

Ч. БЭДСЕЛ А. ЛЕНГДОН

ФИЗИКА ПЛАЗМЫ И ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Перевод с английского
под редакцией
доктора физико-математических наук
А.А. РУХАДЗЕ



МОСКВА
ЭНЕРГОАТОМИЗДАТ
1989

УДК 533.9.072:681.31—523.8

Бэдсэл Ч., Ленгдон А. Физика плазмы и численное моделирование: Пер. с англ.—М.: Энергоатомиздат, 1989.—452 с.—ISBN 5-283-02432-6

Изложены вопросы численного моделирования на ЭВМ плазмы в приложении к термоядерным реакторам. Показаны возможности расширения имеющихся программ для ЭВМ на более сложные виды взаимодействий в плазме.

Для научных работников, занимающихся физикой плазмы в различных ее вариантах, включая управляемый синтез и космическую плазму, а также для аспирантов и студентов.

Табл. 3. Ил. 151. Библиогр.: 279 назв.

Рецензенты В. П. Силин, А. А. Рухадзе

Редактор Л. В. Белова

CHARLES K. BIRDSALL, A. BRUCE LANGDON
PLASMA PHYSICS, VIA COMPUTER SIMULATION
McGraw-Hill Book Company 1985

Б 1704040000—310
051 (01)—89 105—88

ISBN 5-283-02432-6 (рус.)
ISBN 0-07-005371-5 (англ.)

© 1985 by McGraw-Hill, Inc.
© Перевод на русский язык,
Энергоатомиздат, 1989

ПРЕДИСЛОВИЕ АВТОРОВ К РУССКОМУ ИЗДАНИЮ

Наша книга с успехом использовалась в качестве учебника во многих странах. Мы с радостью узнали о ее переводе на русский язык, что значительно расширит круг наших читателей и позволит установить единую терминологию. Для быстрого обучения методам моделирования плазмы можно рекомендовать исследовать задания гл. 5 при помощи кода ES1 и небольшого компьютера. Разумеется, вы поймете, что более современные двух- и трехмерные программы приспособлены для более мощных и быстродействующих компьютеров. Рассмотренные в этой книге методы оказались полезными во многих приложениях — например, для исследования термоядерной и космической плазмы, плазмы СВЧ-разряда, а также заряженной плазмы и пучков частиц. Мы надеемся, что русский перевод поможет расширить использование многочастичного моделирования плазмы. Наконец, эта область развивается очень быстро, так что наша книга является только началом.

Мы очень благодарны научному редактору А. А. Рухадзе за проделанную им большую работу. Мы также были бы признательны читателям за замечания.

*Чарльз К. (Нед) Бэдсел
А. Брюс Ленгдон*

ПРЕДИСЛОВИЕ К РУССКОМУ ИЗДАНИЮ

Ни в одну область физики так глубоко не проникли методы численного моделирования, как в физику плазмы. Сегодня просто немыслимо достаточно полно описать плазменные процессы, опираясь только на аналитические методы современной теоретической физики, не прибегая к методам численного моделирования. Это объясняется, с одной стороны, сложностью и многообразием плазменных процессов, а с другой — наличием хорошо обоснованной модели динамики плазмы — модели Власова — Максвелла, с помощью которой можно количественно с любой степенью точности описать эти процессы. Поэтому, чтобы избежать проведения инженерно очень сложных и дорогостоящих физических экспериментов, исследователи в области физики плазмы уже давно, более 25 лет назад, начали разрабатывать эффективные численные методы анализа плазменных процессов, исходя из модели Власова — Максвелла, и достигли огромных успехов в численных экспериментах.

Сегодня учебники по физике плазмы без основ численного моделирования далеки от совершенства, хотя попытка такого органического слияния изложения теории физики плазмы и численного моделирования плазменных явлений до сих пор не делалось. По существу книга Бэдсела и Ленгдона — первая в этом смысле, но, надо думать, не последняя. Она представляет собой изложение физики плазмы с помощью численного моделирования. В этом смысле книга оригинальна и пока не имеет аналога в мировой литературе.

Книга переведена высококвалифицированными специалистами, хорошо владеющими как методами теории физики плазмы, так и методами численного моделирования, в особенности методом крупных частиц, наиболее распространенным в физике плазмы. Она рассчитана на довольно широкий круг читателей, начиная от студентов, изучающих физику плазмы, и кончая учеными, которые в этой книге найдут много полезного и интересного для себя.

Следует отметить единственную поправку, которая была внесена в русский перевод книги: в ссылках авторов опущены слова «частное сообщение». Такие ссылки приведены в тексте с указанием только фамилии и года, и они отсутствуют в списке литературы, приведенном в конце книги.

Кроме того, при переводе добавлены ссылки на работы советских авторов, сыгравших определяющую роль в развитии методов численного моделирования плазменных явлений. В конце книги приведены монографии, изданные в СССР за последние годы.

Перевод книги выполнен А. М. Афониным (предисловие авторов, гл. 1—10) и А. М. Игнатовым (гл. 11—16, приложения).

А. А. Рухадзе

ПРЕДИСЛОВИЕ АВТОРОВ

Наша книга по численному моделированию плазмы нацелена на понимание читателем сущности плазменных процессов. Большинство современных приложений физики плазмы связаны с задачами различных способов создания управляемого термоядерного синтеза (УТС). Однако моделирование с помощью крупных частиц используется также при изучении космической плазмы, электронных и ионных пушек, ядерных взрывов и СВЧ-приборов. Несмотря на название книги мы не претендуем на изложение всей физики плазмы или всего численного моделирования.

Плазма — это четвертная форма существования вещества, состоящая из электронов, ионов и нейтральных атомов, обычно при температуре более 10^4 К. Плазмой являются Солнце и звезды, ионосфера Земли, пояса Ван-Аллена, магнитосфера и т. д. Плазма составляет большую часть известного вещества во Вселенной.

Плазма является средой для магнитного и инерциально ограниченного управляемого термоядерного синтеза. В плазме из трития и дейтерия при температуре 10^8 К начинается термоядерное горение, в результате получаются энергетические ионы гелия и нейтроны. Такая плазма может быть использована в качестве теплового источника для создания пара, врачающего турбины электростанций. Современные исследования плазмы включают в себя теорию, эксперимент и численное моделирование с помощью больших и быстрых компьютеров, которые дают результаты, весьма полезные в теории и эксперименте, что позволяет экономить массу времени и средств при создании установок УТС. Частично моделирование выполняется с использованием жидкостных моделей, а частично — с использованием многочастичных моделей (от 10^3 до 10^6 частиц) для получения детального кинетического поведения. Ряд гибридных методов сочетают оба описания.

Моделирование плазмы с помощью крупных частиц за последние 20 лет прошло путь от искусства к науке и сейчас используется во всем мире. По мере улучшения параметров компьютеров затраты на моделирование снижались, и сейчас программы, приведенные в книге, можно использовать на очень маленьких ЭВМ или же очень быстро работать с ними на больших ЭВМ. Теперь моделирование с помощью крупных частиц используется не только в больших лабораториях, но и небольшими группами исследователей в университетах.

Книга состоит из четырех частей. Часть I можно уподобить букварю. Она предназначена новичкам, желающим научиться

численному моделированию плазмы. В ней описаны одномерный электростатический код ES1 (с приведением текста программ) и одномерный электромагнитный код EM1, изложены необходимые численные методы математической физики. Часть I является как бы вводным курсом, который дополнен задачами. Имеются задания (с указанием начальных величин и некоторых возможных результатов) для самостоятельной работы.

В части II (теория) разъясняется смысл основной части современной теории электростатического моделирования с помощью крупных частиц. Эта часть книги создает математические и физические основы алгоритмов, использованных в части I.

В части III (практика) рассмотрены более сложные случаи электростатического и электромагнитного моделирования в двухмерном случае. Эта часть, соответствующая современному уровню исследований плазмы, предназначена для научных сотрудников и студентов.

В части IV (приложения) освещены некоторые частные вопросы, существенные при численном моделировании.

Все составляющие элементы книги (программы, задания, задачи, теория) были созданы для курса лекций, который читался студентам более 10 лет.

Результатом, вознаградившим нас за разработку моделирования плазмы, была радость получения полного физического понимания поведения плазмы. Это очень захватывающе — создавать программы, которые хорошо описывают физику. Поэтому мы рекомендуем начинать выполнение заданий с первой недели занятий со студентами, с тем чтобы они приступали к моделированию параллельно со слушанием лекций. Моделирование всегда является единственным прямым опытом, который приобретают студенты по колебаниям плазмы, неустойчивостям потоков и кинетическому поведению горячей плазмы. Наш опыт говорит, что глубокие знания невозможны без практического выполнения заданий и решения всех задач, относящихся к теоретическим вопросам. В книге Иттена «Элементы цвета» есть одно интересное высказывание: «Изучение по книгам с помощью учителей подобно поездке в вагоне, но вагон служит нам, пока он находится на рельсах. Тот, кто достиг конечной станции, должен покинуть вагон и дальше идти пешком».

Основной упор сделан на математическую сторону создания алгоритмов с заданными свойствами. В книге собрана важная для исследователей, использующих моделирование, информация, рассеянная по многим журнальным статьям.

Мы выражаем глубокую признательность Коену и Мострому за написание гл. 6 и 7, Невинсу, написавшему гл. 11 и приложение E.

Ч. Бэдсел, А. Ленгдон

ЧАСТЬ I

ОСНОВЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЛАЗМЫ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА КРУПНЫХ ЧАСТИЦ. ОДНОМЕРНЫЕ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЙ И ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЙ КОДЫ¹

Эта часть книги является введением в моделирование процессов, происходящих в плазме, с помощью представления ее в виде совокупности крупных частиц и предназначена для тех, кто уже имеет некоторые сведения о плазме и знаком с численными методами и программированием. Однако читатель, не имеющий никакого опыта в изучении плазмы или численных методов, может тем не менее получить пользу от этой части книги, используя дополнительную литературу по физике плазмы².

Изложенный в гл. 1—7 материал соответствует курсу лекций по методам моделирования с помощью крупных частиц. Эти лекции авторы данной книги в течение 10 лет читали студентам. Самостоятельная работа студентов начиналась с первой недели занятий по заданиям из гл. 5.

Глава 1 является вводной и предназначена для объяснения читателю возможности использования от нескольких сотен до нескольких тысяч крупных частиц для моделирования плазмы, содержащей от 10^{14} до 10^{24} частиц.

В гл. 2 дано описание некоторых деталей одномерной электростатической программы (ES1) в терминах решаемых дифференциальных и разностных уравнений.

В гл. 3 изложена программа ES1 в деталях, включая тексты большей части программы. Некоторые из приведенных задач можно использовать на занятиях со студентами для проверки правильности понимания изученного материала.

В гл. 4 подробно рассмотрены численное вычисление движения крупных частиц, смысл придания таким частицам определенной формы как следствие введения процедуры взвешивания, а также метод решения уравнения Пуассона.

¹ Здесь и далее слово «код» используется как синоним словосочетаний «программа для ЭВМ» и «компьютерная программа». — Прим. пер.

² Электродинамика плазмы / Под ред. А. И. Ахиезера. М.: Наука, 1976; Александров А. Ф., Богданович Л. С., Рухадзе А. А. Основы электродинамики плазмы. М.: Высшая школа, 1978. — Прим. пер.

Глава 5 содержит ряд вводных заданий для студентов по исследованию колебаний, волн и неустойчивостей в плазме с использованием программы ES1. Здесь же обсуждаются подробности выбора начальных условий, проведения линейного анализа физических процессов для проверки правильности вычислений и приближенного нелинейного анализа. Эти задания начинаются с вариантов, связанных со случаем холодной плазмы, который является очень легким для понимания и недорогим в смысле затрат времени ЭВМ. Успешное выполнение большинства или всех этих заданий очень важно как часть профессиональной подготовки по моделированию плазмы с помощью частиц. Эта глава, как и гл. 7, является как бы лабораторной частью курса обучения.

В гл. 6 приведена одномерная электромагнитная программа EM1, в которой используются уравнения Максвелла для описания поперечных непотенциальных электромагнитных полей.

В гл. 7 приведены задания для студентов по работе с EM1.

Первую часть книги можно рассматривать как самостоятельный курс обучения методам моделирования с помощью частиц, вторую же часть можно использовать для более полного развития теории моделирования.

ГЛАВА 1

ВОЗМОЖНО ЛИ ИЗУЧЕНИЕ ФИЗИКИ ПЛАЗМЫ С ПОМОЩЬЮ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА КРУПНЫХ ЧАСТИЦ

Идея получения более или менее правильного физического описания плазмы с помощью использования компьютера для вычисления взаимодействия между заряженными частицами пришла в голову одновременно нескольким ученым: знаменитому Джону Даусону в Принстонском университете и Оскару Бунеману в Кембриджском университете США в конце 50-х — начале 60-х годов. Известно, что на протяжении всех 50-х годов было выполнено много работ по моделированию электронных пучков в вакуумных приборах с помощью крупных частиц, так почему бы не попробовать моделировать плазму? Вначале было неясно, будет ли успешным переход от моделирования холодных пучков, состоящих из зарядов одного знака, к моделированию теплового распределения зарядов противоположных знаков с равной плотностью. Какие могут возникнуть при этом трудности?

При моделировании электронного пучка есть основания полагать, что вычисления останутся верными, если даже использовать относительно малое число крупных частиц,

например 16 или 32 частицы на длину волны. Эти частицы обычно представляют собой диски диаметром, равным диаметру пучка (как пуговицы, нанизанные на нитку, за исключением небольшого числа частиц, которые при движении обгоняют друг друга), и их движение рассчитывается компьютером в процессе их взаимодействия с СВЧ-цепями (например, объемными резонаторами или замедляющими структурами) на протяжении пяти или десяти длин волны. Всего используется 10 совокупностей по 16 или 32 крупные частицы, и их движение рассчитывается, например, за время от 10 до 20 периодов (несколько сотен временных шагов), начиная от стадии линейной модуляции до нелинейного насыщения. Когда компьютеры стали легко программируемыми, такое моделирование стало довольно простым делом, причем моделирование достигает цели с использованием малого числа частиц, потому что поле одного электрона действует на большую часть всех электронов; длина коллективного взаимодействия сравнима с размерами электронного прибора.

При моделировании нейтральной плазмы необходимо вспомнить, что такое дебаевский радиус. Этот радиус связан с плазменной частотой ω_p , пропорциональной квадратному корню из плотности плазмы, соотношением

$$\lambda_D \equiv \frac{v_t}{\omega_p} \sim \left(\frac{\text{температура}}{\text{плотность}} \right)^{1/2}, \quad (1.1)$$

где λ_D — расстояние, проходимое частицей с тепловой скоростью за $1/2\pi$ часть плазменного периода, или длина экранирования поля в плазме вокруг пробного заряда, т. е. масштабная длина, в пределах которой сильно проявляются эффекты непосредственного взаимодействия между отдельными частицами и вне которой преобладают коллективные эффекты взаимодействия частиц. Напомним, что плазма представляет интерес на расстояниях, много больших λ_D , т. е. $L \gg \lambda_D$. Для того чтобы в пределах длины коллективного взаимодействия было достаточно много частиц, как в электронных приборах, следует ввести значительно большее число крупных частиц при моделировании нейтральной плазмы. Хотя некоторые элементарные определения приведены в книге, не все сведения по физике плазмы, необходимые для понимания, будут в ней приведены; книга является дополнительной по своему характеру к обычным книгам по физике плазмы.

В литературе часто приводятся графики зависимости плотности (от $n = 10^6$ до 10^{22} см^{-3}) от энергии (от 0,01 до 10^5 эВ) с линиями постоянного числа частиц N_D в дебаевской сфере:

$$N_D \equiv n \lambda_D^3. \quad (1.2)$$

Хотя в очень плотной плазме N_D может иметь малое значение, мы увидим, что в плазме паров щелочных металлов $N_D \approx 10^2$, в

ионосфере Земли $N_D \approx 10^4$, а в плазме термоядерного синтеза с магнитным удержанием $N_D \approx 10^6$. Моделирование такой плазмы в ближайшем будущем не представляется возможным.

Таким образом, может показаться, что моделирование плазмы невозможно, так как требует на много порядков величины большего числа частиц, чем может обрабатывать любой существующий компьютер.

Необходимо преодолеть эту трудность, иначе будет потеряна возможность описать общий характер процессов в плазме. Во-первых, мы собираемся интересоваться коллективными явлениями в бесстолкновительной плазме при длинах волн больших, чем дебаевский радиус $\lambda \gtrsim \lambda_D$. Во-вторых, мы постараемся получить много полезной информации для одного и двух измерений, когда нет необходимости удовлетворять трехмерному требованию, т. е. $N_D = 10^6$, а достаточно ограничиться одномерным $N_D = n\lambda_D(10^6)^{1/3} = 10^2$ или двухмерным $N_D = (10^6)^{1/2} = 10^3$. В-третьих, можно изменить моделирование так, чтобы использовать меньшее значение N_D , но сохранить самое существенное в поведении плазмы. Модели, которые будут использованы ниже, предназначены для описания процессов в плазме без учета всех малозначительных деталей.

Обсудим более внимательно только что сделанные утверждения. Конечно, бесстолкновительная лабораторная плазма характеризуется условиями $N_D \gg 1$ и $L \gg \lambda_D$. Однако физическое поведение плазмы обусловлено движением электронов и ионов в самосогласованных кулоновских полях с кинетической энергией, достаточной для предотвращения их рекомбинации. Следовательно, другой важной характеристикой является следующее отношение:

$$KE/PE \gg 1, \quad (1.3)$$

где KE — тепловая кинетическая, а PE — микроскопическая потенциальная энергия плазмы. Это отношение для лабораторной плазмы равно N_D . Однако из чисто физических требований достаточно выполнения условия $KE \gg PE$, что может быть достигнуто при $N_D \sim 10$ или может быть при необходимости обеспечено другими средствами, без требования $N_D \sim 1$. Вторая важная характеристика плазмы — это ее бесстолкновительность, которая также связана с N_D соотношением

$$\frac{v}{\omega_p} \approx \frac{1}{N_D} \ln N_D \ll 1. \quad (1.4)$$

Это условие также может быть выполнено при $N_D = 10$ или достигнуто без выполнения требования $N_D \gg 1$. Третье условие ($L \gg \lambda_D$) во многих задачах может быть реализовано в результате использования периодических моделей, которые можно представить как отрезки бесконечной плазмы; используют, например, длину $L = 50\lambda_D$. Ниже обоснована правомерность моделирования горячей плазмы при малых N_D или малых отношениях L/λ_D . Исследования физики холодной плазмы (например,

ленгмюровских колебаний с частотой $\omega = \pm \omega_p$) и заряженной плазмы (плотность ионов не равна плотности электронов в нулевом порядке) также показывают, что моделирование с помощью крупных частиц является весьма перспективным.

Что мы подразумеваем под словами без выполнения требования $N_D \gg 1$? В изложенных методах моделирования мы, во-первых, редко сохраняем рассмотрение взаимодействия вплоть до исчезающие малых расстояний между зарядами. Дело в том, что в $3D$ и $2D^1$ случаях столкновительные параметры всегда довольно велики даже для $N_D \approx 10$. Более того, в одномерном случае столкновения имеют иную природу, хотя в $1D$ модели выполнение условия $N_D = n\lambda_D$ не представляет труда. Так, если для упрощения вычисления полей мы используем пространственную сетку, то поля и силы при длинах, меньших чем ячейка сетки, становятся ненаблюдаемыми и их можно рассматривать как полностью сглаженные. Можно создать еще большее сглаживание такими средствами, как отбрасывание сил при коротких длинах волн (большие волновые векторы, $k = 2\pi/\lambda$), или не учитывать плотность заряда, потенциалы и силы при больших значениях k . Во-вторых, можно сознательно изменить описание процессов для того, чтобы достичь выполнения условия $KE \gg PE$, или $v \ll \omega_p$, или обоих условий сразу. Например, при рассмотрении лабораторной плазмы частицы обычно считают точечными, взаимодействующими между собой с силами, изменяющимися с расстоянием пропорционально $1/r^2$, $1/r^1$ или $1/r^0$ в случаях $3D$, $2D$ и $1D$. Возникающие при этом кулоновские сингулярности в случаях $3D$ и $2D$ (их нет в одномерном случае) можно устранить использованием частиц конечных размеров — понятие, используемое задолго до моделирования плазмы; например в работе [А. А. Vlasov, 1950], автор которой назвал свои частицы облаками, как это сделано и в этой книге. Ниже приведены следствия введенных выше предложений.

1. Частицы конечных размеров получаются естественным образом, если используется пространственная сетка.

2. Если радиус частицы конечных размеров становится сравнимым с дебаевским радиусом ($R \gtrsim \lambda_D$), или большим него, то поперечное сечение σ и частота столкновений v быстро уменьшаются по сравнению со случаем точечных частиц ($R=0$) в $2D$ и $3D$.

3. Существует некоторая свобода для задания формы частиц и способа взвешивания сил относительно пространственной сетки для получения желаемых результатов в какой-либо задаче моделирования (применимых к одной, но, возможно, не применимых к другой задаче).

Таким образом, мы моделируем плазму со значительно

¹ Здесь и далее для обозначения размерности модели используются сокращения $1D$, $2D$, $3D$ для случая одной, двух и трех пространственных переменных и $1V$, $2V$, $3V$ для учета одной, двух или трех компонент скорости.— Прим. пер.

меньшим числом частиц, чем то, которое находится в реальной, интересующей нас лабораторной плазме. В результате мы имеем дело с относительно высоким вкладом столкновительных процессов, т. е. $v \ll \omega_p$, но не $v \ll \omega_p$ (и большим изменением роли столкновительных процессов в зависимости от параметров), и довольно высокими уровнями шума (крупные частицы могут иметь то же самое отношение заряда к массе, что и в лабораторной плазме, но сами q и m много больше), а потому мы не способны исследовать все возможные временные и пространственные масштабы плазменных явлений (все частоты ω и волновые векторы k).

Альтернативой моделированию с использованием крупных частиц является интегрирование бесстолкновительного кинетического уравнения Власова, которое рассматривает фазовое пространство как континуум (сплошную среду), что также является приближением. Этот подход действительно устраняет статистические ошибки, присутствующие в методике макрочастиц, и весьма успешно используется в исследованиях. Однако моделирование с помощью уравнения Власова не настолько обосновано, чтобы его можно было легко перестраивать применительно к особенностям конкретных задач подобно методу крупных частиц, особенно в многомерных задачах, и беспристрастное, точное, достаточно экономичное представление пространства скоростей представляет значительные трудности при моделировании длительных процессов.

Мы проводим моделирование только в пределах ограниченных времени и области пространства и, таким образом, можем мириться с малыми погрешностями. Мы даже используем в расчетах соотношение масс иона и электрона около 100 вместо 1836 (протон/электрон), иногда замораживаем движение нейтральных или фоновых частиц и вводим линейную восприимчивость $\chi(\omega, k)$, например для горячих электронов. Может оказаться, что конечные временные и пространственные сетки могут сами по себе создавать волны и даже неустойчивости, являющиеся нефизическими и, следовательно, нежелательными. Эти неприятности могут быть устранины или учтены при внимательном анализе используемых вычислительных моделей. По поводу же остаточных погрешностей можно лишь сказать, что такие имеются и в эксперименте, и в теории.

Эта книга предназначена для тех, кто желает освоить численное моделирование плазмы с помощью метода крупных частиц или продвинуться дальше в понимании и использовании его тонкостей. В этом читателю помогут многочисленные примеры и задачи, описывающие встречающиеся на практике проблемы.

Элегантное обоснование проведению компьютерных экспериментов, использующих модели макрочастиц применительно не только к физике плазмы, но и к множеству других областей физики, можно найти в работе [Hockney and Eastwood, 1981].

ГЛАВА 2

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ОДНОМЕРНОЙ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОЙ ПРОГРАММЫ

2.1. ВВЕДЕНИЕ

Здесь приведен общий краткий обзор программы моделирования плазмы методом крупных частиц. Более сложные для понимания особенности работы программы будут изложены ниже.

Наша задача — обсудить широко используемую программу ES1 (электростатическую одномерную программу), включая начальные условия и средства диагностики, которые содержат в себе методы проверки правильности вычислений и способы представления физической информации, полученной при расчетах. Такое обсуждение послужит подготовкой к применению программы для исследования физики плазмы. В процессе работы может оказаться, что наши первоначальные представления о том, что должна уметь делать программа, будут изменяться, следовательно, мы будем модифицировать программу, улучшать задание начальных условий, добавлять новые виды диагностики и продолжать численное моделирование. После нескольких таких приближений мы сможем описать то, что было нам необходимо с самого начала, — физическую суть происходящих в плазме процессов. Конечно, на этом пути, вероятно, обнаружится, что необходимо получить и другие решения дисперсионного уравнения помимо уже найденных или иметь более точные оценки наблюдаемого нелинейного поведения плазмы.

Наша исходная изучаемая система содержит заряды, находящиеся в собственном и внешнем электростатических полях и внешнем магнитном поле. Использование для первоначального обучения электростатической модели, которая, возможно, является наиболее легкой для понимания среди всех моделей, соответствует историческому развитию моделирования плазмы с помощью крупных частиц и прямо подводит читателя к полностью электромагнитным моделям, учитывающим и вихревые поля.

Численное моделирование служит методом познания, дополняющим чисто теоретические, аналитические или экспериментальные исследования, и позволяет исследовать новые физические явления или же дать более точное описание тех процессов, которые уже были предсказаны теоретически или исследованы лабораторным путем. Тесная связь моделирования с теорией и экспериментом дает наилучшие результаты в работе.

2.2. ОСНОВЫ ПОСТРОЕНИЯ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПЛАЗМЫ

Исследуемая модель (рис. 2.1) содержит заряженные частицы, движущиеся под действием сил со стороны внешних и собственных полей. Описание взаимодействия подразделяется

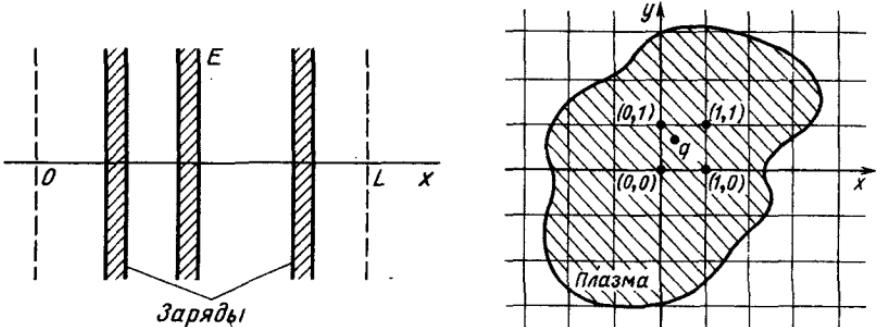


Рис. 2.1. Одномерная модель, состоящая из многих заряженных листов, с собственными и внешними электрическими полями E , направленными вдоль координаты x . Вариации по y и z отсутствуют

Рис. 2.2. Математическая сетка наложена на область, занятую плазмой, для того чтобы рассчитать плотности заряда ρ и тока J ; из них мы будем получать (электрическое E и магнитное B) поля на сетке. Заряженная частица q в точке с координатами (x, y) обычно рассматривается в терминах значений ρ в ближайших точках сетки $(0,0), (1,0), (1,1), (0,1)$, а J определено на гранях между этими точками. Силу, действующую на заряд q , можно вычислить, зная поля в этих точках

на два этапа: расчет полей, создаваемых частицами, и определение движения частиц под действием приложенных к ним сил. Поля находятся из решения уравнений Максвелла по известным координатам и скоростям всех частиц. Их движение описывается уравнениями Ньютона—Лоренца. Вычислительный цикл состоит из попеременного решения этих двух задач.

Отличие процесса моделирования от реального развития событий в лабораторной плазме состоит в его временной дискретности, так как используются численные, а не аналоговые методы решения уравнений. Использование численных методов предъявляет особые требования к обеспечению необходимой точности и устойчивости созданных моделей, которые должны правильно описывать плазму в течение интервала NT , где T —характерное время процесса, например период плазменных, циклотронных или гибридных колебаний ионов или электронов, а $N \gg 1$.

Мы будем использовать временную сетку, которая имеет достаточное число разбиений для моделирования процессов в плазме с необходимыми точностью и устойчивостью.

Второе отличие заключается в использовании пространственной сетки, на которой будут вычисляться поля. Можно задать вопрос: почему бы не использовать прямо закон Кулона для сил между зарядами, пропорциональных $1/r^2, 1/r^1, 1/r^0$ в случае трех, двух и одного измерений соответственно? Проследим за вычислением сил с точки зрения числа требуемых вычислительных операций и физики и ответим на вопрос, необходимо ли детальное знание близкого расположения частиц

и как часто происходят столкновения между частицами. Ответ на обе части вопроса будет почти всегда отрицательным. Вспомним курс по электромагнитной теории, где мы впервые встретились с законом Кулона, быстро перешли к понятию электрического поля E и обнаружили, что E редко определялось суммированием вкладов отдельных зарядов: напротив, было введено понятие плотности заряда ρ и показано, что E легко определить, зная плотность заряда, которая представляется непрерывно изменяющейся в пространстве функцией. Таким образом устраняется необходимость гигантского числа операций для вычисления величин вида $1/r^2$ и рассмотрения такого же числа сингулярностей.

Почти вся физика плазмы, с которой мы будем иметь дело, требует знания процессов только до некоторой масштабной длины, при которой плотность заряда и плотность тока еще рассматриваются как непрерывные величины; более тонкое дробление и поведение плазмы опускаются. Более того, в плазме с большим числом частиц в дебаевской сфере имеют место относительно немного тесных сближений частиц, т. е. мало больших углов рассеяния при одиночных столкновениях; большие отклонения возникают в основном как суммарный эффект многих малых отклонений. Следовательно, сама природа плазменных задач подталкивает нас использовать преимущества упрощений, вытекающих от введения математической пространственной сетки, как это показано на рис. 2.2, обычно достаточно тонкой для того, чтобы рассчитать плотность заряда и затем вычислить электрическое поле E .

Есть несколько исключений из этих общих правил. Например, относительно легко можно вычислить электрическое поле в одномерных задачах без использования пространственной сетки. Однако сетка приводит к сглаживающему эффекту, устранивая пространственные флуктуации, размеры которых меньше размера сетки. Точное вычисление поля сохранило бы все флуктуации E , что обычно нежелательно.

Использование временных и пространственных сеток, являющихся математическими объектами, не имеющими физического смысла, может приводить к эффектам, которые мы будем называть нефизическими. Такие эффекты, а также вопросы точности вычислений рассмотрены во второй части книги. Пока же ограничимся таким утверждением: возможность нефизических эффектов может ограничить произвол в выборе параметров модели, но в целом эти эффекты могут быть устранины; неточности вычислений принципиально неустранимы, но они могут быть сделаны достаточно малыми.

Задачи

2.1. Изобразите схематически электрическое поле E в зависимости от x для одномерной модели на рис. 2.1 при различных граничных условиях:

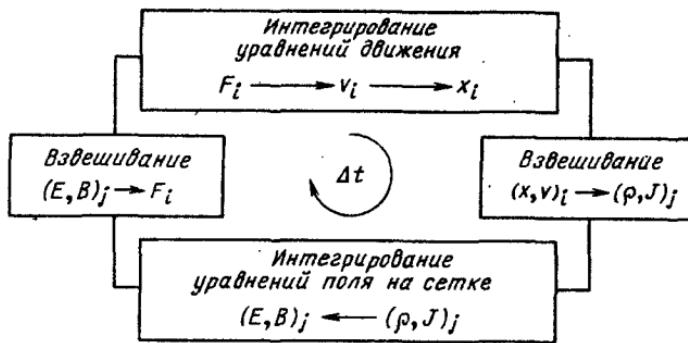


Рис. 2.3. Типичный вычислительный цикл (один шаг по времени) в программе моделирования методом крупных частиц. Частицы пронумерованы $i=1, 2, \dots, NP$, сеточные индексы — это j , которое становится вектором в случае двух и трех измерений

а) потенциал равен нулю при $x=0, x=L$; б) система периодическая с периодом L ; в) приложена разность потенциалов [например, $\phi(0)=0, \phi(L)=V_0$]. Пусть заряды имеют некоторую толщину, как показано на рис. 2.1, чтобы рисовать \mathbf{E} внутри заряда. Рассмотрите нейтральную и заряженную системы (соответственно с равным и неравным числом положительных и отрицательных зарядов). Рассмотрите стационарный однородный зарядовый фон одного знака и заряженные листы другого знака в целом нейтральной системы, нарисуйте $\rho(x)$, $E(x)$ и $\phi(x)$.

2.2. Пусть плотность заряда сосредоточена в области от x_a до x_b и равна нулю вне этого интервала. Покажите, что электростатическая сила, действующая на лист, для произвольного распределения заряда внутри листа (т. е. когда распределение является произвольным между x_a и x_b) равна $q[E(x_a)+E(x_b)]/2$, где q — общий заряд на единицу площади заряженного листа. Указания: рассмотрите интеграл $\int p E dx = \int \frac{\partial}{\partial x} (E^2/2\epsilon_0) dx$ по листу. Это простое равенство составляет «подарок» одномерной модели — один из тех, которые мы будем использовать в дальнейшем [см., например, Portis, 1978].

2.3. В § 2.2 утверждается, что в одномерном случае можно аналитически вводить пространственную сетку. Предположим, что мы используем листы нулевой толщины и точно определяем поля в момент t , затем в момент $t+\Delta t$ и т. д., однако эти поля изменяются, только когда две или более частиц пересекутся, что может произойти в течение Δt , приводя к ошибке. Какой способ коррекции вы могли бы предложить для такого пересечения в течение времени Δt [Dawson, 1970]? Объясните, почему в сеточной модели с частицами конечных размеров меньше проблем в объяснении пересечений.

2.3. ПРИНЦИПЫ ПОСТРОЕНИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЦИКЛА

На каждом шаге по времени в программе вычисляются значения полей при известном расположении частиц, а затем вычисляются новые координаты и скорости частиц; этот цикл показан на рис. 2.3. Обычно используется разбиение характер-

ною периода плазменных процессов на несколько десятков шагов и моделирование продолжается в течение многих периодов, так что общее число шагов в типичном запуске программы составляет несколько сотен или тысяч.

Цикл начинается в момент $t=0$ с заданными начальными условиями для координат и скоростей частиц. Компьютер выполняет заданное число временных шагов, и в конце работы программы распечатываются различные данные. Некоторые из них формируются в виде мгновенного снимка в определенные моменты времени, например распределения плотности, полей или скоростей частиц; другие же представляют собой временные зависимости, такие как зависимость энергии от времени. Из этих графиков можно получить физическую информацию о плазме. Представление данных моделирования только в виде числовой информации без графиков используется черзвычайно редко.

Давайте проследим за ходом вычислительного цикла, показанного на рис. 2.3, начиная от исходных значений координат и скоростей частиц. Необходимо помнить, что в процессе участвуют сотни и тысячи частиц, а в двух- и трехмерных случаях — до миллиона. Величины, описывающие частицы, такие как скорости и координаты, известны при $t=0$, и можно вычислить все величины в пространстве v и x , которое называется фазовым пространством. Частицы помечаются индексом i , например v_i и x_i . Значения полей вычисляются только в узлах пространственной сетки, т. е. известны только в дискретных точках пространства, помеченных индексом j , например E_j . Связи между координатами и скоростями частиц и полевыми величинами устанавливаются при первом вычислении плотности заряда и тока на сетке; на этом шаге мы должны знать, как вычислять плотности по координатам и скоростям частиц. Процесс вычисления зарядов и токов предполагает некоторое взвешивание по точкам сетки, которое зависит от координат частиц. После того как плотности на сетке определены, мы можем использовать различные методы определения электрических и магнитных полей. Так как поля известны только в узлах сетки, а частицы распределены по всему пространству внутри сетки, то необходимо снова выполнять взвешивание, т. е. для получения силы, действующей на частицы, проводить интерполяцию поля по его узловым значениям.

Как же различаются частицы и какая нужна информация о них и о полях? Частицы могут различаться по своим траекториям, запоминаемым в памяти компьютера; они могут быть некоторым образом упорядочены с сохранением только текущих значений (r_i, v_i); значения зарядов q_i и масс m_i могут быть запомнены (например, при наличии только частиц двух сортов, электронов и ионов, q и m могут изменяться только один раз при продвижении всех частиц на один шаг по времени). Значения полей определены в узлах сетки и запоминаются в индексированный массив, откуда

они легко могут быть вызваны в нужный момент. В нашем рассмотрении число частиц почти всегда будет превышать число узлов сетки и число значений полевых величин. Использование внешней памяти позволяет применять больше частиц, чем может уместиться в оперативном запоминающем устройстве компьютера (ОЗУ). Так как уравнения движения частиц интегрируются независимо друг от друга, то одновременно в ОЗУ может находиться информация только о нескольких частицах. Значения поля обычно хранятся в ОЗУ полностью, так как в большинстве вычислительных схем их величины могут вызываться из памяти в произвольном порядке.

Существует много вариантов описанного цикла вычислений. Например электроны (с относительно большими ω_{pe} , ω_{ce} , ω_{ih}) могут продвигаться на относительно малые шаги Δt_e , ионы (с много меньшими ω_{pi} , ω_{ci} , ω_{ih}) могут продвигаться с относительно большими Δt_i ; поля могут получаться по третьей шкале Δt_f , возможно, относительно короткой для электромагнитных полей (волны двигаются быстрее, чем частица) или относительно большой при наблюдении низкочастотных эффектов.

2.4. ИНТЕГРИРОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ

При моделировании физических процессов в плазме может потребоваться 10 000 частиц, взаимодействующих в течение 1000 шагов по времени. Это означает, что уравнения движения должны интегрироваться 10 млн. раз. Поэтому необходимо воспользоваться самыми простыми и быстрыми методами вычислений, какие только возможны, сохраняя при этом приемлемую точность расчетов.

Кроме того, наш выбор метода вычислений должен учитывать возможности памяти компьютера, которые будут использоваться для хранения ряда величин для каждой частицы. Если бы мы наблюдали за траекторией одной частицы, движущейся в заданном поле (так называемые траекторные вычисления), тогда целесообразно было бы использовать метод интегрирования по времени высокого порядка точности с сохранением информации о скорости и координате за несколько предшествующих временных шагов. Однако минимальная информация, необходимая для расчетов,— это скорость и положение частицы, два машинных слова на частицу или 20 000 слов для нашей задачи. Сохранение значений v_i , x_i для нескольких предыдущих шагов существенно увеличит это число. Использование же метода высокого порядка, например Рунге—Кутта, увеличивает число операций, необходимых для каждой частицы. Следовательно, почти всегда мы будем выбирать для использования минимальную информацию и наибыстрейший метод.

Один из наиболее часто используемых методов интегрирования называется методом с перешагиванием. Два диффе-

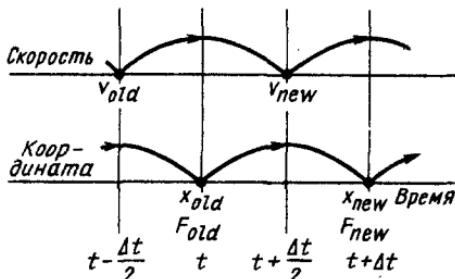


Рис. 2.4. Схема метода интегрирования с перешагиванием, показывающая центрирование по времени силы F при вычислении v_{new} и v при вычислении x_{new}

Рис. 2.5. Плоскость (v_x, v_y) , показывающая силу $q(v \times B)$, нормальную к v и приводящую к вращению v без изменения модуля скорости с $\dot{\theta} < 0$ при $q/m > 0$.
 $B_0 > 0$

дифференциальных уравнений первого порядка, интегрируемые по отдельности для каждой частицы, имеют вид

$$m dv/dt = F, \quad (2.1)$$

$$dx/dt = v, \quad (2.2)$$

где F — сила. Эти уравнения заменяются конечно-разностными уравнениями

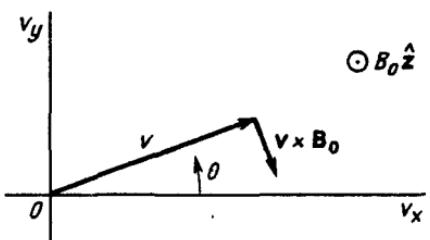
$$m(v_{\text{new}} - v_{\text{old}})/\Delta t = F_{\text{old}}, \quad (2.3)$$

$$(x_{\text{new}} - x_{\text{old}})/\Delta t = v_{\text{new}}. \quad (2.4)$$

Схема интегрирования по времени и обозначения показаны на рис. 2.4, который поясняет идею временного центрирования. Компьютер будет вычислять $v_{t+\Delta t}$ и $x_{t+\Delta t}$, используя v_t и x_t , хотя v и x заданы в разные моменты времени. Для использования этого метода необходимо учесть два момента. Во-первых, начальные условия для скоростей и координат частиц, заданные в момент $t=0$, должны быть изменены ради возможности применения указанного способа интегрирования; в дальнейшем значение $v(0)$ будет преобразовываться в $v(-\Delta t/2)$ с использованием вычисленной при $t=0$ силы F . Во-вторых, необходимо согласование способов вычислений кинетической и потенциальной энергии для проверки закона сохранения энергии в любой момент времени.

Метод с перешагиванием имеет погрешность, которая исчезает при стремлении $\Delta t \rightarrow 0$. Мы будем использовать этот метод интегрирования почти во всех наших программах, потому что он прост (легок для понимания и требует минимума запоминаемой информации) и удивительно точен, как будет показано позднее. Применяя этот метод к интегрированию простого гармонического осциллятора с круговой частотой ω_0 (в следующем параграфе), получим, что при выполнении условия $\omega_0 \Delta t \leq 2$ амплитудная ошибка равна нулю, а фазовый сдвиг на один шаг дается выражением

$$\omega_0 \Delta t + 1/24 (\omega_0 \Delta t)^3 + \text{члены высшего порядка}. \quad (2.5)$$



$\odot B_0 \hat{z}$

Из вида основного члена, определяющего фазовую ошибку, следует, что при условии $\omega_0 \Delta t \leq 0,3$ возможно моделирование колебаний и волн в плазме с приемлемой точностью в течение нескольких десятков периодов.

Силу \mathbf{F} можно разбить на две части:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_{\text{elctr}} + \mathbf{F}_{\text{magn}} = \quad (2.6)$$

$$= q\mathbf{E} + q(\mathbf{v} \times \mathbf{B}). \quad (2.7)$$

Электрическое поле \mathbf{E} и магнитное поле \mathbf{B} должны вычисляться в точке нахождения частиц. Следовательно, используя пространственную сетку, необходимо интерполировать \mathbf{E} и \mathbf{B} из узлов сетки в место нахождения частицы, точно так же, как это делается для определения координат частиц. Такая интерполяция рассматривается ниже, в § 2.6, где будет также показано, что электрическое поле, действующее на частицу, зависит не только от расстояния между частицами (физический эффект), но и от положения частицы внутри ячейки (нефизический эффект).

Рассмотрим одномерное расположение частиц вдоль оси x . Под действием одномерного магнитного поля \mathbf{B}_0 , направленного по оси z , каждая частица приобретает две составляющие скорости: v_x и v_y . Сила $q(\mathbf{v} \times \mathbf{B})$, как показано на рис. 2.5, вызывает простое вращение, т. е. не изменяется по величине. Однако сила $q\mathbf{E} = \hat{x}qE_x$ изменяет величину (т. е. v_x); пусть $E_y = 0$. Следовательно, физически обоснованная схема с центрированием по времени будет следующей (вводятся вспомогательные переменные t' и t'' , $t - \Delta t/2 < t' < t'' < t + \Delta t/2$).

Вычисляются скорости в момент t' (половина ускорения):

$$\left. \begin{aligned} v_x(t') &= v_x(t - \Delta t/2) + (q/m) E_x(t) \Delta t/2, \\ v_y(t') &= v_y(t - \Delta t/2). \end{aligned} \right\} \quad (2.8)$$

Затем вычисляются скорости в момент t'' (вращение):

$$\left. \begin{aligned} v_x(t'') \\ v_y(t'') \end{aligned} \right\} = \begin{pmatrix} \cos \omega_c \Delta t & \sin \omega_c \Delta t \\ -\sin \omega_c \Delta t & \cos \omega_c \Delta t \end{pmatrix} \left. \begin{aligned} v_x(t') \\ v_y(t') \end{aligned} \right\}. \quad (2.9)$$

Конечные величины даются соотношениями (половина ускорения)

$$\left. \begin{aligned} v_x(t + \Delta t/2) &= v_x(t'') + (q/m) E_x(t) \Delta t/2, \\ v_y(t + \Delta t/2) &= v_y(t''). \end{aligned} \right\} \quad (2.10)$$

Угол вращения определяется формулой

$$\Delta\theta = -\omega_c \Delta t, \quad (2.11)$$

т. е. $\theta = -\omega_c$, а циклотронная частота дается формулой

$$\omega_c \equiv (q/m) B_0 \quad (2.12)$$

с сохранением знака q и B_0 . Эта схема [Boris, 1970] тщательно разрабатывается ниже, в гл. 4.

Возникает одно усложнение в момент $t = 0$, когда начальные

условия $x(0)$ и $v(0)$ заданы в один и тот же момент времени. Следовательно, в начальный момент необходимо преобразовать значение $v(0)$ в $v(-\Delta t/2)$, используя величину $E(0)$. Такой переход рассматривается ниже, в § 2.7, рис. 2.10.

2.5. ИНТЕГРИРОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ ПОЛЯ

Зная плотности заряда и тока, заданные в узлах сетки, можно определить электрические и магнитные поля в общем виде, из уравнений Максвелла, где ρ и J используются как источники. Предполагая выполнение условия $\nabla \times E = -\partial B / \partial t \approx 0$, так что $E = -\nabla \phi$, мы изложим в этом параграфе метод расчета поля E в одномерном электростатическом случае. Независимую пространственную переменную обозначим через x . Основные дифференциальные соотношения для поля имеют вид

$$E = -\nabla \phi \text{ или } E_x = -\partial \phi / \partial x, \quad (2.13)$$

$$\nabla E = \rho / \epsilon_0 \text{ или } \partial E_x / \partial t = \rho / \epsilon_0, \quad (2.14)$$

с учетом соотношений (2.13) и (2.14) получаем уравнение Пуассона

$$\nabla^2 \phi = -\rho / \epsilon_0 \text{ или } \partial^2 \phi / \partial x^2 = -\rho / \epsilon_0. \quad (2.15)$$

С использованием разностной сетки, показанной на рис. 2.6, выражения (2.13) и (2.15) запишем в виде

$$E_j = (\phi_{j-1} - \phi_{j+1}) / 2\Delta x, \quad (2.16)$$

$$(\phi_{j-1} - 2\phi_j + \phi_{j+1}) / (\Delta x)^2 = -\rho_j / \epsilon_0. \quad (2.17)$$

Последнее соотношение легко представляется в матричной форме:

$$A\phi = -\rho(\Delta x)^2 / \epsilon_0. \quad (2.18)$$

Мы должны использовать значения ρ_j при известных x_i для получения неизвестных ϕ_j , а затем и величин E_j (индекс j изменяется от 0 до $L/\Delta x$, где L — длина системы из NG узлов). Используя граничные условия при $x=0$, L получаем, что число неизвестных величин соответствует числу имеющихся уравнений, следовательно, задача полностью определена и имеет единственное решение. Численные методы решения уравнения Пуассона изложены в гл. 4.

Очень мощным средством для периодических систем является

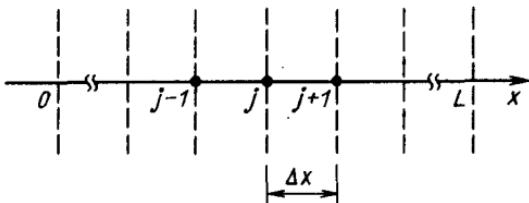


Рис. 2.6. Одномерная разностная сетка с плоскостями, размещенными при $X_j = j\Delta x$ и однородно распределенными в пространстве. Плотность заряда ρ , потенциал ϕ и электрическое поле E определяются только в точках X_j .

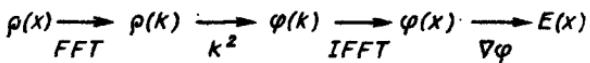


Рис. 2.7. Возможная последовательность действий при решении уравнения Пуассона с использованием быстрого преобразования Фурье (БПФ) и обратного ему (ОБПФ)

ся использование дискретного преобразования Фурье для всех сеточных величин. Этот подход также обеспечивает пространственную спектральную информацию по ρ , φ и E , которая весьма полезна при сопоставлении результатов численного моделирования с теорией плазмы и служит для контроля сглаживания спектра полевых величин. Изложим некоторые детали этого метода, являющегося основой для определения поля в программе *ES1*.

Способность эффективно выполнять преобразование Фурье с помощью использования быстрого преобразования Фурье БПФ — изобретения 60-х годов — является основным фактором в этом вычислении. Ключом к решению задачи является предположение, что $\rho(x)$ и $\varphi(x)$ имеют Фурье-преобразования $\rho(k)$ и $\varphi(k)$, где k — волновой вектор в ядре Фурье-преобразования, $\exp(-ikx)$, тем самым мы предполагаем выполненные граничные условия — периодические, которые подробно рассмотрены ниже. Это допущение позволяет определить $\varphi(k)$ из $\rho(k)$ в одномерном случае по очень простой формуле:

$$\varphi(k) = \rho(k) / (\epsilon_0 k^2). \quad (2.19)$$

Следующим шагом является выполнение обратного преобразования Фурье $\varphi(k)$ для получения $\varphi(x)$ и затем $E(x)$. Общая последовательность действий дана на рис. 2.7. Читатель может заметить, что легко прямо вычислить $E(k)$; мы рассмотрим эту возможность ниже. Сложность выполнения этой процедуры состоит в том, что мы имеем дискретное преобразование Фурье: знаем $\rho(x)$ только в точках X_j , т. е. всего в NG точках.

Решение уравнения Пуассона, использующее конечные ряды Фурье, начинается с применения преобразования Фурье к плотности заряда, определенной в узлах сетки, т. е. к последовательности величин $\rho(X_j)$, где $j=0, 1, 2, \dots, NG - 1$. Пусть сеточные функции $G(X_j)$, представляющие собой поле E , потенциал или плотность заряда ρ , являются периодическими с периодом L , т. е. $G(X_j) = G(X_j + L)$, тогда конечное дискретное преобразование Фурье имеет вид

$$G(k) = \Delta x \sum_{j=0}^{NG-1} G(X_j) \exp(-ikX_j), \quad (2.20)$$

где суммирование идет по точкам $X_j = j\Delta x$. Обратное преобразование представляется суммированием по $k = n(2\pi/L)$ и определяется выражением

$$G(X_j) = 1/L \sum_{n=-NG/2}^{NG/2-1} G(k) \exp(ikX_j), \quad (2.21)$$

позволяющим получить NG значений $G(X_j)$. Достоинством БПФ является его способность быстро выполнять суммирование по формулам (2.20) и (2.21). Используя написанные выше ряды для $\rho(X_j)$, $\phi(X_j)$ и $E(X_j)$ совместно с системой конечно-разностных уравнений (2.16) и (2.17), получаем

$$E(k) = -ik\tilde{\phi}(k), \quad (2.22)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{k} &= k [\sin(k\Delta x)/k\Delta x] = k \operatorname{dif}(k\Delta x), \\ \operatorname{dif}(\theta) &\equiv \sin\theta/\theta, \end{aligned} \quad (2.23)$$

и

$$\phi(k) = \rho(k)/(\epsilon_0 K^2). \quad (2.24)$$

Здесь

$$K^2 = k^2 [\sin(k\Delta x/2)/(k\Delta x/2)]^2 = k^2 \operatorname{dif}^2(k\Delta x/2). \quad (2.25)$$

Конечно-разностные члены \tilde{k} и K^2 сходятся к решению дифференциального уравнения при увеличении числа узлов сетки, когда $k\Delta x \rightarrow 0$. Влияние пространственной сетки как на точность решения (например, на зависимости \tilde{k} от k и K^2 от k^2), так и на создание эффекта наложения частот (при взаимодействии возникают такие значения, что $|k\Delta x| > \pi$, и они воспроизводятся на сетке неправильно, накладываясь на частоты с $|k\Delta x| < \pi$) рассмотрено детально ниже при описании теории моделирования. Обсуждение различий между использованием k , k^2 и \tilde{k} , K^2 дано в приложении.

С учетом того, что NG величин $\rho(X_j)$ преобразуются в NG величин $\rho(k)$ и затем получается NG величин $E(X_j)$, последовательность решения, изображенная на рис. 2.7, остается справедливой; сначала обычно выполняется одним из способов преобразование Фурье, затем проводится деление на K^2 , обратное преобразование и, наконец, определяется градиент [дифференцирование в конечно-разностях соотношения (2.16) от $\phi(X_j)$ и $E(X_j)$]. Имеется NG величин k — от минимального $k = 2\pi/L$ (L — длина системы, см. рис. 2.1) до максимального $k = \pi/\Delta x$ и таких же отрицательных значений, или в терминах длин волн $\lambda_{\max} = L$, $\lambda_{\min} = 2\Delta x$.

Задачи

2.4. Уравнение $\nabla E = \rho/\epsilon_0$ может также быть разрешено относительно E методом Фурье. В одномерном случае очевидно $E_x(k) = \rho(k)/ik\epsilon_0$. В случае 3D (электростатический случай) необходимо добавить условие $\nabla E = 0$. Покажите, что эти уравнения имеют решения

$$E(\mathbf{k}) = k \rho(\mathbf{k}) / (ik^2 \epsilon_0), \text{ где } k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2.$$

2.5. Покажите, что соотношение (2.21) является обратным по отношению к (2.20). При этом величина $G(X_{j+NG})$, определяемая (2.21), равна $G(X_j)$.

2.6. Если $G(X_j)$ —действительная величина, то имеется избыток данных в наличии NG комплексных величин $G(k)$ в (2.20). Покажите, что $G(-k) = G^*(k)$ и поэтому имеется $NG/2 + 1$ независимых величин $\operatorname{Re} G(k)$ (косинусные коэффициенты) и $NG/2 + 1$ независимых величин $\operatorname{Im} G(k)$ (синусные коэффициенты).

2.7. Покажите, что если $G(X_j)$ и $H(X_j)$ являются реальными, то косинусные и синусные коэффициенты G и H могут быть получены из преобразования [с помощью (2.20)] комплексной последовательности $G(X_j) + iH(X_j)$. Это выполняется вызовом подпрограмм CPFT и RPFT2, а обратная операция—вызовом RPFT12 и CPFT (см. приложение А).

2.8. Получите \tilde{k} в (2.23) и K^2 в (2.25) подстановкой $E(X_j)$, $\phi(X_j)$ и $\rho(X_j)$ в виде (2.21) в конечно-разностные соотношения (2.16) и (2.17). Нарисуйте график зависимости (\tilde{k}/k) и (K^2/k^2) от $k\Delta x$ в области от 0 до π .

2.6. СВЯЗЬ МЕЖДУ ВЕЛИЧИНАМИ, ОПИСЫВАЮЩИМИ ЧАСТИЦЫ, И РАЗНОСТНОЙ СЕТКОЙ; ВЗВЕШИВАНИЕ СИЛ И ЧАСТИЦ

Плотность заряда и напряженность поля определены в дискретных узлах сетки, а координаты частиц, использующиеся при их вычислении, являются непрерывными функциями. Необходимо также определять силы, действующие на частицы, по их значениям в узлах сетки. На рис. 2.3 эти вычисления вызваны взвешиванием, которое предполагает некоторую форму интерполяции по сеточным узлам, ближайшим к частице. Как показано ниже, желательно использовать один и тот же способ взвешивания для плотности и вычисления сил, чтобы устранить действие частицы саму на себя (например, самоускорение частицы).

Во взвешивании нулевого порядка мы просто подсчитываем число частиц в пределах интервала $\pm \Delta x/2$ (ширина одной ячейки) около j -го узла сетки и присваиваем это число [называя его $N(j)$] j -му узлу, т. е. сеточная плотность (в одномерном случае) просто равна $n_j = N(j)/\Delta x$. Это проиллюстрировано на рис. 2.8, а. Для такого способа взвешивания используется наименование к ближайшему узлу сетки или NGP. При численной реализации подсчет очень быстр, так как выполняется просмотр только одной ячейки. Электрическое поле, используемое при расчете силы, берется в точке X_j одинаковым для частиц в j -й ячейке.

Когда частица приходит в j -ю ячейку (через границы ячейки при $x = X_j \pm \Delta x/2$), сеточная плотность благодаря этой частице скачком возрастает, а при уходе частицы ($x > X_j + \Delta x/2$ или $x < X_j - \Delta x/2$) сеточная плотность скачком уменьшается. Плотность, наблюдаемая в j -м узле, показана на рис. 2.8, б. Так мы имеем два эффекта. Один из них состоит в том, что частицы

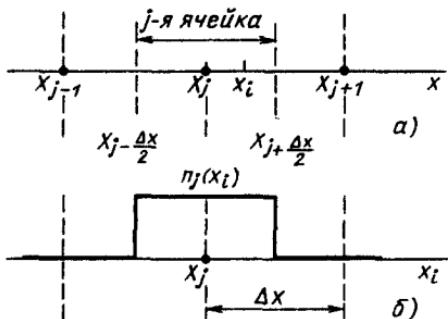


Рис. 2.8. Взвешивание полей и частиц в нулевом приближении NGP. Частицы в j -й ячейке с координатами $x_i \in X_j \pm \Delta x/2$ приписываются к узлу X_j для получения сеточной плотности $n(X_j)$. На все эти частицы действует поле со значением $E(X_j)$ (а); плотность $n_j(x_i)$ в точке X_i создана частицей в x_i , когда частица проходит через ячейку с центром в X_j (б). Эту плотность можно интерпретировать как эффективную плотность частицы

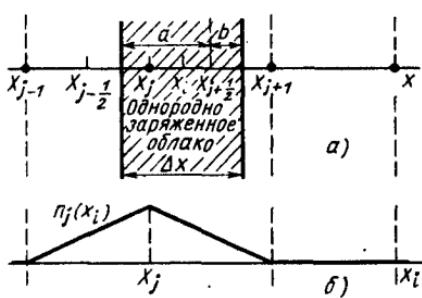


Рис. 2.9. Взвешивание первого порядка, или модель «облако в ячейке» СІС (а). Стандартная заряженная частица конечных размеров, или облако, имеет ширину в одну ячейку с центром в x_i . Это взвешивание помещает часть облака, которая находится в j -й ячейке, в X_j (часть а) и другую часть, которая находится в $(j+1)$ -й ячейке, в X_{j+1} (часть б). Это взвешивание можно считать применением метода NGP к каждой части элемента. Сеточная плотность $n_j(x_i)$ в точке x_i при прохождении через X_j показывает эффективную форму частицы $S(x)$ (б)

кажутся нам имеющими прямоугольную форму с шириной Δx . Это означает, что мы имеем набор частиц конечных размеров, следовательно, наблюдаемые физические эффекты будут проявляться именно для таких, а не точечных частиц. Введение частиц конечных размеров влияет в основном на описание процессов столкновения, оставляя без изменения основные закономерности физики плазмы. Второй эффект — появление скачкообразных изменений плотности заряда и электрического поля при прохождении частицы через границу ячейки, приводящих к заметным шумам в пространстве и времени; этот шум может быть недопустим во многих плазменных задачах.

Взвешивание первого порядка сглаживает флуктуации плотности и поля, что уменьшает шум (относительно взвешивания нулевого порядка), но требует дополнительных вычислительных затрат при добавлении двух узлов сетки для каждой частицы дважды на шаг. Можно рассматривать этот шаг как улучшение использования частиц конечных размеров или как лучшую интерполяцию. Заряженные частицы выглядят облаками конечных размеров, которые могут проходить друг через друга. Такая модель называется «облако в ячейке» или СІС [Birdsall and Fuss, 1969]. Если взять опорное облако однородной плотности шириной Δx , как показано на рис. 2.9, а (так называемое квадратное облако), то сеточное присвоение выг-

лядит очевидным: используется метод NGP для каждого элемента. В этом случае для полного заряда облака q_c часть, задаваемая в j -й узел, определяется формулой

$$q_j = q_c [(\Delta x - (x_i - X_j)) / \Delta x] = q_c (X_{j+1} - x_i) / (\Delta x), \quad (2.26)$$

а часть, задаваемая в $(j+1)$ -й узел, формулой

$$q_{j+1} = q_c (x_i - X_j) / \Delta x. \quad (2.27)$$

В результате получаем треугольную форму частицы $S(x)$ с шириной $2\Delta x$. При вычислениях ближайший сеточный узел с номером j расположен с левой стороны от частицы, так что всегда выполняется условие $x_i > X_j$. Сначала вычисляются веса, а затем производится распределение заряда по узлам сетки. Заметим, что к такому же результату приводит распределение точечного заряда по ближайшим узлам по формулам линейной интерполяции. Эта точка зрения называется моделью «частица в ячейке» или PIC. Когда облако движется через сетку, оно дает вклады в плотность намного более гладко, чем взвешивание нулевого порядка, как это видно из рис. 2.9, б, следовательно, результирующая плотность будет более приемлемой для большинства задач по моделированию плазмы.

Взвешивания более высоких порядков, использующие квадратичные и кубичные сплайны, еще более сглаживают неровности формы частицы и уменьшают шум поля и плотности, но ценой большего числа вычислений. Использование сплайнов для взвешивания более высоких порядков обсуждается ниже. Например, эффективная форма частицы может изменяться в процессе вычислений поля после Фурье-преобразования $\rho(x)$ в $\rho(k)$ отбрасыванием $\rho(k)$ при некотором k или умножением $\rho(k)$ на $\exp[-(k/k_{last})^n]$.

Взвешивание поля и силы выполняется точно так же.

В методе NGP сила получается из значения поля в ближайшем узле сетки. Сила первого порядка (PIC—CIC) получается линейной интерполяцией, точно так же, как распределение заряда; для частицы в точке x_i значение поля дается формулой

$$E(x_i) = (X_{j+1} - x_i) E_j / \Delta x + (x_i - X_j) E_{j+1} / \Delta x. \quad (2.28)$$

Взвешивание первого порядка требует большего машинного времени на частицу, чем взвешивание нулевого порядка, однако для заданного уровня шума PIC допускает как более грубую сетку, так и меньшее число частиц, чем NGP, и, таким образом, экономит время компьютера, требуемое на одну частицу. Мы увидим также, что взвешивание и сглаживание более высоких порядков способствуют уменьшению нефизических эффектов.

Задача

2.9. Покажите, что интерполяция по схеме Лагранжа второго порядка точности приводит к разрывам. (Сплайны также используют кусочно-полиномиальное представление, но сегменты сопрягаются гладко.)

2.7. ВЫБОР НАЧАЛЬНЫХ ВЕЛИЧИН; ОБЩИЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Выше уже были высказаны некоторые соображения о работе вычислительного цикла. Теперь рассмотрим начало работы программы. Предположим, что интересующая нас задача поставлена так, что уже решен вопрос о выборе: а) числа частиц и ячеек сетки; б) методов взвешивания и сглаживания; в) желательной начальной функции распределения $f(x, v, t=0)$, включая начальное возмущение (случайное или упорядоченное). Следующим шагом является размещение частиц в фазовом пространстве (x, v) таким образом, чтобы задача была готова к запуску на счет. Холодная, однородная периодическая плазма подвижных электронов и неподвижных ионов ($m_i/m_e \rightarrow \infty$) является самым простым случаем. Электроны размещаются однородно, по одному или более в ячейке. Плотность заряда и (или) программа определения поля автоматически добавляют однородный нейтрализующий ионный фон обнулением компонент ρ и E при $k=0$. Плазменная волна может быть возбуждена возмущением однородного распределения x_{i0} следующим образом:

$$x_i(t=0) = x_{i0} + x_{i1} \cos(k_s x_{i0}),$$

где $k_{\min} \leq k_s \leq k_{\max}$ — тот же волновой вектор, который мы хотим задать в плазменной волне. Эти x_i и соответствующие скорости (здесь все они равны нулю) задаются на шаге при $t=0$. Программа затем находит поля при $t=0$, из которых определяются скорости при $t = -\Delta t/2$ (эта операция проделывается только 1 раз в начале программы, см. § 2.4 и рис. 2.10). Затем цикл выполняется вперед от $v(t-\Delta t/2)$ к $v(t+\Delta t/2)$ и от $x(0)$ к $x(\Delta t)$, и далее расчеты повторяются.

В случае горячей плазмы каждой частице придается такая скорость v , чтобы в пределах определенной области (возможно, в нескольких ячейках для сохранения самой короткой длины волны λ) реальное распределение по скоростям было хорошо аппроксимировано. Предположим, что реальное распределение по скоростям от $-v_{\max}$ до $+v_{\max}$ имеет вид, показанный на рис. 2.11, а. Тогда если в модели холодной плазмы было, например, 4 частицы на ячейку с нулевой скоростью, то теперь надо расщепить каждую из них мысленно на четыре части, размещенные так, как показано на рис. 2.11, б. Итоговый результат холодной и горячей моделей показан на рис. 2.12.

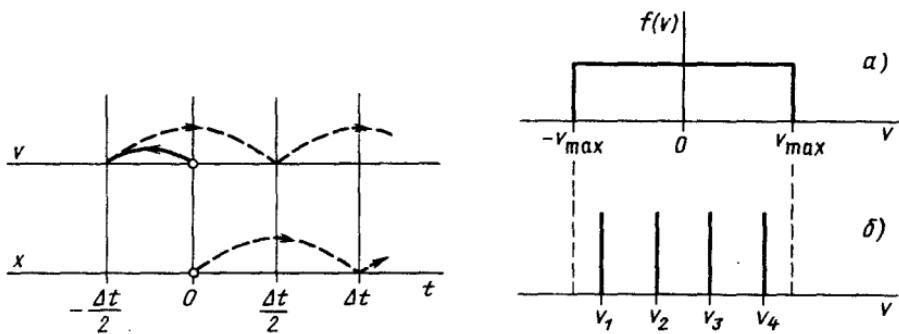


Рис. 2.10. При $t=0$ заданы $x_i(t=0)$ и $v_i(t=0)$. Самый первый шаг — это вычисление полей при $t=0$ по значениям x_i и сдвиг v_i назад на половину шага (сплошная линия). Затем программа продвигает v_i , а затем x_i (см. рис. 2.4)

Рис. 2.11. П-образная функция распределения $f(v)$ (а) и элементарный способ аппроксимации $f(v)$ четырьмя значениями скорости (б)

Можно улучшить размещение частиц, и обычно это приходится делать, например, чтобы устраниТЬ потенциальную много-пучковую неустойчивость, возникающую из-за начальных приближений функции $f(v)$, показанных на рис. 2.11 и 2.12.

Способы более точного задания начальных распределений частиц будут изложены ниже, в гл. 16, так же как и рекомендации по моделированию более сложных функций распределения $f(x, v)$, например неоднородного распределения по x_i и максвелловского распределения по скоростям v .

Задачи

2.10. Покажите, что начальный полу шаг назад имеет тот же самый порядок точности, что и основная программа движения частиц, т. е. $(\Delta t)^2$.

2.11. Придумайте схему, показывающую, как полу шаговая последовательность может быть использована после того, как основная программа начала работу, чтобы получить x и v в один и тот же момент времени, т. е. перейти от $x(t)$ и $v(t-\Delta t/2)$ к $x(t)$ и $v(t)$. Логично, например, использовать полуускорение и затем полу вращение. Будет ли это правильно? С $x(t)$ и $v(t)$ программа может быть снова запущена с начала, например, назад (для проверки точности при изменении знака Δt) или вперед с новым шагом Δt .

2.8. ВЫБОР ФОРМЫ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ РАБОТЫ ПРОГРАММЫ; ОБЩИЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Предметом моделирования является получение знаний о физике плазмы. Объектом любого запуска программы моделирования или серии запусков служит изучение колебаний и волн в плазме, неустойчивостей нагрева и излучения плазмы, транспортировки пучков и т. д., обычно ограниченного числа явлений в любой системе запусков. Следовательно, про-

Рис. 2.12. Размещение частиц в фазовом пространстве для холодной однородной плазмы [четыре частицы на ячейку (а)] и размещение частиц в горячей плазме с П-образной функцией распределения с использованием четырех скоростей и созданием четырех пучков (б)

грамма моделирования должна на выходе содержать информацию, которая показывает, какие физические процессы были реализованы, и обеспечивать необходимые сведения об изучаемых явлениях.

Можно, конечно, сохранять всю получаемую в процессе вычисления информацию, записывая ее, например, на магнитную ленту, а после окончания работы программы проводить анализ полученных сведений. Однако более общепринятым способом представления выходных данных служат графики, создаваемые в процессе работы программы (мгновенные фотографии) и в конце (развитие во времени), дополняемые пространственным и времененным Фурье-анализом некоторых величин, с распечаткой всей информации на пленку или бумагу. Так как никакой другой информации о работе программы не сохраняется, то выбранные графики должны содержать все интересующие нас физические данные. Для ориентировки заметим — обычно благоразумно сохранять больше данных, чем кажется минимально необходимым.

Первая страница могла бы содержать имя программы и используемой версии; она также должна содержать все начальные условия. Следующие страницы могут быть мгновенными фотографиями, выполненными с некоторым интервалом, например, при $t=0$, $t=60\Delta t$, $t=120\Delta t$ и т. д. Интересующей нас информацией на этих снимках может быть для частиц:

фазовое пространство $v_x(x)$;

пространство скоростей $v_y(v_x)$;

плотность распределения по скоростям или $f(v^2)$. Для сеточных величин можно нарисовать:

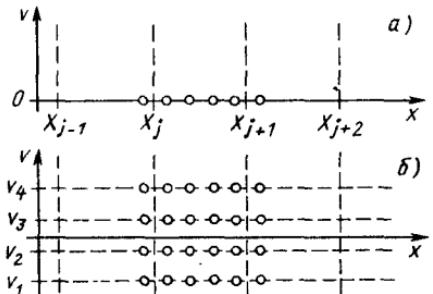
а) плотность заряда $\rho(x)$ или плотность частиц $n(x)$;

б) потенциал $\phi(x)$;

в) поле $E(x)$;

г) распределение электростатической энергии $1/2\rho_k\phi_k$ от k . Результаты в конце работы программы должны состоять из графиков зависимости от времени следующих величин:

а) электростатической энергии $1/2 \sum_k \rho_k \phi_k$;



- б) кинетической энергии частиц по группам $\sum_i 1/2m_i v_i^2$;
- в) дрейфовой энергии частиц $\sum_i 1/2m_i \langle v_i \rangle^2$;
- г) тепловой энергии частиц $\sum_i 1/2m_i (\langle v_i^2 \rangle - \langle v_i \rangle^2)$;

д) полной энергии — энергии частиц плюс энергия электростатического поля (обычно с опущенными лишними нулями для увеличения эффекта несохранения энергии при расчетах);

е) величины $1/2\rho_k\Phi_k$ для каждой моды, возможно с Фурье-анализом каждой моды, с графиками зависимости от ω .

Перечисленные графики дают представление о выходной информации одномерной программы. При типичном запуске, содержащем 1000 шагов, можно делать мгновенные фотографии через каждые $60 \Delta t$ — графики для 7 частиц и сеточных величин (126 графиков) и в конце запуска — 5 энергетических и, например, 32 модовых графика; общее число графиков $1 + 126 + 5 + 32 = 164$, они легко умещаются на 192 страницах микрофильмовой пленки размером 10×15 см.

Представляют интерес и многие другие величины. При изучении диффузии можно проследить за среднеквадратичным отклонением скоростей или координат частиц, когда они запоминаются $[v_i - v_i(t=0)]^2$ или $[x_i - x_i(t=0)]^2$, а потом рисуются. При изучении волны могут понадобиться частотные характеристики, так что потребуется выполнить Фурье-анализ во времени некоторых величин типа $\phi(k, t)$, возможно после работы программы (так называемая последующая обработка) с необходимым запоминанием исследуемой величины. Может представлять интерес динамика фаз или скоростей или пространственная функция распределения — в этом случае должен быть смонтирован кинофильм, вероятно, по мгновенным фотографиям, сделанным через интервалы времени Δt или $2\Delta t$.

На этом пути исследователь, как экспериментатор в лаборатории, будет накапливать необходимые данные для проверки правильности своих физических представлений и обеспечивать желаемое проникновение в суть своей собственной плазменной задачи.

2.9. СПОСОБЫ ПРОВЕРКИ ПРАВИЛЬНОСТИ РАБОТЫ ПРОГРАММЫ

Исследователь при доказательстве правильности полученных при численном моделировании результатов встречается с теми же проблемами, что и экспериментатор или теоретик. Специалист, занимающийся моделированием, использует неопубликованную программу с ограниченным описанием физических процессов (например, одномерная модель или электростатическая, или отсутствуют столкновения, излучение и т. д.), со

специально подобранными начальными условиями и ограниченным количеством выходной информации. Как он может доказать себе и всем, что на его работу можно положиться? Он может сравнить свои результаты с уже полученными в теории или в эксперименте, получить желаемые результаты для задач с известными ответами, показать инвариантность своих результатов при изменении нефизических компьютерных параметров (Δt , Δx , NP , NG и т. д.). Но и после этого может остаться некоторое количество сомневающихся. Фундаментальные задачи могут быть проверены исследователем в различных вычислительных центрах с использованием других программ, например такая задача, как диффузия плазмы поперек магнитного поля.

Занимающийся моделированием сам должен иметь доверие к своей программе и знать границы, в которых она работоспособна. Доверие должно быть настоящим. Во-первых, все составляющие части программы (решение уравнений движения, вычисление полей и т. д.) должны быть протестированы отдельно для получения предсказуемых результатов.

Общая программа должна быть отлажена на тестовых задачах, таких как:

а) простое гармоническое движение пары тестовых электронов в однородном фоне; проверка частоты ω_p ;

б) холодные плазменные колебания многих электронов в длинноволновом приближении, на однородном фоне; проверка частоты ω_p как функции k ;

в) неустойчивость двух противоположно направленных электронных потоков на однородном ионном фоне; проверка инкремента как функции k ;

г) неустойчивость из-за кольцевого распределения скоростей в магнитном поле $f(v_\perp) \approx \delta(v_\perp - v_0)$; проверка комплексного ω .

В любом или во всех этих случаях старайтесь уменьшить число частиц NP или число ячеек сетки или увеличить шаг по времени Δt . Смотрите, как далеко вы можете зайти до появления признаков нефизических эффектов, таких как несомненное нарушение сохранения энергии. Доверие к программе приходит с опытом работы.

ГЛАВА 3

ОДНОМЕРНАЯ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКАЯ ПРОГРАММА ES1

3.1. ВВЕДЕНИЕ

Будем считать, что после ознакомления с гл. 2 читатель уже подготовлен к внимательному изучению особенностей конкретной программы. Изучение состоит в использовании той или

иной конкретной программы для исследования одномерных электростатических задач.

Программа ES1 (Электростатическая, 1-мерная) была написана в 1972 г. Лэнгдоном для обеспечения курса, читаемого Бэдселом в Беркли. Хотя ES1 была создана для целей обучения, она послужила основой для создания программ, используемых в научных исследованиях. Программа ES1 доступна всем сотрудникам Национального вычислительного центра по управляемому термоядерному синтезу и легко может быть приспособлена к возможностям различных типов ЭВМ.

Начнем непосредственно с рассмотрения отдельных частей программы, объясняя выполняемые ими действия и давая их фортранный листинг. Как и в гл. 2, отложим обсуждение точности вычислений, альтернативных схем и сравнение расчетов с результатами физических исследований до последующих глав книги.

В некоторых параграфах настоящей главы обсуждаются вопросы, относящиеся к различным операторам программы. Эти вопросы можно использовать как упражнения на занятиях для проверки правильности понимания программы пользователем.

3.2. ОБЩАЯ СТРУКТУРА ПРОГРАММЫ ES1

Устройство программы во многом соответствует схеме, приведенной ранее в § 2.3, где за исключением начального шага был показан основной цикл вычислений. Теперь сформулируем схему в компьютерных терминах, используя названия компьютерных переменных и подпрограмм, но несколько по-другому сгруппируем вычисления и добавим начальный шаг.

В начале программа считывает входные данные, затем формирует процедуру построения графиков HISTRY. Следом вызываются подпрограммы INIT и FIELDS (которая в свою очередь вызывает процедуру прямого и обратного преобразований Фурье) и SETV,зывающая ACCEL. Обращение к подпрограммам происходит в указанном здесь порядке. Эти процедуры используются только 1 раз для задания соответствующих начальных условий, т. е. величин $x(0)$ и $v(0)$ для всех частиц, а также $x(0)$ и $v(-\Delta t/2)$ в качестве начальных условий для основного вычислительного цикла. Все действия выполняются в следующем порядке:

FIRST

Формирует входной файл. Создает выходной файл для построения графиков и вывода на «ленту 3»

Ввод данных
HISTORY

Рисует величины (типа различных энергий) в зависимости от времени. При первом обращении обнуляет необходимые массивы

INIT	Преобразует входные величины (типа ω_p , q/m) в компьютерные переменные (типа Q , M). Задает начальные координаты частиц, включая возмущение $x(0)$. Задает начальные скорости частиц — холодные или по максвелловскому распределению, включая $v(0)$
SETRHO	Преобразует x в компьютерную переменную $x/\Delta x$. Накапливает со взвешиванием значение зарядов в узлах сетки
FIELDS	Решает уравнение Пуассона для потенциала φ с использованием сеточного задания заряда. Использует процедуры преобразования Фурье CPFT, RPFT2, RPFT12, CRFT.
	Вычисляет поле E дифференцированием потенциала φ , заданного на сетке. Формирует мгновенные фотографии поля
SETV	Преобразует $v(0)$ в $v(-\Delta t/2)$ с использованием значения $E(0)$ в ACCEL Приводит v к виду $v\Delta t/\Delta x$
Затем программа выполняется NT раз, причем на каждом шаге по времени вызываются подпрограммы ACCEL, MOVE и FIELDS (именно в указанном порядке). Детали каждого обращения к подпрограммам указаны ниже. Вся последовательность действий аналогична блок-схеме на рис. 2.3, только операция взвешивания перенесена в подпрограммы ACCEL и MOVE.	
PLOTXV, etc.	Вход в основной цикл после задания начальных условий $x(0)$, $v(-\Delta t/2)$ и $E(0)$
ACCEL	Различные диагностики частиц Преобразует E в компьютерную переменную $A = q/m \times E\Delta t^2/\Delta x$. Определяет значение скорости через один временной шаг, используя взвешенное значение E (или A). Вычисляет момент и кинетическую энергию. Делает все эти действия для каждого сорта частиц
MOVE	Определяет значение координаты через один временной шаг. Накапливает со взвешиванием плотность заряда на сетке. Повторяет все действия для каждого сорта частиц
HISTRY	Сохраняет необходимые величины для рисования графиков в зависимости от времени
Прибавление единицы в счетчике временных шагов FIELDS (Уже описана выше)	
Возвращение в начало основного цикла для выполнения всех NT шагов	
После прохождения NT шагов по времени выходим из основного цикла через процедуры LAST и HISTRY.	
HISTRY	Строит графики величин в зависимости от времени
LAST	Закрывает файлы и заканчивает выполнение всей программы

Остальные подробности, относящиеся к каждому шагу всех подпрограмм, приведены в последующих параграфах, в основном в порядке их использования в программе.

Есть несколько особенностей в ES1, которые обусловлены спецификой развитых в Ливерморе операционных систем для ЭВМ CDC-7600 и CRAY-1. Большинство из них относится к подпрограммам FIRST, LAST и подпрограммам, рисующим графики. В программу интегрирования уравнений движения включены специальные операторы, позволяющие использовать возможность векторных вычислений на компьютере CRAY-1. Кроме того, в этой программе использован предкомпилятор для удобства изменения размерности всех массивов и для повторения COMMON блоков в подпрограммах.

Операторы PARAMETER определяют величины, которые являются фиксированными во время компиляции и сохраняются постоянными (по сравнению с операторами DATA, которые присваивают начальные значения переменным, изменяющимся в процессе выполнения). CLICHE и ENDCLICHE ограничивают операторы, которые должны вставляться в любой источник, цитируемый оператором USE. Таким образом, изменения в размерностях массивов и COMMON блоков необходимо делать только в одном месте.

Далее следует текст основной программы:

```
C   ES1 - одномерная электростатическая программа по моделированию
      плазмы
C   Написана Ленгдоном, Ливермор, 1972 г.
C   Пересмотрена 6/1976 г., 2/1977 г., 10/1977 г., 6/1978 г., 3—5/1979 г.
C   CLICHE MPARAM
      COMMON /PARAM/ NSP,L,DX,DT,NTP
      REAL L
      ENDCLICHE MPARAM
      USE MPARAM
C
C   NGMAX-MAXIMUM NUMBER OF CELLS
      CLICHE MFIELD
      PARAMETER (NGMAX=256)
      PARAMETER (NG1M=NGMAX+1)
      COMMON /CFIELD/ NG,AEL,EPSI,IW,VEC,RHO0,A1,A2,
      RHO(NG1M),PHI(NG1M),E(NG1M),
      EO,WO
      LOGICAL VEC
      ENDCLICHE MFIELD
      USE MFIELD
C
C   CLICHE MPTCL
C   КООРДИНАТЫ И СКОРОСТИ ЧАСТИЦ
      COMMON X(8192),VX(8192),VY(8192)
      ENDCLICHE MPTCL
      USE MPTCL
C   В НЕЗАМАГНИЧЕННОМ СЛУЧАЕ МОЖНО ОПИСАТЬ МАССИВ
      VY(1)
C
C   CLICHE MCNTRL
```

COMMON /CNTRL/ IT,TIME,ITHL,
IRHO,IRHOS,IPHI,IE,IXVX,IVXVY,IFVX
ENDCLICHE MCNTRL
USE MCNTRL

C NTH—ЧИСЛО ШАГОВ ПО ВРЕМЕНИ МЕЖДУ ВРЕМЕННЫМИ
C ГРАФИКАМИ
C MMX—МАКСИМАЛЬНОЕ ЧИСЛО РАЗЛИЧНЫХ ФУРЬЕ-МОД ДЛЯ
C ГРАФИКОВ
C NSPM—МАКСИМАЛЬНОЕ ЧИСЛО ГРУПП ЧАСТИЦ. ДОПУСКА-
C ЕТСЯ ДО NS PM ГРУПП
CLICHE MTIME
PARAMETER (NTH=500,MMAX=10,NSPM=3)
PARAMETER (NTH1=NTH+1,NTH2=NTH+2,NSPM1=NSPM+1)
COMMON /CTIME/ESE(NTH1),KES(NTH1,NSPM),PXS(NTH2,NSPM),
NMS(NSPM),MPLOT(MMAX),ESEM(NTH1,MMAX)
REAL KES,NMS
ENDCLICHE MTIME
USE MTIME
C
REAL KE,MS(NSPM),QS(NSPM),TS(NSPM)
INTEGER INS(NSPM1)
C ВХОДНЫЕ ПЕРЕМЕННЫЕ
C L—ФИЗИЧЕСКАЯ ДЛИНА СИСТЕМЫ
C NSP—ЧИСЛО ГРУПП ЧАСТИЦ
C DT—ШАГ ПО ВРЕМЕНИ
C NT—ЧИСЛО ШАГОВ ПО ВРЕМЕНИ (ПОЛНОЕ ВРЕМЯ=NT*DT)
C NG—ЧИСЛО ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ЯЧЕЕК, ДОЛЖНО БЫТЬ
C СТЕПЕНЬЮ 2
C IW—СЕЛЕКТОР ВЫБОРА АЛГОРИТМА РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ
C ДВИЖЕНИЯ. СМ. ПОДПРОГРАММЫ ACCEL И MOVE
C VEC—TRUE. ДЛЯ ВКЛЮЧЕНИЯ ВЕКТОРНОЙ ВЕРСИИ ПРИ
C РАБОТЕ НА КОМПЬЮТЕРЕ CRAY=1.
C EPSI—МНОЖИТЕЛЬ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ПУАССОНА (РАВЕН 1
C В СИ)
C A1, A2—СГЛАЖИВАНИЕ ПОЛЕЙ И МЕЖДИАПАЗОННОЕ
C УСИЛЕНИЕ, СМ. FIELDS.
C EO, WO—ДОБАВЛЕНИЕ ОДНОРОДНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО
C ПОЛЯ EO*COS(WO*ВРЕМЯ)
C IRHO—ИНТЕРВАЛ ГРАФОПОСТРОЕНИЯ ДЛЯ RHO (ПЛОТНОСТИ
C ЗАРЯДА, ЕСЛИ РАВЕН 0, ТО ГРАФИКИ НЕ СТРОЯТСЯ)
C IRHOS—ИНТЕРВАЛ ГРАФОПОСТРОЕНИЯ ДЛЯ СГЛАЖЕННОЙ
C ПЛОТНОСТИ
C IPhI—ИНТЕРВАЛ ГРАФОПОСТРОЕНИЯ ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛА PHI.
C IE—ИНТЕРВАЛ ГРАФОПОСТРОЕНИЯ ДЛЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО
C ПОЛЯ E
C IXVX—ИНТЕРВАЛ ГРАФОПОСТРОЕНИЯ ДЛЯ X
C IFVX—ИНТЕРВАЛ ГРАФОПОСТРОЕНИЯ ДЛЯ ФУНКЦИИ РАС-
C ПРЕДЕЛЕНИЯ F(VX)>0—ЛИНЕЙНЫЙ МАСШТАБ, <0—ПОЛУ-
C ЛОГАРИФМИЧЕСКИЙ
DATA NSP,L,DT,NT,EPSI/1,6.28318530717958,2,150,1./
DATA NG,IW,A1,A2,VEC/32,2,0.,0.,TRUE./

```

DATA E,WO/0.,0./
DATA IRHO,IRHOS,IPHI,IE,IXVX,IVXVY,IFVX/7*0/,MPLOT/MMAX=0/
NAMELIST /IN/ L,NSP,NT,DT,EPSI,NG,IW,VEC,A1,A2EO,WO,
IRHO,IRHOS,IPHI,IE,MPLOT,IXVX,IVXVY,IFVX

C CALL FIRST
C ЧТЕНИЕ СПИСКА ВХОДНЫХ ДАННЫХ. ПОВТОРЕНИЕ ВСЕХ
C ВЕЛИЧИН ДЛЯ ВЫХОДА, ВКЛЮЧАЯ НЕДОСТАЮЩИЕ
C ОБНУЛЕНИЕ ВЫХОДНОГО БУФЕРА В СЛУЧАЕ ОШИБОК В
C РАБОТЕ ПРОГРАММЫ
READ (2,IN)
WRITE (3,IN)
WRITE (100,IN)

C CALL HISTRY
DX=L/NG
DO J0 IS=1,NSP
10 CALL INIT(INS(IS),INS(IS+1),MS(IS),QS(IS),TS(IS),NMS(IS),
RHO0)
CALL FIELDS(0)
DO IS=1,NSP
11 CALL SETV(INS(IS),INS(IS+1)-1,QS(IS),MS(IS),TS(IS),
PXS(1,IS)?)
C НАЧАЛО ЦИКЛА ПО ВРЕМЕНИ, КООРДИНАТЫ ЧАСТИЦ ЗА-
C ДАНЫ ПРИ T=0, VX И VY—В МОМЕНТ—0,5*PT.
C
100 CONTINUE
VL=0.
VU=0.
C ПОСТРОЕНИЕ ФАЗОВОГО ПРОСТРАНСТВА ДЛЯ ВСЕХ ЧАСТИЦ
CALL PLOTXV(1,INS(NSP+1)-1,VL,VU)
C ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ДЛЯ ЧАСТИЦ СОРТА № 1
CALL PLTFVX(1,INS(2)-1,VL,VU,QS(1),32)
VMU=0.
IF (TS(1).NE.0) CALL PLTVXY(1,INS(2)-1,VMU)
C СОХРАНЕНИЕ ИНФОРМАЦИИ О ЧАСТИЦАХ ДЛЯ ПЕРЕЗАПУСКА
КОДА
P=0.
KE=0.
DO 101 IS=1,NSP
C ПРОДВИЖЕНИЕ СКОРОСТЕЙ ОТ IT -0.5 ДО IT +0.5
CALL ACCEL(INS(IS),INS(IS+1)-1,QS(IS),MS(IS),TS(IS),
PXS(ITH+2,IS),KES(ITH+1,IS))
P=P+PXS(ITH+2,IS)
101 KE=KE+KES(ITH+1,IS)
DO 102 IS=1,NSP
C ПРОДВИЖЕНИЕ КООРДИНАТ ОТ IT ДО IT +1.0
102 CALL MOVE(INS(IS),INS(IS+1)-1,QS(IS))
TE=KE+ESE(ITH+1)
WRITE (3,950) TIME,ESE(ITH+1),P,(KES(ITH+1,IS),IS=1,2),TE
950 FORMAT(«TIME,ESE,P,KE1,KE2,TE»,F8.2,5E17.9)
IF(IT.GE.NT) GO TO 103

```

```

IF (ITH.EQ.NTH) CALL HISTRY
IT=IT+1
TIME=IT DT
ITH=IT-ITHL
C   РАСЧЕТ ПОЛЕЙ В МОМЕНТ ВРЕМЕНИ IT
CALL FIELDS (ITH)
GO TO 100
C   КОНЕЦ РАБОТЫ
C   КООРДИНАТЫ ЧАСТИЦ X В МОМЕНТ NT*DT,VX И VY В
C   МОМЕНТ DT*(NT-.5)
103  CONTINUE
     CALL HISTRY
     CALL LAST
     END

```

3.3. ВХОДНЫЕ ДАННЫЕ К ES1

Для работы основной программы должны быть заданы следующие величины:

L	Длина системы
NSP	Число групп частиц (1,2,3...)
DT	Шаг по времени
NT	Общее число шагов по времени
NG	Число узлов сетки (целая степень 2)
IW	Используется при выборе метода взвешивания: 1—для нулевого порядка (NGP), сохранение импульса 2—для первого порядка (CIC, PIC), сохранение импульса 3—для сохранения энергии (первый порядок взвешивания для частиц и иулевой порядок для сил)
EPSI 1/ ϵ_0	(обычно 1)
A1	Компенсирующий фактор ($A1=0$ означает отсутствие компенсации)
A2	Сглаживающий фактор ($A2=0$ означает отсутствие сглаживания)
IPHI и т. д.	Числа, определяющие, через сколько шагов строить те или иные графики.

Для работы программы INIT необходимы следующие данные по каждой группе частиц:

N	Число частиц (1,2,3,...)
WP	ω_p (положительная величина)—плазменная частота
WC	ω_c (со знаком)—циклотронная частота
QM	q/m (со знаком)—отношение заряда к массе
VT1	Обеспечивает гауссово распределение тепловых скоростей v_{t1} с центром $v_x=v_0$, $v_y=0$, используя процедуру случайных чисел; максимальная скорость $6v_{t1}$
VT2	Обеспечивает гауссово (или другое) распределение тепловых скоростей, используя обратные функции распределения, задавая упорядоченные скорости («спокойный старт»)
NLG	Число подгрупп, которое должно быть задано для того же самого скоростного распределения, обычно равно 1
NV2	Экспонента функции распределения «спокойного старта» $f(v) \sim (v/v_{t2})^{NV2} \exp(-v^2/2v_{t2}^2)$, обычно 0

VO	Дрейфовая скорость в направлении x (со знаком)
MODE	Номер заданной моды при возмущении по x и v_x
X1	Величина возмущения по x , обычно меньше половины протяженности частицы N/L ; используется в виде: $X1 \cos(2\pi x \text{ MODE}/L + \theta_x)$
VI	Величина возмущения по скорости используется в виде: $V1 \sin(2\pi x \text{ MODE}/L + \theta_v)$
THETAX	θ_x — начальная фаза возмущения по x
THETAV	θ_v — начальная фаза возмущения по скорости

3.4. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ВХОДНЫХ ПАРАМЕТРОВ В КОМПЬЮТЕРНЫЕ ВЕЛИЧИНЫ

Обычно при постановке физической задачи начальные данные заданы в терминах плазменных параметров, таких как плазменная и циклотронные частоты (ω_p , ω_c) и отношения заряда к массе (q/m) для каждого сорта частиц. В программе ES1 ω_p^2 определяет среднюю плотность частиц, ω_c — величину однородного магнитного поля, наложенного на систему. Однако для работы программы необходимо знать q и m в отдельности. Их находят по известным значениям ω_p , q/m и плотности частиц n , причем величина заряда q определяется соотношением

$$\omega_p^2 = \frac{n}{\epsilon_0} q \frac{q}{m} = (N/L)(EPSI)(Q)(QM),$$

а масса m получается по формуле

$$m = Q/QM = q/(q/m)$$

для каждого сорта частиц. Эти выражения справедливы в случае однородной плазмы, когда для плотности частиц n верна формула $n = N/L$, где N — число частиц, а L — длина системы. Использование коэффициента ϵ_0 (или $1/4\pi$) устраняется выбором системы единиц, т. е. мы полагаем в программе $\epsilon_0 = 1$ или $EPSI = 1$.

Пользователь задает ω_c и q/m для всех сортов частиц и должен делать это согласованно, так как $\omega_c = (q/m)B_0$, а поле B_0 — одно для всех частиц. Величина $T = -\text{tg}(\omega_c \Delta t/2)$ определяется через значение ω_c и используется при интегрировании уравнений движения для частиц соответствующего сорта. Если данный сорт частиц (например, ионы) считается незамагниченным, то для него $\omega_c = 0$. Если $\omega_c \neq 0$, то следует использовать значение IW , задающее линейное взвешивание.

3.5. НОРМИРОВКА, КОМПЬЮТЕРНЫЕ ПЕРЕМЕННЫЕ

Шаг пространственной сетки Δx и шаг по времени Δt повторяются в умножении (или делении) во многих местах, где они могут быть устраниены нормированием.

Для того чтобы упростить формулы, преобразуем координату частицы x в компьютерную переменную $x/\Delta x$.

Затем, записав уравнения движения частиц способом с перешагиванием из § 2.4 [см. (2.3) и (2.4)] в виде

$$v_{\text{new}} = v_{\text{old}} + F_{\text{old}} \Delta t / m, \quad (3.1)$$

$$x_{\text{new}} = x_{\text{old}} + v_{\text{new}} \Delta t, \quad (3.2)$$

видим, что имеются два различных умножения на Δt для каждой частицы на каждом шаге, которые можно устраниТЬ, если перейти от скорости v к безразмерной величине $v\Delta t/\Delta x$ и заменить значение $F/m = qE/m$ на величину $A = qE(\Delta t)^2/(m\Delta x)$. Тогда уравнения движения принимают вид

$$\left(\frac{v\Delta t}{\Delta x} \right)_{\text{new}} = \left(\frac{v\Delta t}{\Delta x} \right)_{\text{old}} + \frac{q}{m} \frac{E(\Delta t)^2}{\Delta x}, \quad (\text{ACCEL}) \quad (3.3)$$

$$\left(\frac{x}{\Delta x} \right)_{\text{new}} = \left(\frac{x}{\Delta x} \right)_{\text{old}} + \left(\frac{v\Delta t}{\Delta x} \right)_{\text{new}}, \quad (\text{MOVE}). \quad (3.4)$$

Следовательно, формирование значений A в узлах сетки (почти всегда $NG \ll N$) подразумевает, что подпрограмма ACCEL требует только сложения, и MOVE также требует только сложения. Таким образом, многочисленные умножения на Δt на каждом шаге интегрирования устранены. На первом шаге в подпрограмме SETRHO каждое значение x умножается на $1/\Delta x$ и в SETV каждое v умножается на $\Delta t/\Delta x$, что завершает нормировку переменных.

В необходимых случаях проводится переход к размерным переменным, например при вычислении кинетической энергии сумма по всем скоростям частиц умножается на $(\Delta x/\Delta t)^2$.

3.6. ПОДПРОГРАММА INIT; ВЫЧИСЛЕНИЕ НАЧАЛЬНЫХ СКОРОСТЕЙ И КООРДИНАТ ЗАРЯДОВ

Эта подпрограмма размещает каждую частицу в фазовом пространстве (x, v) . Требуется, чтобы исследователь знал эквивалентную начальную плотность распределения $f(x, v, t=0)$ для каждого сорта частиц, т. е. для каждой частицы необходимо задать извне ее начальную скорость и координату.

Пространственно однородная холодная плазма является самым простым примером; частицы размещаются однородно в пространстве с нулевой скоростью $v_{t1} = v_{t2} = v_0 = 0$. Добавляя дрейфовую скорость v_0 к каждой частице, получаем холодный пучок. Однородная горячая плазма требует определения способа задания $f_0(v)$ с разумно хорошим заполнением (достаточно

представительный набор скоростей) для каждого x или диапазона x . Такая плазма, очевидно, требует больше частиц, чем раньше. Для каждой предыдущей холодной частицы, которые были размещены достаточно плотно по x , чтобы обеспечить хорошее пространственное разрешение, должно быть также распределение по v . Некоторые общие приемы определения $f_0(v)$ и $n_0(x)$ [на самом деле $f(x, v, t=0)$] для размещения в пространстве x и v приведены в гл. 16.

В ES1 все частицы распределены в NLG одинаковых групп, различающихся только координатой x . В каждой группе скорости частиц представляют собой произвольную суперпозицию: а) простого дрейфа; б) случайного максвелловского распределения; в) заданного распределения («спокойный старт»). В последнем случае начальные координаты частиц перемещиваются относительно скоростей таким образом, чтобы фазовая плоскость (x, v_x) была равномерно заполнена. Задание распределенных скоростей v_{i2} , соответствующих спокойному старту, выполняется в первую очередь, а уже затем добавляется случайная компонента скорости. Такой порядок допускает добавление на последнем этапе небольшого толчка в скоростях. Примеры использования спокойного старта приведены в заданиях гл. 5 и обсуждаются в гл. 16.

Кроме того, необходимо задать начальные возмущения в распределениях, обозначаемых в случае их малости $f_1(x, v, t=0)$, чтобы начать взаимодействие с заданной моделью фиксированного уровня (параметры X1, X2 и MODE).

Задачи

3.1. Если сначала задано возмущение по $x(X1>0)$, а затем возмущение по $v(V1>0)$, будут ли они взаимно связанными? Какое возмущение должно быть сделано первым, чтобы устранить взаимную связь? Как в программе ES1 решается эта проблема?

3.2. Заметьте, что частицы сначала загружаются при полуцелом умножении на L/N в циклах, заканчивающихся операторами с метками 10 и 41. Что случилось бы, если бы было добавлено возмущение и если бы частицы были загружены при целом умножении на L/N ? Предположите линейное взвешивание (IW=2) и что N/NG — целое число. Указание: вначале положите $N=NG=4$, MODE=1 и проверьте плотность заряда, получающуюся при малом значении XI и величине THETAX, равной 0 или $\pi/2$.

Далее приведем текст подпрограммы INIT:

SUBROUTINE INIT (IL1,IL2,M,Q,NM,RHO0)

C Загружает частицы от одного сорта при T=0
REAL M,NM
USE MPARAM
REAL LG
USE MPTCL
DATA TWOPI /6.2831 85307 17958/

C Входные переменные
 C N — число частиц данного сорта
 C WP — плазменная частота
 C WC — циклотронная частота
 C QM — q/m — отношение заряда к массе
 C VT1 — случайная тепловая скорость для задания случайных скоростей
 C VT2 — случайная тепловая скорость для упорядоченных скоростей
 C NLG — число используемых групп частиц (на которые разделены упорядоченные скорости)
 C NV2 — максвелловский множитель (для упорядоченных скоростей) вида $V**NV2$
 C VO — дрейфовая скорость
 C MODE,X1,V1,THETAX,THETAV
 C используются для создания синусоидального возмущения
 C Вклад в скорости составляющих, связанных с VT1, VT2, V0, V1, аддитивен
 C Недостающие входные параметры
 DATA N,WP,WC,QM,VT1,VT2,NLG,NV2,V0,MODE,X1,V1,THETAX,
 THETAV /128,1,0.,-1,2 0,1,0,0.,1,4 /
 NAMELIST /IN/N, WP,WC,QM,VT1,VT2,NV2,NLG,V0,MODE,X1,V1,
 THETAX,THETAV
 READ(2,IN)
 WRITE (3,IN)
 WRITE(100,IN)
 $T = TAN(-WC*DT/2.)$
 $IL2 = IL1 + N$
 $Q = L*WP*WP/(N*QM)$
 $M = Q/QM$
 $NM = N*M$

C Загрузка первой (из NLG) группы частиц
 C
 NGR = N/NLG
 LG = L/NLG
 DDX = L/N
 C Загрузка с равномерной плотностью в пространстве, с дрейфом, здесь же задается «холодный случай»
 DO 10 I=1,NGR
 I1 = I - 1 + IL1
 $X0 = (I - 0.5)*DDX$
 $X(I1) = X0$
 10 $VX(I1) = V0$
 IF (VT2.EQ.0.) GO TO 50

C Загрузка упорядоченных скоростей по VX («спокойный старт») создается
 C для максвелловского распределения, но может быть выполнена для любого гладкого распределения
 C В дальнейшем NGR (предпочтительно) является степенью 2
 C Первое накопление неопределенного интеграла от функции распределения
 использует правило средней точки $VMAX = 5.*VT2$
 $DV = 2.*VMAX/(N - 1)$
 $VVNV2 = 1.$
 $X(IL1) = 0.$

```

DO 21 I=2,N
VV=((I-1.5)*DV - VMAX)/VT2
IF (NV2.NE.0) VVNV2=VV**NV2
FV=VVNV2*EXP(-.5*VV**2)
I1=I-1+IL1
21 X(I1)=X(I1-1)+AMAX1(EV,0.)
C Для равномерно размещенных в пространстве значений интеграла ско-
C рость определяется методом обратной линейной интерполяции
DF=X(I1)/NGR
I1=IL1
J=IL1
DO 22 I=1,NGR
FV=(I-.5)*DF
23 IF (FV.LT.X(J+1)) GO TO 24
J=J+1
IF (J.GT.IL2-2) GO TO 80
GO TO 23
24 VV=DV (J-IL1+(FV-X(J))/(X(J+1)-X(J)))- VMAX
VX(I1)=VX(I1)+VV
22 I1=I1+1
C Для упорядоченных скоростей с целью уменьшения корреляции переме-
C шиваются координаты с помощью обращенного двоичного счетчика
XS=0.
DO 41 I=1,NGR
I1=I-1+IL1
X(I1)=XS*LG + .5*DDX
WRITE(3,99) X(I1),VX(I1)
99 FORMAT (6F10.4)
XSI=1.
42 XSI=.5*XSI
XS=XS-XSI
IF (XS.GE.0) GO TO 42
41 XS=XS+2.*XSI
C Преобразует (VX,0) в (VX,VY) в случае замагниченной плазмы
50 IF (WC.EQ.0.) GO TO 80
DO 51 I=1,NGR
I1=I-1+IL1
VV=VX(I1)
THETA=TWOPI*X(I1)/LG
VX(I1)=VV*COS(THETA)
51 VY(I1)=VV*SIN(THETA)
C Повторяет начальные данные первой группы в остальные группы
80 IF (NLG.EQ.1) GO TO 85
J=NGR+1
XS=0.
DO 81 I=J,N,NGR
XS=XS+IG
DO 81 J=1,NGR
I1=J-1+IL1
I2=I1+I-1
X(I2)=X(I1)+XS
VX(I2)=VX(I1)

```

```

81 IF (WC.NE.0.) VY(I2)=VY(I1)
C Добавление случайного максвелловского распределения
85 IF (VT1.EQ.0.) GO TO 90
DO 86 I=1,N
I1=I-1+IL1
DO 86 J=1,12
IF (WC.NE.0.) VY(I1)=VY(I1)+VT1*(RANF(DUM)-.5)
86 VX(I1)=VX(I1)+VT1*(RANF(DUM)-.5)
C Добавление возмущения
C Используются значения X(T=0), V(T=0) без сдвига на  $\Delta t/2$ . Метод
C можно использовать для задания возмущения по VY
90 DO 91 I=1,N
I1=I-1+IL1
THETA= TWOPI*MODE*X(I1)/L
X(I1)=X(I1)+X1*COS(THETA + THETAX)
91 VX(I1)=VX(I1)+V1*SIN(THETA + THETAV)
C Добавление граничных условий, расчет плотности заряда и т. д.
CALL SETRHO (IL1,IL2,-1,Q,N*Q/L)
RETURN
END

```

3.7. SETRHO, НАЧАЛЬНОЕ ЗАДАНИЕ ПЛОТНОСТИ ЗАРЯДА

Эта подпрограмма вызывается 1 раз за все время работы программы ES1 для каждого сорта частиц (электронов, ионов и т. д.) в момент $t=0$. SETRHO преобразует величины к нормированному виду, задает условия периодичности и рассчитывает значения зарядов в узлах сетки в соответствии с выбранным способом взвешивания.

```

SUBROUTINE SETRHO (IL,IU,Q,RHOS)
C Преобразует координаты в компьютерные переменные и накапливает
C плотность пространственного заряда
USE MPARAM
USE MFIELD
USE MPTCL
C
QDX=Q/DX
C Если это первая группа частиц, то очищается массив RHO
IF (IL.NE.1) GO TO 2
DO 1 J=1,NG
1 RHO(J)=RHOO
RHO(NG+1)=0.
DX1=1.0/DX
XN=NG
C Добавляется постоянная нейтрализующая плотность заряда (это не
C требуется, если все частицы подвижны, но не нарушает работу
C программы)
2 RHOO=RHOO-RHOS
DO 3 J=1,NG
3 RHO(J)=RHO(J)-RHOS

```

```

C          GO TO (100,200,300), IW
C          NGP
100 CONTINUE
      DO 101 I=IL,IU
      X(I)=X(I) DXI
      IF (X(I).LT.0.) X(I)=X(I)+XN
      IF (X(I).GE.XN) X(I)=X(I)-XN
      J=X(I)+0.5
101 RHO(J+1)=RHO(J+1)+QDX
      RETURN

C          Линейное взвешивание
200 CONTINUE
      DO 201 I=IL,IU
      X(I)=X(I) DXI
      IF( X(I).LT.0.) X(I)=X(I)+XN
      IF (X(I).GE.XN) X(I)=X(I)-XM
      J=X(I)
      DRHO=QDX (XI)-J
      RHO(J+1)=RHO(J+1)-DRHO+QDX
201 RHO(J+2)=RHO(J+2)+DRHO
      RETURN
      END

```

3.8. ПОДПРОГРАММА FIELDS; ОПРЕДЕЛЕНИЕ НАПРЯЖЕННОСТИ И ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Основные уравнения и метод расчета поля изложены в § 2.5. Подпрограмма FIELDS выполняет необходимые действия.

Во-первых, необходимо рассчитать $K^2(k)$, Фурье-образ трехточечного конечно-разностного уравнения (2.17), имеющий вид (2.25). Так как в расчетах используется $1/K^2$, то это выражение рассчитывается для каждой моды, т. е. пространственной гармоники, и обозначается в программе как $KSQI(k)$. (По причинам, изложенным в приложении Е, мы не используем k^2 вместо K^2 или k вместо x .) Затем $KSQI(k)$ умножается на выражение $SM(k)$, называемое сглаживающим множителем. Этот множитель используется для модификации спектра волновых чисел k любым желательным способом, когда вычисляются значения $\phi(k)$ исходя из величин $\rho(k)$, но в основном он используется для ослабления нежелательных коротковолновых процессов или же для устранения ненужных длинноволновых искажений. Подробности применения $SM(k)$ обсуждаются в приложении Б. Такое сглаживание также приводит к уширению формы частицы $S(x)$ (см. гл. 4).

Во-вторых, выполняется Фурье-преобразование плотности заряда $\rho(x)$ с помощью подпрограмм CPFT (комплексное

преобразование Фурье) и RPFT. Их текст приведен в приложении А.

Затем $\rho(k)$ умножается на KSQI(k) для получения $\phi(k)$. На этом этапе, зная $\rho(k)$ и $\phi(k)$, можно вычислить электростатическую энергию $ESE(k)$ в виде

$$ESE(k) \sim 1/2 \rho(k) \phi^*(k)$$

и затем запомнить $ESE(k)$ для получения впоследствии $ESE(t)$ путем обратного преобразования Фурье

$$ESE(t) \sim 1/2 \sum_k \rho(k,t) \phi^*(k,t).$$

Следующим шагом является обратное преобразование Фурье $\phi(k)$ и $\rho(k)$ с помощью вызова подпрограмм RPFTI2 и CPFT для получения потенциала $\phi(x)$ и сглаженной плотности заряда $\rho(x)$. Напряженность поля $E(x) = -\nabla\phi$ вычисляется дифференцированием потенциала ϕ , а выбор формулы для этой операции определяется используемым видом взвешивания. Например, для взвешиваний нулевого и первого порядков используется соотношение (2.16), которое для получения $E(x)$ дифференцирует $\phi(x)$ на интервале $2\Delta x$. В этом месте $E(x)$ не приводится к размерному виду.

Задачи

3.3. Пользуясь идентификаторами программы, начиная с $RHO(J)$ и кончая $E(J)$, покажите последовательность действий в FIELDS и укажите идентификаторы, которые используют данный метод на каждом шаге. Используйте для составления схемы произвольные символьные обозначения.

3.4. Что делает оператор $RHO(1)=RHO(1)+RHO(NG+1)$? Используйте схему разностной сетки для пояснения ответа.

3.5. Нарисуйте графики RHO и $RHOS$. Что такое $RHOS$ и почему рисуются оба графика?

3.6. Что делают следующие операторы:

DO 41 J=1,NG,

41 $RHO(J)=RHOO.$

Почему $RHO(NG)$ отсутствует в этом цикле и обнуляется в следующем операторе?

3.7. Какой смысл имеет алгебраическая формула, используемая для получения электростатической энергии ESE ?

3.8. Какой лабораторной гармоникой является значение $k=1$ в цикле 20?

3.9. Предположим, что вы хотите вычислить только одну волну, одно значение k . Как вы сделаете это? Будут ли вычисления только для одного значения k влиять на физические процессы при малой амплитуде волны; при большой амплитуде?

Текст подпрограммы FIELDS:

SUBROUTINE FIELDS(ITH)

C Определяет PHI и E, вычисляет энергию поля

USE MPARAM
 USE MFIELD
 USE MTIME
 USE MCNTRL

REAL PHOK (1),PHIK (1),SCRACH (1)
 EQUIVALENCE (RHO,RHOK),(PHI,PHIK,(E,SCRACH))
 PARAMETER (NG2M=NGMAX/2)
 REAL KDX2,KSQI (NG2M),LI,SM (NG2M)

C Выполняется на первом шаге по времени

DATA NG2/0/
 IF (NG2.NE.0) GO TO 2
 NG2-NG/2
 NG1=NG+1

C Образование отношения PHIK/RHOK

C A2>0 дает отбрасывание коротких длин волн (сглаживание)
 C A1>0 дает междиапазонное усиление для компенсации слабого затухания
 C при вычислении сил

DATA PI/3.1415 92653 58979/
 DO 1 K=1,NG2
 KDX2=(PI/NG)*K
 SM (K)=EXP(A1*SIN(KDX2)**2-A2*TAN(KDX2)**4)
 1 KSQI (K)= + EPSI/((2.0*SIN(KDX2)/DX)**2)*SM (K)**2
 2 CONTINUE

C Преобразование плотности заряда

RHO (1)=RHO (1)+RHO (NG+1)
 RHO (NG+1)=RHO (1)
 CALL PLOTF(PHO,"CHARGE DENSITY",IRHO)
 HDX=0.5*DX
 DO 10 J=1,NG
 RHOK (J)=RHO (J)*HDX
 SCRACH (J)=0.

10 CALL CPFT(RHOK,SCRACH,NG,1,1)
 CALL RPFT2(PHOK,SCRACH,NG,1)
 RHOK (1)=0.

C Вычисление PHIK и энергии поля

ESES=0.
 PHIK (1)=0.
 DO 20 K=2,NG2
 KK=NG+2-K
 PHIK (K)=KSQI (K-1)*RHOK (K)
 PHIK (KK)=KSQI (K-1)*RHOK (KK)
 ESES=ESES+RHOK (K)*PHIK (K)+RHOK (KK)*PHIK (KK)
 RHOK (K)=SM (K-1)*RHOK (K)
 20 RHOK (KK)=SM (K-1)*RHOK (KK)
 PHIK (NG2+1)=KSQI (NG2)*RHOK (NG2+1)
 ESE (ITH+1)=(2.0*ESES+RHOK (NG2+1)*PHIK (NG2+1)/(2.0*L))
 RHOK (NG2+1)=SM (NG2)*RHOK (NG2+1)

```

C Запоминание энергии выделенных мод
DO 21 KM=1,MMAX
K=MPLOT(KM)+1
IF(K.EQ.1) GO TO 22
KK=NG+2-K
ESEM (ITH+1,KM)=(RHOK (K)*PHIK (K)+RHOK (KK)*PHIK (KK))/L
21 IF (K.EQ.KK) ESEM (ITH+1,KM)=0.25* ESEM (ITH+1,KM)
22 CONTINUE
C
C Обратное преобразование
LI=1.0/L
DO 30 K=1,NG
RHO(K)=RHOK (K)*LI
30 PHI(K)=PHIK (K)*LI
CALL RPFTI2(PHI,RHO,NG,1)
CALL CPFT (PHI,RHO,NG,1,-1)
PHI(NG+1)=PHI(1)
RHO(NG+1)=RHO(1)
CALL PLOTF(RHO,"SMOOTHED DENSITY",IRHOS)
CALL PLOTF(PHI,"E POTENTIAL",IPHI)
C
C Однородное поле
EOT=EO*COS(WO*TIME)
C Выбор вида дифференцирования для электрического поля
C
GO TO (100,200,300), IW
C
C Центрированная разность по 2 ячейкам
100 CONTINUE
HDXI=0.5/DX
DO 101 J=2,NG
101 E(J)=(PHI(J-1)-PHI(J+1))*HDXI+EOT
E(1)=(PHI(NG)-PHI(2))*HDXI+EOT
E(NG+1)=E(1)
GO TO 40
C
C Центрированная разность по 1 ячейке
200 CONTINUE
DXI=1.0/DX
DO 201 J=1,NG
201 E(J)=(PHI(J)-PHI(J+1))*DXI+EOT
E(NG+1)=E(1)
40 CONTINUE
CALL PLOTF(E,"ELECTRIC FIELD",IE)
C Очистка старой плотности заряда
DO 41 J=1,NG
41 RHO(J)=RHOO
RHO(NG1)=0.
C Электрическое поле еще не приведено к размерному виду
AEL=1.
RETURN
END

```

3.9. ПОДПРОГРАММЫ БЫСТРОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФУРЬЕ

Вычисление коэффициентов ряда Фурье для функции, заданной в дискретном числе равноотстоящих точек, делается так же, как и для непрерывной функции. Так как в середине 60-х годов был изобретен способ очень быстрого (по сравнению с ранее известными) вычисления этих коэффициентов, то используемые в программе методы их расчета получили название быстрого преобразования Фурье (БПФ).

В программе используется БПФ, называемое CPFT, для комплексного преобразования Фурье, которое преобразует $a(x) + ib(x)$ в $A(k) + iB(k)$. Так как в ES1 подвергаются преобразованию реальные величины (ρ, φ), то необходимо образовывать пару действительных последовательностей $a(x)$, $b(x)$ и преобразовывать их затем совместно, получая выигрыш по скорости в 2 раза, так как образование пары является быстрой операцией. Подпрограмма RPFT2 выполняет образование пары менее чем за 0,1 часть времени, требуемого для CPFT. БПФ вызывает подпрограммы RPFTI2, CPFT; обратное БПФ обращается к RPFTI2, CPFT.

Текст этих подпрограмм приведен в приложении А.

3.10. ПОДПРОГРАММА ДЛЯ НАЧАЛЬНОГО ПОЛУШАГА ПО СКОРОСТИ SETV

При постановке физической задачи начальные условия для координат и скоростей задаются обычно в момент $t=0$. Но для программы решения уравнений движения частиц центрированным во времени методом с перешагиванием необходимо иметь вектор x , опережающий v на $\Delta t/2$. Следовательно, для получения такого разделения при $t=0$ нужно преобразовать вектор v таким образом: вычисляются поля в момент $t=0$, делается полу шаг вращения назад в магнитном поле и полу шаг назад с использованием qE . Подпрограмма вычисления скоростей ACCEL, вызываемая для выполнения этой процедуры, использует для вычисления замену заряда q на $-q/2$ вместо замены шага интегрирования Δt на $-\Delta t/2$. Объясните такую замену самостоятельно.

Задачи

3.10. Рассмотрите холодную плазму и получите условие на начальные величины X и VX , которые возбуждают чисто бегущую волну. Теперь, если бы не использовалась подпрограмма SETV, сколько противоположно направленных (нежелательных) волн возбудилось бы?

3.11. Косинусами и синусами какого угла являются C и S ?
3.12. Почему используется аргумент $-0,5*Q$ при вызове ACCEL?

3.13. Имеются ли в программе значения электрического поля E , когда происходит вызов SETV?

3.14. Изобразите схему процедуры CHANGV, обратной к SETV, которая преобразует $x(t)$ и $v(t-\Delta t/2)$ к $x(t)$ и $v(t)$.

Текст подпрограммы SETV:

SUBROUTINE SETV(IL,IU,Q,M,T,P)

C Преобразует скорости частиц при $T=0$ к нормированным значениям при
C $T = -DT/2$
C USE MPARAM
C USE MFIELD
C USE MPTCL
C DTDX=DT/DX
C Поворачивает V на угол $+0.5*WC*DT$ и нормирует VY. Если $T=0$, то
C магнитного поля нет. Вращение не выполняется и не делаются обра-
C щения к VY
C IF (T.EQ.0.) GO TO 2
C C=1.0/SQRT(1.0+T*T)
C S=C*T
1 DO 1 I=IL,IU
VXX=VX(I)
VX(I)=C*VXX + S*VY(I)
VY(I)=VY(I)*DTDX
VY(I)=-S*VXX + C*VY(I)
1 VY(I)=VY(I)*DTDX
2 CONTINUE
C Нормировка
DO 3 I=IL,IU
3 VX(I)=VX(I)*DTDX
C Электрический импульс возвращается на 1/2 назад
DATA DUM/0./
CALL ACCEL(IL,IU,-0.5*Q,M,O.,P,DUM)
RETURN
END

3.11. ПОДПРОГРАММА ВЫЧИСЛЕНИЯ СКОРОСТЕЙ ACCEL

Работа программы начинается с нормировки значений поля Е в узлах сетки (см. § 3.5). Затем новое значение скорости частицы получается простым сложением. На следующем этапе вычисляются моменты и кинетические энергии частиц. Последние определяются, когда известна потенциальная энергия, по центрированной к моменту t формуле вида

$$KE = (m/2) v_{\text{old}} v_{\text{new}},$$

где v_{old} — старое, а v_{new} — новое значение скорости частицы. Такое вычисление проще, чем использование соотношений $(v_{\text{old}}^2 + v_{\text{new}}^2)/4$ или $[(v_{\text{old}} + v_{\text{new}})/2]^2/2$, имеет тот же порядок точности $(\Delta t)^2$ и еще ряд преимуществ (см. задачу 4.21).

При наличии магнитного поля $\omega_c \neq 0$ и процедура вычисления v изменяется [см. § 2.4, формулы (2.8) — (2.10)] для случая однородного магнитного поля.

В подпрограмме INIT вычисляется величина

$$T = \operatorname{tg}(-\omega_c \Delta t / 2).$$

В ACCEL проверяется выполнение условия $T=0$, и если $T \neq 0$, происходит переход к шагам полувращения и полуускорения, а также в 2 раза уменьшается нормированное значение E для использования в полуускорении. В присутствии магнитного поля используется только значение $IW=2$. Затем по значению T вычисляются величины $\sin \omega_c \Delta t$ и $\cos \omega_c \Delta t$ и выполняется полуускорение по v_x . В результате находят значение $v_x^2 + v_y^2$ в центре шага по времени, в момент t , и вычисляют кинетическую энергию частиц. После этого выполняется вращение v на угол $(-\omega_c \Delta t)$ и добавляется полуускорение к v_x . Заметим, что кинетические энергии и импульсы вычисляются по v_x^2 и v_y^2 , если только нет магнитного поля, $T=0$. В противном случае отличны от нуля и v_x , и v_y , а поэтому кинетическая энергия вычисляется как $v_x^2 + v_y^2$, импульсы же при этом не вычисляются.

Когда значение логической переменной VEC равно $TRUE$ и $IW=2$, программа переходит к специальной ее части, обозначенной метками 2000 и 2500, которая используется компилятором CRAY CFT для генерации набора машинных команд для компьютера CRAY-I. Использование таких команд в несколько раз более эффективно, чем прямое использование языка программирования ФОРТРАН. Форма этого кодирования отражает векторную архитектуру CRAY-I и способность компилятора CFT использовать преимущества векторных команд. Эти операторы должны быть изменены, если используется другой векторный компьютер или другая версия транслятора CFT.

Задачи

3.15. Что делают следующие операторы с координатами частиц:

$$J = x(I) + 0,5,$$

$$J = x(I).$$

3.16. Покажите, что получение KE из $VN*VO$ имеет тот же порядок точности что и использование квадрата средних или средних квадратов старых и новых скоростей. Почему использование $VN*VO$ предпочтительнее? Может ли здесь возникать проблема знака кинетической энергии? В какое время получают значение KE ?

3.17. Линейное взвешивание полей для частиц определяется выражением (2.28), которое в программе имеет вид

$$VN = VO + A(J+1) + (X(I) - J) * (A(J+2) - A(J+1))$$

или

$$AA = A(J+1) + (X(I) - J) * (A(J+2) - A(J+1)).$$

Объясните различия между алгебраическими утверждениями и утверждениями, содержащимися в программе.

3.18. Что делает оператор

$$VIS = VIS + VN?$$

3.19. Каков смысл оператора $V2S = V2S + VN * VO$?

3.20. Какая форма взвешивания электрического поля используется в случае $IW=3$, сохраняется ли при этом энергия?

3.21. Каков смысл выражения $IF(T.NE.0) AE = 0.5 * AE$?

3.22. Почему в вычислении импульса P присутствует $DXDT$?

3.23. В развитие задачи 3.16 сравните число умножения и сложений на одну частицу для расчета KE заданными тремя способами. Не учитывайте шаги, общие для всех способов.

Текст подпрограммы ACCEL:

```
SUBROUTINE ACCEL(ILP,IUP,Q,M,T,P,KE)
C   Продвигает V на один шаг по времени, вычисляет импульс и кинетическую энергию
      REAL K,E,M
      USE MPARAM
      USE MFIELD
      USE MPTCL
      REAL A(1)
      EQUIVALENCE (A,E)
C   Эти массивы используются в векторизованных ACCEL и MOVE
      COMMON /SCRATCH/ JI(64),AL(64),AR(64),VNI(64),
     VLSI(64),V2SI(64),AAI(64)
      IL=ILP
      IU=IUP
C   Перенормировка ускорения
      DXDT=DX/DT
      AE=(Q/M)*(DT/DXDT)
      IF (T.NE.0.) AE=0.5*AE
      IF (AE.EQ.AEL) GO TO 2
      NGL=NG+1
      TEM=AE/AEL
      DO 1 J=1, NG1
      1  A(J)=A(J)*TEM
      AEL=AE
      2  CONTINUE
C   Выбор вида взвешивания для ускорения
      GO TO (100,200,300), IW
C   NGP, сеточные узлы в точках J*DX
      100 CONTINUE
      V1S=0.
      V2S=0.
      DO 101 I=IL,IU
      J=X(I)+0.5
      VO=VX(I)
```

```

VN=VO+A(J+1)
V1S=V1S+VN
V2S=V2S+VN*VO
101 VX(I)=VN
P=P+M*V1S*DXDT
KE=KE+0.5*M*V2S*DXDT*DXDT
RETURN

C
C Линейное взвешивание, сохранение импульса
200 CONTINUE
IF(T.NE.0.) GO TO 250
V1S=0.
V2S=0.
IF (VEC) GO TO 2000
2009 CONTINUE
DO 201 I=IL,IU
J=X(J)
VO=VX(I)
VN=VO+A(J+1)+(X(I)-J)*(A(J+2)-A(J+1))
V1S=V1S+VN
V2S=V2S+VO*VN
201 VX(I)=VN
P=P+M*V1S*DXDT
KE=KE+0.5*M*V2S*DXDT*DXDT
RETURN

C Линейное взвешивание, сохранение энергии
C
300 CONTINUE
V1S=0.
V2S=0.
DO 301 I=IL,IU
J=X(I)
VO=VX(I)
VN=VO+A(J+1)
V1S=V1S+VN
V2S=V2S+VN*VO
301 VX(I)=VN
P=P+M*V1S*DXDT
KE=KE+0.5*M*V2S*DXDT*DXDT
RETURN

C
C Линейное взвешивание, сохранение импульса, однородная замагниченная
C плазма
250 CONTINUE
S=2.0*T/(1.0+T*T)
V2S=0.
IF (VEC) GO TO 2500
2509 CONTINUE
DO 251 I=IL,IU
J=X(I)
AA=A(J+1)+(X(I)-J)*(A(J+2)-A(J+1))
VYY=VY(I)

```

```

VXX=VX(I)-T*VYY +AO
VYY=VYY+S*VXX
VXX=VXX-T*VYY
V2S=V2S+VXX*VXX+VYY*VYY
VX(I)=VXX+AO
251 VY(I)=VYY
KE=K=+0.5*M*V2S*DXDT*DXDT
RETURN
C Векторизованное решение уравнений движения
C Это все функционально эквивалентно прямому использованию изло-
C женной выше программы на ФОРТРАНе, но записанной таким обра-
C зом, что компилятор CFT (для CRAY-I) может использовать век-
C ториальные команды для большинства операций
C
C Линейное взвешивание, сохранение импульса, векторизованная версия
C
2000 CONTINUE
DO 2004 I=1,64
V1SI(I)=0.
2004 V2SI(I)=0.
DO 2006 J=IL,IU-63,64
DO 2001 I=0,63
2001 JI(I+1)=X(I+J)
DO 2002 I=1,64,2
AL(I+1)=A(JI(I+1)+1)
AR(I+1)=A(JI(I+1)+2)
AL(I)=A(JI(I)+1)
2002 AR(I)=A(JI(I)+2)
DO 2005 I=0,63
VNI(I+1)=VX(I+J)+AL(I+1)+(X(I+J)-JI(I+1))*(AR(I+J)-
-- AL(I+1))
V1SI(I+1)=V1SI(I+1)+VNI(I+1)
V2SI(I+1)=V2SI(I+1)+VX(I+1)*VNI(I+1)
2005 VX(I+J)=VNI(I+1)
2006 IL=IL+64
DO 2007 I=1,64
V1S=V1S+V1SI(I)
2007 V2S=V2S+V2SI(I)
C Возврат в исходное положение, так что и векториальная программа выпол-
C няет действия с остальными частицами
C Число частиц кратно 64, тогда IL>IU и CFT вообще не выполняет
C цикл 201
GO TO 2009
C Линейное, сохранение импульса, векторизованное
C Смотри комментарии к незамагниченному кодированию, приведенные
C выше
2500 CONTINUE
DO 2504 I=1, 64
2504 V2SI(I)=0.
DO 2506 J=IL,IU-63,64
DO 2501 I=0,63
2501 JI=JI(I+1)=X(I+J)

```

```

DO 2502 I=1,64,2
AL(I+1)=A(JI(I+1)+1)
AR(I+1)=A(JI(I+1)+2)
AL(I)=A(JI(I)+1)
2502 AR(I)=A(JI(I)+2)
DO 2505 I30,63 I=0,63
AAI(I+1)=AL(I+1)+(X(I+J)-JI(I+1))*(AR(I+1)-AL(I+1))
VX(I+J)=VX(I+J)-T*VY(I+J)+AAI(I+1)
VY(I+J)=VY(I+J)+S*VX(I+J)
VX(I+J)=VX(I+J)-T*VY(I+J)
V2SI(I+1)=V2SI(I+1)+VX(I+J)*VX(I+J)+VY(I+J)*VY(I+J)
2505 VX(I+J)=VX(I+J)+AAI(I+1)
2506 IL=IL+64
DO 2507 I=1,64
2507 V2S=V2S+V2SI(I)
GO TO 2509

```

C

END

3.12. ПОДПРОГРАММА ВЫЧИСЛЕНИЯ КООРДИНАТ MOVE

Эта подпрограмма вычисляет по формуле (3.4) новые значения координат x_{new} всех частиц каждого сорта. MOVE вызывается один раз для каждого сорта частиц.

Если при вычислении x_{new} получится, что $x_{\text{new}} < 0$ или $x_{\text{new}} > L$, то MOVE передвигает частицу в интервал $0 \leq x \leq L$, добавляя или вычитая величину L из x_{new} .

Для новых значений координат частиц MOVE вычисляет заряд в узлах сетки в соответствии с выбранным способом взвешивания. Как и в ACCEL, если $VEC = \text{TRUE}$ и $IW = 2$, то мы переходим к специальному кодированию, которое использует векторные возможности компилятора CFT для компьютера CRAY-I (см. обсуждение в § 3.11).

Задачи

3.24. Используя схему сетки и расположение типичного заряда, покажите, как линейное взвешивание получается графически (по крайней мере тремя способами).

3.25. Что служит единицей измерения RHO? Сформулируйте ответ в произвольной форме.

3.26. Объясните смысл следующего оператора:

Текст подпрограммы MOVE:

SUBROUTINE MOVE(ILP,IUP,Q)

C Перемещает частицы на один шаг по времени и накапливает плотность заряда

USE MPARAM

USE MFIELD

USE MPTCL

C Эти массивы используются в векторизованных ACCEL и MOVE

COMMON/SCRATCH/ JI(64),RHOI(64),RHOR(64)

IL=ILP

IU=IUP

QDX=Q/DX

XN=NG

GO TO (100,200,300) ,IW

C

C NGR, ближайший узел сетки

100 CONTINUE

DO 101 I=IL,IU

X(I)=X(I)+VX(I)

IF (X(I).LT.0.) X(I)=X(I)+XN

IF (X(I).GE.XN) X(I)=X(I)-XN

J=X(I)+0.5

101 RHO(J+1)=RHO(J+1)+QDX

RETURN

C

C Линейное взвешивание

200 CONTINUE

IF (VEC) GO TO 2000

2009 CONTINUE

DO 201 I=IL,IU

X(I)=X(I)+VX(I)

IF (X(I).LT.0.) X(I)=X(I)+XN

IF (X(I).GE.XN) X(I)=X(I)-XN

J=X(I)

DRHO=QDX*(X(I)-J)

RHO(J+1)=RHO(J+1)-DRHO+QDX

201 RHO(J+2)=RHO(J+2)+DRHO

RETURN

C Векторизованное решение уравнений движения

C Это функционально эквивалентно программе на ФОРТРАНе, написанной выше, но записано таким образом, что компилятор CFT может использовать векторные команды для некоторых операций

C

C Линейное взвешивание, векторизованная форма

C См. комментарии в ACCEL

2000 CONTINUE

DO 2004 J=IL,IU-63,64

DO 2001 I=0,63

X(I+J)=X(I+J)+VX(I+J)

X(I+J)=CVMGM(X(I+J)+XN,X(I+J),X(I+J))

X(I+J)=CVMGP(X(I+J)-XN,X(I+J),X(I+J)-XN)

JI(I+1)=X(I+J)

RHOR(I+1)=QDX*(X(I+J)-JI(I+1))

RHOL(I+1)=QDX-RHOR(I+1)

2001 CONTINUE

DO 2002 I=1,64,2

RHO(JI(I)+1)=RHO(JI(I)+1)+RHOL(I)

RHO(JI(I)+2)=RHO(JI(I)+2)+RHOR(I)

RHO(JI(I+1)+1)=RHO(JI(I+1)+1)+RHOL(I+1)

2002 RHO(JI(I+1)+2)=RHO(JI(I+1)+2)+RHOR(I+1)

```
2004 IL=IL+64
GO TO 2009
END
```

3.13. ИЗМЕНЕНИЕ ВРЕМЕНИ НА ОДИН ШАГ

В конце шага по времени скорость уже изменена от значения $v(t-\Delta t/2)$ до $v(t+\Delta t/2)$, координата изменена на $x(t+\Delta t)$, время — на $t+\Delta t$ и поле $E(t+\Delta t)$ уже вычислено. Проверяется условие — если уже были сделаны NT шагов, то программа переходит к построению итоговых графиков, иначе программные расчеты продолжаются.

3.14. ПОДПРОГРАММА ПОСТРОЕНИЯ ГРАФИКОВ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ВРЕМЕНИ, HISTRY

Эта подпрограмма носит вспомогательный характер и вызывается на каждом шаге по времени для запоминания величин, которые должны быть построены как функции времени в конце работы программы или в промежуточные моменты времени, если $NTH < NT$. HISTRY выполняет также некоторые вспомогательные операции, как, например, обнуление массивов при $t=0$.

Текст подпрограммы HISTRY:

```
SUBROUTINE HISTRY
C Строит энергию и другие величины в зависимости от времени
USE MPARAM
USE MTIME
REAL TIM(NTH1),PXSL(NSPM)
IF (IT.EQ.0) GO TO 10
TL=ITHL DT
MTH=IT - ITHL + 1
DO 1 I=1,MTH
1 TIM(I)=(I-1)*DT + TL
C Построение энергии мод
DO 50 KM=1,MMAX
K=MPLOT(KM)
IF (K.EQ.0) GO TO 52
CALL PLTHST(ESEM(1,KM),TIM,MTH,TL,TIME,1)
50 WRITE(NTP,51) K,TL,TIME
51 FORMAT(«MODE»,13,«ENERGY,TIME=»,F10.4,«TO»,F10.4)
52 CONTINUE
C Построение энергии поля
CALL PLTHST(ESE,TIM,MTH,TL,TIME,1)
WRITE(NTP,100) TL,TIME
100 FORMAT(«FIELD ENERGY,TIME=»,F10.4,«TO»,F10.4)
C Построение кинетических энергий
DO 200, IS=1,NSP
CALL PLTHST(KES(1,IS),TIM,MTH,TL,TIME,0)
```

```

200 WRITE(NTP,201) IS,TL,TIME
201 FORMAT(«KINETIC ENERGY»,12,»TIME = »,F10.4,«TO»,F10.4)
C Построение направленных (дрейфовых) энергий
DO 300 IS=1,NSP
PXSL (IS)=PXS(MTH,IS)
DO 299 I=1,MTH
299 PXS(I,IS)=PXS(I,IS)*PXS(I+1,IS)/(2.0*NMS(IS))
CALL PLTHST(PXS(1,IS),TIM,MTH,TL,TIME,0)
300 WRITE(NTP,301) IS,TL,TIME
301 FORMAT(«DRIFT ENERGY»,12,»TIME = »,F10.4,«TO»,F10.4)
C
C Построение тепловых энергий
DO 400 IS=1,NSP
DO 399 I=1,MTH
399 PXS(I,IS)=KES(I,IS)-PXS(I,IS)
CALL PLTHST(PXS(1,IS),TIM,MTH,TL,TIME,1)
400 WRITE(NTP,401) IS,TL,TIME
401 FORMAT(«THERMAL ENERGY»,12,»TIME = »,F10.4,«TO»,F10.4)
C
C Построение полной энергии
DO 499 IS=1,NSP
DO 499 I=1,MTH
499 ESE(I)=ESE(I)+KES(I,IS)
CALL PLTHST(ESE,TIM,MTH,TL,TIME,0)
WRITE(NTP,500) TL,TIME
500 FORMAT(«TOTAL ENERGY»,TIME = »,F10.4,«TO»,F10.4)
C
ITHL=IT
C Пересылка последних значений в первые для следующего интервала
времени
ESE(1)=ESE(MTH)
DO 2 IS=1,NSP
KES(1,IS)=KES(MTH,IS)
ESE(1)=ESE(1)-KES(1,IS)
PXS(1,IS)=PXSL (IS)
PXS(2,IS)=PXS(MTH+1,IS)
DO 2 I=2,MTH
KES(I,IS)=0.
2 PXS(I+1,IS)=0.
DO 3 I=2,MTH
3 ESE(I)=0.
DO 4 KM=1,MMAX
ESEM(1,KM)=ESEM(MTH,KM)
DO 4 I=2,MTH
4 ESEM(I,KM)=0.
RETURN
C
C Засылка нулей в массивы при T=0
10 MTH=NTH+1
DO 11 IS=1,NSP
PXS(1,IS)=0.

```

```

DO 11 I=1,MTH
KES(I,IS)=0.
11 PXS(I+1,IS)=0.
DO 12 I=1,MTH
12 ESE(I)=0.
DO 13 KM=1,MMAX
DO 13 I=1,MTH
13 ESEM(I,KM)=0.
RETURN
END

```

3.15. ГРАФОПОСТРОИТЕЛЬНЫЕ И ПРОЧИЕ ПОДПРОГРАММЫ

Завершают ES1 тексты следующих подпрограмм: PLOTF, PLOTXV, PLTVXY, PLTFVX, PLTHST. Они вызывают при своей работе программы рисования графиков, разработанные в вычислительном центре Ливерморской национальной лаборатории. Их смысл легко можно понять из текста подпрограмм, чтобы подставить вместо них свои собственные процедуры. Подпрограммы FIST и LAST были уже обсуждены выше, а MYFRAME служит просто для создания новой системы отсчета для графиков. Эти три подпрограммы не несут необходимой читателю информации, и их текст здесь не проводится.

```

SUBROUTINE PLOTE(F,LABEL,INTRVI)
C Строит распределение поля в определенные моменты времени
USE MPARAM
USE MCNTRL
USE MFIELD
REAL XJ(NGLM),F(1),LABEL(2)
DATA XJ(2)/0./
IF (INTRVL.LE.0) RETURN
IF((IT/INTRVL)*INTRVL.NE.IT) RETURN
C
IF (XJ(2).EQ.DX) GO TO 2
NGL=NG+1
DO 1 J=1,NGL
1 XJ(J)=(J-1)*DX
2 CONTINUE
C
CALL MYFRAME
CALL CARTMM(NG,RMIN,RMAX,F,1)
CALL MARG(0.,L,RMIN,RMAX)
CALL TRACE(XJ,F,NG+1)
CALL SETCH(10,1.,1,0,1,0,1)
WRITE(NTP,3) LABEL,TIME
3 FORMAT(2A8,«AT TIME=»,F10.4)
RETURN

```

```

END
SUBROUTINE PLOTEXV(IL,IU,VI,VU)
C Строит фазовое пространство в заданные моменты времени
USE MPTCL
USE MPARAM
USE MCNTRL
IF(IXVX.LE.0) RETURN
IF ((IT/IXVX)*IXVX.NE.IT) RETURN
DXDT=DX/DT
C
C Устанавливается диапазон скоростей в необходимых случаях
IF (VL.LT.VU) GO TO 2
V1=VX(IL)
VU=VL
DO 1 I=IL,IU
VL=A MIN(VL,VX(I))
VU=A MAX(VU,VX(I))
VL=VL*DXDT
VU=VU*DXDT
CONTINUE
2
C
CALL MYFRAME
CALL MARS(0.,1,VL,VU)
CALL SETPCH(1,0,0,0,1)
C Если менее 2000 частиц, на графике ставится «+» для ясности
IF (IU-IL.GT.2000) GO TO 31
DO 3 I=IL,IU
3 CALL POINTC(«+», (X(I)-0.5*VX(I))*DX, VX(I)*DXDT,1)
GO TO 33
C Если более 13 000 частиц, строится каждая 3-я или 5-я частица
31 INT=2*((IU-1 IL)/13000)+1
DO 32 I=IL,IU,INT
32 CALL POINT((X(I)-0.5*VX(I))*DX, VX(I)*DXDT,1)
CONTINUE
C
C Рисуется метка
CALL SETCH(10.,1.,1,0,1,0)
TIM=TIME-0.5*DT
WRITE(NTP,4) TIM
4 FORMAT(«VX VS. X, TIME=»,F10.4)
RETURN
END
SUBROUTINE PLTVXY(IL,IU,VMU)
C Строится фазовая плоскость VX—VY в заданные моменты времени
USE MPTCL
USE MPARAM
USE MCNTRL
IF (IVXVY.LE.0) RETURN
IF ((IT/IVXVY)*IVXVY.NE.IT) RETURN
DXDT=DX/DT

```

```

C Устанавливается диапазон скоростей
IF (VMU.NE.0.) GO TO 2
VL=VX(IL)
VU=VL
DO 1 I=IL,IU
VL=AMIN1(VL,VX(I),VY(I))
1 VU=AMAX1(VU,VX(I),VY(I))
VMU=AMAX1(ABS(VL),ABS(VU))*DXDT
2 CONTINUE
C
CALL MYFRAME
CALL MAPS(-VMU,VMU,-VMU,VMU)
CALL SETPCH(1,0,0,0,1)
C Если менее 2000 частиц, на графике ставится «+» для ясности
IF (IU-IL.GT.2000) GO TO 31
DO 3 I=IL,IU
3 CALL POINTC(«+»,VX(I)*DXDT,VY(I)*DXDT,1)
GO TO 33
C Если более 13 000 частиц, строится каждая 3-я или 5-я частица
31 INT=2*((IU-IL)/13000)+1
DO 32 I=IL,IU,INT
32 CALL POINT(VX(I)*DXDT,VY(I)*DXDT,1)
33 CONTINUE
C
C Рисуется метка
CALL SETCH(10.,1.,1,0,1,0)
TIM=TIME-0.5*DT
WRITE(NTP,4) TIM
4 FORMAT(«VY VS. VX,TIME=»,F10.4)
RETURN
END
SUBROUTINE PLTFVX(IT, IL,IU,VL,VU,Q,NBINS)
C Строится функция распределения F(VX) в заданные моменты времени
Если IFVX<0, рисуется полулогарифмический график
USE MPTCL
USE MPARAM
USE MCNTRL
PARAMETER (MAXBINS=50)
COMMON /SCRATCH/ VBIN(MAXBINS),FBIN(MAXBINS)
C NBINS не должно превышать размерность этих массивов
IF (IFVX.EQ.0) RETURN
IF ((IT/IFVX)*IFVX.NE.IT) RETURN
NBINS=AMINO(NBINS,MAXBINS)
DXDT-DXODT
C
C Устанавливается диапазон скоростей, если необходимо
IF (VL.LT.VU) GO TO 2
VL=VX(IL)
VU=VL
DO 1 I=IL,IU
VL=AMIN1(VL,VX(I))

```

```

1   VU=AMAX1(VU,VX(I))
VL=VL*DXDT
VU=VU*DXDT
TEM=(VU-VL)/(NBINS-2)
VL=VL-TEM
VU=VU+TEM
2   CONTINUE
IF (VL.EQ.VU.OR.NBINS.LE.1) RETURN
DVI=(NBINS-1)/(VU-VL)
DQ=ABS(Q)*DVI
C
C   Засылка VX в накопитель с линейным взвешиванием
DO 3 I=1,NBINS
FBIN(I)=0.
3   VBIN(I)=(I-1)/DVI+VL
DO 4 I=IL,IU
TEM=(VX(I)*DXDT-VL)*DVI
J=TEM
IF (TEM.LT.0.0.R.J+2.GT.NBINS) GO TO 4
TEM=(TEM-J)*DQ
FBIN(J+1)=FBIN(J+1)-TEM+DQ
FBIN(J+2)=FBIN(J+2)+TEM
4   CONTINUE
C
CALL MYFRAME
CALL CARTMM(NBINS,RMIN,RMAX,FBIN,1)
IF (IFVX.LT.0) GO TO 5
CALL MAPS(VL,VU,0.,RMAX)
GO TO 6
5   RMIN=AMAX1(RMIN,1.E-5*RMAX)
CALL MAPSS(VL,VU,RMIN,RMAX)
6   CALL TRACE(VBIN, FBIN,NBINS)
CALL SETCH(10,1,1,0,1,0)
TIM=TIME-0.5 DT
'WRITE(NTP,7) TIM
7   RO FORMAT(«F(VX),TIME=»,F10.4)
RETURN
END
SUBROUTINE PLTHST(REC,TIM,MTH,TL,TU,LINLOG)
C   Построение развития во времени, линейное или логарифмиче
REAL REC(MTH),TIM(MTH)
CALL MYFRAME
CALL CARTMM(MTH,RL,RU,REC,1)
IF (LINLOG.EQ.1.AND.RL.GR.0.) GO TO 1
CALL MAPG(TL,TU,RL,RU)
GO TO 2
1   RL-AMAX1(RL,1.e-5*RU)
CALL MAPGS(TL,TU,RL,RU)
2   CALL TRACE(TIM,REC,MTH)
CALL SETCH(10,1,1,0,1,0,1)
RETURN
END

```

ОСНОВЫ ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ

4.1. ВВЕДЕНИЕ

Выше читатель уже получил представление о том, как работает программа ES1 в целом. Прежде чем переходить к выполнению заданий гл. 5, необходимо разобраться в существе используемых численных методов.

Сначала рассмотрим более подробно способ решения уравнений движения, исследуем точность метода с перешагиванием, а также познакомимся с методом магнитной силы.

Далее исследуем вопрос о выборе формы крупных частиц, которые, как решено выше, будут иметь конечные размеры. Рассмотрим понятие формфактора $S(x)$, его Фурье-образа $S(k)$ и различные способы взвешивания.

Затем изложим метод вычисления поля на основе решения уравнения Пуассона для потенциала и определим порядок точности вычислений. Обсудим альтернативные подходы к определению напряженности поля и рассмотрим различные виды граничных условий, в том числе непериодические.

Будет также сказано несколько слов об энергиях частиц и поля, способах их вычисления.

4.2. ТОЧНОСТЬ МЕТОДА РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ ЧАСТИЦ

Рассмотрим простую модель, иллюстрирующую метод с перешагиванием. Это модель простого гармонического осциллятора, которая описывается дифференциальным уравнением второго порядка

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\omega_0^2 x. \quad (4.1)$$

Уравнение (4.1) имеет решения

$$x(t, t_0) = A(t_0) \cos \omega_0 t + B(t_0) \sin \omega_0 t. \quad (4.2)$$

Конечно-разностные уравнения метода с перешагиванием (гл. 2) имеют вид

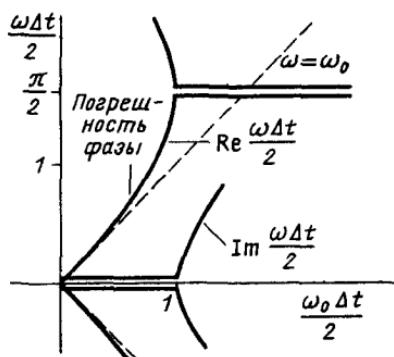
$$\frac{dx}{dt} \rightarrow (x_t - x_{t-\Delta t}) / \Delta t = v_{t-\Delta t/2}, \quad (4.3)$$

$$\frac{dx}{dt} \rightarrow (x_{t+\Delta t} - x_t) / \Delta t = v_{t+\Delta t/2}, \quad (4.4)$$

$$\frac{dv}{dt} \rightarrow (v_{t+\Delta t/2} - v_{t-\Delta t/2}) / \Delta t = (x_{t+\Delta t} - 2x_t + x_{t-\Delta t}) / (\Delta t)^2. \quad (4.5)$$

Вычисления начинаются с некоторого момента t с начальными значениями x_t и $v_{t-\Delta t/2}$. Сначала по известному x_t определяют силу и вычисляют $v_{t+\Delta t/2}$ из уравнения для ускорения, затем $x_{t+\Delta t}$ вычисляют из уравнения для скорости. Это дает новое x , и процесс повторяется во времени снова и снова. Для устойчивости

Рис. 4.1. Зависимость ω от $\omega_0 \Delta t$ для простого гармонического движения, полученная методом с перешагиванием для уравнения в конечных разностях. Частота ω согласуется с ω_0 при малых $\omega_0 \Delta t$, но она больше, чем ω_0 , при увеличении $\omega_0 \Delta t$. Для $\omega_0 \Delta t / 2 > 1$ решение становится комплексным с нарастающими и затухающими корнями (это и есть численная неустойчивость); одна ветвь распадается на четные и нечетные шаги, проявляя сдвиг фаз π



ти уравнения центрированы во времени. Подставим конечно-разностное приближение в однородное уравнение движения (4.1), решим его аналитически и сравним результат с точным. Необходимо решить однородное уравнение

$$(x_{t+\Delta t} - 2x_t + x_{t-\Delta t})/(\Delta t)^2 = -\omega_0^2 x_t. \quad (4.6)$$

Это — стандартное конечно-разностное уравнение, которое можно легко решить подстановкой вида

$$x_t = A \exp(-i\omega t), \quad (4.7)$$

где A — начальное значение; ω — неизвестно. Подставляя x_t и $x_{t-\Delta t} = A \exp[-i\omega(t-\Delta t)]$ в (4.6), получаем уравнение для частоты ω :

$$\sin(\omega\Delta t/2) = \pm \omega_0 \Delta t/2. \quad (4.8)$$

График (4.8) показан на рис. 4.1. Видно, что для $\omega_0 \Delta t/2 \ll 1$ $\omega \approx \omega_0$, что и требовалось. Однако видно, кроме того, что как только $\omega_0 \Delta t > 2$, первоначально полностью действительное решение для ω становится комплексным с нарастающими и затухающими корнями, что указывает на численную неустойчивость. Определим величину фазовой ошибки для малых $\omega_0 \Delta t$ (Амплитудная ошибка равна нулю для $\omega_0 \Delta t < 2$.) При $\omega_0 \Delta t \ll 1$ можно ω разложить в ряд и получить выражение

$$\omega\Delta t/2 \approx \omega_0 \Delta t/2(1 + 1/6(\omega_0 \Delta t/2)^2 + \dots), \quad (4.9)$$

дающее квадратичный член ошибки.

Суммарная фаза после N шагов равна $\omega N \Delta t$, так что итоговая фаза

$$N\omega_0 \Delta t / 6(\omega_0 \Delta t/2)^2 = 1/24 \cdot N(\omega_0 \Delta t)^3. \quad (4.10)$$

Если предположить, что итоговая ошибка равна, например, $1/24$ рад, то получим соотношение для числа шагов $N = 1/(\omega_0 \Delta t)^3$, что при $\omega_0 \Delta t = 0,1$ составит 1000 шагов, около 16 периодов, а при $\omega_0 \Delta t = 0,3$ — 37 шагов, около 2 периодов. Если возможно увеличение ошибки до 1 рад, то соответственно при $\omega_0 \Delta t = 0,1$ программа дает верные результаты в течение 24 000

шагов, что составляет 384 периода, а при $\omega_0 \Delta t = 0,3$ — 890 шагов, или 42 периода. Следовательно, ограничение допустимой ошибки малой величины сокращает число шагов и периодов; увеличение шага увеличивает ошибку как куб размера шага. Обычным компромиссом является значение $\omega_0 \Delta t = 0,2$, при этом используется от 1000 до 10 000 шагов, а иногда и несколько большее их число, если позволяет постановка задачи.

Задачи

4.1. Нарисуйте схему расположения a , v и x для альтернативной схемы интегрирования

$$(v_{t+\Delta t} - v)/\Delta t = 1/2(3a_t - a_{t-\Delta t}), \quad (4.11)$$

$$(x_{t+\Delta t} - x_t)/\Delta t = 1/2(v_{t+\Delta t} + v_t). \quad (4.12)$$

Покажите, что эта схема интегрирования дает частоту для простого гармонического осциллятора (4.1)

$$\omega \approx \omega_0(1 + 1/6(\omega_0 \Delta t)^2 + i(\omega_0 \Delta t)^3/8 + \dots). \quad (4.13)$$

Указания: используйте представление $x_{t \pm \Delta t} = Z^{\pm i} x_t$, $Z \equiv \exp(-i\omega \Delta t)$ и запишите (4.11) и (4.12) в матричном виде. Приравняйте детерминант, составленный из коэффициентов, нулю и получите кубическое уравнение относительно Z , которое надо решить. Фазовая ошибка в 4 раза больше, чем в методе с перешагиванием, и имеется слабая неустойчивость. Покажите, как (со схемой, как на рис. 2.4) Δt можно уменьшить или увеличить в 2 раза на одном шаге. Этот метод имеет недостаток — требуется запоминание предыдущего ускорения $a_{t-\Delta t}$ в добавление к предшествующей скорости v_t и положению x_t .

4.2. Обсудите возможность использования целой арифметики (без плавающей запятой) в методе решения уравнений движения с особым вниманием к числу бит, необходимых для разумной точности. Помните всегда, что малые изменения теряются, т. е. ничего не случается, пока $v \Delta t$ не превысит наименьший шаг по x и $a \Delta t$ не превысит наименьшую скорость. Указание: 17 бит является минимально возможным числом для спокойного старта. Такое кодирование использовалось [Estabrook and Tull, 1980] для получения очень высокой скорости вычисления, почти вдвое быстрее на CDC-7600 (в кодах), чем расчеты по ESI на CRAY-I (на ФОРТРАНе)!

4.3. СИЛА НЬЮТОНА — ЛОРЕНЦА; ТРЕХМЕРНЫЙ МЕТОД ИНТЕГРИРОВАНИЯ $v \times B$

Уравнения движения частиц, которые должны быть проинтегрированы, имеют вид

$$mdv/dt = q(E + v \times B), \quad (4.14)$$

$$dx/dt = v. \quad (4.15)$$

Мы хотим получить центрированную разностную форму уравнений движения Ньютона — Лоренца. Магнитный член цент-
64

рируется усреднением $v_{t-\Delta t/2}$ и $v_{t+\Delta t/2}$ согласно работе [Buneman, 1967]. Остальные члены остаются в прежнем виде. Следовательно, (4.14) принимает вид

$$(v_{t+\Delta t/2} - v_{t-\Delta t/2})/\Delta t = (q/m) [\mathbf{E} + (v_{t+\Delta t/2} + v_{t-\Delta t/2})/2 \times \mathbf{B}]. \quad (4.16)$$

Это векторное уравнение для $v_{t+\Delta t/2}$ может быть разрешено как три совместных скалярных уравнения — по одному для каждой составляющей. Вместо этого выберем путь получения более простого решения, используя специальное преобразование уравнения (4.16).

Первый метод [Buneman, 1967] состоит в вычитании дрейфовой скорости $\mathbf{E} \times \mathbf{B}/\mathbf{B}^2$ из v , так что

$$v'_{\text{old}} = v_{t-\Delta t/2} - \mathbf{E} \times \mathbf{B}/\mathbf{B}^2, \quad (4.17)$$

$$v'_{\text{new}} = v_{t+\Delta t/2} - \mathbf{E} \times \mathbf{B}/\mathbf{B}^2. \quad (4.18)$$

Использование этого способа сводит уравнение (4.14) к вращению для v_{\perp} ($v_{\perp} \perp \mathbf{B}_0$) и поступательному движению для v_{\parallel} :

$$(v'_{\text{new}} - v'_{\text{old}})/\Delta t = (q/m)[\mathbf{E}_{\parallel} + (v'_{\text{new}} + v'_{\text{old}})/2 \times \mathbf{B}]. \quad (4.19)$$

Подробности обсуждаются в задаче 4.3 и в § 4.4.

Другой метод использует разделение электрических и магнитных сил [Boris, 1970]. Подставим в уравнение (4.16)

$$v_{t-\Delta t/2} = v^- - (q\mathbf{E}/m)(\Delta t/2), \quad (4.20)$$

$$v_{t+\Delta t/2} = v^+ + (q\mathbf{E}/m)(\Delta t/2). \quad (4.21)$$

Тогда из уравнений полностью исчезает \mathbf{E} и из (4.16) получаем

$$(v^+ - v^-)/\Delta t = (q/2m)(v^+ + v^-) \times \mathbf{B}, \quad (4.22)$$

что представляет собой чистое вращение (см. задачу 4.3). В методе имеются такие вычислительные шаги: добавление

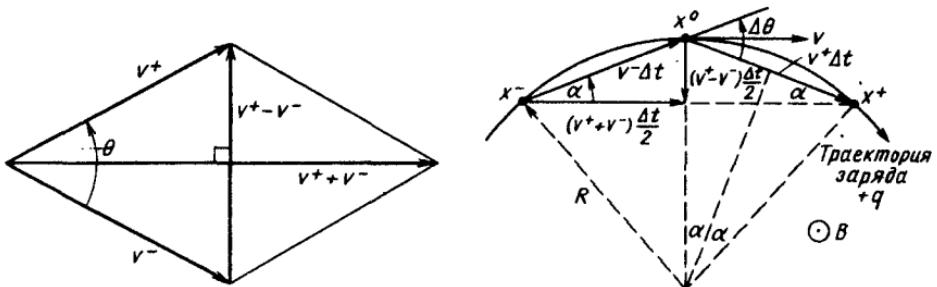


Рис. 4.2. Диаграмма, из которой легко получить значение $\operatorname{tg}(\theta/2)$ в соответствии с (4.22)

Рис. 4.3. Скорости и координаты частицы в плотности, нормальной к однородному магнитному полю \mathbf{B}_0 при $\mathbf{E}_{\perp}=0$, в которой траектория частицы является окружностью (циклотронное движение). Компьютерная или конечно-разностная траектория состоит из сегментных прямых линий, связывающих старое и новое положения

половины электрического импульса к $v_{t-\Delta t/2}$ с использованием (4.20) для получения v^- ; вращение в соответствии с (4.22) для получения v^+ и добавление остальной половины электрического импульса (4.21) для получения $v_{t+\Delta t/2}$. Это те же самые шаги, обоснованные по отдельности, как и в § 2.4. Разделение параллельных и перпендикулярных компонент в этом методе не требуется, а релятивистское обобщение является очевидным. Вычислим угол вращения θ , который должен быть близок по значению к $\omega_c \Delta t = qB\Delta t/m$. Из рис. 4.2 видим, что

$$|\operatorname{tg} \theta/2| = \left| \frac{v^+ - v^-}{v^+ + v^-} \right| = (qB/m)(\Delta t/2) = \omega_c \Delta t/2, \quad (4.23)$$

где использовано соотношение (4.22) для получения последнего равенства. Следовательно, разностное уравнение (4.22) дает угол вращения

$$\theta = 2 \operatorname{arctg}(qB/m)(\Delta t/2) = \omega_c \Delta t (1 - (\omega_c \Delta t)^2 / 12 + \dots), \quad (4.24)$$

где ошибка не превышает 1% при $\omega_c \Delta t < 0,35$.

Задачи

4.3. Покажите, что соотношение (4.22) изменяет только направление v . Указание: образуйте скалярное произведение (4.22) с $(v^+ + v^-)$.

4.4. Рассмотрите модель с однородным B_0 и $E_\perp = 0$, в которой частица со скоростью v имеет круговое движение в плоскости x_\perp .

Пусть орбита определяется (индексы относятся к шагам по времени) такими выражениями:

$$(x^+ - x^0)/\Delta t = v^+, (x^0 - x^-)/\Delta t = v^-,$$

где v^+ получается из равенства

$$(v^+ - v^-)/\Delta t = \lambda [(v^+ + v^-)/2] \times (qB/m),$$

как показано на рис. 4.3. Используя $\operatorname{tg} \alpha$ из этого рисунка [указание: рассмотрите (4.23)], покажите, что

$$\lambda = \operatorname{tg} \alpha / (1/2\omega_c \Delta t)$$

равно $\operatorname{tg} \alpha / \alpha$, если мы потребуем, чтобы метод решения давал правильную фазу вращения $\alpha = \omega_c \Delta t / 2$. Затем, налагая условие, чтобы радиус вращения и период воспроизвелись правильно, покажите, что

$$|v^+| = |v^-| = v(\sin \alpha / \alpha).$$

Наконец, покажите, что когда имеется E_\perp , множитель λ записывается как $\lambda(E_\perp + v \times B)$ для того, чтобы получить правильное значение скорости дрейфа $E \times B / B^2$. (Эти идеи взяты из работ [Hockney, 1966; Buneman, 1967].) Используя любой из приведенных здесь способов интегрирования $v \times B$, нарисуйте для однородного $B_0 z$ орбиты частиц в плоскости x, y :

- а) без коррекции $\operatorname{tg} \alpha / \alpha$, предположительно с полным числом шагов на циклотронный период; отметьте, где точки второго и последующего кругов будут по отношению к таким же точкам первого круга;
- б) повторите а) с коррекцией $\operatorname{tg} \alpha / \alpha$; пусть $0 < \alpha < \pi$;
- в) как и б), но с $\omega_c \Delta t = 2\pi$; сравните с правильной орбитой; объясните движение; является ли это нестабильностью?
- г) как и б), но с $\omega_c \Delta t = 2\pi - \delta$; сравните с правильной орбитой; объясните движение.

4.4. ВЫПОЛНЕНИЕ ВРАЩЕНИЯ $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$

Рассмотрим случай, когда поле \mathbf{B} параллельно оси z . В плоскости (x, y) будет вращение на угол θ , где

$$\operatorname{tg} \theta / 2 = -(qB/m)(\Delta t / 2). \quad (4.25)$$

Это дает хорошее приближение к углу вращения θ , когда θ не слишком велико [см. (4.24)], и весьма удобно, когда B не постоянно. В ES1 B фиксировано, так что, вычисляя $\operatorname{tg} \theta / 2 = -\operatorname{tg}(qB \Delta t / 2m)$, легко получить правильный угол вращения.

Используем теперь это значение $\operatorname{tg} \theta / 2$ для получения $\cos \theta$ и $\sin \theta$ при вращении скорости. Обозначая

$$t = -\operatorname{tg} \theta / 2, \quad (4.26)$$

имеем

$$s \equiv -\sin \theta = 2t/(1+t^2), \quad (4.27)$$

$$c \equiv \cos \theta = (1-t^2)/(1+t^2). \quad (4.28)$$

Формулы вращения принимают вид

$$v_x^+ = cv_x^- + sv_y^-, \quad (4.29)$$

$$v_y^+ = -sv_x^- + cv_y^-. \quad (4.30)$$

Метод решения не требует вычислений трансцендентных функций, что существенно экономит время в условиях, когда B не постоянно. Уравнения (4.27) — (4.30) требуют семи умножений, одного деления и пяти сложений. В работе [Buneman, 1973] формулы были упрощены до такого вида:

$$v_x' = v_x^- + v_y^- t, \quad (4.31)$$

$$v_y' = v_y^- - v_x' s, \quad (4.32)$$

$$v_x^+ = v_x' + v_y' t, \quad (4.33)$$

В них есть только четыре умножения, одно деление и пять сложений. Экономия трех умножений для одной частицы на одном временном шаге очень полезна.

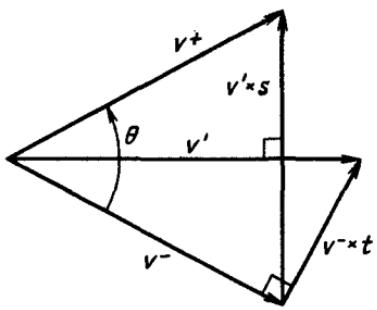


Рис. 4.4. Пространство скоростей, показывающее вращение от v^- к v^+ . Представлены проекции полных скоростей на плоскость, перпендикулярную \mathbf{B}

Когда направления \mathbf{B} и \mathbf{v} произвольны, удобное вращение в векторной форме описано в [Boris, 1970]. Сначала v^- увеличиваются для получения вектора v' , который перпендикулярен $(v^+ - v^-)$ и \mathbf{B} (рис. 4.4):

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v}^- + \mathbf{v}^- \times \mathbf{t}. \quad (4.34)$$

Угол между v^- и v' как раз равен $\theta/2$, следовательно, вектор \mathbf{t} , видимый на рис. 4.4, определяется следующим образом:

$$\mathbf{t} \equiv -\mathbf{b} \operatorname{tg} \theta/2 = (q \mathbf{B}/m)(\Delta t/2). \quad (4.35)$$

Окончательно $v^+ - v^-$ параллельно $v' \times \mathbf{B}$, так что имеем

$$v^+ = v^- + v' \times \mathbf{s}, \quad (4.36)$$

где \mathbf{s} параллельно \mathbf{B} и его величина определяется требованием $|v^-|^2 = |v^+|^2$,

$$\mathbf{s} = 2\mathbf{t}/(1 + t^2). \quad (4.37)$$

Этот алгоритм легко можно обобщить на релятивистский случай (см. гл. 15).

Задачи

4.5. Проверьте, что (4.31)–(4.33) дают тот же результат, что и (4.29) и (4.30).

4.6. Используя равенство $|v^+| = |v^-|$ (вращение), получите выражение для s (4.37).

4.7. Покажите, что вращение удовлетворяет уравнению движения (4.22), если $\mathbf{t} = q \mathbf{B} \Delta t / 2m$.

4.5. ПРИМЕНЕНИЕ ФОРМУЛ ВРАЩЕНИЯ В ОДНОМЕРНЫХ ПРОГРАММАХ

В программах с одним измерением x и двумя скоростями v_x и v_y , что допускает присутствие магнитного поля B_z , движение всегда перпендикулярно \mathbf{B} . Следовательно, используя векторные уравнения предыдущих параграфов, мы получаем алгоритм вида $1D2V$ «ускорение — вращение — ускорение» (см. § 2.4).

Программа с одной пространственной координатой и тремя скоростями $1D3V$ может быть сконструирована, как показано на рис. 4.5. Пусть поле \mathbf{B}_0 (постоянное, однородное) находится в плоскости (x, z) и составляет угол θ с осью z . Самосогласованное поле \mathbf{E} и волновой вектор \mathbf{k} должны быть направлены

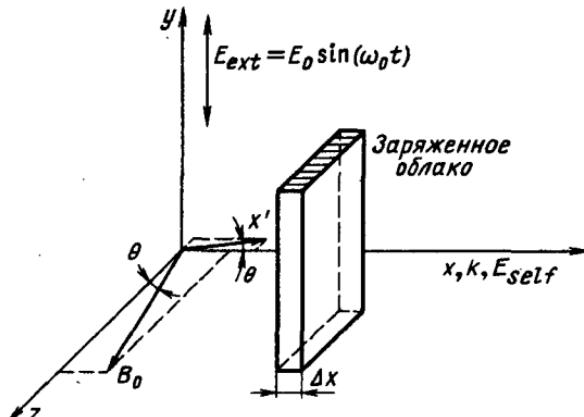


Рис. 4.5. Одномерная модель листов с координатой x и скоростями v_x, v_y, v_z 1 D3V. Самосогласованное поле, создаваемое листами, направлено вдоль x , как и k . Может быть приложено электрическое поле вдоль y . Магнитное поле находится в плоскости $x-z$

вдоль x перпендикулярно листам. Если мы ограничимся этим, то перпендикулярным движением по z можно пренебречь ($F_z=0$). Однако иногда представляет интерес задача с приложенным электрическим полем E вдоль оси y , которое дает скорость v_y , а она в свою очередь дает силу $F_z=-qv_yB_x$ и дрейф по z , $(v_E)_z=-(E_{ext})_y/B_x$. Для упражнения сохраним в модели как $v_{||}$ и v_{\perp} , так и $k_{||}$ и k_{\perp} . Удобно иметь движение, разделенное в продольном и поперечном направлениях, что приводит к введению координаты x' (перпендикулярной B_0 соответственно под углом θ к оси x). Пусть поле, создаваемое зарядами, есть согласованное поле $E \equiv E_{sc}$. Тогда поля имеют вид

$$\mathbf{E}_{sc} = \hat{\mathbf{x}} E_{sc} = \hat{\mathbf{x}}' E_{sc} \cos \theta + \mathbf{b}_0 E_{sc} \sin \theta, \quad (4.38)$$

$$\mathbf{E}_{ext} = \hat{\mathbf{y}} E_{ext}, \quad (4.39)$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}_0. \quad (4.40)$$

Уравнения движения в координатах (x', y, B_0) интегрируются методом «ускорение — вращение — ускорение» следующим образом:

$$v_{x'_1} = v_{x'} (t - \Delta t/2) + (q/m)(\Delta t/2) E_{sc} \cos \theta, \quad (4.41)$$

$$v_{y1} = v_y (t - \Delta t/2) + (q/m)(\Delta t/2) E_{ext}, \quad (4.42)$$

$$= v_{x'_1} \cos(\omega_c \Delta t) + v_{y1} \sin(\omega_c \Delta t) + (q/m)(\Delta t/2) E_{sc} \cos \theta; \quad (4.43)$$

$$v_y (t + \Delta t/2) = \\ = -v_{x'_1} \sin(\omega_c \Delta t) + v_{y1} \cos(\omega_c \Delta t) + (q/m)(\Delta t/2) E_{ext}, \quad (4.44)$$

$$v_{B_0}(t + \Delta t/2) = v_{B_0}(t - \Delta t/2) + (q/m) \Delta t E_{\text{ext}} \sin \theta. \quad (4.45)$$

Во многих задачах магнитное поле однородно и постоянно ($B_z = B_0$) и не зависит от x и t . В этом случае $\omega_c \Delta t$ можно вычислить 1 раз в начале задачи и, следовательно, также $\cos(\omega_c \Delta t)$ и $\sin(\omega_c \Delta t)$.

В некоторых задачах B_z может изменяться по t или x , так что придется вычислять $\cos(\omega_c \Delta t)$ и $\sin(\omega_c \Delta t)$ на каждом шаге для каждой частицы. Центрирование времени и пространства для таких моделей рассматривались в работах [Langdon, Lasinski, 1976; Nevins et al., 1979]. Одномерную модель в этом параграфе иногда называют моделью $1^{1/2}D$ из-за использования двух компонент скорости. Впервые такое рассмотрение было проведено в работе [Auer et al., 1961] для листов заряда и тока, а также в работе [Hasegawa and Birdsall, 1964]. Результаты по модели $1D3V$, изложенные здесь, взяты из работы [Chen and Birdsall, 1973].

Задачи

4.8. В случае однородного \mathbf{B} , параллельного оси z , и $E_y = E_z = 0$, как в ES1, компоненту y уравнения движения (4.14) можно проинтегрировать и получить интеграл движения

$$\omega_c X_{gc} \equiv v_y + \omega_c x = \text{const},$$

где X_{gc} — положение ведущего центра, связанное с каноническим моментом p_y . Покажите, что разностное уравнение (4.16) также имеет аналогичный интеграл движения

$$\omega_c X_{gc,t+\Delta t/2} = v_{y,t+\Delta t/2} + \omega_c (x_t + x_{t+\Delta t})/2,$$

т. е. покажите, что

$$X_{gc,t+\Delta t/2} = X_{gc,t-\Delta t/2}.$$

4.9. Покажите, что уравнение движения

$$(x_{t+\Delta t} - 2x_t + x_{t-\Delta t})/(\Delta t)^2 = qE_x/m + \omega_c^2 \left(X_{gc} - \frac{x_{t-\Delta t} + 2x_t + x_{t+\Delta t}}{4} \right)$$

эквивалентно (4.16) в одномерном случае. Здесь X_{gc} (определенное в задаче 4.8) запоминается вместе с v_y . Еще более простое уравнение движения, выведенное [Byers, 1970], сводит магнитный член к виду

$$\omega_c^2 (X_{gc} - x_t).$$

4.6. СВЯЗЬ МЕЖДУ ЧАСТИЦАМИ И РАЗНОСТНОЙ СЕТКОЙ; ФОРМФАКТОРЫ $S(x)$, $S(k)$

Использование пространственной сетки и интерполяции при расчете плотности заряда приводит к появлению зарядов, которые имеют ширину по крайней мере в одну ячейку сетки, как уже показывалось в § 2.6 (см. рис. 2.8 и 2.9). Это связано с

тем, что плотность заряда, потенциал и поле вычисляются в узлах сетки. Естественным следствием является то, что частицы никогда не ведут себя так, как если бы они имели нулевую толщину. Следовательно, разумно рассмотреть эффективную форму частиц через призму формфактора частицы $S(x)$ (см. рис. 2.9) и Фурье-преобразование формфактора $S(k)$.

Ниже кратко рассмотрены частицы конечных размеров без учета сеточных эффектов. В части II книги рассмотрены сеточные эффекты во всех деталях. Пока же просто отметим, что частицы имеют конечные размеры. Этот подход использован в работах [Langdon and Birdsall, 1970; Okuda and Birdsall, 1970].

Частицы имеют пространственное распределение заряда, двигаются как твердые тела без вращения или инерциального изменения объема и проходят свободно друг через друга. Естественно назвать такие частицы облаками. Взаимодействия системы облаков являются прямым обобщением взаимодействия точечных частиц; фактически, как отмечалось в гл. 1, это устраняет различия между кинетической теорией и классической электромагнитной теорией.

Плотность заряда в точке с координатами x' от облака с центром в x изменяется от $q\delta(x' - x)$ для точечной частицы до $qS(x' - x)$ для облака, где q — полный заряд, определяемый соотношением $q \int dx' S(x' - x)$. Пусть J_p и ρ_p — плотности тока и заряда системы точечных зарядов, расположенных в точках (x') ; тогда плотности J_c и ρ_c для системы облаков, чьи центры совпадают с точечными частицами, определяются так:

$$\begin{Bmatrix} \rho_c(x, t) \\ J_c(x, t) \end{Bmatrix} = \int dx' S(x' - x) \begin{Bmatrix} \rho_p(x', t) \\ J_p(x', t) \end{Bmatrix}. \quad (4.46)$$

Эти плотности облаков будут использоваться в уравнениях Максвелла для определения полей E и B . Сила Ньютона — Лоренца, действующая на облако с полным зарядом q , центром в точке x и скоростью v , равна

$$F(x, v, t) = q \int dx' S(x' - x) [E(x', t) + v \times B(x', t)]. \quad (4.47)$$

Соотношения (4.46) и (4.47) являются свертками, а поэтому приобретают очень простую форму после преобразования Фурье по координате

$$\begin{Bmatrix} \rho_c(k, t) \\ J_c(k, t) \end{Bmatrix} = S(k) \begin{Bmatrix} \rho_p(k, t) \\ J_p(k, t) \end{Bmatrix}, \quad (4.48)$$

$$F(k, v, t) = qS(-k) [E(k, t) + v \times B(k, t)], \quad (4.49)$$

где

$$S(k) = \int d\mathbf{x} S(\mathbf{x}) \exp(-ik \times \mathbf{x}). \quad (4.50)$$

Условие нашего преобразования таково, что в пределе точечных частиц (радиус частицы $R \rightarrow 0$) или в длинноволновом пределе $k \rightarrow 0$, $S(k) \rightarrow 1$. Размер облака по какому-либо критерию обозначим R , тогда $S(k)$ становится малым для $|k| \geq R^{-1}$.

Формфактор S не обязательно должен быть изотропным или симметричным. Однако здесь мы предположим, что функция $S(\mathbf{x})$ изотропна. Следовательно, $S(\mathbf{k})$ — изотропная и действительная величина. Для асимметричных облаков единственным изменением в большинстве результатов будет замена $S^2(\mathbf{k})$ на $|S^2(\mathbf{k})|$.

Используя соотношение (4.48), теперь легко получить большую часть результатов теории плазмы с малыми изменениями путем замены заряда q на $qS(\mathbf{k})$. Например, тензор диэлектрической проницаемости для однородного газа облаков Власова и, следовательно, дисперсионные соотношения остаются неизменными, за исключением того, что квадрат плазменной частоты ω_p^2 должен быть везде умножен на $S^2(k)$ (один множитель S возникает из уравнения движения, другой — из связи положения частицы с плотностью), т. е.

$$\omega^2 \approx S^2(k) \omega_p^2. \quad (4.51)$$

Этот результат можно рассматривать как зависящие от k плазменную частоту или заряд, когда проводят линейный анализ устойчивости в плазме, состоящей из облаков. До сих пор в книге встречались две формы, связанные со взвешиваниями первого и нулевого порядков (см. рис. 2.9), для которых преобразования формфакторов в одномерном случае имеют вид

$$S_0(k) = \sin(k\Delta x/2)/(k\Delta x/2), \quad (4.52)$$

$$S_1(k) = S_0^2(k). \quad (4.53)$$

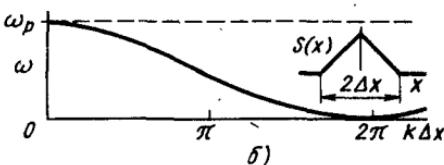
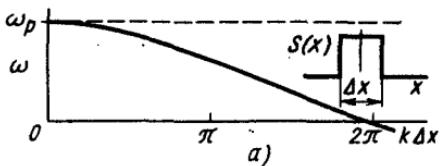
Следовательно, наши первые соображения о дисперсии холодной плазмы таковы, как показано на рис. 4.6. Ниже мы увидим, что кроме пространственной сетки конечные разности вносят дополнительные изменения в дисперсионные зависимости.

При наложении однородного магнитного поля в нулевом приближении необходимо положить $k=0$ в формуле $\omega_{c0} = -qB_0S(k)/m$, чтобы результаты не отличались от случая точечных частиц. Это свидетельствует о том, что при наличии в модели нескольких нелинейно взаимодействующих волн или при введении пространственной сетки нужно проявлять повышенную внимательность в случае одновременного описания нескольких пространственных зависимостей.

Задачи

4.10. Что случилось бы, если бы мы использовали понятие облака несвязанно, т. е. использовали бы различные S в (4.46) и (4.47)? Например, если

Рис. 4.6. Дисперсия холодной плазмы в случае зарядов конечных размеров с формфактором $S(x)$, показанным для метода NGP. Ленгмюровский результат ($\omega = \omega_p$) показан штриховыми линиями. Уменьшение ω объясняется сглаживающим эффектом облаков, когда длина волны становится сравнимой с радиусом облака. Влияние разностной сетки не учитывалось (a). Аналогичные зависимости получаются в случае применения метода CIC (б)



бы мы не делали никакой свертки полей, что тогда стало бы с дисперсионным соотношением (4.51)? Получающаяся нестабильность при волновых векторах, для которых $S(k) < 0$, аналогична той, которая возникает в системе гравитационно притягивающих частиц. Покажите, что потенциальная энергия при возмущениях плотности с такими k меньше, чем при однородной плотности [Langdon and Birdsall, 1970].

4.11. Можно ли использовать разные формы S для различных сортов частиц?

4.7. ГОРЯЧАЯ ПЛАЗМА ЧАСТИЦ КОНЕЧНЫХ РАЗМЕРОВ

Рассмотрим продольные колебания плазмы без магнитного поля, чтобы выяснить, чем отличается используемая нами модель от случая точечных частиц.

Продольная диэлектрическая проницаемость для плазмы облаков имеет вид

$$\epsilon(k, \omega) = 1 + S^2(k) \frac{\omega_p^2}{k^2} \int \mathbf{k} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}} \frac{dv}{(\omega - \mathbf{k} \times \mathbf{v})}. \quad (4.54)$$

Здесь все обозначения имеют стационарный смысл. Предполагается, что пространственно-временная зависимость имеет вид $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega t)$ и выполнены обычные условия аналитичности. Для максвелловского распределения скоростей (без дрейфовой скорости) $v_t = (v_{av}^2/3)^{1/2}$, диэлектрическая проницаемость принимает вид

$$\epsilon(k, \omega) = 1 - (1/2) (S \omega_p / kv_t)^2 Z'(\omega / \sqrt{2}kv_t), \quad (4.55)$$

где Z' — производная плазменной дисперсионной функции, введенная в работе [Fried and Conte, 1961].

Дисперсионное соотношение для продольных волн имеет вид $\epsilon = 0$. Если $kv_t / S \omega_p = k \lambda_D / S \ll 1$, то можно использовать асимптотическое разложение для Z' при больших значениях аргумента и получить приближенное решение для ω , обладающее слабым затуханием Ландау:

$$(\operatorname{Re} \omega)^2 \approx S^2(k) \omega_p^2 + 3k^2 v_t^2, \quad (4.56)$$

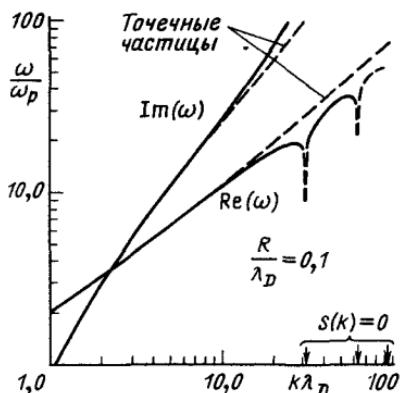


Рис. 4.7. Корни дисперсионного уравнения (ω от k) для малых облаков ($R=0,1\lambda_D$). Сетка не учитывается

Рис. 4.8. То же, что и на рис. 4.7, для случая больших облаков [Langdon and Birdsall, 1970]

$$\text{Im } \omega \approx -(\pi/8)^{1/2} S \omega_p (S/k\lambda_D)^3 \exp [(-1/2)(S/k\lambda_D)^2 - 3/2]. \quad (4.57)$$

При малых размерах облаков (радиуса $R < \lambda_D$) и слабом затухании имеем $kR < k\lambda_D \ll 1$, так что $S \approx 1$. Таким образом, слабо затухающие колебания почти не чувствуются малыми облаками, как и следовало ожидать. Точное решение для облаков с однородной плотностью показано на рис. 4.7. Для больших облаков ($R \geq \lambda_D$) и слабого затухания $\text{Re } \omega$ может сильно отличаться от результата для точечных частиц, когда $kR \geq 1$ (рис. 4.8).

В случае $k\lambda_D/S \geq 1$ колебания сильно затухают. В плазме облаков появление затухания с ростом k происходит, когда $k\lambda_D \approx 1$ или когда kR достаточно велико. Для некоторых форм облаков, таких как кубы, $S \rightarrow 0$ при конечных k . В условиях, когда это имеет место, асимптотические решения для сильного затухания показывают, что $\text{Im } \omega \rightarrow \infty$, $\text{Re } \omega \rightarrow 0$, как видно на рис. 4.1. Конечно, когда S очень мало, электрическое взаимодействие становится слабым и облака движутся спокойно. Тогда корни дисперсионного уравнения не описывают временную эволюцию возмущения плотности; свободная временная эволюция развивается по закону $\exp [(-1/2)k^2 v_t^2 t^2]$. В случае $S(k) \rightarrow 0$ возможно создание возмущения по плотности, которое не создает никакого поля E , следовательно, оно будет незатухающим; это возмущение может повторяться и вызывать существенную нелинейность. В случае сильного взаимодействия облаков такие процессы не имеют места.

Настоящий параграф можно рассматривать как введение в физику частиц конечных размеров (без рассмотрения особенностей, вызываемых введением пространственной сетки). В работах [Langdon and Birdsall, 1970; Okuda and Birdsall, 1970],

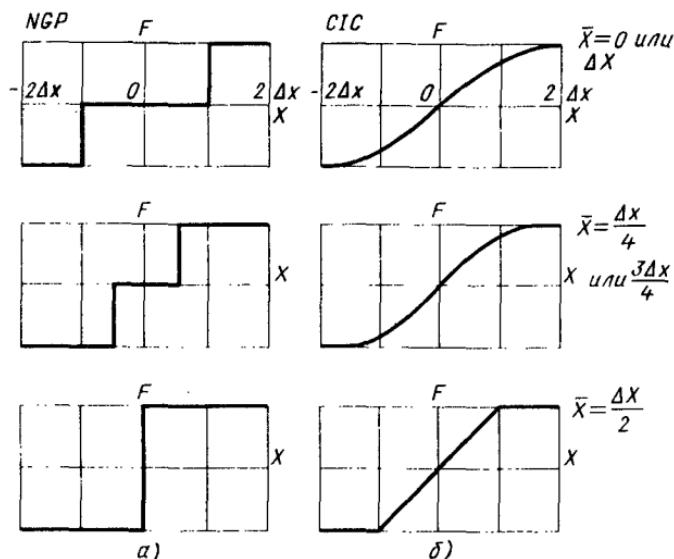


Рис. 4.9. Сила взаимодействия для частицы нулевых размеров ($R \rightarrow 0$, листы) при использовании метода NGP для плотности и силы (a) и сила F для облака шириной Δx ($R = \Delta x/2$) при использовании взвешивания первого порядка, CIC, PIC

подробно изложенных в части II книги, рассмотрено влияние пространственной сетки на потенциал, энергию, столкновение частиц, экранирование зарядов и т. д.

4.8. СИЛА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЧАСТИЦ КОНЕЧНЫХ РАЗМЕРОВ ПРИ НАЛИЧИИ РАЗНОСТНОЙ СЕТКИ

Выше при расчете плотности заряда в узлах разностной сетки были определены взвешивания нулевого и первого порядков. Рассмотрим теперь силу взаимодействия между двумя частицами в одномерном случае для обоих способов взвешивания. Из закона Кулона для листов следует, что сила пропорциональна $1/r^0$, т. е. сила не зависит от расстояния, однако в нашей модели она изменяется скачками и может изменять знак при прохождении двух частиц друг через друга; следовательно, сила без учета влияния сетки является ступенчатой функцией.

Добавление пространственной сетки изменяет закон $1/r^0$ при расстояниях, меньших толщины частиц, для взвешиваний нулевого и первого порядков следующим образом. В обоих случаях используются трехточечное конечно-разностное выражение для $\partial^2 \Phi / \partial x^2$ и двухточечное выражение для $\partial \Phi / \partial x$, описанные выше. Сила взаимодействия частицы, находящейся в точке x_1 , с частицей в точке x_2 записывается так [Langdon and Birdsall, 1970]:

$$F(x_1, x_2) = F(\bar{x} - 1/2x, \bar{x} + 1/2x). \quad (4.58)$$

Сила F зависит от расстояния

$$x \equiv x_2 - x_1, \quad (4.59)$$

а также от среднего положения на сетке

$$\bar{x} \equiv (x_1 + x_2)/2. \quad (4.60)$$

Когда используются точечные частицы ($R=0$, как в § 4.7) и взвешивание нулевого порядка (схема NGP), тогда сила будет ожидаемой кулоновской ступенчатой функцией только для $\bar{x} = \Delta x/2$ (среднее положение — это середина между узлами сетки) и будет иметь две ступени для других значений \bar{x} , как показано на рис. 4.9, а. Частицы теперь «чувствуют» присутствие сетки.

Если используются облака ширины $2R = \Delta x$ при взвешивании первого порядка (PIC, CIC), то сила (но не ее производная) непрерывна по x , как показано на рис. 4.9, б, и зависимость изменения силы от \bar{x} выражена существенно меньше, чем при взвешивании нулевого порядка.

Полезно разделить силу взаимодействия на две части: усредненную, которая не зависит от положения на сетке,

$$\bar{F}(x_1, x_2) = \bar{F}(x_1 - x_2) = 1/\Delta x \int_{\Delta x} F(\bar{x} - x/2, \bar{x} + x/2) d\bar{x} \quad (4.62)$$

и остаток, который представляет собой нефизическую сеточную силу

$$\delta F = F - \bar{F}. \quad (4.63)$$

Если влиянием δF можно пренебречь, то система может быть проанализирована методами, обсужденными выше. Например, в дисперсионном уравнении для плазменных колебаний необходимо умножить S^2 на величину kk/K^2 , рассмотренную в § 2.5, которая показывает, что одним из эффектов присутствия сетки является сглаживание взаимодействия.

Детальная формулировка проблемы сеточной силы показывает, что основным следствием наличия δF служит то, что возмущения волнового вектора k связаны с возмущениями волновых векторов, отличающихся от k на целый множитель $2\pi/\Delta x$ (проблема экранирования частот, см. гл. 8). Эта связь не важна, когда $\lambda_D \gg \Delta x$; при этом приближенное описание в терминах \bar{F} достаточно точно.

Мы видим, что частицы конечных размеров на пространственной сетке потеряли свое короткодействующее взаимодействие и проходят гладко друг через друга с относительно малым шумом. Эти эффекты прекрасно воспроизводятся в случае двух и трех измерений, существенно уменьшают поперечные сечения и полностью устраняют рассеяние на большие углы, т. е.

столкновительные и коротковолновые флуктуации. Кроме того, для размеров облаков $R \leq \lambda_D$ продольные волны и дебаевское экранирование практически соответствуют лабораторной плазме. Все это более детально рассмотрено ниже.

Задачи

4.12. Перерисуйте рис. 4.9, а и наложите друг на друга графики $\bar{x}=0$, $\Delta x/4$, $\Delta x/2$. Это сделает зависимость F от расположения на сетке более явной.

4.13. Повторите задачу 4.12 на рис. 4.9, б.

4.14. Сконструируйте график взвешивания второго порядка, используя квадратичный сплайн и подкрепляя свои схемы анализом (см. § 8.8 для определения сплайна). Повторите наложение из задачи 4.12 и пронаблюдайте: положение сетки изменяет силу F очень слабо — намного меньше, чем взвешивание нулевого и первого порядков.

4.9. ТОЧНОСТЬ МЕТОДА РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА

При анализе метода решения уравнения движения было установлено, что ошибка пропорциональна $(\Delta t)^2$. Теперь необходимо оценить точность метода вычисления электрических полей. Хотелось бы, чтобы ошибка была пропорциональна $(\Delta x)^2$.

Предположим, что значения плотности заряда в узлах сетки известны и необходимо определить потенциалы в узлах Φ_j , решая уравнение Пуассона

$$\frac{d^2 \Phi(x)}{dx^2} = -\rho(x)/\epsilon. \quad (4.64)$$

Для этой цели преобразуем (4.64), используя результаты работ [Kollats, 1966; Forsite and Vasov, 1960], к представлению в виде конечных разностей с использованием трехточечной схемы

$$\frac{\Phi_{j-1} - 2\Phi_j + \Phi_{j+1}}{(\Delta x)^2} + \left(\frac{1}{12} (\Delta x)^2 \Phi_\epsilon^{IV} \right) = \rho_j, \quad (4.65)$$

где Φ_ϵ^{IV} — значение четвертой производной Φ в интервале между $j-1$ -м и $j+1$ -м узлами сетки. Разностная схема такого же порядка точности требует для своей записи пяти точек в двухмерном случае и семи точек в трехмерном. Ошибка пропорциональна $(\Delta x)^2$, как нам и хотелось. Она довольно мала в случае, когда $0 < k\Delta x < \pi/2$, а при $\pi/2 < k\Delta x < \pi$ исчезает вообще. Эта форма записи уравнения Пуассона широко используется в численном моделировании.

Исходя из значений плотности заряда в большем числе узлов сетки, можно записать уравнение (4.64) в виде

$$\frac{\Phi_{j-1} - 2\Phi_j + \Phi_{j+1}}{(\Delta x)^2} + \left(\frac{1}{240} (\Delta x)^4 \Phi_\epsilon^{IV} \right) = \frac{\rho_{j-1} + 10\rho_j + \rho_{j+1}}{12}, \quad (4.66)$$

в котором используются 9 точек в случае 2D и 19 точек разностной сетки в случае 3D. Точность этой разностной схемы существенно выше, чем (4.65), и в то же время требует лишь незначительного увеличения объема вычислений. Существует множество разностных схем и более высокого порядка точности. Однако для моделирования важна не точность решения уравнения Пуассона сама по себе, а точность вычисления силы, действующей на частицы. Поэтому в дальнейшем будем использовать форму записи (4.65), так как именно она лучше обеспечивает необходимый сглаживающий эффект при расчете сил.

Задачи

4.15. Для того чтобы убедить себя в степени точности, предположите, что

$$\varphi(x) = A \cos(2\pi mx/L), \quad m = 1, 2, \dots, m_{\max}.$$

Наибольшее допустимое $k = (2\pi m/L)$ равно $\pi/\Delta x$, так что $m_{\max} = 2L/\Delta x = NG/2$. Определите относительную ошибку и нарисуйте ее в зависимости от m для значений $1 \leq m \leq NG/2$ в случаях, описываемых формулами (4.65) и (4.66). При каком m/m_{\max} ошибка превышает, скажем, 5%?

4.10. ЭНЕРГИЯ ПОЛЯ И КИНЕТИЧЕСКИЕ ЭНЕРГИИ ЧАСТИЦ

Во всех методах моделирования рассчитываются и запоминаются физические величины, такие как потенциальная (PE), кинетическая (KE) и полная (TE) энергии и различные моменты частиц. Особое внимание уделяется источникам энергии и процессам ее поглощения и преобразования. Графики энергетических величин в зависимости от времени строятся в конце работы программы и иллюстрируют наиболее интересные физические процессы в плазме, такие как насыщение неустойчивостей, переход потенциальной энергии в кинетическую, изменения состояния, инкременты и т. д. Так как сохранение моментов и энергий при численном моделировании выполняется в пределе $\Delta t \rightarrow 0$, то отклонение таких величин от ожидаемых постоянных значений служит мерой точности проводимых расчетов. Именно поэтому необходима особая тщательность при вычислении PE , KE , TE и построении их графиков.

Энергия электростатического поля (ESE) в модели ES1 получается суммированием произведений $\rho_k \Phi_k$, т. е.

$$ESE = \frac{1}{L} \sum_{k=k_0}^{k_{\max}} \rho_k \Phi_k. \quad (4.67)$$

Эта формула выведена из равенства Парсеваля

$$\frac{1}{2} \int_0^L \rho(x) \phi(x) dx = \frac{1}{L} \sum_k^{\infty} \rho_k \phi_k. \quad (4.68)$$

Так как $\rho(x)$, $\phi(x)$, ρ_k , ϕ_k известны в моменты t , $t + \Delta t$, $t + 2\Delta t$ и т. д., то и ESE определяется в эти же моменты времени.

Для расчета энергии поля можно использовать и другую формулу:

$$\frac{1}{L} \sum_k E_k^2. \quad (4.69)$$

При использовании значений напряженности поля для вычисления ESE необходимо учесть следующие особенности. Во-первых, имеется существенное различие между $\rho_k \phi_k$ и E_k^2 . Если мы полагаем ρ_k известным и определяем ϕ_k и E_k по формулам (2.22) и (2.24), то

$$E_k^2 / \rho_k \phi_k = \tilde{k}^2 / K^2, \quad (4.70)$$

что можно переписать, используя соотношения (2.16) и (2.17), в виде

$$\tilde{k}^2 / K^2 = \cos^2(k \Delta x / 2). \quad (4.71)$$

Следовательно, E_k^2 уменьшается при больших $k \Delta x$ по сравнению с $\rho_k \phi_k$, так что сумма E_k^2 по k заметно меньше, особенно когда относительно большая энергия сосредоточена в области коротких длин волн. Итак, потенциальную энергию необходимо вычислять суммированием $q \phi$ по всем зарядам, которое может быть представлено как интеграл по объему $(1/2) \int \rho \phi dv$. Если использовать закон Кулона ($E \sim q/r^2$), то этот интеграл можно преобразовать к виду $(1/2) \int E^2 dv$. Так как в нашей модели выполняется модифицированный закон Кулона — уменьшение сил при малых расстояниях, как показано на рис. 4.9, то эти два выражения для энергии не эквивалентны и более правильным является первое из них. В модель специально введен алгоритм сохранения энергии (используется при значении параметра $IW=3$), позволяющий правильно вычислять потенциальную энергию при наличии разностной сетки. Более подробно он рассмотрен в части II. KE — это сумма $(1/2) \sum_{NP} mv^2$ по всем частицам. Если бы мы просто вычисляли $(1/2) \sum_{p=1} mv^2$, то мы рассчитывали бы KE в моменты времени $t + \Delta t/2$, $t + 3\Delta t/2$ и т. д., перемежающиеся с временами расчета ESE t , $t + \Delta t$ и т. д. Для того чтобы рассчитывать энергию одновременно, можно, как уже отмечалось в § 3.11, усреднить величину KE каким-либо из способов, указанных ниже и имеющих порядок точности $(\Delta t)^2$:

$$(v_{\text{new}}^2 + v_{\text{old}}^2)/2, \quad (4.72)$$

$$(v_{\text{new}} + v_{\text{old}})^2/8, \quad (4.73)$$

$$v_{\text{new}} \cdot v_{\text{old}}/2. \quad (4.74)$$

Последнее выражение требует минимальных вычислительных затрат, и именно поэтому оно используется в программе ES1. Если бы точность интегрирования уравнений движения была выше, чем $(\Delta t)^2$, то можно было бы использовать более точные интерполяционные формулы для вычисления KE.

Задачи

4.16. Получите результаты, приведенные в формулах (4.70) и (4.71).

4.17. Предположим, что ρ_k сглажено множителем $SM(k)$ (вводимого для уменьшения шума при больших $k\Delta x$) и что ϕ_k получается из значений $\rho_k \times SM(k) \equiv \rho_{k,\text{smoothed}}$. Покажите, что выражение (4.70) все еще справедливо.

4.18. Перечислите число сложений и умножений для каждой из записей (4.72), (4.73) и (4.74). Вычислите каждую из форм, предполагая v_{new} выраженным через v_{old} для доказательства утверждения в тексте, что (4.72) -- (4.74) имеют один и тот же порядок точности по Δt , и получите разницу в этих выражениях.

4.19. Покажите, что если $(1/2)\sum mv_{\text{new}}^2$ используется как кинетическая энергия, то в колебаниях холодной плазмы полная энергия (кинетическая + потенциальная) осциллирует с амплитудой, пропорциональной $\omega_p \Delta t$.

4.20. Загляните вперед, в часть II книги, и покажите, делает или нет запись $(v_{\text{new}} v_{\text{old}})/2$ точной сумму KE+PE для алгоритма сохранения энергии. Только для холодной плазмы. Для горячей плазмы.

4.11. ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ ДЛЯ ЗАРЯДА, ТОКА, ПОЛЯ И ПОТЕНЦИАЛА

Одномерная периодическая система обычно подразумевается как часть бесконечной системы. Однако имеются различные варианты, заслуживающие рассмотрения, включая короткое замыкание, холостой ход и управляемые электродинамические системы.

Прежде всего рассмотрим периодическое поле. Интегрирование $\partial E/\partial x = \rho/\epsilon$ по периоду L дает

$$\int_x^{x+L} \frac{\partial E}{\partial x} dx = E(x+L) - E(x) = (1/\epsilon) \int_x^{x+L} \rho dx = L \langle \rho \rangle / \epsilon, \quad (4.75)$$

т. е. средняя плотность заряда исчезает, $\langle \rho \rangle = 0$, если поле периодично. В ES1 нет нескомпенсированного заряда на любом периоде, $\rho(k=0)=0$.

Далее, если потенциал выбирается периодическим, то интегрирование $\partial \phi/\partial x = -E$ по периоду L

$$\int_x^{x+L} \frac{\partial \phi}{\partial x} dx = \phi(x+L) - \phi(x) = - \int_x^{x+L} E dx = -L \langle E \rangle \quad (4.76)$$

дает $\langle E \rangle = 0$, что подразумевает условие $E(k=0)=0$. В программе ES1 возможно добавление однородного поля $E_0 \cos(\omega_0 t)$, задаваемого какой-либо внешней системой, предлагающей непериодический потенциал ϕ . Будем называть систему короткозамкнутой, если $\phi(0)=\phi(L)$.

Наконец, необходимо рассмотреть полную плотность тока, состоящего из конвекционного тока и тока смещения:

$$J_{\text{total}} = \rho v + \partial E / \partial t. \quad (4.77)$$

В одномерном случае величина (4.77) не должна зависеть от x — результат, вытекающий из условия

$$\nabla \times H = J_{\text{total}}, \quad \nabla \times \nabla \times H \equiv 0 = \nabla \times J_{\text{total}}, \quad (4.78)$$

т. е. $\partial J_{\text{total}} / \partial x = 0$, следовательно, $J_{\text{total},x}$ не зависит от x и может зависеть от времени. Обозначим эту величину $J(x)$. Следовательно, по сравнению с заданием в ES1 периодических значений E и ϕ управляемая одномерная плазменная модель (рис. 4.10) может иметь нескомпенсированные значения поля или заряда или разности потенциалов, т. е. могут быть отличными от нуля компоненты E , ρ или $\phi \neq 0$ при $k=0$. Эти составляющие могут создаваться в программе различными методами, которые описываются дополнительными подпрограммами задания компонент при $k=0$.

Интегрируя (4.77) по области длиной L , используя равенства $J_{\text{total}} = J_{\text{total}}(t)$, $E = -\partial \phi / \partial x$ для модели с N листами и заменяя

интеграл $\int_0^L \rho v dx$ на сумму $\sum_{i=1}^N \rho_{si} v_i$ (где $\rho dx = \rho_\partial$), получаем

соотношение

$$J(t) = \left\{ \sum_{i=1}^N \rho_{si} v_i - \frac{\partial}{\partial t} (\Phi_b(t) - \Phi_a(t)) \right\} / L, \quad (4.79)$$

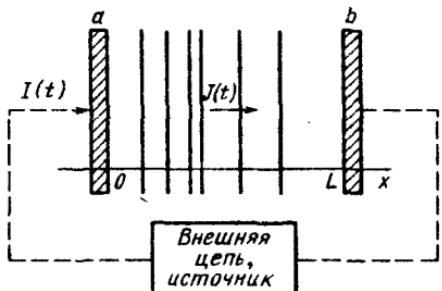


Рис. 4.10. Управляемая плазменная модель, ограниченная плоскостями a и b , которые могут быть эмиттерами, поглотителями, отражателями или прозрачными для частиц (концами периодической системы). $J_{\text{total}}(t)$ — полная плотность тока в области взаимодействия (не зависящая от x); I — ток во внешней цепи

где $x=0$ в плоскости a и $x=L$ в плоскости b . Первый член — это пространственное среднее от конвекционного тока, компонента с $k=0$, называемая также наведенным или управляющим током при описании плазменного прибора. Второй член — это ток смещения, вычисленный, как если бы при $0 < x < L$ не было никаких зарядов (значение при $k=0$). Интересные примеры, иллюстрирующие этот случай, даны в работе [Birdsall and Brige, 1966].

Для области, управляемой внешним источником тока (эквивалентная цепь генератора тока — разомкнутая цепь), который задан как функция времени, величина E при $k=0$ может изменяться во времени от E^n до E^{n+1} согласно соотношениям (4.77) или (4.79):

$$J_{\text{external}}^{n+1/2} = J_{\text{plasma}, k=0}^{n+1/2} + (E_{k=0}^{n+1} - E_{k=0}^n)/\Delta t, \quad (4.80)$$

где

$$J_{\text{plasma}, k=0}^{n+1/2} = 1/L \sum_{i=1}^N q_i v_i^{n+1/2}, \quad (4.81)$$

а величины v_i уже известны. Периодичность $E(k \neq 0)$ следует из условия сохранения полной нейтральности системы, но с допущением непериодичности потенциала ϕ .

Область, связанная с внешней цепью через сеточные плоскости a и b , называется прибором. В такой модели, которая может иметь ненулевой полный заряд, также должно быть задано уравнение внешней цепи, например

$$\Phi_0(t) - \Phi_L(t) = I(t) R \quad (4.82)$$

для внешнего сопротивления, см. работу [Birdsall and Brige, 1966]. Для внешних L и C используются обычные уравнения Кирхгофа (это рассмотрено в деталях в гл. 16). Потенциал внутри прибора теперь создается зарядами в области $0 < x < L$ и зарядами на электродах при $x=0, L$. В этом случае возможно раздельное задание граничных условий для поля и частиц в отличие от периодического варианта программы ES1. Необходимо знать и частное, и однородное решения уравнения Пуассона, где первое создается свободными зарядами внутри прибора (расчитывается так же, как и в случае периодической модели), а второе — зарядами при $x=0, L$ в виде

$$\Phi_{\text{homogen}}(x, t) = A(t)x + B(t) = (\Phi_L(t) - \Phi_0(t)) \frac{x}{L} + \Phi_0(t), \quad (4.83)$$

$$E_{\text{homogen}} = -[(\Phi_L(t) - \Phi_0(t))/L]. \quad (4.84)$$

Эти решения с $k=0$ должны быть добавлены к решениям с $k \neq 0$, которые получаются из решения уравнения Пуассона. Однако теперь граничные условия для уравнения Пуассона соответствуют случаю короткого замыкания

$$\phi_0(t) = 0 = \phi_L(t). \quad (4.85)$$

Поэтому необходимо изменить вычисления $\phi(x)$ и оставить периодические решения, содержащие только члены вида $\sin(kx)$. Самый простой способ получить такое решение при минимальных изменениях в программе — это доопределить функцию $\rho(x)$, заданную при $0 < x < L$, на интервал $L < x < 2L$, как показано на рис. 4.11. В случае, когда имеются нескомпенсированный заряд и наружные электроды, можно использовать также и прямой метод решения, описанный в приложении Д.

На основе периодической программы ES1 в работе [Birdsall, 1982] была промоделирована плазма вокруг зонда с плавающим потенциалом. Зонд представлял собой плоскость $x=L/2$, поглощающую любой пересекающий ее заряд. Границы $x=0$ и $x=L$ находились при нулевом потенциале. Рассматривались только частицы в области $0 < x < L/2$, плотность заряда при $L/2 < x < L$ получалась зеркальным отражением левой половины. Частицы, выходящие через плоскость $x=0$, зеркально отражались обратно в пространство взаимодействия. В качестве начальных условий задавалась горячая плазма с нулевым полным зарядом. Это условие продолжало выполняться при медленном перетекании частиц на зонд. После зарядки области перехода (примерно за три плазменных периода) текущий потенциал падает до значения, предсказанного стационарной кинетической теорией [Emmert et al., 1980]. В отсутствие источников и столкновений быстрые электроны будут поглощены в самом начале процесса и потенциал зонда медленно возрастет. Используя пару создающих источников (для поддержания нейтральности), в некоторой области x можно достичь в модели стационарного состояния с некоторыми флуктуациями вокруг него.

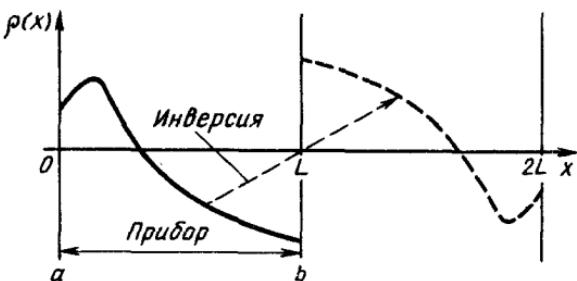


Рис. 4.11. Плотность заряда в приборе, $0 < x < L$. Плотность инвертируется относительно $x=L$ на интервал $L < x < 2L$, для того чтобы получить плотность при $0 < x < 2L$, которая является нечетной и имеет среднее значение $\langle \rho \rangle = 0$, и обеспечить сохранение только членов $\sin(kx)$ в $\rho(k)$ и, следовательно, в $\phi(k)$.

Задача

4.21. Нарисуйте пробный заряд и придумайте способ задания заряда в узлы сетки первого порядка для $x_i = -\Delta x/4, 0, \Delta x/2$ при эмитирующем стенке в $x=0$. Сделайте то же самое для последних четырех x_i для отражающей стенки при $x=0$. Повторите задание с использованием взвешивания нулевого порядка. Сравните ваши изобретения с алгоритмом, предложенным на рис. 16.17.

ГЛАВА 5

ЗАДАНИЯ ПО ИСПОЛЬЗОВАНИЮ ПРОГРАММЫ ES1

5.1. ВВЕДЕНИЕ

После знакомства с гл.1—4 читатель подготовлен к выполнению заданий по исследованию физики плазмы. В этой главе довольно детально исследуются некоторые виды колебаний, волн и неустойчивостей в плазме. Будут приведены необходимые для выполнения заданий теоретические сведения, например: амплитуды колебаний, необходимые для создания пересечений траекторий частиц, или ожидаемые максимальные значения электрического поля, достигаемые при развитии разных неустойчивостей. Целью приводимых ниже заданий по моделированию является изучение основных особенностей поведения лабораторной плазмы, начиная с холодной плазмы.

Глава 5 состоит из параграфов, связанных с заданиями по моделированию, для выполнения которых обычно требуется один или несколько расчетов, содержащих от нескольких десятков до тысячи временных шагов. В тех параграфах, где численное моделирование должно выполняться с помощью программы ES1, слово «задание» вынесено в заголовок параграфа. В них подробно объяснено, как выполнять моделирование, что следует наблюдать в процессе расчетов и что необходимо вычислить для того, чтобы объяснить наблюдаемые результаты. Изложение ведется от простых задач к более сложным. Студентам необходимо выполнить эти задания и записать их следующим образом: постановка задачи, теория явления, выбор параметров, результаты моделирования и сравнение их с теорией.

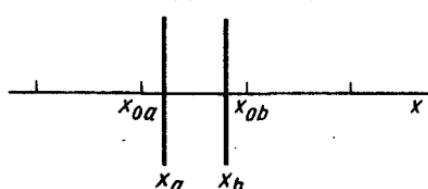


Рис. 5.1. Невозмущенное положение соседних частиц x_{0a} и x_{0b} и их возмущенное положение x_a и x_b

5.2. СВЯЗЬ НАЧАЛЬНЫХ ЗНАЧЕНИЙ РАЗНЫХ ВЕЛИЧИН В ЛИНЕЙНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Из теории обычно известно задание начальной плотности заряда или частиц, однако для начала работы программы необходимо задать начальные координаты и скорости всех частиц. Следовательно, для синусоидального возбуждения волны малой амплитуды нужно на основе известной плотности частиц определить их координаты и затем при $t=0$ задать все величины с соответствующими фазовыми и амплитудными соотношениями.

Положение частиц будем описывать координатами x_i . Рассмотрим две соседние частицы с координатами x_a и x_b , как показано на рис. 5.1. В одномерном случае однородной плазмы частицы имеют координаты x_{0a} и x_{0b} , и в нулевом приближении плотность частиц определяется выражением

$$n_0 = 1/(x_{0b} - x_{0a}). \quad (5.1)$$

Зададим возмущение начальных значений координат в виде

$$x_a = x_{0a} + \delta x_a; \quad x_b = x_{0b} + \delta x_b, \quad (5.2)$$

так что при некотором x , $x_a < x < x_b$, новая плотность будет равна

$$n(x) = n_0 + n_1(x) = 1/(x_b - x_a) = \quad (5.3)$$

$$= n_0 / [1 + (\delta x_b - \delta x_a) / (x_{0b} - x_{0a})]. \quad (5.4)$$

Другой подход состоит в рассмотрении в нулевом порядке некоторого количества жидкости между точками x_{0a} и x_{0b} , Δf . Тогда $n(x) = \Delta f / (x_b - x_a)$. Так как порядок a и b несуществен, заменим $(x_b - x_a)$ на $|x_b - x_a|$. Для того чтобы иметь возможность рассматривать несколько элементов жидкости, одновременно находящихся в точке x , будем вычислять $n(x)$ как сумму $\Delta f / |\Delta x|$. Пусть отклонение положения частиц от однородного является непрерывной переменной, которую можно рассматривать как смещение элемента жидкости

$$\delta x(x_0) \equiv x - x_0. \quad (5.5)$$

Тогда для $n(x)$ имеем соотношение

$$n(x) = n_0 / (1 + \partial \delta x / \partial x_0). \quad (5.6)$$

Предполагая, что n_0 и $n_1(x)$ заданы, а δx отыскивается, получаем

$$\partial \delta x / \partial x_0 = -n_1(x) / [n_0 + n_1(x)]. \quad (5.7)$$

Мы можем определить некоторую меру малости возмущения, замечая, что частицы соприкасаются при

$$x_b = x_a \text{ или } \partial \delta x / \partial x_0 = -1, \quad (5.8)$$

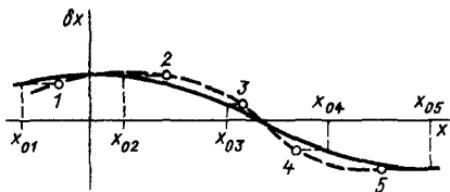


Рис. 5.2. Однородные положения частиц x_{0i} вместе с их синусоидально возмущенными положениями (точки), полученными по формуле $x_i = x_{0i} + \delta x(x_{0i})$. Наиболее близки к касанию (и пересечению) точки 3 и 4, где $\partial \delta x / \partial x_{0i}$ имеет наибольшее отрицательное значение: они касаются при $\partial \delta x / \partial x_{0i} = -1$ (для очень близко расположенных частиц, т. е. при большом числе частиц на длину волны возмущения). Можно рассмотреть $x_{02} - x_{03}$ как элемент жидкости, размещенный на интервале $x_2 - x_3$

давая пик плотности $n(x)$ [и $n_1(x)$] $\rightarrow \infty$ (рис. 5.2). Если мы интересуемся малосигнальным возбуждением, т. е. $|n_1(x)| \ll n_0$, то $|\partial \delta x / \partial x_{0i}| \ll 1$ и

$$\partial \delta x / \partial x \approx -n_1(x)/n_0. \quad (5.9)$$

В трехмерном случае соотношение (5.9) записывается в виде $\nabla \delta x = -n_1(x)/x_0$; вывод приведен в § 9.2.

Пусть возбуждение является периодическим, синусоидальным по x

$$n_1(x) = A \sin(kx), \quad (5.10)$$

с возмущенной плотностью заряда

$$\rho_1(x) = qn_1(x) = qA \sin(kx). \quad (5.11)$$

Предположим, что либо A , либо qA известны, так же как и k . Тогда смещение δx получается интегрированием (5.9) в виде

$$\delta x(x) = x - x_0 = A \cos(kx)/(n_0 k). \quad (5.12)$$

Возмущенное электрическое поле определяют из уравнения $\nabla E_1 = \rho_1/\epsilon_0$ также интегрированием по x :

$$E_1(x) = -qA \cos(kx)/(\epsilon_0 k). \quad (5.13)$$

Наконец, потенциал дается интегрированием напряженности поля ($\nabla \Phi_1 = -E_1$) или находится из уравнения $\nabla^2 \Phi = -\rho_1/\epsilon_0$:

$$\Phi_1(x) = qA \sin(kx)/(\epsilon_0 k^2). \quad (5.14)$$

Эти соотношения показаны на рис. 5.3 с амплитудами относительно начального возмущения плотности $|n_1| = A$ и соответствующими фазами. Возвращаясь назад от малого начального смещения ($x_1 \ll x_{02} - x_{01}$)

$$x = x_0 + x_1 \cos(kx), \quad (5.15)$$

получаем максимальную плотность частиц

$$|n_1| = A = (n_0 k) x_1 \quad (5.16)$$

с максимальным значением поля

$$|E_1| = qA/(\epsilon_0 k) = (qn_0/\epsilon_0) x_1, \quad (5.17)$$

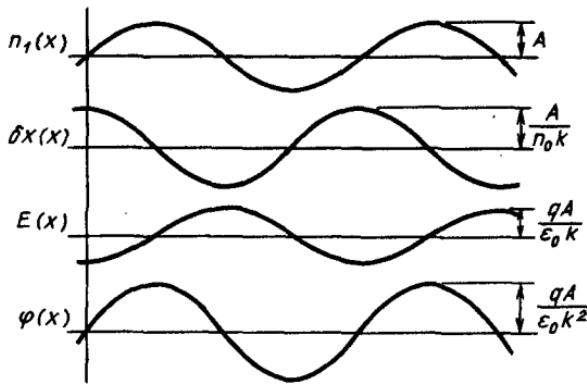


Рис. 5.3. Приведены малые возмущения по плотности $n_1(x)$ с амплитудой A , возмущения в координате δx , поле E и потенциале φ с относительными амплитудами

максимальным ускорением

$$q|E_1|/m = (q^2 n_0 / (m \epsilon_0)) x_1 = \omega_p^2 x_1 \quad (5.18)$$

и максимумом потенциала

$$|\varphi_1| = (qn_0 / (\epsilon_0 k)) x_1. \quad (5.19)$$

Из этих соотношений находим пиковое значение электростатической энергии:

$$\begin{aligned} (W_E)_{\max} &= (1/2) [\rho_1(x) \varphi_1(x)]_{\max} = \\ &= (1/2) q [n_1(x) \varphi_1(x)]_{\max} = \frac{q^2 n_0^2 x_1^2}{2 \epsilon_0}. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Для горячей плазмы, имеющей в нулевом приближении плотность кинетической энергии

$$W_K = n_0 m v_t^2 / 2, \quad (5.21)$$

получаем в первом приближении теории возмущения отношение средних значений W_E и W_K в виде

$$W_E/W_K = q^2 n_0 x_1^2 / (2 m \epsilon_0 v_t^2) = \omega_p^2 x_1^2 / (2 v_t^2) = \frac{1}{2} \left(\frac{x_1}{\lambda_D} \right)^2. \quad (5.22)$$

Ответ выглядит просто, но его необходимо правильно интерпретировать.

В процессе развития неустойчивости поле нарастает до некоторого значения E_{\max} , соответствующего величине $(W_E)_{\max}$, и обычно выполняется условие

$$(W_E)_{\max} \leq f W_K, \quad (5.23)$$

где f — величина, меняющаяся в пределах от 0,1 до 0,01. Если мы хотим наблюдать за развитием неустойчивости начиная с

малых амплитуд, когда применим линейный анализ и можно сравнить данные моделирования с теоретическими значениями инкрементов, то начальная энергия поля (W_E)_H должна составлять примерно 10^{-3} конечного ее значения, откуда следует, что

$$(W_E)_H \lesssim 10^{-3} (W_E)_{\max}; \quad (W_E)_{\max} \lesssim 10^{-2} W_K, \quad (5.24)$$

или грубо приближенно

$$(W_E)_H \leq 10^{-5} W_K. \quad (5.25)$$

Иначе говоря, для горячей плазмы с использованием соотношения (5.22) имеем

$$(x_1/\lambda_D)^2 \leq 10^{-5}, \text{ т. е. } x_1 \leq 3 \cdot 10^{-3} \lambda_D. \quad (5.26)$$

В случае холодной плазмы, например холодного пучка со скоростью v_0 и $W_K = (1/2)mv_0^2$, написанные выше соотношения будут справедливы, если заменить λ_D на величину v_0/ω_p . Способ оценки x_1 , описываемый соотношениями (5.21) — (5.26), довольно приближенный, но это все же лучше, чем не иметь никаких оценок.

Задачи

5.1. Используя равенство (5.6) для $n(x)$ и $\delta x = kB \sin(kx)$, изобразите $n(x)$ для $0 < x < 2\pi$ при $kB = 0,1, 0,5$ и $0,9$; нарисуйте также положения частиц (см. рис. 5.2). При $kB = 1$ $n(x) \rightarrow \infty$ при $kx = \pi$. Что вы можете сказать об использовании значений $kB > 1$ в (5.6), дающем $n(x) < 0$? Измените формулировку так, чтобы разрешить выполнение условия $\frac{\partial \delta x}{\partial x_0} < -1$; когда траектории частиц уже пересеклись.

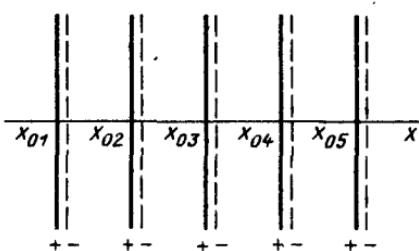
5.2. Покажите, что процедура возмущения в подпрограмме INIT дает начальное распределение в виде

$$f(x, v, 0) = [1 - kx_1 \sin(kx + \theta_x)]^{-1} f_{-v} [v - v_1 \sin(kx + \theta_v)], \text{ где } f_{-v} — \text{пространственно однородное распределение до возмущения.}$$

5.3. АНАЛИЗ ЛЕНГМЮРОВСКИХ КОЛЕБАНИЙ ХОЛОДНОЙ ПЛАЗМЫ

Понятие «холодная плазма» является внутренне противоречивым, так как в большинстве случаев плазма имеет по крайней мере одну скорость компоненту с тепловой энергией большей, чем $1 \text{ эВ} \approx 10^4 \text{ К}$, а также слегка сингулярным в силу предположения, что $\lambda_D \rightarrow 0$. Если ввести тепловую энергию так, чтобы $\lambda_D > 0$, то поведение плазмы существенно изменится. Тем не менее многое можно изучить, используя упрощение $v_{\text{thermal}} \rightarrow 0$, т. е. то, которое позволяет нам использовать простые начальные условия и легко интерпретировать полученные результаты. Первоначально ограничимся при вычислениях областью $k\lambda_D \lesssim 0,1$.

Рис. 5.4. Электрон-ионные пары в пространстве без сетки. Ионы полагаются массивными и остающимися вблизи положений равновесия x_{0i} . Если электроны отделены от ионов менее чем на половину равновесного расстояния между листами, то их движение будет колебательным, но не простым гармоническим. Электроны должны пересечь много ионов, чтобы дать приближение к плазменным колебаниям



Из книг по теории плазмы известно, что в холодной плазме заряженные частицы совершают простое гармоническое движение относительно равновесных положений (x_0), которое описывается соотношениями

$$\delta(x) \equiv x - x_0, \quad \delta \ddot{x} = -\omega_p^2 \delta x \quad (5.27)$$

с решениями

$$\delta x(t - t_0) = A(t_0) \cos \omega_p(t - t_0) + B(t_0) \sin \omega_p(t - t_0). \quad (5.28)$$

При обычном выводе соотношения (5.27) делают допущения, например $m_i \rightarrow \infty$ или считают, что частицы распределены в пространстве непрерывно, или траектории частиц не пересекаются. Вывод можно получить любым способом очень быстро, так что обычно серьезно не задумываются о сделанных допущениях или полученных результатах. Поэтому разберемся во всем этом подробнее.

Во-первых, очень просто учесть движение и ионов, и электронов. Результат будет тот же самый: частицы обоих видов колеблются гармонически с одной и той же частотой ($\omega^2 = \omega_p^2 = \omega_p^2 e + \omega_p^2 i$), но возмущение ионной плотности и скорости в m_e/m_i раз меньше, чем у электронов. Следовательно, мы полагаем ионы неподвижными для высокочастотных колебаний и устремляем отношение m_i/m_e к бесконечности.

Во-вторых, для вычислительных целей необходимо решить, как будут рассматриваться ионы или можно ли пренебречь их движением и следить только за электронами.

Предположим, что мы на мгновение забыли о пространственной сетке и рассматриваем одномерное однородное распределение электронов и ионов (листы) (рис. 5.4). Пусть каждый лист имеет заряд q или $-q$; система нейтральна, в том смысле, что полный заряд равен нулю. Если сместить электроны на расстояние δx , меньшее половины однородного расположения ионов [$\delta x < (1/2)(x_{02} - x_{01})$], то каждый электрон притягивается назад к своему родственному иону; электроны колеблются вокруг ионов. Но такое движение не будет гармоническим, так как сила, действующая на любую частицу, в одномерном случае

не зависит от расстояния. Детальное описание движения является сложной задачей, поэтому рассмотрим более простой случай пары частиц ион-электрон.

Чтобы преодолеть трудность описания гармонического движения, введем в рассмотрение большее число однородно расположенных ионов, например пять ионов с зарядом $q/5$ каждый на один электрон с зарядом q . Будем отклонять электроны от положения равновесия так, чтобы они пересекали несколько ионов в своем колебательном движении. Для изолированной группы ионов и одного электрона сила между ионами более или менее постоянна и изменяется скачком в момент пересечения иона электроном. Такая конструкция начинает приближенно описывать желаемую силу, пропорциональную отклонению от положения равновесия. Если ввести однородный фон, т. е. непрерывное распределение ионов, то все трудности описания силы исчезнут. Если добавить теперь пространственную сетку, размазывание ионов для создания однородного фона выполняется относительно легко. В периодической системе, где нет нескомпенсированного заряда на периоде системы, программа моделирования может нейтрализовать полный заряд, вводя однородный фон, равный разбалансу в заряде, просто обнулением среднего значения в ряду Фурье для плотности заряда $\rho(k=0)=0$. Или можно в программе ES1 присваивать значениям плотности заряда ρ_i величину плотности заряда ионов еще до вычисления плотности заряда движущихся частиц. С этой точки зрения полезно вывести линейную продольную (поле E направлено вдоль k) диэлектрическую проницаемость $\epsilon(\omega, k)$ для одномерной холодной плазмы с одним подвижным видом частиц (только электроны, $\frac{m_i}{m_e} \rightarrow \infty$).

Электроны могут иметь в нулевом порядке дрейфовую скорость v_0 вдоль вектора k . Так как поток является холодным, используем гидродинамические уравнения

$$m \frac{dv}{dt} = qE = F, \quad (5.29)$$

$$\nabla \rho v + \partial \rho / \partial t = 0, \quad J = \rho v, \quad (5.30)$$

$$\nabla \times H = J + \epsilon_0 \partial E / \partial t. \quad (5.31)$$

Для потока с дрейфовой скоростью v_0

$$v(x, t) = v_0 + v_1(x, t). \quad (5.32)$$

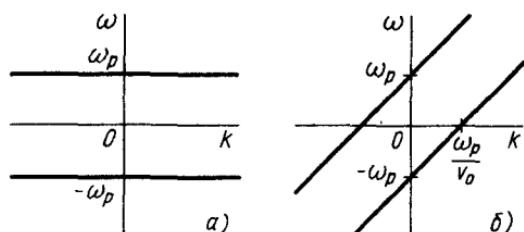
Полная производная в уравнении (5.29) будет равна

$$d/dt = \partial/\partial t + v \nabla. \quad (5.33)$$

Предполагая зависимость от x, t в виде $\exp(i k x - i \omega t)$, линеаризованное уравнение движения запишем в виде

$$-mi(\omega - kv_0)v_1 = qE_1 = F_1. \quad (5.34)$$

Рис. 5.5. Дисперсия холдной плазмы, или ω - k -диаграмма, показывающая плазменные колебания при $\omega = \omega_p$ (а), и аналогичная зависимость для электронов, дрейфующих со скоростью v_0 среди тяжелых ионов; показаны волны пространственного заряда (б)



Линеаризованное выражение для тока выглядит так:

$$\mathbf{J}(x, t) = \mathbf{J}_0 + \mathbf{J}_1(x, t) = \rho_0 \mathbf{v}_0 + \rho_0 \mathbf{v}_1 + \rho_1 \mathbf{v}_0, \quad (5.35)$$

а уравнение непрерывности записывается в виде

$$i\mathbf{k}(\rho_0 \mathbf{v}_1 + \rho_1 \mathbf{v}_0) - i\omega \rho_1 = 0 \quad (5.36)$$

или

$$\rho_1 = \rho_0 \mathbf{k} \mathbf{v}_1 / (\omega - \mathbf{k} \mathbf{v}_0). \quad (5.37)$$

Подстановка значения v_1 из (5.34) дает

$$n_1 = n_0 i \mathbf{k} F / m (\omega - \mathbf{k} \mathbf{v}_0)^2. \quad (5.38)$$

Подстановка же $\rho_1 = q n_1$ из (5.38) в (5.35) и использование уравнения

$$i\mathbf{k} \times \mathbf{H}_1 = \mathbf{J}_1 - i\omega \epsilon_0 \mathbf{E}_1 = -i\omega \epsilon \mathbf{E}_1 \quad (5.39)$$

приводит для диэлектрической проницаемости к выражению

$$\epsilon/\epsilon_0 = 1 - \omega_p^2 / (\omega - \mathbf{k} \mathbf{v}_0)^2. \quad (5.40)$$

Решения $\omega(k)$ для продольных волн получаются из условия $\epsilon=0$, корни которого имеют вид

$$\omega = \mathbf{k} \mathbf{v}_0 \pm \omega_p. \quad (5.41)$$

Они показаны на рис. 5.5. Эти решения описывают плазменные (ленгмюровские) колебания ($v_0=0$) или волны пространственного заряда при $v_0 \neq 0$.

Задачи

5.3. Получите движение электронных листов вокруг массивных ионных листов ($m_i/m_e \rightarrow \infty$) для бесконечной модели, показанной на рис. 5.4; сетка отсутствует. Нарисуйте силу, действующую на электрон, как функцию отклонения от его равновесного положения (x_0); получите потенциал силы ψ , определяемый равенством $\nabla \psi = -\mathbf{F}$, и изобразите потенциальную яму. Рассмотрите все пары частиц, возбужденные на длине волны, которая является кратным равновесного расстояния между частицами, $\lambda = m(x_{02} - x_{01})$. Ответ должен показать, что движение не является простым гармоническим и что частота колебаний зависит от начального возбуждения.

5.4. Повторите последнюю задачу, только на этот раз пусть будет, например, 5 ионных листов с зарядом $q_i = q_e$ (5 на каждый электронный лист). Если электрон отклоняется так, что пересекает только один равновесный лист,

то результат будет такой же, как и в задаче 5.3. Однако пусть электронным листам будет позволено пересекать несколько листов за один колебательный период; нарисуйте потенциальную яму $\psi(x)$ и покажите, что яма приближается к случаю гармонического движения (парабола). Затем пусть число ионных листов (на электронный лист) станет очень большим, так чтобы неподвижные ионы могли рассматриваться образующими непрерывный фон; покажите, что движение будет простым гармоническим с частотой

$$\omega^2 = |q/m| (n_0 q)_i / \epsilon_0 = |q/m|_e \rho_{0i} / \epsilon_0.$$

5.5. Пусть модель будет состоять из электронных листов в непрерывном неподвижном ионном фоне. Пусть начальное возбуждение будет создаваться скоростной модуляцией при однородном размещении электронов в пространстве

$$v(x, t=0) = v_1 \sin(k_0 x).$$

Определите значение v_1 , при котором начнется пересечение электронных листов, и покажите, какие листы пересекутся первыми, найдите время пересечения. Даны N_e электронов, однородно размещенных на длине $L = 2\pi/k_0$. Тщательно изобразите зависимость движения на траекторной диаграмме от t для большого и малого N_e .

Ответ. Пересечение происходит при отношении v_1/ω_p , равном расстоянию между листами при равновесии, равном отношению L/N_e .

5.6. Пусть модель будет периодической с периодом L , с N_e электронными листами и однородным неподвижным ионным фоном. Какое минимальное число листов $(N_e)_{\min}$ необходимо для получения чисто гармонических (плазменных) колебаний? Что случится, если $N_e = 1$? Для $N_e = 2$ каковы должны быть фазы скоростного или координатного возбуждения для получения колебаний; изобразите траектории частиц (\dot{x} в зависимости от t). Считаем $E(k=0)=0$.

5.4. ЗАДАНИЕ ПО КОЛЕБАНИЯМ ХОЛОДНОЙ ПЛАЗМЫ

Для первого задания, к которому вы приступаете, при первом запуске будут использоваться следующие параметры: $NSP=1$, $L=2\pi$, $DT=0.2$, $NT=150$, $NG=32$, $IW=2$, $EPSI=0$, все частоты графопостроения — по 20, рисуемые моды 1, 2, ... Для группы 1 $N=128$, $WP=1$, $WC=0$, $QM=-1.0$, $MODEL$ возбуждается при $X1=0.001$ (все остальные величины равны нулю). Некоторые из этих величин определяются в ES1, и их не требуется описывать при вводе.

Запустите программу с этими параметрами и внимательно изучите полученные графики. По моментальным фотографиям (в фиксированные моменты времени) $\rho(x)$, $\phi(x)$, $E(x)$ и фазовым траекториям убедитесь, что эти величины имеют соответствующие амплитуды и фазы, а также проверьте превращение кинетической энергии KE в потенциальную PE и обратно, которое характерно для простого гармонического движения и несущественно в горячей плазме, где $PE/KE \approx 92$

$\approx 1/N_D \ll 1$. Изменение полной энергии системы, если оно будет иметь место, должно быть много меньше PE . Нарушение этого условия ставит вопрос о правильности работы программы.

Сделав 150 шагов с $\omega_p \Delta t = 0,2$, программа к моменту $T=30$ проходит около $30/2\pi \approx 5$ периодов плазменных колебаний. При использовании значения $NG=32$ и 16 мод (от 0 до $k\Delta x=\pi$) первая мода становится различимой при $k\Delta x=\pi/16$; в этом случае

$$\omega(k) = \omega_p \{k\tilde{\kappa}(k)S^2(k)/K^2(k)\}^{1/2} \approx 0,9952\omega_p, \quad (5.42)$$

что весьма близко к ω_p . Однако, как показано на рис. 4.6, а, с ростом $k\Delta x$ частота ω уменьшается, так что при 150 шагах частоты мод высших порядков различаются хуже. Обоснование использования $S^2(k)$ в формуле (5.42) было дано в § 4.6, а для $\tilde{\kappa}(k)$ и $K^2(k)$ — в § 2.5. Результат (5.42) для силы усреднен по всем смещениям сетки и как таковой является приближенным; точный ответ имеет вид

$$\omega(k) = \omega_p \cos(k\Delta x/2). \quad (5.43)$$

Из графиков $ESE(k)$ для каждой зависимости k от времени можно получить частоту любой моды за один запуск. Помните, что $\rho_k \Phi_k$ суть произведение $(\cos\omega t)(\cos\omega t)$ для стоячей волны, дающее удвоенную частоту 2ω . Используйте достаточно большое возбуждение моды 1, так чтобы все моды были заметны, но не слишком большое, чтобы движение было почти линейным и моды были почти независимы. Нарисуйте оцененное из формулы (5.42) ω , точное значение (5.43) и ваши измеренные величины в зависимости от $k\Delta x$ (от 0 до π); обозначьте полосы ошибок ваших измерений. Оцененное из (5.42) ω не включает в себя эффект пространственного наложения частот, так что оцененные и измеренные величины не должны согласовываться, однако ваши результаты должны согласовываться очень хорошо с точным вычислением (5.43), которое включает все наложения частот.

Исследуйте различные методы взвешивания: NGP, CIC и сохранение энергии ($IW=1,2,3$). Выясните, с чем связаны различия в дисперсионных зависимостях: с формой частиц, со способом описания их движения или с конечно-разностной аппроксимацией величин $\nabla\phi$, $\nabla^2\phi$, а также насколько хорошо при $IW=3$ сохраняется энергия с увеличением шага интегрирования Δt . Описание метода моделирования, уделяющего особое внимание сохранению энергии, содержится в части II книги. Для выполнения этого задания достаточно знать, что при $IW=3$ в пределе $\Delta t \rightarrow 0$ сохраняется энергия (но не импульс) системы.

Попробуйте использовать нестандартное для программы ES1 размещение 32 частиц в 16 ячейках (по 2 частицы на ячейку), когда частицы будут находиться в узлах сетки и между

ними. Отметьте зазубрины в плотности при малом синусоидальном возмущении, которые удваиваются эффектом «кайзера Вильгельма». Используйте эти начальные условия без задания какого-либо возмущения. Попробуйте использовать не целое отношение NP/NG , а, например, 33 частицы и 16 ячеек, $IW=2$, и не задавайте начального возмущения. Объясните зазубрины в плотности заряда при $t=0$ (указание: нарисуйте плотность заряда для трех частиц, размещенных в двух ячейках сетки). Теория называет это эффектом наложения частиц, его подробное изложение приведено в работе [Denavit, 1974].

Попробуйте сделать $\omega_p \Delta t > 2$ и получите описанную в § 4.2 неустойчивость метода с перешагиванием. Постройте график зависимости комплексной величины ω от $\omega_p \Delta t$ для случая возбуждения от одной моды при малых $k \Delta x$. Таким образом вы сможете показать, что при $\omega_p \Delta t > 2$ сдвиг фаз на каждом шаге равен π , — так называемое четно-нечетное разделение? Учтите, что неустойчивость может быть слабо различимой, если не принять специальных мер; исключение составляет случай, когда не сохраняется энергия системы.

Задайте первую группу частиц электронами ($q_1 < 0$) и вторую группу — подвижными ионами ($|q_1| = q_2 > 0$) с соотношением $(\omega_{p1}/\omega_{p2})^2 = m_2/m_1$ порядка 100 и с $N_1 = N_2$. Проверьте визуально движение, учитывая, что максимальные величины плотности и скорости электронов в m_2/m_1 раз больше, чем те же значения для ионов. Добавьте какие-либо дополнительные необходимые виды диагностики по своему выбору.

Дополнительные предложения. Возбудите волны с большой амплитудой, достаточной, чтобы частицы касались друг друга и пересекались. Опишите распад волны. Используйте задание параметров: $x_1 = 0$, большое значение v_1 и рассмотрите нечетные моды.

Почему в плазменных колебаниях с малой амплитудой PE и KE имеют отчетливые нули, указывающие на точный обмен между PE и KE , но имеют различные максимальные значения?

Возбудите плазму на короткой длине волны, выше $k \Delta x = \pi$ и посмотрите, что случится. Должно проявляться наложение частот. Например $NG=16$ имеет 8 мод (9 косинусов и 7 синусов); следовательно, мода 10 даст моду 6 на сетке, а возбуждение моды 12 даст моду 4.

Возбудите плазму локально с малой амплитудой, используя $IW=2$ и затем $IW=3$, и понаблюдайте за распространением возмущения от области возбуждения. Объясните различия в этих двух случаях. Указание: рассмотрите, каковы групповые скорости волн для двух видов взвешивания (см. гл. 8 и 10).

5.5. ЗАДАНИЕ ПО ГИБРИДНЫМ КОЛЕБАНИЯМ

При наложении однородного статического магнитного поля B_{0z} , перпендикулярного плоскости (x, y) , плазменные колебания превращаются в гибридные.

Уравнение движения для любой частицы (т. е. листа) имеет вид

$$\delta \ddot{x} = -\omega_H^2 \delta x, \quad (5.44)$$

где δx обозначает смещение по x или y от ведущего центра частицы и гибридная частота определяется так:

$$\omega_H^2 \equiv \omega_p^2 + \omega_c^2. \quad (5.45)$$

Движение частицы дается выражениями [при $v_{x1}(0) = 0, y_1(0) = 0$]

$$x = x_0 + x_1 \cos(\omega_H t), \quad (5.46)$$

$$y = y_0 + (v_{y1}/\omega_H) \sin(\omega_H t), \quad (5.47)$$

которые являются уравнениями эллипса с центром x_0, y_0 (ведущий центр) в плоскости (x, y) .

Предположим, что мы хотим для некоторого значения k определить $\omega_H(k)$ путем моделирования, задавая начальное возмущение с тем же k , т. е. $x_1 \sim \sin kx$ и $v_1 = 0$, как и в модели плазменных колебаний при $B_0 = 0$. Результат (как вы сможете увидеть сами) не является чистым гибридным колебанием любой из сеточных величин, однако каждая частица колеблется с частотой ω_H , просто не соответствующей фазе с другими частицами, дающей когерентный пространственный образ — моду. Желаемые гибридные колебания получаются при использовании возмущения по скорости v_x с $x_1 = 0$ или при создании согласованных возмущений по x и y (v_y), таких, например, как

$$v_y = -\omega_c x_1, \quad (5.48)$$

которые устраниют дрейф по y и постоянное ускорение по x , т. е. ведущий центр остается в покое. Используйте, например, $x_1 = A \cos kx$ и $v_y = -\omega_c A \cos kx$; гибридные колебания должны быть такими же чистыми, как и плазменные колебания (см. § 5.4). Для того чтобы получить значения ω для всех k за один запуск, используйте начальное малое случайное возбуждение по скоростям v_x , применяя $VT1$ и $X1=0$. В этой одномерной модели нет никакой необходимости вводить согласованное смещение по y . Или используйте случайное возбуждение по скоростям v_y , но с согласованным смещением по x [см. (5.48)].

Постройте зависимость ω от k , как в плазменных колебаниях, и сравните результат с предсказанием

$$\omega(k) = (\omega_p^2 \cos^2(k \Delta x / 2) + \omega_c^2)^{1/2}. \quad (5.49)$$

Добавьте программу построения траекторий одной частицы в плоскости (x, y) и постройте траектории нескольких характер-

ных частиц. Проверьте предсказанные размеры эллипсов с вычисленными значениями.

Выполните гибридное моделирование с возбуждением одной моды на короткой длине волны $\pi/2 < k\Delta x < \pi$. Используйте малое начальное смещение x_{11} , если скорость по y равна $-\omega_c x_{11}$. Заметьте, что ESE колеблется с частотой $2\omega_H$ с ровной огибающей, как и ожидалось, в то время как КЕ также колеблется с частотой $2\omega_H$, но имеет огибающую, которая слабо нарастает и уменьшается с частотой биений $\omega_H - \omega_c \approx \omega_p^2/2\omega_c$. Радиус орбиты отдельной частицы медленно увеличивается, а затем уменьшается. Этот результат наблюдался в работе [Thomas and Birdsall, 1980] и показывает, что возбуждение при больших $k\Delta x$ должно быть устранено.

Задачи

5.7. Проверьте формулы (5.44)–(5.47). Получите движение ведущего центра при произвольном начальном возбуждении.

5.8. (Предложена Джоном Кэри.) Существует вихревая мода холодной замагнеченной плазмы, в которой поле E продольное, нормально полю B_0 , частота $\omega = 0$. Можете ли вы обнаружить эту моду? Эта ли мода возбуждается при $x_1 \neq 0, y_1 = 0$? Что дает дрейфовое движение по y ? См. работы [Taylor and McNamara, 1971; Okuda and Dawson, 1973; Montgomery and Joyce, 1974; Langdon, 1969].

5.9. (Предложена Робертом Литтлджоном.) Используйте гидродинамическое уравнение непрерывности, уравнение движения для v_x и v_y и $\nabla D = 0$ для получения уравнения

$$\partial^3 n_1 / \partial t^3 + \omega_H^2 \partial n_1 / \partial t = 0$$

с решением вида

$$n_1(x, t) = n_1(x, 0) + [\dot{n}_1(x, 0)/\omega_H] \sin \omega_H t + \\ + [\ddot{n}_1(x, 0)/\omega_H^2] (1 - \cos \omega_H t).$$

Получите $\dot{n}_1(x, 0)$ и $\ddot{n}_1(x, 0)$, выраженные через $n_1(x, 0)$, $v_x(x, 0)$ и $v_y(x, 0)$. Покажите, что при начальном смещении $v_x(x, 0) = 0 = v_y(x, 0)$ и $\omega_c \approx \omega_p$, решение получается в виде

$$n_1(x, t) \approx 1 + \cos(\sqrt{2}\omega_p t).$$

Оно имеет только один нуль на гибридном цикле. Аналогично выражение

$$\rho \phi^* \sim E^2 \sim (1 + \cos(\sqrt{2}\omega_p t))^2$$

имеет только один нуль при $\omega_p \sqrt{2}t = 2\pi$, так что если мы насчитали два нуля (или два пика) в цикле для ESE, то мы должны потребовать выполнения условия $\omega = \omega_H/2$, что неправильно. Получите все решения v_x , v_y и E ; отметьте дрейфовое движение по y при любых начальных возбуждениях, исключая v_x .

5.6. ЛИНЕЙНЫЙ АНАЛИЗ ДВУХПУЧКОВОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ

Рассмотрим два противоположно направленных потока заряженных частиц, как это схематически показано на рис. 5.6. Модели с относительным движением между двумя системами или потоками заряженных частиц изучались во всех деталях начиная с работ [Haeff, 1949; Pierce, 1948]. Полное понимание нелинейного поведения противоположных потоков пришло много позже — после моделирований, выполненных в работе [Dawson, 1962]. Жидкостный аналог солитонов был дан намного раньше — в 80-х годах прошлого столетия Герцем, об этом можно получить исчерпывающую информацию в книгах по гидродинамике и акустике [Lamb, 1945; Rayleigh, 1945]. Можно легко показать, что система противоположных потоков неустойчива. Когда два потока двигаются друг через друга, причем одна длина волны проходит за один период плазменной частоты, то возмущение плотности в одном потоке подкрепляется силами, возникающими из-за группировки частиц в другом потоке, и наоборот; следовательно, $\Delta n_1 \sim n_1$, так что возмущение нарастает во времени экспоненциально. Это простое соотношение было получено в 1948 г. профессором Chodorow в Стэнфордском университете (и содержалось в неявном виде в диссертации [Birdsall, 1951]) для двух потоков, движущихся в одном направлении [Chodorow, 1964].

Фазовое соотношение, необходимое для усиления, представим в виде

$$v_{\text{relative}}(2\pi/\omega_p) = 2\pi/k, \quad (5.50)$$

где в случае относительной скорости $v_{\text{relative}} = v_0 - (-v_0) = 2v_0$ получаем

$$k = \omega_p / 2v_0. \quad (5.51)$$

Это очень близко к тому, что получается из точного анализа для максимального инкремента.

Продольную линейную диэлектрическую проницаемость для двух независимых холодных потоков можно получить, как это было сделано в § 5.3, используя уравнения движения и непрерывности отдельно для каждого потока и добавляя токи каждого потока в уравнение поля. Результат для двух потоков с дрейфовыми скоростями v_{01} и v_{02} имеет вид

$$\epsilon(\omega, k)/\epsilon_0 = 1 - \omega_{p1}^2/(\omega - kv_{01})^2 - \omega_{p2}^2/(\omega - kv_{02})^2. \quad (5.52)$$

Этот результат также получается непосредственно из обычной системы Власова — Пуассона при задании распределения скорости в виде двух δ -функций:

$$f_0(v) = A\delta(v - v_{01}) + B\delta(v - v_{02}). \quad (5.53)$$

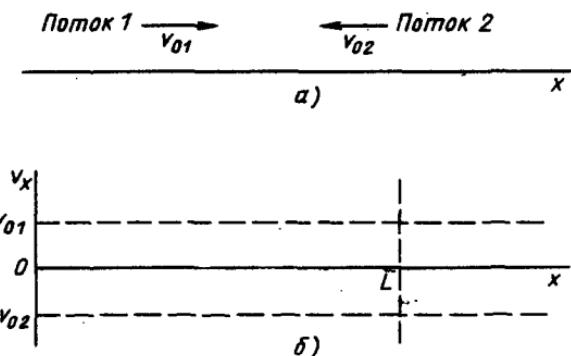


Рис. 5.6. Два противоположных потока в лабораторной системе отсчета (а); два потока в фазовом пространстве в начале задачи при $t=0$ (б) и потоки в пространстве скоростей при $t=0$ и $t>0$ (в)

Система из N независимых холодных потоков дает сумму по потокам (или индексу s)

$$\epsilon(\omega, k)/\epsilon_0 = 1 - \sum_{s=1}^N \omega_{ps}^2 / (\omega - kv_{0s})^2. \quad (5.54)$$

Обобщение суммы на интеграл при $N \rightarrow \infty$ должно выполняться аккуратно, как это было аналитически сделано в работе [Dawson, 1980], а при аппроксимации гладкого распределения $f(v)$ в моделировании набором дискретных пучков — в работах [Byers, 1970; Gitomer and Adam, 1976]; подробности обсуждаются ниже, в гл. 16.

Решения для комплексной частоты ω и действительного волнового вектора k , т. е. абсолютная неустойчивость для случая одинаковых, но противоположно направленных потоков, у которых $\omega_{p1} = \omega_{p2} \equiv \omega_p$, $v_{01} = -v_{02} \equiv v_0$, получаются из уравнения $\epsilon(\omega, k) = 0$. Это уравнение четвертой степени с четырьмя независимыми решениями вида

$$\omega = \pm (k^2 v_0^2 + \omega_p^2 \pm \omega_p (4k^2 v_0^2 + \omega_p^2)^{1/2})^{1/2}. \quad (5.55)$$

Для (5.55) справедливы следующие характеристики корней:

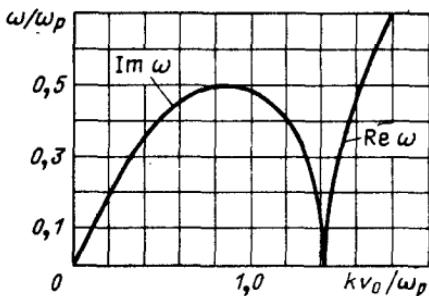
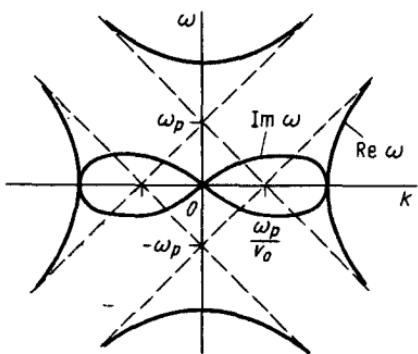


Рис. 5.7. Дисперсионная диаграмма $\omega - k$ для двух одинаковых противоположных потоков: действительных k и комплексных ω . Несвязанные волны пространственного заряда показаны штриховыми линиями. Для каждого k существует четыре значения ω , которые соответствуют четырем линейно независимым волнам

Рис. 5.8. Инкремент $Im \omega$ для двух противоположных потоков

$$\text{при } 0 < k v_0 / \omega_p < \sqrt{2} \begin{cases} \text{два действительных корня,} \\ \text{два мнимых корня,} \end{cases} \quad (5.56)$$

$$\text{при } \sqrt{2} < k v_0 / \omega_p \text{ все четыре корня действительны,} \quad (5.57)$$

$$\text{при } k v_0 / \omega_p = \sqrt{3}/2, \quad Im \omega = \omega_p / 2 \text{ максимальный инкремент.} \quad (5.58)$$

Указанное поведение схематически показано на рис. 5.7, изменение $Im \omega$ приведено на рис. 5.8 более детально. В этой модели, где есть нарастание при $Im \omega > 0$, получаем $Re \omega = 0$ в случае максимального инкремента. Отсутствие осциллирующей части при нарастании возмущения свидетельствует о том, что не все правильно описано. Смысл рис. 5.8 состоит в пояснении существования минимальной длины неустойчивости L , в этой модели необходимо выполнение условия

$$\omega_p L / v_0 > 2\pi / \sqrt{2}, \quad (5.59)$$

для того чтобы получить нарастание. Это то же самое, что и условие (5.56), если использовать $L = 2\pi / k_0$, где k_0 — наименьшее волновое число системы. Нарастание, которое начинается при малой амплитуде, продолжается, пока течение не разрушится; в конце процесса распределение скоростей частиц становится почти максвелловским. Следовательно, мы говорим, что «стabilizирующиеся потоки термализовались», но не посредством столкновений частиц. Коллективные эффекты на длинных волнах (λ значительно больше расстояния между частицами) создают большие электрические поля, рассеивающие частицы в фазовом пространстве.

С ростом неустойчивости в графике зависимости $f(v)$ заметны два изменения (см. рис. 5.6) для $t > 0$. Ширина каждого пучка увеличивается [измеряют ширину прямо на графике $f(v)$ или значением $(\bar{v}^2 - \bar{v}'^2)$ для одного потока], что рассматривается как увеличение температуры каждого пучка (но если бы электрическое поле было вдруг выключено — и вы должны были бы попробовать это сделать при моделировании, разброс может уменьшиться). Дрейфовая или средняя скорость \bar{v} уменьшается. Поскольку v_{thermal} увеличивается, а v_{drift} уменьшается, можно ожидать, что условия линейной стадии неустойчивости будут нарушены, экспоненциальный рост прекратится (как это показано в работе [Stringer, 1964]), а порог нарастания для двух электронных пучков будет достигнут при $v_{\text{drift}} \approx 1,3v_{\text{thermal}}$. Однако в момент достижения порога условия линейности уже существенно нарушены возмущением плотности заряда, сравнимым с невозмущенным значением; частицы в каждом потоке почти пересекают своих соседей и сворачиваются в вихри в фазовом пространстве, т. е. становятся захваченными. Следовательно, нарастание продолжается, хотя можно ожидать изменения в характере нарастания, например отхода от экспоненциального роста во времени в момент, когда v_t превышает $\bar{v}/1,3$. Это следует помнить при выполнении задания. Конечно, ES1 может легко быть запущена с горячими пучками, при этом следует показать нарастание при $v_0 = 2v_t$ (см. § 5.9) и устойчивость при $v_0 = v_t$.

Задачи

5.10. Получите решение для четырех волн, данное в (5.55). Покажите, что $(\text{Im}\omega)_{\max}$ достигается при выполнении условия (5.58).

5.11. Пусть при $t=0$ заданы $x_{11}(x)$, $v_{11}(x)$, $x_{21}(x)$ и $x_{21}(x)$ (возмущение первого порядка по положению и скорости) в виде (с одним значением k)

$$x_{11}(x) = \text{Re}[x_{11} \exp(i k x)]$$

или

$$x_{11}(x) = x_{11} \cos(kx).$$

Исходя из этих четырех величин, получите возбуждение четырех волн, т. е. найдите коэффициенты A_n и B_n в разложении

$$\phi(x, t) = \sum_{n=1}^4 A_n \exp i(\omega_n t - kx),$$

$$\rho(x, t) = \sum_{n=1}^4 B_n \exp i(\omega_n t - kx).$$

Вы сможете использовать начальное возмущение $\rho_{11}(x)$, а не $x_{11}(x)$, если вам хочется провести переход, показанный в § 5.2. Вы можете выбрать для преобразования Лапласа уравнения (5.29), (5.30) и (5.31), чтобы получить

решение. Изобразите $\phi(t)$ [или $\ln\phi(t)$] при фиксированном x и покажите преобладание нарастающей волны с увеличением t .

5.12. Покажите, что нарастание с $\text{Im}\omega = 0,5\omega$, означает рост на 27 дБ по мощности за один плазменный период. Это очень большой рост, начиная например с шума 10^{-12} Вт до мощности электростанции 10^9 Вт (210 дБ) менее чем за 10 плазменных периодов. Очевидно, что любое лабораторное двухпоточное течение сохраняется только несколько плазменных периодов.

5.7. ПРИБЛИЖЕННЫЙ НЕЛИНЕЙНЫЙ АНАЛИЗ ДВУХПОТОКОВОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ

Начиная выполнять задания по моделированию, можно довольно смутно представлять себе, что в конце концов будет получено. Однако начинать его совсем вслепую не очень разумно, особенно если нужно исследовать неустойчивость. Обычными проблемами являются плохие параметры или начальные условия (слишком шумные, неправильно возбужденные моды, нет необходимых мод и т. д.) или недостаточные виды диагностики [недостаток разрешения при малых изменениях в $f(v)$, нет временного анализа Фурье и т. д.]. Общей проблемой является отсутствие точного знания, при каком уровне энергии неустойчивость насыщается и какое разрешение по t и $x(\omega$ и $k)$ необходимо на этом уровне. Обычно полезно сделать несколько оценок ожидаемого уровня насыщения и сдвига, если он имеется, по ω и k . Эти оценки не должны восприниматься очень серьезно, но они могут быть весьма полезны в выборе начальных условий, параметров и диагностик. Желательно также сделать несколько предварительных коротких запусков для выявления непредвиденных трудностей.

Два противоположных потока, каждый плотностью n_0 , вначале имеют только дрейфовую энергию. Пусть потоки имеют один и тот же знак заряда ($q_1 q_2 > 0$), дрейфуя через фоновые неподвижные заряды противоположного знака и плотности:

$$\rho_{\text{background}} = -2n_0 q. \quad (5.60)$$

При взаимодействии потоки образуют большие сгустки заряда, которые ускоряют либо замедляют заряды своими большими электрическими силами. Энергия электрического поля получается из начальной кинетической энергии дрейфового движения. Следовательно, можно ожидать (грубо), что выполняется баланс энергий

$$(TE)_{t=0} = (KE)_{\substack{\text{drift} \\ t=0}} \rightarrow (KE)_{\substack{\text{drift} \\ t>0}} + (KE)_{\text{thermal}} + (PE)_{\text{fields}}, \quad (5.61)$$

и дрейфовая энергия должна уменьшаться, когда возникают поля из-за развития неустойчивости, т. е. оба потока в целом замедляются.

Если параметр линейного анализа $\omega_p L/v_0$ вычислять по средним значениям

$$\omega_p^2 L^2/v_0^2 \rightarrow (q/m)(-\rho_{\text{background}}/\epsilon_0)L^2/\langle v \rangle^2, \quad (5.62)$$

то при постоянном $\rho_{\text{background}}$ это отношение увеличивается с уменьшением $\langle v \rangle$. Это может увеличивать или уменьшать $\text{Im}\omega$ (см. рис. 5.8), но не передвигает систему в область, где нарастание отсутствует. При потоках частиц с зарядами одного знака ($q_1 q_2 > 0$) взаимодействие стремится к созданию сгустков заряда, удаленных друг от друга на $\lambda/2$. Это группирование создает электрическое поле на второй пространственной гармонике (т. е. на удвоенном начальном k), следовательно, эта длина волны не должна быть сглажена при моделировании. Для потоков зарядов с различным знаком $q_1 q_2 < 0$, например электронов и позитронов, группирование будет другим. Конечно, нелинейная генерация пространственных гармоник ($k \rightarrow 2k, 3k, 4k$ и т. д.) — это визитная карточка большинства неустойчивостей, в которых начальные синусоидальные сгустки обостряются до шипов. Эти гармоники могут качественно изменить развитие неустойчивостей, см. работу [Ishihara e.a., 1980, 1981].

Первая догадка о поведении при больших амплитудах: пусть заряды потока на некоторой стадии образуют два синусоидальных сгустка на расстоянии $L/2$, как показано на рис. 5.9; любое большее группирование дало бы много гармоник. Средние значения $\langle \rho \rangle$, $\langle E \rangle$, $\langle \phi \rangle$ равны нулю, как требуется в периодических моделях. Присутствует только одна гармоника

$$k_2 = 2k_0, \quad k_0 \equiv 2\pi/L, \quad (5.63)$$

связанная с

$$\rho_{\text{total}}(x) = -|\rho_b| \cos(2k_0 x), \quad (5.64)$$

$$E(x) = -|\rho_b| \sin(2k_0 x), \quad (5.65)$$

$$\phi(x) = -|\rho_b| \cos(2k_0 x)/(\epsilon_0 4k_0^2). \quad (5.66)$$

Вычисление начинаем, задав два вопроса: 1) превышает ли полная энергия электрического поля PE полную начальную кинетическую энергию KE_0 , которая равна полной энергии системы TE ? Если так, то необходимо уменьшить оценку ρ_{total} ; 2) настолько ли велик потенциал, чтобы отражать частицы? Ответ на первый вопрос получается из соотношения $(PE)_{\text{total}}/TE$:

$$\frac{(PE)_{\text{total}}}{TE} = \frac{1/2\epsilon_0 \int_0^L E^2 dx}{2n_0 (1/2mv_0^2)L} =$$

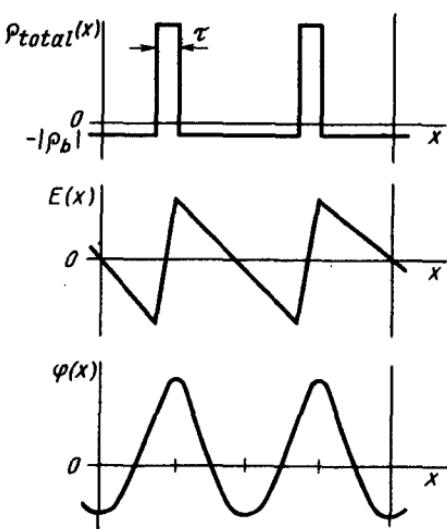
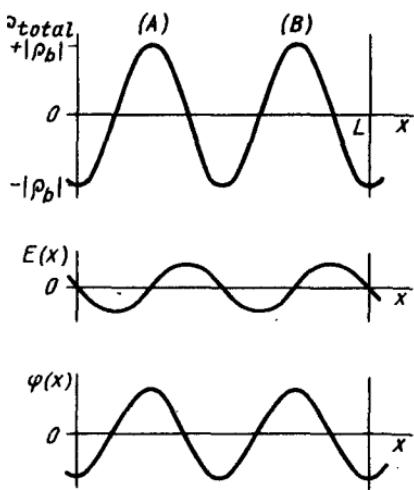


Рис. 5.9. Плотность большой амплитуды, поле и потенциал для двух противоположных потоков с одинаковыми знаками заряда в неподвижном фоне зарядов другого знака, плотность заряда ρ_b . Физически заряды одного потока стремятся оказаться в сгустке A или в другом сгустке B. Начальное малосигнальное нарастание имело одну длину волн в этом пространстве, $\lambda = L$

Рис. 5.10. Плотность большой амплитуды, поле и потенциал для двух противоположных потоков одного знака заряда с очень плотными сгустками толщиной $\tau \ll L$.

$$= \frac{\rho_b^2 L^2}{64\pi^2 \epsilon_0 n_0 m v_0^2} = \left(\frac{\omega_p L}{v_0} \right)^2 / 32\pi^2. \quad (5.67)$$

При пороге неустойчивости $\omega_p L / v_0 = 2\pi\sqrt{2}$, следовательно, нет проблем, так как

$$\frac{(PE)_{\text{total}}}{TE} = 1/16. \quad (5.68)$$

При $\omega_p L / v_0 = 4\pi/\sqrt{3}$ инкремент максимальен, $\text{Im}\omega = \omega_p/2$ и мы имеем

$$\frac{(PE)_{\text{total}}}{TE} = 1/6, \quad (5.69)$$

что все еще меньше единицы и, следовательно, физично; конечно, это значение подразумевает, что можно ожидать более плотного группирования, чем предполагалось. Ответ на второй вопрос получается из соотношения для одночастичных решений

$$\begin{aligned} |q\Phi|_{\max} / (1/2mv_0^2) &= -q\rho_b / (\epsilon_0 4k_0^2 1/2mv_0^2) = \\ &= \left(\frac{\omega_p L}{v_0} \right)^2 / 8\pi^2, \end{aligned} \quad (5.70)$$

которое в 4 раза больше отношения $(PE)_{\text{total}}/TE$. Следовательно, при пороговом значении это отношение равно $1/4$ и частица со скоростью v_0 не может быть остановлена при $|q\phi|_{\max}$. При максимальном инкременте, однако, $|q\phi|_{\max} = -2/3(1/2mv_0^2)$, что указывает на то, что частица с начальной скоростью v_0 будет существенно замедлена потенциальным гребнем. Только при $\omega_p L/v_0 > 4\pi/\sqrt{3}$, и именно когда $\omega_p L/v_0 = \sqrt{8\pi^2}$, можно ожидать, что частица будет остановлена и повернет назад. Из того факта, что отношение энергий частицы в 4 раза больше, чем отношение полных энергий, следует, что механизм, ограничивающий рост неустойчивости, обусловлен отражением частиц, а не появлением плотных сгустков. Для изменяющихся во времени полей пренебрегите, пожалуйста, ошибкой, возникающей из-за приравнивания $1/2mv_0^2$ и $|q\phi|$. В качестве второй догадки рассмотрим более плотное группирование. Предположим, что имеются сгустки нулевой толщины (δ -функции), как показано на рис. 5.10. Для толщины сгустков τ , близкой к нулю (это означает, что $\tau/L \ll 1$), легко получить поле и потенциал в области $1/0 < x < L/4$:

$$E_1(x) = \rho_b x/\epsilon_0 \quad (\rho_b < 0), \quad (5.71)$$

$$\varphi_1(x) = A + Bx^2. \quad (5.72)$$

Значение B находим из определения $\nabla\varphi = -E$; A получим из условия $\langle\varphi\rangle = 0$. В результате имеем

$$\varphi_1(x) = \rho_b (L^2/96 - x^2/2)/\epsilon_0. \quad (5.73)$$

Из этой модели следует соотношение

$$\frac{(PE)_{\text{total}}}{TE} = 1/48 (\omega_p L/v_0)^2, \quad (5.74)$$

а также

$$|q\phi|_{\max} (1/2mv_0^2) = 1/24 (\omega_p L/v_0)^2. \quad (5.75)$$

Эти значения соответственно в $2\pi^2/3$ и $\pi^2/3$ раз больше, чем значения, полученные ранее, и находятся теперь в соотношении 1 к 2 (ранее 1 к 4). При максимальном значении $\text{Im}\omega$ величина $\omega_p L/v_0 = 4\pi/\sqrt{3}$ и мы получаем

$$\frac{(PE)_{\text{total}}}{TE} = \pi^2/9 \approx 1,09, \quad (5.76)$$

$$|q\phi|_{\max} / (1/2mv_0^2) = 2\pi^2/9 \approx 2,19. \quad (5.77)$$

Оба значения превышают единицу, причем (5.76) указывает, что в системе нет достаточной кинетической энергии для создания сгустков нулевой толщины, а (5.77) означает, что частицы, двигающиеся со скоростью v_0 , были бы остановлены и отражены такими сгустками и никогда не были бы захвачены.

Нашей третьей догадкой должно быть допущение конечной, но все еще малой толщины сгустков. Используя эту модель, получаем отношение

$$\frac{(PE)_{\text{total}}}{TE} = 1/48 \left(\omega_p L / v_0 \right)^2 (1 - 2\tau/L)^2. \quad (5.78)$$

При максимальном инкременте, как и в равенстве (5.76), приравнивание $(PE)_{\text{total}} = TE$ (означающее, что вся энергия теперь содержится в поле и частицы полностью остановлены) требует, чтобы

$$\pi^2/9 = (1 - 2\tau/L)^{-2} \quad (5.79)$$

или

$$\tau/L = (1 - 3/\pi)/2 \approx 0,022, \quad (5.80)$$

что означает наличие в этом случае довольно тонких сгустков.

Ответ для $\frac{|q\phi|_{\max}}{1/2mv_0^2} = 1$, составленный для рассмотрения в задаче,

вероятно, указывает на несколько более толстый сгусток. Эти оценки, обычно называемые вычислениями на обратной стороне конверта, выполняются легко, однако они полезны, если осваиваются новые области. Настоящий интерес приходит от сравнения этих оценок с моделирующими запусками, которые подтверждают некоторые догадки и опровергают другие и тем самым продвигают теорию и моделирование вперед.

Задачи

5.13. Получите отношение $|q\phi|_{\max}/1/2mv_0^2$ для сгустка конечной толщины (рис. 5.10), для того чтобы скорректировать равенство (5.75) в случае сгустка конечной толщины. При какой толщине это соотношение становится равным 1?

5.14. Пусть два пучка со скоростями v_0 и $-v_0$ термализуются вследствие неустойчивости к максвелловскому распределению с уровнем поля $(PE)_{\text{total}} \ll (KE)_{\text{total}}$. Выразите v_i через v_0 .

5.15. Прочтите работу [Friedberg and Armstrong, 1968]. Можете ли вы придумать еще оценки, основанные на этой работе?

5.16. Гидродинамические уравнения, использованные в линейном анализе, справедливы, пока частицы в данном потоке догоняют частицы в другом потоке, т. е. до точки, в которой скорость v удваивается. Используя смещение, как это делалось в § 5.2, x_1 , E , Φ , ρ и учитывая только нарастающую волну для двух потоков (см. § 5.6), получите значения E и Φ при догоне частиц. Представьте свой результат в терминах $(PE)_{\text{total}}/TE$ и $|q\phi|/1/2mv_0^2$ при догоне, используя параметр $(\omega_p L / v_0)^2$, как это делалось в настоящем параграфе. Эти уровни являются дополнительными нелинейными критериями.

5.17. Для встречных потоков зарядов разного знака ($q_1 q_2 < 0$, например электронов и позитронов, или ионов D^+ и D^-) первое соображение для

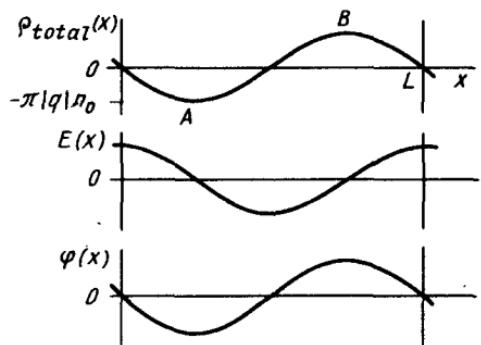


Рис. 5.11. Как и на рис. 5.9, но для частиц разных знаков, $q_1 q_2 < 0$. Отрицательные заряды собираются в сгусток *A* и положительные — в сгусток *B*

значения отличаются от выведенных для частиц одного знака.

5.8. ЗАДАНИЕ ПО ИЗУЧЕНИЮ ДВУХПОТОКОВОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ

При наблюдении линейной стадии неустойчивости получите:

- 1) инкременты и частоты колебаний; сравните их с их изображениями на рис. 5.8; 2) фазу группирования $\rho(x)$ относительно $\varphi(x)$ и $E(x)$ для $q_1 q_2 > 0$ и $q_1 q_2 < 0$.

При наблюдении нелинейной стадии неустойчивости получите:

- 1) максимальные значения плотности заряда;
- 2) толщину сгустков;
- 3) отношение PE/KE ($t=0$) в момент насыщения неустойчивости;
- 4) изменение в поведении мод при переходе от стационарных колебаний к нарастающим вне области линейности, т. е. при $kv_0/\omega_p > \sqrt{2}$, возникающее из-за нелинейных связей;
- 5) уменьшение средних направленных скоростей $\langle v_1 \rangle$ и $\langle v_2 \rangle$ с увеличением PE ;
- 6) увеличение скоростного разброса, определяемого как $[\langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2]$; он служит мерой перехода от холодной плазмы к горячей;
- 7) различие в значении $(PE)_{\max}$ в случае двух электронных потоков ($q_1 q_2 > 0$); электронного и позитронного потоков.

Приведем список начальных значений, чтобы помочь вам приступить к работе с программой: $NSP=2$, $DT=0.2$, $L=2\pi$, $NT=300$, $NG=32$, $IW=2$, $EPSI=1.0$, $A1$, $A2=0$, строятся графики мод 1, 2, 3 через 50 шагов по времени. Для первого вида частиц $N=128$, $WP=1.0$, $WC=0.0$, $QM=-1.0$, $V0=1.0$, $MODE=1$, $X1=0.001$, а все другие величины равны нулю. Для второго вида частиц задаются те же значения, кроме $V0=-1.0$. Заметьте, что такое задание величин обеспечивает для первой моды условие $\frac{k_0 v_0}{\omega_p} = 1$, что соответствует линейной стадии, а для

поведения при большой амплитуде показано на рис. 5.11. Полагая ρ , E , φ меняющимися по закону $-\sin k_0 x$, $\cos k_0 x$, $-\sin k_0 x$ соответственно, как в выражениях (5.64), (5.65) и (5.67), получите $(PE)_{\text{total}}/TE$ и $|\varphi q|^{1/2} mv_0^2$. Покажите, как эти

второй моды — условие $\frac{kv_0}{\omega_p} = 2$, что соответствует нелинейной области, в которой ω — действительная величина. Следовательно, когда мода 1 в своем нарастании станет достаточно большой, чтобы создать гармоники nk_0 , $n=2, 3, \dots$, тогда начнет возрастать мода 2. Наиболее интересно здесь проявление нелинейностей при амплитудах обеих мод намного меньших, чем их максимальные значения при насыщении. Это даст вам некоторое представление о «границе» между линейностью и нелинейностью в развитии неустойчивости.

Вы можете использовать большие начальные возмущения, например в 10 или 100 раз, но задать меньшее число шагов, скажем, 50, только чтобы убедиться, что программа работает, и получить некоторое представление об инкрементах, амплитудах, насыщении и необходимой периодичности выдачи результатов расчета. Конечно, такой запуск программы будет нелинейным с момента $t=0$ и его можно использовать для лучшего задания данных при меньших возмущениях. Можно также уменьшить k_0 , чтобы рассмотреть возбуждение большего числа мод и наблюдать изменение амплитуд насыщения при большей плотности волновых векторов k , отмечая при этом некоторые недостатки одномодового возбуждения или использования дискретных значений k , что всегда делается при моделировании.

Если вы хотите продвинуться еще дальше, то вернитесь назад к линейной теории холодного пучка и получите начальные значения отклонений и скоростей (значения амплитуд возмущения), необходимые для возбуждения одной нарастающей волны. Изучите отличия в нелинейном поведении от случая возбуждения одной моды, т. е. всех четырех волн, или от возбуждения многих мод, например возбуждения всех мод с малыми случайными амплитудами. Постарайтесь возбудить одну затухающую моду. Как определить величину затухания?

Сопоставьте результаты для частиц одного и противоположных знаков, начиная с результатов линейной теории, и получите относительные фазы p_1, x_1, Φ_1 и E_1 для нарастающей волны. Используйте эту информацию для объяснения различий в фазовых диаграммах (x, v_x) , получаемых при моделировании взаимодействия $e-e$ - и $e-p$ -пучков.

5.9. НЕКОТОРЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДВУХПОТОКОВОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ

Приведем для примера ряд результатов по двухпотоковой неустойчивости, полученные с помощью использования программы ES1.

Рассмотрим сначала взаимодействие двух электронных потоков. При $t=0$ потоки имеют дрейфовые скорости $\pm 1,0$ и

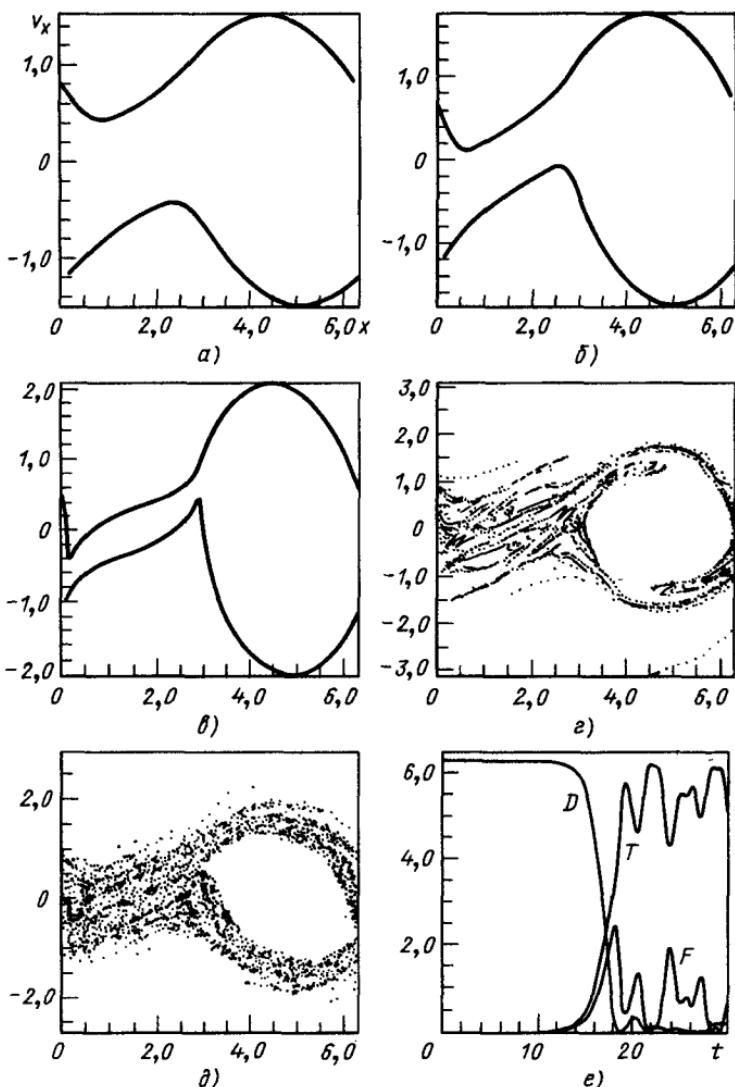


Рис. 5.12. Фазовые портреты двухпоточной электрон-электронной неустойчивости, на плоскости $x-v_x$ (а—д) соответствуют моментам времени $t=16, 17, 18, 34$ и 60 (следует обратить внимание на изменение масштаба v_x). На рис. 5.12, е приведены зависимости энергий от времени $0 \leq t \leq 30$: D —дрейфовая энергия частиц; T —тепловая; F —энергия поля. Значения начальных скоростей равны $\pm 1,0$, в каждом потоке содержится по 4096 частиц, $\omega_{p1}=\omega_{pr}=1$, сетка состоит из 32 ячеек

слегка возмущены по координате. На рис. 5.12 показано развитие неустойчивости. Плотность заряда, заданная на сетке, потенциал и электрическое поле остаются синусоидальными в пространстве до момента времени $t=15$, когда возмущение становится достаточно большим и на графике плотности заряда появляются два пика (на рис. 5.12 они не показаны). Затем

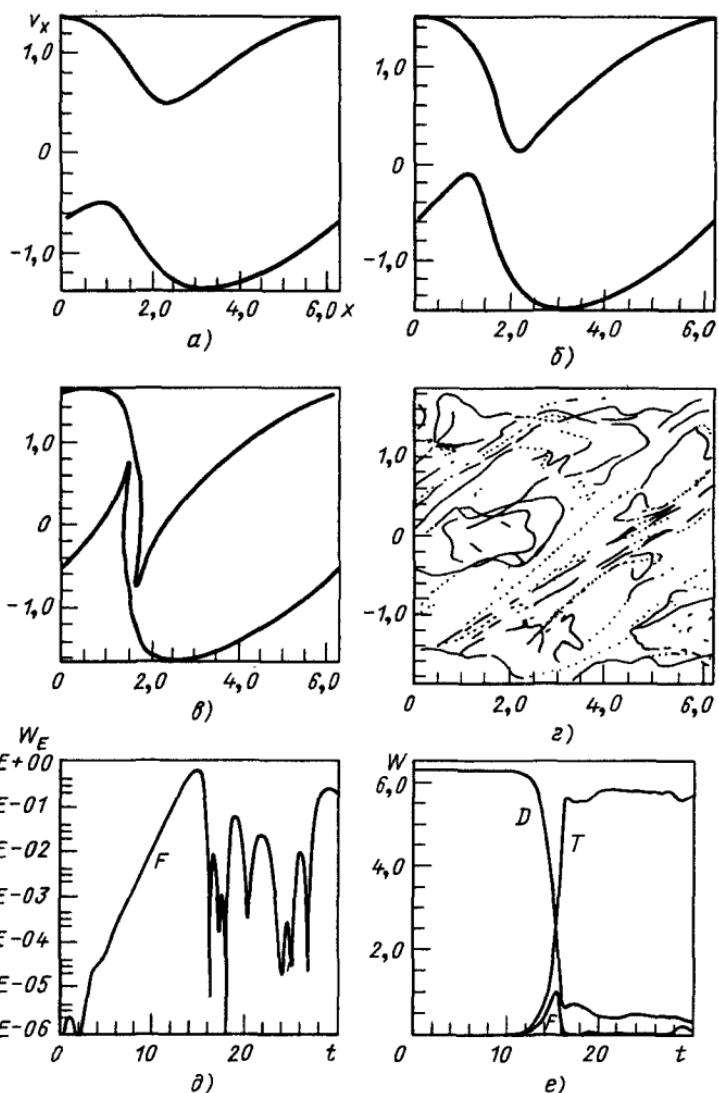


Рис. 5.13. Фазовые портреты двухпоточной электрон-позитронной неустойчивости на плоскости $x - v_x$ (а-г) соответствуют моментам времени $t = 14, 15, 16$ и 33 , на рис. 5.13, д показано изменение энергии первой моды поля от времени, а на рис. 5.13, е — тепловой (T) и дрейфовой (D) энергий частиц и энергии всего поля F . Параметры моделирования аналогичны предыдущему случаю

большое электрическое поле тормозит пучок и при $t = 17$ некоторые частицы останавливаются и поворачивают назад, при $t = 18$ образуются устойчивые завихрения в фазовом пространстве. Следует также заметить, что большое поле ускоряет некоторые частицы до значения скорости $|v| \approx 3$, т. е. увеличивает их кинетическую энергию в 9 раз. В конце работы программа строит графики зависимости энергий от времени.

Электростатическая энергия поля достигает максимального значения—около 40% полной начальной кинетической энергии потока; почти вся энергия поля содержится в моде 1 ($k_1 v_0 / \omega_0 = 1$). Эта энергия экспоненциально нарастает в десятки раз в точном соответствии с теоретическими предсказаниями, как это можно увидеть из графика, построенного в полулогарифмическом масштабе. Моды 2 и 3 в линейном приближении устойчивы, но нарастают за счет нелинейной связи, начиная с $t=8$; при $t=10$ энергия первой моды еще в 100—1000 раз меньше, чем при насыщении. В этих условиях другие модели дают все еще только одномодовое нарастание, см. работу [Симе е.а., 1972].

Рассмотрим теперь модель из двух сталкивающихся потоков—электронного и позитронного, имеющую те же дисперсионные соотношения, но другие фазовые сдвиги между ρ , ϕ и E для нарастающей волны. На рис. 5.13 показаны некоторые результаты, относящиеся к этой модели. Видна совсем другая картина группирования, чем в случае частиц с зарядом одного знака: при $t=15,9$ положительные и отрицательные струйки формируются почти в одном месте. После этого времени возникает нечто вроде «куча мала», а не устойчивый вихрь. На графике зависимости от времени энергия поля достигает максимума в 16% случаев общей начальной кинетической энергии, максимумы электрического поля также имеют относительно меньшую величину, что является прямым следствием вида группировки частиц. Дрейфовая кинетическая энергия резко уменьшается за время порядка одного плазменного периода, причем и в этом случае она не падает точно до нуля.

Наконец, рассмотрим кинетическую двухпотоковую электрон-электронную неустойчивость, которая показана на рис. 5.14. Дрейфовые скорости равны $\pm 1,0$ и $v_{te} = v_0/2$; начальное распределение по скоростям показано на плоскости $x - v_x$ (спокойный максвелловский старт плюс маленькая случайная тепловая компонента), а также в виде проинтегрированной по x функции $f(v_x)$. Вначале неустойчивость нарастает экспоненциально для моды 3, мода 2 на 10 дБ меньше, при этом и образуются три завихрения в фазовом пространстве, которые затем объединяются в два, как показано на рисунке, и, наконец, превращаются в один вихрь (на рисунке не показано). Дрейфовая кинетическая энергия также падает не до нуля и сохраняется даже при $t=300$. Читатель может заметить, что так как моды 2 и 3 имеют примерно одинаковый инкремент, наблюдаемое объединение завихрений может происходить из-за начальных условий—это возможность обсуждена ниже.

Выше результаты были получены без изучения влияния перебора значений параметров, как это должно быть сделано в

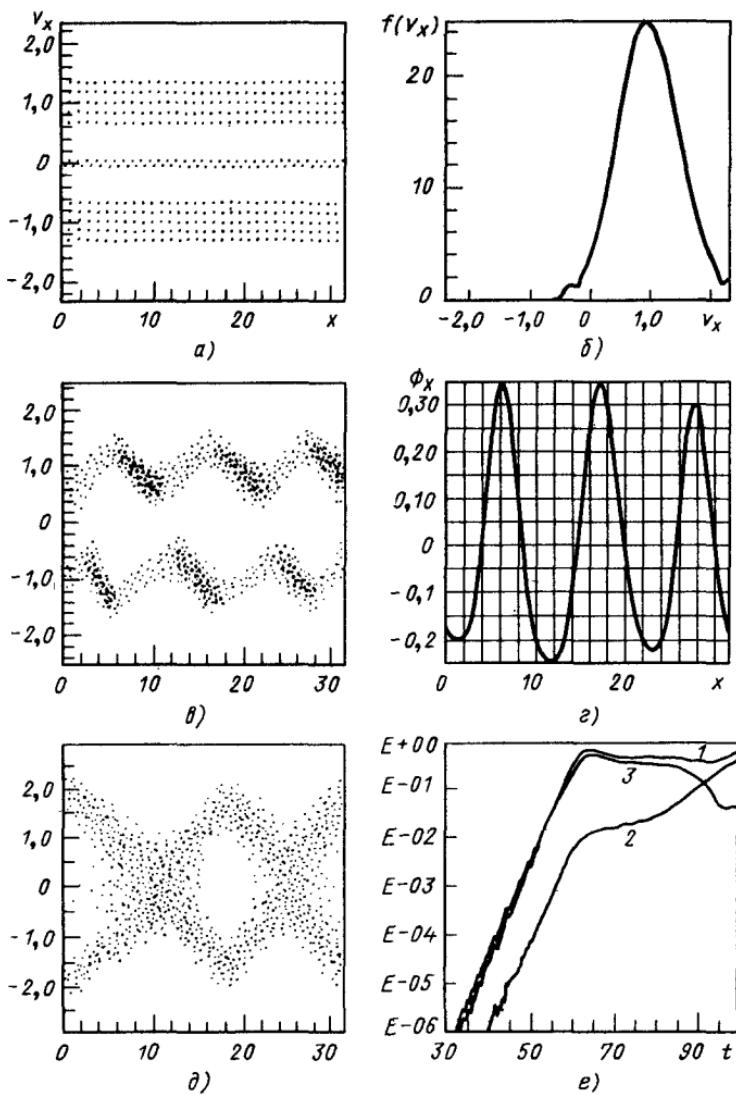


Рис. 5.14. Фазовые портреты горячей двухпоточной электрон-электронной неустойчивости на плоскости $x - v_x$ (а, в, д) соответствуют моментам времени $t = 0,60$ и 100 ; на рис. 5.14, б показано распределение по скоростям одного из потоков $f(v_x)$, на рис. 5.14, г — распределение потенциала $\phi(x)$ при $t = 60$, на рис. 5.14, е — изменения энергий в зависимости от времени: 1 — полная энергия; 2 и 3 — энергия мод 2 и 3 соответственно

научном исследовании. Они служат примером того, что может быть сделано в начале настоящего тщательного исследования физики процессов, и являются образцами широко применяемых способов представления полученной при расчетах информации.

Задача

5.18. Так как уравнения движения обратимы во времени, то, если в какой-либо момент развития неустойчивости изменить скорости на противоположные, система вернется в свое первоначальное состояние! А что случится, если продолжить моделирование дальше? Разрабатывая процесс выполнения обращения по времени программы ES1, помните, что x и v_x определены в различные моменты времени. Из-за компьютерных арифметических ошибок округления программа не будет вполне обратимой на больших временных интервалах, особенно в физически неустойчивых ситуациях.

5.10. ЛИНЕЙНЫЙ АНАЛИЗ ПЛАЗМЕННО-ПУЧКОВОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ

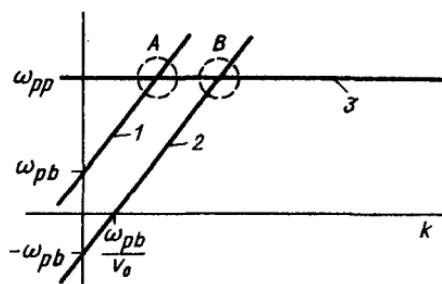
Эта модель рассматривает пучок, инжектируемый в стационарную плазму, и хорошо изучена теоретиками и исследователями, использующими численные методы. Существует множество вариантов постановки задачи: холодная или горячая плазма, слабый или сильноточный пучок, конвективная или абсолютная неустойчивость, линейные, квазилинейные и нелинейные эффекты, периодическая или безгранична модель и т. д. Рассмотрим только один или два случая, относящихся к абсолютной неустойчивости в периодической модели. Различные варианты этой задачи читатель может исследовать самостоятельно.

После исследования двухпотоковой неустойчивости естественно перейти к изучению плазменно-пучковой системы. Первые теоретические и экспериментальные результаты по усилению были получены в работе [Boyd e.a., 1958]. При инжекции электронного пучка в длинную газоразрядную трубку было получено усилие СВЧ-сигнала сантиметрового диапазона. Перед вводом в плазму поток модулировался, а на выходе из плазмы модуляция усиливалась. Прибор вызвал большой интерес возможностью генерации миллиметровых волн, так как пучок проходил через плазму и не требовалось использование замедляющей системы с малыми геометрическими размерами, которая могла быть повреждена интенсивным электронным пучком. В более поздней работе [Gentle and Lohr, 1973] были рассмотрены нелинейные эффекты. Эта задача до сих пор представляет интерес для исследователей.

С физической точки зрения плазменно-пучковая неустойчивость аналогична двухпоточной, рассмотренной в § 5.6. Все те же идеи можно использовать здесь, если ввести новую систему координат. Основным отличием будет то, что плотность пучка n_{pb} существенно меньше плотности плазмы n_{p0} , т. е. $\omega_{pb}^2 \ll \omega_{pp}^2$ (модель слабого пучка).

Вначале рассмотрим взаимодействие между электронами при неподвижном ионном фоне, т. е. при $m_i/m_e \rightarrow \infty$. Диспер-

Рис. 5.15. Приближенная (без учета связи) дисперсионная диаграмма для модели слабого пучка (ω_{pb} и v_0 — плазменная частота и скорость пучка; ω_{pp} — плазменная частота плазмы; 1 и 2 — линии электронного пучка; 3 — линия колебаний электронов плазмы. Связь между волнами пространственного заряда пучка и колебаниями плазмы возникает в областях A и B)



ционные зависимости для плазмы и пучка без учета их связи показаны на рис. 5.15. Доминирующей частотой, естественно, будет ω_{pp} , и основной интерес представляет область волновых векторов вблизи $k = \omega_{pp}/v_0$.

Для холодной плазмы и холодного пучка дисперсионное уравнение имеет вид

$$\epsilon(\omega, k)/\epsilon_0 = 1 - \omega_{pp}^2/\omega^2 - \omega_{pb}^2/(\omega - kv_0)^2 = 0. \quad (5.81)$$

Вводя нормированные переменные, определяемые соотношениями

$$W = \omega/\omega_{pp}, \quad K \equiv kv_0/\omega_{pp}, \quad R = (\omega_{pb}/\omega_{pp})^2, \quad (5.82)$$

уравнение (5.81) запишем в виде, удобном для решения:

$$F(W, K) = 1 - 1/W^2 - R/(W - K)^2 = 0. \quad (5.83)$$

Предположим, что K — действительная величина, и решим уравнение (5.83) относительно комплексных значений ω , получим для каждого K четыре значения ω . Решения показаны на рис. 5.16 для значений $R = 0,001 \div 0,1$. Отметьте необходимость использования программы построения графиков и вычисления корней уравнений. На рис. 5.17 показаны значения максимального инкремента ω_i , а также ω , и k , где $\omega_i = \text{Im } \omega$, $\omega_r = \text{Re } \omega$. Видно, что вначале отношение ω_i/ω_{pp} растет как $2R^{1/3}/3$ (слабый пучок), а затем как $R^{1/4}/2$ (сильный пучок). Граница между этими зависимостями определяется на глаз или же приравниванием этих двух величин, откуда имеем

$$R = (3/4)^{1/2} = 0,032, \quad (5.84)$$

как показано на рисунке. Эту границу не следует воспринимать всерьез. Она только указывает на переходную область от трехволнового взаимодействия с $\omega_i \sim n_0^{1/3}$ (см. рис. 5.16, а и б) к четырехволновому с $\omega_i \approx n_0^{1/4}$ (см. рис. 5.16, в).

Для слабых пучков видно, что максимальный инкремент достигается вблизи точки синхронизма B (см. рис. 5.15), причем $\omega \approx \omega_{pp}$, $k \approx \omega_{pp}/v_0$. Заметим, что даже очень слабый пучок с плотностью, в 10^4 раз меньшей плотности плазмы, создает заметную неустойчивость — в этом случае инкремент равен 1,8 dB

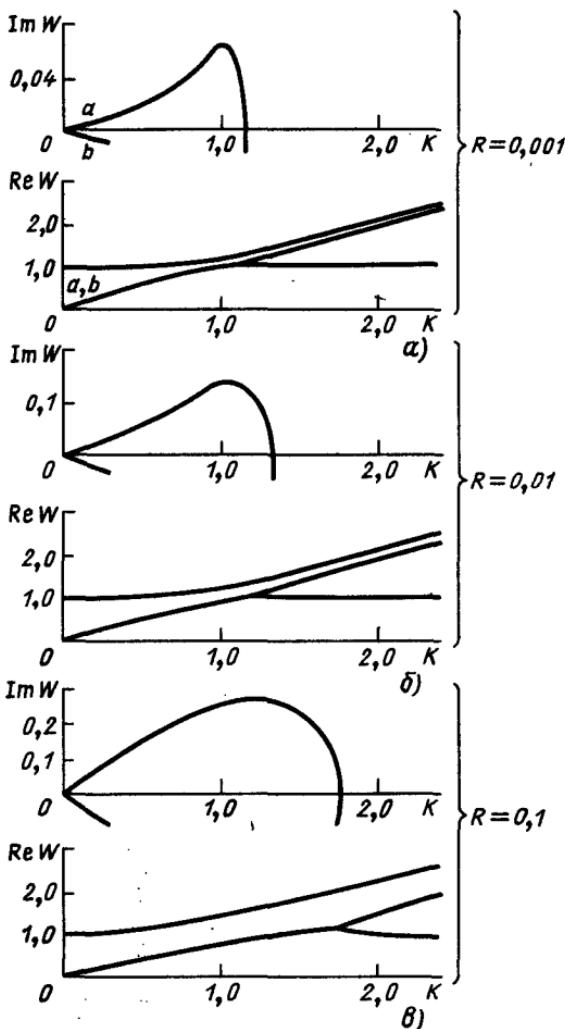


Рис. 5.16. Действительные и мнимые корни дисперсионного уравнения (5.83) для различных значений R :
 a — 0,001; b — 0,01; θ — 0,1. На рис. 5.16, a парные комплексные корни помечены буквами a и b , остальные корни — чисто действительные. Корни с $\operatorname{Re} W \approx -1,0$ не показаны

на один плазменный период, т. е. имеет место нарастание в 10 раз за 5,5 периода. Более точные результаты приведены в работе [Berts, 1972]. Для сильных пучков взаимодействие из точек A и B , показанных на рис. 5.15, распространяется в точки C и D (рис. 5.18) и трехволновое взаимодействие переходит в четырехволновое с $k \approx \omega_{pb}/v_0$. В этом случае необходимо разобраться с проблемой нейтральности системы. Неравенство (5.23) подразумевает, что плотность электронного пучка больше не равна плотности электронов фоновой плазмы; последняя обычно полагается равной фоновой плотности ионов, теперь же этого недостаточно.

Следовательно, в плазме

точно для нейтральности системы. Плотность ионов должна быть больше плотности электронов:

$$n_{pi}/n_{pe} = (1+R)/(1-m_e/m_i). \quad (5.85)$$

Это существенно отличается от наших первоначальных представлений, так как теперь нельзя рассматривать пучок как слабовозмущающий. Конечно, можно было бы рассмотреть все ионы как фон, так чтобы $\omega_{pp}^2 = q/m_i(n_{b0}q/\epsilon_0)$ и выполнялось условие $\omega_{pp}^2 \ll \omega_{pb}^2$. Такая модель движения электронов сквозь ионы была исследована в работе [Buneman, 1959], явившейся заметной вехой в моделировании плазмы. Эта же модель была использована в работе [Pierce, 1948] для поиска объяснений ложных сигналов, отличающихся от частоты СВЧ-сигнала на величину ионной плазменной частоты, которые наблюдались в

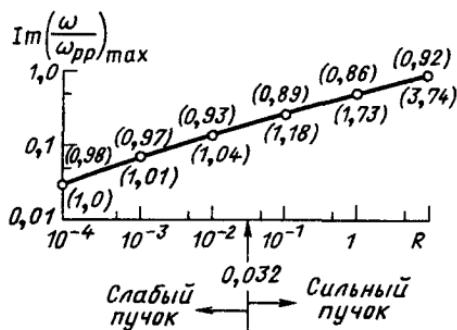


Рис. 5.17. Максимальный инкремент для системы холодный пучок — плазма как функция отношения плотности пучка к плотности плазмы $R = (\omega_{pb}/\omega_{pp})^2$. Числа над линией соответствуют значениям $\text{Re}\omega/\omega_{pp}$, а под линией — $k v_0/\omega_{pp}$ при максимальном значении инкремента. Значение отношения плотностей $R = 0.032$ отмечено как граница, разделяющая нарастание пропорционально $R^{1/3}$ и $R^{1/4}$

Рис. 5.18. Дисперсионная диаграмма для модели сильного пучка без учета связи. Связь между пучком и плазмой в областях C и D представляет собой два двухволновых взаимодействия

электронных лампах (триодах, тетродах и т. д.). Решалось то же самое дисперсионное уравнение (5.81), но для действительных ω и комплексных k . Модель рассматривалась как теоретически, так и методами вычислительного эксперимента в работах [Ishihara e.a., 1980, 1981], где была показана роль пространственных гармоник при насыщении неустойчивости.

Для моделирования читателю предлагается использовать две различные модели:

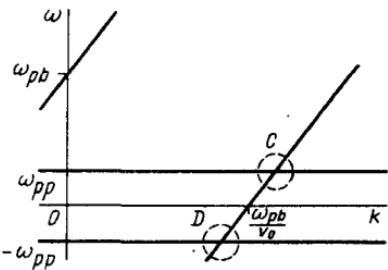
1) модель слабого пучка: $\omega_{pb}^2 \ll \omega_{pp}^2$, когда слабый электронный пучок вводится в плазму с холодными подвижными электронами существенно большей плотности. Ионы плазмы неподвижны, $m_i \rightarrow \infty$. Условие нейтральности задается программным способом путем обнуления полной плотности заряда;

2) модель сильного пучка: $\omega_{pb}^2 \gg \omega_{pp}^2$, когда электронный пучок двигается среди подвижных холодных ионов равной плотности, но $m_i \gg m_e$.

Конечно, вы можете выбрать и другие варианты.

5.11. ПРИБЛИЖЕННЫЙ НЕЛИНЕЙНЫЙ АНАЛИЗ ПЛАЗМЕННО-ПУЧКОВОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ

Нелинейная модель холодного слабого пучка в плазме рассматривалась теоретически, например в работе [Drummond e.a., 1970], экспериментально [Gentle and Lohr, 1973] и с применением вычислительного эксперимента [Kaineg e.a., 1972]. Все результаты хорошо согласуются между собой. Изложим



здесь эти работы в общих чертах, выделив интерпретацию результатов и выводы [Hasegawa, 1975].

Используем вначале изложенные ранее данные линейного анализа, чтобы получить значения относительной модуляции плотности и скорости, необходимые для понимания явления захвата частиц. Подставляя в дисперсионное уравнение (5.81) значение ω в виде

$$\omega \equiv \omega_{pp}(1 - \delta), \quad (5.86)$$

где $\delta \ll 1$, легко получить приближенное кубическое уравнение

$$\delta^3 = -(\omega_{pb}/\omega_{pp})^2/2 = -R/2. \quad (5.87)$$

Отсюда находим три корня уравнения $(-1)^{1/3}(R/2)^{1/3}$, в результате комплексная частота нарастающей волны ($\text{Im } \omega > 0$, $\text{Im } \delta < 0$) имеет вид

$$\omega_{\text{grow}} = \omega_{pp} [1 - (R/2)^{1/3}/2 + i(3/2)^{1/2}(R/2)^{1/3}]. \quad (5.88)$$

Возмущение первого порядка плотности и скорости в случае $(q/m)_p = (q/m)_b$ можно оценить из соотношений

$$(n_1/n_0)_p \approx (v_1/v_0)_p \approx \delta(v_1/v_0)_b \approx \delta^2(n_1/n_0)_b. \quad (5.89)$$

Даже при 100%-ной модуляции пучка по плотности ($n_{1b} \approx n_{0b}$) скоростная модуляция все еще мала, особенно в плазме, так как

$$(v_1)_b \approx \delta v_0 \text{ и } (v_1)_p \approx \delta^2 v_0. \quad (5.90)$$

Эти оценки наводят на мысль, что пучок может достигнуть нелинейной стадии, в то время как плазма остается еще существенно линейной. При моделировании слабых пучков рассмотрение линейного плазменного фона позволяет описать плазму диэлектрической проницаемостью, как, например, в работе [O'Neil e.a., 1971], или как линеаризованную жидкость, см. [Lee and Birdsall, 1977].

Даже в случае сильной нелинейности можно предположить, что потенциал достаточно точно можно представить в виде периодической функции

$$\phi_1 \cos(kx - \omega t) = \phi_1 \cos \omega_{pp} \left[\frac{x}{v_0} - t(1 - \delta_r) \right], \quad (5.91)$$

умноженной на $\exp(\omega_{pp}\delta_i t)$. Пучок захватывается этим потенциалом. В системе отсчета, движущейся с фазовой скоростью v_p , частица с номером i видит стационарный потенциал

$$\Phi_1 = \bar{\Phi} \cos(kx_i) \quad (5.92)$$

и ведет себя так, как будто находится в не зависящем от времени потенциальном поле, т. е. $\partial \Phi / \partial t = 0$, подчиняясь закону сохранения энергии

$$mv_i^2/2 + q\bar{\Phi} \cos(kx_i) = c_i, \quad (5.93)$$

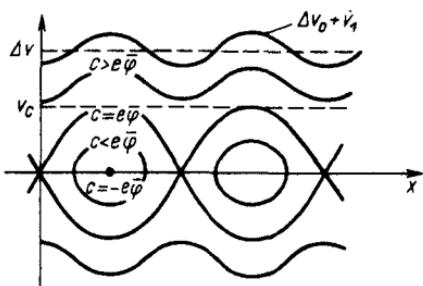


Рис. 5.19. Фазовые траектории частиц пучка, наблюдаемые из системы отсчета, движущейся с фазовой скоростью волнами

Рис. 5.20. Фазовое пространство частиц пучка ($t=t_1^+$ — начало захвата, $t=t_2$ — через половину периода колебаний захваченных частиц и последняя диаграмма — через много периодов колебаний захваченных частиц)

где c_i — полная энергия i -й частицы. Конечно, необходимо помнить, что для потенциала, зависящего от времени, условие $mv^2/2 + q\phi = \text{const}$ несправедливо. Поведение частиц в фазовом пространстве показано на рис. 5.19. Низкоэнергетичные частицы с $c_i < q\bar{\phi}$ захватываются, а высокоэнергетичные с $c_i > q\bar{\phi}$ остаются пролетными. Частицы с энергией $c_i = -q\bar{\phi}$ находятся на дне потенциальной ямы с нулевой скоростью. Критическое значение скорости выхода из захвата (энергия $c_i = q\bar{\phi}$) равно

$$v_c^2 = 4q\bar{\phi}/m. \quad (5.94)$$

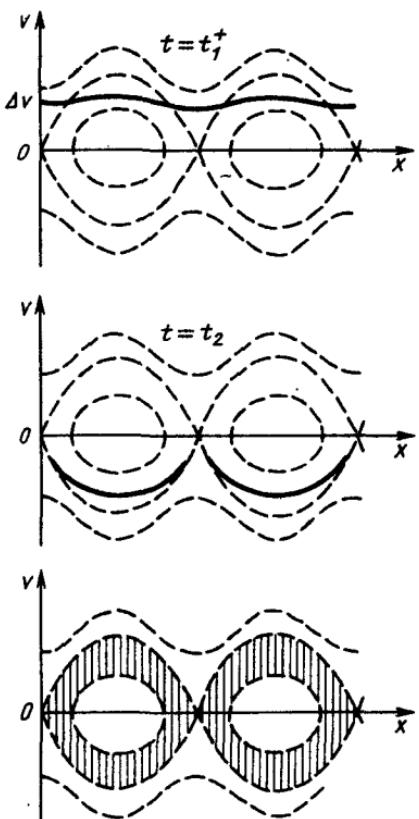
Таким образом, когда потенциал $\bar{\phi}$ станет достаточно велик, так что $\Delta v = v_0 - v_p = \delta v_0 = v_c$, пучок начинает захватываться. Эта стадия начинается в момент времени t_1 , когда $\bar{\phi}$ достигает значения

$$\Phi_T \equiv m(\Delta v)^2/(4q), \quad (5.95)$$

связанного со средней плотностью энергии поля

$$\epsilon_0 E^2(t_1)/4 = \epsilon_0 k^2 \Phi_T^2/4 = 2^{-31/3} R^{1/3} (n_{ob} m_b v_0^2/2), \quad (5.96)$$

которая более чем в 1000 раз меньше плотности кинетической энергии пучка. В работе [Drummond e.a., 1970] было предложено, что захват может происходить так, как показано на диаграммах (рис. 5.20). После того как пучок захватился, он



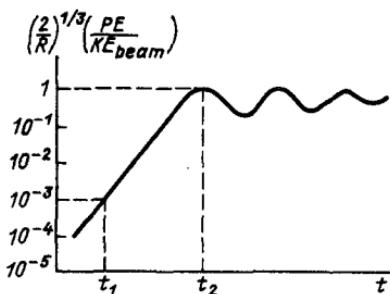


Рис. 5.21. Зависимость плотности энергии электрического поля от времени. При $t=t_1$ начинается захват первых частиц и при $t=t_2$ пучок отдает максимум со своей кинетической энергией. Далее колебания затухают, так как не все частицы имеют одинаковую частоту колебаний в потенциальной яме волны

скатывается к дальней стенке потенциальной ямы за половину периода колебаний в ней. В этот момент (t_2) частицы пучка уже потеряли часть кинетической энергии

$$\Delta(KE) \approx 1/2m_b n_{ob} [(v_0 + \Delta v)^2 - (v_0 - \Delta v)^2] \approx \quad (5.97)$$

$$\approx 2m_b n_{ob} v_0 \Delta v, \quad (5.98)$$

половина которой переходит в кинетическую энергию колебаний, а вторая половина превращается в энергию поля, как это следует из линейной теории, которая с небольшой натяжкой еще может быть применена здесь. В момент t_2 плотность энергии поля определяется выражением

$$\epsilon_0 E^2(t_2)/4 = \Delta(KE)/2 = m_b n_{ob} v_0 \Delta v = (R/2)^{1/3} (m_b n_{ob} v_0^2 / 2). \quad (5.99)$$

Это в $2^{10} = 1024$ раза больше, т. е. на 30 дБ, чем при $t=t_1$. Заметьте, что при наиболее сильном слабом пучке $R=0,032$, а $(R/2)^{1/3}=0,251$, т. е. 25% энергии пучка может перейти в энергию поля, что может служить грубой оценкой эффективности или насыщения. Когда скорости частиц вернутся к исходным значениям через половину периода колебаний, энергия поля снова перейдет в кинетическую энергию, однако поскольку частицы из-за непарabolичности ямы колеблются с различными частотами, то они перемешиваются по фазе и колебания частиц и поля затухают, как показано на рис. 5.21. В итоге энергия поля равна полуразности энергий пучка в начале и в конце, когда в нем устанавливается размазанное распределение энергий, симметричное относительно фазовой скорости волны со средним значением $(1/2)m_b n_{ob} v_p^2$. В пределе $t \rightarrow \infty$ плотность энергии поля определяется выражением

$$\epsilon_0 E^2/4(t \gg t_2) = \frac{1}{2} m_b n_{ob} (v_0^2 - v_p^2) (R/2)^{1/3} \left(\frac{1}{2} m_b n_{ob} v_0^2\right), \quad (5.100)$$

что составляет ровно половину максимального значения. Выражение для Φ_{max} приведено в работе [Walsh and Hagelin, 1976].

Конечно, представленная картина явления весьма приближена. В статье [Hasegawa, 1975] было показано, что модуляция скорости пучка в момент захвата порядка $v_1 = \Delta v$, т. е. пучок

хорошо сгруппирован. Представленная на рис. 5.20 схема без группировки и со слабой скоростной модуляцией слишком проста. Сгустки захватываются и вращаются в фазовом пространстве, и в целом изменения электрической энергии, показанные на рис. 5.21, имеют место, но детали явлений, как можно увидеть из моделирования, оказываются существенно иными.

Приведенное выше рассмотрение дает ключ к пониманию нелинейного поведения слабого пучка. Подробности вычислений можно найти в работе [Kainer e.a., 1972], где рассмотрены случаи сильного и слабого пучков в нелинейном режиме. Используя результаты этого исследования и выбирая значения $R = n_{pb}/n_{0p}$, можно провести ряд полезных моделей взаимодействия пучка с плазмой.

5.12. ЗАДАНИЯ ПО МОДЕЛИРОВАНИЮ ПЛАЗМЕННО-ПУЧКОВОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ

В этом задании необходимо наблюдать за развитием слабой ($R=0,001$) плазменно-пучковой неустойчивости от начального экспоненциального нарастания до насыщения. Случай сильной неустойчивости, особенно предел $\omega_{pb} \rightarrow \omega_{pp}$, $R=1$, очень близок к уже изученной двухпучковой неустойчивости. При моделировании нужно проверить значения комплексной частоты ω , даваемые линейной теорией, уровень насыщения, т. е. «эффективность» преобразования кинетической энергии частиц в энергию поля, замедление и уширение распределения скоростей пучка в колебательное или захваченное движение сгустков пучка после насыщения.

При $R \ll 1$, т. е. $n_1/n_0 \ll 1$, плазма в отличие от слабого пучка остается линейной. Следовательно, ее можно представить линеаризованной жидкостью или описать с помощью линейной восприимчивости. Комбинированная модель частицы — жидкость весьма полезна в сложных задачах (замагниченные кольца в плазме), где шум плазмы мешает исследовать нужные процессы, см. [Lee and Birdsall, 1979 a]. Здесь мы используем другой прием: так как важна лишь плазменная частота частиц, создающих линейный отклик среды, то мы свободно можем выбрать малое отношение q/m для обеспечения линейной плазмы, что позволяет использовать для ее описания весьма малое число частиц, даже одну частицу на ячейку. Недостающий постоянный ионный фон создается самой программой ES1.

Пусть отношение $(\omega_{pb}/\omega_{pp})^2 \equiv R = 0,001$, что находится в области слабого пучка, $R \leq 0,032$. Пучок становится сильно возмущенным на фазовой плоскости $x - v_x$, сворачиваясь в завихрения; следовательно, для достижения необходимой точности его описания нужно существенно больше частиц, чем для

описания плазмы. Выберем для пучка значение $N=512$, для плазмы $N=64$ и число узлов сетки $NG=64$. Зададим также $\omega_{pp}=1,0$ и $\omega_{pb}=(1000)^{-1/2}$, а для скорости пучка $v_0=1$. Для пробного случая зададим условия для первой моды вблизи максимального инкремента $kv/\omega_{pp}=1,01$, когда $\omega/\omega_{pp}=0,97+i0,006$, и пусть $k_0=1$, $L=2\pi$. В дальнейших исследованиях задайте десятую моду вблизи этого максимума, используя значение $L=20\pi$, и возбудите все моды, используя $VT1$.

Возбуждение пучка при величине $X1=0,01$, выбранной из условия наилучшего возбуждения нарастающей волны, обеспечивает экспоненциальное нарастание в десятки раз, заканчиваясь насыщением при $t=115$; при использовании $\Delta t=0,2$ задайте $NT=600$. Моделирование с большим числом шагов позволяет наблюдать движение захваченных частиц.

Проверьте нелинейные предсказания из § 5.11 и работы [Kainer e.a., 1972]. Предскажите значение потенциала в начале захвата; согласуется ли это с вашими фазовыми графиками? Используйте фазовые диаграммы, полученные при насыщении и в последующие моменты времени, соответствующие найденным в предыдущих запусках программы максимумам и минимумам, чтобы подтвердить или опровергнуть начало захвата и последующее перемешивание частиц, показанное на рис. 5.20. Соответствует ли максимум энергии электрического поля предсказанному в § 5.11? Будет ли замедление и уширение $f(v)$ таким же, как в работе [Kainer e.a., 1972]? Появятся ли очень горячие частицы, которые хорошо можно увидеть на графике зависимости $\lg f(v)$ от v или v^2 ? Рассмотрите уменьшение средней скорости пучка $\langle v \rangle$ и увеличение $\langle v^2 \rangle$ со временем.

Придумайте свои собственные варианты постановки задачи.

Во-первых, предположите, что только пучок может двигаться, а плазма неподвижна. В этом случае возможны только ненарастающая быстрая и медленная волны пространственного заряда. Однако возможна нефизическая неустойчивость, связанная с эффектом наложения частот, как аналитически было показано в работах [Langdon, 1970a,b; Chen e.a., 1974] и проверено в [Okuda, 1972] (см. ниже, гл. 8). Эта неустойчивость вызывает нагрев пучка до уровня $\lambda_D/\Delta x \approx 0,05$, где $\lambda_D=v_t/\omega_p$, ω_p — плазменная частота пучка, и затем стабилизируется, оставляя устойчивый, но слегка нагретый пучок с шумом, как показано в [Birdsall and Maron, 1980]. Максимальный инкремент равен $0,2\omega_{pb}=0,2\omega_{pp}R^{1/2}$, т. е. примерно $\omega_{pp}/150$ при $R=0,001$, что почти в 10 раз меньше, чем ожидается в случае взаимодействия плазмы с потоком. Этот эффект самонагрева, рассматриваемый ниже, в части II, можно считать переходным процессом.

Во-вторых, посмотрите, что случится, если задать большое возбуждение плазмы, например использовать начальное смеще-

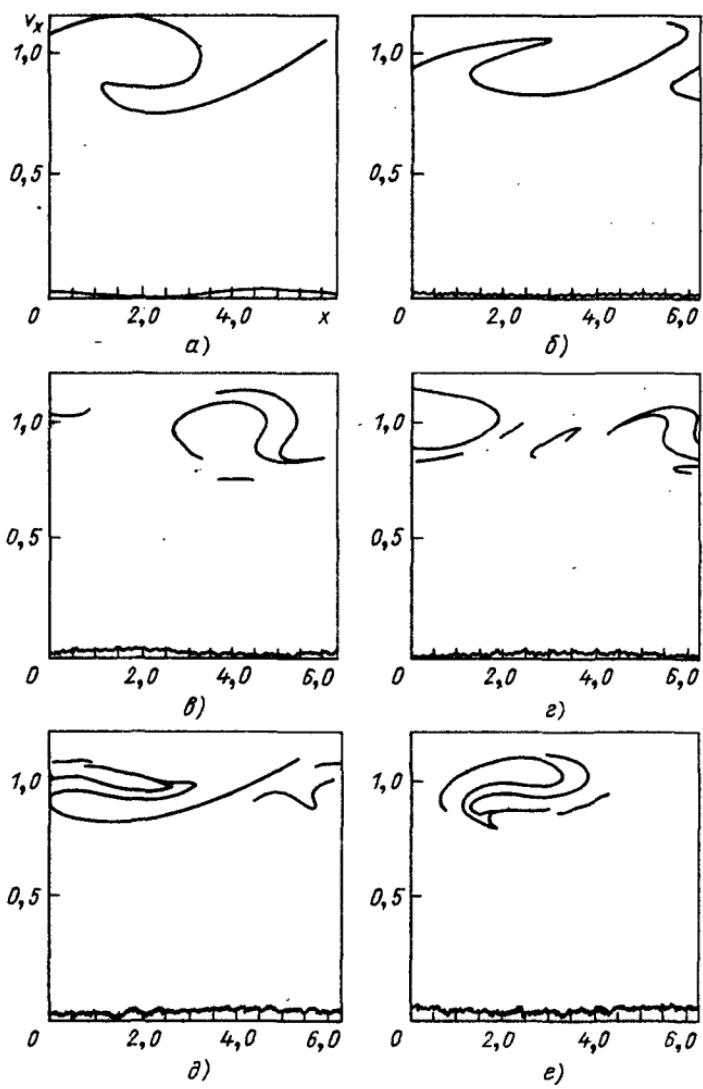


Рис. 5.22. Фазовый портрет на плоскости $x-v_x$ неустойчивости слабого пучка в плазме при $R=0,001=(\omega_{pb}/\omega_{pp})^2$ и скорости пучка $v_0=1,0$. Рисунки слева соответствуют первым трем максимумам энергии поля, а справа — последующим минимумам; на них видны колебательное движение и перемешивание частиц. Соответствующие значения времени t равны 146, 173, 202, 230, 258, 286

ние $X1$ порядка невозмущенного расстояния между частицами. Будет ли тогда существовать взаимодействие плазмы с пучком?

В-третьих, сопоставьте линейные и нелинейные эксперименты с инжекцией пучка в плазму с помощью электронной пушки. Можете изменить методику моделирования, чтобы лучше отразить постановку задачи, где электронный пучок непрерывно инжектируется при $x=0$ и поглощается при $x=L$, а не

возвращается в точку $x=0^+$, как в периодической модели. Электроны плазмы испытывают отражения при $x=0^+$ и $x=L^-$. Синусоидальное возбуждение пучка по скоростям и (или) плотности создается источником в точке $x=0^+$. Глубина модуляции и длина системы должны быть выбраны так, чтобы насыщение достигалось при $x < L$. Эти изменения лучше отражают экспериментальные условия, в которых обычно изучается нарастание по координате (вещественные ω и комплексные k). Разницу между абсолютной, конвективной и «никакой» неустойчивостями можно уяснить с помощью работы [Briggs, 1971].

Некоторые результаты для $R=0,001$ показаны на рис. 5.22. Изображения фазового пространства $x-v_x$ даны в моменты, когда достигаются максимумы энергии поля: $t \approx 146, 202$ и 258 и максимумы кинетической энергии пучка: $t = 173, 230$ и 286 . Моменты пиков соответствуют группировке при $v < v_0 = 1,0$, а при $v > v_0$ максимум группировки приходится на провалы энергии поля. Используя значение Φ_{\max} , можно оценить из формулы $\omega_{tr} = k(q\Phi_{\max}/m)^{1/2}$ характерное время захвата $\tau_{tr} \approx 56$, что хорошо совпадает с результатами моделирования. Заметьте, что завихрение представляет собой большую структуру, так что нельзя использовать представление о простых колебаниях захваченных частиц.

Задачи

5.19. Хотя мы можем выбрать отношение q/m для частиц плазмы произвольно малым без существенного изменения физики процессов, покажите, что существует нижний предел отношения, связанный с конечной точностью вычислений компьютера.

5.20. Что произойдет, если возбуждение $Xl=0,01$ приложить к электронам плазмы, а не пучка?

5.13. ЛИНЕЙНЫЙ АНАЛИЗ ЦИКЛОТРОННОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ ПУЧКА

Другая интересная неустойчивость возникает при дрейфе ионов относительно электронов во внешнем однородном магнитном поле $B_0 z$. Взаимодействие происходит в плоскости, перпендикулярной направлению B_0 . Движение частиц описывается координатой x и двумя компонентами скорости v_x и v_y , волновой вектор имеет вид kx , где x — единичный вектор по оси x . Напряженность магнитного поля характеризуется соотношением

$$\omega_{ci} \ll \omega_{pi} \ll \omega_{pe} \approx \omega_{ce}. \quad (5.101)$$

Для упрощения рассмотрим холодные электроны и ионы, т. е. $v_{te} = v_{ti} = 0$. Перейдем к системе отсчета, связанной с электронами, в которой они покоятся, а ионы дрейфуют с постоянной скоростью v_0 вдоль оси x . Для рассматриваемых возмущений

электроны являются замагниченными, т. е. в их движении учитывается член $v_1 \times B_0$, а ионы являются незамагнеченными, так как для волн выполняется условие $|\omega - kv_0| \gg \omega_{ci}$. Эта модель и подобные ей широко использовались для теоретического изучения дрейфового возбуждения электростатических неустойчивостей в замагнченной плазме (подробности об использовании модели и пороговые значения v_0 , определяющие, должно ли выполняться условие $v_0 > v_{te}$ или $v_0 > v_{ti}$ для возникновения неустойчивости, можно найти в работе [Forsslund e.a., 1972]).

Рассмотрим ряд теоретических вопросов для того, чтобы получить результаты в форме, удобной для сопоставления с результатами моделирования. Использованная система координат показана на рис. 5.23. Рассмотрим гидродинамическую нерезонансную неустойчивость, полагая

$$kv_{te}/\omega_{ce} < 1, \quad |\omega - kv_0| > kv_{te}, \quad \omega > k_{||}v_{te}. \quad (5.102)$$

Первое допущение означает, что для $\omega_{ce} \geq \omega_{pe}$

$$v_{te}/v_0 < \omega_{ce}/\omega_{uh} \approx 1, \quad (5.103)$$

где $\omega_{uh}^2 \equiv \omega_{pe}^2 + \omega_{ce}^2$. Второе допущение требует выполнения условия

$$v_{ti}/v_0 < (m_e/m_i)^{1/3} (\omega_{pe}/\omega_{uh})^{4/3}. \quad (5.104)$$

Для $T_e \approx T_i$, или при $m_e v_{te}^2 \approx m_i v_{ti}^2$ и $\omega_{pe} \approx \omega_{ce}$, условие (5.104) преобразуется к виду

$$v_{te}/v_0 < (m_i/m_e)^{1/6} (\omega_{pe}/\omega_{uh})^{4/3}.$$

Холодное дисперсионное уравнение, исследованное в работе [Buneman, 1962], можно записать так:

$$1 - \cos^2 \theta \frac{\omega_{pe}^2}{\omega^2 - \omega_{ce}^2} - \sin^2 \theta \frac{\omega_{pe}^2}{\omega^2} - \frac{\omega_{pi}^2}{(\omega - kv_0 \cos \theta)^2} = 0. \quad (5.105)$$

Член с $\cos^2 \theta$ возникает из-за движения электронов поперек B_0 , а член с $\sin^2 \theta$ соответствует их движению вдоль B_0 .

В нашем задании по моделированию $k_{||} = 0$, т. е. $\theta = 0$, и полезно использовать решения уравнения (5.105) для $\theta = 0$ и малых $\theta \approx \sqrt{m_e/m_i}$. Эти решения позволяют описать верхнегибридную двухпотоковую неустойчивость при $\theta = 0$, предсказанную Бунеманом, и модифицированную двухпотоковую неустойчивость, предсказанную в работе [Krall and Liewer, 1971, 1972].

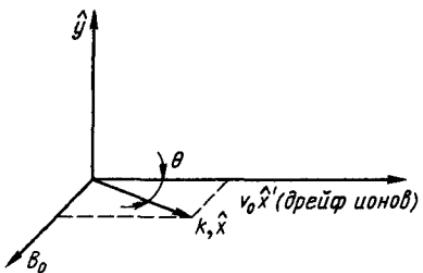


Рис. 5.23. Система координат для рассмотрения неустойчивости, возбуждаемой дрейфом (его скорость направлена вдоль оси x)

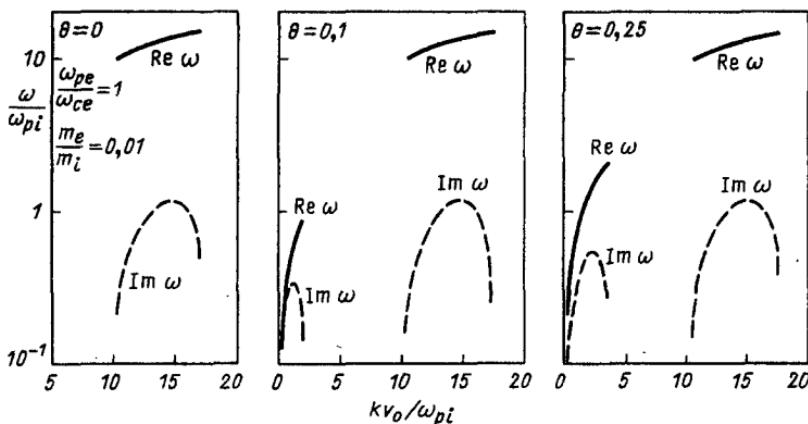


Рис. 5.24. Графики корней неустойчивости при $\theta=0$, $(m_e/m_i)^{1/2}$ и $2,5(m_e/m_i)^{1/2}$ даны в полулогарифмическом масштабе ($m_e/m_i=0,01$ и $\omega_{pe}/\omega_{ce}=1$)

На рис. 5.24 представлены графики ω_r и ω_i для обеих неустойчивостей. Физические особенности обоих режимов обсуждаются в работе [Chen and Birdsall, 1973].

5.14. ЗАДАНИЕ ПО ЦИКЛОТРОННОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ ПУЧКА

Эта неустойчивость характеризуется значениями $\text{Re}\omega \approx \omega_{uh}$ и $\text{Im}\omega \ll \omega_{pe}, \omega_{ce}, \omega_{uh}$. Поэтому необходимо выбирать значение $\omega_{uh}\Delta t$ достаточно малым, например 0,2, и задавать число шагов достаточно большим, порядка 600. Вначале рекомендуем выбрать параметры, использованные выше: $\omega_{pe} = |\omega_{ce}| = 10\omega_{pi}$. Максимальное значение инкремента $\gamma/\omega_{pe} \approx 0,12$ получается при $kv_0/\omega_{pe} \approx 1,5$, а отношение $\omega_r/\omega_i \approx 1,38$. Можно задать $\omega_{pe} = 1,0$, $v_{oe} = 0$, рассматривая взаимодействие в системе отсчета, связанной с электронами, $\omega_{ce} = -1,0$, $\omega_{pi} = 0,1$, $\omega_{ci} = 0$, т. е. ионы не замагничены, $v_{oi} = 1,0$. Пусть первая мода имеет максимальный инкремент при $k_0 \approx 1,5\omega_{pe}/v_0 \approx 1,5$, что требует задания $L = 2\pi/k_0 = 4\pi/3$. Используйте значения $q/m_e = -1,0$ и $q/m_i = 0,01$. Ионы относительно массивны и поэтому слабо перемещаются при своем дрейфе, тогда как электроны в фазовом пространстве образуют завихрения. Следовательно, можно использовать существенно меньшее число ионов, чем электронов, например $N = 512$ для электронов и $N = 128$ для ионов. Возбуждение первой моды заданием для электронов начального смещения $X1 = 0,001$ обеспечивает возможность его нарастания в десятки децибел (для его уменьшения можно увеличить значение $X1$ до насыщения через предложенное число шагов $NT = 600$).

Проверьте один из выводов линейной теории. Частью проверки может служить определение комплексных значений ω по графикам зависимости разных величин от времени и

сравнение полученных величин как функций k с теоретическими значениями. Почему $\text{Re}\omega$ обращается в нуль на графике зависимости энергии первой моды от времени? Как бы вы могли определить значения $\text{Re}\omega$? Что представляет собой разность фаз между ϕ и r и согласуется ли она с данными линейного анализа? Угадайте и получите графики v_x , v_y для электронов.

Другим объектом исследований может служить поведение системы при больших амплитудах. Оцените величину электростатической энергии при насыщении неустойчивости по сравнению с начальной кинетической энергией. Уменьшается ли дрейфовая энергия ионов? Нарастает ли дрейфовая энергия электронов? Пронаблюдайте увеличение тепловой энергии электронов и ионов. Убедитесь в справедливости моделирования, сравнивая ошибку для полной энергии системы с изменениями любой ее компоненты, т. е. будет ли максимальная электростатическая энергия много меньше ошибки для полной энергии?

5.15. ЗАТУХАНИЕ ЛАНДАУ

Электростатические волны в горячей плазме затухают даже в отсутствие столкновений. Этот удивительный результат был получен впервые при исследовании на комплексной плоскости ω аналитического продолжения потенциала ϕ после преобразования Лапласа. Детальный анализ этого явления и объяснение его физической сущности можно найти в работах [Jackson, 1960; Dawson, 1961].

При максвелловском распределении скоростей имеются частицы, двигающиеся быстрее и медленнее фазовой скорости волны ω/k . Если мы перейдем в систему отсчета, двигающуюся с фазовой скоростью, потенциал будет периодической функцией x и будет затухать без осцилляций со скоростью ω_i . Если пренебречь затуханием, то легко видеть, что электроны, имеющие скорость в пределах интервала $\omega/k \pm v_{tr}$, захватываются волной и их скорость колеблется вокруг значения ω/k с частотой $\omega \approx \omega_{tr}$, где $1/2mv_{tr}^2 = q\phi$ и $m\omega_{tr}^2 = qk^2\phi$, а ϕ — максимальная амплитуда составляющей поля волны вдоль этой фазовой скорости. Возвращаясь в неподвижную систему отсчета, видим, что резонансные электроны в диапазоне скоростей $(\omega/k - v_{tr}, \omega/k)$ за время $\sim \pi/\omega_{tr}$ меняются местами с электронами, чьи скорости изменяются от ω/k до $+v_{tr}$. Если первоначально большее число электронов находилось в интервале меньших скоростей, то суммарная энергия частиц будет увеличиваться за счет энергии волны. Это и есть бесстолкновительный механизм диссипации, объясняющий затухание Ландау, скорость которого пропорциональна $(\partial f_0 / \partial v)_{v=\omega/k}$.

Мы начнем с примера, показывающего этот эффект и подчеркивающего, кроме того, ряд трудностей при его моделировании в чистом виде. Пусть $DT=0,1$, $NT=200$, $NG=256$, $A2=10^4$, $IPHI=10$, $IXVX=10$, $MPLT=1,2,3$; $N=2^{14}$, $VT2=0,5$, $NLG=1$, $MODE=1$, $XI=0,02$.

Волна затухает с декрементом $\omega_i = -0,15\omega_p$, близким к значению, предсказанному линейной теорией, но энергия волны уменьшается только на порядок, а затем медленно осциллирует. Такие же результаты были получены в работе [Denavit and Walsh, 1981], где использовался другой способ задания спокойного старта.

При задании случайно распределенных начальных скоростей ($VT1=0,5$ и $VT2=0$) экспоненциальное затухание не проявляется. Функция распределения $f_0(v)$ вблизи значения $v=\omega/k$ должна быть очень тщательно задана начальным распределением частиц. По этой причине мы не можем уменьшить очень большой декремент в этом примере выбором меньших значений kv_t/ω_p , чтобы сдвинуть фазовую скорость на редко заселенный «хвост» распределения. Вместо этого мы используем такой прием.

Во-первых, мы разделим электроны на две группы, одна — холодная, другая — с максвелловским распределением скоростей. В программе ES1 эти группы будут условно рассматриваться как различные сорта частиц, обозначаемые c и h . Выбирая $\omega_{pc}^2 \gg \omega_{ph}^2$ и $kv_h \approx \omega_{pc}$, мы помещаем фазовую скорость на самый крутой склон функции распределения f_{0h} для того, чтобы в области захвата попало много частиц, а декремент был много меньше ω_{pc} .

Во-вторых, небольшая хитрость позволит нам уменьшить необходимое число частиц. В коде мы можем выбрать $N_c \ll N_h$; это означает, что холодные частицы переносят существенно больший заряд, чем горячие. Выбирая $q/m=0,01$ для холодных частиц, можно устранить нелинейность в их восприимчивости и использовать $N_c=NG$. Все эти изменения не влияют на рассмотрение процессов при малых амплитудах.

Используйте в основной программе такие параметры: $DT=0,1$, $NT=1000$, $NSP=3$, $NG=256$, $A2=10^4$, $IPHI=20$, $IXVX=20$, $MPLT=1,2,3,4$; для горячих частиц $N=2^{14}$, $WP=-0,383$, $VT2=0,9$, а для холодных $N=256$, $QM=0,01$, $WP=-0,924$, $VT2=0$, $MODE=1$, $VI=2,5 \times 10^{-4}$; для меченых же частиц $N=1020$, $NLG=1020/3$, $QM=-1,0$, $WP=10^{-10}$, $VO=0,9$ и $VT2$ выбирается так, чтобы получить значения скорости 0,8; 0,9 и 1,0. В этом примере энергия поля уменьшается на два порядка, а затем возрастает, как показано на рис. 5.25. Начальный декремент легко оценить из линейной теории, используя мнимую часть дисперсионного уравнения $\epsilon(k, \omega_r + i\omega_i)=0$, что при малых ω_i дает соотношение

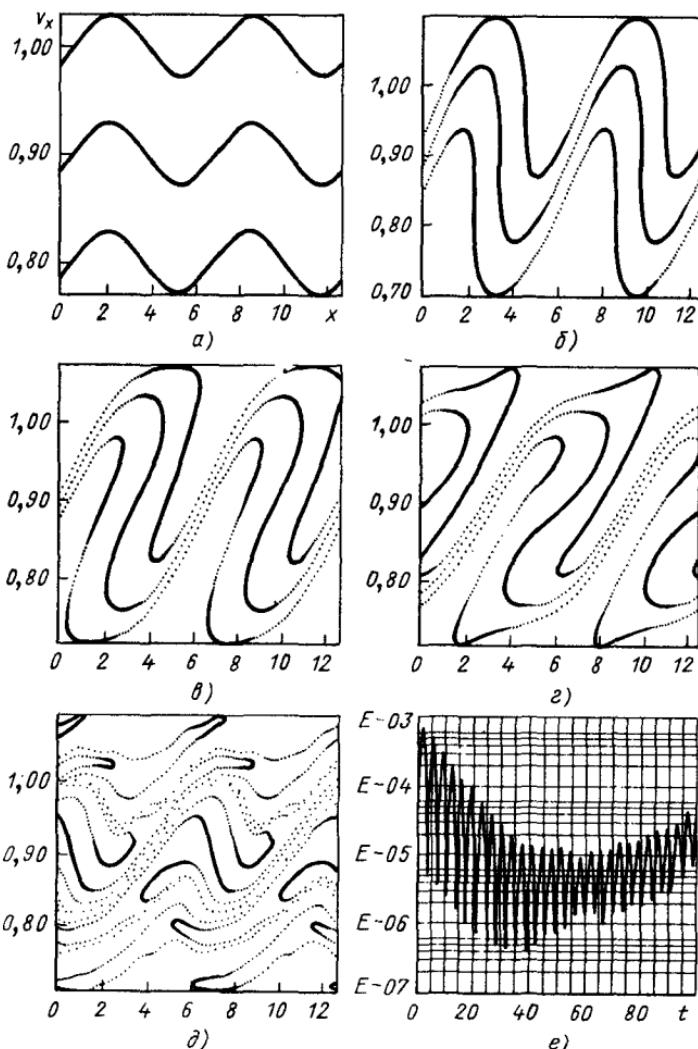


Рис. 5.25. Фазовые портреты на плоскости $x-v_x$ для затухания Ландау (рис. 5.25, а - д соответствуют значениям $t=2, 16, 30, 40$ и 90) и изменение энергии поля в зависимости от времени $0 \leq t \leq 100$ (е). На фазовых диаграммах маркерные частицы, имеющие такое же значение q/m , но существенно меньшие q и t по сравнению с основными частицами показаны различными точками соответственно значениям скорости $v=0,8; 0,9$ и $1,0$. Для прояснения пространственной структуры для построения выбран интервал $0 \leq x \leq 2L$ и каждая частица построена дважды: в точках (x, v) и $(x+L, v)$

$$\text{Im}\epsilon = 0 \approx 2 \frac{\omega_{pe}^2}{\omega_r} \omega_i - \pi \omega_{ph}^2 f'_0(\omega_r/k)/k|k|, \quad (5.106)$$

из которого для максвелловского распределения получаем

$$\omega_i/\omega_r = -\left(\frac{\pi}{8}\right)^{1/2} \frac{\omega_{ph}^2}{\omega_{pc}^2} \left(\frac{\omega_r}{kv_t}\right)^3 \exp(-\omega_r^2/2k^2v_t^2). \quad (5.107)$$

При моделировании полагаем $\omega_r = 0,90$ и из выражения (5.107) имеем $\omega_i = -0,058$, что хорошо согласуется с полученным при моделировании значением $\omega_i = -0,062$. Нарастание амплитуды после $t = 45$ происходит из-за колебаний захваченных электронов в поле волны. Его можно ускорить увеличением начальной амплитуды, т. е. частоты колебаний захваченных частиц, но нельзя существенно уменьшить без увеличения числа частиц в модели.

Изменяя несколько операторов в коде, можно нарисовать фазовое пространство и $f(v)$ только для области захвата и увидеть изменения $f(v)$, но из фазового портрета нельзя понять тонкую структуру явления, так как информация о предшествующих моментах развития в программе не сохраняется. Захват можно увидеть, если строить графики для частиц, чья начальная скорость была больше 0,9. Другим способом описания служит построение графиков для третьего сорта частиц — меченых, которые имеют то же самое отношение q/m , но меньшую плотность заряда, так что они движутся вместе с горячими частицами, но не участвуют в развитии неустойчивости. Мы используем три пучка таких частиц со скоростями $v = 0,8; 0,9$ и $1,0$. Фазовые портреты этих частиц, представленные на рис. 5.25, несут информацию об истории резонансных частиц, которую нельзя получить из функции распределения $f(x, v, t)$ в программе, использующей интегрирование уравнения Власова.

Задача

5.21. При задании спокойного старта в ES1 скорости в каждой группе частиц монотонно нарастают, тогда как координаты перемешиваются с помощью специальной процедуры. Что бы изменилось, если бы координаты монотонно возрастили, а скорости перемешивались?

5.16. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЗАМАГНИЧЕННЫХ КОЛЕЦ ПО СКОРОСТИМ И ЛИНЕЙНЫЙ АНАЛИЗ НЕУСТОЙЧИВОСТИ ДОРИ—ГЕСТА—ХАРРИСА

Плоские волны в однородной плазме, распространяющиеся перпендикулярно направлению однородного магнитного поля B_0 ($k_\perp \neq 0, k_\parallel = 0$), будут устойчивыми или нарастающими в зависимости от вида распределения по скоростям [Harris, 1959]. Рассмотрим тепловое кольцеобразное распределение по скоростям такого вида:

$$dn = F_0^p(v_\perp) 2\pi v_\perp dv_\perp = \left[\int_{-\infty}^{\infty} dv_\parallel f_0(v_\perp, v_\parallel) \right] 2\pi v_\perp dv_\perp = \\ = \frac{1}{\pi a_\perp^2 p!} \left(\frac{-v_\perp}{a_\perp} \right)^{2p} \exp \left(\frac{-v_\perp^2}{a_\perp^2} \right) 2\pi v_\perp dv_\perp. \quad (5.108)$$

При $p=0$ функция распределения F_0^0 будет максвелловской и корни дисперсионного уравнения лежат вблизи электронных и циклотронных гармоник, стремясь асимптотически к ω_c при $k_\perp v_\perp / \omega_c \rightarrow \infty$; это гармоники или моды Бернштейна [Bernstein, 1958].

В работе [Crawford and Tataronis, 1965] приведены дисперсионные кривые, а в книге [Krall and Trivelpiece, 1973] дано полное описание этих волн. Для максвелловского распределения при $p=0$ дисперсионное уравнение дает при любом отношении ω_p/ω_c только действительные корни. Если сохранить ω_p постоянным, а ω_c устремить к нулю, то снова получим затухание Ландау, по крайней мере при ω_c меньшем, чем значение декремента. В работе [Kamitura e.a., 1978] дан теоретический анализ этого парадокса и с помощью весьма аккуратного моделирования исследованы затухание Ландау и его связь с автоускорением, спектр тепловых флуктуаций поля и диффузия частиц поперек магнитного поля.

Для $p \neq 0$ функция F_0^p похожа на тепловое кольцо в пространстве v_\perp , например v_y в зависимости от v_x , и неустойчива при $p \geq 3$ для так называемой моды с нулевой частотой, когда $\omega_r=0$, что было показано в работе [Dory e.a., 1965].

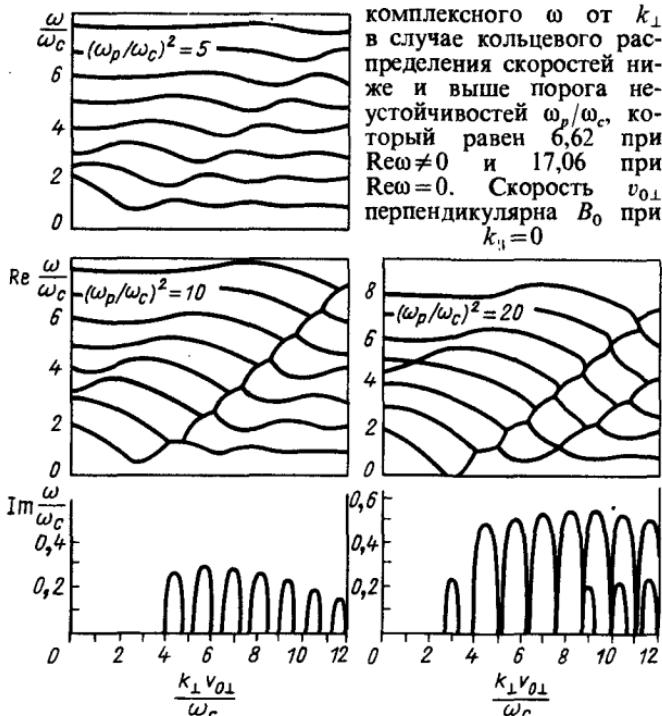
При $p \rightarrow \infty$ кольцо становится бесконечно тонким, т. е. имеет место холодный случай, и F_0^∞ принимает вид

$$F_0^\infty(v_\perp) = \delta(v_\perp - v_{\perp 0}) / 2\pi v_{\perp 0}. \quad (5.109)$$

Все частицы имеют одинаковую скорость $v_{\perp 0}$. Холодное кольцо неустойчиво при $(\omega_p/\omega_c)^2 > 6,62$, как показано в работе [Crawford and Tataronis, 1965], и решение дисперсионного уравнения имеет показанный на рис. 5.26 вид. Выполняя задание, учтите, что при $(\omega_p/\omega_c)^2 = 10$ нарастающие комплексные корни равны $\omega/\omega_c = 1,37 + i \cdot 0,265$ при $k_\perp v_{\perp 0} / \omega_c = 4,5$ и $2,34 + i \cdot 0,273$ при $k_\perp v_{\perp 0} / \omega_c = 5,5$. Получите моду с нулевой частотой $\text{Re}\omega = 0$ при $k_\perp v_{\perp 0} / \omega_c \approx 3$. Значения $k_\perp = 0$ получаются на частотах $n\omega_c$ плюс гибридные частоты. Значения $k_\perp \neq 0$ при $\omega = n\omega_c$ являются нулями функций J_n и J'_n от аргумента $k_\perp v_0 / \omega_c$.

Действительные части частоты лежат примерно посередине между циклотронными гармониками, а максимумы мнимых частей даже при $(\omega_p/\omega_c)^2 \gg 1$ сравнимы с ω_c . Такое ограничение неустойчивости ставит вопрос — почему максимальный инкремент $\gamma \lesssim \omega_c$, а не $\gamma \sim \omega_p$? Кроме того, одномерная функция распределения $F_0^\infty(v_\perp)$, проинтегрированная по v_y , т. е. проекция на ось v_x , имеет два резких максимума, проявляющих себя как два потока, что было показано в книге [Schmidt, 1979]. Однако когда критерий Пенроуза для незамагниченной плазмы применяется к этому распределению, то интеграл Пенроуза равен нулю, что означает отсутствие неустойчивости. Этот результат отмечен в [Lindgren e.a., 1976]. Следовательно, кольцевая

Рис. 5.26. Зависимость комплексного ω от k_{\perp} в случае кольцевого распределения скоростей ниже и выше порога неустойчивостей $(\omega_p/\omega_c)^2$, который равен 6,62 при $Re\omega \neq 0$ и 17,06 при $Re\omega = 0$. Скорость $v_{0\perp}$ перпендикулярна B_0 при $k_{\parallel} = 0$



неустойчивость требует присутствия магнитного поля B_0 . Если бы γ было больше ω_c , то магнитное поле не играло бы никакой роли, значит, максимальные инкременты для одиночного кольца будут порядка ω_c .

Кольцевое распределение интересно по нескольким причинам. Во-первых, нейтральный пучок, инжектируемый в магнитное поле, например в экспериментах по управляемому термоядерному синтезу, создает растянутое распределение. Во-вторых, кольцо служит моделью слабоконического распределения, которое относительно легко описывается теоретически. В-третьих, максвелловское распределение $F(v_{\perp})$ можно получить с помощью набора колец. Именно поэтому это распределение по v_{\perp} и было выбрано для задания.

Очень похожая неустойчивость имеет место для горячего кольца и горячего плазменного ядра. Границы неустойчивости для холодного кольца и горячего плазменного ядра даны в работе [Tataronis and Crawford, 1970]. В работе [Mynick e.a., 1977] представлены исчерпывающие результаты по незамагниченнной плазме с двумя ионными компонентами. На основе критерия Пенроуза были получены границы устойчивости и значения инкрементов в широком диапазоне температуры и отношений плотностей плазмы и ядра. Эти результаты могут дать полезные ориентиры в случаях, когда $(\omega_p/\omega_{ci})^2 \gg 1$ и

инкремент $\text{Im}\omega/\omega_c \gtrsim 1/\pi$, что означает, что ионы почти не замагничены. В работах [Lee and Birdsall, 1979 *a,b*] теоретические результаты замагниченной модели существенно дополнены и подтверждены с помощью моделирования. Эта двухкомпонентная модель также удобна для изучения, и читатель может исследовать ее после изучения холодной кольцевой модели.

Задача

5.22. Получите связь между величиной $v_{\perp 0}$ из формулы (5.109) и a_1 из (5.108) для $p \gg 1$.

5.17. ЗАДАНИЕ ПО ЗАМАГНИЧЕННОМУ КОЛЬЦЕОБРАЗНОМУ РАСПРЕДЕЛЕНИЮ

Исследуйте поведение однородной замагниченной плазмы с холодным кольцевым распределением скоростей с нулевым значением v_0 . Выберите $(\omega_p/\omega_c)^2 = 10$; комплексные ω при действительных k , полученные использованием периодической модели ES1, показаны на рис. 5.26.

Пусть частицами будут ионы, а электроны в ES1 замените однородным нейтрализующим фоном.

Придумайте схему задания начальных условий, в которой размещение частиц по кольцу радиуса $v_{\perp 0}$ в пространстве скоростей сочетается с максимально возможным однородным распределением частиц в фазовом пространстве x , v_x , v_y . Например, пусть частицы однородно размещены по координате x , а скорости определяются выражениями

$$v_{xi} = v_{\perp 0} \cos \theta_i, \quad (5.110)$$

$$v_{yi} = v_{\perp 0} \sin \theta_i. \quad (5.111)$$

Подумайте, почему нам не хочется, чтобы θ_i было явно связано с x_i ? Маленькое изменение в подпрограмме INIT дает хорошее задание кольцевого распределения. При запуске программы задаются величины WC , $VO = v_{\perp 0}$ и $NLG = 1$. Измените логическую схему, чтобы пропустить задание начальных скоростей, включая $VT2$, но сохранить перемешивание координат. Часть программы между операторами с метками 50 и 51 затем задает размещение значений скорости по кругу. Однако угол $TNETA$ предназначен для задания теплового распределения (5.108) [см. задачу 5.24, которую мы изменяем с помощью соотношения $TNETA = TWOPI*(I-1)/NGR$]. При этом частицы загружаются в компьютер с равномерным распределением по углу, который монотонно возрастает с номером i , в то время как координаты x_i перемешаны. Из-за высокой степени упорядоченности фазового пространства электрическое поле в начале получается без шумов, т. е. спокойным.

Полагая $\omega_p = 1$ и $\omega_c = (10)^{-1/2}$, задайте $v_{0\perp}$ так, чтобы $kv_{10}/\omega_c = 4,5$ или 5,5, чтобы получить один из максимальных инкрементов для основной моды. При $\Delta t = 0,2$, $NT = 600$, $XI = 10^{-3}$ и $N = 4096$ неустойчивость нарастает на несколько порядков и насыщается, обеспечивая возможность точного определения комплексного ω .

Проверьте результаты в начале моделирования сравнением с линейной теорией. Пронаблюдайте быстрый коллапс холодного кольца в тепловое распределение, как показано в работе [Byers and Grewal, 1970]. Повторите их наблюдения сдвига частотного спектра электрического поля примерно от $3\omega_c/2$ или $5\omega_c/2$ в линейном режиме до $i\omega_c$ в режиме после насыщения, где $f(v)$ становится гауссовым и возможно появление мод Бернштейна.

Задачи

5.23. В подпрограмме INIT в коде ES1 установите связь между $NV2$ и $VT2$ и величинами $2p$ и a_\perp в формуле (5.108). $NV2$ и $2p$ могут отличаться на единицу из-за разницы в элементах пространства скоростей v_\perp .

5.24. Объясните, как с помощью неизменной подпрограммы INIT задать распределение (5.108), используя $NLG = NG$ и $N \gg NG$. Что случится, если $NLG = 1$? Рассмотрите перемешивание углов с использованием троичного численного обращения [Denavit and Walsh, 1981], обеспечивающего отсутствие корреляции между x , v_\perp и θ .

5.18. ПРИМЕНЕНИЕ ES1 В ИССЛЕДОВАНИЯХ

От самых ранних работ до настоящего момента одномерная электростатическая программа моделирования методом крупных частиц продолжает быть продуктивным исследовательским орудием познания. В дополнение к уже цитированным в этой главе статьям упомянем только одну работу, из которой будут ясны области исследований, где использовались эти программы.

Наличие захваченных частиц может приводить к неустойчивости на боковых частотах $\omega \approx \omega_p \pm \omega_{tr}$, см. [Kruer and Dawson, 1970]. Классический пример параметрической неустойчивости плазмы, где падающая волна нелинейно связана с другими модами, которые получают от нее энергию, исследовался в работе [Kruer and Dawson, 1972]. В этой работе показано нарастание удельного сопротивления в результате развития такого взаимодействия. Релятивистский случай рассмотрен в работе [Lin and Tsintsadze, 1976]. Другим интересным следствием нелинейной связи мод является взрывная неустойчивость, названная так потому, что она нарастает быстрее, чем экспонента; примеры приведены в работе [Йонес анд Фукаи, 1979]. Расширение плазмы в вакуум рассмотрено в работе [Denavit, 1979]. Программа ES1 с некоторыми изменениями использовалась во многих случаях. В работе [Lee and Bird-

sall, 1979^в] к ней была добавлена линейная восприимчивость электронной жидкости. В работе [Cohen and Maron, 1980] моделировалось линеаризованное движение электронов при наличии градиента плотности. Такие виды моделирования с помощью ES1 легко выполняются на современных ЭВМ. В работе [Albritton and Langdon, 1980] исследовалось изменение нагрева электронов и профиля плотности в плазме под действием переменного электрического поля. Условия образования электростатического скачка — двойного слоя — в авроральной магнитосфере изучались в работе [Hudson and Potter, 1981]. Многие статьи из этих работ содержат ссылки на другие приложения одномерного электростатического моделирования.

ГЛАВА 6

ОДНОМЕРНАЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНАЯ ПРОГРАММА ЕМ1

6.1. ВВЕДЕНИЕ

Одномерные коды даже с тремя компонентами скорости почти всегда легче для программирования и использования, а также требуют меньших вычислительных затрат, чем двух- и трехмерные. Существуют одномерные алгоритмы, которые обладают хорошими свойствами. Все это учтено в приведенном здесь электромагнитном коде, использующем простой и устойчивый метод вычисления полей.

Первый полностью электромагнитный одномерный алгоритм был создан Даусоном в 1965 г., который выделил поперечные поля в левых и правых частях уравнений. Выбором соотношения $\Delta x = c\Delta t$ изменение поперечных полей во времени было сведено просто к сдвигу значений на одну ячейку и добавлению вклада от тока частиц, пересекающих световые лучи. Мы обсудим вариант этого одномерного алгоритма в том виде, как он был сформулирован и использован в работе [Langdon and Dawson, 1967], а затем применялся при исследовании лазерной плазмы [Cohen e.a., 1975] авторами этой главы.

В гл. 15 даны двух- и трехмерные полностью электромагнитные программы.

6.2. ОДНОМЕРНАЯ МОДЕЛЬ

На рис. 6.1 показана ориентация рассматриваемых компонент линейно поляризованных электромагнитных волн. Электромагнитные и электростатические волны распространяются вдоль оси x ; изменения величин по y и z отсутствуют, т. е.

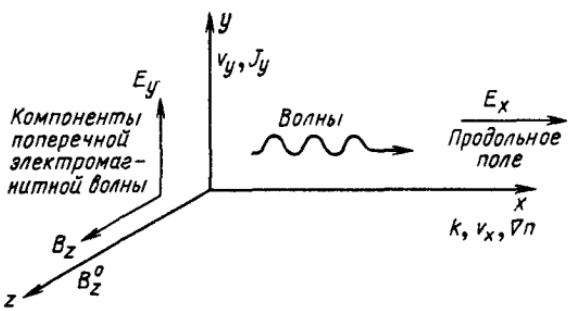


Рис. 6.1. Расположение частиц и компонент поля в случае линейной поляризации в коде EM1; продольное электрическое поле направлено вдоль оси x , поперечное поле — вдоль оси y , волна распространяется по оси x

$k_y = k_z = 0$. Вдоль оси x плазма может быть неоднородной и на нее могут быть наложены магнитные поля. Для удобства \mathbf{B} , представляющее сумму полей волны и внешнего поля, выбрано направленным вдоль оси z Продольное электрическое поле обозначено E_x , а поперечное поле излучения E_y . Частицы имеют три координаты в фазовом пространстве x , v_x и v_y . Программы EM1 для периодических систем и EM1BND для ограниченных систем были написаны Коеном, Мостромом, Николсоном и Ленгдоном. Коэн предложил модель произвольно поляризованной волны с добавлением другой компоненты статического магнитного поля B_x^0 , а также волновых полей B_y и E_z , скорости v_z и плотности тока J_z . Как показано ниже, это немного изменяет систему уравнений Максвелла.

6.3. ИНТЕГРИРОВАНИЕ ОДНОМЕРНЫХ УРАВНЕНИЙ ПОЛЯ

Уравнения Максвелла для поперечных полей, используемых в модели, имеют в рационализированной СГС системе единиц Хевисайда — Лоренца такой вид:

$$\partial \mathbf{E} / \partial t = c \nabla \times \mathbf{B} - \mathbf{J}, \quad (6.1)$$

$$\partial \mathbf{B} / \partial t = -c \nabla \times \mathbf{E}. \quad (6.2)$$

Вычитая и складывая эти уравнения для E_y , B_z и J_y , получаем уравнения

$$(\partial / \partial t \pm c \partial / \partial x)^{\pm} F = -1/2 J_y, \quad (6.3)$$

где

$$^{\pm} F \equiv 1/2 (E_y \pm B_z). \quad (6.4)$$

Поперечные поля получаются из $^{\pm} F$ по формулам

$$E_y = ^+ F + ^- F, \quad (6.5)$$

$$B_z = ^+ F - ^- F. \quad (6.6)$$

Поток вектора Умова — Пойнтинга имеет вид

$$P = c^2 (^+ F^2 - ^- F^2), \quad (6.7)$$

а плотность энергии равна $^+ F^2 + ^- F^2$. Величины E_y , B_z , J_y^{\pm} , F и P определены в узлах сетки.

Поля можно легко определить, так как левая часть уравнения (6.3) является полной производной для наблюдателя, движущегося со скоростью $\pm c$, т. е. обычной производной, взятой на вакуумной характеристике, так что (6.3) можно записать в виде

$$\begin{aligned} & (\pm F(t + \Delta t, x \pm c\Delta t) - \pm F(t, x)) / \Delta t = \\ & = -1/2 J_y^\pm(t + \Delta t/2, x \pm c\Delta t/2), \end{aligned} \quad (6.8)$$

где J_y^\pm — соответствующим образом усредненный центрированный по времени и пространству ток, как видно из его аргументов. Следовательно, можно интегрировать прямо вдоль вакуумных характеристик ($x = \pm c\Delta t + \text{const}$), используя шаг сетки $\Delta x = c\Delta t$.

Формально можно считать, что поле в узле сетки с номером j в момент $n+1$ определяется выражением

$${}^\pm F_j^{n+1} = {}^\pm F_{j \mp 1}^n - \Delta t / 4 (J_y^{-, j \mp 1} + J_y^{+, j}), \quad (6.9)$$

где J_y^- и J_y^+ обозначают плотности тока, вычисленные по значениям скоростей $v_y^{n+1/2}$, вычисленных в узлах сетки с помощью линейного взвешивания по координатам x^n и x^{n+1} соответственно. Это означает, что поле из узла сетки $j \pm 1$ распространяется в узел j под действием источников в узлах j и $j \mp 1$. Все величины показаны на рис. 6.2.

Ток J_y^- получается из значения $[qv_y(t + \Delta t/2)]$ для i -й частицы линейным взвешиванием координаты частицы $x_i(t)$, а ток J_y^+ получается аналогично из значения $x_i(t + \Delta t)$. Эти величины определяются таким способом для того, чтобы токи, входящие в соотношение (6.9), т. е. усредненные J_y^- и J_y^+ , относились к точкам, лежащим посередине между узлами сетки x и $x \pm c\Delta t = x \pm \Delta x$, как требуется в уравнении (6.8).

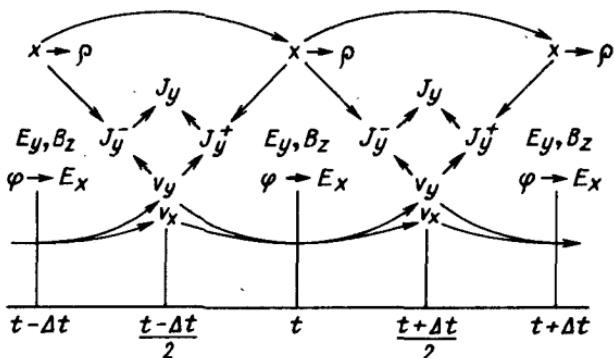


Рис. 6.2. Расположение временных шагов, используемое в программе EM1. Движение частиц рассчитывается по методу с перешагиванием, показанному кривыми линиями, ρ — плотность заряда, необходимая для вычисления ϕ , затем рассчитывается E_x

Заметьте, что ${}^+F$ и ${}^-F$ представляют собой приходящие в узел справа и слева электромагнитные величины, распространяющиеся с постоянной скоростью $c = \Delta x / \Delta t$, т. е. со скоростью света в вакууме. Однако в плазме электромагнитные волны распространяются с фазовой скоростью $v_{\text{phase}} > c$, следовательно, ${}^+F$ и ${}^-F$ будут электромагнитными полями, приходящими справа и слева в точку рассмотрения только в вакууме и в областях вне плазмы.

Продольное поле E_x равно $-\nabla\phi$, а потенциал ϕ определяется из решения уравнения Пуассона, как в программе ES1.

Схема (6.8) является центрированной во времени, обратимой, имеет второй порядок точности и аккуратно описывает собственное поле излучения. В одномерном случае сила реакции излучения $(\ddot{v}_y)_{\text{rad}} = -v_y q^2 / 2mc$ пропорциональна скорости — удивительный результат, который можно согласовать со случаем точечных трехмерных частиц, рассматривая излучение от движущейся сферической заряженной оболочки в пределе больших и малых отношений ее радиуса к длине волны. Факт, что плазменный слой не может быстро излучить свою тепловую энергию, можно объяснить в терминах радиационных нормальных мод слоя [Langdon, 1969]. Устойчивость по отношению к нефизическим модам пучка, т. е. отсутствие численной черенковской неустойчивости, отмеченная Коеном и проанализированная в работе [Godfrey and Langdon, 1975] является неожиданной и обсуждается в следующем параграфе.

У этого алгоритма есть и другие достоинства:

1) поля известны в узлах с номерами j и в моменты времени n , которые являются целыми числами, что очень удобно для диагностики и решения уравнений движения частиц, так как не требуется процедур усреднения и обратных им, типичных в случаях 2D и 3D электромагнитных программ;

2) просто задаются условия излучения для ${}^\pm F$; в работе [Langdon, 1969] рассмотрено излучение ограниченной плазмы в вакуум.

В конце § 6.2 упомянута модель с произвольно поляризованной волной, где все величины зависят только от x , но статическое магнитное поле лежит в плоскости $x-z$ и есть все три компоненты скорости. Такой код обозначается 1D3V, и один из его вариантов рассматривался в § 4.5. Дополнительные составляющие поля E_z и B_y , а также плотности тока J_z требуют решения дополнительных уравнений для поперечного поля

$$(\partial/\partial t \pm c \partial/\partial x)(E_z \mp B_y) = -{}^1/{}_2 J_z. \quad (6.10)$$

Эти уравнения не включены в версию кода EM1, приведенную здесь, однако такое дополнение было бы весьма полезно и позволило бы промоделировать множество электромагнитных и электростатических волн, распространяющихся под произволь-

ным углом относительно внешнего магнитного поля. Вычислительная простота и устойчивость основного одномерного алгоритма при этом сохраняются.

Задача

6.1. Придумайте явный метод решения уравнений Максвелла в духе работы [Morse and Nielson, 1971] для тех же полей, что используются в $1\frac{1}{2}$ модели Ленгдона—Даусона в настоящем параграфе. Нарисуйте сетку и отметьте вычисляемые величины во времени и пространстве; запишите центрированные конечно-разностные уравнения первого порядка. Можете ли вы получить количественное или качественное условие на $\Delta x/c\Delta t$, т. е. условие Куранта? Найдите отличие вашего метода от электромагнитной схемы Ленгдона—Даусона.

6.4. УСТОЙЧИВОСТЬ МЕТОДА

Численная устойчивость одномерного электромагнитного алгоритма моделирования плазмы исследовалась в работе [Godfrey, 1974] и с акцентом на численную черенковскую неустойчивость — в работах [Boris and Lee, 1973; Godfrey, 1975]. Эта неустойчивость возникает, когда дисперсия поперечной волны в вакууме, определяемая соотношением $\omega = \pm ck$, получается численными методами, давая $|\omega/k| < c$ обычно вблизи $k\Delta x = \pi$. Такие фазовые скорости допускают взаимодействие волна-частица черенковского типа, являющееся нефизическим. В статье [Godfrey, 1974] конечно-разностная схема была неправильно приписана Ленгдону; в работе [Godfrey and Langdon, 1976] этот вопрос был пояснен и был проанализирован настоящий алгоритм Ленгдона—Даусона.

Основным приемом излагаемого здесь метода является численное интегрирование уравнений Максвелла на их вакуумных характеристиках. Это легко выполняется в одномерном случае, когда поперечные волны, приходящие справа и слева (\pm), явно развязаны, в результате получаем соотношение

$$(E_y \pm B_z)_{j+1}^{n+1} = (E_y \pm B_z)_j^n - (J_y)_{j \pm 1/2}^{n+1/2} \Delta t \quad (6.11)$$

и аналогичное уравнение для E_z и B_y . Целые индексы n и j относятся соответственно к времени и пространству. Единицы выбраны таким образом, что скорость света и плазменная частота равны единице. Заметим, что уравнение (6.11) требует выполнения равенства $\Delta x = \Delta t$.

Можно показать, что улучшенная устойчивость таких разностных схем связана в основном не с отсутствием дисперсии при вакуумном распространении волны, а с менее широко распространенными способами вычисления значений тока на сетке, используемыми в этих схемах. Так, в случае, рассмотр-

ренном в работе [Godfrey, 1974], $J^+ = J^-$ и определяется по формуле

$$J_{j \pm 1/2}^{n+1/2} = \sum_i q_i v_i^{n+1/2} 1/2 [S(X_{j \pm 1/2} - x_j^{n+1}) + S(X_{j \pm 1/2} - x_i^n)], \quad (6.12)$$

где $S(x)$ — координатная интерполяционная функция, а J — ток частиц; x_i и v_i — координата и скорость i -й частицы. Другими словами, токи интерполируются на сетке по координатам частиц в моменты времени t^{n+1} и t^n и скоростям, взятым при $t^{n+1/2}$, а затем усредняются для получения $J^{n+1/2}$. Основным эффектом такого определения J является сглаживание токового члена в дисперсионном соотношении для уравнения (6.11) множителем, зависящим от скорости в виде $\cos(kv\Delta t/2)$. Для больших скоростей v множитель подавляет нефизические эффекты при $k\Delta x$ вблизи $\pm\pi$. Кроме того, он также искажает физические явления в этой области волновых чисел. Этот недостаток, однако, был преувеличен в работе [Godfrey, 1974]. Для любого алгоритма, а не только для этого, необходима осторожность в интерпретации поведения мод при больших k . Такое определение J успешно использовалось в двух- и трехмерных электромагнитных кодах и статьях [Langdon and Lasinski, 1976; Boris, 1970].

Настоящая разностная схема Ленгдона определяет сеточный ток не по формуле (6.12), а из соотношения

$$J_{j \pm 1/2}^{n+1/2} = \sum_i q_i v_i^{n+1/2} 1/2 [S(X_{j+1} - x_i^{n+1}) - S(X_j - x_i^n)]. \quad (6.13)$$

Ток усреднен вдоль вакуумной характеристики, а не по фиксированным точкам пространства.

Для холодного пучка, состоящего из частиц одного сорта с малыми скоростями $v \ll c$, токовый член в электромагнитном соотношении умножается на характерное для многих разностных схем выражение, уменьшающее его вклад. Оно имеет вид $\cos(kc\Delta t/2)$ или, что то же самое, $\cos(k\Delta x/2)$ в силу условия $c = \Delta x / \Delta t$. Этот множитель сглаживает влияние тока на коротких длинах волн независимо от скорости, и все вычислительные проблемы, возникающие из-за пересечения (связи) дисперсионных кривых электромагнитных волн и пучка вблизи $k\Delta x = \pm\pi$, исчезают. При больших скоростях пучка дисперсионные кривые в этой задаче раздвигаются и нет никакой неустойчивости даже при скорости пучка, равной c .

6.5. КОД EM1 ДЛЯ ПЕРИОДИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Код EM1 очень похож на ES1. Головная программа вызывает подпрограммы GREATOR, FIELDS, ACCEL, MOVE, SETV, SETRHO, RPFT2, RPFTI2, CPFT, и процедуры построе-

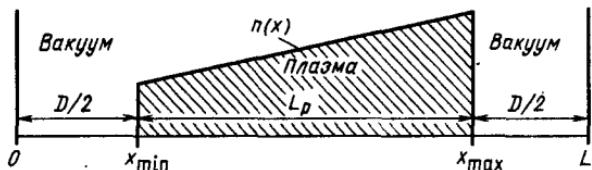


Рис. 6.3. Типичный профиль плотности $n(x)$, создаваемый в программе EM1BND при начальном распределении частиц. Интервалы $D/2$ — вакуумные

ния графиков точно так же, как и в ES1. Конечно, подпрограмма FIELDS кроме вычисления продольного поля $E_x = -\nabla\phi$ и потенциала ϕ из уравнения Пуассона решает также уравнения Максвелла для поперечных полей E_y и B_z . Подпрограмма CREATOR задает релятивистское максвелловское распределение; ACCEL, также релятивистская, соответствует схеме, предложенной Борисом (Boris) (см. гл. 15), и использует быстрый алгоритм вращения Бунемана (см. § 4.4). Исследователь, имеющий опыт работы с программой ES1, должен быстро освоиться с использованием EM1.

6.6. КОД EM1BND ДЛЯ ОГРАНИЧЕННЫХ СИСТЕМ; ЗАДАНИЕ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ $f(x, v)$

Вариант программы EM1 для ограниченных систем называется EM1BND. В этом параграфе описано задание начальных условий, которое отличается от EM1, а граничные условия изложены ниже.

В коде EM1BND частицы размещаются в пространстве в соответствии с профилем плотности, определяемым функцией FDENS(x) на длине $L_p \equiv L - \text{DMOAT} < L$, окруженной с обеих сторон вакуумными интервалами ширины DMOAT/2, как показано на рис. 6.3. Функция FDENS(x) нормирована таким образом, что интеграл от нее по интервалу L_p равен полному числу частиц N_s каждого сорта, который задается в задаче. Реализованный алгоритм загрузки включает в себя интегрирование FDENS от $XMIN = \text{DMOAT}/2$ до x и размещение частицы при каждом значении x , так что этот интеграл увеличивается на единицу по сравнению со своим предыдущим целым значением. Такое использование накапливающегося распределения повторяется для каждого сорта частиц и заданной неоднородной фоновой плотности заряда, добавляемой в узлы сетки для обеспечения локальной и общей зарядовой нейтральности. Затем при необходимости задается синусоидальная модуляция плотности заряда, как в ES1. В существующем виде код позволяет задавать квадратичный профиль плотности общего вида $f = a + bx + cx^2$, где N_s , DMOAT и коэффициенты a и b (в единицах длины L_p) задаются при вводе начальных данных.

Оба кода (EM1 и EM1BND) позволяют создавать начальные распределения по скоростям в виде холодных пучков, или в виде максвелловского распределения. Задание максвелловского распределения аналогично по структуре заданию неоднородной плотности заряда, только функция профиля плотности $FDENS(x)$ заменена на соответствующую функцию распределения по скоростям $f(v_x), f(v_y)$ или $f(p=\gamma|v|/c)$ в случае релятивистских высоких температур.

При нерелятивистских температурах нерелятивистские максвелловские функции распределения по скоростям $f(v_x)$ и $f(v_y)$ нормированы так, что интеграл от них по v_x или v_y от $-\infty$ до $+\infty$ равен полному числу частиц N_s соответствующего сорта. Задание начальных скоростей включает в себя интегрирование f от 0 до v и присвоение значения v частице в те моменты, когда интеграл увеличивается на единицу по сравнению с предшествующим целым значением. Такое задание выполняется вплоть до величины v , равной четырем значениям тепловой скорости, в результате чего первые $N_s/2$ частиц получают нарастающие в зависимости от их номера скорости. Такие же отрицательные значения скоростей присваиваются затем остальным $N_s/2$ частицам. Если N_s нечетно, то последняя непарная частица имеет нулевую скорость. Распределения по v_x и v_y задаются независимо и первоначально декоррелируются друг от друга посредством обмена значений скорости у случайно выбранных пар частиц.

В EM1 возможно дополнительно задать релятивистскую дрейфовую скорость v_0 , соблюдая ограничение $v < c$, с помощью релятивистской формулы сложения скоростей [Jackson, 1975]

$$v'_x = (v_x + v_0) / \left(1 + \frac{v_x v_0}{c^2} \right), \quad v'_y = v_y \sqrt{1 - v_0^2/c^2} / \left(1 + \frac{v_x v_0}{c^2} \right). \quad (6.14)$$

Для релятивистских температур и изотропного распределения по скоростям двухмерное релятивистское максвелловское распределение по нормированным импульсам $p \equiv \gamma|v|/c$ имеет вид

$$f(p) = (N_s/2\pi) \frac{mc^2}{T} \exp \left[-\frac{mc^2}{T}(\gamma-1) \right] / \left(1 + \frac{T}{mc^2} \right), \quad (6.15)$$

где $\gamma = \sqrt{1+p^2}$, а f нормировано следующим образом:

$$\int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} f p dp = N_s. \quad (6.16)$$

Угол θ определяется так: $p_x = p \cos \theta$ и $p_y = p \sin \theta$. Если мы выполним численно интегрирование $f(p)$ в пределах $\int_0^p p dp$ и умножим на $\pi/2$, то получим

$$\frac{\pi}{2} \sum_{n=1}^{IP} (n \Delta p) \Delta pf(n \Delta p) = 1/4 N_p, \quad (6.17)$$

где $p \leq IP \Delta p$. Результат представляет собой число частиц в первом квадранте $0 \leq \theta \leq \pi/2$ с импульсом $p \leq IP \Delta p$, а N_p — это полное число частиц во всех квадрантах, имеющих импульс, меньший или равный p . Таким образом, каждый раз, когда текущий индекс IP достигает значения, при котором этот интеграл увеличивается на единицу по сравнению со своим предыдущим целым значением, мы присваиваем частице значение импульса $p = IP \Delta p$ и случайное значение угла θ в интервале от 0 до $\pi/2$. Для устранения дрейфа или смещения по v_x и v_y , одновременно четыре частицы получают значения $\theta, \theta + \pi/2, \theta + \pi, \theta + 3\pi/2$. Величины скоростей определяются по формулам

$$v_x = p \cos \theta / \sqrt{1 + p^2}, \quad v_y = p \sin \theta / \sqrt{1 + p^2}. \quad (6.18)$$

Число шагов интегрирования, необходимых для загрузки всех N_s частиц, весьма велико: $NSTEPS = 10^5$ для обеспечения необходимой точности, а предел интегрирования равен $PMAX = 4\sqrt{T/mc^2 + 4(T/mc^2)^2}$, что дает отношение $f(PMAX)/f(p=0) = \exp(-8)$. Размер шага интегрирования определяется так: $\Delta p = PMAX/NSTEPS$.

На последнем этапе загрузки частиц уменьшается корреляция между x и v_x или v_y путем выполнения случайного парного обмена координат частиц. Профиль плотности при этом процессе не изменяется.

Задача

6.2. 1) Исходя из нерелятивистской одномерной максвелловской функции распределения проанализируйте графически и полукаличественно с помощью таблицы функции erf(v/v_c) эффект влияния конечного общего числа частиц, например 1000 и 4000, на населенность хвоста функции распределения. Охарактеризуйте диапазоны скоростей $v_i, 2v_i, 3v_i, 4v_i$ и т. д. **2)** Оцените влияние, которое может иметь этот факт на резонанс между волной и частицей (типа затухания Ландау) и другие физические эффекты. **3)** Сравните полученные результаты с результатами при релятивистском максвелловском распределении, когда соотношение v_i^2/c^2 уже не пренебрежимо мало (численное значение выберите из соображений удобства проведения арифметических выкладок). **4)** Предложите (дополнительно) схему релятивистского спокойного старта со взвешиванием q и t для получения сглаженного хвоста максвелловского распределения.

6.7. ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ В КОДЕ EM1BND

Коды EM1 и ES1 являются периодическими, так как в них все величины, изменяющиеся в пространстве, полагались периодическими с периодом повторения L , равным длине систе-

мы. В частности, все величины вида $F(x)$, связанные с электромагнитными или электростатическими полями, удовлетворяют условию $F(x=L)=F(x=0)$. Отсюда следует, что как только электромагнитное поле достигает границы справа или слева, оно тут же появляется на противоположной границе. Применение этого условия к электростатическому потенциалу дает условие исчезновения усредненного по координате электростатического поля $\langle E_x \rangle = -\langle \partial \phi / \partial x \rangle$, а применение к E_x — зарядовую нейтральность системы. Для обеспечения периодичности в программе также имеется условие для частиц — при выходе из системы через одну границу частица должна одновременно войти через противоположную границу с той же скоростью и иметь соответствующую координату.

Код EM1BND учитывает границы системы, и в нем $F(x=L) \neq F(x=0)$. Однажды излученные поля выходят из системы и больше не возвращаются в нее, выбывая из рассмотрения. Внешние поля излучения, например лазерные, могут входить в систему и усиливаться в ней. Стенки системы прозрачны для излучения. Электростатическое поле E_x полагается равным нулю на границе и вне системы, что обеспечивает условие зарядовой нейтральности $E_x(x)=0$ при $x \leq 0$ и $x \geq L$.

Нам бы хотелось также сохранить возможность решения уравнения Пуассона для электростатического потенциала с помощью преобразования Фурье, но тогда требуется, чтобы плотность заряда была периодической функцией, т. е. $\rho(x=L)=\rho(x=0)$. Единственной возможностью в таком случае является наложение условия

$$\rho(x=L)=\rho(x=0)=0. \quad (6.19)$$

При этом частное решение ϕ_p неоднородного уравнения

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = -\rho(x) \quad (6.20)$$

будет периодическим. К нему необходимо добавить решение

$$\phi = a + bx \quad (6.21)$$

однородного уравнения

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 0, \quad (6.22)$$

где b — константа, определяемая граничными условиями

$$E_x(0) = -\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_0 = -\left. \frac{\partial \phi_p}{\partial x} \right|_0 - b = -\left. \frac{\partial \phi_p}{\partial x} \right|_L - b = E_x(L) = 0. \quad (6.23)$$

Используя симметричное разностное представление производной и условие периодичности $\phi_p(x+L)=\phi_p(x)$, имеем

$$b = -\left. \frac{\partial \phi_p}{\partial x} \right|_0 = \frac{\phi_p(-\Delta x) - \phi_p(\Delta x)}{2\Delta x} = \frac{\phi_p(L-\Delta x) - \phi_p(\Delta x)}{2\Delta x}, \quad (6.24)$$

$$\varphi(X_j) = \varphi_p(X_j) + bX_j \text{ при } 0 \leq X_j \leq L, \quad (6.25)$$

$$E_x(X_j) = \frac{\varphi(X_j - \Delta x) - \varphi(X_j + \Delta x)}{2\Delta x} \text{ при } \Delta x \leq X_j \leq L - \Delta x. \quad (6.26)$$

Частицы не могут приблизиться к границе ближе чем на одну ячейку разностной сетки, так как необходимо выполнить условие $\rho(x=0)=\rho(x=L)=0$. В коде EM1BND это достигается размещением упруго отражающих стенок при $x=\Delta x$ и $x=L-\Delta x$. Когда частица сталкивается со стенкой (рис. 6.4), вектор скорости изменяет направление на противоположное и она находится на таком же расстоянии от стенки, как если бы она продолжала двигаться прямолинейно и проникла в стенку.

6.8. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ВЫХОДНЫХ ДАННЫХ В EM1 И EM1BND

Как и программа ES1, электромагнитные коды EM1 и EM1BND строят выходные графики фазового пространства, различные полевые величины (электростатические и электромагнитные) и источники как функции координаты, а также как изменение различных видов энергии во времени. Кроме того, коды строят распределение локальной температуры для каждого сорта частиц, энергию гармоник Фурье электростатического поля и приходящих в систему справа и слева электромагнитных полей.

Для вычисления значения локальной температуры сначала рассчитывается значение средней колебательной скорости $v_k(X_j)$ в каждом узле сетки. Усреднение скоростей проводится по всем частицам, которые удалены от узла сетки X_j не более чем на половину размера ее ячейки. Случайные или тепловые значения скоростей этих частиц равны разности между полной и колебательной скоростями, вычисленной по релятивистской формуле (6.14), и используются для вычисления релятивистской кинетической энергии каждой частицы. Усреднение этих энергий по всем частицам в интервале $X_j \pm \Delta x/2$ дает локальную тепловую энергию, приходящуюся на одну частицу, и это значение относится к узлу сетки X_j .

Энергия электростатических мод вычисляется с использованием гармоник Фурье электростатического потенциала $\varphi(k)$, определяемых на промежуточном этапе решения уравнения Пуассона. Программы строят графики зависимости энергии каждой моды от времени.

Как уже упоминалось выше, величины $\pm F$ являются обычными электромагнитными полями, падающими на систему справа и слева только в вакуумных промежутках, окружающих плазму в EM1BND. В коде EM1BND запоминаются величины $+F(x=L)$ и $-F(x=0)$ на каждом шаге по времени и проводится их анализ Фурье через NF шагов: на интервале от $t=0$ до

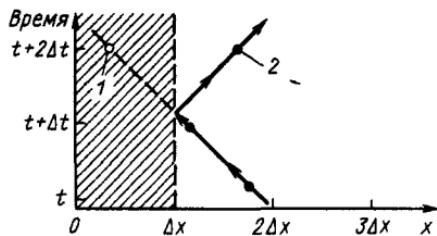


Рис. 6.4. Описание движения частиц с помощью отражения на левой границе в коде EM1BND:
 1 — траектория без отражения, 2 — с отражением; заштрихованная область — стена

$t = (NF - 1)\Delta t$, от $t = NF\Delta t$ до $t = (2NF - 1)\Delta t$ и т. д. В итоге получается $NF/2 + 1$ частот, включая $\omega = 0$, — от минималь-

ной ненулевой или фундаментальной частоты $\omega_0 = 2\pi/NF\Delta t$ до максимальной $\omega_{\max} = \pi/\Delta t$. Так как частота и волновое число в вакууме связаны дисперсионным соотношением $\omega = ck$, то мы получаем фундаментальное волновое число $k_0 = 2\pi/(NF\Delta x)$ и максимальное его значение $k_{\max} = \pi/\Delta x$. Таким образом, методы диагностики могут различать моды с максимальной длиной волны $\lambda = 2\pi/k_0 = NF\Delta x$, которая в зависимости от отношения NF/NG может быть большие или меньше длины системы L . Используемый метод быстрого анализа Фурье требует, чтобы NF было целой степенью 2.

Ниже приводится полный список выходных графиков:
 фазовое пространство: $v_x(x)$, $v_y(x)$ и $v_y(v_x)$;
 функции распределения: $f(x)$, $f(v_x)$ и $f(v_y)$;
 электростатические поля: $\Phi(x)$ и $E_x(x)$;
 электромагнитные поля: ${}^+F(x)$, ${}^-F(x)$, $E_y(x)$ и $B_z(x)$;
 источники поля: $\rho(x)$ и $J_y^+(x)$;
 температура каждого сорта частиц: $T_s(x)$, $T_s(t)$;
 энергия полей: E_x , E_y , ${}^+F$ и ${}^-F$ в зависимости от времени;
 энергия мод полей: E_x — для каждой моды в зависимости от времени, ${}^\pm F$ — в зависимости от номера;
 усредненный дрейфовый момент для каждого сорта частиц: $p_x^s(t)$, $p_y^s(t)$.

ГЛАВА 7

ЗАДАНИЯ ПО ИСПОЛЬЗОВАНИЮ ЕМ1

7.1. ВВЕДЕНИЕ

В коде EM1 не делается никаких физических допущений при решении уравнений Максвелла и уравнений движения частиц, и его применение ограничивают только условия одномерности, поляризации и конечность шага решения дифференциальных уравнений. Два варианта кода, EM1 и EM1BND, относятся соответственно к периодическим и конечным граничным условиям. В периодическом случае все величины, зависящие от

координаты x , т. е. амплитуды поперечных волн, потенциал, плотность заряда и т. д., являются периодическими. При учете границ частицы упруго отражаются от краев системы, электромагнитные волны поглощаются ими, а продольное электрическое поле полагается равным нулю.

Коды были уже успешно использованы для изучения линейных неустойчивостей, таких как релятивистская двухпотоковая неустойчивость, слабый пучок в плазме, вынужденное комбинационное и бриллюэновское рассеяние, а также линейное и нелинейное распространение электромагнитных волн в незамагниченной плазме.

Код EM1BND удобен для изучения взаимодействия лазерного излучения с плазмой, так как легко учесть отражения поперечных волн от стенок системы. Таким образом, в работе [Cohen e.a., 1975] были исследованы рамановское и бриллюэновское обратные рассеяния и резонансный лазерный нагрев плазмы. Код особенно удобен при изучении аномального поглощения электромагнитного излучения при учете кинетических явлений, например нелинейного затухания Ландау, распада волн, захвата частиц резонансно и нерезонансно возбужденными волнами биений (резонансный нагрев или резонансное рассеяние). Использование этой программы расширило наши понимание и теоретические представления в области резонансного возбуждения нелинейных нормальных мод [Cohen, 1975] и захвата частиц при резонансном нагреве [Cohen e.a., 1975].

Моделирование помогает понять захват частиц в потенциальные ямы, которые могут изменяться во времени таким образом, что это нельзя описать с помощью линейной теории возмущений.

В качестве более сложного случая можно проследить за поведением полной энергии (кинетическая энергия частиц и энергия полей), которая должна сохраняться. При учете границ необходимо учесть поток энергии через них. Исследуя линейные явления, например линейные дисперсионные соотношения для электромагнитных и электростатических волн малой амплитуды, инкременты циклотронного затухания или затухания Ландау, необходимо наилучшим образом проверить программу, убедиться в правильности даваемых ею результатов и накопить опыт работы. Мы уже убедились, что этот код дает результаты, согласующиеся с линейной аналитической теорией при рассмотрении распространения поперечных волн, электронных плазменных волн, ионно-акустических волн в незамагниченной плазме, правильно описывает линейное затухание Ландау, инкременты двухпотоковой электростатической и слабой плазменно-пучковой неустойчивостей, параметрическое рамановское и бриллюэновское рассеяния и линейный резонансный нагрев.

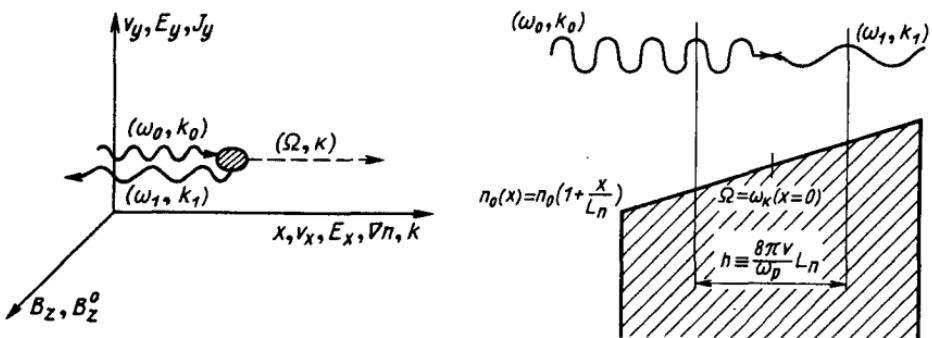


Рис. 7.1. Схематическое изображение направления векторов, описывающих задачу. Распространение волны и изменение плотности вдоль оси x . Поперечные волны линейно поляризованы и имеют компоненту E_y . Магнитное поле параллельно z

Рис. 7.2. Резонансный нагрев в неоднородной среде. Из-за резонансного условия это область длиной $h=8\pi v L_n/\omega_p$, вблизи плоскости точного резонанса, $n_0(x)=n_0(1+x/L_n)$. Градиент плотности, описываемой скалярной длиной $L_n \equiv [d[\ln(n)]/dx]^{-1}$, параллелен направлению распространения волн

7.2. РЕЗОНАНСНЫЙ НАГРЕВ ПЛАЗМЫ

В работе [Cohen e.a., 1975] рассмотрен нагрев плазмы двумя лазерами с частотами ω_0 и ω_1 . Частота биений $\Omega = \omega_0 - \omega_1$ лежит вблизи плазменной частоты ω_p (рис. 7.1). Нелинейное взаимодействие может быть рассмотрено как резонансный распад $\omega_0 \rightarrow \omega_1 + \Omega$, в котором часть R начальной мощности на частоте ω_0 переходит в частоты ω_1 и Ω и часть $R\Omega/\omega_0$ превращается в продольные плазменные колебания и в конечном счете в тепло благодаря затуханию. Целью теории и моделирования является определение зависимости параметра интенсивности нагрева R от параметров задачи, таких как интенсивности лазеров, масштабная длина плотности и температура.

Изучаемый здесь процесс включает три высокочастотные волны (две поперечные и одну продольную) без учета магнитного поля и служит иллюстрацией к более сложному трехволновому процессу, могущему включать в себя ионы и магнитное поле. Таким образом, рассмотрение электронного нагрева из-за затухания резонансного возбуждения биений двух высокочастотных волн может быть распространено на аналогичный нагрев ионов в магнитной ограниченной плазме.

Две линейно поляризованные поперечные волны падают с противоположных направлений на ограниченную, неоднородную, разреженную плазму (рис. 7.2). Возможно резонансное взаимодействие с продольной нормальной модой плазмы, если электростатическое возмущение, вызванное пондеромоторной

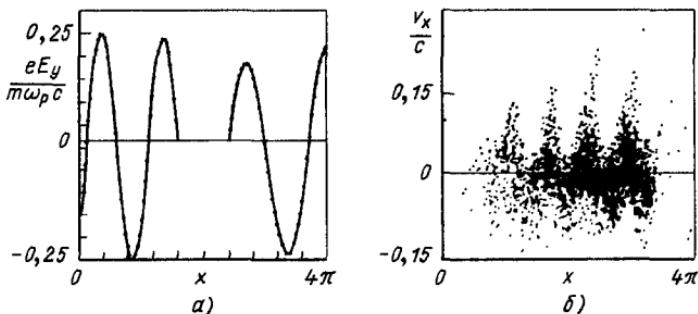


Рис. 7.3. Резонансный нагрев в конечной неоднородной среде. Электромагнитные волны, приходящие справа и слева до входа в область взаимодействия (a), и фазовое пространство (x, v_x) после установления электронной плазменной волны с большой амплитудой, $e/m=1$, $\omega_p=1$, $c \approx 2$ (б)

силой на разностной частоте, и волновой вектор $k(\Omega \ll \omega_0, \omega_1; k=k_0 - k_1)$ удовлетворяют в каком-либо месте плазмы дисперсионному уравнению Бома—Гросса. Из-за неоднородности плазмы трехволновое взаимодействие будет резонансным только в конечной области вокруг точки точного равенства (рис. 7.2). Затухание электронных плазменных колебаний приводит к необратимости трехволнового процесса и служит механизмом окончательной термализации части энергии электромагнитных волн. Диссипация может возникать из-за столкновений, затухания Ландау, конвективных потерь или нелинейной связи мод.

На рис. 7.3 показаны электронная плазменная волна большой амплитуды и биения. Начальное значение тепловой компоненты v_x/c было равно $v_{te}/c \approx 0,05$.

В качестве задания промоделируйте возбуждение резонансного трехволнового взаимодействия в горячей однородной электронной плазме с нейтрализующим ионным фоном при условиях

$$\omega_0 = \omega_1 + \Omega, \quad k_0 = k_1 + k.$$

1. Обсудите, рассортируйте и определите параметры, необходимые для обеспечения наблюдения желаемых физических процессов, т. е. условия на Δt , Δx , N и т. д., с тем чтобы аккуратно промоделировать поведение плазмы, в которой имеются две высокочастотные и одна низкочастотная волны. Выберите начальные значения $N \leq 4000$, $NT \leq 1000$, $NG \leq 256$.

2. Пусть затухание Ландау будет единственным механизмом, вызывающим затухание электронных колебаний плазмы, резонансно возбуждаемых на частоте $\omega_0 - \omega_1$. Стационарное состояние достигается за время, равное нескольким обратным декрементам О(1/v). Предложите подходящие параметры для моделирования двух противоположных световых волн. Пусть

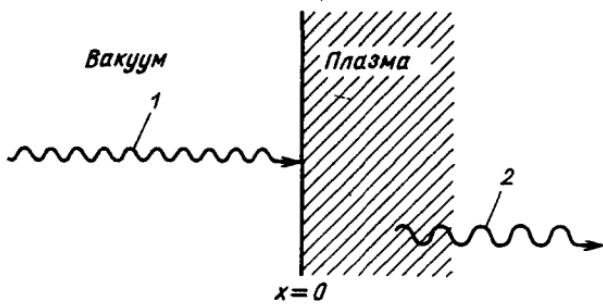


Рис. 7.4. Нормально падающие электромагнитные волны, бегущие вправо:
1—падающая волна; 2—прошедшая волна

$\omega_{pe} = 1$, $10 \geq (\omega_0, \omega_1) \geq 1$ и $0,01 \leq v \leq 0,1$; определите значения Δt , Δx , N , λ_D и т. д. Вычислите все частоты и волновые числа, определите зазор вокруг плазмы и проверьте поправку к плазменной частоте ω_{pe} , вызванную разностной сеткой.

3. Дополнительное задание. Пусть в неоднородной плазме $n = n_0(1+x/L)$ и $\omega_{pe} \approx \omega_{pe}(0)(1+x/2L)$. Предположите, что продольная волна резонансно возбуждается при $x=0$ и нерезонансно при $x \neq 0$. Тогда простая лоренцева модель дает отклик плазмы на действие пондеромоторной возбуждающей силы с формфактором

$$[(v/\Omega)^2 + (x/2L)^2]^{-1}.$$

Выполните критерий эффективной резонансной длины и проанализируйте, как выбор величины kL может повлиять на ваш выбор параметров в случаях 1 и 2.

7.3. НАБЛЮДЕНИЕ ПРЕДВЕСТНИКА

Это задание состоит в исследовании бегущей электромагнитной волны с частотой ω_0 , распространяющейся из вакуума в разреженную незамагниченнную плазму с $\omega_{pe} < \omega_0$ (рис. 7.4). Известно, что линейно поляризованная поперечная волна входит слева в ограниченную однородную плазму и распространяется направо с фазовой скоростью $\omega_0/k = c/\sqrt{1 - \omega_{pe}^2/\omega_0^2}$ и групповой скоростью kc^2/ω_0 для основной части волнового пакета, которая внезапно возникает для наблюдателя. Однако можно наблюдать также предвестники, опережающие основную часть волны.

Простая модель, описывающая предвестники, была дана в книге [Sommerfeld, 1954], где в пределе малой амплитуды волны были вычислены поля методом преобразования Фурье—Лапласа линейного волнового уравнения. В одномерном случае это дает выражение

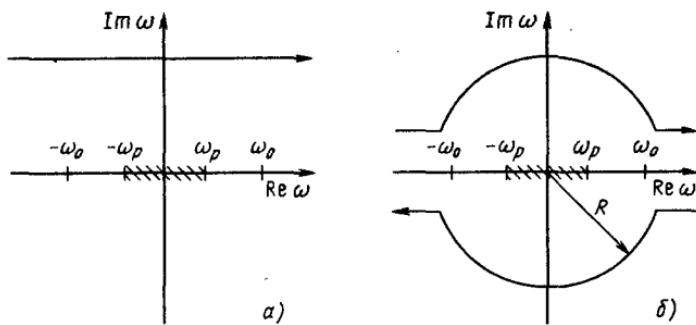


Рис. 7.5. Топология полюсов, точек ветвления и разрез на плоскости комплексного ω (а) и контур для вычисления асимптотического отклика (б)

$$f(x, t) = -\omega_0/2\pi \int_{-\infty + i\epsilon}^{\infty + i\epsilon} d\omega \frac{\exp[i(kx - \omega t)]}{\omega^2 - \omega_0^2}, \quad (7.1)$$

где $k_c = \sqrt{\omega_0^2 - \omega_p^2}$. Точки ветвления, разрезы и полюсы изображены на рис. 7.5, а. Замыкание контура интегрирования сверху при $x > 0$ и $t > 0$ дает $f(x, t) = 0$. Если мы замкнем контур снизу при $x > 0$ и $t > 0$ и выберем его в виде, показанном на рис. 7.5, б, то при $R/\omega_0 \gg 1$ асимптотически получим

$$f(x, t) \approx \begin{cases} \frac{\omega_0}{\omega_p} 2^{1/2} (ct - x)^{1/2} J_1 \left(\omega_p \left[\frac{2x}{c} \left(t - \frac{x}{c} \right) \right]^{1/2} \right), & x \leq ct, \\ 0, & x > ct. \end{cases} \quad (7.2)$$

По нулям функций Бесселя можно предсказать положение узлов и амплитуду поперечного электрического или магнитного поля как функцию времени. Типичный результат показан на рис. 7.6.

Подходящий для исследования предвестника набор параметров для кода EM1BND может иметь такие значения: $N1 = 2000$, $NT = 400$, $NG = 128$, $DT = 0,05$, $KO = 0,5$, $IRHO = 0$, $IRHOS = 0$, $IPHI = 0$, $IXVX = 10$, $IVXVY = 10$, $IEX = 5$, $IEY = 5$, $IBZ = 5$, $IEYL = 20$, $IEYR = 20$, $IFT = 10$, $WPMPR = 9,75$, $W1 = 7,9$, $EPMPR = 0,1$, $MOAT = 40$, $ITHERM = 25$; остальные параметры выберите сами. Результаты моделирования при этих параметрах очень хорошо согласуются с асимптотическим решением Зоммерфельда.

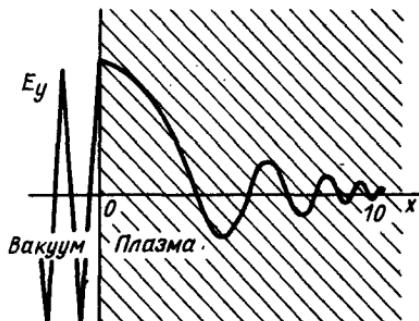


Рис. 7.6. Поперечное электрическое поле с предвестником при $x = t = 18$

ЧАСТЬ II

ТЕОРИЯ. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАЗМЫ МЕТОДОМ КРУПНЫХ ЧАСТИЦ ПРИ УЧЕТЕ КОНЕЧНОСТИ ВРЕМЕННЫХ И ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ШАГОВ

Моделирование обычно дает полезные результаты, имеющие физический смысл. В этой части книги объяснено, как значимость полученных результатов зависит от понимания сделанных при физическом моделировании приближений и дополнительных эффектов, возникающих случайно или по воле исследователя.

Мы уже встречались с некоторыми относительно простыми эффектами, возникающими при использовании конечно-разностных выражений Δt и Δx вместо истинных непрерывных уравнений в частных производных. Видели, что использование слишком большого временного шага приводит к ошибке и даже к нефизической неустойчивости, а пространственная сетка может действовать как фильтр, ослабляя и сглаживая физическую информацию. Наверное, если вы были достаточно активны при выполнении заданий первой части книги, вы обнаружили некоторые странные результаты, которые существенно выходили за рамки ожидаемых неточностей моделирования.

Теперь мы попристальнее рассмотрим физическое и численное моделирование, чтобы получить максимально точные теоретические представления о нем. Исследователям часто мешают результаты, которые нельзя объяснить слишком большими шагами Δt или Δx или же плохими исходными уравнениями. Одно только улучшение методов решения уравнения Пуассона или уравнений движения частиц не всегда может устранить возникающие проблемы. Следовательно, необходимо иметь некоторое представление о точности и устойчивости всей системы, которое и излагается ниже.

Можно ожидать, что большинство читателей — как новички, так и опытные исследователи — прочтут эту часть книги весьма бегло, не вчитываясь в детали. Конечно, можно выполнить большой объем моделирования без понимания всей или даже части теории моделирования. Но мы думаем и почти можем гарантировать, что читатели почувствуют потребность в теории и ее выводах скорее, чем этого можно было ожидать вначале.

Настоящая часть была написана в основном по инициативе Ленгдона во время работы в Беркли. Первоначальные идеи использования частиц конечных размеров принадлежат многим ученым, достаточно упомянуть Хокни, Бунемана, Даусона, Байерса и др. Такое описание физики плазмы широко использовалось и проверялось. В основном мы опирались на статьи Ленгдона и наших выпускников, а также на наши квартальные отчеты за 1968—1970 гг. По мере необходимости даются дополнительные объяснения и примеры.

Авторы благодарят руководство журналов "Physics of Fluids", "Methods of Computational Physics" и "Journal of Computational Physics" за предоставленное разрешение использовать соответствующие статьи или их части.

В гл. 8 рассмотрены эффекты, связанные с использованием пространственной сетки, и влияние формфактора частиц $S(x)$. Дан вывод деталей эффекта пространственного наложения частот, включая численные неустойчивости.

В гл. 9 изложены изменения в теории, вызванные использованием конечного временного шага.

В гл. 10 рассмотрены детали модели «сохранение энергии», включая ее гамильтоновскую формулировку.

В гл. 11 обсуждаются мультипольные модели, их преимущества и недостатки.

В гл. 12 содержится кинетическая теория частиц конечных размеров на пространственной сетке с конечным временным шагом. Выведены выражения для флуктуаций, диффузии и скоростного сопротивления.

В гл. 13 в основном приведена статья [Dawson, 1962] по моделированию плазмы, посвященная статистической механике модели, состоящей из листов. Эта работа имела важное значение в развитии моделирования 20 лет назад. Даусон использовал заряженные листы без сетки, так как поле можно в одномерном случае рассчитать по теореме Гаусса. Читатель может, если хочет, повторить эксперименты по дебаевскому экранированию, релаксации и термализации, используя сеточный код ES1, и сравнить свои результаты с результатом Даусона.

ГЛАВА 8

ЭФФЕКТЫ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СЕТКИ

8.1. ВВЕДЕНИЕ. РАННИЕ РАБОТЫ ПО ИСПОЛЬЗОВАНИЮ СЕТОК И ЯЧЕЕК В ОПИСАНИИ ПЛАЗМЫ

Здесь использованы работы [Langdon, 1970 *a, b*; Langdon and Birdsall, 1970], а также часть результатов из неопубликованных

отчетов за 1968—1970 гг. Мы начнем с введения и краткого исторического обзора.

Численное моделирование на ЭВМ стало мощным инструментом изучения плазмы. Затрачивается много усилий и машинного времени для исследования новых, более трудных задач. Для систематизации такой работы мы провели теоретический анализ общего класса многочастичных методов моделирования. Как и любой человек, изучающий основные свойства реальной плазмы, мы исследовали колебания, флюктуации и столкновения в идеализированном случае однородной и бесконечной или периодической плазмы. Даже в простых случаях есть несколько моментов, когда модель весьма неточно воспроизводит поведение плазмы. В этой и четырех последующих главах изложена теория и обсуждено такое нефизическое поведение модели, которое вызвано конечно-разностными методами. На плазму когерентно воздействуют периодичность пространственной сетки, в узлах которой определяются электромагнитные поля, и периодичность конечно-разностного интегрирования по времени. Иногда возникают различные параметрические неустойчивости, которые могут быть и сильными, и слабыми и с трудом могут быть отделены от настоящих физических неустойчивостей. Существует также высокочастотный шум, связанный со скоростью пересечения частицами ячеек пространственной сетки. Если временной шаг достаточно велик, так что частота этого шума превышает частоту временной выборки, то шум разрушает нормальные флюктуации и столкновения частиц и может стать превалирующим. Теория помогла определить природу таких нефизических эффектов при моделировании.

В ранних работах по моделированию плазмы были проанализированы различные схемы каждого шага вычислений, но общая картина описания плазмы тщательно не анализировалась. Мы начнем со строгого описания пространственной сетки и дадим формулировку, описывающую максимальное число используемых в настоящее время программ. Это будет сделано таким образом, чтобы была ясна роль каждого шага вычислений в конечном результате, а также можно было сравнить выражения, описывающие свойства плазмы, с соответствующими характеристиками настоящей плазмы. Детально рассмотрен электростатический случай. В гл. 10 исследованы линейные дисперсионные соотношения, устойчивость и вопрос сохранения энергии. Влияние пространственной сетки на сглаживание силы взаимодействия и связь плазменных возмущений с возмущениями на других длинах волн названо наложением частот. Сила связи зависит от гладкости используемого метода интерполяции. Ее влияние определяется в основном тем, как хорошо в отсутствие сетки плазма будет реагировать на волновые числа

$k \approx 2\pi/\Delta x$, т. е. если дебаевский радиус слишком мал, связь может разрушить плазменные колебания даже в горячей плазме.

Обсуждаемые модели плазмы созданы в Станфордском университете в 1963 г. Для того чтобы сделать двухмерное моделирование практическим и экономичным, Бунеман и Хокни [Yi e. a., 1965; Hockney, 1965, 1966] создали модель, использующую пространственную сетку, на которой по координатам частиц вычисляется плотность заряда, уравнение Пуассона решается в конечно-разностной форме, а затем силы, действующие на частицы, вычисляются путем интерполяции значений в узлах сетки. Это значительно более эффективно, чем суммировать для N частиц N^2 сил, вычисленных по закону Кулона. Авторы перечисленных выше работ поняли, что при этом устраняются расходимости, связанные с вычислением сил по закону Кулона; взаимодействие при малых расстояниях между частицами слажено и уменьшено рассеяние на большие углы при парных столкновениях, которое в горячей плазме не представляет интереса и которое из-за малого числа используемых при моделировании частиц сильно преувеличено [Hockney, 1966]. Хотя одномерное моделирование можно осуществить и другими средствами, новая модель оказалась простой и быстрой в вычислениях [Dunn and Ho, 1963; Burger e. a., 1965; Buneman and Dunn, 1966]. Часть выигрыша в скорости расчетов обеспечивает метод интегрирования уравнений движения по времени. Были созданы быстрые алгоритмы, сохраняющие основные физические характеристики плазмы [Buneman, 1967]. Преимущества сеточного подхода не были немедленно признаны всеми, и потребовалось выполнить много модельных расчетов, чтобы показать его эффективность.

Впоследствии другие исследователи развили варианты сеточных моделей с использованием более аккуратной интерполяции и других методов решения уравнения Пуассона [Birdsall e. a., 1968; Birdsall and Fuss, 1968, 1969; Morse and Nielsen, 1968, 1969; Boris and Roberts, 1969; Alder e. a., 1970]. Завершением этих усилий было крупномасштабное моделирование нескольких задач по управляемому термоядерному синтезу, выполненных в 1968 г. в Лос-Аламосской научной лаборатории. С тех пор моделирование с использованием таких методов стало широко применяться при исследованиях плазмы.

Мы больше заинтересованы в точности описания коллективных плазменных явлений, чем индивидуального движения частиц. Следовательно, наше аналитическое описание, терминология и критерии будут больше соответствовать физике плазмы, чем численному моделированию, скажем, задачи Коши для небольшой системы дифференциальных уравнений. В

некоторых случаях коллективные свойства горячей плазмы играют решающую роль.

Очевидно, что модели неаккуратно воспроизводят микроскопическую динамику плазмы. Необходимо рассмотреть, как такие неточности изменяют макроскопическое поведение. Обычно в модели слишком мало частиц. Это приводит к таким эффектам, связанным с использованием дискретных частиц, как чрезмерное влияние столкновений и флуктуаций. Возможно также, что частиц слишком мало для адекватного описания в фазовом пространстве таких плазменных явлений, как резонансное затухание Ландау. Могут быть серьезные проблемы с заданием начальных и граничных условий. Ошибки округления обычно могут быть сделаны пренебрежимо малыми по сравнению с другими ошибками. Такие источники ошибок практически трудно оценить. Необходимо было провести исследования их влияния на нефизические эффекты. Это было сделано с помощью экспериментов с такими моделями [Birdsall e. a., 1968; Hockney, 1968, 1970; Montgomery and Nielson, 1970; Okuda, 1970, 1972 b].

Кроме эмпирических результатов желательно иметь теоретические оценки. Это следует из тех соображений, что добавление хорошей теории дает лучшее понимание физики, чем большое число осциллограмм или компьютерных распечаток.

Во второй части книги мы развиваем теоретическое описание ошибок, вызванных конечно-разностным представлением во времени и пространстве динамики частиц и уравнений поля. Можно ожидать, что теория также предскажет неожиданные интересные результаты, которые можно проверить экспериментально. Будут описаны результаты, которые, по-видимому, относятся к этой категории.

Уже было сделано несколько предварительных обсуждений моделей плазмы. Сглаживающее и шумовое влияния пространственной сетки были признаны достаточно давно [Hockney, 1968; Langdon and Birdsall, 1970; Okuda and Birdsall, 1970], и было дано их приближенное теоретическое описание [Hockney, 1968; Longdon and Birdsall, 1970; Okuda and Birdsall, 1970]. Интегрирование во времени было сделано эвристически [Buneman, 1967].

Однако рассмотрение пространственно-временной сетки только как источника сглаживания и шума не позволяет рассмотреть очень важные эффекты, включая когерентное взаимодействие в пространстве и во времени плазмы и сеточных величин. Существует теория, точно описывающая эффекты конечных разностей и применимая к линейной дисперсии волн, устойчивости и сохранению энергии [Lindman, 1970; Langdon, 1970 a, b]. Мы также изучали флуктуации и столкно-

вения частиц [Langdon, 1979]. Теория достаточно полна и формально строга, насколько это возможно для таких систем. Ее результаты легко применить к различным частям алгоритмов моделирования, и необходимые изменения литературных данных применительно к рассматриваемым задачам сделаны ниже. В отдельных случаях мы сохраняем результаты в форме, позволяющей легкое сравнение с теорией плазмы.

Хотя наши методы применимы и к более общим моделям, мы ограничимся примерами только с кулоновским взаимодействием и один раз рассмотрим случай с внешним магнитным полем.

8.2. ВВЕДЕНИЕ В ТЕОРИЮ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СЕТКИ

Эта глава представляет собой математическую основу, с помощью которой можно применять обычную теорию плазмы к ее моделированию с использованием пространственной сетки, на которой определены электромагнитные поля, плотности заряда и тока. Использование сеток для полей удобно даже в электростатическом приближении с простыми формами частиц в отличие от суммирования сил по закону Кулона между каждой парой частиц, за исключением одномерной модели листов, где кулоновская сила является простой ступенчатой функцией, а частицы могут быть упорядочены по координате, что позволяет легко выполнить вычисления. Глава предназначена для развития понимания физических особенностей моделирования плазмы, а не для получения новых алгоритмов расчетов.

Ниже мы предполагаем время непрерывным, чтобы сконцентрировать внимание на следствиях введения конечного значения Δx , конечность Δt рассмотрена в следующей главе. Условием рассмотрения времени как непрерывной величины служит неравенство $\omega_{\max} \Delta t \ll 1$, где ω_{\max} — наибольшая частота, принимаемая в рассмотрение при $\Delta t \rightarrow 0$ в предположении, что интервал интегрирования по времени остается постоянным. Обычно величины $\omega_p \Delta t$, $\omega_c \Delta t$ и т. д. достаточно малы, однако если $(\lambda_D / \Delta x)$ велико, то значение $(v_i / \Delta x) \Delta t = (\omega_p \Delta t)(\lambda_D / \Delta x)$ может и не быть малым. Теория позволяет выделить эту область справедливости модели.

Пространственная сетка является простым примером периодической пространственной неоднородности, и мы начнем изложение с некоторых соображений относительно более общего случая пространственно неоднородной плазмы. Тогда каждый шаг расчета взаимодействия с использованием пространственной сетки будет изучен с общностью, достаточной

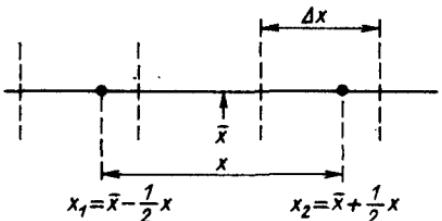


Рис. 8.1. Обозначения переменных в одномерном случае. Две частицы расположены в точках x_1 и x_2 на расстоянии $x = x_2 - x_1$ друг от друга, $\bar{x} = (x_1 + x_2)/2$ — среднее положение частиц. Шаг пространственной сетки равен Δx

для включения в большинство программ для ЭВМ. Затем рассмотрим сохранение момента, а также преобразования Фурье для плотностей, сил и полей. В конце главы развитый формализм применяется к линейным волнам и неустойчивостям.

8.3. ОСНОВНЫЕ ЭФФЕКТЫ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ НЕОДНОРОДНОСТИ

Ниже приведены некоторые общие соображения о плазменных системах с пространственно неоднородными силами взаимодействия, которые предполагаются периодическими и зависящими от времени. В § 8.4 рассмотрена проблема сетки; настоящий общий раздел не служит предпосылкой к остальной части главы.

Рассмотрим силу взаимодействия $F(x_1, x_2)$, которая в одномерном случае является силой, действующей на частицу с координатой x_2 со стороны частицы с координатой x_1 . В нормальной физической системе, инвариантной относительно переноса, F зависит только от разности $x \equiv x_2 - x_1$. Однако при численном моделировании, использующем пространственную сетку, инвариантность существует не при всех расположениях частиц. Так, F зависит от расположения относительно сетки $\bar{x} \equiv (1/2)(x_1 + x_2)$, так же как и от x (рис. 8.1). Мы уже познакомились с некоторыми эффектами влияния сетки на силу в § 4.8. В большинстве методов моделирования используется сетка с постоянным шагом Δx , тогда сила $F(\bar{x} - 1/2x, \bar{x} + 1/2x)$, рассматриваемая как функция \bar{x} с постоянной разделения, будет периодической с периодом Δx .

Для того чтобы изучить влияние неоднородности на плазму, необходимо выполнить преобразование Фурье от $F(x_1, x_2)$. Для бесконечной системы мы используем интеграл Фурье по x и ряд Фурье по \bar{x}

$$F(\bar{x} - 1/2x, \bar{x} + 1/2x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} \sum_{-\infty}^{\infty} e^{ipk_q \bar{x}} F_p(k), \quad (8.1)$$

где $k_g \equiv 2\pi/\Delta x$ — сеточное волновое число, а

$$F_p(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx F_p(x) \exp(-ikx), \quad (8.2)$$

$$F_p(x) = \frac{1}{\Delta x} \int_{\Delta x} d\bar{x} e^{-ipk_g \bar{x}} F(\bar{x} - 1/2x, \bar{x} + 1/2x). \quad (8.3)$$

Знак и нормировка интеграла Фурье сохраняются в последующем изложении.

Те характеристики плазмы, на которые слабо влияет отсутствие инвариантности, будут подобны свойствам плазмы с силой между двумя частицами, определяемой членом при $p=0$, т. е. усредненной силой $F_0(x)$. Такие свойства могут анализироваться бессеточной теорией [Langdon and Birdsall, 1970]. Разница $\delta F = F - F_0$ является нефизической сеточной силой. В некоторых отношениях сила δF подобна «шумовой» силе, однако она когерентна с возмущениями плазмы. Подробнее об этом будет сказано ниже.

Пусть задана плотность частиц $n(x, t)$, представляющая собой сумму δ -функций, если число частиц конечно. Тогда сила $F(x)$, действующая на частицы с координатой x , при пренебрежении зависимостью от времени имеет вид

$$F(x) = \int dx' F(x', x) n(x'). \quad (8.4)$$

Используя соотношение (8.1) после преобразования Фурье, получаем

$$F(k) = \sum_{-\infty}^{\infty} F_p(k - 1/2pk_g) n(k_p), \quad (8.5)$$

где

$$k_p \equiv k - pk_g. \quad (8.6)$$

Видим, что влияние силы δF , соответствующее членам с $p \neq 0$, проявляется из-за возмущений плотности и сил с волновыми числами, различающимися на величину pk_g . Говорят, что такие волновые числа накладываются друг на друга [Blackman and Tukey, 1958].

В качестве иллюстрации выведем дисперсионное соотношение для малых колебаний плазмы. Линеаризуя уравнение Власова и представляя зависимость от времени n и F в виде $\exp(-i\omega t)$ для незамагниченной однородной плазмы, получаем соотношение

$$n(k, \omega) \equiv F(k, \omega) \psi(k, \omega), \quad (8.7)$$

где

$$\Psi(k, \omega) = (n_0/im) \int dv \frac{f'_0}{\omega + i0 - kv}, \quad \text{Im}\omega \geq 0. \quad (8.8)$$

При $\text{Im}\omega < 0$ это выражение должно быть аналитически продолжено из верхней полуплоскости ω . Объединяя (8.5) и (8.8), получаем

$$n(k, \omega) = \psi(k, \omega) \sum_p F_p(k - 1/2pk_g) n(k_p, \omega),$$

или

$$F(k, \omega) = \sum_p F_p(k - 1/2pk_g) F(k_p, \omega) \psi(k_p, \omega).$$

При замене k на $k_q = k - qk_g$ и p на $p - q$ ($q = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) каждую систему уравнений можно записать в виде бесконечной матрицы:

$$\sum_p \{\delta_{q,p} - F_{p-q}(1/2[k_p + k_q]) \psi(k_q, \omega)\} n(k_p, \omega) = 0, \quad (8.9)$$

$$\sum_p \{\delta_{q,p} - F_{p-q}(1/2[k_p + k_q]) \psi(k_p, \omega)\} F(k_p, \omega) = 0, \quad (8.10)$$

где $\delta_{q,p}$ — символ Кронекера. Теперь можно получить некоторые важные характеристики.

Приравнивая нуль детерминанты матриц, получаем возможные свободные колебания плазмы. Присутствие внедиагональных членов из-за связи различных длин волн показывает, что нормальные координаты (в терминологии задачи малых колебаний в классической механике) для n и F не будут экспонентами вида $\exp(ik_p x - i\omega t)$, а будут некоторыми пока неизвестными линейными комбинациями таких экспонент, так что n или F меняются как $\exp(ikx - i\omega t)$, умноженная на периодическую функцию x с периодом Δx (функция Блоха). Таким образом, мы свели рассматриваемую задачу к классическому виду [Brillouin, 1953].

При $|k| \ll |k_g|$ следует ожидать, что элементы с $p=q=0$ будут в матрице максимальными. Если $k_g v_t \gg \omega_p$, т. е. дебавский радиус $\lambda_D = v_t/\omega_p \gg \Delta x$, то величина $n(k_p, \omega)$ максимальна при $p=0$. Следовательно, получаем приближенное дисперсионное уравнение $\epsilon_0 = 0$, где $\epsilon_0 \equiv 1 - F_0(k) \psi(k, \omega)$. Оно имеет точно такой же вид, как если бы мы рассматривали однородную плазму с силой F_0 . Справедливость этого приближения будет пояснена в § 8.11 и далее.

В § 8.11 мы покажем, что детерминанты в рассматриваемых приложениях совпадают с нулями намного более простых рядов. В следующем параграфе начинается математическое описание моделирования плазмы.

8.4. ОБОЗНАЧЕНИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Величины, относящиеся к частицам, обозначим индексом i :

$$x_i, v_i, F_i = F(x_i, t), \quad (8.11)$$

а также отнесем к ним значение плотности центров облаков, сами плотности облаков и плотность заряда облаков

$$n(x, t), \rho_c(x, t) = q n_c(x, t). \quad (8.12)$$

Сеточные величины обозначим номерами узлов j , где они определены:

$$\rho_j, \Phi_j, E_j, X_j, \quad (8.13)$$

где

$$X_j = j \Delta x. \quad (8.14)$$

В одномерной периодической системе длины $L = N_g \Delta x$ функции, относящиеся к частицам, удовлетворяют условию $P(x+L) = P(x)$, а сеточные функции — условию $G_{j+N_g} = G_j$. Прямое и обратное преобразования Фурье становятся суммами δ -функций. Коэффициенты при δ -функциях отличаются множителем $2\pi/L$ от значений, полученных при интегрировании по одному периоду:

$$P(k) = \int_0^L dx P(x) \exp(-ikx), \quad (8.15)$$

$$G(k) = \Delta x \sum_{j=0}^{N-1} G_j \exp(-ikX_j), \quad (8.16)$$

где $k = 2\pi n/L$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Некоторые выражения должны интерпретироваться как обобщенные функции [Lighthill, 1962]. Все результаты для конечных систем хорошо обусловлены. В терминах соотношений (8.15) и (8.16) обратные преобразования имеют вид

$$P(x) = 1/L \sum_{-\infty}^{\infty} P(k) \exp(ikx), \quad (8.17)$$

$$G_j = 1/L \sum_{n=0}^{N_g-1} G(k) \exp(i k X_j). \quad (8.18)$$

Первое выражение является обычным рядом Фурье, а второе — конечным дискретным преобразованием Фурье. Выражения для $P(k)$ и $G(k)$ отличаются от бесконечного случая только пределами интегрирования и тем, что они определены для значений $k = 2\pi n/L$. Эти k интегралов превращаются в суммы в соответствии с правилом

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk / 2\pi \rightarrow 1/L \sum_{n=-\infty}^{\infty}, \quad (8.19)$$

$$\int_{k_g} dk / 2\pi \rightarrow 1/L \sum_{n=0}^{N_g-1}, \quad (8.20)$$

где

$$\int_g dk \equiv \int_{-1/2k_g}^{+1/2k_g} dk, \quad k_g = 2\pi/\Delta x. \quad (8.21)$$

8.5. ВЗВЕШИВАНИЕ ЧАСТИЦ НА СЕТКЕ; ФОРМФАКТОРЫ

Сеточную плотность заряда, созданную зарядами q_i , расположенными в точках x_i , находят по формуле

$$\rho_j \equiv \rho(X_j) = \sum_i q_i S(X_j - x_i). \quad (8.22)$$

Это выражение можно толковать как плотность заряда для частиц конечных размеров, определенную на сетке с помощью интерполяции нулевого, первого или второго порядков. Более высокие порядки интерполяции используются редко.

По значениям ρ_j на сетке определяется электрическое поле; обычно используется та же самая сетка. В электростатических задачах решается уравнение $\nabla^2\phi = -\rho$ в конечных разностях и вычисляется $E = -\nabla\phi$. В нашем рассмотрении не требуется какой-либо специальной формы этого решения или сглаживания. Частные случаи будут рассматриваться в качестве необходимых численных примеров.

Сила, действующая на частицу, получается интерполяцией значений электрического поля в узлах сетки

$$F_i = q_i \Delta x \sum_j E_j S(X_j - x_i), \quad (8.23)$$

использующей ту же самую весовую функцию, что и в (8.22). Хотя использование в (8.22) и (8.23) одной и той же функции не

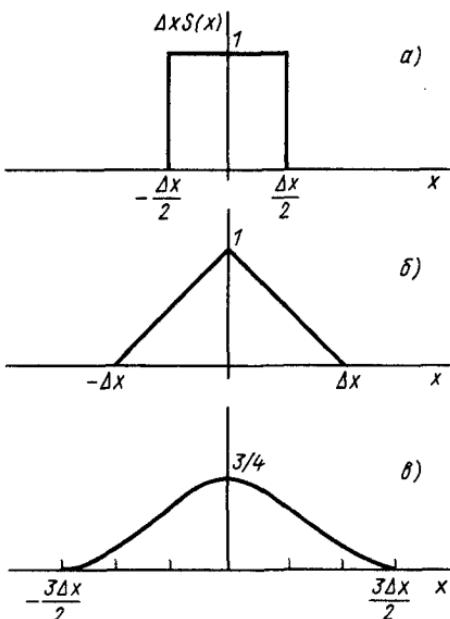


Рис. 8.2. Различные интерполяционные функции для заряда и силы: нулевой порядок, NGP (а); первый порядок, CIC, PIC (б); второй порядок, параболический или квадратичный сплайн, состоящий из трех параболических непрерывно соединенных секций длины Δx (в) (см. § 8.8)

Для (в) см. § 8.8)

самовоздействие и обеспечивает сохранение момента (см. § 8.6). Различные интерполяционные функции, которые мы уже использовали в качестве формфакторов, показаны на рис. 8.2. «Задание функции формы», использованное в работе [Hockney and Eastwood, 1981], соответствует в рассматриваемом случае заданию S и в проводимом анализе не используется понятие «форма облака». S определяется таким образом, что заряд во всех узлах сетки равен суммарному заряду всех частиц:

$$\Delta x \sum_j p_j = \sum_i q_i. \quad (8.24)$$

Из равенства (8.24) следует утверждение для частицы с координатой x

$$\Delta x \sum_j S(X_j - x) = 1, \quad (8.25)$$

свидетельствующее о том, что вклад частицы в сеточную плотность заряда p точно такой же независимо от расположения частицы. В случае линейной интерполяции (CIC) и

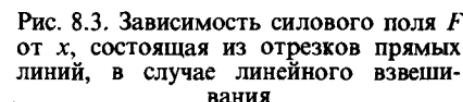


Рис. 8.3. Зависимость силового поля F от x , состоящая из отрезков прямых линий, в случае линейного взвешивания

является необходимым в нашем рассмотрении, имеются веские основания сделать именно так. Использование различных весовых функций в соотношениях (8.22) и (8.23) соответствует использованию различных форм облаков, что может приводить к гравитационноподобной неустойчивости (см. задачу 4.11). Кроме того, если разностные уравнения, связывающие p_j и E_j , симметричны в пространстве, то использование одной и той же весовой функции устраняет

интерполяции более высоких порядков справедливо соотношение

$$\Delta x \sum_j X_j S(X_j - x) = x, \quad (8.26)$$

утверждающее, что заряд в точке x дает тот же самый правильный вклад в дипольный момент независимо от расположения частицы (см. задачу 8.2).

Рассмотрим силовое поле $F(x)$ в случае линейной интерполяции (рис. 8.3). Оно представляет собой кусочно-ломаную линию, отрезки прямых создают пространственные гармоники с периодом, пропорциональным Δx , иначе говоря частицы «чувствуют» сетку. В § 8.7 мы оценим амплитуды гармоник Фурье F .

Задачи

8.1. Покажите, что утверждение (8.25) следует из (8.24).

8.2. Покажите, что (8.26) эквивалентно равенству

$$\Delta x \sum_j p_j X_j = \sum_i q_i x_i, \quad (8.27)$$

т. е. дипольный момент сетки точно такой же, как дипольный момент частиц.

8.6. СОХРАНЕНИЕ ИМПУЛЬСА В ПОЛНОЙ СИСТЕМЕ

Как приложение развитого выше формализма, не требующего проникновения в частности какого-либо способа взвешивания, рассмотрим полный импульс системы P . Из уравнения движения Ньютона, записанного в виде

$$dP/dt = \sum_i F_i, \quad (8.28)$$

имеем равенство

$$dP/dt = \sum_i q_i \Delta x \sum_j E_j S(X_j - x_i). \quad (8.29)$$

Изменяя порядок суммирования, получаем соотношение

$$dP/dt = \Delta x \sum_j E_j \sum_i q_i S(X_j - x_i), \quad (8.30)$$

которое можно записать так:

$$dP/dt = \Delta x \sum_j p_j E_j \quad (8.31)$$

без использования формфактора. Следовательно; вопрос сохранения момента $dP/dt=0$ сводится к свойствам вычисления E_j по величинам ρ_j .

Для бесконечной или периодической системы, если алгоритм рассматривает все точки одинаковым образом (ограниченная форма трансляционной симметрии) и имеет место зеркальная инвариантность, находим

$$\Delta x \sum_j \rho_j E_j = 0. \quad (8.32)$$

Следовательно, сохраняется импульс системы. Но в присутствии металлических границ $\Delta x \sum_j \rho_j E_j \neq 0$ и импульс плазмы не сохраняется, что физически правильно.

Задача

8.3. Докажите правильность утверждения (8.32) при сформулированных выше условиях.

8.7. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ ДЛЯ ЗАВИСИМЫХ ВЕЛИЧИН; НАЛОЖЕНИЕ ЧАСТОТ, ВОЗНИКАЮЩЕЕ ИЗ-ЗА КОНЕЧНЫХ РЯДОВ ФУРЬЕ

Как мы уже хорошо знаем, удобно работать в k -пространстве, подвергая заряд, потенциал, поле и силу преобразованию Фурье. Для лучшего понимания повторим некоторые определения и предыдущие шаги. Для ρ преобразование имеет вид (все аналогично для Φ и E)

$$\rho(k) \equiv \Delta x \sum_j \rho_j \exp(-ikX_j), \quad (8.33)$$

$$\rho_j \equiv \int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} (dk/2\pi) \rho(k) \exp(ikX_j). \quad (8.34)$$

В случае бесконечной системы интегрирование ведется по первой зоне Бриллюэна:

$$\rho_i \equiv 1/L \sum_{n=-N_g/2}^{N_g/2-1} \rho(k) \exp(ikX_j), \quad (8.35)$$

для конечной же системы $k=2\pi n/L$, а длина $L=N_g \Delta x$. При использовании этих определений обычная конечно-разностная форма уравнения Пуассона в рационализованной системе единиц Хевисайда—Лоренца СГС [Panofsky and Phillips, 1962; Jackson, 1975] записывается так:

$$(\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}) / (\Delta x)^2 = -\rho_j, \quad (8.36)$$

откуда получаем

$$K^2(k)\varphi(k)=\rho(k), \quad (8.37)$$

где

$$K^2(k)=k^2 \operatorname{dif}^2(k\Delta x/2). \quad (8.38)$$

Мы ввели дифракционную функцию

$$\operatorname{dif}(x)\equiv \sin x/x, \quad (8.39)$$

аналогичную функции $\sin c(x)$, использованной другими авторами. Конечно-разностное выражение для градиента имеет вид

$$-(\varphi_{j+1}-\varphi_{j-1})/(2\Delta x)=E_j, \quad (8.40)$$

из которого следует

$$-i\chi(k)\varphi(k)=E(k), \quad (8.41)$$

где

$$\chi(k)=k \operatorname{dif}(k\Delta x). \quad (8.42)$$

Для силы, определенной соотношением

$$F(k)\equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx F(x) \exp(-ikx), \quad (8.43)$$

с использованием формулы (8.23) имеем

$$F(k)=\int_{-\infty}^{\infty} dx \left[q\Delta x \sum_j E_j S(X_j-x) \right] \times \\ \times \exp(i k (X_j-x)) \exp(-ikX_j). \quad (8.44)$$

Меняя местами суммирование и интеграл, получаем

$$F(k)=q \left[\Delta x \sum_j E_j e^{-ikx_j} \right] \left[\int dx S(X_j-x) e^{ik(X_j-x)} \right]. \quad (8.45)$$

Так как $S(-k)$ не зависит от j , то (8.45) преобразуется к простому виду

$$F(k)=qE(k)S(-k). \quad (8.46)$$

Теперь сеточные величины имеют базовый период Δx , а поэтому преобразования Фурье сеточных величин периодичны, т. е.

$$E(k-pk_g)=E(k). \quad (8.47)$$

Таким образом, из (8.46) видим, что при больших k , $k\Delta x > \pi$ или $\lambda < 2\Delta x$ связь $E(k)$ и $F(k)$ зависит от характера убывания $S(k)$ при $k\Delta x \rightarrow \infty$. Вот почему гладкость $F(x)$ зависит от гладкости и непрерывности $S(x)$. В случае плотности заряда мы определим сначала плотность облака ρ_c (см. § 4.6):

$$\rho_c(x) \equiv q n_c(x) \equiv q \int dx' S(x-x') n(x'), \quad (8.48)$$

где n — плотность центров облаков, так что

$$\rho_c(k) = q S(k) n(k), \quad (8.49)$$

откуда ясно видно фильтрующее действие формфактора. Сеточная плотность заряда ρ_j , определяемая соотношением (8.22), имеет вид

$$\rho_j \equiv \rho_c(X_j) = \int_{-\infty}^{\infty} (dk/2\pi) \rho_c(k) \exp(ikX_j). \quad (8.50)$$

или

$$\rho_j = \int_{-\pi/\Delta x}^{\pi/\Delta x} (dk/2\pi) \exp(ikX_j) \left[\sum_{p=-\infty}^{\infty} \rho_c(k_p) \right] \quad (8.51)$$

при переходе от интегрирования по всем k к интегрированию по одному периоду и суммированию по всем пространственным гармоникам. Член в квадратных скобках обозначим $\rho(k)$:

$$\rho(k) = \sum_p \rho_c(k_p) = \quad (8.52)$$

$$= q \sum_p S(k_p) n(k_p). \quad (8.53)$$

Именно здесь проявляется связь частот через сетку. Об этой бесконечной сумме можно рассуждать так: берем информацию, определенную на континууме и пытаемся сжать континуум в дискретную сетку. Появляющаяся здесь трудность состоит в том, что различные длины волн частиц фигурируют в одних и тех же точках сетки (наложение частот).

Такое явление хорошо известно в анализе временных рядов. Если не делать выборку достаточно часто, то разные частоты становятся неразличимыми. Положение можно улучшить путем низкочастотной фильтрации сигнала перед выборкой, что и делается в рассматриваемом случае путем сглаживания S . В вычислительных моделях эффекты выборки в системе подвергаются действию обратной связи. Даже синусоидальное возмущение плотности создает силы на многих длинах волн, которые вызывают возмущение плотности на новых длинах волн, и все эти возмущения действуют обратно на первоначальные возмущения. Основным моментом здесь является то, что возмущения плотности с $k \Delta x > \pi$ (вне основной зоны Бриллюэна) дают вклад в $\rho(k)$ при $k \Delta x < \pi$. Как и в случае с силой, все зависит от быстроты убывания $S(k_p)$ при больших k . Причина обратной связи состоит в том, что значения k , отличающиеся множителем k_g , дают одинаковый вклад в точках сетки X_j .

Мы уже отметили, что сеточные величины ρ , ϕ , E периодичны, так что $\phi(k) = \phi(k_p)$ и т. д., и их можно представить в виде суммы по p . Однако нормальные моды для сеточных величин F и n не синусоидальны из-за связи частот. Ситуация больше похожа на атомы в кристалле, а не на распространение волны в непрерывном пространстве, имеющем периодическую неоднородность.

Там, где мы используем быстрое преобразование Фурье для вычисления поля, можно выбрать K и κ произвольно в пределах основного периода в k -пространстве для наилучшего описания желаемых физических эффектов, даже если эти величины не имеют никакого соответствия с конечно-разностными соотношениями, использующими малое число точек сетки (см. приложение Д). Например, можно получить большее сглаживание путем отбрасывания части волновых векторов по некоторому сглаживающему алгоритму (см. приложение Б). Это существенно проще с вычислительной точки зрения, чем использование усложненных методов интерполяции частиц по сетке с использованием многоточечных схем. По крайней мере, в одномерном случае наиболее экономичный способ получить очень гладкое взаимодействие без сеточных эффектов состоит в использовании очень частой сетки, взвешивании низкого порядка и применении описанного выше сглаживания в пространстве волновых векторов. Заметим, что в модели E более точно соответствует величине F , чем в случае бессеточной системы облаков. К сожалению, метод NGP даже в случае частой сетки дает больший самонагрев, чем взвешивание более высокого порядка, больше, чем можно допустить.

Задачи

8.4. Покажите, что из (8.25) следует $S(k)=1$ при $k=0$, $S(k)=0$ при $k=pk_g$, т. е. при $k\Delta x=2\pi p$, $p\neq 0$, а из (8.26) следует, что $S'(pk_g)=0$, т. е. $S(k)$ имеет нули второго порядка при $k=pk_g$ для любой интерполяции с точностью не хуже линейной. Тогда можно ожидать, что $S(k)$ будет меньше вблизи значений pk_g , чем в случае, когда (8.26) не выполняется. Следовательно, $F(k)$ имеет при малых k меньшее наложение частот, так что $F(x)$ изменяется более гладко, чем мы могли бы ожидать для случая линейной интерполяции по сравнению с методом NGP.

8.5. Для того чтобы яснее получить фильтрующее действие S , нарисуйте произвольное распределение плотности центров облаков $n(x)$, выберите ваше любимое выражение для $S(x)$ и вычислите по формуле (8.48) плотность облаков $n_c(x)$.

8.6. Вместо соотношения (8.40) определите E в полуцелых точках $X_{j+1/2}=(j+1/2)\Delta x$, т. е. $E_{j+1/2}=-(\Phi_{j+1}-\Phi_j)/\Delta x$. Покажите, что (8.41) все еще имеет место, но теперь периодичность κ (и E) имеет вид $\kappa(k_p)=(-1)^p\kappa(k)$. Получите явное выражение κ . Изменится ли равенство (8.46)? Рассуждения § 8.6 больше неприменимы. Покажите, что импульс при этом не сохраняется.

8.8. БОЛЕЕ ТОЧНЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ $S(x)$ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СПЛАЙНОВ

«Очевидный» способ улучшить точность — это использовать интерполяционную формулу Лагранжа более высокого порядка. Однако формула второго порядка является разрывной и поэтому не годится. В третьем порядке функция $S_L(x)$ дифференцируема, но дает разрывную силу. Из-за этих разрывов $S_L(x)$ медленнее уменьшается при больших k , что приводит к большему наложению частот.

Если мы потребуем существования нескольких непрерывных производных, то S будет уменьшаться более быстро и будет иметь малую склонность к наложению частот. Это предполагает использование сплайнов, которые мы сейчас и применим в описании [Lewis e. a., 1972; Buneman, 1973; Langdon; 1973; Brown e. a., 1974; Denavit, 1974; Lewis and Nielson, 1975].

Определим $S_m(x)$ как свертку квадрата функции взвешивания по методу NGP (рис. 8.2, а) саму с собой m раз. Для больших m S_m приближается к гауссиану в смысле центральной предельной теоремы. S_m является аналогом гауссиана для таких систем. Следовательно, S_1 является случаем линейной интерполяции (CIC), рис. 8.2, б. Базовые функции $S_m(X^j - x)$ и, следовательно, $F(x)$ являются полиномами порядка m , как показано в подписи к рис. 8.2. Имеются m непрерывных производных. Заметим также, что $S(x) \geq 0$ в отличие от формул Лагранжа. Связь с обычной сплайновой интерполяцией обсуждается в работах [Langdon, 1973; Hockney and Eastwood, 1981].

Фурье-образ для $S_m(x)$ в одномерном случае имеет вид

$$S_m(k) = [\sin(k\Delta x/2)/(k\Delta x/2)]^{m+1} = \text{dif}^{m+1}(k\Delta x/2). \quad (8.54)$$

При больших k $S_m = 0(k^{-m-1})$. Для значений $pk_g = p2\pi/\Delta x$ функция $S_m(k)$ имеет нуль $m+1$ -го порядка и мала в окрестностях этих точек. Это выполняется и для интерполяционных формул Лагранжа, однако при малых k $S(k \pm k_g)$ в 5 раз больше и $S(k \pm 2k_g)$ в 21 раз больше для формул Лагранжа второго порядка, чем для S_2 (рис. 8.2, в). Таким образом, при том же количестве вычислительных операций сплайн уменьшает ошибки из-за наложения частот при больших длинах волн. При малых k $S_m(k) \approx 1 - (m+1)(k\Delta x)^2/24$, тогда как $S - 1 = O(k^{m+1})$ или $O(k^{m+2})$ при интерполяции по Лагранжу. Однако эту «ошибку» в сплайне можно компенсировать выбором алгоритма решения уравнения Пуассона, как уже отмечалось выше.

В качестве примера рассмотрим квадратичный сплайн $(QS)S_2$ в одномерной периодической системе (рис. 8.2, в), который имеет вид

$$S_2(X_j - x) = [3/4 - (x - X_j)^2 / (\Delta x)^2] / \Delta x, \quad (8.55)$$

$$S'_2(X_{j\pm 1}-x) = (1/2 \pm (x-X_j)/\Delta x)^2/(2\Delta x), \quad (8.56)$$

где в обоих случаях выполняется условие

$$|x-X_j| \leq \Delta x/2. \quad (8.57)$$

Задача

8.7. Покажите, что S_2 и S'_2 , определенные соотношениями (8.55) и (8.56) непрерывны при $x=X_j \pm \Delta x/2$.

8.9. ОБОБЩЕНИЕ НА СЛУЧАЙ ДВУХ И ТРЕХ ИЗМЕРЕНИЙ

Имея теперь полное описание взаимодействия в одномерном случае, проведем обобщение на случай двух и трех измерений.

Обозначение узла сетки j становится вектором $\mathbf{j}=(j_x, j_y, j_z)$ с целыми компонентами. Координаты узла сетки \mathbf{j} в случае косоугольной трехмерной сетки, например треугольной, имеют вид

$$\mathbf{X}_j = \mathbf{j} \Delta \mathbf{x}, \quad (8.58)$$

где строки тензора $\Delta \mathbf{x}$ являются базисными векторами сетки, см. [Brand, 1957]. Таким образом, определяются границы ячейки сетки, объем которой задан формулой

$$V_c = \det \Delta \mathbf{x}. \quad (8.59)$$

Для обычной прямоугольной сетки имеем

$$\Delta \mathbf{x} = \begin{vmatrix} \Delta x & 0 & 0 \\ 0 & \Delta y & 0 \\ 0 & 0 & \Delta z \end{vmatrix}. \quad (8.60)$$

Преобразование Фурье принимает вид

$$\mathbf{E}(\mathbf{k}) = V_c \sum_j \mathbf{E}_j \exp(-ik\mathbf{X}_j). \quad (8.61)$$

Для точечной частицы, находящейся в точке \mathbf{x} ,

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = q V_c \sum_j S(\mathbf{X}_j - \mathbf{x}) \mathbf{E}_j, \quad (8.62)$$

$$\rho_j = q V_c S(\mathbf{X}_j - \mathbf{x}). \quad (8.63)$$

В случае частиц конечных размеров эти соотношения записываются в виде

$$\mathbf{F}(\mathbf{k}) = q S(-\mathbf{k}) \mathbf{E}(\mathbf{k}), \quad (8.64)$$

$$\rho(\mathbf{k}) = q \sum_p S(\mathbf{k}_p) n(\mathbf{k}_p), \quad (8.65)$$

где

$$\mathbf{k}_p = \mathbf{k} - \mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_g, \quad (8.66)$$

$$\mathbf{k}_g = 2\pi (\Delta \mathbf{x}^{-1})^T \quad (8.67)$$

и \mathbf{p} — вектор с целыми компонентами. Строки тензора \mathbf{k}_g являются базисными векторами, обратными к базисным векторам $\Delta \mathbf{x}$, умноженным на 2π . Они определяют периодичность преобразований сеточных величин, так как

$$\exp(i\mathbf{k}_p \mathbf{X}_j) = \exp(i\mathbf{k} \mathbf{X}_j - 2\pi i \mathbf{p} \mathbf{j}) = \exp(i\mathbf{k} \mathbf{X}_j). \quad (8.68)$$

Для прямоугольной сетки

$$\mathbf{k}_g = 2\pi \begin{vmatrix} \Delta x^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & \Delta y^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & \Delta z^{-1} \end{vmatrix}. \quad (8.69)$$

Интеграл в обратном преобразовании Фурье берется по одному периоду в пространстве k :

$$\mathbf{E}_j = \int_{\mathbf{k}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \mathbf{E}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \mathbf{X}_j). \quad (8.70)$$

Формулы в случае одного, двух и трех измерений выглядят одинаково, если $d\mathbf{k}/(2\pi)^3$ заменить на $d\mathbf{k}/(2\pi)^d$, где d — размерность пространства. Соотношения между Фурье-образами сеточных величин имеют вид

$$\rho(\mathbf{k}) = K^2(\mathbf{k}) \varphi(\mathbf{k}), \quad (8.71)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{k}) = -i\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{k}) \varphi(\mathbf{k}). \quad (8.72)$$

Величины φ_i , \mathbf{E}_j и ρ_j определяются только в узлах сетки, тогда как $n(x)$ и $F(x)$ определены на континууме координат частиц.

Для сплайна порядка m по всем трем координатам формфактор на прямоугольной сетке имеет вид

$$S_m(\mathbf{k}) = [\text{dif}(k_x \Delta x / 2) \text{dif}(k_y \Delta y / 2) \text{dif}(k_z \Delta z / 2)]^{m+1}. \quad (8.73)$$

Эта формула включает модель NGP при $m=0$ и CIC — PIC при $m=1$. Конечно-разностные уравнения для поля в самом простом случае дают

$$\begin{aligned} K^2 = & k_x^2 \text{dif}^2(k_x \Delta x / 2) + k_y^2 \text{dif}^2(k_y \Delta y / 2) + \\ & + k_z^2 \text{dif}^2(k_z \Delta z / 2) \end{aligned} \quad (8.74)$$

и

$$\boldsymbol{\kappa}_x = k_x \text{dif}(k_x \Delta x) \text{ и т. д.} \quad (8.75)$$

Задача

8.8. Выведите выражение для формфактора $S(k)$ для двух- и трехмерной прямоугольных сеток в случае линейного взвешивания СIC.

8.10. ЛИНЕЙНАЯ ДИСПЕРСИЯ ВОЛНЫ

Подставив (8.46) в (8.9), получим для каждой строки один и тот же результат

$$\epsilon(k, \omega) q S(-k) E(k) = 0, \quad (8.76)$$

так что равенство $\epsilon = 0$ является дисперсионным уравнением, в котором

$$\epsilon(k, \omega) = 1 - S^{-1}(-k) \sum_p F_p(k - pk_g/2) S(-k) \psi(k_p, \omega). \quad (8.77)$$

Решение $\omega(k)$ будет многозначной периодической функцией k . Уравнение (8.77) можно переписать с использованием K^2 и χ в виде

$$\epsilon(k, \omega) = 1 + \frac{iq^2}{K^2} \sum_p \chi |S(k_p)|^2 \psi(k_p, \omega), \quad \chi = \chi(k_p), \quad (8.78)$$

где $n(k, \omega) = \psi(k, \omega) F(k, \omega)$.

Такая более простая форма записи предполагает, что тот же самый результат можно получить более простым путем, что и сделано ниже. При выводе формулы (8.78) принято только одно упрощающее предположение — использована линеаризованная восприимчивость плазмы; никаких предположений о малости сеточных эффектов не делалось. Функция $\epsilon(k, \omega)$ для сеточных величин играет обычную роль диэлектрической проницаемости в результатах кинетической теории по флуктуациям и столкновениям (см. гл. 12).

Нормальные моды получаются как решения скалярного уравнения $\epsilon = 0$, а не из бесконечного детерминанта, поскольку эффект наложения частот одинаков для всех сеточных величин. Для сеточных величин (p, φ, E) нормальные моды изменяются в пространстве синусоидально в отличие от величин, относящихся к частицам, когда имеет место связь различных частот.

8.11. ИССЛЕДОВАНИЕ ХОЛОДНОЙ ДРЕЙФУЮЩЕЙ ПЛАЗМЫ; ЧАСТОТЫ КОЛЕБАНИЙ

Легкой для изучения моделью с простыми приложениями может служить одномерный пучок частиц с дрейфовой скоростью v_0 , проходящий сквозь фон неподвижных нейтрализующих частиц. Предположим, что на одну ячейку сетки приходит-

ся достаточное для справедливости жидкостных уравнений непрерывности и движения число частиц. В таком случае можно получить следующую связь между силой и возмущением плотности (5.38):

$$n_1(k, \omega) = n_0 i k F(k, \omega) / [m(m - kv_0)^2]. \quad (8.79)$$

Подстановка (8.79) в формулу (8.53) дает

$$\rho(k, \omega) = (n_0 q/m) \sum_p \frac{i k_p S(k_p) F(k_p, \omega)}{(\omega - k_p v_0)^2}. \quad (8.80)$$

Используя соотношения (8.41) и (8.46), получаем

$$F(k_p, \omega) = -iqS(-k_p)\chi(k_p)\phi(k_p, \omega). \quad (8.81)$$

Подстановка F в (8.80) дает для $\rho(k, \omega)$ выражение

$$\rho(k, \omega) = \left(\frac{n_0 q}{m} \right)^2 \sum_p \frac{k_p \chi(k_p) S(k_p) S(-k_p)}{(\omega - k_p v_0)^2} \phi(k_p, \omega). \quad (8.82)$$

Мы не используем условие $\chi(k_p) = \chi(k)$, так как хотим сохранить за собой свободу выбора алгоритма; в гл. 10 изложен метод расчета с сохранением энергии и условием $\chi(k_p) = k_p$. Используя условие периодичности сеточных величин, в частности

$$\phi(k_p, \omega) = \phi(k, \omega), \quad (8.83)$$

исключим ϕ из суммы. Заметим, что так как $S(x)$ — действительная и четная величина, то

$$S(k_p) S(-k_p) = |S(k_p)|^2 = S^2(k_p). \quad (8.84)$$

Используя теперь связь ϕ и ρ из уравнения Пуассона (8.39), получим дисперсионное уравнение

$$1 - \frac{\omega_p^2}{K^2(k)} \sum_p \frac{k_p \chi(k_p) S^2(k_p)}{(\omega - k_p v_0)^2} = \varepsilon(k, \omega) = 0, \quad (8.85)$$

где $\omega_p^2 = n_0 q^2 / m$.

Рассмотрим сначала случай с $v_0 = 0$. Тогда дисперсионное соотношение принимает вид

$$\omega^2 = \omega_p^2 \left[\left(\sum_p k_p \chi(k_p) S^2(k_p) \right) / K^2(k) \right]. \quad (8.86)$$

Выражение в квадратных скобках представляет собой изменение ленгмюровской частоты колебаний из-за наложения пространственной сетки. Сумма по p сходится достаточно быстро, и для получения достоверных результатов достаточно учитывать только члены с $p=0, \pm 1, \pm 2 \dots$ в основной зоне Бриллюэна, $|k\Delta x| < \pi$.

В некоторых случаях в зависимости от вида K , χ и S суммирование можно выполнить аналитически. Например, если исходить из алгоритма с сохранением импульса, подразумевая, что сила получается с помощью интерполяции продифференцированного потенциала, то χ можно вычислить по формуле (8.42) и при использовании линейной интерполяции СIC для $S(k)$ получить выражение

$$S(k) = \text{dif}^2(k\Delta x/2). \quad (8.87)$$

В результате суммирование в (8.86) приобретает вид

$$\sum_p k_p \chi(k_p) S^2(k_p) = \sum_p k_p^2 \text{dif}(k_p \Delta x) \text{dif}^4(k_p \Delta x/2) = \quad (8.88)$$

$$= 2^4 \frac{\sin(k \Delta x) \sin^4(k \Delta x/2)}{(\Delta x)^5} \sum_p k_p^{-3}. \quad (8.89)$$

Принимая во внимание тождество из работы [Abramowitz and Stegun, 1964]

$$\sum_p (k - pk_g)^{-2} = [2 \sin(k \Delta x/2) / \Delta x]^{-2}, \quad (8.90)$$

после его дифференцирования по k получаем

$$\sum_p (k - pk_g)^{-3} = [2 \sin(k \Delta x/2) / \Delta x]^{-3} \cos(k \Delta x/2). \quad (8.91)$$

Для завершения вывода используем обычный трехточечный алгоритм для уравнения Пуассона (8.40), в итоге получим простой результат

$$\omega^2 = \omega_p^2 \cos^2(k \Delta x/2), \quad \omega = \pm \omega_p \cos(k \Delta x/2). \quad (8.92)$$

Заметим, что этот точный результат отличается от приближенного результата, полученного при сохранении только члена с $p=0$, соответствующего уравнению $\varepsilon_0=0$ в § 8.3 и использованного в гл. 4, где мы пренебрегли пространственными гармониками. Использование только члена $p=0$ приводит к приближенному результату

$$\omega^2 \approx \omega_p^2 \cos^2(k \Delta x/2) \left[\frac{\operatorname{tg}(k \Delta x/2)}{(k \Delta x/2)} \frac{\sin^2(k \Delta x/2)}{(k \Delta x/2)^2} \right], \quad (8.93)$$

имеющему погрешность менее 3% при $k \Delta x < \pi/2$ по сравнению с равенством (8.92).

Но если использовать алгоритм с сохранением энергии, описанный ниже, в гл. 10, то можно показать, что $\chi(k_p) = k_p$ и результат не содержит дисперсии

$$\omega^2 = \omega_p^2, \quad \omega = \pm \omega_p, \quad (8.94)$$

т. е. не зависит от k , как в обычных ленгмюровских колебаниях холодной плазмы. В этом случае ошибка от использования членов только с $p=0$ будет существенно меньше, так как это приближение дает

$$\omega^2 \approx \omega_p^2 [\sin(k\Delta x/2)/(k\Delta x/2)]^2. \quad (8.95)$$

Если бы основную роль играла точность описания дисперсии, как при колебаниях холодной плазмы, то можно было бы изменить алгоритм решения уравнения Пуассона для компенсации ошибки в методе с сохранением импульса или использовать алгоритм с сохранением энергии. Однако в § 8.13 показано, что для горячей плазмы сохранение только членов с $p=0$ часто является очень хорошим приближением и оба типа алгоритмов полезны для моделирования, как это видно из приложения Б.

Задача

8.9. Для программы с сохранением импульса используйте сплайновое взвешивание порядка m с $S_m(k)$, определяемым по формуле (8.54). При $v_0=0$ покажите, что равенство (8.86) приобретает вид

$$\omega^2 = \frac{\omega_p^2}{K^2(k)} \frac{\sin(k\Delta x) \sin^{2m+2}(k\Delta x/2) 2^{2+2m}}{(\Delta x)^{3+2m}} \sum_p k_p^{-(1+2m)}. \quad (8.96)$$

Затем, используя определение K^2 по формуле (8.40), покажите, что при

$$m=0, \text{ NGP}, \omega^2 = \omega_p^2 \cos^2(k\Delta x/2), \quad (8.97)$$

$$m=1, \text{ CIC}, \omega^2 = \omega_p^2 \cos^2(k\Delta x/2), \quad (8.98)$$

$$m=2, \text{ QS}, \omega^2 = \omega_p^2 \cos^2(k\Delta x/2) [2 + \cos^2(k\Delta x/2)]/3. \quad (8.99)$$

8.12. НЕФИЗИЧЕСКАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ ХОЛОДНОГО ПУЧКА

Рассмотрим односкоростной холодный электронный поток, двигающийся относительно сетки и неподвижного ионного фона. Физически эта модель должна быть устойчивой. Дисперсионное уравнение имеет вид (8.85). При любом фиксированном k оно имеет структуру, аналогичную случаю многих пучков в системе. Единственное отличие состоит в том, что квадрат эффективной плазменной частоты для половины «пучков» отрицателен. Все частицы сильно взаимодействуют, когда доплеровски сдвинутая частота $\omega - kv_0$ находится вблизи гармоник сеточной частоты $k_g v_0$, т. е. вблизи резонанса, определяемого соотношением

$$\omega - kv_0 + pk_g v_0 = 0. \quad (8.100)$$

Можно показать, что имеется два корня, соответствующих каждому члену в сумме в дисперсионном уравнении (8.85).

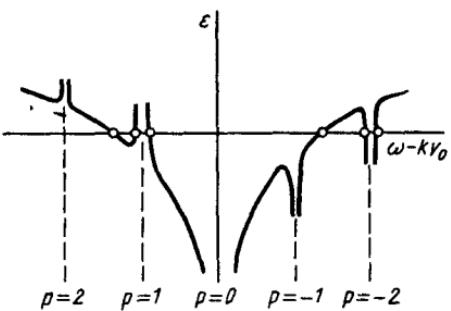


Рис. 8.4. Примерный вид зависимости $\epsilon(k, \omega)$ от $\omega - kv_0$ для холодного пучка в случае кода с сохранением импульса. Показаны значения полюсов для каждого значения p . Этот рисунок справедлив при $k\Delta x \ll 1$ и $v_0/\Delta x \omega_p < 1/2\pi$; при $v_0/\Delta x \omega_p > 1/2\pi$ полюсы лежат вне полосы $\pm \omega_p$

Корни либо действительны, либо попарно комплексно сопряжены.

На рис. 8.4 схематически изображена зависимость ϵ от $\omega - kv_0$ при малых $k\Delta x$. Сразу заметны пары действительных корней, соответствующих случаю $p=0$, $\omega - kv_0 = \pm \omega_p$, $p=1$ и $p \leq -2$. Для всех других резонансов существуют пары комплексных корней, один из которых неустойчив. Для больших $|p|$ моды имеют высокий порядок резонанса, возбуждаются с трудом и также легко разрушаются любым затуханием или разбросом при резонансе, т. е. при $|\omega - kv_0| < |k_p v_1|$. Для каждого значения p при действительных k существует два значения ω — либо действительных, либо комплексно сопряженных. При очень малых $k\Delta x$ $S^2 \ll 1$ при $p \neq 0$ (высшие зоны); при $p=0$ для малых $k\Delta x$ $\omega \approx \pm \omega_p$; для $p \neq 0$, сохраняя член с $p=0$, полагая $k\chi(k)S^2/K^2(k) \approx 1$ и удерживая только один член с $p \neq 0$, получаем решение вблизи резонанса в виде

$$\omega \approx kv_0 \pm \omega_p \frac{S(k_p)}{K(k)} \left[\frac{k_p \chi(k_p)}{1 - (\omega_p/p k_p v_0)^2} \right]^{1/2}, \quad (8.101)$$

Мы видим, что возможна чисто вычислительная неустойчивость при $k_p \chi(k_p) < 0$, имеющая место только в программе с сохранением импульса, или при $\omega_p > k_g v_0$ в случае программ с сохранением энергии или момента. Заметим, что неравенства определены с точностью до численного множителя из-за приближений, сделанных при выводе соотношения (8.101).

Инкременты мод с $p=-1$ и 2 с $p=1$ при больших $k\Delta x$ довольно велики. При численном решении с $v_0=0,12 \Delta x \omega_p$ в работе [Langdon, 1970b] был получен инкремент $0,017\omega_p$ при $k\Delta x=1$ для $p=1$, а максимальный инкремент превышает $0,22\omega_p$ при $k\Delta x=2,2$. Неустойчивость холодного пучка (и горячей плазмы, см. ниже) были подтверждены при моделировании в работе [Okuda, 1972b] для алгоритмов с сохранением импульса и момента, в работе [Langdon, 1973] — для сохранения энергии и в работе [Chen e. a., 1974] — для модели с сохранением импульса, причем каждая работа добавила свои детали к описанию неустойчивостей. Во всех случаях численная неустой-

чивость, приводящая к нарушению сохранения энергии (импульса системы), ясно наблюдалась в программе с сохранением импульса (сохранением энергии).

В работе [Birdsall e. a., 1975, 1980] приведены многочисленные решения уравнения (8.85) для различных случаев линейной стадии неустойчивости, исследование проведено на основе программы с сохранением импульса. Для программ с сохранением энергии пороговым значением является $k_g v_0 = 2\omega_p$. Кроме того, в этой работе приведены «рецепты» по уменьшению инкрементов. Однако при рассмотрении нарастания неустойчивости холодного пучка до насыщения по энергии электрического поля и тепловой энергии (так как неустойчивость нагревает пучок) было установлено, что рост прекращается и система возвращается в исходное состояние с сохранением энергии довольно быстро по достижении определенного уровня, примерно при

$$\lambda_B / \Delta x = v_t / (\omega_p \Delta x) = 0,046 \text{ для} \\ \lambda_B / \Delta x \equiv v_0 / (\omega_p \Delta x) \geq 1/\pi. \quad (8.102)$$

Уровень насыщения, обусловленный захватом частиц, был выведен аналитически в [Birdsall and Maron, 1980]. На рис. 8.5 показана область устойчивости при всех значениях $\lambda_B / \Delta x$.

При задании в качестве начальных условий значений больших, чем определяется формулой (8.102), неустойчивость не возникает. Следовательно, если необходимо устранить нефизическую неустойчивость холодного пучка, то достаточно просто ввести небольшой тепловой разброс, как предписывает неравенство (8.102). Если этого не сделать, то такое значение v_t появится само собой! Следовательно, эта нефизическая неустойчивость стремится к самозатуханию; такое поведение коррелирует с численными неустойчивостями жидкостных моделей, которые стремятся к саморазрушению. Было установлено, что неустойчивость является благом, потому что она так изменяет начальное состояние системы, что алгоритм становится более точным. Однако такое изменение может быть фатальным для цели моделирования! Например, если бы для ES1 были выбраны неподходящие параметры в работах [Ishihara e. a., 1981, 1982], то холодный электронный пучок из-за сеточной неустойчивости нефизически термализовался бы за время намного меньшее, чем требуется для насыщения физической неустойчивости.

В [Langdon, 1973] для программы с сохранением энергии и в [Birdsall and Maron, 1980] для кода с сохранением импульса была получена прекрасная картина фазового пространства (x, v_x) , показывающая коротковолновую активность частиц при $k \Delta x > \pi$ в соответствии с эффектом наложения частот; например при $N_g = 32$ (16 различных мод) можно наблюдать 12 мод для

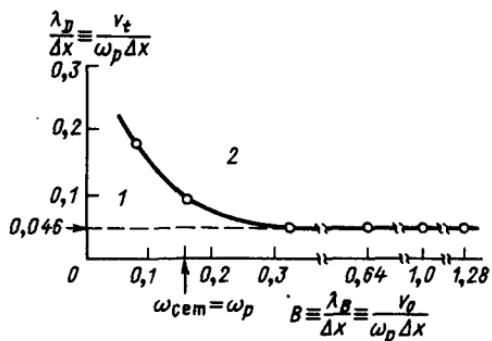


Рис. 8.5. Экспериментальное определение теплового разброса скоростей, необходимого для устойчивости пучка в периодической (математически) сеточной системе в случае программы с сохранением импульса. Для программ с сохранением энергии устойчивость определяется аналитически: $\lambda_B/\Delta x > 1/\pi \approx 0.3$; 1 — область неустойчивости; 2 — область устойчивости

сеточных значений ρ , ϕ и E и $32 - 12 = 20$ мод в фазовом

пространстве (см. § 10.9).

В работе [Birdsall and Maron, 1980] также был исследован чистый тепловой случай без дрейфа, $v_0=0$, начиная с $\lambda_B/\Delta x=0,1$, модель CIC. Тепловая и полная энергия растет во времени, и ее асимптотически можно описать соотношением

$$\lambda_B(t)/\Delta x \approx \lambda_B(\infty)/\Delta x [1 - \exp(-\alpha t)],$$

где $\lambda_B(\infty)/\Delta x \approx 0,26$ и $\alpha \ll \omega_p$ — константа, после чего линейный инкремент становится малым. Теория для горячего пучка приведена ниже.

8.13. РЕШЕНИЕ ДЛЯ МАКСВЕЛЛОВСКОЙ ПЛАЗМЫ; НЕФИЗИЧЕСКИЕ НЕУСТОЙЧИВОСТИ, ВЫЗВАННЫЕ СЕТКОЙ

Дизелектрическая проницаемость для незамагниченной электростатической плазмы, описываемой уравнением Власова, дается выражением (задача 8.10)

$$\epsilon(\mathbf{k}, \omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{K^2(\mathbf{k})} \sum_p |S(\mathbf{k}_p)|^2 \int \frac{\mathbf{k} d\mathbf{v}}{\omega + i0 - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{v}} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}}, \quad (8.103)$$

$$\text{Im } \omega \geq 0.$$

Если f_0 — максвелловское распределение по скоростям при нулевой дрейфовой скорости, то соотношение (8.103) можно записать в виде

$$\epsilon(\mathbf{k}, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{2K^2 v_t^2} \sum_p |S(\mathbf{k}_p)|^2 \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}_p}{k_p^2} Z'[\omega / (\sqrt{2} |\mathbf{k}_p| v_t)], \quad (8.104)$$

где Z' — производная плазменной дисперсионной функции [Fried and Conte, 1961].

При $\lambda_B \geq \Delta x$ основным в (8.104) является член с $\mathbf{k}_p \approx \mathbf{k}$. При значениях \mathbf{k} , существенно отличающихся от \mathbf{k}_p , моды сильно затухают. В этом случае нельзя ожидать существенного взаимодействия, связанного с наложением частот. В первой зоне сохраним только член с $p=0$, получая усредненную силу F_0 и

Рис. 8.6. Решения точного (с учетом всех p) и приближенного ($p=0$) дисперсионных уравнений для максвелловского распределения скоростей при $\lambda_D/\Delta x = 1$ и интерполяции по методу NGP. Значение $\text{Im } \omega$ соответствует ожидаемому затуханию Ландау; сплошная кривая — $\text{Re } \omega/\omega_p$ при учете всех p ; штрих-пунктирная — $\text{Re } \omega/\omega_p$ при $p=0$; пунктирная — $\text{Im } \omega$

диэлектрическую проницаемость ϵ_0 (см. § 8.3 и 8.11).

Это соответствует модели бессеточной плазмы облаков с кулоновским взаимодействием, причем

$$\epsilon_0 = 1 - \frac{\omega_p^2}{2K^2 v_t^2} |S_0|^2 Z'(\omega/\sqrt{2kv_t}), \quad (8.105)$$

$$|S_0(k)|^2 = |S(k)|^2 \frac{kx}{K^2}, \quad (8.106)$$

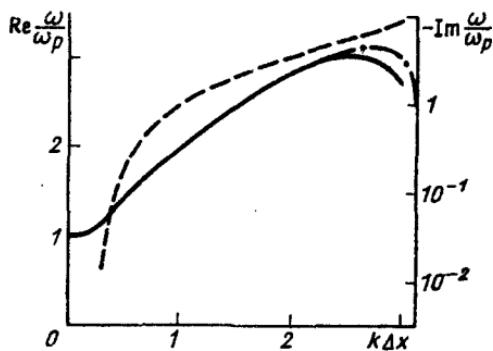
где сохранен только член с $p=0$, а S_0 — формфактор облака, используемый в дисперсионном уравнении.

Решение этих двух дисперсионных уравнений [(8.104) и (8.105)] показано на рис. 8.6 при $\lambda_D = \Delta x$ для одномерного максвелловского распределения $S(k) = \text{dif}(k\Delta x/2)$, метод NGP. Различие между $\text{Im } \omega$ в двух случаях графически незаметно, а $\text{Re } \omega$ существенно отличаются только для сильного затухания волны. Связь гармоник при $\lambda_D = \Delta x$ несущественна, и усредненная сила работает очень хорошо; при использовании метода CIC — PIC совпадение еще лучше улучшается.

В этом случае имеется очень много фазовых скоростей ω/k_p , с которыми частицы могут резонансно взаимодействовать. Если связь не слишком сильна, то нет качественной разницы в поведении $\text{Re } \omega$ для действительных ω , в частности не меняется знак ее производной. Это условие может не выполняться для мнимой части

$$\text{Im } \epsilon = -\pi \frac{\omega_p^2}{K^2} \sum_p S^2(k_p) \frac{x}{|k_p|} f'_0(\omega/k_p), \quad (8.107)$$

что может изменить условие устойчивости плазмы. В половине случаев k_p противоположно по направлению x , так что множитель xk_p/k_p^2 имеет неправильный знак. Для малых $k\Delta x$ это может сделать произведение $\omega \text{Im } \omega$ отрицательным, тогда как $\omega \partial \text{Re } \omega / \partial \omega$ остается положительным, что приводит к неустойчивости [Lindman, 1970; Langdon, 1970 a, b]. Говоря на плазменном жаргоне, волна имеет положительную энергию и накапливает отрицательное поглощение. При $\lambda_D = \Delta x$ в работе



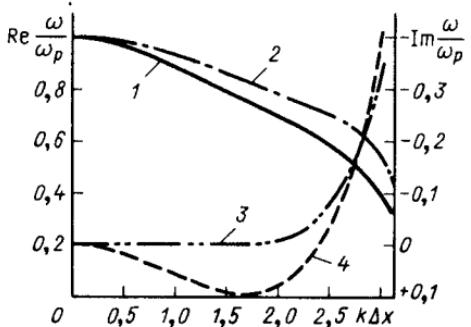


Рис. 8.7. Решения точного (кривые 1 и 4) и приближенного (кривые 2 и 3) дисперсионных уравнений при $\lambda_D/\Delta x=0,1$ и использовании интерполяции по методу NGP. Наличие $\text{Im } \omega > 0$ при $0 < k\Delta x \leq 2,5$ соответствует нефизическому нарастанию из-за наложения частот, возникающего при сохранении членов с $|p| > 0$. При использовании интерполяции по методу CIC—PIC максимальный инкремент примерно в 10 раз меньше и равен $0,014\omega_p$: кривые 1 и 2— $\text{Re } \omega/\omega_p$; кривые 3 и 4— $\text{Im } \omega/\omega_p$

[Langdon, 1970a] было обнаружено слабое нарастание, имеющее место только при длинах волн, много больших Δx , которое становится существенным при уменьшении $\lambda_D/\Delta x$ в широком диапазоне $k\Delta x$, как видно из рис. 8.7 при отношении $\lambda_D/\Delta x=0,1$. Ниже мы объясним эти результаты и получим дополнительные выводы.

Дисперсионное уравнение периодично по k ; ограничимся $k < k_g/2$, $k\Delta x < \pi$, т. е. основной зоной Бриллюэна, в которой только k и имеет физический смысл. В этом случае физическая фазовая скорость ω/k больше скорости гармоник ω/k_p , $p \neq 0$. Так, отношение ω/k может быть больше, чем v_t , что может привести к пренебрежимо малому затуханию Ландау. В то же время медленные волны сильно взаимодействуют с термализованными частицами как показано на рис. 8.8, если $k_g v_t \gtrsim \omega_p$. Вклад от воли с равными $|p|$ почти взаимно уничтожается, и в итоге возникает неустойчивость. Хотя она и мала при малых $k\Delta x$ [порядка $(k\Delta x)^2$ для NGP и $(k\Delta x)^4$ при линейном взвешивании], затухание Ландау для основной волны стремится к нулю даже быстрее при $k \rightarrow 0$. Так, сетка может дестабилизировать колебание даже для больших длин волн $\lambda \gg \Delta x$.

При $\lambda_D \gtrsim \Delta x/2$ скорости накладывающихся волн попадают на плоскую часть функции распределения частиц по скоростям и затухание Ландау имеет место до тех пор, пока $k\Delta x \leq 2k\lambda_D$.

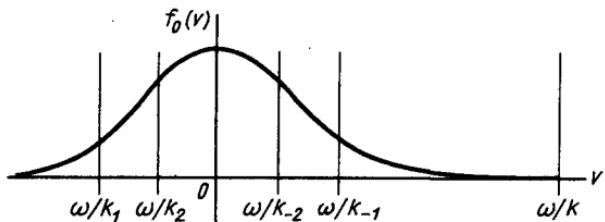


Рис. 8.8. Фазовая скорость волны ω/k , фазовые скорости налагающихся волн ω/k_p и $f_0(v)$ при $k_g v_t \sim \omega_p$

мало. Следовательно, для длинных волн неустойчивость ограничена и очень слаба. Эта нефизическая неустойчивость при $\lambda_D/\Delta x \geq 1/\pi \approx 0,3$ и линейном взвешивании имеет пренебрежимо малые инкременты.

Однако когда $\lambda_D \sim 0,1 \Delta x$, наименьшие и наиболее сильные налагающиеся частоты взаимодействуют с крутыми спадами начальной функции распределения f_0 и затухание Ландау мало даже при $k\Delta x \sim 2$, когда имеется сильная связь. В результате возникает сильная неустойчивость $\text{Im}\omega$ порядка $0,1\omega_p$ для NGP; однако при линейном взвешивании $\text{Im}\omega < 0,014\omega_p$, что составляет примерно 1 дБ на период и может считаться пренебрежимо малым во многих приложениях.

Если отношение $\lambda_D/\Delta x$ еще уменьшится, слабый вклад в наложение частот дают только члены с большими значениями p и неустойчивость исчезает, как это и можно ожидать,—холодная стационарная плазма не активна и обладает только устойчивыми колебаниями. Во многих приложениях наблюдается спокойное и свободное от шумов коллективное поведение холодной плазмы.

При изучении этой неустойчивости в численном моделировании необходимо использовать очень большое число частиц, чтобы наверняка быть уверенным, что линейное приближение не будет нарушено слишком большими флуктуациями и силами сеточного шума или что столкновения не подавят неустойчивость. Можно прийти в замешательство от того, на что все же похожа неустойчивость в плазме, обладающей уже максвелловским распределением по скоростям, и лишь догадываться, что именно это и вызывает раскачку колебаний. Они вызываются медленным нагревом плазмы. Это не запрещено, так как коды с сохранением импульса не сохраняют энергию. В программах с сохранением энергии (см. гл. 10) дестабилизирующий множитель $\pi k_p/k_g^2$ равен единице, так что при дрейфе плазмы сквозь сетку не создается никаких неустойчивостей, вызываемых ею. Подтверждающие этот факт эксперименты с максвелловской плазмой были рассмотрены выше.

Главной характеристикой колебаний является связь плазменных возмущений с различными длинами волн. Это можно рассматривать как параметрическое взаимодействие, в котором пространственная сетка играет роль накачки с нулевой частотой, волновыми числами k_g и их гармониками pk_g . В результате плазменные возмущения, характеризующиеся совокупностью ($\omega, k_p = \omega - pk_g$, p —целое), связаны между собой и в дисперсионном уравнении мы имеем сумму по этим подмодам. Сила связи определяется $S^2(k_p)$ и уменьшается с ростом порядка интерполяции.

Задачи

8.10. Выведите соотношение (8.103) по аналогии с § 8.11, но используя результаты из § 8.9 и кинетическое уравнение Власова вместо уравнений холодной жидкости.

8.11. Сохраняя только член с $p=0$, покажите, что дисперсионное соотношение Бома—Гросса приобретает вид

$$\omega^2 = \omega_p^2 (1 + 3k^2 \lambda_B^2 / 2 - \alpha k^2 \Delta x^2),$$

и определите α для случаев NGP и CIC—PIC. Заметьте, что при $\lambda_B^2 / (\Delta x)^2 < 2\alpha/3$ волна становится обратной, т. е. ее групповая скорость противоположна фазовой. Это изменение дисперсии может оказывать влияние на многие виды плазменных неустойчивостей и показывает необходимость изменения метода расчета поля для компенсации неточностей в дисперсионном соотношении.

8.12. Как изменится неустойчивость, если определить E так, как это было сделано в задаче 8.6?

ГЛАВА 9

ЭФФЕКТЫ КОНЕЧНОГО ШАГА ПО ВРЕМЕНИ

9.1. ВВЕДЕНИЕ

Здесь рассмотрены эффекты, связанные с использованием конечного временного шага Δt . В начале главы описана незамагниченная плазма, затем—замагниченная, а в конце главы рассмотрены некоторые другие схемы интегрирования по времени и проблемы больших временных шагов.

При численном моделировании плазмы методом крупных частиц алгоритм продвижения системы на один шаг по времени обычно подразделяется на две части: вычисление электромагнитных полей и сил, действующих на частицы, и расчет координат и скоростей частиц. В гл. 8 первая часть рассматривалась в предположении, что вторая выполняется точно в соответствии с дифференциальными уравнениями динамики Ньютона. В настоящей главе обсуждаются свойства конечно-разностных уравнений, используемых для расчета движения частиц во времени. В большей части наших обсуждений мы возвращаемся для простоты к силам и полям, непрерывно зависящим от x . Однако результаты, полученные в гл. 8, объединены в § 9.5 для достижения точного описания эффектов дискретности времени и пространства. Это является предпосылкой развития количественной кинетической теории моделирования плазмы (см. гл. 12).

Различные авторы изучали различные аспекты интегрирования по времени как другими методами [Lindman, 1970; Godfrey, 1974], так и методами, изложенными в настоящей главе [Byers e. a., 1978]. В их работах рассматривались и полностью электромагнитные поля, и магнитоиндуктивное приближение Дарвина. Ниже довольно полно рассмотрен электростатический случай на основе работ [Langdon, 1970_в, 1979_в] и других источников.

Сначала мы получим выражение для диэлектрической проницаемости, представляющей отклик плазмы на возмущающие поля. Приравнивая ее к нулю, определяем дисперсионные зависимости и устойчивость свободных колебаний. Вывод всех соотношений дается двумя способами, которые иллюстрируют различные стороны и пределы изменения параметров. Анализ колебаний плазмы включает те же самые физические процессы, что и в классической задаче Ландау [Jackson, 1960], и наши результаты сводятся к результатам Ландау простым и корректным образом в пределе $\Delta t \rightarrow 0$.

Конечное значение Δt приводит к простому изменению линейных дисперсионных соотношений. Для метода интегрирования с перешагиванием в случае незамагниченной модели плазмы мы покажем, что обычный резонансный знаменатель $1/(\omega - kv)$ принимает вид

$$\frac{\Delta t}{2} \cos(\omega - kv) \frac{\Delta t}{2} = \sum_q (\omega - kv - q\omega_g)^{-1}, \quad (9.1)$$

где $\omega_g = 2\pi/\Delta t$. В результате при малых $\omega_p \Delta t$ корни дисперсионного уравнения $\omega(k)$ сдвигаются вверх на $(\omega_p \Delta t)^2/24$, как было показано выше, в гл. 4.

Периодичность по ω отражает тот факт, что частоты, различающиеся гармониками $\omega_g = 2\pi/\Delta t$, дают одно и то же изменение фазы за один шаг по времени

$$\exp(-i(\omega - q\omega_g)\Delta t) = \exp(-i\omega\Delta t)$$

и, следовательно, эквивалентны с точки зрения разностных уравнений. Это — проявление стробоскопического эффекта, который «одурачивает» не только наблюдателя, но и динамику системы. Частоты $(\omega - q\omega_g)$ называются налагающимися, потому что они — это различное обозначение для одного и того же явления.

В случае простых гармонических колебаний (см. гл. 4) при $k\lambda_D \ll 1$ обычная схема с перешагиванием становится неустойчивой при $\omega_p \Delta t \geq 2$. Коллективные эффекты изменяют это условие на неравенство $\omega_p \Delta t \geq 1,62$ в случае максвелловского распределения скоростей. Именно поэтому в дисперсионном уравнении Бома — Гросса ω возрастает по сравнению с ω_p , а не

из-за того, что частицы проходят большую часть длины волны за один шаг по времени. Однако никаких других нефизических неустойчивостей не возникает. Эти результаты вместе с изложенными в гл. 8 затем объединяются для совместного описания алгоритма, учитывающего пространственную и временную дискретность моделирования.

В замагниченной плазме (см. § 9.6) наложение циклотронных гармоник приводит к нефизическому неустойчивости, вызванной конечным ларморовским радиусом, которая не проявляется при одночастичном описании или же в холодной плазме и, возможно, даже при максвелловском распределении.

В § 9.7 изложены три метода эффективного моделирования медленно меняющихся (по сравнению, например, с ω_{pe}) процессов. В § 9.8 теория обобщается на целый класс схем интегрирования. Проанализирован ряд примеров и получены новые алгоритмы моделирования.

9.2. ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ ГОРЯЧЕЙ НЕЗАМАГНИЧЕННОЙ ПЛАЗМЫ; АЛГОРИТМ С ПЕРЕШАГИВАНИЕМ

Рассмотрим возмущения однородной, бесконечной или периодической, незамагниченной однокомпонентной плазмы с неподвижным нейтрализующим фоном. Мы анализируем коллективное движение плазмы, т. е. делаем иной акцент, чем в обычной литературе по численному анализу, в которой по-другому рассматриваются точность и скорость вычислений. Например, задача с начальными условиями для обычных дифференциальных уравнений изучена весьма хорошо и разработано много очень точных алгоритмов ее решения. Такие методы использовались, например, для описания движения одной частицы при изучении структуры магнитных полей в установках по управляемому термоядерному синтезу. Методы, используемые при моделировании многих частиц, могут показаться сравнительно простыми. Однако, что важно отметить, нужно обеспечить точность описания коллективного движения многих частиц, отражающего поведение плазмы, а не траектории отдельной частицы. При ограниченных возможностях ЭВМ обычно лучше использовать простые и быстрые разностные алгоритмы, чем, скажем, иметь меньшее число частиц. Даже некоторые ошибки в коллективном движении, например в частотах колебаний, могут быть приемлемыми, если количественно понятны их последствия и программы сохраняли определенные физические свойства системы. Например, в то время как многие успешно работающие коды не являются точно обратимыми во времени, опыт показывает, что можно устранить неприемлемые виды ошибок, если обеспечить точную обратимость в разностных уравнениях [Buneman, 1967].

Кажется более разумным работать с отклонениями от стационарных орбит, вызванными действием полей, чем строить конечно-разностный аналог уравнения Власова [Lindman, 1970; Godfrey, 1974]. Соответствующие характеристики, как, например, ограничения линеаризованного анализа, получаются более явно. Без всякого усложнения теория применима к схемам интегрирования по времени уравнений движения третьего и более высоких порядков, так что для описания системы из N частиц в трехмерном случае необходимо фазовое пространство размерностью $9N$ или больше вместо $6N$, и к алгоритмам, не сохраняющим фазовый объем при движении частиц (см. § 9.8, в частности задачи 9.22 и 9.23). Мы сохраним физическое содержание приближения Власова, но выполняем его функции другими средствами.

В приближении Власова частицы двигаются по прямым линиям, несущественно возмущенным столкновениями. Вычислим отклонение частицы от этой прямой линии, вызванное действием электрического поля вида

$$\mathbf{E}^{(1)}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{E} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x} - i\omega t), \quad (9.2)$$

при $\operatorname{Im} \omega > 0$, начиная с невозмущенного состояния плазмы при $t = -\infty$. Обобщение на случай нескольких видов частиц и для $\operatorname{Im} \omega \leq 0$ станет ясным ниже.

Разностные уравнения движения частицы (см. § 2.4) имеют вид

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{n+1/2} - \mathbf{v}_{n-1/2} &= \mathbf{a}_n \Delta t, \\ \mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n &= \mathbf{v}_{n+1/2} \Delta t. \end{aligned} \quad (9.3)$$

Ясно, что этот алгоритм сохраняет фазовый объем, так как изменения скорости и координаты являются просто сдвигами в фазовом пространстве. Разделяя \mathbf{x} и \mathbf{v} на невозмущенную и возмущенную части, т. е. $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(0)} + \mathbf{x}^{(1)}$, исключая \mathbf{v} и линеаризуя уравнения, имеем

$$\mathbf{x}_{n+1}^{(1)} - 2\mathbf{x}_n^{(1)} + \mathbf{x}_{n-1}^{(1)} = q \frac{\Delta t^2}{m} \mathbf{E} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}_n^{(0)} - i\omega t_n), \quad (9.4)$$

где $t_n \equiv n\Delta t$. В левой части уравнения $\mathbf{x}^{(0)}$ выпадает, в правой части поле берется при невозмущенном значении координаты $\mathbf{x}_n^{(0)} = \mathbf{x}_n^{(0)} + \mathbf{v}^{(0)}t_n$, в качестве условия линеаризации используется следующее:

$$kx^{(1)} \ll 1. \quad (9.5)$$

Это условие ниже вновь появится в вычислениях и заменит более строгое условие

$$\mathbf{E}^{(1)} \partial f^{(1)} / \partial \mathbf{v} \ll \mathbf{E}^{(1)} \partial f^{(0)} / \partial \mathbf{v}, \quad (9.6)$$

обычно используемое в литературе [Jackson, 1960] и являющееся достаточным условием для линеаризации уравнения Власова. Условие (9.5) достаточно для линеаризованных вычислений возмущения плотности заряда $\rho^{(1)}$, а (9.6) предполагает вычисление плотности в фазовом пространстве $f^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{v})$. Успешное использование линейной теории при возмущениях, для которых нарушается выполнение условия (9.6), можно понять с помощью анализа лагранжиана. Например, инкременты для неустойчивости встречных холодных пучков точно вычисляются при выполнении (9.5), тогда как (9.6) не выполняется для холодных пучков при любых амплитудах возмущений.

Правая часть соотношения (9.4) меняется во времени по закону

$$\exp(-i\omega_d t_n + ikv^{(0)}t_n) \equiv \exp(-i\omega_d t_n), \quad (9.7)$$

представляющему определение ω_d ; $\mathbf{x}_n^{(1)}$ изменяется аналогично. Из-за условия $\mathbf{x}^{(1)} \rightarrow 0$ при $t_n \rightarrow -\infty$ не возникает никаких линейных по времени членов. Подставляя эту зависимость в левую часть (9.4), получаем решение

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(1)}(\mathbf{x}_n^{(0)}, \mathbf{v}^{(0)}, t_n) &= \frac{q \Delta t^2 \mathbf{E}}{m} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_n^{(0)} - i\omega_d t_n) = \\ &= -\left(\frac{2}{\Delta t} \sin(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}^{(0)}) \frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{q}{m} \mathbf{E}^{(1)}. \end{aligned} \quad (9.8)$$

Мы получили явную зависимость от $\mathbf{x}^{(0)}$, $\mathbf{v}^{(0)}$ и t . Исходя из возмущения траектории, вычислим результирующее возмущение плотности заряда. Эту плотность можно представить как результат смещения частиц от их невозмущенных координат $\mathbf{x}^{(0)}$ на величину $\mathbf{x}^{(1)}$, рассматривающийся как суперпозиция монополей с зарядом q в точке $\mathbf{x}^{(0)}$ и диполей, состоящих из заряда $+q$ в точке $\mathbf{x}^{(0)} + \mathbf{x}^{(1)}$ и $-q$ в точке $\mathbf{x}^{(0)}$, т. е. дипольный момент $q\mathbf{x}^{(1)}$ локализован в точке $\mathbf{x}^{(0)}$. Плотность монополей компенсируется нейтрализующим фоном. Плотность диполей P в приближении Власова получается усреднением $q\mathbf{x}^{(1)}$ по распределению по скоростям:

$$P(\mathbf{x}, t) = n_0 q \int d\mathbf{v} f_0(\mathbf{v}) \mathbf{x}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t), \quad (9.9)$$

где n_0 и f_0 — невозмущенные плотность заряда и функция распределения по скоростям. Для получения изменения плотности заряда $\rho^{(1)}$ рассмотрим произвольный объем V и частицы, движущиеся из положения $\mathbf{x}^{(0)}$ в $\mathbf{x}^{(0)} + \mathbf{x}^{(1)}$. Изменение заряда δQ возникает из-за частиц, пересекающих граничную поверхность S :

$$\delta Q = - \int_S d\mathbf{s} \mathbf{P} = - \int_V d\mathbf{x} \nabla \mathbf{P}. \quad (9.10)$$

Следовательно, плотность заряда определяется соотношением

$$\rho^{(1)} = -\nabla P = -ikP \quad (9.11)$$

и изменяется аналогично соотношению (9.1). Этот результат также основывается на предположениях, что $kx^{(1)} \ll 1$ и $n_0 \gg k^3$.

Используя (9.8) и (9.9), выразим поляризацию в терминах восприимчивости χ :

$$P = \chi E. \quad (9.12)$$

Учитывая равенство (9.11) и теорему Гаусса, получаем дисперсионное уравнение в виде

$$\epsilon(k, \omega) \equiv 1 + \chi(k, \omega) = 0, \quad (9.13)$$

где дисперсионная функция ϵ имеет вид

$$\epsilon(k, \omega) \equiv 1 - \omega_p^2 \int \frac{dv f_0(v)}{\left[\left(\frac{2}{\Delta t} \right) \sin \frac{1}{2} (\omega + i0 - kv) \Delta t \right]^2}, \quad (9.14)$$

$$\epsilon(k, \omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{k^2} \int dv k \frac{\partial f_0}{\partial v} \frac{\Delta t}{2} \operatorname{ctg}(\omega + i0 - kv) \frac{\Delta t}{2}; \quad (9.15)$$

здесь $\omega_p^2 = (n_0 q^2 / m)^{1/2}$ — плазменная частота в рационализованной системе единиц СГС (Хевисайда — Лоренца) [Panofsky and Phillips, 1962; Jackson, 1975].

Второе выражение получается интегрированием по частям и в пределе $\Delta t \rightarrow 0$ сводится к известным результатам [Jackson, 1960]. Дисперсионная функция ϵ играет обычную роль при получении других результатов, например по экранированию и флюктуациям (см. гл. 12). В многокомпонентной плазме каждая компонента дает аддитивный вклад в χ в выражении (9.13).

Член « $i0$ » в (9.14) напоминает нам, что это соотношение выведено в предположении $\operatorname{Im}\omega > 0$, но может быть использовано для действительных ω или даже для затухающих колебаний аналитическим продолжением вдоль или ниже оси действительных ω , как это делается при обычном анализе затухания Ландау [Jackson, 1960]. Это можно показать формально из решения задачи с начальными условиями с использованием Z -преобразования [Jury, 1964] аналогично способу Ландау с использованием преобразования Лапласа. В общем случае $g(\omega + i0)$ означает предел выражения $g(\omega + i\delta)$ при $\delta \rightarrow 0$ со стороны действительных положительных значений. Мнимую часть ϵ находят из задачи (9.2).

Для холодной движущейся плазмы из (9.14) получаем

$$\omega = kv \pm [2 \arcsin(\omega_p \Delta t / 2)] / \Delta t = kv \pm \omega_p [1 + (\omega_p \Delta t)^2 / 24 + \dots]. \quad (9.16)$$

Предполагается, что выбором ω_p можно обеспечить сохранение в рассмотрении только членов с ошибкой порядка $(\Delta t)^2$. Это

справедливо также и в случае горячей плазмы. Разлагая котангенс в (9.15), получаем

$$\varepsilon = 1 + \frac{\omega_p^2}{k^2} \int d\mathbf{v} \mathbf{k} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}} \left[\frac{1}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}} - \frac{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}}{3} \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 + O(\Delta t^4) \right] = \\ = \varepsilon_0 - (\omega_p \Delta t)^2 / 12 + O(\Delta t^4), \quad (9.17)$$

где ε_0 — обычная дисперсионная функция для непрерывного времени. Влияние члена порядка $(\Delta t)^2$ на решения $\omega(\mathbf{k})$ дисперсионного уравнения $\varepsilon=0$ дает такое же слабое увеличение частоты, как и в (9.16). Отсутствие членов, пропорциональных $(\Delta t)^3$, является следствием обратимости уравнений движения [Buneman, 1967].

Обычный вид для ε получается при использовании разложения котангенса, справедливого всюду на комплексной плоскости ω [Abramowitz and Stegun, 1964]:

$$\varepsilon = 1 + \frac{\omega_p^2}{k^2} \int d\mathbf{v} \mathbf{k} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}} \sum_{q=-\infty}^{\infty} (\omega - \mathbf{k}\mathbf{v} - q\omega_q)^{-1}, \quad (9.18)$$

т. е. $\chi(\mathbf{k}, \omega) = \sum \chi_0(\mathbf{k}, \omega - q\omega_q)$, где $\chi_0 = \varepsilon_0 - 1$ — восприимчивость при непрерывном времени; $\omega_q = 2\pi/\Delta t$ — частота, характеризующая «сеточное» время. Каждый член в сумме аналогичен обычному непрерывному с заменой ω на $\omega - q\omega_q$. Если мы можем вычислить ε_0 для некоторых f_0 , то можно также вычислить ε , используя тот ряд, чья сходимость может быть ускорена [Langdon, 1979 b]. Например, для максвелловского распределения с дрейфовой скоростью v и тепловой скоростью $v_t = (T/m)^{1/2}$ имеем

$$\varepsilon = 1 - \frac{\omega_p^2}{2k^2 v_t^2} \sum_{q=-\infty}^{\infty} Z' \left(\frac{\omega_q - \mathbf{k}\mathbf{v}}{\sqrt{2}|k|v_t} \right), \quad (9.19)$$

где $\omega_q \equiv \omega - q\omega_q$ — частота с учетом наложения [Hamming, 1962; Blackman and Tukey, 1958], а Z' — производная дисперсионной функции [Fried and Conte, 1961]. Эта форма записи удобна для вычислений на ЭВМ, так как компьютерные программы для вычисления Z весьма доступны.

Перед анализом решений этого дисперсионного уравнения сделаем небольшое отступление для обсуждения наложения частот и его следствиях. Спутники частоты ω удовлетворяют соотношению $\exp(-i\omega_q t_n) = \exp(-i\omega t_n + 2\pi iq n) = \exp(-i\omega t_n)$ при всех целых n и q . Значения ω_q — это различные частоты, которые дают одинаковые изменения величин, определенных только в моменты t_n на временной сетке. Эта эквивалентность отражена в нашей теории периодичностью всех величин как функций ω , т. е. периодичностью с $\omega_q = 2\pi/\Delta t$. Бесконечность числа полюсов в подынтегральном выражении (9.15) не предполагает наличия

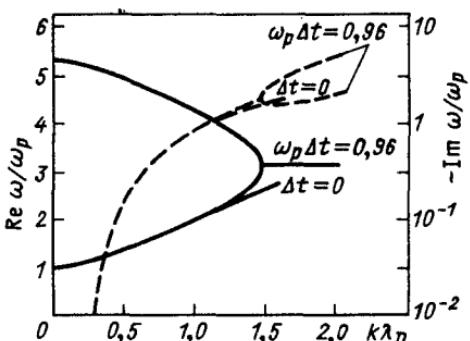
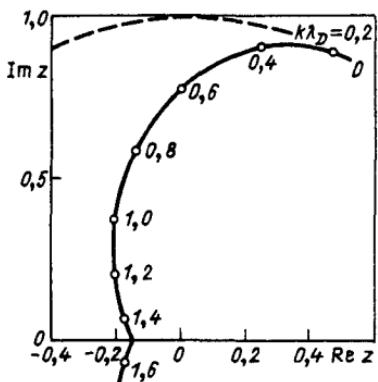


Рис. 9.1. Зависимость расположения численных решений $Z = \exp(-i\omega\Delta t)$ от $k\lambda_D$ для максвелловского распределения скоростей при $\arcsin(\omega_p\Delta t/2)=0,5$ и в пренебрежении эффектами пространственной сетки, штриховая линия — единичная окружность. При $k\lambda_D=0$ имеем решение для простого гармонического осциллятора $Z=\exp(\pm i)$. При нарастании $k\lambda_D$ решение сдвигается влево, оставаясь в пределах единичной окружности, затем устремляется к оси z , пересекая ее при $k\lambda_D=1,45$, и затем удаляется от оси. Корень, движущийся влево вдоль действительной оси, становится неустойчивым при $\omega_p\Delta t>1,62$ (см. § 9.4). При $k\lambda_D\geq 1,6$ в рассматриваемом примере оба корня движутся вместе к $z=0$, все более затухая

Рис. 9.2. Действительные и мнимые части $\omega=(i/\Delta t)\ln z$ в случае решения, представленного на рис. 9.1. Показан один период $\text{Re } \omega$. Нижняя и верхняя кривые для $\text{Re } \omega$ соответствуют $\omega \sim +\omega_p$ и наложению при $-\omega_p$. Для сравнения показаны решения в пределе непрерывного времени для соответствующих параметров. Приближение, даваемое формулой (9.17), выглядит довольно точным до тех пор, пока $\text{Re } \omega$ не достигнет $\pi/\Delta t$ несмотря на большие значения Δt , превышающие обычно используемые на практике

более одного резонанса, и из периодичности ϵ не следует существования новых видов колебаний.

Часто полезно заменить переменную ω на величину $Z = \exp(-i\omega\Delta t)$ (поворот в единицу времени); это устраняет периодичность и множественность дисперсионных корней. Решения с наименьшим затуханием для Z , полученные из (9.19), показаны на рис. 9.1 для случая $\omega_p\Delta t=2\sin(0,5)=0,95885$, довольно большого временного шага, точное значение которого выбрано для последующего сравнения с решениями при непрерывном времени. При $k=0$ решение $Z=\exp(\pm i)$ соответствует плазменным колебаниям с $\omega=\pm\omega_p$. С ростом $k\lambda_D$ корни изгибаются влево, затем в направлении отрицательной действительной полуоси, где они быстро смыкаются и уходят дальше вдоль действительной оси. Один из корней движется слегка влево, затем следует за другим корнем к началу координат.

Это взаимодействие двух ветвей плазменных колебаний является нефизическим следствием периодичности, введенной численными методами. После встречи корней, однако, $|Z|—$

порядка единицы, так что моды сильно затухают и их взаимодействием можно пренебречь.

Исследуем теперь решения дисперсионного уравнения на плоскости ω . Мы выбрали $\omega_p \Delta t$ таким образом, чтобы при $k=0$ решения имели вид $\omega \Delta t = \pm 1$ плюс накладывающиеся частоты. На рис. 9.2 показаны ветви, проходящая через $\omega \Delta t = 1$, плюс накладывающаяся частота с $-\omega_p$, а также ветвь, проходящая через $\omega \Delta t = 2\pi - 1$. Показан один период $\text{Re} \omega \Delta t$; все $\text{Im} \omega$ равны между собой. Для пояснения точности выражения (9.17) приводится также решение для дисперсионного соотношения при непрерывном времени, где ω_p^{-1} выбрано из условия задания временного шага при моделировании. При $|k \lambda_D| \lesssim 1$ решения совпадают в пределах 1%. Для больших $k \lambda_D$, $\text{Re}(\omega \Delta t)$ порядка π , эффекты наложения частот являются определяющими и простая коррекция становится несправедливой. При $k \lambda_D \approx 1,45$ решение встречается с решением, вызванным наложением частот; это взаимодействие уже описано выше и не приводит к каким-либо последствиям из-за сильного затухания мод.

При $\omega_p \Delta t = 1,62$ одна мода становится неустойчивой, как показано в § 9.4.

Задачи

9.1. Покажите, что точное значение плотности заряда можно получить из якобиана

$$\rho(x, t) = \rho_0 \int d\mathbf{v}_0 [\partial(x(x_0, \mathbf{v}_0, t)) / \partial x_0]^{-1} f_0(\mathbf{v}_0). \quad (9.20)$$

Покажите, что в этом случае выражение (9.11) получается линеаризацией якобиана.

9.2. Покажите, что $\text{Im}[(\Delta t/2) \operatorname{ctg}(\omega + i0 - \Omega) \Delta t/2]$ можно заменить в интегrale на $-\pi \sum \delta(\omega - \Omega - q\omega_g)$ по всем q и $\text{Im}[(2/\Delta t) \sin(\omega + i0 - \Omega) \Delta t/2]^{-2}$ также эквивалентно $+\pi \sum \delta'(\omega - \Omega - q\omega_g)$. Указание: рассмотрите контур для Ω , лежащий вдоль действительной оси, за исключением огибания полюсов при $\omega = q\omega_g$ по полуокружностям с центрами в этих полюсах, и устремите их радиусы к нулю. Подставляя эти результаты в (9.14) или (9.15), покажите, что

$$\text{Im} \epsilon = -\frac{\omega_p^2}{k^2} \int d\mathbf{v} \mathbf{k} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \sum_q \delta(\omega - q\omega_g - \mathbf{k}\mathbf{v}). \quad (9.21)$$

9.3. АЛЬТЕРНАТИВНЫЙ АНАЛИЗ НА ОСНОВЕ СУММИРОВАНИЯ ПО ТРАЕКТОРИЯМ ЧАСТИЦ

Поучительно вновь рассмотреть данную проблему методом суммирования, аналогичным интегрированию, по предшествующим значениям ускорения, взятым вдоль невозмущенных траекторий. Этот подход приводит к пониманию предела больших $k v \Delta t$ («памяти» системы), роли перемешивания фаз и приоткрывает различие между методом с перешагиванием и

другими схемами, которые содействуют выводу дисперсионного уравнения и обосновывают классификацию, приведенную в § 9.8.

Для того чтобы выразить $\mathbf{x}^{(1)}$ через $\mathbf{a}^{(1)}$, используем импульсный отклик: отклонение $\mathbf{x}_n^{(1)}$, вызванное импульсом $a_{n-1}^{(1)} s \Delta t$, равно $(a_{n-1}^{(1)} s \Delta t)(s \Delta t)$. Суммируя по всем предыдущим импульсам, получаем

$$\mathbf{x}_n^{(1)} = \Delta t \sum_{s=1}^{\infty} \mathbf{v}_{n-1}^{(1)} s + 1/2 = \Delta t^2 \sum_{s=1}^{\infty} s \mathbf{a}_{n-1}^{(1)} s. \quad (9.22)$$

Предполагая, что силовое поле изменяется по формуле (9.2), получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(1)}(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{v}^{(0)}, t_n) &= \frac{q}{m} E \Delta t^2 \exp(i k \mathbf{x}^{(0)} - i \omega t_n) \times \\ &\times \sum_{s=1}^{\infty} s \exp[(i \omega - i k \mathbf{v}) s \Delta t], \end{aligned}$$

где $\mathbf{v} \equiv \mathbf{v}^{(0)}$ и сумма сходится при $\text{Im} \omega > 0$. Определим, как и выше, плотность заряда и затем диэлектрическую проницаемость.

$$\epsilon = 1 + \omega_p^2 \Delta t^2 \sum_{s=1}^{\infty} \int d\mathbf{v} f_0(\mathbf{v}) s \exp[i s \Delta t (\omega - k \mathbf{v})], \quad (9.23)$$

$$\epsilon = 1 - i \omega_p^2 \Delta t \frac{\partial}{\partial \omega} \sum_{s=1}^{\infty} \int d\mathbf{v} f_0(\mathbf{v}) \exp[(\omega - k \mathbf{v}) i s \Delta t]. \quad (9.24)$$

Выполняя затем интегрирование по \mathbf{v} , мы выполним Фурье-преобразование f_0 в пространстве скоростей

$$\epsilon = 1 - i \omega_p^2 \Delta t \frac{\partial}{\partial \omega} \sum_{s=1}^{\infty} \tilde{f}_0(k s \Delta t) \exp(i \omega s \Delta t), \quad (9.25)$$

где

$$\tilde{f}_0(\tilde{\mathbf{v}}) \equiv \int d\mathbf{v} f_0(\mathbf{v}) \exp(-i \mathbf{v} \cdot \tilde{\mathbf{v}}). \quad (9.26)$$

Для максвелловского распределения по скоростям $\tilde{f}_0(\tilde{\mathbf{v}}) = \exp(-\tilde{\mathbf{v}}^2 v_t^2 / 2)$ и ряд сходится при любом комплексном ω . Это выражение не требует аналитического продолжения. При $k v_t \Delta t \rightarrow 0$ сумма переходит в интеграл и выражение (9.25) в случае максвелловского распределения корректно сводится к такому виду:

$$\epsilon = 1 - i \omega_p^2 \frac{\partial}{\partial \omega} \int_0^{\infty} dt \tilde{f}_0(kt) \exp(i \omega t), \quad (9.27)$$

$$\epsilon = 1 - i \omega_p^2 \frac{\partial}{\partial \omega} \int_0^{\infty} dt \exp(i \omega t - 1/2 k^2 v_t^2 t^2). \quad (9.28)$$

Соотношение (9.28) можно преобразовать до полного квадрата в подынтегральном соотношении и выразить через комплексную функцию ошибок.

Если сначала выполним суммирование простой геометрической прогрессии в (9.24), получим следующий результат:

$$\sum_{s=1}^{\infty} \exp(i\omega_d s \Delta t) = [\exp(-i\omega_d \Delta t) - 1]^{-1}, \quad (9.29)$$

$$\sum_{s=1}^{\infty} \exp(i\omega_d s \Delta t) = -\frac{1}{2} + \frac{i}{2} \operatorname{ctg}(\omega_d \Delta t / 2). \quad (9.30)$$

Подстановка в (9.24) дает выражение (9.15) (см. задачу 9.4).

Скорость сходимости ряда (9.24) определяет, как долго значение силового поля в данный момент влияет на плотность заряда, т. е. временную память. При заданном ω память короче (сходимость быстрее) при больших $k v_i \Delta t$. Конечно, возмущение $x^{(1)}$ не затухает и может нарастать, только его вклад в значение $\rho^{(1)}$ уменьшается при усреднении по гладкому распределению f_0 в осциллирующем поле. Этот процесс хорошо известен в физике плазмы и называется «фазовым перемешиванием» (см. задачу 9.36).

Уравнение (9.24) является степенным рядом по $Z^{-1} = \exp(+i\omega \Delta t)$, его усечение дает полином от Z . В случае максвелловского распределения при сохранении достаточного числа членов добавление новых слагаемых приводит к появлению дополнительных корней малой величины (сильное затухание) без существенного изменения больших по модулю корней. Таким образом, мы возвращаемся к бесконечному числу корней, ожидаемых в случае непрерывного изменения времени [Jackson, 1960].

Полезно рассмотреть изменение соотношений (9.25) и (9.15) для других разностных схем. Рассмотрим схему из работы [Feix, 1969]:

$$x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t + a_n \Delta t^2 / 2, \quad (9.31)$$

$$v_{n+1} = v_n + a_n \Delta t + (a_n - a_{n-1}) \Delta t / 2. \quad (9.32)$$

В этом случае (задача 9.6)

$$x_n^{(1)} = -a_{n-1}^{(1)} \Delta t^2 / 2 + \Delta t^2 \sum_{s=1}^{\infty} s a_{n-s}^{(1)}. \quad (9.33)$$

Второе слагаемое соответствует результату метода с перешагиванием. Эти схемы различаются только связью $x^{(1)}$ со значением $a^{(1)}$ в предшествующий момент времени. Отличие ϵ от вида (9.15) и (9.25) заключается в следующем:

$$\epsilon - \epsilon_{\text{leapfrog}} = (-\omega_p^2 \Delta t^2 / 2) \tilde{f}_0(k \Delta t) \exp(i\omega \Delta t). \quad (9.34)$$

Существование такого вида связи между методом с перешагиванием и некоторыми другими методами второго порядка точности по Δt объясняет их классификацию в § 9.8.

Задачи

9.3. Докажите формулу (9.22), затем получите соотношение (9.23).

9.4. Подставьте (9.30) в (9.24), чтобы получить формулу (9.15). Указание: действие $\partial/\partial \omega$ на подынтегральное выражение сводится к $-k^{-2} k \partial/\partial v$. Почему слагаемое $-1/2$ в (9.30) выпадает при интегрировании по скоростям?

9.5. Для получения другого взгляда на фазовое перемешивание рассмотрите систему невзаимодействующих частиц, описываемых уравнением Власова, однородных в пространстве, имеющих максвелловское распределение по скоростям при $t < 0$ и подвергающихся действию импульсной силы $F_0 \delta(t) \cos(kx)$. Определите $f(x, v, t)$ при $t > 0$. Хотя возмущение f нарастает во времени (исследуйте $\partial f/\partial v$), покажите, что плотность (момент скорости) затухает как $\exp(-k^2 v^2 t^2/2)$.

9.6. Получите выражение (9.33) из (9.31) и (9.32), рассматривая импульсный отклик, или соответствующим образом суммируя (9.31) и (9.32) по предшествующим моментам $n, n-1, \dots$ [другой метод состоит в определении степеней Z^{-1} в правой части (9.68) в моменты времени, определяемые формулой (9.33)].

9.4. ЧИСЛЕННАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ

При анализе влияния пространственной сетки в гл. 8 была обнаружена неустойчивость, связанная с резонансом частиц при малых фазовых скоростях накладывающихся волн, т. е. $\omega/k_p \lesssim v$, при $p \neq 0$ и $\omega/k \gg v$. Конечный временной шаг вводит новые резонансы, и мы должны будем рассмотреть — приведет ли это к нежелательным последствиям или нет. При рассмотрении только временного наложения никаких аналогичных неустойчивостей не возникает. Если положить без потери общности, что $\omega < \pi/\Delta t$, то фазовые скорости накладывающихся волн будут больше по величине и их вклад в $\text{Im } \varepsilon$ будет меньше, чем члена с $q=0$, ответственного за затухание Ландау. Фактически, только когда $k v, \Delta t \gtrsim \pi$, возможен резонанс более чем одного члена в формуле (9.18) с частицами, имеющими соответствующие фазовые скорости. Даже для больших значений $k v, \Delta t$ мы не обнаружим никаких неустойчивостей такого вида.

Теперь рассмотрим неустойчивость, которая возникает в линейной теории, и неустойчивость нелинейных колебаний.

Сначала обсудим линейную неустойчивость. При $\omega_p \Delta t > 2$, как следует из (9.16), неустойчивость имеет место для холодной плазмы. Покажем, что дисперсия Бома — Гросса уменьшает порог неустойчивости, $\omega \Delta t = \pi + kv$ и $\text{Im } \varepsilon = 0$. При подстановке этого соотношения в (9.23) дисперсионное уравнение принимает вид

$$(\omega_p \Delta t)^{-2} = - \sum_{s=1}^{\infty} s (-1)^s \exp(-(kv_t \Delta t)^2 s^2/2). \quad (9.35)$$

Значение $kv_t \Delta t$, которое максимизирует правую часть равенства, показывает, когда плазма впервые станет неустойчивой с ростом $\omega_p \Delta t$. Неустойчивость возникает при $kv_t \Delta t = 1,14$, а $\omega \Delta t > 1,62$ (см. задачу 9.7).

Можно ожидать, что в эту неустойчивость будут вовлечены частицы, проходящие больше половины длины волны за один шаг по времени и видящие поэтому очень искаженные изменения поля. Такая ситуация может вызвать ошибки (см. § 9.7). Однако при возникновении этой неустойчивости тепловые частицы проходят менее одной пятой длины волны за временной шаг. То, что происходит, не есть дестабилизация одной моды, а представляет собой нефизическое взаимодействие из-за наложения частот двух плазменных колебаний. Неустойчивость может произойти, когда одна ветвь дисперсионной кривой близко подойдет к гармонике другой ветви, как показано на рис. 9.1 и 9.2.

С ростом $\omega_p \Delta t$ неустойчивость усиливается и имеет место при больших длинах волн, достигая значения $k=0$ при $\omega_p \Delta t > 2$. При численном моделировании в этом режиме пороговое значение $\omega_p \Delta t$ также изменится под действием алгоритма расчета поля, использующего пространственную сетку.

Некоторые примеры можно получить, используя одномерный код ES1 со следующими параметрами: длина периода 4π , 32 ячейки сетки, $v_t = 1,14$, $\Delta t = 1$ и 4096 частиц. Для достижения «спокойных» нетепловых начальных условий 128 частиц размещаются в первой ячейке с максвелловским распределением скоростей. Эти частицы транслируются затем в другие ячейки. К скорости каждой частицы добавляется малая случайная величина порядка 10^{-5} . Такое возмущение может привести к нарастанию неустойчивости. Для $\omega_p = 1,8$ вторая гармоника Фурье нарастает быстро, как и предсказывает теория, с $\text{Re}(\omega \Delta t) = \pi$. Вихри захвата образуются вокруг значений скорости $\pm \pi$, резонансных с колебаниями, так как $(\omega - kv) \Delta t$ кратно 2π . Насыщение второй моды достигается при $t = 60$, в момент $t = 80$ кинетическая энергия в 1,8 раза больше начального значения и быстро нарастает со сверхтепловым «хвостом» в распределении по скоростям. При уменьшении $\omega_p \Delta t$ до 1,6 уровня насыщения для второй моды и полная энергия поля быстро уменьшаются, что увеличивает кинетическую энергию. При $\omega_p \Delta t = 1,6$ и 1,5 (ниже порога) энергии мод насыщаются до значений, близких к тем, которые получаются при шумовых, случайных начальных условиях (скорости некоррелированы). Выводы, сделанные в этом параграфе, согласуются с предсказаниями линейной бесстолкновительной теории.

При $\omega_p \Delta t = 1,5$ вторая мода все еще наиболее быстро достигает насыщения. Это может быть связано с теоретическим результатом, согласно которому спектр флуктуаций, пропорциональный $|\varepsilon|^{-2}$, превышается для параметров ниже бесстолкновительного порога. Такие результаты выходят за рамки настоящей главы, но мы можем подтвердить эмпирическое наблюдение [Hockney, 1971], что большие $\omega_p \Delta t$ и $v, \Delta t / \Delta x$ приводят к высоким уровням шума и быстрому нефизическому нагреву.

Предсказания линейной теории лучше подтверждаются в случае прямоугольного распределения ($f_0 = (2a)^{-1}$ при $|v| < a$ и $f=0$ при $|v| > a$) из-за проявления нелинейных эффектов (захват частиц) при больших амплитудах, чем в случае максвелловского распределения. Нестабильность имеет место при

$$(\omega_p \Delta t / 2)^2 \operatorname{tg}(ka \Delta t / 2) / (ka \Delta t / 2) > 1. \quad (9.36)$$

Мы исследовали с помощью ES1 два случая: $\omega_p = 1,77$ при $a = 2,33$ и $\omega_p = 1$ при $a = 2,86$. Другие параметры оставались неизменными. В обоих случаях мода 1 была устойчива, а мода 2 демонстрировала экспоненциальное нарастание до насыщения, при котором начинается захват частиц. Во втором случае насыщение имеет место при меньшей амплитуде, так как фазовая скорость $\omega/k = 1,1$ ближе к скорости частиц. Ясно, что большие сдвиги частоты Бома — Гросса, возможные из-за резких краев распределения, вызывают неустойчивость созданием больших колебаний частот вблизи $\pi/\Delta t$.

Авторы полагают, что разрушительные неустойчивости имеют место только при таких экстремальных условиях, когда можно ожидать неприятностей, даже не имея формальной теории.

Рассмотрим теперь нелинейную неустойчивость. Для нелинейного осциллятора ускорение будет несинусоидальным и будет содержать много гармоник фундаментальной частоты колебаний. Если налагающаяся гармоника близка к основной частоте, то колебание может отклониться от правильного результата. Например, рассмотрим осциллятор вида $d^2x/dt^2 + \omega_0^2 x = \delta T_6(x)$, где T_6 — полином Чебышева вида $T_n(\cos \theta) = \cos(n\theta)$ [Abramowitz and Stegun, 1964], так что нелинейный член содержит только шестую гармонику, когда x изменяется синусоидально с единичной амплитудой. Начиная с $x_n = \cos(\omega t_n)$ и $\omega_0 \Delta t = 2 \sin(\pi/M)$, так чтобы один период содержал M шагов по времени при $\delta = 0$, мы на опыте установим, что амплитуда вначале возрастает при $M = 7$ и уменьшается при $M = 5$, как и предсказывается анализом, в котором рассматривается решение вида $x_n = A_n \cos(\omega t_n + \theta_n)$, где A_n и θ_n — медленно меняющиеся переменные. При малом δ эти случаи проявляют периодическое поведение (предельные цик-

лы). Например, при $M=5$ энергия уменьшается примерно на 30% и затем почти возвращается к начальному значению; время повторения равно $1,36/(\delta\omega_0)$. Отношение энергий не зависит от δ , так что даже малая нелинейность может вызвать значительную ошибку. Неустойчивость наблюдается также при $M=6$. Обычно неустойчивость ассоциируют с увеличением амплитуды, но уменьшение также может быть опасно как отклонение от правильного поведения системы.

Задачи

9.7. Получите границу неустойчивости для формулы (9.35). Указание: ряды сходятся достаточно быстро, достаточно двух членов, что позволяет использовать микрокалькулятор.

9.8. Выведите соотношение (9.36).

9.5. ДИСПЕРСИОННАЯ ФУНКЦИЯ, ВКЛЮЧАЮЩАЯ КОНЕЧНЫЕ ЗНАЧЕНИЯ Δx И Δt

Результаты настоящей главы и гл. 8, 10 и 11, относящиеся к пространственной сетке, легко могут быть объединены. Для дисперсионного уравнения $\epsilon=0$ получим (см. задачу 9.9) результат, использованный в работах [Langdon, 1970a, 1979a; Chen, Langdon and Birdsall, 1974] и в гл. 12:

$$\epsilon = 1 + K^{-2} \sum_p k_p \chi(k_p) S^2(k_p) \chi(k_p, \omega), \quad (9.37)$$

$$\epsilon = 1 + \frac{\omega_p^2}{K^2} \sum_p S^2(k_p) \int dv \chi(k_p) \frac{\partial f_0}{\partial v} \frac{\Delta t}{2} \operatorname{ctg}(\omega + i0 - k_p v) \frac{\Delta t}{2}. \quad (9.38)$$

Этот результат можно рассматривать как диэлектрическую проницаемость для величин, определенных на пространственно-временной сетке, и, как они, являющуюся периодической функцией k и ω .

Для алгоритма с «сохранением импульса» поля (см. гл. 8) $\chi(k_p)=\chi(k)$, так что $\chi(k_p)$ можно вынести из-под знака суммирования. При $\chi(k_p)=k_p$ в гл. 10 получено, что то же самое выражение справедливо для алгоритма с «сохранением энергии» поля. При подходящем определении χ и S величина (9.37) содержит и мультипольные алгоритмы, рассмотренные в гл. 11.

Альтернативная форма с записью через Δt имеет вид

$$\epsilon = 1 + \omega_p^2 \Delta t^2 \sum_p S^2 \frac{k_p \chi}{K^2} \sum_{s=1}^{\infty} f_0(k_p S \Delta t) s \exp(i \omega s \Delta t). \quad (9.39)$$

Из анализа этого выражения можно заключить, что фазовое перемешивание делает сумму по p сходящейся более быстро, чем в случае непрерывного изменения времени ($\Delta t=0$). В случае

максвелловского распределения вклад в сумму по p членов с $k_p v_t \Delta t \gtrsim 1$ приближенно определяется следующим образом:

$$\omega_p^2 = \Delta t^2 S^2 \frac{\mathbf{k}_p \cdot \boldsymbol{\chi}}{K^2} \exp(-k_p^2 v_t^2 \Delta t^2 / 2 + i\omega \Delta t), \quad (9.40)$$

так как значения членов с $s \geq 2$ много меньше. Ясно, что для $|\mathbf{p}| \gtrsim (k_p v_t \Delta t)^{-1}$ в одномерном случае вклад уменьшается из-за фазового перемешивания. Если $v_t \Delta t \gtrsim \Delta x$, то сумма ρ сходится при учете нескольких членов.

Более тривиальное замечание состоит в том, что дрейфовая скорость равна $C \Delta x / \Delta t$, где C — то же самое, что и при отсутствии дрейфа в бесконечной или периодической системе. В электростатическом коде это не удивительно, так как точки сетки, в которых определено поле, занимают на каждом шаге по времени одни и те же положения относительно плазмы. Таким образом, сохраняется ограниченная форма инварианта Галилея.

Более сложные примеры, объединяющие рассмотрение Δt и Δx , имеются в работе [Chen, Langdon and Birdsall, 1974] и в гл. 12.

Существует заслуживающее особого внимания различие между пространственной сеткой с конечными шагами и конечными шагами по времени. Если динамика частиц размещает их при всех значениях x и интерполяция в пределах ячейки используется для получения плотности заряда и силы, пространственная информация существует при всех x и всех k . Однако информация, относящаяся ко времени, получается только в моменты $0, \Delta t, 2\Delta t, 3\Delta t$ без какой бы то ни было интерполяции в пределах шага.

Задачи

9.9. Выполните соотношение (9.37). Используйте формулы (9.11) и (9.12) для связи плотности заряда частиц и силы $q\mathbf{n} = -ik\boldsymbol{\chi}(F/q)$. Используйте результаты § 8.9 для связи $q\mathbf{n}$ и F через сеточные величины ρ и ϕ в виде

$$\rho(\mathbf{k}, \omega) = -\sum S^2(\mathbf{k}_p) \mathbf{k}_p \cdot \boldsymbol{\chi}(\mathbf{k}_p, \omega) \phi(\mathbf{k}_p, \omega).$$

Используйте также уравнение Пуассона (8.71) и периодичность $\phi(\mathbf{k}, \omega)$, не предполагая периодичности $\boldsymbol{\chi}$ в (8.72).

9.10. В соотношении (9.37) используйте выражение для $\boldsymbol{\chi}$ (9.14) и получите (9.38) интегрированием по частям.

9.6. ДИСПЕРСИЯ ЗАМАГНИЧЕННОЙ ГОРЯЧЕЙ ПЛАЗМЫ И НЕФИЗИЧЕСКАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ

При наложении магнитного поля появляются новые колективные моды. В случае распространения поперек магнитного поля при длинах волн порядка ларморовского радиуса существ-

вуют волны вблизи гармоник циклотронной частоты. Величины $\omega_p \Delta t$ и $\omega_c \Delta t$ могут быть малыми, но частота циклотронной гармоники может быть сравнима с $\pi/\Delta t$. Покажем, как это приводит к нефизической неустойчивости циклотронной гармоники, включающей в свой простейшей форме взаимодействие между $n\omega_c$, $-n\omega_c$ и ω_g при $\omega_c \approx \omega_g/2n$.

Вывод диэлектрической проницаемости. Переходим к описанию коллективного поведения частиц замагнченной плазмы, заменив их уравнения движения на разностные. Как и в § 9.2 для незамагнченного случая, пренебрежем влиянием пространственной сетки, используемой для описания полей, и сосредоточимся на интегрировании по времени. Рассмотрим малые возмущения однородной плазмы в однородном магнитном поле, параллельном оси z .

Внешнее магнитное поле может быть включено в уравнения движения частиц таким образом, что невозмущенные траектории в постоянном поле будут правильными спиральами плюс $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -дрейф с гирочастотой ω_c . Мы будем использовать алгоритм Хокни, как в задаче 4.4 с полем \mathbf{B} , параллельным оси z . Тогда для поперечного радиуса-вектора $\mathbf{x}_\perp = (x, y)$ имеем

$$\begin{aligned} & (\mathbf{x}_{\perp, s+1} - 2\mathbf{x}_{\perp, s} + \mathbf{x}_{\perp, s-1})/(\Delta t)^2 = \\ & = \lambda q/m \left[E_{\perp s}(\mathbf{x}_s, t_s) + (\mathbf{x}_{\perp, s+1} - \mathbf{x}_{\perp, s-1}) \hat{z} \frac{\mathbf{B}}{2\Delta t} \right], \end{aligned} \quad (9.41)$$

где $t_s = s \Delta t$,

$$\lambda = 2 \operatorname{tg}(\omega_c \Delta t / 2) / (\omega_c \Delta t) \quad (9.42)$$

и $\omega_c \equiv qB/m$. Разностное уравнение для z_s будет таким же, как в § 9.2 для незамагнченной плазмы.

Полагая $\mathbf{E}=0$ для невозмущенных траекторий, получим

$$x_s^{(0)} = v_\perp \sin(\omega_c t_s - \psi) / \omega_c + x_c, \quad (9.43)$$

$$y_s^{(0)} = v_\perp \cos(\omega_c t_s - \psi) / \omega_c + y_c, \quad (9.44)$$

$$z_s^{(0)} = z_0^{(0)} + v_z t_s, \quad (9.45)$$

откуда видно, что частицы располагаются на спирали постоянного радиуса v_\perp/ω_c , определяемого величиной v_\perp , и поворачиваются вокруг оси с координатами x_c , y_c на угол $-\omega_c \Delta t$ за один шаг по времени. Существование постоянных движения v_\perp и v_z важно в приложениях и в последующем рассмотрении. Кроме того, выбор других разностных уравнений изменит наши результаты несущественным образом (см. задачу 9.15).

Рассмотрим распространение волны в плоскости $x-z$. Поле вдоль невозмущенной траектории имеет вид

$$\mathbf{E}^{(1)}(\mathbf{x}_s^{(0)}, t_s) = \mathbf{E} \exp(i k_x x_s^{(0)} + i k_z z_s^{(0)} - i \omega t_s) = \quad (9.46)$$

$$= E \exp(i k_x x_c + i k_z z_0^{(0)}) \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(\chi) \times \\ \times \exp(-i n \psi - i [\omega - k_z v_z - n \omega_c] t_s). \quad (9.47)$$

Здесь $\chi \equiv k_x v_{\perp}/\omega_c$, а также использовано разложение в ряд $\exp(i \chi \cos \theta) = \sum J_n(\chi) \exp(in \theta)$. Поле $E^{(1)}$ подставляется в уравнение (9.41) для возмущенных величин. Вклад каждого члена суммы по циклотронным гармоникам можно получить отдельно с помощью подстановки $(x_s^{(1)}, E^{(1)}) = (X, E) \exp(-i \omega' t_s)$, где $\omega' = \omega - k_z v_z - n \omega_c$. В результате имеем соотношение

$$-4x_{\perp} \sin^2(\omega' \Delta t / 2) = \lambda \frac{q}{m} E \Delta t^2 - 2i \sin(\omega' \Delta t) \operatorname{tg}\left(\frac{\omega_c \Delta t}{2}\right) x_{\perp} \times \hat{z}. \quad (9.48)$$

Решим уравнение (9.48), полагая $E_y^{(1)} = 0$ при $k_y = 0$, и запишем сумму по гармоникам, используя соотношение (9.47). При граничных условиях $x_s^{(1)} = 0 = x_s^{(1)} - x_{s-1}^{(1)}$ при $t_s = \rightarrow -\infty$ и $\operatorname{Im} \omega > 0$ для получения полного решения (см. задачу 9.11) не требуется добавлять решение однородного уравнения:

$$\begin{bmatrix} x_s^{(1)}(x_s^{(0)}, v_{\perp}, v_z, \psi) \\ z_s^{(1)}(x_s^{(0)}, v_{\perp}, v_z, \psi) \end{bmatrix} = -\frac{q}{m} \exp[i k x_s^{(0)} - i \chi \sin(\omega_c t_s - \psi) - i \omega t_s] \times \\ \times \sum_n J_n(\chi) e^{i n (\omega_c t_s - \psi)} \frac{\Delta t^2}{4} \begin{bmatrix} E_x \frac{\sin \omega_c \Delta t}{\omega_c \Delta t} \\ \frac{E_z}{\sin^2(\omega' \Delta t / 2) - \sin^2(\omega_c \Delta t / 2)} \\ \frac{E_z}{\sin^2(\omega' \Delta t / 2)} \end{bmatrix}. \quad (9.49)$$

Итак, мы получили значения отклонений от невозмущенной траектории в момент времени t_s в зависимости от невозмущенных параметров. Предположим, что невозмущенные частицы распределены с однородной плотностью n_0 , однородно по углу ψ и имеют распределение по скоростям $f_0(v_{\perp}, v_z)$. Для обратимых во времени разностных схем, используемых в книге, такое распределение частиц при отсутствии возмущающих полей остается постоянным. Подставляя вместо $x_s^{(0)}$ величину x в (9.49), получаем связь возмущений электрического поля, потенциала и траекторий в виде

$$-\nabla^2 \phi^{(1)} = -n_0 q \int d\psi v_{\perp} dv_{\perp} dv_z f_0(v_{\perp}, v_z) \nabla x_s^{(1)}(x, v_{\perp}, v_z, \psi), \quad (9.50)$$

$$E^{(1)} = -\nabla \phi^{(1)}.$$

Исключая $E^{(1)}$ и $\phi^{(1)}$ и выполняя интегрирование по ψ , находим дисперсионное уравнение

$$0 = \varepsilon(k, \omega) = 1 - \frac{1}{k^2} \left(\frac{\omega_p \Delta t}{2} \right)^2 \int 2\pi v_\perp dv_\perp dv_z f_0(v_\perp, v_z) \times \\ \times \sum_n J_n^2(\chi) \left\{ \frac{k_x^2 \sin(\omega_c \Delta t)/(\omega_c \Delta t)}{\sin^2(\omega - k_z v_z - n \omega_c) \Delta t/2 - \sin^2(\omega_c \Delta t/2)} + \right. \\ \left. + \frac{k_z^2}{\sin^2(\omega - k_z v_z - n \omega_c) \Delta t/2} \right\}. \quad (9.51)$$

Этот результат можно преобразовать к виду, аналогичному дисперсионному уравнению работы [Harris, 1959] (задача 9.12):

$$0 = \varepsilon = 1 + \frac{\omega_p^2}{2} \int dv \sum_n J_n^2(\chi) \frac{\Delta t}{2} \operatorname{ctg} \left[\frac{\Delta t}{2} (\omega - k_z v_z - n \omega_c) \right] \times \\ \times \left(\frac{n \omega_c}{v_\perp} \frac{\partial f_0}{\partial v_\perp} + k_z \frac{\partial f_0}{\partial v_z} \right). \quad (9.52)$$

В пределе $\Delta t \rightarrow 0$ получаем очевидным образом результаты работы [Harris, 1959]. Для максвелловского распределения f_0 интеграл можно вычислить до конца аналитически (см. задачу 9.13).

Если $\omega - k_z v_z$ находится вблизи гармоник $n \omega_c$, при любом Δt в (9.52) имеет место резонанс в пределах $O(\Delta t^2)$. При создании разностной схемы использованы условия, обеспечивающие точное описание влияния сил на частицы при частотах, малых по сравнению с ω_c [Hockney, 1966; Buneman, 1969; Hockney and Eastwood, 1981] (см. задачу 4.4).

В горячей плазме с конечным χ даже низкочастотные поля чувствуются частицами как имеющие частотные компоненты вблизи $\pm \omega_c$. Поэтому очень удивительно, что поведение ε вблизи n -й гармоники описывается довольно точно, даже если $n \omega_c \Delta t$ не мало. Причина заключается в тех же приемах, которые Хокни и Бунеман использовали для достижения точности при низких частотах и которые также обеспечивают точное описание продольного движения вблизи резонансов при $\omega' = \pm \omega_c$ (см. задачи 9.14 и 9.15).

Свойства дисперсионного уравнения. Исследуем детально простой случай перпендикулярного распространения, $k_z = 0$, когда интеграл по v_z вычисляется тривиально.

Сначала заметим, что в этом случае частоты ω при действительных k также действительны и образуют комплексно сопряженные пары. При действительных ω величина ε также действительна и является аналитической функцией, следовательно, $\varepsilon(k, \omega^*) = \varepsilon^*(k, \omega) = 0$, если $\varepsilon(k, \omega) = 0$.

Полезно перейти от переменной ω к $z = \exp(-i\omega \Delta t)$ (см. задачу 9.16):

$$\varepsilon = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_c} \int_0^\infty 2\pi v_\perp dv_\perp f_0(v_\perp) \frac{1}{\chi} \sum_n n(J_n^2)' \frac{i\Delta t}{1-z^{-1}z_c^n}, \quad (9.53)$$

где $z_c = \exp(-i\omega_c \Delta t)$. Эта запись очень удобна для вычисления корней, так как является алгебраической по z в дополнение к преимуществам, найденным при анализе случая незамагниченной плазмы (см. § 9.2), таким как прояснение природы наложения частот.

Для упорядочения корней рассмотрим три случая: 1) $\omega_g/\omega_c = 2\pi/(\omega_c \Delta t)$ — целое число; 2) ω_g/ω_c — нецелое рациональное число и 3) ω_g/ω_c — иррациональное число. В первых двух случаях существует конечное число (не более $N-1$) различных полюсов функции $\varepsilon(k, z)$, где N — наименьшее положительное число, такое что $z_c^N = 1$. При этом полюсы могут

быть устранины умножением ε на $\prod_{n=1}^{N-1} (z - z_c^n)$, если опустить

множитель $n=N/2$ в случае четного N без добавления новых корней. В результате получаем полином степени $N-1$ или $N-2$, корни которого легко вычислить. Мы, например, использовали вариант метода Мюллера для того, чтобы устранить трудности вычисления коэффициентов полинома и избежать потери точности. Конечно-разностная схема не создает новых мод и объединяет гармонические виды колебаний, когда их соответствующие циклотронные гармоники накладываются друг на друга.

В третьем случае величины $\{z_c^n\}$ плотно расположены на единичном круге и соотношение (9.53) хорошо ведет себя только при $|z| > 1$. Однако члены ряда с $|n| \gg \chi$ дают вне единичного круга малый вклад в ε , так что система очень похожа на (9.53), в которой ряд для ε ограничен членами до n_{max} включительно. Остальные члены и моды с номером, существенно большим n_{max} , только слегка изменяют корни, соответствующие меньшим n , особенно если учесть влияние столкновений, конечных k_z , слегка неоднородное магнитное поле и другие влияния, которые сглаживают резонансы высших гармоник. Кроме того, можно сказать, что система похожа на другую систему с циклотронной частотой ω'_c , достаточно близкой к ω_c , так что ω_g/ω'_c — рациональное число.

Численная неустойчивость. Рассмотрим случай холодной плазмы $\chi \ll 1$ и волны перпендикулярные **В**. Дисперсионное уравнение запишем в виде (см. задачу 9.17)

$$\sin^2(\omega \Delta t/2) = (\omega_p \Delta t/2)^2 \sin(\omega_c \Delta t)/(\omega_c \Delta t) + \sin^2(\omega_c \Delta t/2), \quad (9.54)$$

$$\sin^2(\omega \Delta t/2) = 1 - [1 - \lambda(\omega_p \Delta t/2)^2] \cos^2(\omega_c \Delta t/2). \quad (9.55)$$

Неустойчивость возникает при $\lambda(\omega_p \Delta t/2)^2 > 1$.

В горячей плазме налагающиеся гармоники создают возможность нефизической неустойчивости, происходящей из взаимодействия гармонических мод, накладывающихся друг на друга. Если $\Delta\omega = l\omega_c + m\omega_c + n\omega_g$ достаточно мало для некоторых чисел l , m и n , то l -я и m -я гармоники искусственно сводятся вместе. Эта численная неустойчивость возникает из-за конечного ларморовского радиуса, который не может быть рассмотрен в одночастичном анализе; неустойчивость не имеет места в холодной плазме. Даже максвелловское распределение скоростей может быть неустойчивым.

Простым случаем является взаимодействие между гармониками с $\pm n$, когда $n\omega_c \approx \omega_g/2$. Если вкладом других составляющих вблизи этой частоты можно пренебречь, дисперсионное уравнение примет следующий вид:

$$(\omega - \omega_g/2)^2 = (n\omega_c - \omega_g/2)^2 + 2(n\omega_c - \omega_g/2) \frac{\omega_p^2}{\omega_c} \int dv f_0 \frac{n}{\chi} (J_n^2)' . \quad (9.56)$$

При фиксированных ω_p , ω_c , k и f_0 наиболее неустойчивый выбор шага по времени дает выражение (см. задачу 9.18)

$$\pm \operatorname{Im} \omega = n\omega_c - \omega_g/2 = -\omega_c \left(\frac{\omega_p}{\omega_c} \right)^2 \int dv f_0 \frac{n}{\chi} (J_n^2)' \quad (9.57)$$

с $\operatorname{Re} \omega = \omega_g/2$. Это неустойчивость четно-нечетного типа. Инкремент равен полуразности между гармоникой $2n$ и частотой ω_g ; его можно трактовать как скорость, при которой колесо с $2n$ спицами, врачающееся с частотой ω_c , можно наблюдать в свете стробоскопических вспышек, следующих через интервалы Δt .

Полное дисперсионное уравнение решалось численно для $\omega_c \Delta t = 6\pi/25$ (примерно 8 шагов на период), $\omega_p^2/\omega_c^2 = 2$ при $k_{\parallel} = 0$ и монозергетическом распределении по скоростям [см. уравнение (5.109), кольцо на плоскости v_{\perp}]. Это было сделано для более устойчивой гармонической волны, а не для создания волны с отрицательной энергией. В отличие от неустойчивостей гармонических мод в настоящей плазме взаимодействующие моды не нуждаются в обладании противоположными энергиями. Пара может иметь противоположные знаки номеров гармоник, что дает такой же эффект; значение имеет только требуемый знак $\Delta\omega$. При этих параметрах плазма должна быть устойчивой (см. § 5.16). Всего имеется 24 резонансные гармоники при каждом сомножителе $\omega_c/3$. Гармоники $4\omega_c$ и $-4\omega_c$ имеют почти одинаковый сдвиг фаз π за один шаг по времени. Итоговая четно-нечетная неустойчивость будет наиболее сильной при $\chi = 3,6$, когда длина волны приближенно равна ларморовскому радиусу, а $\operatorname{Im} \omega / \omega_c \approx 0,15$. Другие неустойчивости имеют инкременты порядка $0,06\omega_c$ при $\chi = 5,8$ для взаимодействия гармоник $\pm 2\omega_c$ и $\pm 6\omega_c$. Неустойчивость отсутствует, когда

$\omega_c \Delta t / 2\pi = 1/8$; такое малое изменение уменьшает число разделенных расстоянием ω_c резонансов, насколько это вообще возможно (до 6 резонансов). Нефизическая неустойчивость устраняется простым выбором циклотронного периода, равного целому числу временных шагов при условии постоянства ω_c .

При использовании программы EZ1 в варианте, описанном в § 5.17, получено хорошее согласие с теоретическими результатами. С параметрами из приведенного выше примера графики фазового пространства (v_x, v_y) представляют собой восемь ответвлений вокруг кольца. Волна нарастает до амплитуд, сравнимых с получаемыми при настоящей циклотронной неустойчивости. Изменение $\omega_c \Delta t$ до значения $6\pi/24$ (точно 8 шагов на период) устраняет неустойчивость, как и предсказывается теорией. Неустойчивость уменьшается при ослаблении гармонических волн, например когда сглаживается функция распределения (см. задачу 9.19, максвелловское распределение по скоростям), ларморовские радиусы меньше Δx или уменьшается $\omega_c \Delta t$ (подавляется любое неустойчивое взаимодействие между высшими гармониками с малыми инкрементами и точной частотной настройкой). Это может быть важно, например, когда имеются горячие электроны, которые считаются устойчивыми, и используется большое значение $\omega_{ce} \Delta t$ из-за исследования процессов с временной шкалой многое больше ω_{ce}^{-1} .

Механизм неустойчивости слегка изменяется при выборе других разностных уравнений (см. задачу 9.15).

Даже если гармоники электронных циклотронных волн не являются объектом изучения, но существуют физически, то они должны быть приняты во внимание при выборе Δt . Как было показано, может оказаться недостаточным простое условие малости $\omega_{pe} \Delta t$ и $\omega_{ce} \Delta t$.

Задачи

9.11. Для того чтобы вывести соотношение (9.49), сначала покажите, что решение уравнений (9.48) можно записать в виде

$$X = -\frac{q}{m} E_x \frac{\Delta t^2}{4} \frac{\sin(\omega_c \Delta t)/(\omega_c \Delta t)}{\sin^2(\omega' \Delta t/2) - \sin^2(\omega_c \Delta t/2)}.$$

Используйте равенства (9.47) и (9.8) для определения E_z в соотношении (9.49).

9.12. Преобразуйте уравнение (9.51) к виду (9.52). Указание: используйте тригонометрическое тождество

$$\frac{\sin \omega_c \Delta t}{\sin^2(\omega' \Delta t/2) - \sin^2(\omega_c \Delta t/2)} = \operatorname{ctg}\left(\frac{\omega' - \omega_c}{2} \Delta t\right) - \operatorname{ctg}\left(\frac{\omega' + \omega_c}{2} \Delta t\right) \quad (9.58)$$

и перепишите сумму с использованием тождества Бесселя

$$J_{n-1}^2 - J_{n+1}^2 = \frac{2n}{\chi} (J_n^2)', \quad (9.59)$$

затем проинтегрируйте по частям по v_{\perp} . Второе слагаемое проинтегрируйте по частям по v_z .

9.13. В случае, когда f_0 является максвелловским распределением и $k_z = 0$, используйте тождество

$$\int dv f_0 J_n^2 = e^{-\Lambda} I_n(\Lambda),$$

где $\Lambda = (k_x v_i / \omega_c)^2$; I_n — модифицированная функция Бесселя [Abramowitz and Stegun, 1964], и получите из уравнения (9.52) дисперсионное соотношение в виде

$$\varepsilon = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega_c} \frac{e^{-\Lambda}}{\Lambda} \sum_{n=-\infty}^{\infty} n I_n(\Lambda) \frac{\Delta t}{2} \operatorname{ctg} [(\omega - n \omega_c) \Delta t / 2] = 0.$$

9.14. Покажите из решения уравнения (9.48) для Y , что поперечное изменение траектории частицы под действием возмущающего поля с частотой, близкой к ω_c , также вычисляется более точно при использовании множителя Хокни—Бунемана в уравнении движения (9.41).

9.15. Покажите, что дисперсионное уравнение содержится в разностных уравнениях, использованных в кодах ES1, или в задаче 4.10, если множители порядка 1 включены в члены с k_x^2 в уравнении (9.51) и в член df_0/dv_{\perp} в уравнении (9.52).

9.16. Выведите соотношение (9.53).

9.17. Выведите равенство (9.54) из (9.42) и (9.51) или подставьте $qE_x/m = -\omega_p^2 X$ в результат задачи 9.11.

9.18. Выведите уравнение (9.56) и покажите, как определить ω_g , при котором получается максимальный инкремент (9.57).

9.19. В случае, когда f_0 является максвелловским распределением, покажите, исходя из равенства (9.57) и задачи 9.13, что максимальный инкремент четно-нечетной неустойчивости имеет вид

$$\operatorname{Im} \omega = \omega_c \left(\frac{\omega_p}{\omega_c} \right)^2 \frac{n}{\Lambda} e^{-\Lambda} I_n(\Lambda).$$

Как сравнить этот результат со значением инкрементов, получаемых для монознергетического кольцевого распределения?

9.7. МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕДЛЕННО МЕНЯЮЩИХСЯ ЯВЛЕНИЙ; ПОДЦИКЛЫ, УСРЕДНЕНИЕ ОРБИТ И НЕЯВНЫЕ МЕТОДЫ

Во многих приложениях необходимо изучать плазменные явления с характеристическим временным масштабом много большим, чем ω_{pe}^{-1} и возможно даже ω_{pi}^{-1} , оставаясь в рамках кинетического описания. Примерами таких процессов могут служить ионно-акустическая турбулентность и электромагнитная неустойчивость Вейбеля. Моделирование с помощью крупных частиц в том виде, как оно было описано в настоящей книге выше, требует очень большого числа шагов по времени и может быть слишком дорогим. Ниже изложены три подхода к проблеме эффективного моделирования медленно эволюционирующих плазменных явлений, которое, возможно, является

наиболее быстро развивающейся новой областью исследований в моделировании плазмы с помощью крупных частиц.

Введение подциклов. Простым подходом, который обеспечивает существенную экономию времени расчетов, является введение электронных подциклов [Adam, Gourdin and Langdon, 1982]. Стандартная схема с перешагиванием используется и для электронов, и для ионов, но шаг по времени для электронов составляет часть временного шага для ионов. Для каждого цикла выполнения интегрирования во времени выполняется один цикл для ионов и несколько подциклов для электронов. Затраты времени на интегрирование уравнений движения ионов становятся пренебрежимо малыми. Движение электронов рассчитывается на их временной шкале, в то время как для более медленных массивных ионов уравнения можно интегрировать с большим шагом по времени, используя их собственное поле и отфильтрованное низкочастотное поле электронов. Эту связь различных видов частиц можно сделать центрированной по времени. Устойчивость и конструкция низкочастотного фильтра анализируются с помощью методов, изложенных в настоящей главе, и проверяются эмпирически при применении алгоритма. В отличие от неявных методов отсутствуют какие-нибудь ограничения на длину волны или градиенты поля и высокочастотные электронные волны сохраняются полностью. Хотя экономия машинного времени существенно меньше, чем при использовании неявных методов, введение дополнительных подциклов имеет большие возможности применения. В обоих случаях для получения выигрыша предполагается такая смесь, которая имеет много общего с методами усреднения по траекториям.

Неявные схемы интегрирования. Другим подходом является поиск схем интегрирования, которые остаются устойчивыми даже при $\omega_{pe} \Delta t \gg 1$. Это обычно требует неявных методов, в которых вычисление координат x_n требует знания полей в тот же самый момент времени (см. задачу 9.20), а не в предшествующий момент, как в явных методах, обсуждавшихся выше. Так как поля в момент t_n зависят от неизвестных координат $\{x_n\}$, уравнения для полей и частиц представляют собой очень большую систему связанных нелинейных уравнений. Для сохранения устойчивости приближенное решение должно быть очень аккуратным.

Недавно был выполнен ряд экспериментов с различными схемами точного предсказания полей на следующем шаге по времени [Mason, 1981; Friedman, Langdon and Cohen, 1981; Denavit, 1981; Brackbill and Forslund, 1982; Langdon, Cohen and Friedman, 1983; Barnes e. a., 1983]. После их определения можно продвинуть частицы на один шаг по времени. Если новая плотность заряда не согласована с предсказанным электричес-

ким полем, то возможно расхождение итераций. В этом методе число связанных решаемых уравнений порядка числа ячеек сетки, а не числа частиц. Мы опишем развитие этих методов в гл. 14 и 15. Параллельная работа по разработке неявных временных разностных схем проведена в этой главе (см. § 9.8 и работу [Cohen, Langdon and Friedman, 1982 b]).

Существует фундаментальное ограничение в использовании электронов в виде крупных частиц [Langdon, 1979 b; Langdon, Cohen and Friedman, 1983]. При $kv_t \Delta t \gg 1$ диэлектрическая проницаемость приобретает вид $\epsilon \approx 1 + \beta \omega_p^2 (\Delta t)^2$ (см. задачу 9.24), причем растет с ростом $\omega_p \Delta t \gg 1$, тогда как фактически мы хотим получить зависимость $\epsilon = 1 + \omega_p^2 / (kv_t)^2 + \dots$. Таким образом, когда $kv_t \Delta t \gtrsim 1$, мы не можем правильно отобразить даже дебаевское экранирование! Чтобы проиллюстрировать ограничения, вносимые этим условием, учтем, что величина $k \lambda_D = kv_t \Delta t / \omega_p \Delta t$ должна быть много меньше единицы в пределе $\omega_p \Delta t \gg 1$. Модель, использующая уравнение Власова для электронов, может быть более практической, чем модель с крупными частицами, если невозможно сохранить величину $kv_t \Delta t$ малой.

Ограничение на градиент электрического поля было отмечено в работе [Denavit, 1981] и подробно разработано в статье [Langdon, Cohen and Friedman, 1983]. При минимуме потенциальной энергии электроны колеблются с частотой захвата ω , определяемой в одномерном случае по формуле $\omega^2 = (q/m) dE/dx$. Когда $(\omega \Delta t)^2 > 1$, используемая для предсказания поля линеаризация ненадежна.

Имеется значительный накопленный опыт в неявном интегрировании по времени уравнений течения жидкости, диффузии, химической кинетики, магнитогидродинамики и для многих других. Теперь и методы с крупными частицами также начинают использовать преимущества применения неявных методов.

Усреднение траекторий. Другие методы, созданные для улучшения эффективности программ расчета движения частиц, используют прямые преимущества широкого разделения временных масштабов, обычно присущего в физике плазмы. В магнитоиндуктивном алгоритме с усреднением траекторий [Cohen e. a., 1982; Cohen and Freis, 1982] частицы продвигаются с малым времененным шагом, который точно отслеживает их циклотронные орбиты. Явное решение для электромагнитных полей, разделенных на излучаемые и электростатические, получается с использованием плотности тока, которая определена из данных, относящихся к частицам на каждом малом шаге и усредненных по быстрой орбитальной шкале времени. Число вычислений, приходящихся на одну частицу, не уменьшается, а реальный выигрыш получается от существенного

уменьшения требуемого числа частиц. Усредненный вклад от каждой частицы может заменить собой действие многих частиц в обычном коде. Эта увеличенная эффективность позволяет использовать реальные параметры, такие как отношение ионной циклотронной частоты к скорости замедления ионов из-за столкновения с электронами при моделировании экспериментов с «магнитным зеркалом».

Для того чтобы применить усреднение по траекториям к модели, включающей электростатические поля, и расширить моделирование на область больших $\omega_p \Delta t$, нужно использовать неявный метод вычисления поля [Cohen, Freis and Thomas, 1982].

Задача

9.20. Обычно алгоритм интегрирования по времени является линейной комбинацией $x_n, a_n \Delta t^2$ и некоторых предыдущих координат и ускорений. Покажите, что такая схема становится неустойчивой при $\Delta t \rightarrow \infty$, если она применена к одной частице простого гармонического осциллятора, а также если опущен член a_n . Включение a_n делает схему неявной [Cohen, Langdon and Friedman, 1982].

9.8. ДРУГИЕ АЛГОРИТМЫ ДЛЯ НЕЗАМАГНИЧЕННОЙ ПЛАЗМЫ

Альтернативами методу интегрирования с перешагиванием могут, например, быть неявные схемы и схемы с подавлением. В рассматриваемом параграфе мы увидим, как получить свойства схемы интегрирования простым и надежным способом.

Обобщение вывода, сделанного при получении формулы (9.14), приводит к выражению для ϵ вида

$$\epsilon = 1 + \omega_p^2 \int dv f_0(v) (X/A)_{\omega+i0 - kv}, \quad (9.60)$$

где X/A означает отношение амплитуд Фурье-гармоник $x^{(1)}$ и $a^{(1)}$. Это выражение сохраняет большую общность и для изотропных схем, в которых при $a=0$ величина v остается постоянной, т. е. невозмущенные траектории не затухают, и его легко использовать.

Другой часто используемый подход основан на конечно-разностном аналоге уравнения Власова [Lindman, 1970; Godfrey, 1974; Hockney and Eastwood, 1981]. Исходя из свойства сохранения фазового объема в уравнениях движения [они преобразуют объем в фазовом пространстве (x, v) в равный объем в другой момент времени] уравнение Власова постулирует, что плотность фазового объема $f(x, v, t)$ постоянна вдоль любой траектории частицы. В применении к интегрированию с

конечным Δt , которое преобразует $\{\mathbf{x}_n, \mathbf{v}_n\}$ к $\{\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{v}_{n+1}\}$, это означает, что $f(\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{v}_{n+1}, t_{n+1}) = f(\mathbf{x}_n, \mathbf{v}_n, t_n)$. Если скорость v определена на полуцелых шагах, как в методе с перешагиванием, то можно определить и значение \mathbf{v}_n [Hockney and Eastwood, 1981]. Можно также определить f в момент t_n как плотность от $\{\mathbf{x}_n, \mathbf{v}_{n-1/2}\}$ и использовать равенство $f(\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{v}_{n+1/2}, t_{n+1}) = f(\mathbf{x}_n, \mathbf{v}_{n-1/2}, t_n)$ (см. задачу 9.21).

Этот метод, однако, непригоден, если он применяется в сформулированном выше виде к другим уравнениям движения, которые не сохраняют фазовый объем (см. задачу 9.22), таким как описанная ниже в этом параграфе схема с затуханием. Например, ясно, что при затухающих колебаниях в потенциальной яме фазовый объем уменьшается и f возрастает. Хотя и можно устранить это обстоятельство (см. задачу 9.23), намного проще использовать соотношение (9.60).

Далее в настоящем параграфе рассмотрены два класса схем интегрирования по времени с ошибкой такого же или высшего порядка по Δt , что и метод с перешагиванием. Обсуждены неявные схемы, которые сконструированы и анализируются с использованием методов этой главы.

Алгоритмы класса С. Рассмотрим теперь класс алгоритмов, в которых изменение импульса отличается от метода с перешагиванием только учетом нескольких шагов по времени, вспоминая рассуждения, сделанные при выводе соотношения (9.33), т. е.

$$\mathbf{x}_n = \Delta t^2 \left(c_0 \mathbf{a}_n + c_1 \mathbf{a}_{n-1} + \dots + c_{k-2} \mathbf{a}_{n-k+2} + \sum_{s=1}^{\infty} s \mathbf{a}_{n-s} \right). \quad (9.61)$$

Предполагая экспоненциальную зависимость от времени $(\mathbf{x}_n^{(1)}, \mathbf{a}_n^{(1)}) = (\mathbf{X}, \mathbf{A}) z^n$, получаем

$$\frac{\mathbf{X}}{\mathbf{A} \Delta t^2} = c_0 + \frac{c_1}{z} + \frac{c_2}{z^2} + \dots + \frac{c_{k-2}}{z^{k-2}} + \frac{z}{(z-1)^2}. \quad (9.62)$$

Здесь опять последний член такой же, как и в методе с перешагиванием, который, следовательно, является просто частным случаем с $k=2$ и $c_0=0$. Соответствующее разностное уравнение можно записать в форме

$$\begin{aligned} & (\mathbf{x}_n - 2\mathbf{x}_{n-1} + \mathbf{x}_{n-2}) / \Delta t^2 = \\ & = \mathbf{a}_{n-1} + c_0 (\mathbf{a}_n - 2\mathbf{a}_{n-1} + \mathbf{a}_{n-2}) + c_1 (\mathbf{a}_{n-1} - 2\mathbf{a}_{n-2} + \mathbf{a}_{n-3}) + \dots \\ & \dots + c_{k-2} (\mathbf{a}_{n-k+2} - 2\mathbf{a}_{n-k+1} + \mathbf{a}_{n-k}). \end{aligned} \quad (9.63)$$

Очевидно, что невозмущенное движение при $\mathbf{a}=0$ будет прямолинейным. Уравнение имеет порядок k , так как в него включены $k+1$ шагов по времени, и оказывается неявным, если c_0 не равно нулю.

Диэлектрическая проницаемость горячей плазмы, полученная подстановкой (9.62) в (9.60), имеет вид

$$\epsilon = \epsilon_0 + \omega_p^2 \Delta t^2 \sum_{s=0}^{k-2} c_s \int d\mathbf{v} f_0(\mathbf{v}) \exp [is \Delta t (\omega - \mathbf{k}\mathbf{v})], \quad (9.64)$$

где ϵ_0 — значение, используемое в методе с перешагиванием. Вывод ϵ_0 рассмотрен в § 9.2 и в работе [Langdon, 1979 b], а новые члены легко выражаются через преобразование скоростей $\tilde{f}_0(\mathbf{v})$. Уравнение (9.64) можно использовать для проверки коллективного отклика при моделировании с помощью неявной схемы интегрирования по времени (см. задачу 9.24).

В случае больших длин волн частицы испытывают простые гармонические колебания с плазменной частотой. Для осциллятора с частотой ω_0 существует два корня уравнения (9.62), соответствующих частотам вблизи $\pm\omega_0$ и $k-2$ сильно затухающих корней при малых $\omega_0 \Delta t$. Как будет показано ниже, два корня вблизи частот $\neq \omega_0$ имеют ошибку в их реальной части второго или более высокого порядка по Δt и ошибку в мнимой части третьего или более высокого порядка по Δt .

Для анализа гармонического осциллятора подставим $A = -\omega_0^2 X$ в уравнение (9.62). Из вида (9.62) при малых $\omega_0 \Delta t$ видно, что имеется $k-2$ корня вблизи $z=0$ (сильное затухание) и два вблизи $z=1$, соответствующих колебаниям. В задаче 9.25 показано, что

$$\operatorname{Re} \frac{\delta \omega}{\omega_0} = \frac{(\omega_0 \Delta t)^2}{2} (1/12 - c_0 - \dots - c_{k-2}) + O(\Delta t^2), \quad (9.65)$$

$$\operatorname{Im} \frac{\delta \omega}{\omega_0} = -\frac{(\omega_0 \Delta t)^2}{2} (c_1 + 2c_2 + \dots + (k-2)c_{k-2}) + O(\Delta t^4). \quad (9.66)$$

Таким образом, этот класс имеет ошибку второго порядка в $\operatorname{Re} \omega$, но более сильно затухающая ошибка в $\operatorname{Im} \omega$ имеет третий порядок, как утверждалось выше. Для алгоритма с перешагиванием имеем $\delta \omega / \omega_0 = (\omega_0 \Delta t)^2 / 24$, как в соотношениях (4.9) и (9.14); $\delta \omega$ фактически является действительным для всех порядков в этой обратимой во времени схеме второго порядка точности.

Пример [Feix, 1969]. Схемы (9.31) и (9.32) можно обосновать как разложение в ряд Тейлора в момент t_n с разностью первого порядка для оценки $d\mathbf{a}/dt$. Диэлектрическая проницаемость уже была приведена в соотношении (9.34). Подставляя в него $(\mathbf{x}_n, \mathbf{v}_n, \mathbf{a}_n) = (\mathbf{X}, \mathbf{V}, \mathbf{A}) z^n$ и исключая \mathbf{V} , получаем

$$\frac{\mathbf{X}}{\mathbf{A} \Delta t^2} = \frac{(3/2 - z/2)}{(z-1)^2} + \frac{1}{2(z-1)}. \quad (9.67)$$

$$\frac{\mathbf{X}}{\mathbf{A} \Delta t^2} = -\frac{1}{2z} + \frac{z}{(z-1)^2}. \quad (9.68)$$

Сравнивая с соотношениями (9.62), (9.65) и (9.66), находим, что $k=3$, $c_0=0$ и $c_1=-1/2$. Таким образом, имеем

$$\operatorname{Re} \frac{\delta\omega}{\omega_0} = 7/24 (\omega_0 \Delta t)^2, \quad (9.69)$$

$$\operatorname{Im} \frac{\delta\omega}{\omega_0} = 1/4 (\omega_0 \Delta t)^3. \quad (9.70)$$

Погрешность в определении периода колебаний в 7 раз больше, чем в методе с перешагиванием. Кроме того, имеется слабая неустойчивость. Следует заметить, что свойства сохранения фазового объема алгоритма с перешагиванием в этой схеме потеряны, даже если бы она могла быть описана в фазовом пространстве только в координатах (x_n, v_n) . Другим недостатком является необходимость сохранения предшествующих значений ускорений наряду с x и v . Однако для параметров, использованных в работе [Feix, 1969], обычно $\omega_p \Delta t = 0.1$, нарастание слабое и, вероятно, оно подавлялось столкновительным затуханием. Может также оказаться преимуществом и то, что x и v заданы в одни и те же моменты.

Пример. Другая схема, обладающая этим преимуществом, имеет вид

$$v_{n+1} = v_n + a_n \Delta t + (a_n - a_{n-1}) \Delta t / 2, \quad (9.71)$$

$$x_{n+1} = x_n + (v_{n+1} + v_n) \Delta t / 2. \quad (9.72)$$

Скорость здесь вычисляется точно так же, как и в первом примере, а координата вычисляется по формуле трапеций. При этом получаем соотношение

$$X/A \Delta t^2 = \frac{(3-z^{-1})(z+1)}{4(z-1)^2}, \quad (9.73)$$

$$X/A \Delta t^2 = -\frac{1}{4z} + \frac{z}{(z-1)^2}, \quad (9.74)$$

откуда $k=3$, $c_0=0$, $c_1=-1/4$ и

$$\operatorname{Re} \frac{\delta\omega}{\omega_0} = 1/6 (\omega_0 \Delta t)^2, \quad (9.75)$$

$$\operatorname{Im} \frac{\delta\omega}{\omega_0} = 1/8 (\omega_0 \Delta t)^3. \quad (9.76)$$

Эта схема точнее предыдущей, но менее точна, чем метод с перешагиванием.

Приведем пример алгоритма синтеза (в качестве противоположности анализа), в котором устраним ошибку $O(\Delta t^2)$ в $\operatorname{Re}\omega$ метода с перешагиванием. Если использовать неявную схему, следует просто положить $c_0=1/12$, тогда полученную центрированную во времени схему довольно успешно можно использовать в других случаях. Вместо этого мы сохраним неявность как плату

за введение затухания $O(\Delta t^3)$. Из равенств (9.65) и (9.66) получаем значения $k=3$, $c_0=0$ и $c_1=1/12$. Отсюда следует, что

$$\operatorname{Re} \frac{\delta\omega}{\omega_0} = O(\Delta t^3), \quad (9.77)$$

$$\operatorname{Im} \frac{\delta\omega}{\omega_0} = -\frac{1}{24} O(\omega_0 \Delta t)^3 \quad (9.78)$$

и

$$\frac{X}{A\Delta t^2} = \frac{1}{12z} + \frac{z}{(z-1)^2}. \quad (9.79)$$

Это соотношение представим в виде

$$V z^{-1/2} (z-1) = A\Delta t, \quad (9.80)$$

$$X(z-1) = V z^{1/2} \Delta t + \frac{A\Delta t^2}{12z} (z-1) \quad (9.81)$$

и тем самым введем явно скорость. Теперь разностную схему можно записать в виде, удобном для отождествления степеней z с уровнями времени ($V z^{-1/2}$ соответствует $V_{n-1/2}$):

$$V_{n+1/2} = V_{n-1/2} + a_n \Delta t, \quad (9.82)$$

$$x_{n+1} = x_n + v_{n+1/2} \Delta t + \frac{\Delta t^2}{12} (a_n - a_{n-1}). \quad (9.83)$$

Здесь все аналогично методу с перешагиванием, за исключением члена, пропорционального $(da/dt)(\Delta t^3/12)$, который корректирует $\operatorname{Re}\omega$. Затухание, возникающее вследствие центрирования по времени, из-за этого члена теряется. Схема кажется более предпочтительной по сравнению с двумя предыдущими, если есть намерение сохранять a для использования на следующем шаге по времени. Задавая четвертый порядок точности $c_0=0$, $c_1=1/6$ и $c_2=-1/12$, можно устранить $\operatorname{Im}\omega$, используя выражения для точности (9.65) и (9.66).

Алгоритмы класса D. Читатель может поинтересоваться, все ли алгоритмы с точностью, соответствующей схемам класса C, описываются формулами (9.61) и (9.62). Возможным является вариант

$$\frac{X}{A\Delta t^2} = \frac{1}{2-z^{-1}} + \frac{z}{(z-1)^2}, \quad (9.84)$$

которому в формуле (9.62) соответствуют $c_s=(1/2)(2z)^{-s}$ и $k\rightarrow\infty$. Разность ξ_n между x_n и результатом метода с перешагиванием дается рекурсивным фильтром, $\xi_n=(1/2)(\xi_{n-1}+a_n \Delta t^2)$. Импульсный отклик в этой схеме затухает, но не исчезает через несколько шагов. Пример, даваемый формулой (9.84), является первым членом класса, названного в работе [Cohen, Langdon and Friedman, 1982] как «неявные D схемы» и описываемого формулой

$$\frac{X}{A\Delta t^2} z^{-1} D(z^{-1}) = \frac{z}{(z-1)^2}, \quad (9.85)$$

где $D(z^{-1}) = d_0 + d_1/z + d_2/z^2 + \dots$ — полином от z^{-1} . Точность и устойчивость схемы определяются выбором коэффициентов $\{d_i\}$ (см. задачу 9.27). Разностные уравнения можно записать таким образом:

$$x_n - 2x_{n-1} + x_{n-2} = a_{n-1} \Delta t^2, \quad (9.86)$$

где $d_0 a_{n-1} = a_n - d_1 a_{n-2} - d_2 a_{n-3} - \dots$, т. е. имеет место интегрирование с перешагиванием, использующее рекурсивно отфильтрованные ускорения (см. задачу 9.29).

Задачи

9.21. Используйте метод фазовой плотности для вывода дисперсионной функции схемы с перешагиванием. Указание: запишите равенство

$$f(x_n, v_{n-1/2}, t_n) = f(x_{n+1}, v_{n+1/2}, t_{n+1}) = \quad (9.87)$$

$$= f(x_n + v_{n-1/2} \Delta t, v_{n-1/2}, t_{n+1}) + a_n \Delta t \frac{\partial f_0(v_{n-1/2})}{\partial v}, \quad (9.88)$$

сохраняя в разложении линейные члены. Затем учтите соотношения

$$f(x_n, v_{n-1/2}, t_n) = f_1(v_{n-1/2}) e^{ikx_n - i\omega t_n} + f_0(v_{n-1/2}), \quad (9.89)$$

$$a_n = A \exp(ikx_n - i\omega t_n) \quad (9.90)$$

и получите

$$f_1 = A \Delta t \frac{\partial f_0}{\partial v} (1 - e^{i(kv - \omega) \Delta t})^{-1}. \quad (9.91)$$

Используя (9.30), представьте $\epsilon(k, \omega)$ в виде (9.15).

9.22. Примените метод фазовой плотности к схеме Эйлера

$$x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t, \quad v_{n+1} = v_n + a_n(x_n) \Delta t. \quad (9.92)$$

Считая f постоянным, как и в задаче (9.21), покажите, что f_1 выводится точно таким же образом, как и в методе с перешагиванием. С помощью Фурье-анализа уравнений движения получите выражение

$$\left(\frac{X}{A} \right)_{\omega - kv} = [\exp(ikv - \omega) \Delta t - 1]^{-2} \quad (9.93)$$

и подставьте его в (9.60) для получения дисперсионной функции.

9.23. Для правильного применения метода фазовой плотности к схеме Эйлера и многим другим используйте равенство $J^{-1} f(x_n, v_n, t_n) = f(x_{n+1}, v_{n+1}, t_{n+1})$, где якобиан J в одномерном случае определяется соотношением

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial x_{n+1}}{\partial x_n} & \frac{\partial v_{n+1}}{\partial x_n} \\ \frac{\partial x_n}{\partial v_n} & \frac{\partial x_{n+1}}{\partial v_n} \\ \frac{\partial x_{n+1}}{\partial v_n} & \frac{\partial v_{n+1}}{\partial v_n} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & \Delta t \frac{\partial a_n}{\partial x_n} \\ \Delta t & 1 \end{vmatrix}, \quad (9.94)$$

выражающим изменение фазового объема. Покажите, что для схемы Эйлера

$$f_1 = \left[-ikA\Delta t^2 f_0(v) + A\Delta t \frac{\partial f_0}{\partial v} \right] (1 - e^{i(kv - \omega)\Delta t})^{-1}, \quad (9.95)$$

где член с f_0 возникает из неравенства $J \neq 1$. Выведите дисперсионную функцию и покажите, что она согласуется с конечным результатом задачи 9.22.

9.24. Используйте равенства (9.64) и (9.23), чтобы показать, что ϵ переходит в выражение $1 + c_0 \omega_p^2 \Delta t^2$ при $kv_i \Delta t > 1$.

9.25. Для вывода соотношения (9.65) и (9.66) подставьте $z = \exp[-i(\omega_0 + \delta\omega)\Delta t]$ в (9.62) и разложите в ряд, сохраняя члены, линейные по $\delta\omega$.

9.26. При $k=2$ покажите, что $c_0 \geq 1/4$ является необходимым и достаточным условием для устойчивости осциллятора при $\omega_0 \Delta t \rightarrow \infty$. Случай $c_0 = 1/4$ соответствует правилу трапеции. При $k=3$ покажите, используя (9.62), что условия $c_0 \geq c_1 + 1/4$ и $c_1 \geq 0$ необходимы для устойчивости при $\omega_0 \Delta t \rightarrow \infty$ (фактически это также и достаточные условия [Cohen, Langdon and Friedman, 1982]).

9.27. Выполните условия на коэффициенты $\{d_i\}$ и убедитесь, что метод имеет второй порядок точности [Cohen, Langdon and Friedman, 1982]. Используя их, покажите, что для простой схемы D_1 получаем $d_0 = 2$ и $d_1 = -1$. Покажите, что она эквивалентна равенству (9.84). Что случится, если какой-нибудь из корней уравнений $D(z^{-1}) = 0$ окажется вне единичного круга $|z| = 1$?

9.28. Примените D схемы к простому гармоническому осциллятору. Покажите, что при $\omega_0 \Delta t \rightarrow 0$ корнями будут значения $z = 1$ и нули уравнения $D(z^{-1}) = 0$. Покажите, что все корни сходятся к $z = 0$ при $\omega_0 \Delta t \rightarrow \infty$. Каким свойством разностных уравнений это вызвано?

9.29. Множитель (9.85) в $X/A\Delta t^2$ равен $z/(z-1)^2$, $z^{-1}D(z^{-1})A$ равно A; определите степени z в соответствии с моментами времени для получения разностных уравнений (9.86) [Cohen, Langdon and Friedman, 1982; Langdon, Cohen and Friedman, 1983; Barnes e.a., 1983].

ГЛАВА 10

ЧИСЛЕННЫЕ МОДЕЛИ С СОХРАНЕНИЕМ ЭНЕРГИИ

10.1. ВВЕДЕНИЕ

Разработка вариационной формулировки для моделирования плазмы была неизбежна, и она была впервые выполнена в работах [Lewis, 1970, a, b], а затем расширена другими исследователями. Ее явным преимуществом является улучшенное сохранение энергии. Оказалось неизбежным, что математическая элегантность оставляет неясными практические свойства метода. В этой главе построены алгоритмы и исследованы их свойства с помощью методов, изложенных в гл. 8.

Начнем с показа того, что алгоритм с сохранением импульса не может сохранять энергию; затем покажем, как это можно преодолеть. В соответствии с этим рецептом разработан

алгоритм на основе вариационного принципа. Утрата сохранения импульса и общая точность вариационной процедуры обсуждаются в остальных параграфах. Хотя алгоритмы с сохранением энергии не проявили практического превосходства над другими методами, они обладают интересными свойствами.

В коде ESI имеется версия с сохранением энергии (IW-3). Ниже мы не выходим за рамки рассмотрения электростатических полей; электромагнитный случай был рассмотрен в работах [Lewis, 1970b; 1972] и использован в [Denavit, 1974].

10.2. НАРУШЕНИЕ СОХРАНЕНИЯ ЭНЕРГИИ В КОДАХ С СОХРАНЕНИЕМ ИМПУЛЬСА

Рассмотрим несколько комбинаций сеточных величин, являющихся функциями энергии поля. Наиболее часто используются две такие комбинации

$$W_E = \Delta x \sum_j E_j^2 / 2 \quad \text{и} \quad W_F = \Delta x \sum_j \rho_j \varphi_j / 2. \quad (10.1)$$

Можно быстро установить, что любая из них, а они обычно не равны, при сложении с кинетической энергией не является постоянной независимо от возможной точности интегрирования по времени. Для того чтобы понять, почему сумма энергий не остается строго постоянной, а часто лишь очень близка к этому, выразим скорость ее изменения через плотность тока частиц J и силу F , действующую на частицы, ограничившись одномерным случаем:

$$\frac{d}{dt} \Delta x \sum_j E_j^2 / 2 = \frac{d}{dt} \int_{\theta} \frac{dk}{2\pi} \frac{|E(k)|^2}{2} = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{F(-k)}{q} J(k) \frac{k \varkappa}{K^2}, \quad (10.2)$$

$$\frac{d}{dt} \Delta x \sum_j \rho_j \varphi_j / 2 = \frac{d}{dt} \int_{\theta} \frac{dk}{2\pi} \frac{1}{2} \rho(k) \varphi^*(k) = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{F(-k)}{q} J(k) k \varkappa, \quad (10.3)$$

тогда как

$$\frac{d}{dt} KE = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{F(-k)}{q} J(k), \quad (10.4)$$

а для реальной плазмы последнее соотношение преобразуется в $\int dx \mathbf{E} \cdot \mathbf{J}$. Подынтегральные выражения в (10.2)–(10.4) равны только при $k=0$, и это нельзя исправить переопределением \varkappa и k , так как они должны быть периодическими. Только в первой зоне можно положить $\varkappa=K=k$, тогда как интегралы берутся по всем k .

Например, предположим, что мы используем трехточечное разностное представление для ∇^2 и двухточечное для ∇ , когда $K = k \operatorname{dif}(k\Delta x/2)$ и $\kappa = k \operatorname{dif}(k\Delta x)$. Тогда для $\sum_j E_j^2$ в равенстве (10.2) имеем

$$E_1 \equiv \frac{k\kappa}{K^2} = \frac{k\Delta x/2}{\operatorname{tg}(k\Delta x/2)} \leq 1,$$

$$E_1 \rightarrow 0 \text{ при } k\Delta x \rightarrow \pi \quad (10.5)$$

и для $\sum_j \rho_j \phi_j$ (10.3) получаем

$$E_2 \equiv \frac{k}{\kappa} = \frac{k\Delta x}{\sin(k\Delta x)} \geq 1,$$

$$E_2 \rightarrow \infty \text{ при } k\Delta x \rightarrow \pi. \quad (10.6)$$

В зависимости от выбранной формы записи мы или занижаем или завышаем значение электрической энергии на коротких длинах волн.

Хотя мы убедились, что микроскопически энергия не сохраняется, во многих алгоритмах моделирования с сохранением импульса наблюдаемое макроскопическое изменение полной энергии достаточно мало по сравнению с другими важными энергетическими величинами, например с энергией поля, которая в горячей плазме существенно меньше кинетической энергии частиц. Когда это имеет место, то предполагается, что наибольший энергообмен между полями и частицами имеет место при больших длинах волн. Так как в этом случае модель наиболее точно описывает плазму, то хорошая проверка сохранения энергии вызывает доверие к моделированию.

Задача

10.1. Покажите, как в соотношениях (10.2) и (10.3) перейти от интегралов от сеточных величин (E , ρ , ϕ) к интегралам от F и J , определенным для частиц.

10.3. АЛГОРИТМ С СОХРАНЕНИЕМ ЭНЕРГИИ

Сконструируем теперь алгоритм, который сохраняет сумму кинетической энергии частиц и энергии поля, определенного на сетке. Постулируем, что полная (или потенциальная) энергия поля определяется следующим образом:

$$W_E = V_c \sum_j \rho_j \phi_j / 2, \quad (10.7)$$

где V_c — объем ячейки, причем это определение справедливо при любом законе взаимодействия, а не только при законе Кулона [Reitz and Milford, 1960]. В частности, равенство (10.7) применимо, когда кулоновская сила слажена на коротких длинах волн. Плотность заряда в точках сетки определяется как обычно:

$$\rho_j = \sum_i q_i S(\mathbf{X}_j - \mathbf{x}_i). \quad (10.8)$$

Если мы рассчитываем силу, действующую на i -ю частицу, по формуле

$$\mathbf{F}_i = -\partial W_E / \partial \mathbf{x}_i \quad (10.9)$$

и электрический потенциал ϕ получается из ρ с помощью некоторой процедуры, которую еще надо определить, то при условии аккуратного интегрирования по времени полная энергия с очевидностью сохраняется.

Из (10.7) и (10.9) имеем

$$\mathbf{F}_i = -V_c \sum_j \left\{ \frac{\partial \rho_j}{\partial \mathbf{x}_i} \phi_j + \rho_j \frac{\partial \phi_j}{\partial \mathbf{x}_i} \right\}. \quad (10.10)$$

Из определения (10.8) получаем для $\partial \rho_j / \partial \mathbf{x}_i$, входящей в первое слагаемое, $q_i \partial S(\mathbf{X}_j - \mathbf{x}_i) / \partial \mathbf{x}_i$, и для расчета требуется только несколько значений ϕ_j . Однако $\partial \phi_j / \partial \mathbf{x}_i \neq 0$ при всех j . Так как это слагаемое дает вклад во все ячейки, его вычисление было бы очень дорогостоящим. Полезно равенство (10.10) переписать в виде

$$\mathbf{F}_i = -\frac{V_c}{2} \sum_j \frac{\partial \rho_j}{\partial \mathbf{x}_i} \phi_j + \frac{V_c}{2} \sum_j \left(\frac{\partial \rho_j}{\partial \mathbf{x}_i} \phi_j - \rho_i \frac{\partial \phi_j}{\partial \mathbf{x}_i} \right). \quad (10.11)$$

Ниже в этом параграфе показано, что вторая сумма всегда равна нулю. Тогда сила, действующая на частицу, получается из первой суммы выражения (10.11):

$$\mathbf{F}_i = -q_i V_c \sum_j \phi_j \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i} S(\mathbf{X}_j - \mathbf{x}_i) = -q_i \frac{\partial V}{\partial \mathbf{x}_i} \Big|_{\phi_j = \text{const}}. \quad (10.12)$$

Градиент функции S вычисляется аналитически, и следовательно, точно. Именно этот шаг существенно отличается от алгоритмов с сохранением импульса, в которых для получения \mathbf{E} потенциал численно дифференцируется и затем поле \mathbf{E} интерполируется в точку расположения частицы.

В программе ϕ_j вычисляется из ρ_j за один шаг, а \mathbf{F}_i вычисляется на последующем шаге, используя ϕ_j , которое теперь фиксировано. Можно определить потенциальное поле интерполяцией ϕ_j .

$$V_i(\mathbf{x}_i) = q_i V_c \sum_j \phi_j S(\mathbf{X}_j - \mathbf{x}_i). \quad (10.13)$$

Силу, действующую на частицу, можно затем получить из градиента потенциального поля, как в последнем равенстве (10.12), в котором ϕ_j считается постоянным при дифференцировании V_i . Способ, рассмотренный в работе [Lewis, 1970 a], аналогичен нашему, см. § 10.5.

Заметим, что одна и та же интерполяционная функция S используется в (10.8) и в (10.12). Левис привел примеры использования линейной интерполяции первого порядка в случае одного и двух измерений. Однако в работах [Lewis, 1970 a, b; Langdon, 1970 b, 1973] не было никаких ограничений на эти веса. Интерполяция нулевого порядка NGP, в которой S является разрывной функцией, не подходит из-за non-existence градиента в соотношении (10.12).

Выше отмечалось, что вторая сумма в (10.11) исчезает; это действительно так, если имеет место (см. задачу 10.2) равенство

$$V_c \sum_j \rho_j^{(1)} \phi_j^{(2)} = V_c \sum_j \rho_j^{(2)} \phi_j^{(1)}, \quad (10.14)$$

где индексы (1) и (2) относятся к двум различным распределениям плотности и соответствующим им потенциалам. В пределе $\Delta x \rightarrow 0$ это утверждение переходит в теорему взаимности Грина для электростатики [Jackson, 1975]. Взаимность имеет место, когда ϕ является решением разностного уравнения вида

$$\rho_j = -V_c \sum_m \Delta_{jm} \phi_m \quad (10.15)$$

с

$$\Delta_{jm} = \Delta_{mj} \quad (10.16)$$

(см. задачу 10.3). Симметрия Δ_{jm} обычно возникает естественным образом при записи уравнения Пуассона в общей криволинейной системе координат. В нейтральной плазме с периодическими граничными условиями и для уравнения Пуассона, симметричного относительного отражения в плоскостях решетки, эта симметрия обеспечена. Формально $\Delta_{jm} = \Delta_{-j, -m} = \Delta_{m, j}$. Первое равенство следует из отражения, а второе — из трансляции на величину $j + m$. В способе Левиса Δ симметрично для разностного уравнения Пуассона (10.30), так как интеграл инвариантен при перестановке индексов j и j' . Это последнее свойство вносит существенно меньше ограничений, чем (10.30), и, следовательно, закон сохранения энергии справедлив для существенно более широкого класса алгоритмов, чем это было указано Левисом.

В криволинейных координатах выполняются также условия $\Delta_{jm} \geq 0$ при $j \neq m$, а

$$\sum_m \Delta_{jm} = 0, \quad (10.17)$$

так как $\rho_j = 0$, если φ однородно в пространстве. Эти условия влияют на знак энергии поля (см. задачу 10.5).

Другой случай возникает, когда уравнение Пуассона можно решить с помощью дискретного преобразования Фурье, как в случае периодической модели или при прямоугольной границе с заданным потенциалом, как в работах [Lewis, 1970 a, b]. Необходимо только, чтобы отношение $\varphi(\mathbf{k})/\rho(\mathbf{k})$ было действительным [Langdon, 1970 a]. Если это отношение положительно, то собственная потенциальная энергия неотрицательна.

Можно сделать выводы: когда имеет место взаимность, как в (10.14), сила, используемая в коде с сохранением энергии, идентична градиенту со знаком минус от полной энергии поля. Анализ соотношения (10.23) показывает, что взаимность является необходимым условием.

Используя однородное сплайновое взвешивание порядка m (см. § 8.8), из равенства (10.12) получаем выражение для силы

$$F_i = -q_i \Delta x \sum_j \varphi_j \frac{\partial}{\partial x_i} S(X_j - x_i) = q_i \Delta x \sum_j \varphi_j S'(X_j - x_i). \quad (10.18)$$

Учитывая тождество для производной S_m

$$S'_m(x) = [S_{m-1}(x + \Delta x/2) - S_{m-1}(x - \Delta x/2)]/\Delta x,$$

которое следует из определения S_m как огибающей S_{m-1} , при S_0 , соответствующем методу NGP, запишем силу в виде

$$F_i = q_i \Delta x \sum_j E_{j+1/2} S_{m-1}(X_{j+1/2} - x_i), \quad (10.19)$$

где $X_{j \pm 1/2} = (j \pm 1/2)\Delta x$ и (см. задачу 10.6) $E_{j+1/2} = -(\varphi_{j+1} - \varphi_j)/\Delta x$. (10.20)

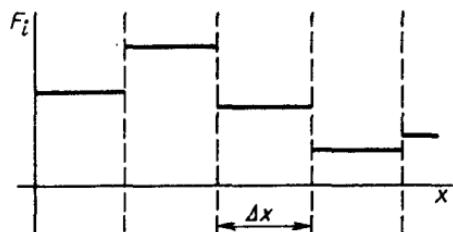
При линейном взвешивании, $m=1$, сила F_i кусочно-постоянна, как показано на рис. 10.1, т. е. точно такая же, как и сила при взвешивании нулевого порядка NGP. Это означает, что существуют скачки при прохождении частицей границы ячейки, приводящие к усилению шума и саморазогреву, точно так же, как при методе NGP в программах с сохранением импульса. При квадратичном сплайне, $m=2$, сила непрерывна и кусочно-линейна.

Задачи

10.2. Покажите, что вторая сумма в равенстве (10.11) исчезает, давая соотношение (10.14). Указание: примите $\rho^{(1)} = \rho$,

$$\rho^{(2)} = \delta\rho = (\partial\rho/\partial x_i)dx_i.$$

Рис. 10.1. Сила для алгоритма с сохранением энергии, использующего линейное взвешивание заряда, кусочно-постоянна



10.3. Докажите правильность соотношения взаимности подстановкой (10.15) в (10.14) и при помощи симметрии Δ_{jm} .

10.4. Покажите, что обе части (10.14) равны $\Delta x \sum_j E_{j+1/2}^{(1)} E_{j+1/2}^{(2)}$, если поле определяется формулой (10.20) при $E_{j+1/2} - E_{j-1/2} = \rho_j \Delta x$. Этим доказывается взаимность и неотрицательность энергии поля. Обобщите выкладки на случай двух измерений.

10.5. Используйте равенства (10.15)–(10.17), чтобы показать, что энергию поля можно записать в виде

$$\frac{1}{2} V_c \sum_j \rho_j \phi_j = \left(\frac{1}{2} V_c \right)^2 \sum_{j \neq m} \Delta_{jm} (\phi_j - \phi_m)^2,$$

и, следовательно, она неотрицательна, если $\Delta_{jm} \geq 0$ при $j \neq m$. Этот результат применим к энергии в большинстве методов вычисления поля, тогда как задача 10.10 специфична именно для формулировки Лагранжа.

10.6. Покажите переход от соотношения (10.18) к (10.20).

10.7. Покажите, что нежелательные скачки силы (10.19) могут быть устранены переходом к взвешиванию следующего порядка (квадратичному сплайну, см. § 8.8), которое также увеличивает порядок взвешивания силы (переход к линейному взвешиванию).

10.4. СОХРАНЕНИЕ ЭНЕРГИИ

Здесь мы продемонстрируем сохранение энергии при довольно общих условиях на уравнения поля. Так как свойство сохранения энергии применимо только, когда уравнения движения частиц интегрируются по времени точно, предположим, что время изменяется непрерывно. Скорость изменения кинетической энергии определяется формулой

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} KE &= \frac{d}{dt} \sum_i \frac{1}{2} m_i \dot{x}_i^2 = - \sum_i \dot{x}_i \cdot \frac{d}{dx_i} q_i V_c \sum_j \phi_j S(\mathbf{X}_j - \mathbf{x}_i) = \\ &= - V_c \sum_j \phi_j \frac{d}{dt} \sum_i q_i S(\mathbf{X}_j - \mathbf{x}_i) = - V_c \sum_j \dot{\rho}_j \phi_j. \end{aligned} \quad (10.21)$$

Электрический потенциал является решением дискретного аналога уравнения Пуассона и представляет собой линейную комбинацию $\{\rho_j\}$ и граничных условий, если последние неоднородны. Следовательно, потенциал имеет вид

$$\Phi_j = V_c \sum_m g_{j,m} \rho_m + \Phi_{j,\text{ext}}, \quad (10.22)$$

где $g_{j,m}$ — функции Грина для разностного уравнения Пуассона. Любая фиксированная плотность заряда может быть или включена в ρ и рассматриваться как принадлежащая бесконечно тяжелым частицам, или рассматриваться как вклад в $\Phi_{j,\text{ext}}$. По аналогии с обычной теорией электростатического поля можно ожидать, что потенциальная энергия системы, связанная с полем частиц, имеет вид [Jackson, 1975]

$$\frac{1}{2} \sum_i V_{i,\text{self}}(\mathbf{x}_i),$$

где $V_{i,\text{self}}$ интерполируется из первого слагаемого в формуле (10.22), а потенциальная энергия, связанная с внешним потенциалом, равна $\sum V_{i,\text{ext}}$. Рассмотрим, когда такое представление справедливо. Из тождества

$$\sum_i V_i(\mathbf{x}_i) \equiv V_c \sum_j \rho_j \Phi_j \quad (10.23)$$

получаем, что скорость изменения во времени полной энергии имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (KE + \frac{1}{2} \sum_i V_{i,\text{self}} + V_c \sum_j \rho_j \Phi_{j,\text{self}}) = \\ = V_c \sum_j \rho_j \dot{\Phi}_{j,\text{ext}} + \frac{1}{2} V_c \sum_j (\rho_j \dot{\Phi}_{j,\text{self}} - \dot{\rho}_j \Phi_{j,\text{self}}). \end{aligned} \quad (10.24)$$

Первый член в правой части — скорость изменения полной энергии из-за ее явной зависимости от времени; он соответствует $\partial H / \partial t$, следовательно, его появление оправдано. Для получения системы с сохранением энергии необходимо, чтобы вторая сумма в правой части исчезла. Это будет иметь место, если потенциал удовлетворяет теореме взаимности Грина (10.14) при постановке в нее $\rho^{(1)} = \rho$, $\rho^{(2)} = \dot{\rho} dt$. Другое доказательство достаточности взаимности для сохранения энергии дано в § 10.3.

Можно показать, что условие взаимности будет выполнено, если ϕ определяется равенством (10.22) и известно, что функция Грина симметрична, чего следует ожидать, когда $\Delta_{j,m}$ симметрична. Существует некоторый произвол в определении g из-за равенства полного заряда нулю в периодической системе, так что может потребоваться преобразование g , которое получается непосредственно из метода решения уравнения Пуассона, чтобы сделать симметрию явной [Lewis et al., 1972]. Важность симметрии показана в задаче 10.9.

В любом случае ясно, что свойство сохранения энергии легко достижимо.

Задачи

10.8. Выведите соотношение (10.23), используя (10.8) и (10.13).

10.9. Рассмотрите одну частицу в бесконечной системе, в которой функция Грина имеет антисимметричный вид $g_{j,i} \sim i - j$. Покажите, что частица ускоряется в собственном поле, увеличивая кинетическую энергию, тогда как энергия поля постоянна и равна нулю.

10.5. АЛГОРИТМЫ, ВЫВЕДЕННЫЕ ИЗ ВАРИАЦИОННЫХ ПРИНЦИПОВ

Основной идеей является подстановка в точный лагранжиан приближенного представления полей и частиц. Это представление имеет конечный набор переменных, и обычный вариационный принцип обеспечивает вывод уравнений, управляющих этими переменными.

Для устранения сложностей в обозначениях мы будем использовать векторные координаты вместо обобщенных координат и рассмотрим только электростатические поля. В работе [Lewis, 1972] формально рассмотрен случай обобщенных координат и полного электромагнитного поля. В рационализованной системе единиц Хевисайда — Лоренца СГС [Jackson, 1975] лагранжиан имеет вид

$$L = \sum_i m_i \dot{x}_i^2 / 2 - \sum_i q_i \phi(\mathbf{x}_i, t) + \int d\mathbf{x} \frac{1}{2} [\nabla \phi(\mathbf{x}, t)]^2. \quad (10.25)$$

Заменим ϕ интерполяционным потенциалом

$$\Phi(\mathbf{x}, t) = V_c \sum_j \phi_j(t) S(\mathbf{X}_j - \mathbf{x}). \quad (10.26)$$

Применение вариационного принципа к лагранжиану в виде $L(\{\mathbf{x}_i\}, \{\dot{\mathbf{x}}_i\}, \{\phi_i\})$ дает уравнения Эйлера — Лагранжа

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{x}}_i} \right) = 0, \quad (10.27)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \phi_j} = 0. \quad (10.28)$$

Второе уравнение имеет такой вид из-за того, что ϕ_j явно не входит в L . Это уравнение точно такое же, какое получается при использовании метода Галеркина для конечных элементов. С использованием соотношения (10.26) получаем

$$m_i \ddot{\mathbf{x}}_i = -q_i \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i} V_c \sum_j \phi_j(t) S(\mathbf{X}_j - \mathbf{x}_i), \quad (10.29)$$

$$\rho_j = V_c \sum_{j'} \phi_{j'} \int d\mathbf{x} \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} S(\mathbf{X}_{j'} - \mathbf{x}) \right] \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} S(\mathbf{X}_{j'} - \mathbf{x}) \right]. \quad (10.30)$$

Уравнение (10.29) — обычное уравнение движения с точно таким же выражением для силы, как и (10.12), а именно с градиентом интерполированного потенциала, а не интерполированной первой производной потенциала. Связь этой характеристики с существованием сохранения энергии показана в § 10.3. В одномерном случае при линейной функции S получим из (10.30) наипростейшую разностную аппроксимацию уравнения Пуассона. Однако в двух- или трехмерном случае итоговое разностное уравнение Пуассона не будет таким простым. В § 10.8 показано, что формула (10.30) дает правильную частоту колебаний холодной плазмы при любой длине волны! Она автоматически увеличивает гладкость при переходе к сплайнам более высокого порядка. Есть искушение считать, что эти алгоритмы моделирования должны быть в некотором смысле оптимальными. Для ответа на такой вопрос необходимо решить, какие свойства моделирования должны быть точными, и затем перейти от вариационного принципа к методам гл. 8 для анализа и приспособления алгоритма к этим требованиям. Например, в § 10.10 мы увидим, что для горячей плазмы формула (10.30) не является наиболее точной при определении частот колебаний. Это происходит из-за того, что горячая плазма менее чувствительна к коротковолновому шуму, чем к ошибкам на длинных и средних волнах. Вариационный принцип не может этого «знать». В системах, для которых такой анализ затруднен или лучшие алгоритмы трудны в применении, например при использовании криволинейных координат, вариационный принцип может быть полезным.

Задача

10.10. Покажите, что энергия поля неотрицательна, если она получается по формуле (10.30). Указание: сначала покажите, что энергию поля можно записать в виде

$$\frac{1}{2} \sum_j \rho_j \Phi_j = \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} (\nabla \Phi)^2,$$

где Φ — интерполяционный потенциал из формулы (10.26). Это доказательство можно адаптировать для любой системы координат. Свойство неотрицательности и симметрия оператора Пуассона облегчают численное решение (10.30).

10.6. ПРОСТРАНСТВЕННОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ ЗАВИСИМЫХ ВЕЛИЧИН

Как и в § 8.9, рассмотрим пространственное преобразование Фурье-уравнений для вычисления силы и отметим различия в моделях с сохранением импульса и с сохранением энергии.

Преобразование соотношения (10.8) имеет, конечно, такой же вид, как § 8.9, однако преобразование (10.12) записывается в виде

$$F(\mathbf{k}) = -iqS(-\mathbf{k})\varphi(\mathbf{k}), \quad (10.31)$$

где $\mathbf{x} = \mathbf{k}$ [с (10.3) и (10.4)]. Сравнивая (10.31) с (8.64) и (8.72), видим, что (10.31) формально то же самое и отличается только в определении φ . Преобразование уравнения Пуассона (10.30) имеет вид

$$K^2(\mathbf{k})\varphi(\mathbf{k}) = \rho(\mathbf{k}), \quad (10.32)$$

что формально то же самое, что и (8.71), но здесь K^2 , определяемое лагранжианом, записывается в виде

$$K^2(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{p}} k_{\mathbf{p}}^2 S(\mathbf{k}_{\mathbf{p}}). \quad (10.33)$$

В одномерном случае $k_p = k - 2\pi p / \Delta x$. Заметим, что $K^2 \geq 0$, так что энергия поля неотрицательна.

10.7. РАЗНОСТНОЕ УРАВНЕНИЕ ПУАССОНА В ФОРМЕ ЛЕВИСА И КУЛОНОВСКИЕ ПОЛЯ

Запись уравнения Пуассона в форме Левиса не связана с сохранением энергии, но она довольно точно описывает кулоновское взаимодействие, скрытое в его лагранжиане, и даже частично компенсирует погрешности интерполяции. Чтобы это увидеть, мы используем полученные выше результаты, относящиеся к плотности частиц и силовому полю:

$$F(k) = \frac{-iq^2 k S(k) \sum_{\mathbf{p}} S(\mathbf{k}_{\mathbf{p}}) n(\mathbf{k}_{\mathbf{p}})}{\sum_{\mathbf{p}} k_{\mathbf{p}}^2 S^2(\mathbf{k}_{\mathbf{p}})}. \quad (10.34)$$

Предположим, что используется интерполяция, свободная от наложения частот. При этом требуется, чтобы $S(\mathbf{k})=0$ вне первой зоны Бриллюэна, причем для прямоугольной решетки первая зона определяется как $\max |k_x \Delta x, k_y \Delta y, k_z \Delta z| < \pi$. Это называется интерполяцией с ограниченной полосой. Нет необходимости в том, чтобы функция $S(\mathbf{k})$ была постоянной и равной единице в пределах первой зоны. В этом случае вклад дают только члены с $p=0$, в итоге получаем

$$F(\mathbf{k}) = \begin{cases} -iq^2 n(\mathbf{k}) k/k^2 & \text{в первой зоне,} \\ 0 & \text{в остальных зонах.} \end{cases} \quad (10.35)$$

В свободном от наложения пределе поля при больших длинах волн являются кулоновскими. Если функция $S(\mathbf{k})$ не постоянна

в первой зоне, то появляются ошибки в интерполяции, а левисовский алгоритм для уравнения Пуассона создает компенсацию ошибок в вычислении ϕ для обеспечения хорошей общей точности. Это важно при практической реализации высокоточных алгоритмов, так как если $S(k)$ постоянно в первой зоне, то $S(x)$ уменьшается с ростом x очень слабо, но в то же время не остается положительным. Однако интерполяция с ограниченной полосой не очень практична при моделировании плазмы, и если бы это было верно, то алгоритмы с сохранением импульса сохраняли бы энергию и могли бы быть сделаны точными.

В некоторых вариантах моделирования наблюдалось, что малые колебания холодной неподвижной плазмы в модели Левиса с линейным взвешиванием происходили точно на плазменной частоте, исключая погрешности интегрирования по времени. Эти интересные наблюдения справедливы при любой функции взвешивания S и в одном, двух и трех измерениях, как показано в § 10.8. Здесь рассмотрен тот случай, когда вариационный принцип применен так, как это должно быть сделано. Однако это исключительный случай и (это будет понятно из § 10.10).

В качестве точности различных вариантов расчетов мы используем усредненную силу $F_0(k)$, определенную в § 8.3. Представим себе неподвижные частицы, в то время как сетка смещается без вращения. Тогда $F_0(x)$ будет средним от $F(x)$ по всем таким смещениям. Можно показать, что $F_0(k)$ получается из (10.34) сохранением только члена с $p=0$ в числителе:

$$F_0(k) = \frac{-iq^2 n(k) k}{\sum_p k_p^2 S^2(k_p)}. \quad (10.36)$$

Применимость F_0 обсуждается в § 8.13 и 10.10. Мы используем F_0 в § 10.11 и 10.12 при обсуждении примеров.

10.8. МАЛЫЕ КОЛЕБАНИЯ ХОЛОДНОЙ ПЛАЗМЫ

В этом параграфе покажем, что малосигнальные колебания холодной плазмы без дрейфовой скорости имеют правильную частоту и пространственные свойства при использовании алгоритма с лагранжианом. Это будет сделано как с применением преобразования Фурье, так и без него.

Линейный отклик холодной плазмы выражается следующим образом:

$$n(k, \omega) = \frac{in_0 k \cdot F(k, \omega)}{m\omega^2}. \quad (10.37)$$

Умножим это выражение на $S(k)$, подставим значение F из (10.34), заменим k на k_p и просуммируем по p' , учитывая

периодичность сумм в равенстве (10.34), затем сократим суммы $\sum S_n$ и $\sum k_p^2 S^2$. В итоге имеем

$$\omega^2 = \frac{n_0 q^2}{m} = \omega_p^2 \quad (10.38)$$

вне зависимости от k , т. е. получен правильный результат без всякой ошибки, связанной с конечностью Δx .

Хотя этот вывод весьма краток [с учетом того, что (10.34) уже выведено], поучительно повторить вывод с самого начала без использования преобразования Фурье. Прояснится значение линеаризации и жидкостного предела, а также природа колебаний. Для краткости рассмотрим одномерный случай, так как обобщение выполняется тривиально.

Предположим, что невозмущенные положения частиц размещены равномерно и в каждой ячейке находится целое число частиц. Их заряд нейтрализован неподвижным фоном. После возмущения положения частиц на величину x_{i1} получаем

$$\rho_j = q \sum_i x_{i1} \frac{\partial}{\partial x_{i0}} S(X_j - x_{i0}). \quad (10.39)$$

Соотношение (10.39) представляет разложение в ряд Тэйлора выражения (10.8) с сохранением линейных членов. Продифференцируем ρ_j дважды по времени. Ускорение \ddot{x}_{i1} определяется формулой (10.12), в которую подставлены значения x_{i0} — это еще одна линеаризация. Преобразуя сумму, получаем

$$\ddot{\rho}_j = - \frac{q^2}{m} \Delta x \sum_{j'} \Phi_{j'} \sum_i \left[\frac{\partial}{\partial x_{i0}} S(X_{j'} - x_{i0}) \right] \left[\frac{\partial}{\partial x_{i0}} S(X_j - x_{i0}) \right]. \quad (10.40)$$

Предполагая, что число частиц в ячейке $n_0 \Delta x$ велико, сумму по частицам заменим на интеграл. Тогда, сравнивая с выражением (10.30), находим

$$\ddot{\rho}_j = - \frac{n_0 q^2}{m} \rho_j. \quad (10.41)$$

Каждая величина ρ_j колеблется с плазменной частотой независимо от других величин, или Φ_j могут колебаться независимо. Колебания же частиц в одной ячейке не являются независимыми.

Если кинетическую энергию вычисляют, как в коде ES1 (см. § 3.11), с помощью модели линейного взвешивания, размещая частицы таким образом, чтобы точки сетки находились между ними, и сохраняя амплитуды колебаний достаточно малыми, чтобы частицы не пересекали точки сетки, то полная

энергия сохраняется в пределах погрешности округления (см. задачу 4.21). Однако это очень частный специальный случай!

Приведенный вывод становится несправедлив, если частицы участвуют в каком-либо дрейфовом движении. В этом случае следует использовать дисперсионное уравнение (10.43). Некоторые особенности этого случая обсуждаются в § 10.9 и в работе [Langdon, 1970b].

10.9. НЕСОХРАНЕНИЕ ИМПУЛЬСА

Рассмотренные выше модели не сохраняют импульс. Покажем теперь, что этот недостаток связан с наложением частот. И то и другое является проявлением неоднородности динамики системы. Если лагранжиан не инвариантен при перемещении, то в общем случае импульс не сохраняется. Рассмотрим произвольную силу, действующую на систему частиц, и воспользуемся интерполяцией с ограниченной полосой:

$$\int dx n(x) F(x) = \int \frac{dk}{(2\pi)^3} n(k) F(-k) = \int \frac{dk}{(2\pi)^3} n(k) ik S(k) q\phi(-k) = \\ = \int \frac{dk}{(2\pi)^3} ik \rho(k) \phi(-k) = 0, \quad (10.42)$$

где $\rho(k) = qS(k)n(k)$ при отсутствии наложения частот, причем подынтегральное выражение нечетно. В итоге полная сила, действующая на частицы, равна нулю и импульс сохраняется. При этом очень существенно, что частицы больше не чувствуют положения точек сетки. Неоднородность сетки устранена из динамики. Следует отметить, что при отсутствии наложения частот обычные модели, сохраняющие импульс, могут также сохранять и энергию, например когда в формуле (10.2) $K^2 = k^2$ или в (10.3) в первой зоне $k=k$.

Простым примером нарушения сохранения импульса является учет силы, действующей на частицу со стороны ее собственного поля. Исследуем этот случай ниже, пока же предположим, что мы не интересуемся погрешностями в силе такого рода на макроскопическом уровне (возможно из-за того, что она в среднем стремится к нулю) до тех пор, пока это не проявит себя явно. Приведем два примера, в которых может иметь место большое изменение полного импульса.

На рис. 10.2 и 10.3 показано существенное нарушение сохранения импульса. Неустойчивость предсказывается и наблюдается в холодной плазме, двигающейся сквозь сетку с неподвижным нейтрализующим фоном (см. § 8.12 и задачу 10.11). Здесь не требуется присутствия двух или более плазменных компонент, движущихся относительно друг друга. Ясно, что это нефизическая неустойчивость и ее происхождение

Рис. 10.2. Пример макроскопического нарушения сохранения импульса. Холодный пучок, проходящий через постоянный однородный нейтрализующий фон, становится неустойчивым:

1 — тепловая энергия частиц; 2 — дрейфовая; 3 — энергия поля

связано с ошибками из-за наложения частот. Разделим энергию на три неравные части: на кинетическую энергию, связанную со средним движением, кинетическую энергию движения относительно средней скорости и энергию поля. Их

сумму при желании можно сделать практически постоянной, уменьшая временной шаг. При развитии неустойчивости два последних слагаемых увеличивают свой вклад в полную энергию, а вклад первого ослабевает. Следовательно, средние скорость и импульс должны уменьшаться, погрешности в вычислении силы разрушают среднее упорядоченное движение. Заметим, что существование постоянной энергии означает, что амплитуда неустойчивости ограничена значением имеющейся энергии, что нетипично для таких неустойчивостей в обычных моделях, в которых наблюдаемая полная энергия увеличивается [Okuda, 1970, 1972]. Такое описание подтверждается результатами моделирования, показанными на рис. 10.2 и 10.3.

Столкновения частиц также создают сопротивление, приводящее к уменьшению импульса, как это предсказывается для горячей однородной устойчивой плазмы, дрейфующей через сетку (см. § 12.6). Потеря энергии среднего движения компенсируется увеличением температуры.

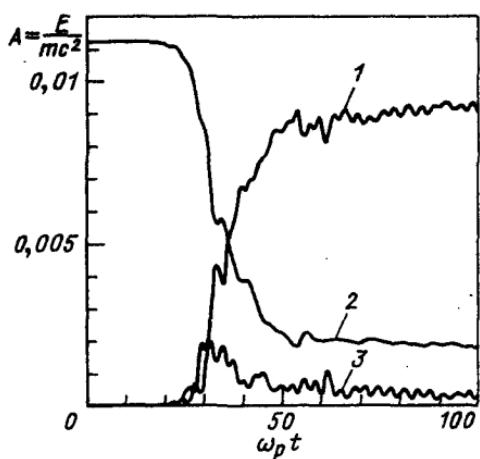
Мы далеки от мысли утверждать, что отсутствие сохранения момента является неизбежным недостатком практического моделирования, хотя и показали, что оно может иметь макроскопически видимые последствия.

Задача

10.11. Используйте аргументацию из § 8.12, чтобы показать, что холодная плазма неустойчива, если ее дрейфовая скорость меньше $\omega_p \Delta x / 2\pi$.

10.10. НАЛОЖЕНИЕ ЧАСТОТ И ДИСПЕРСИОННОЕ УРАВНЕНИЕ КОЛЕБАНИЙ ГОРЯЧЕЙ ПЛАЗМЫ

Выше утверждалось, что дисперсия волн в горячей плазме очень хорошо описывается уравнением, основанным на исполь-



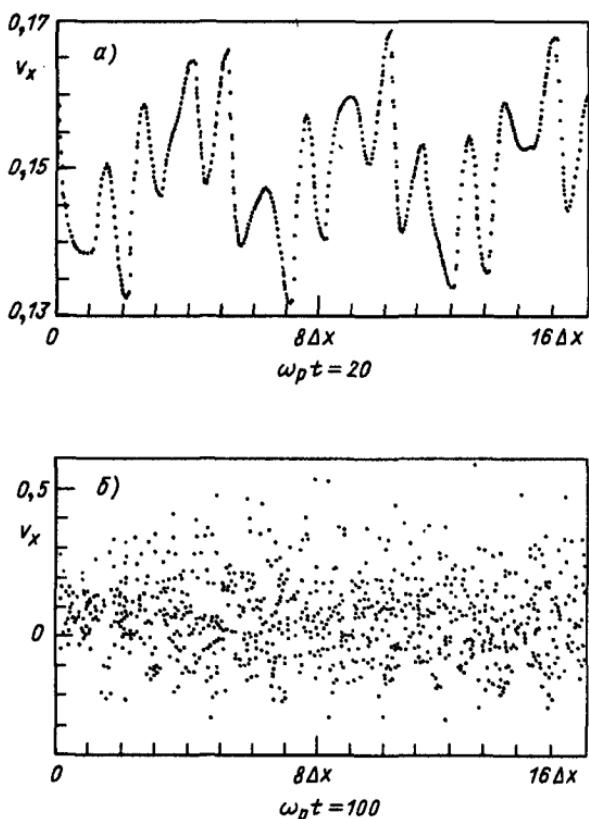


Рис. 10.3. Фазовое пространство в моменты времени $\omega_p t = 20$ (а) и 100 (б). Начальная дрейфовая скорость равна $0,15\omega_p \Delta x$, возбуждалась третья мода. В процессе взаимодействия появилась 13-я мода из-за наложения частот, так как моделирование проводилось для 16 точек сетки. Обе моды связаны сеткой и быстро нарастают. Следует обратить внимание на масштаб скоростей. Момент $\omega_p t = 100$ соответствует распределению части после насыщения

зовании усредненной силы F_0 . Это было установлено при численном решении точных, включая наложение частот, дисперсионных уравнений (см. § 8.13). В настоящем параграфе показано, что ошибки наложения при линейном взвешивании могут иметь четвертый или пятый порядок по Δx . Следовательно, погрешности при больших длинах волн могут быть меньше, чем погрешности второго порядка в F_0 в случае использования вариационного принципа (см. обсуждение в конце § 10.11).

Дисперсионное соотношение из § 9.5 имеет вид

$$\varepsilon \equiv 1 + \frac{\omega_p^2}{k^2} \sum_{\mathbf{p}} S^2(\mathbf{k}_p) \int \mathbf{k}_p \frac{\partial f_0}{\partial v} \frac{dv}{\omega - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{v}} = 0, \quad (10.43)$$

где частицы рассматриваются как линеаризованная власовская плазма: x , v и t непрерывны. Эффекты конечного шага сетки описываются точно. Для простоты рассмотрим одномерный случай.

Если в соотношении (10.43) сохранить только слагаемое с $p=0$, получим приближенное соотношение, которое записывается как $\epsilon_0=0$ и получается при замене силы на F_0 . Для линейного взвешивания имеем

$$S^2(k_p) = \left(\frac{2}{k_p \Delta x} \frac{\sin k_p \Delta x}{2} \right)^4 = \left(\frac{k \Delta x}{2\pi p} \right)^4 \left(1 + \frac{2k \Delta x}{\pi p} \right) + O(k \Delta x)^6, \quad (10.44)$$

если $p \neq 0$ и $k \Delta x \ll \pi$. Отсюда можно заключить, что разность $\epsilon - \epsilon_0$ имеет четвертый порядок по Δx . Для уверенности в этом необходимо рассмотреть отклик плазмы при коротких длинах волн из интеграла по скоростям. Используем максвелловское распределение со среднеквадратичным разбросом v_t , наложенным на дрейфовую скорость. Получим

$$\epsilon = 1 - \frac{1}{2K^2 \lambda_p^2} \sum_p S^2(k_p) Z' \left(\frac{\omega - k_p v_0}{\sqrt{2} |k_p| v_t} \right), \quad (10.45)$$

где Z' — производная дисперсионной функции плазмы из работы [Fried and Conte, 1961]. Далее проведем аналитические выкладки в интересующем нас случае $\lambda_p \gtrsim \Delta x$, $v_0 \lesssim v_t$. При малых аргументах разложение функции Z' имеет вид

$$\frac{1}{2} Z' \left(\frac{\xi}{\sqrt{2}} \right) = -i \left(\frac{\pi}{2} \right)^{1/2} e^{-\xi^2/2} - 1 + \xi^2 - \frac{1}{3} \xi^4 + \frac{1}{15} \xi^6. \quad (10.46)$$

Подставляя это разложение в равенство (10.45) и используя разложение при малых k , как в формуле (10.44), получаем низший неисчезающий порядок по Δx :

$$\epsilon - \epsilon_0 \approx \frac{1}{(k \lambda_p)^2} \left[\frac{(k \Delta x)^4}{720} + i 2,65 \cdot 10^{-4} \frac{(k \Delta x)^5}{v_t} \left(\frac{\omega}{k} + 4v_0 \right) \right]. \quad (10.47)$$

Соответствующая погрешность в ω/k приблизительно пропорциональна $\epsilon - \epsilon_0$, так что погрешности $\text{Re } \omega$ и $\text{Im } \omega$ из-за наложения имеют соответственно четвертый и пятый порядок по Δx . Однако при использовании вариационного принципа погрешность в F_0 равна $O(\Delta x)^2$. Итоговая погрешность $O(\Delta x)^4$ в $\omega(k)$ требует другого оператора для уравнения Пуассона (см. § 10.11).

Мнимая часть равенства (10.47) показывает уменьшающееся влияние членов с наложением при $v_0=0$. Кроме того, следует заметить, что при $v_0 \neq 0$ эти члены могут стать дестабилизирующими.

10.11. ПРИМЕР МОДЕЛИ С ЛИНЕЙНОЙ ИНТЕРПОЛЯЦИЕЙ

Исследуем природу силы F , действующей на частицы, в примерах с линейной интерполяцией, приведенных в [Lewis, 1970]. Во-первых, заметим, что F разрывна. При заданном фиксированном $\{\phi_j\}$ в двухмерном случае сила F_x непрерывна и кусочно-линейна как функция u и представляет собой ступенчатую функцию x . В одномерном случае F —ступенчатая функция (см. рис. 10.1). В этом случае можно ожидать большего шума, чем в обычных алгоритмах линейного взвешивания, общее время вычислений меньше, так как выражение для F существенно проще. Очень трудно выполнить интегрирование по времени достаточно точно для реализации улучшения сохранения энергии. При эмпирическом изучении [Lewis et al., 1972; Brown et al., 1974; Lewis and Nielson, 1975] вариационные алгоритмы не проявили своего превосходства.

Сохранение импульса и собственные силы. Как упоминалось выше, простым примером нарушения сохранения импульса является учет силы, действующей на частицу со стороны ее собственных полей. Так как частица имеет много соседей, более существенно, что сила двухчастичного взаимодействия является неконсервативной. Однако случай одиночной частицы проще и представляет некоторый интерес. Рассмотрим одиночную частицу в большой одномерной системе, используя линейную интерполяцию. Поместим частицу между точками сетки $x=0$ и Δx . Тогда собственная сила записывается в виде

$$F = -q \frac{\Phi_1 - \Phi_0}{\Delta x} = \frac{1}{2} q \Delta x (\rho_0 - \rho_1) = -q^2 \left(\frac{x}{\Delta x} - \frac{1}{2} \right), \quad (10.48)$$

где $0 \leq x \leq \Delta x$. Это—потенциальная яма простого гармонического осциллятора. Попробуем выяснить ее влияние в однокомпонентной плазме. Она дает частоту колебаний $\omega_s = \omega_p / \sqrt{n \Delta x}$ — много меньшую, чем ω_p , если число частиц в ячейке $n \Delta x$ велико. Энергетическая глубина ямы W_s может быть сравнима с тепловой энергией:

$$\left(\frac{W_s}{\frac{1}{2} m v_t^2} \right) = \frac{1}{4} \frac{(\Delta x / \lambda_p)^2}{n \Delta x} = \frac{1}{4} \left(\Delta x / \lambda_p \right) / (n \lambda_p), \quad (10.49)$$

где m —масса частицы; v_t —случайная тепловая скорость; λ_p —дебаевский радиус. Аналогичные результаты получаются в двух- и трехмерных случаях (см. задачу 10.12).

Заметим, что отношения (10.49) малы при больших $n \Delta x$ и заданном $\Delta x / \lambda_p$. Более того, так как другие частицы в ячейке дают вклад в силы, сравнимый с собственной силой частицы, последняя становится малой по сравнению с нормальным многочастичным взаимодействием.

Мы пока далеки от мысли игнорировать погрешности интегрирования по времени, предполагая сохранять шаг Δt пренебрежимо малым. Если Δt остается постоянным при уменьшении Δx , то при $\omega_p \Delta t \geq 2$ колебания, вызванные силой, становятся неустойчивыми. Поэтому возникает следующее требование: $n\Delta x < 1$. Было показано, что даже до порога неустойчивости скорости частиц могут безгранично диффундировать — из-за погрешностей интегрирования по времени возникает большое несохранение энергии. Хотя такое нефизическое поведение даже невозмущенных траекторий частиц нежелательно, можно сравнить его с диффузией скоростей, связанной с обычными столкновениями. Для оценки скорости диффузии предположим, что Δx настолько мало, что положения частиц внутри ячейки случайны и независимо распределены от одного шага по времени до другого. Среднеквадратичная собственная сила в одномерном случае равна $\langle F^2 \rangle = q^4/12$ и приводит к диффузии, определяемой выражением

$$\langle \Delta v^2 \rangle = \frac{\langle F^2 \Delta t^2 \rangle}{m^2} \frac{t}{\Delta t}. \quad (10.50)$$

Вычисляя время диффузии τ и полагая $\langle \Delta v^2 \rangle = v_t^2$, получаем

$$\omega_p \tau_s = 12 \frac{(n\lambda_p)^2}{\omega_p \Delta t}, \quad (10.51)$$

тогда как обычные времена столкновений для одномерной плазмы равны $\omega_p \tau_c (n\lambda_p)$ или $(n\lambda_p)^2$. Кажется, не представляет труда сделать $\tau_s \gg \tau_c$. Аналогичный аргумент можно привести в двух- и трехмерных случаях. Погрешности интегрирования могут увеличить значимость собственной силы, но не чрезмерно.

Можно попытаться восстановить сохранение импульса добавлением новой силы к каждой частице, которая уничтожит ее собственную силу. Мы, однако, рассмотрим случай, когда частицы четко периодически размещены на целых расстояниях Δx . Немодифицированный алгоритм не дает нам никакой ненужной силы.

Заметим, что при использовании уравнения Власова самоускорение исчезает и система остается такой же, как и без уничтожения самоускорения. Обсуждение в § 10.9 показывает, что в этом случае импульс не сохраняется. Никакое сглаживание ϕ или ρ не восстанавливает сохранение импульса. Несохранение импульса не является основным вопросом при рассмотрении собственной силы частицы.

Точность макроскопического поля. Если какое-либо плазменное явление не изменяется при смещении сетки относительно самой себя, то оно не изменится при замене силы взаимодействия на усредненную силу F_0 , определенную в § 10.7. Для

примера рассмотрим колебания горячей плазмы, используя точность периода и декремент (или инкремент) как меру точности вычисления полей.

В § 10.10 показано, что вклад членов с $p \neq 0$ в $\epsilon(k, \omega)$ имеет четвертый или более высокий порядок по Δx . Следовательно, погрешность более низкого порядка в F_0 уменьшает порядок точности в целом. При линейном взвешивании с помощью (10.30) получаем

$$K^2/k^2 = S^2(k) + \frac{1}{2}(k\Delta x)^2 + O(\Delta x)^4. \quad (10.52)$$

Итак, F_0 имеет относительную погрешность $-(k\Delta x)^2/12$, вызывающую аналогичную погрешность в частоте колебаний ω . Заметим, что погрешность в $\text{Re } \omega$ может вызвать погрешность в $\text{Im } \omega$ изменением фазовой скорости. Для максвелловского распределения этот вклад в относительную погрешность $\text{Im } \omega$ равен $-\Delta x^2/(24\lambda_p^2)$ и не зависит от k .

Погрешность $O(\Delta x)^2$ можно устраниТЬ изменением алгоритма решения уравнения Пуассона. Это можно сделать при решении такого же уравнения Пуассона, но с измененной правой частью ρ'_j :

$$\rho'_j = \frac{1}{12}(-\rho_{j-1} + 14\rho_j - \rho_{j+1}). \quad (10.53)$$

Тогда остаются погрешности $O(\Delta x^4)$ в F_0 и из-за наложения погрешностей получаем итоговую погрешность четвертого порядка в $\omega(k)$.

Эти замечания справедливы также в случае двух и трех измерений. Алгоритм решения уравнения Пуассона, полученный из вариационного принципа, не оптимален с этой точки зрения. Будет ли он оптимальным в ситуациях, отличных от единственного случая колебаний холодной плазмы, еще требуется показать.

Очевидно, что при применении вариационного принципа возникают проблемы в случае, когда базисные функции не составляют полной системы. Известно много других таких примеров, например явление Гиббса при приближении функции тригонометрическими суммами по методу наименьших квадратов, дающее усеченные ряды Фурье, в которых, как и в рассматриваемом случае, лучшие алгоритмы могут быть получены при учете природы результатов, которые необходимо получить.

Задача

10.12. Используйте соотношение размерностей для того, чтобы показать, что в случае двух и трех измерений соотношения (10.48) и (10.49) имеют вид

$$\frac{\omega_j^2}{\omega_p^2} \sim \frac{1}{N_c}, \quad \frac{W_s}{\frac{1}{2}mv_i^2} \sim \frac{1}{N_c} \left(\frac{\Delta x}{\lambda_p} \right)^2, \quad (10.54)$$

где $N_c = nV_c$ — число частиц в ячейке. Частота служит только приближенным индикатором среднего градиента силы, так как одночастичные колебания больше не являются простыми гармоническими колебаниями.

10.12. МОДЕЛЬ С КВАДРАТИЧНЫМ СПЛАЙНОМ

Уменьшение наложения частот обеспечивается сплайнами более высоких порядков, позволяющими получить лучшую точность при использовании вариационного принципа. Алгоритм решения уравнения Пуассона можно получить из соотношений (10.30) или из (10.33) и (8.54) для $S_m(k)$. Для $K(k)$ имеем

$$K^2(k) = \left(\frac{2}{\Delta x} \sin(k\Delta x/2) \right)^6 \sum_p (k - pk_g)^{-4} = \left[\frac{2}{\Delta x} \sin(k\Delta x/2) \right]^2 \frac{1}{3} [2 + \cos(k\Delta x)]. \quad (10.55)$$

Сумму можно определить, вычислив вторую производную формулы (4.3.92) из работы [Abramovitz and Stegun, 1964]. Если при моделировании используются методы преобразования Фурье, то это все, что необходимо для получения алгоритма. Новый множитель в (10.55) добавляется для компенсаций низкочастотного фильтрующего слаживающего эффекта S_2 по сравнению с S_1 .

При малых $k\Delta x$ относительная погрешность в K^2 и S_2 равна $-(k\Delta x)^2/4 + O(k^4)$, так что погрешность второго порядка в $F_0(k)$ исчезает и остается только погрешность четвертого порядка, что показывает, как могут быть уменьшены погрешности, вызванные S_1 при больших длинах волн.

Коэффициенты разностного уравнения являются коэффициентами разложения (10.55) по степеням $\exp(i k \Delta x)$:

$$-p_j \Delta x^2 = \frac{1}{6} (\varphi_{j+2} - \varphi_{j-2}) + \frac{1}{3} (\varphi_{j+1} + \varphi_{j-1}) - \varphi_j. \quad (10.56)$$

Это разностное уравнение — четвертого порядка, так что в непериодической конечной системе необходимы еще два граничных условия в дополнение к двум имеющимся. Их вид зависит от изменения интерполяционной формулы у краев системы.

Сила самовоздействия в этом примере определяется формулами (10.48) и (10.49), но с меньшими коэффициентами. В общем, все недостатки, вызванные наложением частот (неустойчивость, несохранение момента, сеточный шум), уменьшаются.

Возвращаясь к вопросу колебаний горячей плазмы, следует отметить, что члены с наложением дают вклад в $\varepsilon - \varepsilon_0$ порядка $O(\Delta x^6)$, тогда как погрешность в F_0 имеет четвертый порядок. Опять получаем наилучшую точность комплексной частоты $\omega(k)$ при другом алгоритме решения уравнения Пуассона, чем при использовании вариационного принципа.

Задача

10.13. Уравнение (10.56) приводит к матричному соотношению, в котором ненулевые элементы находятся в полосе шириной в пять элементов вдоль диагонали плюс несколько элементов в узлах. Однако равенство (10.55) показывает, что вместо этого можно использовать две трехдиагональные системы, соответствующие множителям k^2 . Покажите, что соответствующие разностные уравнения можно записать в виде

$$\frac{1}{6}\rho'_{j-1} + \frac{2}{3}\rho'_j + \frac{1}{6}\rho'_{j+1} = \rho_j, \quad (10.57)$$

$$\Phi_{j-1} - 2\Phi_j + \Phi_{j+1} = -\rho'_j \Delta x^2. \quad (10.58)$$

Возможна ли такая факторизация в двухмерном случае?

ГЛАВА 11

МУЛЬТИПОЛЬНЫЕ МОДЕЛИ

11.1. ВВЕДЕНИЕ

Здесь рассматривается другой способ получения алгоритмов моделирования плазмы. Опишем сначала вкратце историю вопроса и содержание этой главы.

В первом методе, разработанном Доусоном с сотрудниками, для вычисления поля, действующего на частицу, использовалось оборванное разложение в конечный ряд Фурье. Для приложений, в которых существенны детали пространственного распределения (необходимо учитывать много гармоник), вычисление рядов Фурье обходится слишком дорого. Вместо этого поля и их производные вычисляются в узлах пространственной сетки (которых намного меньше, чем частиц), а действующее на частицу поле рассчитывается при помощи оборванного разложения в конечный ряд Тейлора около ближайшего узла сетки. Это разложение можно интерпретировать в терминах мультипольных моментов.

В «сокращенном мультипольном» методе для сокращения необходимого объема памяти при помощи разложения Фурье

вычисляются только сами поля, а их производные вычисляются конечно-разностными методами. Этот алгоритм легко выразить в формулировках гл. 8, что облегчает его сравнение с другими методами.

В своем первоначальном виде мультипольный алгоритм рассматривается в § 11.2, а в «сокращенной» форме — в § 11.3. В § 11.4 показано, как получить стандартное одномерное линейное взвешивание, и определена новая двухмерная дипольная схема. Добавление квадрупольного ху-момента приводит к уже знакомому билинейному или квадратичному взвешиванию! По сравнению с другими опубликованными дипольными алгоритмами алгоритмы, полученные здесь, дают при сравнимом разрешении более гладкие пространственные вариации. В § 11.5 рассматривается связь между частичными и сеточными величинами. В § 11.6 исследуется точность схемы в целом.

11.2. МЕТОД РАЗЛОЖЕНИЯ ПО МУЛЬТИПОЛЯМ

Рассмотрим сначала метод мультипольного моделирования в целом, а затем исследуем точность и отдельные формы метода (монопольный, дипольный, квадрупольный). Оригинальными работами на эту тему являются [Kruer, Dawson, Rosen, 1973; Chen, Okuda, 1975; Okuda, 1977].

Мультипольному методу предшествует алгоритм вычисления поля, в котором частица рассматривается как облако конечных размеров, а поле представляется в виде ряда Фурье [Dawson, 1970]. При этом сила, действующая на i -ю частицу, равна

$$F_i = q_i \int dx' \hat{S}(x' - x_i) \left[\frac{-i}{L} \sum_{\ell} \ell \varphi(\ell) e^{i\ell x'} \right] = \frac{-i}{L} q_i \sum_{\ell} \ell \hat{S}(-\ell) \times \\ \times \varphi(\ell) e^{i\ell x_i}, \quad (11.1)$$

где L — длина одномерной системы, а слаживающий множитель \hat{S}_{ℓ} выбран в виде $\exp(-\ell^2 a^2 / 2)$. Эта сумма вычисляется для каждой частицы. Разложение Фурье плотности заряда имеет вид

$$\rho(\ell) = \int dx' e^{i\ell x'} \left[\sum_i q_i \hat{S}(x' - x_i) \right] = \hat{S}(\ell) \sum_i q_i e^{-i\ell x_i}, \quad (11.2)$$

откуда следует, что $\varphi(\ell) = \rho(\ell) / \ell^2$. Этот метод дает плавное изменение полей, но с увеличением пространственного разрешения (и тем самым числа гармоник Фурье) объем вычислений на частицу растет.

Для ускорения процесса вычисления силы используется пространственная сетка. Сила, действующая на частицу, получается при разложении в ряд Тейлора экспоненты в формуле (11.1):

$$F_i = -\frac{i}{L} q_i \sum_{\kappa} \kappa \hat{S}(-\kappa) \varphi(\kappa) e^{i\kappa x_j} [1 + i\kappa(x_i - X_j) - \frac{1}{2}\kappa^2 \times (x_i - X_j)^2 \dots], \quad (11.3)$$

где X_j — координата ближайшего к частице x_i узла сетки. Этую силу можно записать в виде

$$\begin{aligned} F_i &= F_{0,j} + (x_i - X_j) F_{1,j} + \frac{1}{2}(x_i - X_j)^2 F_{2,j} + \dots = \\ &= \sum_{l=0} \frac{1}{l!} F_{l,j} (x_i - X_j)^l. \end{aligned} \quad (11.4)$$

Производные силы задаются выражением

$$F_{l,j} = \frac{1}{L} \sum_{\kappa} F_l(\kappa) e^{i\kappa x_j}, \quad (11.5)$$

где

$$\left. \begin{aligned} F_l(\kappa) &= (i\kappa)^l F_0(\kappa), \\ F_0(\kappa) &= -i\kappa q_i \hat{S}(-\kappa) \varphi(\kappa). \end{aligned} \right\} \quad (11.6)$$

Величины $F_{l,j}$ получаются из $F_l(\kappa)$ при помощи быстрого преобразования Фурье (БПФ); затем для каждой частицы вычисляется F_i .

Точно так же вычисляются при помощи разложения в ряд Тейлора экспоненты в формуле (11.2):

$$\rho(\kappa) = \hat{S}(\kappa) \sum_j e^{-i\kappa x_j} \sum_{i \in j} q_i \left[1 - i\kappa(x_i - X_j) - \frac{1}{2}\kappa^2(x_i - X_j)^2 \dots \right], \quad (11.7)$$

где внешнее суммирование проводится по узлам сетки, а внутренняя сумма берется по частицам, ближайшим к j -му узлу, и ее можно записать в виде разложения по мультипольям:

$$\rho(\kappa) = \hat{S}(\kappa) \Delta x \sum_j e^{-i\kappa x_j} \left[\rho_{0,j} - i\kappa \rho_{1,j} - \frac{1}{2}\kappa^2 \rho_{2,j} \dots \right], \quad (11.8)$$

где

$$\rho_{l,j} = \sum_{i \in j} \frac{q_i}{\Delta x} (x_i - X_j)^l \quad (11.9)$$

— плотность мультиполя. Первые две из этих величин назовем монопольной ($l=0$) плотностью

$$\rho_{0,j} = \sum_{i \in j} \frac{q_i}{\Delta x}$$

(это то же самое, что плотность в методе NGP) и дипольной ($l=1$) плотностью

$$\rho_{1,j} = \sum_{i \in j} \frac{q_i}{\Delta x} (x_i - X_j).$$

Наконец, выражение (11.8) принимает вид

$$\rho(\kappa) = \hat{S}(\kappa) \left[\rho_0(\kappa) - i\kappa \rho_1(\kappa) - \frac{1}{2} \kappa^2 \rho_2(\kappa) \dots \right], \quad (11.10)$$

где

$$\rho_l(\kappa) = \Delta x \sum_j \rho_{l,j} e^{-i\kappa x_j}, \quad (11.11)$$

вычисляется при помощи быстрого преобразования Фурье.

Для того чтобы записать вычисление силы в виде мультипольного кода, следует из отдельных частиц собрать мультипольные плотности (11.9), преобразовать (11.11) и сложить их (11.10), что и приводит к величине $\rho(\kappa)$; после этого вычисляется $\phi(\kappa) = \rho(\kappa)/\kappa^2$. Производные силы $F_{l,j}$ вычисляются при помощи (11.5) и (11.6) через величины $F_l(\kappa)$. Сила, действующая на каждую частицу, получается при помощи суммы (11.4). На рис. 11.1 показана вся схема в целом.

Оценим объем памяти и число БПФ при одномерном вычислении силы с использованием моментов от 0 до M . В каждом узле сетки вычисляется $M+1$ величина: плотности $\rho_{l,j}$ и производные силы $F_{l,j}$. В целом для этого необходимо $2(M+1)$ действительное преобразование, которое обычно выполняется парами комплексных преобразований (приложение А). Если координаты частиц записываются во внешней памяти типа вращающегося магнитного диска, то вычислять новые плотности лучше при перемещении частиц на их новые места, иначе придется просматривать список частиц дважды на каждом временном шаге. В этом случае в оперативной памяти должны содержаться как старые силы, так и новые плотности и в каждом узле необходимо запоминать $2(M+1)$ величину. В

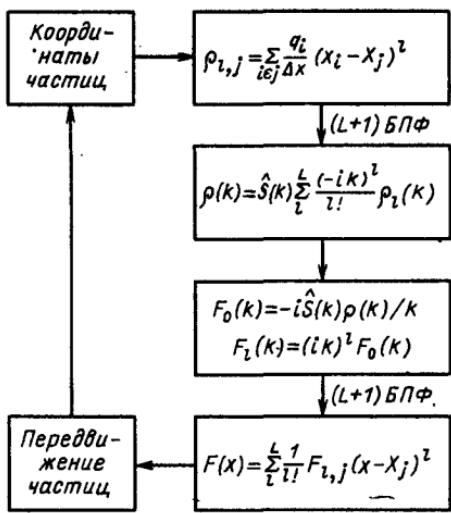


Рис. 11.1. Метод разложения по мультипольям начинается с координат частиц x_i , затем следует $L+1$ преобразование Фурье сеточных плотностей заряда, еще $L+1$ разложение моментов силы и вычисление силы, действующей на частицу. Диполь соответствует $L=1$, квадруполь — $L=2$ и т. д.

потребности электромагнитного кода (см. задачу 11.2).

На практике мультипольные коды часто использовались в монопольном (т. е. NGP) режиме и редко учитывалось что-нибудь большее, чем диполи. Соответственно в наших обсуждениях и вычислениях мы не будем заходить дальше $M=2$.

Сравним теперь пространственное изменение поля сил в дипольном приближении и в стандартном методе линейной интерполяции. В последнем случае сила будет непрерывной и кусочно-линейной, как показано на рис. 11.2. В методе мультипольного разложения сила в окрестности ближайшего узла дается в виде ряда Тейлора (11.4). Вблизи узла точность хорошая, но она быстро ухудшается при приближении к границе между ячейками. Более того, после пересечения частицей границы разложение выполняется в новом узле сетки. Следовательно, сила разрывна на границе (рис. 11.3). Как мы

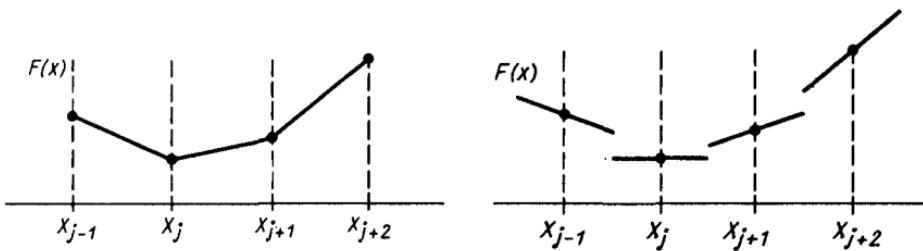


Рис. 11.2. Условное изображение взвешивания силы на сетке с линейной интерполяцией между узлами. Для любых x сила непрерывна, но $\partial F / \partial x$ разрывна в точках X_j

Рис. 11.3. Сила в дипольном методе ($L=1$) — как F , так и $\partial F / \partial x$ разрывны на границах ячеек

увидим в § 11.6 и 11.7, вредное влияние этого разрыва приводит к увеличению ошибок наложения. На практике величину этого скачка (см. задачу 11.3) уменьшают, выбирая параметр $a \geq \Delta x$. Для фиксированной гармоники это не приводит к уменьшению скачка по отношению к самой силе. Однако для малых длин волн при некоторой потере разрешения обе величины уменьшаются.

Задачи

11.1. Модифицируйте рис. 11.1 для размерностей 2 и 3. Укажите: необходимое число БПФ; какие величины являются скалярами, векторами, тензорами (с рангом); число запоминаемых величин на узел сетки.

11.2. Исследуйте мультипольное разложение заряда и тока для двухмерного электромагнитного кода.

11.3. Покажите, что величина скачка на границе между ячейками в случае синусоидальной силы $F_{0,j} = A \cos kX_j$ достигает $2A \sin^2(k\Delta x/4)$. На минимально возможной длине волны $\pi/\Delta x$ скачок равен $2A$!

11.3. СОКРАЩЕННОЕ МУЛЬТИПОЛЬНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ

Для уменьшения объема памяти, необходимого в мультипольном методе, предложен метод [Кгцег et al., 1973], который называется сокращенной мультипольной схемой. В этом подходе производные силы в узлах сетки получаются при помощи конечно-разностного оператора. Следовательно, только силу нужно вычислять и запоминать в каждом узле; получить же силу можно, действуя конечно-разностным оператором на потенциал. Плотность заряда образуется мультипольными плотностями при помощи операторов, симметричных используемым при вычислении силы. БПФ применяется для решения уравнения Пуассона, сглаживания и, возможно, дифференцирования потенциала.

Что касается мультипольных схем, то чаще всего используется сокращенное дипольное разложение (SDPE). Заменим в выражении для силы $F_{1,k} = ikF_{0,k}$ конечной разностью

$$F_{1,j} = \frac{F_{0,j+1} - F_{0,j-1}}{2\Delta x}, \quad (11.12)$$

тогда разложение (11.4) примет вид

$$F_i = F_{0,j} + (x_i - X_j) \frac{F_{0,j+1} - F_{0,j-1}}{2\Delta x}. \quad (11.13)$$

Аналогично $\rho_k = \hat{S}(\rho_{0,k} - ik\rho_{1,k})$ в (11.10) превращается в

$$\rho_j = \rho_{0,j} - \frac{\rho_{1,j+1} - \rho_{1,j-1}}{2\Delta x}. \quad (11.14)$$

Сглаживающий множитель \hat{S} (совпадающий с множителем SM в ES1) учитывается при решении уравнения Пуассона, которое теперь имеет вид $\kappa^2\phi = \hat{S}^2\rho$.

Этот подход приспособлен к формализму гл. 8, где сила (8.23) равна

$$F_i = q\Delta x [\dots E_{j-1} S(X_{j-1} - x_i) + E_j S(X_j - x_i) + E_{j+1} S(X_{j+1} - x_i) \dots]. \quad (11.15)$$

Сила в SDPE (11.13) принимает форму (11.15), если E — сглаженное поле, т. е. $F_{0,j} = qE_j$, и весовая функция S определяется так:

$$\left. \begin{array}{l} \Delta x S(X_j - x_i) = 1, \\ \Delta x S(X_{j \pm 1} - x_i) = \pm \frac{x_i - X_j}{2\Delta x} \end{array} \right\} \quad (11.16)$$

при $|X_j - x_i| < \Delta x/2$ и 0 в противоположном случае (рис. 11.4). Плотность заряда (8.22) $\rho_j = qS(X_j - x_i)$ с той же самой функцией совпадает с результатом SDPE (3) (см. задачу 11.4). Тем самым результаты гл. 8 применимы к схеме SDPE.

Для лучшего понимания нового метода имеет смысл рассмотреть простую модель. В духе классического дипольного разложения поместим начало координат в ближайшем к x_i узлу сетки X_j . Здесь же сначала поместим весь заряд, так же как при взвешивании по методу NGP. Затем добавим зачаточный диполь; пусть заряд соседней ячейки равен Δq ; поместим его в точку X_{j+1} и завершим построение диполя, разместив в точке X_{j-1} заряд $-\Delta q$. Дипольный момент теперь равен $(\Delta q)(2\Delta x)$, что должно совпадать с $q(x_i - X_j)$. Результирующий вклад в плотность заряда при $\Delta q = (q/2\Delta x)(x_i - X_j)$ имеет вид ($|x_i - X_j| < \Delta x/2$)

$$[\rho_{j-1}, \rho_j, \rho_{j+1}] = [-\Delta q, q, \Delta q] / \Delta x.$$

Заряд каждой частицы распределяется по трем узлам сетки (вместо двух при линейном взвешивании), а это означает, что эффективная ширина заряда равна по меньшей мере двум ячейкам.

Как исходные, так и сокращенные мультипольные схемы можно рассмотреть с единой точки зрения (см. задачу 11.5), что мы и имеем в § 11.5.

Весовая функция SDPE изображена на рис. 11.4. Так же, как и при взвешивании по методу NGP, редкие разрывы приводят к накоплению ошибок [Kruer et al., 1973]. Величины $S(\kappa)$ для этой и других схем сравниваются в § 11.6 и 11.7.

В работе [Kruer et al., 1973] предложена улучшенная весовая функция, изображенная на рис. 11.4, где разрывы убраны перемещением половины заряда из ближайших узлов сетки на следующие два узла. Заметим, что эта улучшенная функция S

Рис. 11.4. Весовые функции при взаимодействии частица — сетка:

- a* — «сокращенное» дипольное приближение;
- b* — улучшенное дипольное приближение;
- c* — обычное линейное взвешивание S_1

совпадает со средним двух линейных функций S_1 , сдвинутых на Δx . В результате при таком улучшенном сокращенном дипольном взвешивании силы оказываются совпадающими с вычисленными при помощи стандартной линейной функции S_1 , но с учетом простого пространственного сглаживания ρ или ϕ (см. задачу 11.7).

Последнее обстоятельство позволяет предположить, что стандартный алгоритм линейного взвешивания может быть мультипольной схемой. Эта и другие возможности развиваются в следующем параграфе.

Задачи

11.4. Сравнивая плотность заряда (8.22) $\rho_j = q_i S(X_j - x_i)$ с выражением (11.14), где $\rho_{0,j} = q/\Delta x$, найдите $S(X_j - x_i)$ при $|X_j - x_i| < \Delta x/2$. Получите $S(X_{j\pm 1} - x_i)$, рассмотрев выражение (11.14), переписанное в виде $\rho_{j\pm 1} = \rho_{0,j\pm 1} \pm (\rho_{1,j} - \rho_{1,j\pm 2})$, где $\rho_{1,j} = q(x_i - X_j)/\Delta x$. Ответы согласуются с (11.16).

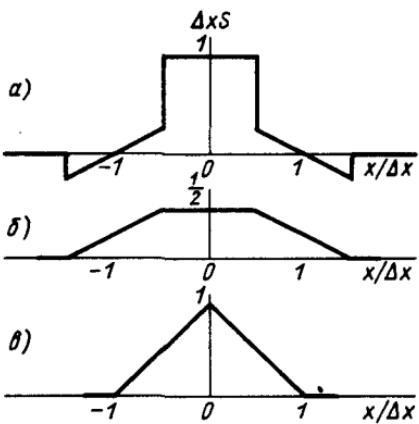
11.5. Покажите, что силы, вычисленные при помощи SDPE, совпадают с получаемыми при дипольном разложении с заменой $F_1(\ell)$ на $iF_0(\ell)(\sin k\Delta x)/\Delta x$ и с аналогичной заменой в (11.10).

11.6. Найдите $S(\ell)$ для сокращенной дипольной схемы, используя, например, непосредственное преобразование Фурье $S(x)$.

11.7. Покажите, что силы, вычисленные при помощи улучшенного взвешивания (см. рис. 11.4, б), те же, что и при стандартном линейном взвешивании (см. рис. 11.4, в) с учетом пространственного сглаживания на сетке для ρ или ϕ (1/4, 1/2, 1/4). Какой путь эффективнее?

11.4. МУЛЬТИПОЛЬНАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ДРУГИХ АЛГОРИТМОВ

Здесь рассматриваются другие алгоритмы взвешивания частицы, которые также можно интерпретировать как мультипольные методы. Сначала покажем, что при помощи дипольного разложения вокруг точки, расположенной в середине между узлами сетки, можно получить знакомый одномерный алгоритм линейного взвешивания. Далее, с использованием разложения вокруг центра ближайшей ячейки будет выведен двухмерный дипольный алгоритм. Затем мы покажем, что взвешивание по площади представляет собой дипольную схему, в которой также учитывается xu — квадрупольный момент. Если



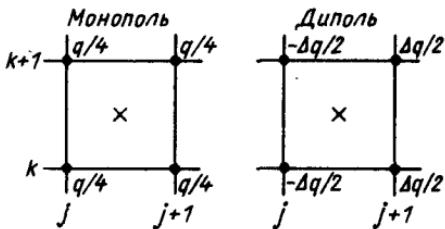


Рис. 11.5. Конструирование монопольных и дипольных моментов в центре ячейки (\times) при помощи добавления подходящих зарядов в четырех углах ячейки

верить мультипольной интерпретации, то можно с чистой совестью использовать линейное взвешивание или взвешивание по площади. В заключение высказываются некоторые соображения по созданию мультипольных алгоритмов, оптимизирующих точность и объем вычислений.

Построим монополь и диполь с зарядами в двух узлах сетки вместо трех. Для заряда q , расположенного в точке x между узлами j и $j+1$, монополь можно построить, разместив половинки заряда в каждый узел. Диполь получается прибавлением и вычитанием Δq :

$$\left. \begin{array}{l} \rho_j \Delta x = \frac{1}{2} q - \Delta q, \\ \rho_{j+1} \Delta x = \frac{1}{2} q + \Delta q. \end{array} \right\} \quad (11.17)$$

Дипольный момент $\Delta q \Delta x$ с центром в $X_{j+1/2}$ должен равняться моменту частицы $q(x - X_{j+1/2})$. Результат

$$\left. \begin{array}{l} \rho_j \Delta x = q \left[\frac{1}{2} - \frac{x - X_{j+1/2}}{\Delta x} \right] = q \frac{X_{j+1} - x}{\Delta x}, \\ \rho_{j+1} \Delta x = q \left[\frac{1}{2} + \frac{x - X_{j+1/2}}{\Delta x} \right] = q \frac{x - X_j}{\Delta x} \end{array} \right\} \quad (11.18)$$

совпадает с используемым в ES1 стандартным линейным взвешиванием! Гладкость здесь такая же, как и в улучшенной сокращенной дипольной схеме, и вычисления проводятся так же быстро (см. задачу 11.10).

В случае двух измерений построение монопольного и двух дипольных моментов, центрированных в середине ячейки, показано на рис. 11.5. Например, для узла (j, k) к величине $\rho_{j,k} \Delta x \Delta y$ добавляется

$$\frac{q}{4} + \frac{q}{2\Delta x} (x - X_{j+1/2}) + \frac{q}{2\Delta y} (y - Y_{k+1/2}). \quad (11.19)$$

Распределение заряда по четырем ячейкам вокруг (j, k) имеет вид

$$\rho_{j,k} \Delta x \Delta y = q \Delta x \Delta y S(X_j - x, Y_k - y) =$$

$$= \begin{cases} \frac{3}{4}q - \frac{q}{2}|x - X_j| - \frac{q}{2}|y - Y_\ell|; & |x - X_j| < \Delta x \text{ и } |y - Y_j| < \Delta y; \\ 0 & \text{в противоположном случае} \end{cases} \quad (11.20)$$

(см. рис. 11.8). По сравнению с весовой функцией [Krieg et al., 1973] разрывы в рассматриваемом случае меньше, что позволяет повысить точность. Оказывается, что добавлением квадрупольного члена xy разрывы можно убрать (см. задачу 11.8), что приводит к обычному билинейному взвешиванию (см. рис. 11.8).

Соотношения (8.24), (8.26), следующие из (8.25) и (8.26), подчеркивают эти утверждения. Любое линейное взвешивание можно рассматривать как дипольный метод в одном, двух или трех измерениях. Кроме того, билинейное взвешивание включает в себя один квадрупольный момент (см. задачу 11.9).

Задачи

11.8. Покажите, что квадрупольный член, который нужно добавить в (11.19), равен

$$\frac{q(x - X_{j+1/2})(y - Y_{\ell+1/2})}{\Delta x \Delta y} \quad (11.21)$$

и (11.20) принимает вид

$$\rho_{j,\ell} \Delta x \Delta y = q \left[1 - \frac{|x - X_j|}{\Delta x} \right] \left[1 - \frac{|y - Y_\ell|}{\Delta y} \right]. \quad (11.22)$$

Это то же самое, что квадратичное взвешивание (см. гл. 14).

11.9. Покажите, что соотношения (8.24) и (8.27) можно обобщить и записать для двухмерного билинейного взвешивания в виде

$$\Delta x \Delta y \sum_j \rho_j (1, X_j, Y_j, X_j Y_j) = \sum_i q_i (1, x_i, y_i, x_i y_i). \quad (11.23)$$

Отсюда следует, что билинейное взвешивание является дипольной схемой с добавлением квадрупольного члена.

11.10. Покажите, что при суммировании q или qx по всем частицам в каждой ячейке получается плотность заряда, построенная при помощи SDPE или стандартного линейного взвешивания. Покажите, что в обеих схемах сила является линейной комбинацией q и qx в каждой ячейке. Тем самым при оптимальной организации счета и одинаковом объеме памяти объем вычислений одинаков для SDPE и стандартной линейной схемы.

11.11. Добавив сеточный фильтр, преобразуйте QS в квадрупольный метод. Существует много возможностей, одна из них — применить фильтр

$$\rho_j \leftarrow -\frac{1}{8} \rho_{j-1} + \frac{5}{4} \rho_j - \frac{1}{8} \rho_{j+1} \quad (11.24)$$

к ρ до решения уравнения Пуассона, а к ϕ — после решения.

11.5. СВЯЗЬ МЕЖДУ ПРЕОБРАЗОВАНИЯМИ ФУРЬЕ ЧАСТИЧНЫХ И СЕТОЧНЫХ ВЕЛИЧИН

Для того чтобы подготовить вывод дисперсионного соотношения и сравнить мультипольные и другие алгоритмы, в § 11.5 выясняется связь между Фурье-образами плотности частиц $n(x)$ и поля сил $F(x)$, сеточными величинами $\rho_{l,j}$ и т. д. Мы облегчим себе задачу, позаимствовав некоторые результаты из гл. 8 и приведя соотношения к принятой там форме.

В § 11.2 предполагалось (хотя особо и не оговаривалось), что κ принадлежит первой зоне Бриллюэна, т. е. $|\kappa| < \pi/\Delta x$. Этого достаточно для преобразования сеточных величин, но при этом нужно знать $n(\kappa)$ и $F(\kappa)$ при всех κ . Так же, как и в гл. 8, удобно использовать тот факт, что образы сеточных величин периодичны с периодом $2\pi/\Delta x$, т. е. $\rho(\kappa + 2\pi/\Delta x) = \rho(\kappa)$. Во избежание недоразумений введем периодическую функцию

$$\kappa = \kappa \pmod{2\pi/\Delta x}, \quad |\kappa| \leq \pi/\Delta x. \quad (11.25)$$

Результаты, полученные в § 11.2 при подстановке k вместо κ , становятся пригодными для всех

$$\rho(\kappa) = \hat{S}(\kappa) \sum_l \frac{(-i\kappa)}{l!} \rho_l(\kappa), \quad (11.26)$$

$$\varphi(\kappa) = \rho(\kappa)/k^2; \quad (11.27)$$

$$F_l(\kappa) = (i\kappa)^l F_0(\kappa); \quad (11.28)$$

$$F_0(\kappa) = -i\kappa q \hat{S}(-\kappa) \varphi(\kappa). \quad (11.29)$$

Для того чтобы отделить ближайшие к j -му узлу частицы, перепишем сначала мультипольную плотность (11.9) при помощи весовой функции S_0 (см. рис. 8.2):

$$\rho_{l,j} = \sum_i q_i S_0(X_j - x_i) (x_i - X_j)^l. \quad (11.30)$$

Заметим, что так же, как и в уравнении (8.22), Фурье-образ $\sum q_i S(X_j - x_i)$ в соответствии с (8.53) равен

$$\sum qn(\kappa_p) S(\kappa_p) = \sum qn(\kappa_p) \int dx e^{-i\kappa_p x} S(x), \quad (11.31)$$

где $\kappa_p = \kappa - 2\pi p/\Delta x$. Сравнивая эти формулы, получаем

$$\rho_l(\kappa) = \sum_p qn(\kappa_p) \int dx e^{-i\kappa_p x} S_0(x) (-x)^l. \quad (11.32)$$

Подстановка в (11.26) приводит к искомому соотношению, записанному в похожем на (8.53) виде:

$$\rho(\kappa) = \hat{S}(\kappa) \sum_p qn(\kappa_p) S(\kappa_p), \quad (11.33)$$

где

$$S(\kappa) = \sum_l \int dx e^{-i\kappa x} S_0(x) \frac{(ix)^l}{l!}, \quad (11.34)$$

$$S(\kappa) = \frac{1}{\Delta x} \int_{-\Delta x/2}^{\Delta x/2} dx e^{-i\kappa x} \sum_l \frac{(ix)^l}{l!} \quad (11.35)$$

— образ эффективной весовой функции. [Отсутствующий в (8.53) множитель \hat{S} в гл. 8 включен в K^2 , а здесь этот множитель, описывающий пространственное сглаживание, учтен при получении $\rho(\kappa)$ и $F(\kappa)$.]

Возвращаясь к силе, перепишем (11.4) и для выделения нужных членов в сумме по j используем S_0 :

$$F_i = \sum_l \left[\Delta x \sum_j F_{l,j} S_0(X_j - x_i) \frac{(x_i - X_j)^l}{l!} \right]. \quad (11.36)$$

Член [...] для каждого l совпадает с (8.23), Фурье-образ которого (8.46)

$$E(\kappa) S(-\kappa) = E(\kappa) \int dx e^{i\kappa x} S(x).$$

Сравнивая, мы получаем, что образ силового поля мультиполя равен

$$F(\kappa) = \sum_l F_l(\kappa) \int dx e^{i\kappa x} S_0(x) \frac{(-x)^l}{l!}. \quad (11.37)$$

Если учесть, что $F_l(\kappa) = (i\kappa)^l F_0(\kappa)$, то

$$F(\kappa) = S(-\kappa) F_0(\kappa) = \hat{S}(-\kappa) S(-\kappa) [-i\kappa q \Phi(\kappa)], \quad (11.38)$$

где мы снова встречаемся с эффективной весовой функцией (11.34). Результат имеет тот же вид, что и (8.46) с учетом (8.41) и пространственного сглаживания \hat{S} , где κ определяется выражением (11.25).

Следовательно, верны также и другие результаты гл. 8, такие как сохранение импульса (см. задачу 11.13). Если бы мы могли удержать все моменты, то (см. задачу 11.13)

$$S(\kappa) = 1, |\kappa| < \pi/\Delta x, (\kappa = \kappa), \quad (11.39)$$

$S(\kappa) = 0$ в противоположном случае (т. е. $\kappa - \kappa$ кратно $2\pi/\Delta x$). Итак, мы снова приходим к интерполяции (11.1) и (11.2), ограниченной на зону, которая не дает ошибок наложения.

Для того чтобы проследить связь с другим представлением, использовавшимся в работе [Chen, Okuda, 1975], перепишем (11.34) в виде [см. задачу (11.14)]

$$S(\kappa) = \sum_l \frac{1}{l!} \left[-\kappa \frac{d}{d\kappa} \right]^l S_0(\kappa), \quad (11.40)$$

где

$$S_0(\kappa) = \frac{\sin \vartheta}{\vartheta} \equiv \text{dif } \vartheta, \quad \vartheta = \frac{\kappa \Delta x}{2}. \quad (11.41)$$

Для $|\kappa| < \pi/\Delta x$ $S(\kappa_p)$ совпадает с функцией $I(\kappa, \kappa_p)$, использованной в работе [Chen, Okuda, 1975]. В дипольном приближении остается вклад только $l=1$ и $l=0$:

$$S(\kappa) = S_0(\kappa) - \kappa \frac{d}{d\kappa} S_0(\kappa) = \frac{\sin \vartheta}{\vartheta} - \frac{\kappa}{\vartheta} \left(\cos \vartheta - \frac{\sin \vartheta}{\vartheta} \right). \quad (11.42)$$

Используя результаты задачи 11.5 и применяя сокращенную дипольную схему (SDPE) из § 11.3, получаем

$$S(\kappa) = \frac{\sin \vartheta}{\vartheta} - \frac{\sin 2\vartheta}{2\vartheta} \left(\cos \vartheta - \frac{\sin \vartheta}{\vartheta} \right), \quad (11.43)$$

что уже было получено в задаче 11.6.

Существуют три источника погрешностей, возникающих при вычислении силы: погрешности величины и направления \mathbf{F} и связь разных длин волн из-за эффекта наложения частот. При векторе \mathbf{k} , лежащем в первой зоне Бриллюэна, погрешностей направления нет, если \mathbf{F}_0 (или \mathbf{E}) получается преобразованием Фурье (11.29), а погрешности величины, получающиеся из-за отличия \hat{S}^2 от единицы, можно скомпенсировать, подогнав \hat{S} .

Погрешности наложения, за которые отвечают члены с $p \neq 0$, определяются при заданном κ величиной $S(\kappa_p)$, и их нельзя поправить или уменьшить без потери пространственного разрешения.

Построенные нами выражения (11.33) и (11.38) аналогичны (8.49) и (8.46). Можно сделать конгруэнтными § 8.7 и настоящий параграф, если переместить множители $\hat{S}(\kappa)$, $\hat{S}(-\kappa)$ из (11.33) и (11.38) в выражение (11.27), которое примет вид $K^2 \phi = |\hat{S}|^2 p$. Результат совпадает с (8.37) с $K^2 = |\hat{S}|^2 \kappa^{-2}$, и, таким образом, этот метод можно эффективно применять.

В дальнейшем полученные результаты применяются к построению дисперсионного соотношения и к анализу точности вычисления силы в мультипольном приближении. В ограничении точности главную роль играет весовая функция частицы на сетке.

Задачи

11.12. Покажите, что мультипольное вычисление силы сохраняет импульс, если при вычислении плотности и силы используется одинаковое число моментов [указание: подумайте, нельзя ли мультипольные вычисления записать в виде (8.22) и (8.23), чтобы применить результаты § 8.6].

11.13. Если в (11.35) сдерживаются все моменты, то, заменяя сумму на $\exp(i\kappa x)$, используйте (11.25) для получения (11.39). Аналогично в сумме в выражении (11.40) можно узнать полное разложение Тейлора S_0 в окрестности κ_p , т. е.

$$S(\kappa_p) = S_0(\kappa_p - \kappa), \quad (11.44)$$

$$S(-p\kappa_a) = S_0(-p\kappa_a), \quad (11.45)$$

$$S(\kappa_p) = \begin{cases} 1, & \text{если } p=0, \\ 0, & \text{если } p \neq 0. \end{cases} \quad (11.46)$$

11.14. Получите (11.40), рассматривая каждый член в (11.34) как l -ю производную $S_0(\kappa)$.

11.15. Получите выражение (11.43).

11.16. Обобщите формулы (11.32)—(11.35) и (11.38)—(11.43) на случай двух и трех измерений. Например, в двухмерном случае (11.43) принимает вид

$$S(\kappa) = \operatorname{dif}(9_x/2) \operatorname{dif}(9_y/2) - \operatorname{dif} 9_y \operatorname{dif}(29_x)(\cos 9_x - \operatorname{dif} 9_x) - \operatorname{dif} 9_x \operatorname{dif}(29_y)(\cos 9_y - \operatorname{dif} 9_y),$$

где $9_x = \kappa_x \Delta x / 2$; $9_y = \kappa_y \Delta y / 2$.

11.6. ПОЛНАЯ ТОЧНОСТЬ ВЫЧИСЛЕНИЯ СИЛЫ; ДИСПЕРСИОННОЕ СООТНОШЕНИЕ

Дисперсионное соотношение демонстрирует влияние численных эффектов на плазменные волны и проясняет вклад каждого шага вычисления силы. Опираясь на результаты § 11.5, приступим к выводу дисперсионного соотношения для незамагниченной плазмы:

$$\varepsilon = 1 + \frac{\hat{S}^2}{\kappa^2} \mathbf{x} \cdot \sum \mathbf{k}_p S^2(\mathbf{k}_p) \chi(\mathbf{k}_p, \omega), \quad (11.47)$$

что совпадает с (9.35a), если записать $K^{-2} = \hat{S}^2/\kappa^2$ и убрать $\chi(\mathbf{k}_p) = \chi(\mathbf{k})$ из-под знака суммы.

Поскольку интегрирование по времени не связано с мультипольным вычислением силы, можно игнорировать сложности, связанные с конечностью шага по времени. Из (9.35б) имеем

$$\varepsilon = 1 + \frac{\hat{S}^2}{\kappa^2} \mathbf{x} \cdot \sum S^2(\mathbf{k}_p) \int \frac{\partial f_0}{\partial v} \frac{dv}{\omega + i0 - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{v}}. \quad (11.48)$$

Кроме того, при проведении количественных оценок ограничимся одномерным случаем. Наши рассуждения и дисперсионное соотношение эквивалентны содержащимся в работе [Chen, Okuda, 1975].

Не следует смешивать величину \hat{S} , именуемую в литературе формой частицы («частица гауссовой формы»), и весовую функцию S . То, что \hat{S} и S играют разную роль, отчетливо

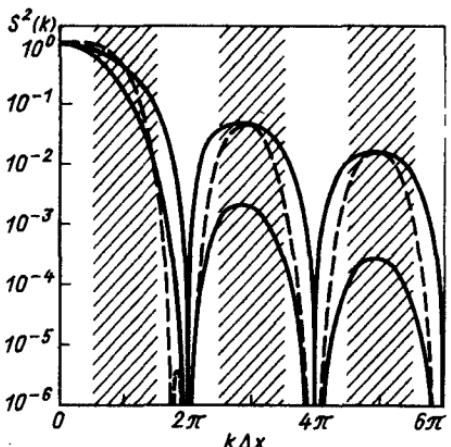


Рис. 11.6. Зависимость весовых функций $S^2(k)$ от $k\Delta x/2\pi$ для NGP и линейного взвешивания (верхняя и нижняя сплошные кривые) и для сокращенного дипольного взвешивания (штриховая кривая). Штриховкой обозначены интервалы $k\Delta x$, на которые оказывает влияние сглаживание на сетке с длинами волн большие $4\Delta x$. Тем самым важно сравнивать незаштрихованные интервалы, где фильтрация сеточных величин не может селективно подавить погрешности, связанные с большими значениями S^2 при $k\Delta x$ вблизи $2\pi, 4\pi\dots$, без изменения физической силы (потери разрешения)

видно из дисперсионного соотношения (11.47); $\hat{S}^2(x)$ появляется вне суммы по p , представляет собой просто произвольный сглаживающий множитель (в первой зоне Бриллюэна $|k\Delta x| < \pi$) и используется в любом методе (в ES1 это множитель SM^2). Следовательно, относительная точность мультипольного разложения определяется $S^2(k)$.

Мы знаем из (11.39), что если удерживаются все моменты, то ошибок наложения не возникает. Тем самым только один член суммы в выражении для дисперсионной функции отличен от нуля, и то же самое возникает при вычислении силы без сетки (11.1) и (11.2):

$$\epsilon_\infty(k, \omega) = 1 + \omega_p^2 \frac{\hat{S}(x)}{x} \int dv \frac{\partial f_0(v)/\partial v}{\omega - \omega v}. \quad (11.49)$$

Это — диэлектрическая проницаемость при нулевом шаге сетки; следовательно, при $L \rightarrow \infty$ мультипольное разложение действительно не зависит от сетки и из-за наложения не возникает никаких нефизических результатов. На практике, однако, можно удержать самое большее октупольные моменты, так что важно сравнить дипольные и октупольные члены.

Функция $S^2(k)$ в первой зоне Бриллюэна при сокращенном дипольном разложении почти постоянна, а при линейном взвешивании спадает более быстро — как $[(\sin \theta)/\theta]^2$. Разумеется, в первой зоне Бриллюэна можно произвольным образом переопределить \hat{S} , так что характер изменения этой функции может быть каким угодно.

В высших зонах Бриллюэна, тем не менее, нельзя независимо контролировать $\hat{S}^2(x)S^2(k)$ (незаштрихованные области при $k\Delta x > \pi$, рис. 11.6). Для SDPE при $k\Delta x \lesssim 1$

$$\hat{S}^2(k_p) = \left(\frac{k\Delta x}{2\pi p}\right)^4 \left[1 - \frac{k\Delta x}{2} \left(p\pi + \frac{2}{p\pi}\right)\right]^2, \quad p \neq 0, \quad (11.50)$$

тогда как при использовании стандартных линейного (CIC) и квадратичного (QS) сплайнов имеем

$$S^2(\kappa_p) = \left[\frac{\sin \kappa_p \Delta x / 2}{\kappa_p \Delta x / 2} \right]^{2M}, \quad M = \begin{cases} 2; & \text{CIC,} \\ 3; & \text{QS,} \end{cases} \quad (11.51)$$

$$S^2(\kappa_p) \approx \left(\frac{\kappa \Delta x}{2\pi p} \right)^{2M}, \quad \kappa \Delta x \ll 1, \quad p \neq 0. \quad (11.52)$$

При $\kappa \Delta x / 2 \ll (p\pi + 2/p\pi)^{-1}$, т. е. при длинах волн, больших примерно 10 ячеек, эффекты наложения в SDPE и CIC одинаковы. В противоположном пределе $S^2(\kappa_p)$ для CIC ведет себя как (11.52), тогда как в SDPE наложение больше и ведет себя как $S^2(\kappa_p) \approx (\kappa \Delta x / 2\pi p)^2$ — это указывает на то, что при $\kappa \Delta x / 2 \sim 1$ наложение для дипольного разложения того же порядка, что и в методе NGP, где $S^2(\kappa_p) = (\kappa \Delta x / 2\pi p)^2$. Причины медленного ($1/p^2$) уменьшения заключаются в разрывах силы на плоскостях посредине ячеек.

В квадрупольной схеме QPE наложение меньше 1% почти для всей показанной на рис. 11.6 области. Это достижение требует существенного дополнительного увеличения памяти и объема вычислений. Следовательно, QPE следует сравнивать со схемами взвешивания частиц более высокого порядка, такими, например, как квадратичный сплайн QS, для которого в (11.51) и (11.52) $M=3$. При $p=1$ для QS наложение больше и достигает примерно 0,067 при $\kappa \Delta x = \pi$; это составляет примерно 0,4 от CIC — немного меньше, чем для DPE (при $p=-1$), и примерно в 3 раза больше, чем для QPE; при других значениях p наложения для QS меньше 10^{-4} и максимумы меньше, чем для других методов.

В работе [Okuda, Cheng, 1981] показано, что даже квадратичные сплайны и мультипольные схемы высшего порядка численно неустойчивы при малых $\lambda_D/\Delta x$ (мы это демонстрировали для взвешивания низкого порядка). Там же обнаружено, что при $\lambda_D/\Delta x < 0,1$ у квадратичных и кубических сплайнов устойчивость лучше, чем у октупольного разложения. Авторы связали это с большей гладкостью, допускаемой сплайнами, что согласуется и с нашей точкой зрения. При $\lambda_D/\Delta x = 0,01$ только кубические сплайны допускают приемлемую численную устойчивость.

На рис. 11.7 и 11.8 сравниваются наше улучшенное сокращенное дипольное разложение (11.20) и двухмерное билинейное 2d-взвешивание. Стандартный метод SDPE не столь хорош. Для билинейного взвешивания наложение возникает в основном вблизи осей κ_x и κ_y , где функция S^2 максимальна. Величина S^2 для улучшенного метода в этой области по меньшей мере того же порядка или даже больше.

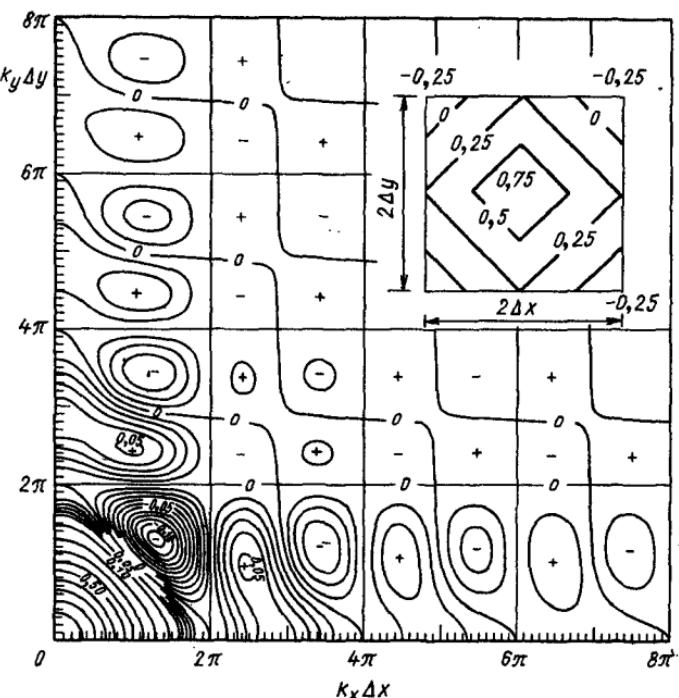


Рис. 11.7. Контуры $S(x, y)$ и $S^2(k_x, k_y)$ для улучшенной сокращенной дипольной схемы (11.20). Вне указанной области $S(x, y)=0$. Хотя функция $S(x, y)$ разрывна на сторонах квадрата, функция $S^2(k_x, k_y)$ вне основной зоны Бриллюэна ведет себя намного лучше, чем в схеме SDPE

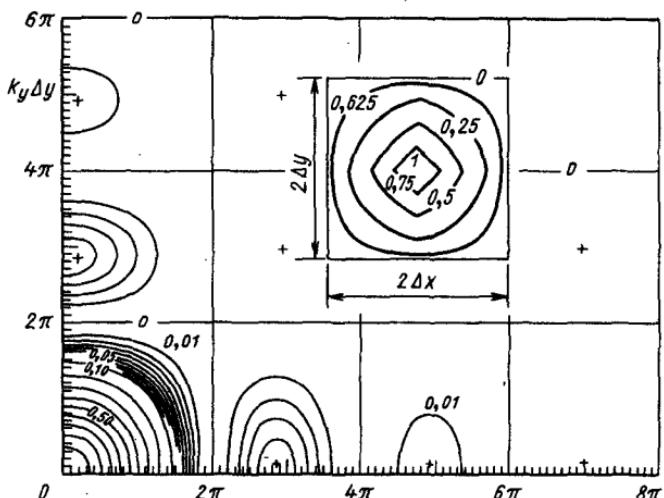


Рис. 11.8. Контуры $S(x, y)$ и $S^2(k_x, k_y)$ для обычной 2d-билинейной схемы («взвешивание по площади», «разделение заряда»), которая представляет собой сочетание дипольной и ху-квадрупольной схемы (см. задачу 11.8). Функция $S(x, y)$ всюду непрерывна и равна нулю вне указанного квадрата

Много ценных исследований было сделано при помощи мультипольных кодов. Мы описали мультипольный метод как в его первоначальном виде, так и в «сокращенной» форме. Увидели, что и другие алгоритмы можно интерпретировать как мультипольные. Были получены дипольные схемы с более гладкими пространственными вариациями; два таких усовершенствования совпадают со знакомыми одномерным линейным и двухмерным билинейным (квадратичным) взвешиванием. Проанализированы способы вычисления силы, приведенные в гл. 8. Ясно, что если при взвешивании частицы на сетке возникают ошибки наложения, то их нельзя убрать применением к сеточным величинам ρ и ϕ сглаживающего множителя [обычно $\hat{S}(\kappa) = \exp(-\kappa^2 a^2 / 2)$ и $a \approx \Delta x$].

При помощи аналитических методов мы сравнивали точность опубликованной сокращенной дипольной схемы, ее предложенной модификации и стандартных линейных или билинейных схем (СЛС, квадратичное взвешивание).

Практически используемые алгоритмы представляют собой компромисс между пространственным разрешением и отсутствием ошибок наложения, с одной стороны, и необходимым объемом вычислений и памяти, приспособленностью к более общим граничным условиям, криволинейным координатам и т. д., с другой стороны.

В любом случае в том виде, в котором мультипольный метод описан в литературе, он представляет собой не более чем представление поля сил в виде оборванного разложения Тейлора вблизи ближайшего узла сетки и аналогичную процедуру получения плотности заряда из координат частиц. Разложение Тейлора (мультипольный метод) или интерполяция Лагранжа (сокращенный метод) точны в основном вблизи узлов сетки, и за это приходится платить потерей точности в других местах. Если требуется гладкое и точное представление во всем интервале, то при тех же пространственном разрешении и объеме вычислений сплайны предпочтительнее. Сплайны обеспечивают систематический переход к высшим порядкам и также могут быть интерпретированы в терминах мультиполей. Не влияя на физический смысл, точность можно улучшить, изменив математику. В конкретных приложениях, возможно, существуют более оптимальные способы взвешивания. Изученные в этих главах методы могут оказаться полезными при их анализе.

КИНЕТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ФЛУКТУАЦИЙ И ШУМА; СТОЛКНОВЕНИЯ

12.1. ВВЕДЕНИЕ

Эта глава посвящена аккуратной теории флуктуаций, шума и столкновений и ее применению к численным моделям. Аналитическими методами точно описывается пространственная и временная дискретизация, в пределе малых пространственно-временных шагов результаты просто и корректно согласуются со стандартными результатами кинетической теории плазмы. Предметом исследования будет также влияние коллективных эффектов на флуктуации распределения в том случае, когда частицы случайным образом распределены в фазовом пространстве. Это представляет интерес для теоретических и эмпирических исследований в связи с необходимостью понять, каким же образом численное моделирование может описывать процессы типа переноса в плазме.

При численном моделировании плазмы флуктуации представляют интерес, поскольку они возникают при моделировании бесстолкновительных явлений. Тем не менее то, что для одного — шум, для другого является сигналом, поэтому численное моделирование применялось как метод исследования флуктуаций и других процессов типа переноса частиц в плазме. Измерения спектров флуктуаций использовались также для проверки новых программ. Температурные флуктуации изменились и теоретически анализировались как в бессеточных моделях плазмы, так и в рассматриваемых здесь моделях, использующих пространственную сетку для описания взаимодействия частиц.

Частицы можно рассматривать как лагранжевые метки, случайно распределенные во власовской жидкости и движущиеся вместе с ней через фазовое пространство [Morse, Nielson, 1969]. Эта стохастическая точка зрения явно учитывает аспект случайности в моделях частиц в ячейке, и настоящая глава содержит информацию о статистике, т. е. дисперсии и корреляции плотности, которые определяются интегрированием методом Монте-Карло по фазовому пространству. Тем не менее, так как частицы влияют друг на друга через самосогласованное поле, они не являются независимыми метками в фазовой жидкости, и коллективные эффекты влияют на статистику. Используемые при этом аналитические методы аналогичны применяемым в обычной кинетической теории плазмы.

Чтобы облегчить сравнение, результаты по возможности приближены по форме к стандартным результатам кинети-

ческой теории плазмы. По-видимому, качественное отличие возникает при слишком грубой пространственной и временной дискретизации, что часто случается при недостатке памяти и машинного времени.

Обычный подход использует моменты уравнения Лиувилля или формализм Климонтовича [Rostoker, 1961; Rostoker, Rosenbluth, 1960; Klimontovich, 1967; Dawson, Nakayama, 1966]. Однако нам представляется более простым и общим другим способом. Причин для этого несколько. Некоторые схемы численного интегрирования по времени соответствуют дифференциальным уравнениям движения третьего и более высоких порядков, и в этом случае для описания состояния системы (N частиц в трех измерениях) необходимо вместо $6N$ -мерного фазового пространства использовать пространство размерности $9N$ или больше. Более того, некоторые схемы интегрирования не сохраняют меру, т. е. объем фазового пространства при движении частиц не сохраняется. Все это, с одной стороны, затрудняет использование обычного подхода кинетической теории. С другой стороны, проще и информативнее с точки зрения физической интуиции к желаемым результатам приводит путь, близкий по духу к методу Хаббарда [Hubbard, 1961], который к тому же приспособлен к плазменным системам с измененной динамикой, таким как численные модели.

В этой главе учитываются только электростатистические поля — даже в электромагнитных моделях флуктуации плотности и дебаевская экранировка определяются в основном продольными полями. Глава построена следующим образом. В § 12.2 результаты в гл. 8 и 10 применяются к анализу простого примера: экранировки Дебая. Спектр флуктуаций получен в § 12.3, и в различных пределах исследованы его физические и нефизические компоненты. В § 12.5 изучаются диффузия и трение в пространстве скоростей, причем учитывается также поляризация пробной частицей. Полученные результаты используются для вывода оператора столкновений, который в пределе $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$ переходит в знакомый оператор Балеску — Ленарда. Наконец, законы сохранения и H -теорема обсуждаются в § 12.6.

12.2. ПРОБНЫЙ ЗАРЯД И ДЕБАЕВСКОЕ ЭКРАНИРОВАНИЕ

Вычислим сначала линейный отклик моделируемой плазмы на возмущение заряда и рассмотрим экранировку Дебая.

Если устойчивая плазма с постоянным нейтрализующим фоном возмущена распределенным по сетке внешним зарядом ρ_e , то полное возмущение плотности заряда равно

$$\rho(\mathbf{k}, \omega) = \rho_e(\mathbf{k}, \omega) + \sum_{\mathbf{p}} S(\mathbf{k}_p) q_n(\mathbf{k}_p, \omega) =$$

$$= \rho_e(\mathbf{k}, \omega) - \sum_{\mathbf{p}} S(\mathbf{k}_p) \chi(\mathbf{k}_p, \omega) i \mathbf{k}_p \times \\ \times [-i \mathbf{x}(\mathbf{k}_p) S(-\mathbf{k}_p) \phi(\mathbf{k}_p, \omega)]. \quad (12.1)$$

Это выражение получено аналогично задаче 9.9 с использованием формул (8.65), (9.11) и (9.14а). Используя условие периодичности $\phi(\mathbf{k}_p, \omega) = \phi(\mathbf{k}, \omega)$ для того, чтобы вынести ϕ из-под знака суммы, а также уравнение Пуассона (8.71), получаем

$$\varepsilon(\mathbf{k}, \omega) \rho(\mathbf{k}, \omega) = \rho_e(\mathbf{k}, \omega) \quad (12.2)$$

$$\phi(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\rho_e(\mathbf{k}, \omega)}{K^2(\mathbf{k}) \varepsilon(\mathbf{k}, \omega)}, \quad (12.3)$$

где, как и в § 9.5, диэлектрическая функция имеет вид

$$\varepsilon(\mathbf{k}, \omega) = 1 + K^{-2}(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{x}(\mathbf{k}_p) \cdot \mathbf{k}_p S^2(\mathbf{k}_p) \chi(\mathbf{k}_p, \omega) = \\ = 1 + \frac{\omega_p^2}{K^2} \sum_{\mathbf{p}} S^2 \mathbf{x} \int d\mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}} \frac{\Delta t}{2} \operatorname{ctg}(\omega + i0 - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{v}) \frac{\Delta t}{2}. \quad (12.4)$$

В некоторых случаях можно вычислить $K^2 \varepsilon$ в замкнутом виде. Из (9.16) находим, что для стационарного пробного заряда и максвелловского распределения по скоростям

$$\chi(\mathbf{k}_p, \omega) = \omega_p^2 \left(\frac{1}{k_p v_t^2} - \frac{\Delta t^2}{12} \right), \quad (12.5)$$

где учтено, что $\omega \ll k_p v_t \lesssim \Delta t^{-1}$, это условие обсуждается ниже. Сумму по \mathbf{p} можно вычислить, используя формулу из работы [Abramowitz, Stegun, 1964]. Например, при линейном взвешивании в одномерной гамильтоновой модели

$$K^2 \varepsilon = K^2 + \omega_p^2 \sum_{\mathbf{p}} k_p^2 S^2 \left(\frac{1}{k_p^2 v_t^2} - \frac{\Delta t^2}{12} \right) = \left\{ 1 - \frac{1}{12} \left[(\omega_p \Delta t)^2 + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{2 \Delta x^2}{\lambda_D^2} \right] \right\} K^2 + \frac{1}{\lambda_D^2}, \quad (12.6)$$

где $\lambda_D \equiv v_t / \omega_p$ — дебаевский радиус и использованы выражение (10.32б) и производная от (8.91). (Теперь видно, что членом Δt^2 можно пренебречь, так как если он сравним с Δx^2 , то приближение $k_p v_t \Delta t \leq 1$ нарушается для слишком малых $|p|$ и сходимость становится плохой.) В трехмерном случае сумма $\sum S^2$ превращается в произведение сумм по каждой компоненте в отдельности.

Пространственное изменение потенциала Дебая определяется нулями $\pm ik$ в знаменателе в (12.3):

$$\left(\frac{2}{\Delta x} \operatorname{sh} \frac{i\ell \Delta x}{2} \right)^{-2} = \lambda_D^2 - \frac{1}{6} \Delta x^2. \quad (12.7)$$

При малых Δx , Δt вновь получается правильная экранировка. Если, тем не менее, λ_D становится меньше Δx , длина экранирования оказывается сравнимой с Δx . Более того, ниже мы покажем, что при $\lambda_D^2 < \Delta x^2/6$ потенциал, уменьшаясь, может сменить знак.

В простом случае одного внешнего заряда q в точке, когда $X_j=0$, можно совершить обратное преобразование Фурье. Заменой переменной $\xi = \exp(i\ell \Delta x)$ интеграл Фурье превращается в интеграл по контуру $|\xi|=1$ с одним полюсом внутри и одним снаружи. В результате

$$\phi_j = q \frac{\lambda_D}{2} \xi_0^{j|j|} \left(1 + \frac{\Delta x^2}{12\lambda_D^2} \right)^{-1/2}, \quad (12.8)$$

где

$$\xi_0 = \frac{\lambda_D^2 - \Delta x^2/6}{\lambda_D^2 + \Delta x^2/3 + \Delta x(\lambda_D^2 + \Delta x^2/12)^{1/2}} \quad (12.9)$$

— точка расположения полюса внутри единичной окружности. При $\Delta x/\lambda_D \rightarrow 0$ $\xi_0^{j|j|} \rightarrow \exp(-|X_j|/\lambda_D)$ и тем самым, как и следовало ожидать,

$$\phi_j = q \frac{\lambda_D}{2} e^{-|X_j|/\lambda_D}. \quad (12.10)$$

Тем не менее, если $6\lambda_D^2/\Delta x^2$ устремить к единице, то $\xi_0 \rightarrow 0$ и $\phi_j = q\lambda_D/\sqrt{6}$ при $j=0$ и $\phi_j=0$ во всех других точках. Можно сказать, что длина экранирования равна Δx . При $6\lambda_D^2/\Delta x^2 < 1$ потенциал, уменьшаясь, меняет знак от ячейки к ячейке. Если $\lambda_D/\Delta x$ очень мало, то

$$\phi_j = \sqrt{3} q \frac{\lambda_D^2}{\Delta x} \xi_0^{j|j|} \quad (12.11)$$

и $\xi_0 = -(2 + \sqrt{3})^{-1}$, что указывает на осциллирующий спад потенциала и уменьшение величины $\phi_0/(q\lambda_D)$ в $2\sqrt{3}\lambda_D/\Delta x$ раз; оба этих свойства были отмечены и для облачной модели плазмы без сетки [Langdon, Birdsall, 1970; Okuda, Birdsall, 1970]. Эффективный «радиус» облака при этом примерно равен Δx . В системе конечных размеров интеграл Фурье заменяется суммой и если мода $\ell=0$ отсутствует, то ϕ_j отличается от (12.8) или (12.10) на константу и вместо нуля при больших $|X_j|$ стремится к отрицательной величине.

12.3. ФЛУКТУАЦИИ

Здесь мы получим спектр флюктуаций сначала для нескоррелированных частиц, затем с учетом коллективных эффектов и исследуем различные предельные случаи.

Спектр. В нулевом приближении частицы движутся по прямым линиям независимо друг от друга. Следовательно, координата нулевого порядка i -й частицы в момент времени $t_n \equiv n\Delta t$ равна

$$x_{in}^{(0)} = x_{i0} + v_i t_n, \quad (12.12)$$

а преобразование Фурье плотности частиц имеет вид

$$n^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) = 2\pi \sum_i \exp(-ik \cdot x_{i0}) \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_i, \omega_g), \quad (12.13)$$

где $\omega_g \equiv 2\pi/\Delta t$ и введена периодическая гребенка из δ -функций

$$\delta(\omega, \omega_g) \equiv \sum_{q=-\infty}^{\infty} \delta(\omega - q\omega_g), \quad (12.14)$$

которая заменяет возникающую при непрерывном преобразовании обычную δ -функцию.

Рассмотрим теперь пример системы, для которой средние величины не зависят от того, где и когда они вычисляются, т. е. однородный и стационарный ансамбль. Это означает, что среднее от полного заряда должно равняться нулю, но среднее от произведений зарядов может быть отлично от нуля. Вычислим среднее по ансамблю такого произведения:

$$\langle \rho(\mathbf{k}, \omega) \rho(\mathbf{k}', \omega') \rangle.$$

Отсюда легко можно найти флюктуации других величин.

Рассматривая сначала взаимодействующие частицы, подставим (12.13) в (8.65). При усреднении по ансамблю используем следующие утверждения: координаты и скорости частиц нулевого порядка независимы, n_0 равно средней плотности частиц и распределение по скоростям $f_0(\mathbf{v})$ нормировано на единицу. В двойной сумме по частицам члены, соответствующие парам различных частиц, уничтожают члены, связанные со средней нейтрализующей плотностью заряда других сортов частиц. В оставшихся членах

$$\langle g(x_{i0}, v_i) \rangle \rightarrow n_0 \int d\mathbf{x} d\mathbf{v} f_0(\mathbf{v}) g(\mathbf{x}, \mathbf{v}).$$

В итоге получаем результат вида (см. задачу 12.1)

$$\begin{aligned} & \langle \rho^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) \rho^{(0)}(\mathbf{k}', \omega') \rangle = \\ & = (\rho^2)_{\mathbf{k}, \omega} (2\pi)^4 \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}', \mathbf{k}_g) \delta(\omega + \omega', \omega_g), \end{aligned} \quad (12.15)$$

где функция $\delta(\mathbf{k}, \mathbf{k}_g)$ определена аналогично (12.14). Выражение (12.15) определяет теперь спектр флуктуаций

$$(\rho^2)_{\mathbf{k}, \omega}^{(0)} = \sum_{\mathbf{p}, q} q^2 S^2(\mathbf{k}_p) (n^2)_{\mathbf{k}_p, \omega_q}^{(0)}, \quad (12.16)$$

где $\omega_q = \omega - q\omega_g$ и

$$(n^2)_{\mathbf{k}, \omega}^{(0)} = 2\pi n_0 \int d\mathbf{v} f_0(\mathbf{v}) \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) \quad (12.17)$$

— спектральная плотность числа частиц для случая невзаимодействующих частиц и $\Delta t = 0$. Заметим, что спектр ρ , так же как и спектры других сеточных величин, периодичен по \mathbf{k} и ω .

Из-за флуктуаций плотности возникают поля, которые слегка отклоняют частицы и изменяют плотность. Выберем отклик на возмущения плотности так же, как (12.3), — в виде асимптотического по времени отклика в линеаризованном приближении Власова. Плотность заряда дается теперь формулой (12.2), где ρ_e заменяется на $\rho^{(0)}$, — отличие от истинной плотности оказывается более высокого порядка малости, чем наши окончательные выражения [Hubbard, 1961]. Построим среднее:

$$\langle \epsilon(\mathbf{k}, \omega) \epsilon(\mathbf{k}', \omega') \langle \rho(\mathbf{k}', \omega') \rho(\mathbf{k}, \omega) \rangle \rangle = \langle \rho^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) \rho^{(0)}(\mathbf{k}', \omega') \rangle.$$

Используя далее (12.15) и заменяя $\epsilon(\mathbf{k}', \omega')$ на $\epsilon(-\mathbf{k}_p, -\omega_q) = \epsilon(\mathbf{k}, \omega)^*$ (см. задачу 12.2), получаем

$$(\rho^2)_{\mathbf{k}, \omega} = \frac{2\pi\rho_0 q}{|\epsilon(\mathbf{k}, \omega)|^2} \sum_{\mathbf{p}} S^2(\mathbf{k}_p) \int d\mathbf{v} f_0(\mathbf{v}) \delta(\omega - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{v}, \omega_g), \quad (12.18)$$

что является основным результатом этого параграфа. Поскольку учтено только прямолинейное движение, это выражение подходит для большинства алгоритмов интегрирования, даже если изменяется вид ϵ . Обобщение на случай нескольких сортов частиц тривиально.

Флуктуации других величин очевидным образом связаны с полученными. Например, спектральная плотность энергии в гамильтоновой модели равна

$$\left(\frac{1}{2} \rho \phi \right)_{\mathbf{k}, \omega} = \frac{(\rho^2)_{\mathbf{k}, \omega}}{2K^2}. \quad (12.19)$$

Это выражение пригодно даже для некулоновских законов взаимодействия (см. гл. 10). Условие нормировки и выбора знака дает (см. задачу 12.3)

$$\left\langle \frac{1}{2} \rho_{j,n} \phi_{j',n'} \right\rangle = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{d\omega}{2\pi} \left(\frac{1}{2} \rho \phi \right)_{\mathbf{k}, \omega} \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{X}_j - \mathbf{X}_{j'}) - i\omega(t_n - t_{n'})]. \quad (12.20)$$

Зависимость только от $\mathbf{X}_j - \mathbf{X}_{j'}$ и $t_n - t_{n'}$ возникла из-за вида

выражения (12.15) и тем самым отражает стационарность ансамбля. Для случая одного и двух измерений необходимо очевидным образом изменить степень 2π в нормировке интеграла \mathbf{k} .

Предельные случаи. Если один из параметров велик, можно аналитически получить дополнительную информацию. В общем случае эффективные методы вычисления кратных сумм обсуждались в работе [Langdon, 1976].

1) **Флуктуационно-диссипативная теорема.** Спектр (12.19) для гамильтоновых моделей гл. 10 можно иногда записать в виде флуктуационно-диссипативной теоремы:

$$\left(\frac{1}{2}\rho\Phi\right)_{\mathbf{k},\omega} = -\frac{T}{\omega} \text{Im} \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{k},\omega)}, \quad (12.21)$$

где T — температура в энергетических единицах. Для обобщения результатов задачи 9.2 применим к (12.4) формулу Племеля:

$$\text{Im } \varepsilon(\mathbf{k}, \omega + i0) = -\pi \frac{\omega_p^2}{K^2} \sum_{\mathbf{p}, q} S^2 \int d\mathbf{v} \mathbf{k}_p \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}} \delta(\omega - q\omega_g - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{v}). \quad (12.22)$$

Для того чтобы получить выражение (12.21), положим $\Delta t = 0$ (сумма по q пропадает); предположим, что f_0 — распределение Максвелла без дрейфа относительно сетки и у всех сортов частиц одинаковая температура. Теперь можно записать выражение

$$\text{Im } \varepsilon = \frac{\omega}{K^2 T} 2\pi \rho_0 q \sum_{\mathbf{p}} S^2 \int d\mathbf{v} f_0(\mathbf{v}) \delta(\omega - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{v}), \quad (12.23)$$

в котором мы узнаем числитель (12.18). Отсюда немедленно следует флуктуационно-диссипативный результат (12.21). Возможно, что при $\Delta t \neq 0$ существует выражение, похожее на (12.21), но ω должно быть заменено на некоторое выражение с периодом ω_g .

2) **Пространственный спектр.** Обычно измеряется не полный, зависящий от \mathbf{k} , ω , а пространственный спектр. Для его получения можно аналитически проинтегрировать (12.21):

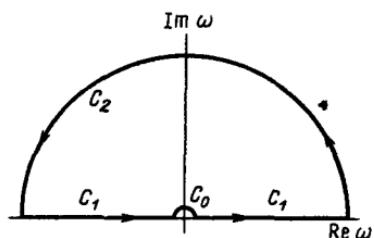
$$\left(\frac{1}{2}\rho\Phi\right)_{\mathbf{k}} \equiv \int \frac{d\omega}{2\pi} \left(\frac{1}{2}\rho\Phi\right)_{\mathbf{k},\omega} = -T \int \frac{d\omega}{2\pi\omega} \text{Im} \frac{1}{\varepsilon}, \quad (12.24)$$

взяв мнимую часть от интеграла по замкнутому контуру, изображенному на рис. 12.1,

$$-T \oint \frac{d\omega}{2\pi\omega} \left(\frac{1}{\varepsilon} - 1\right) = 0,$$

подынтегральное выражение которого аналитично в верхней полуплоскости (при сделанных предположениях у ε там корней

Рис. 12.1. Контур, использованный при вычислении интеграла (12.24) для получения пространственного спектра плотности энергии. Радиус большой полуокружности устремляется к бесконечности



нет, см. гл. 8 и 10) и стремится к нулю при $|\omega| \rightarrow \infty$. Интеграл по C_1 (действительная ось за исключением начала координат) равен правой части (12.24). Из интеграла по бесконечно малой полуокружности C_0 получаем

$$\left(\frac{1}{2} \rho \varphi \right)_k = \frac{T}{2} \left(1 - \frac{1}{\varepsilon(k, \omega)} \right) = \quad (12.25a)$$

$$= \frac{T}{2} \left(\frac{\sum S^2}{\sum S^2 + K^2 \lambda_D^2} \right), \quad (12.25b)$$

где $\varepsilon(k, \omega)$ определено при помощи (12.6). В конечной системе это равно энергии, приходящейся на одну Фурье-гармонику [напомним, что k принимает как положительные, так и отрицательные значения, см. (12.20) и § 8.4 и 8.7]. При $\Delta x \rightarrow 0$ и постоянном k выражение (12.25b) переходит в хорошо известный результат.

В случае точечных частиц («листов» в одномерном случае) экранированный потенциал и пространственный спектр имеют тот же вид. Так как последний легче измерять в компьютерном «эксперименте», может оказаться более предпочтительным (равно как и достаточным) при исследовании кинетических свойств моделируемой плазмы измерять только пространственный спектр. Сравнивая (12.6) и (12.25b), видим, что знаменатели в выражениях для потенциала Дебая и пространственного спектра одинаковы (вклад коллективных эффектов), но имеется некоторое различие в чисителях (источники). Тем самым при $\lambda_D \lesssim \Delta x$ это не одно и то же.

Получить выражение для $\varepsilon(k, 0)$ можно, аналитически вычислив, так же как в § 12.2, сумму по p ; можно также аналитически совершить обратное преобразование Фурье и найти пространственную корреляционную функцию и полную плотность тепловой энергии поля. Предел $\lambda_D / \Delta x \rightarrow 0$ тривиален: разные ячейки не коррелированы, и энергия поля на одну ячейку равна $T/2$ (см. задачу 12.4).

3) Высокочастотный шум при $\Delta x \neq 0, \Delta t = 0$. Основной результат здесь заключается в том, что на очень больших частотах спектр спадает медленно — как отрицательная степень ω , вместо того чтобы уменьшаться быстрее — пропорционально $f_0(\omega/k)$.

Высокие частоты связаны с частицами, пересекающими сетку с частотой, примерной равной $\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_g \cdot \mathbf{v}$.

Полагая $\lambda_p \gtrsim \Delta x / 2\pi$, имеем $\mathbf{k}_g \mathbf{v}_t \gtrsim \omega_p$, так что $\epsilon \approx 1$ и в одномерном случае

$$(\rho^2)_{k, \omega} \approx 2\pi \rho_0 q \sum_p \frac{S^2}{|\mathbf{k}_p|} f_0 \left(\frac{\omega}{\omega_p} \right). \quad (12.26)$$

В двух или трех измерениях в отсутствие пространственной сетки частицы дают вклад во флуктуации для всех частот $\leq |\mathbf{k}| |\mathbf{v}|$, но не больше. На частотах $\omega > \mathbf{k}_g v_t$ возникает вклад от всех чисел $|p| \gtrsim p_0 \equiv \omega / (\mathbf{k}_g v_t)$, дающих эффект наложения частот. Полагая $f_0(v) \approx 1/2$ при $|v| < v_t$ и $f_0 \approx 0$ в противоположном случае, можно, аппроксимировав сумму интегралом, оценить уровень флуктуаций при одномерном линейном взвешивании:

$$\begin{aligned} (\rho^2)_{k, \omega} &\approx 2\pi \rho_0 q \left(\frac{2}{\Delta x} \sin \frac{\ell \Delta x}{2} \right)^4 \sum_{|p| > p_0} \frac{1}{2v_t |\mathbf{k}_p|^3} \approx \\ &\approx \frac{\pi}{2} \frac{\rho_0 q}{\mathbf{k}_g v_t} \left(\frac{\omega}{\mathbf{k}_g v_t} \right)^{-4}. \end{aligned} \quad (12.27)$$

При взвешивании по методу «ближайший угол сетки» шумы спадают как ω^{-2} . Графики спектров и сравнение с измерениями, сделанными при моделировании, можно найти в работе [Okuda, 1972].

При электростатическом моделировании высокочастотный шум не так уж вреден — он возникает на высоких частотах и частицы не могут сильно реагировать на такие нерезонансные поля. (В электромагнитных моделях высокочастотный шум приводит к осложнениям, см. гл. 15.) Тем не менее при конечных Δt , как мы увидим дальше, картина меняется в худшую сторону.

4) **Высокочастотный шум при $\Delta x = 0, \Delta t \neq 0$.** При конечном шаге по времени высокочастотные шумы действуют так же, как и низкочастотные. На это указывает сумма по q (12.18). Мы увидим также, что при больших Δt спектр имеет тенденцию к «уплощению», т. е. зависимость от ω становится более слабой и нарушается баланс между трением и диффузией в пространстве скоростей, который в тепловом равновесии сохраняет энергию.

При $\Delta x = 0$ и максвелловском распределении по скоростям спектр (12.18) принимает вид

$$(\rho^2)_{k, \omega} = \frac{\sqrt{2\pi} \rho_0 q}{|\mathbf{v}|^2 |\mathbf{k}| v_t} \sum_q \exp \left(\frac{-\omega_q^2}{2k^2 v_t^2} \right). \quad (12.28)$$

При $\omega_p = \Delta t \ll 1$ конечное Δt не меняет спектра, если $k v_t \Delta t \lesssim 1$, но при $k v_t \Delta t \gtrsim 1$ одновременно дают вклад несколько членов в сумме по q . В этом случае удобно использовать выражение [Langdon, 1979 $_b$]

$$(\rho^2)_{\mathbf{k}, \omega} \approx \frac{\rho_0 q}{|\varepsilon|^2} \Delta t \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp \left[i \omega n \Delta t - \frac{1}{2} (\kappa v_i \Delta t)^2 n^2 \right], \quad (12.29)$$

которое можно получить из (12.28), применив формулу суммирования Пуассона [Lighthill, 1962]. Из результатов задачи 9.24 следует, что при $\kappa v_i \Delta t \gtrsim 1$ $\varepsilon \approx 1$ и выражение (12.29) указывает на примерную постоянность спектра (белый шум)

$$(\rho^2)_{\mathbf{k}, \omega} \approx \rho_0 q \Delta t \left[1 + 2 \exp \left(-\frac{1}{2} \kappa^2 v_i^2 \Delta t^2 \right) \cos \omega \Delta t \dots \right]. \quad (12.30)$$

В этом пределе тепловые частицы за один шаг по времени проходят заметную часть длины волны, и нет никакой корреляции между их вкладами в ρ для разных моментов времени, что и является белым шумом.

В случае, когда Δx и Δt конечны, белый шум может появиться, даже если $\kappa v_i \Delta t$ мало.

5) Δx и Δt не равны нулю. Обсуждаемый здесь основной результат — появление сеточного шума на низких частотах (12.27). Этот эффект наиболее сильно проявляется при $v_i \Delta t \gtrsim \Delta x$; мы рассмотрим случай $v_i \Delta t / \Delta x = 0,5$. Теперь $\omega_g / \kappa v_i = (\kappa_g / \kappa) (\Delta x / v_i \Delta t) > 4$, т. е. для максвелловского распределения и $\kappa < (v_i \Delta t)^{-1} < \kappa_g / 2$ и член с $p=0$ определяется выражением (12.18). Но $\kappa_g v_i \Delta t = \pi$, так что (12.29) описывает члены с $p \neq 0$. Это позволяет переписать источник в виде

$$(\rho^2)_{\mathbf{k}, \omega} = \frac{\rho_0 q}{|\varepsilon|^2} \left[\sum_p S^2 \left(\sqrt{2\pi} \sum_q \frac{\exp(-\omega_q^2 / 2\kappa_p^2 v_i^2)}{|\mathbf{k}_p| v_i} - \Delta t \right) + \Delta t \sum_p S^2 \right]. \quad (12.31)$$

Как только $p \gtrsim (\kappa_g v_i \Delta t)^{-1}$, первая сумма по p быстро сходится, тогда как вторую сумму можно вычислить аналитически так же, как это было сделано в § 12.2. При $v_i \Delta t / \Delta x = 0,5$ достаточно оставить только член с $q=0$. На частотах $\omega \lesssim \kappa v_i$, как и требовалось, доминирует первый член. На частотах больших, чем κv_i и ω_r , белый шум подавляет этот физический член:

$$(\rho^2)_{\mathbf{k}, \omega} \approx \rho_0 q \Delta t \sum_{p \neq 0} S^2. \quad (12.32)$$

Для одномерного линейного взвешивания выражение (12.32) пропорционально на больших длинах волн $(\kappa \Delta x)^4$. Для более коротких волн, $(v_i \Delta t)^{-1} < \kappa < \kappa_g / 2$, используем (12.29) для любых p и в одномерном случае на всех частотах получаем

$$(\rho^2)_{\mathbf{k}, \omega} \approx \rho_0 q \Delta t \left(1 - \frac{2}{3} \sin^2 \frac{\kappa \Delta x}{2} \right). \quad (12.33)$$

Это означает потерю корреляции между временными шагами, что впервые было отмечено в работе [Hockney, 1966]. Наши результаты находятся в разумном соответствии с эвристическим

анализом [Abe et al., 1975] эффекта влияния $v_i \Delta t / \Delta x$ на времена корреляции и другие величины.

При взвешивании по методу «ближайший узел сетки» $\sum_p S^2 = 1$ и спектр не зависит ни от k , ни от ω . Для одномерного сокращенного дипольного взвешивания (см. гл. 11) находим

$$\sum_p S^2 = 1 + \frac{1}{12} \sin^2 k \Delta x,$$

что хуже, чем при взвешивании по методу «ближайший узел сетки», и на малых длинах волн в 3 с лишним раза больше, чем при линейном взвешивании. Причины этого заключаются в разрывности $S(x)$, что приводит к $S^2(k) \approx k^{-2}$ (вместо k^{-4} для линейного взвешивания), и в отрицательных значениях, принимаемых функцией S , что приводит к увеличению интеграла

$$\int_g^g \frac{d\kappa}{2\pi} \sum_p S^2(\kappa_p) = \int dx S^2(x).$$

На практике пользователи сокращенного дипольного взвешивания отфильтровывают малые длины волн, из-за которых и возникают большие различия. Разумеется, если кто-либо готов примириться с некоторой потерей разрешения в случае линейного взвешивания, то уровень шумов будет ниже, чем при сокращенном дипольном взвешивании.

Задачи

12.1. Результаты (12.15)–(12.20) для усредненных по ансамблю флуктуаций были получены для бесконечной системы. Проделайте этот вывод для конечной периодической системы, обращая внимание на специальные случаи равенства нулю k и k' и на члены, обратно пропорциональные числу частиц, которые в бесконечной системе не появляются.

12.2. Обобщая результаты задачи 9.2 и используя периодичность ε , покажите, что $\varepsilon(-k_p, -\omega_q) = \varepsilon^*(k, \omega)$.

12.3. Проверьте формулу (12.20).

12.4. При $\lambda_p \rightarrow 0$ и $t_n = t_{n'}$ покажите, используя (12.25б), что из (12.20) следует $\langle 1/2\rho_j \phi_j \rangle = 0$, если $j \neq j'$, и энергия поля, приходящаяся на одну ячейку, $\Delta x < 1/2\rho_j \phi_j > T/2$.

12.4. ЗАМЕЧАНИЯ ОБ ЭКРАНИРОВКЕ И ФЛУКТУАЦИЯХ

Выражения для экранировки Дебая и спектра флуктуаций были получены при помощи точного математического описания численных алгоритмов. Результаты для моделируемой и реальной плазмы сравнивались в случае максвелловского распределения по скоростям. Как и следовало ожидать, точное соответствие обнаруживается, только если шаг сетки и шаг по

времени достаточно малы. Качественные различия в дебаевской экранировке и пространственном спектре возникают, если $\lambda_D \leq \Delta x/2$; потенциал Дебая, например, спадает, осциллируя. В спектре флуктуаций возникает шум на высоких, порядка $v_t/\Delta x$, частотах. Большой временной шаг ($\Delta t \geq \Delta x/v_t$) перераспределяет шумы по всем частотам, создавая более плоский спектр, и влияет на диффузию скорости (§ 12.5).

У этих теоретических результатов та же область применимости, что и у обычной кинетической теории, за тем исключением, что при моделировании плазмы отсутствуют коротковолновые расходимости. Эта теория применима только для устойчивой плазмы. Однако в гл. 8 и 10 мы показали, что пространственная сетка на больших длинах волн может дестабилизировать даже распределение Максвелла. Даже если этого не происходит, до тех пор, пока не включены столкновения на больших длинах волн, равновесный спектр флуктуаций может и не устанавливаться, что противоречит подразумевавшейся при выводе адиабатической гипотезе. В этих случаях для таких волн полученные выражения бессмысленны. Тем не менее можно предположить, что соответствующие формулы можно применять для других длин волн, на которых возникает затухание Ландау, обеспечивающее достаточно малые амплитуды и применимость линейного приближения.

Если используются спокойные старты с их сильно скоррелированными начальными координатами частиц, обратными потоками и многопучковыми неустойчивостями, вычисления могут закончиться задолго до того, как эта теория станет применимой. На самом деле целью пользователя спокойного старта является замедление развития тепловых флуктуаций при моделировании бесстолкновительных явлений.

Неразрешенные трудности классической статистической механики, такие как парадокс Гиббса, от решения которых уходили, ссылаясь на квантовую статистическую физику, вновь возникли в численных моделях с их различными частицами и классической детерминированной динамикой. Незавершенное развитие классической физики тепла — законная и даже неотложная задача теоретической физики. Другие трудности, связанные с малыми длинами волн (такие как «ультрафиолетовая катастрофа» и бесконечность энергии поля точечной частицы), не проявляются в численных моделях из-за того, что число степеней свободы ограничено числом машинных переменных, используемых для представления состояния системы.

12.5. ВЫВОД КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

Диффузия скорости. Рассчитаем теперь влияние флуктуирующего поля на распределение скоростей движущихся через

него частиц. Вычислим сначала дисперсию изменения скорости пробной частицы за время t_s под влиянием ускорений, принимающих значения от $\mathbf{a}_0^{(1)}$ до $\mathbf{a}_{s-1}^{(1)}$. Диффузионный процесс имеет место, если для достаточно больших t_s дисперсия пропорциональна t_s . При интегрировании методом с перешагиванием изменение скорости равно

$$\mathbf{v}_{s-1/2}^{(1)} = \Delta t \sum_{r=0}^{s-1} \mathbf{a}_r^{(1)}. \quad (12.34)$$

Для вычисления ускорения используем силу на невозмущенной траектории. Кроме того, используем силовое поле в отсутствие пробной частицы. [При этом погрешности малы по сравнению с главными членами и в дисперсию (величину квадратичную) дают вклад более высокого порядка малости, чем нам нужно. Позднее мы покажем, что тем не менее и то, и другое дает важный вклад в среднее изменение скорости и в трение.] В выражении (12.34) можно просуммировать по r , используя преобразование Фурье для поля

$$\mathbf{v}_{s-1/2}^{(1)} = \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \int_g \frac{d\omega}{2\pi} \mathbf{F}(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_s^{(0)} - i\omega t_s} \frac{1 - \exp(i(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) t_s)}{\exp[-i(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) \Delta t] - 1}. \quad (12.35)$$

Для флуктуации силы имеем

$$\langle \mathbf{F}(\mathbf{k}, \omega) \mathbf{F}(\mathbf{k}', \omega') \rangle = q^2 S(-\mathbf{k}) S(-\mathbf{k}') (\mathbf{EE})_{\mathbf{k}, \omega} (2\pi)^4 \times \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}', \mathbf{k}_g) \delta(\omega + \omega', \omega_g), \quad (12.36)$$

где

$$(\mathbf{EE})_{\mathbf{k}, \omega} = \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}}{K^4} (\rho^2)_{\mathbf{k}, \omega}. \quad (12.37)$$

Так как сила зависит от непрерывной переменной x , следует использовать обычное обратное преобразование Фурье. Множитель $\delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}', \mathbf{k}_g)$ вместо $\delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}')$ означает, что по отношению к \mathbf{F} (или n) ансамбль не вполне однороден. Средние периодически зависят от положения относительно сетки и, кроме того, от расстояния между точками. Этого можно было ожидать, так как хотя узлы сетки могут быть эквивалентными, но ситуация в узлах и между ними разная. Подробнее этот вопрос рассмотрен ниже.

Образуем теперь среднее по ансамблю $\langle \mathbf{v}^{(1)} \mathbf{v}^{(1)} \rangle / 2t_s$, которое, как мы надеемся, будет тензором диффузии, т. е. при $t_s \rightarrow \infty$ не будет зависеть от t_s . Умножим для этого выражение (12.35) на себя с заменой \mathbf{k} и ω на \mathbf{k}' и ω' , при этом две пары интегралов можно преобразовать к одному кратному интегралу. Для получения дисперсии, используя (12.36), усредним

полученное выражение по ансамблю и возьмем интегралы по \mathbf{k}' и ω' :

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\mathbf{v}_{s-1/2}^{(1)} \mathbf{v}_{s-1/2}^{(1)}}{2t_s} \right\rangle &= \frac{q^2}{2m^2} \int_g \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{d\omega}{2\pi} \sum_{\mathbf{p}} S(-\mathbf{k}) S(\mathbf{k}_p) (\mathbf{EE})_{\mathbf{k}, \omega} \times \\ &\times e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{k}_g \cdot \mathbf{x}_s^{(0)}} \frac{1}{t_s} \frac{1 - e^{i(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) t_s}}{e^{-i(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) \Delta t} - 1} \frac{1 - e^{-i(\omega - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{v}) t_s}}{e^{i(\omega - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{v}) \Delta t} - 1}. \end{aligned} \quad (12.38)$$

Нас не интересует зависимость диффузии частиц от их положения на сетке, так что усредним $x_s^{(0)}$ по ячейке, в результате чего все члены, кроме члена с $p=0$, пропадают:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\mathbf{v}_{s-1/2}^{(1)} \mathbf{v}_{s-1/2}^{(1)}}{2t_s} \right\rangle &= \mathbf{D}(\mathbf{v}, t_s) \equiv \frac{q^2}{2m^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int_g \frac{d\omega}{2\pi} S^2(\mathbf{k}) (\mathbf{EE})_{\mathbf{k}, \omega} \times \\ &\times \frac{\Delta t^2}{t_s} \frac{\sin^2 1/2(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) t_s}{\sin^2 1/2(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) \Delta t}. \end{aligned} \quad (12.39)$$

Рассмотрим интеграл по ω при большом t_s . Последний множитель — это пик шириной t_s^{-1} . Если спектр $(\mathbf{EE})_{\mathbf{k}, \omega}$ слабо меняется в окрестности пика (а это, грубо говоря, означает, что t_s больше времени корреляции поля), то существует вклад типа

$$\mathbf{D}(\mathbf{v}) = \frac{q^2}{2m^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} S^2(\mathbf{k}) (\mathbf{EE})_{\mathbf{k}, \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}}, \quad (12.40)$$

который не зависит от t_s и тем самым напоминает диффузию. Подходит также вклад от частот, в области которых существуют большие плазменные колебания,— он соответствует колебаниям нерезонансных частиц в поле волны и в нашем стационарном ансамбле почти постоянен:

$$\left\langle \mathbf{v}_{s-1/2}^{(1)} \mathbf{v}_{s-1/2}^{(1)} \right\rangle_{\text{nonres}} = \frac{2q^2}{m^2} \int_g \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int_g \frac{d\omega}{2\pi} S^2(\mathbf{k}) (\mathbf{EE})_{\mathbf{k}, \omega} \frac{(\Delta t/2)^2}{\sin^2 1/2(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) \Delta t}. \quad (12.41)$$

Поскольку этот вклад уменьшается медленно — пропорционально t_s^{-1} , он может вызывать трудности при попытках измерить диффузию в численном эксперименте. В конце концов $\mathbf{D}(\mathbf{v}, t_s)$ приближается к $\mathbf{D}(\mathbf{v})$, что поэтому мы и называем тензором диффузии. (Но нельзя ждать слишком долго — при этом частицы отклоняются от невозмущенных траекторий

больше, чем на длину волны, и линейное приближение нарушается. Обоим условиям можно удовлетворить, если частиц достаточно много и амплитуды флуктуаций малы.)

Трение. Если при усреднении изменения скорости частицы использовать траектории нулевого порядка и пренебречь влиянием выбранной (пробной) частицы на окружающую плазму, то получится нуль. Для получения обоих вкладов в трение подправим сначала одно из этих приближений, а затем другое.

В первом случае следует найти среднее изменение скорости частицы, движущейся через поля с заданным спектром флуктуаций. Пусть $\mathbf{a}^{(1)}$ — создаваемое полем ускорение на траектории нулевого порядка. Из (9.21) следует, что результирующее отклонение частицы равно

$$\mathbf{x}_r^{(1)} = \Delta t^2 \sum_{r'=0}^{r-1} (r-r') \mathbf{a}_{r'}^{(1)}. \quad (12.42)$$

Разность между ускорением на возмущенной траектории и $\mathbf{a}^{(1)}$ равна

$$\mathbf{a}_r^{(2)} = \mathbf{x}_r^{(1)} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_r^{(0)}} \mathbf{a}_r^{(1)}. \quad (12.43)$$

Поскольку $\mathbf{a}^{(1)}$, разумеется, скоррелировано с $\mathbf{x}^{(1)}$, то хотя среднее от $\mathbf{a}^{(1)}$ пропадает, среднее от $\mathbf{a}^{(2)}$ не равно нулю. В результате среднее изменение скорости частицы равно

$$\mathbf{v}_{s-1/2}^{(2)} = \Delta t \sum_{r=0}^{s-1} \mathbf{a}_r^{(2)}. \quad (12.44)$$

Пройдя путь, похожий на уже пройденный при рассмотрении диффузии, можно найти, что (см. задачу 12.5)

$$\left\langle \frac{\mathbf{v}_{s-1/2}^{(2)}}{t_s} \right\rangle = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathbf{D}(\mathbf{v}, t_s), \quad (12.45)$$

где $\mathbf{D}(\mathbf{v}, t_s)$ дается все тем же выражениям (12.39). При большом t_s эта величина опять приближается к постоянной, в результате чего эффект становится похожим на ускорение трением

$$\mathbf{a}_{\text{fluct}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathbf{D}. \quad (12.46)$$

Если собрать воедино диффузию и трение, найденные пока в рамках описания Фоккера—Планка медленной эволюции распределения по скоростям, то получим

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \left(-f \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathbf{D} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot f \mathbf{D} \right), \quad (12.47)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \mathbf{D} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}}. \quad (12.48)$$

Так как входящий в \mathbf{D} спектр флуктуаций (12.40) с учетом (12.37) не обязан совпадать с (12.18), а может быть обусловлен турбулентностью слабо неустойчивой плазмы, мы получаем альтернативный вывод уравнения для частиц квазилинейной теории (в пределе малой скорости роста).

Оставшийся источник трения — это возмущение пробной частицей окружающей плазмы. Вполне достаточно рассматривать плазму как власовский газ и считать, что частица движется с постоянной скоростью. Усредняя, как обычно, по ячейке, получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(\mathbf{v}) = & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} q^2 S^2 \frac{\mathbf{x}}{K^2} \operatorname{Im} \frac{1}{\epsilon(\mathbf{k}, \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i0)} = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \times \\ & \times \frac{q^2 \mathbf{x} S^2}{K^2 |\epsilon(\mathbf{k}, \mathbf{k} \cdot \mathbf{v})|^2} \operatorname{Im} \epsilon(\mathbf{k}, \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + i0). \end{aligned} \quad (12.49)$$

Этот результат [но не (12.46)] применим и к не использующим перешагивания схемам интегрирования по времени (см. задачу 12.8).

Кинетическое уравнение. Собрав (12.40), (12.46), (12.48), (12.49) и (12.22) в уравнение Фоккера — Планка для $f(\mathbf{v})$, получим аналог кинетического уравнения Балеску — Гуэрнси — Ленарда для моделируемой плазмы:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \pi \frac{\omega_p^4}{n_0} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \times \\ & \times \frac{S^2(\mathbf{k})}{|\epsilon(\mathbf{k}, \mathbf{k} \cdot \mathbf{v})|^2} \frac{\mathbf{x} \mathbf{x}}{K^4} \sum_{\mathbf{p}} S^2(\mathbf{k}_p) \int d\mathbf{v}' \delta(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{v}', \omega_g) \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}'} \right) \times \\ & \times f(\mathbf{v}) f(\mathbf{v}'). \end{aligned} \quad (12.50)$$

Можно сравнить это длинное уравнение с уравнением БГЛ для настоящей плазмы (само по себе довольно сложное [Lenard, 1960; Balescu, 1960; Guernsey, 1962]). Формула (12.50) в пределе малых Δx и Δt сводится к их результату

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \pi \frac{\omega_p'}{n_0} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\epsilon|^2} \frac{\mathbf{k} \mathbf{k}}{K^4} \times \\ & \times \int d\mathbf{v}' \delta(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}') \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}'} \right) f(\mathbf{v}) f(\mathbf{v}'). \end{aligned} \quad (12.51)$$

Кинетическое уравнение в модели Льюиса (см. гл. 10) представляет собой специальный случай полученного выше результата, за тем исключением, что не делается никаких предположений о периодичности \mathbf{x} . Оно имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \pi \frac{\omega_p^4}{n_0} \int d\mathbf{v}' \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \times \\ & \times \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \frac{S^2(\mathbf{k}_p) S^2(\mathbf{k}_{p'})}{|\epsilon(\mathbf{k}, \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{v})|^2} \sum_q \delta(k_p \cdot \mathbf{v} - \mathbf{k}_{p'} \cdot \mathbf{v}' - q\omega_g) \frac{\mathbf{x}}{K^4} \left(\mathbf{x} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} - \right. \\ & \left. - \mathbf{x}' \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}'} \right) f(\mathbf{v}) f(\mathbf{v}'), \end{aligned} \quad (12.52)$$

где $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$ определяется выражением (12.4) и $\mathbf{x} \equiv \mathbf{x}(\mathbf{k}_p)$, $\mathbf{x}' = \mathbf{x}(\mathbf{k}_{p'})$. Специальными случаями являются сохраняющие энергию алгоритмы с $\mathbf{x} = \mathbf{k}$ и переплетающейся сеткой (см. задачу 12.7).

Для не использующих перешагивания схем интегрирования, которые используются при неявном моделировании, возникают дополнительные члены (см. задачу 12.8).

У нашей теории есть одно достоинство по сравнению с теорией настоящей плазмы — из-за того, что решетка сглаживает кулоновское поле, не возникает трудностей с расходимостями при больших k .

Сюда примешиваются обычные столкновения, модифицированные сглаживанием силы [Langdon, Birdsall, 1970; Okuda, Birdsall, 1970], плюс все прочие сеточные эффекты вроде нагрева из-за сеточного шума [Hockney, 1966, 1971; Hockney, Eastwood, 1981]. В некоторых интересных случаях можно сделать некоторые красивые приближения, а различные физические стороны вопроса аналитически исследуются ниже.

Задачи

12.5. Получите формулу (12.45). Указание: запишите (12.43) и (12.42) в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_r^{(2)} = & \frac{\Delta t}{m^2} \sum_{r'=0}^{r-1} (t_r - t_{r'}) \mathbf{F}^{(1)}(\mathbf{x}_r^{(0)}, t_r) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_r^{(0)}} \mathbf{F}(\mathbf{x}_r^{(0)} + \mathbf{v}[t_r - t_{r'}], t_r) = \\ = & \frac{1}{m^2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \Delta t \sum_{r'=0}^{r-1} \mathbf{F}^{(1)}(\mathbf{x}_r^{(0)}, t_r) \mathbf{F}^{(1)}(\mathbf{x}_r^{(0)} + \mathbf{v}[t_r - t_{r'}], t_r). \end{aligned}$$

Теперь, вводя $(\mathbf{E}\mathbf{E})_{\mathbf{k}, \omega}$, усредните по ансамблю и по положению частицы в ячейке, что дает

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_r^{(2)} = & \frac{q^2}{m^2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{d\omega}{2\pi} S^2(\mathbf{k}) \times \\ & \times (\mathbf{E}\mathbf{E})_{\mathbf{k}, \omega} \Delta t \sum_{r'=0}^{r-1} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - \omega)(t_r - t_{r'})}. \end{aligned}$$

Выделите в (12.44) члены, которые не дают вклада из-за симметрии $(\mathbf{EE})_{\mathbf{k}, \omega} = (\mathbf{EE})_{-\mathbf{k}, -\omega}$ и из-за того, что дифференцирование $\partial/\partial v$ убирает не зависящие от v члены; получите формулу (12.45).

12.6. Получите формулу (12.49), используя для отдельной частицы выражение (12.3) и (12.13) и найденную в задаче 12.2 симметрию.

12.7. Проверьте, что при подходящем выборе x уравнение (12.52) применимо и в том случае, если электрическое поле выбрано в форме задачи 8.6.

12.8. Покажите, что обобщение формулы (12.46) для любой схемы интегрирования по времени имеет вид

$$\mathbf{a}_{\text{fluct}} = \frac{q^2}{m^2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{d\omega}{2\pi} \mathbf{k} \cdot (\mathbf{EE})_{\mathbf{k}, \omega} \operatorname{Im} \left(\frac{\mathbf{X}}{\mathbf{A}} \right)_{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i0}. \quad (12.53)$$

Для схемы с перешагиванием, так же как и в задаче 9.2, остается только резонансный вклад (12.46) — покажите это. Для нецентрированного интегрирования по времени, например для схем С и D, существует также нерезонансный вклад с $\omega \neq \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}$. Указание: в (12.43) выразите a через $F(\mathbf{k}, \omega)$ и вместо формулы (12.42) запишите $(\mathbf{X}/\mathbf{A})_{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}}$, использовав, как и в гл. 9, пропорциональность X и A .

12.6. ТОЧНЫЕ СВОЙСТВА КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

После вывода своего кинетического уравнения Ленард [Lenard, 1960] рассмотрел H -теорему и некоторые выполняющиеся микроскопически неравенства и законы сохранения. В этом отношении его уравнение оказалось удовлетворительным. Мы начнем с такой же проверки нашего кинетического уравнения. Использование его обозначений позволит избежать существенного дублирования похожих манипуляций.

Кинетическое уравнение (12.52) имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} f(v, t) = - \frac{\partial}{\partial v} \cdot \mathbf{J}, \quad (12.54)$$

где поток в пространстве скоростей

$$\mathbf{J} = \int dv' \mathbf{Q}(v, v') \cdot \left(\frac{\partial}{\partial v} - \frac{\partial}{\partial v'} \right) f(v) f(v'), \quad (12.55)$$

причем из (12.52) имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}(v, v') = & -\pi \frac{\omega_p^4}{n_0} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \times \\ & \times \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \frac{S^2(\mathbf{k}_p) S^2(\mathbf{k}_{p'})}{|\epsilon(\mathbf{k}, \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{v})|^2} \frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}'}{K^4} \times \\ & \times \delta(\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{v} - \mathbf{k}_{p'} \cdot \mathbf{v}', \omega_g). \end{aligned} \quad (12.56)$$

Используя периодическую зависимость \mathbf{x} , K и $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$ от \mathbf{k} , удобно переписать \mathbf{Q} , сделав замену $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}'$ и

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk g(\mathbf{k}) \rightarrow \int_{\mathbf{g}} d\mathbf{k} \sum_{\mathbf{p}} g(\mathbf{k}_{\mathbf{p}}).$$

Плотность частиц сохраняется, во-первых, поскольку оператор столкновений имеет вид дивергенции потока в пространстве скоростей, причем когда кинетическое уравнение интегрируется по скорости, столкновительный член можно, используя теорему Гаусса, переписать в виде интеграла по бесконечно удаленной поверхности в пространстве скоростей.

Плотность f должна быть большей или равной нулю. Ленард показал, что если тензор \mathbf{Q} отрицателен, то положительная гладкая функция f не станет впоследствии отрицательной (см. задачу 12.9). Это следует из того, что если \mathbf{Q} имеет вид интеграла и суммы отрицательных величин, то квадратичная форма

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{Q} \cdot \mathbf{A} < 0 \quad (12.57)$$

для любого \mathbf{A} .

Импульс сохраняется, если

$$\mathbf{Q}(\mathbf{v}, \mathbf{v}') = \mathbf{Q}(\mathbf{v}', \mathbf{v}) \quad (12.58)$$

(см. задачу 12.10). Соотношение (12.58) можно проверить, если поменять местами \mathbf{v} , \mathbf{v}' и \mathbf{p} , \mathbf{p}' и для того, чтобы заменить $\mathbf{k}_{\mathbf{p}'} \cdot \mathbf{v}'$ на $\mathbf{k}_{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{v}$, использовать затем δ -функцию и периодичность ϵ по частоте. Так как δ -функция четная, мы снова возвращаемся к (12.56). Итак, импульс сохраняется, как это и должно быть в моделях с точным сохранением импульса.

Тем не менее мы знаем, что энергия не является точно сохраняющейся, и в действительности мы не можем здесь сделать никаких общих выводов об энергии. (Изменение полной энергии в рассматриваемом приближении совпадает с изменением кинетической энергии.) Доказательство Ленарда сохранения кинетической энергии опиралось на то, что $(\mathbf{v} - \mathbf{v}') \cdot \mathbf{Q}(\mathbf{v}, \mathbf{v}') \equiv 0$, а здесь это не так. Оставим этот вопрос на некоторое время открытым.

Для доказательства H -теоремы необходимо использовать только (12.57) и (12.58). Имеем

$$\begin{aligned} \dot{H} \equiv \frac{d}{dt} \int d\mathbf{v} f(\mathbf{v}) \ln f(\mathbf{v}) &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{v} d\mathbf{v}' \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \ln f - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}'} \ln f \right) \times \\ &\times \mathbf{Q}(\mathbf{v}, \mathbf{v}') \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \ln f - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}'} \ln f \right) f(\mathbf{v}) f(\mathbf{v}') < 0, \end{aligned} \quad (12.59)$$

и равенство нулю невозможно. Тем самым в этом случае не существует не то чтобы максвелловской, а вообще стационар-

ной функции f ? То же самое происходит и в случае одного измерения, а также если Δx или Δt по отдельности стремятся к нулю. Можно сказать, что пространственно-временная сетка производит энтропию даже для плазмы с максимально возможной при заданных плотности, импульсе и энергии энтропией. Так как величина H экстремальна, она может меняться только при изменении внешних условий. В этом случае должна возрастать энергия. И действительно, можно показать, что в максвелловском случае энергия возрастает в точном соответствии с изменением энтропии:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2v_i^2} \frac{d}{dt} \bar{v}^2 &= -\dot{H} = \\ &= -\frac{1}{2v_i^4} \int d\mathbf{v} d\mathbf{v}' (\mathbf{v} - \mathbf{v}') \cdot \mathbf{Q} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}') f(\mathbf{v}) f(\mathbf{v}') > 0. \end{aligned} \quad (12.60)$$

H -теорема дает выражение, удобное для изучения процессов, связанных исключительно со свойственным модели нефизическим нагревом, который легко измеряется в численном эксперименте [Montgomery, Nielson, 1970]. На самом деле полная энергия обычно контролируется.

Для «сохраняющих» энергию моделей можно показать, снова следуя Ленарду, что функция f остается положительной и число частиц сохраняется. Поскольку импульс и энергия микроскопически не сохраняются, следует ожидать, что они не сохраняются и при кинетическом описании (за исключением энергии при $\Delta t=0$, см. задачу 12.11).

Распределение Максвелла стационарно при $\Delta t=0$. В противоположном случае из H -теоремы следует, что f меняется так, что энтропия возрастает ($\dot{H} < 0$).

О скорости изменения импульса, энергии и H можно сказать немного больше, если f в какой-то момент времени — функция распределения Максвелла. Можно показать, что хотя по отдельности приращения энергии и импульса не имеют определенного знака, их комбинация

$$\frac{d}{dt} \frac{1}{2} (\mathbf{v} - \bar{\mathbf{v}})^2 = -v_i^2 \dot{H} > 0, \quad (12.61)$$

что указывает на увеличение разброса при увеличении \bar{v} в дрейфовой системе отсчета — так возрастает энтропия.

Легко видеть, что при $\Delta t=0$ \bar{v} уменьшается. Иными словами, «столкновения с сеткой» замедляют дрейф, а разброс по скоростям возрастает так, чтобы величина \bar{v}^2 оставалась постоянной.

Мы по-прежнему ожидаем, что при конечном, но малом шаге по времени дрейф замедляется, или, точнее говоря, скорость стремится к величине $j \cdot \Delta x / \Delta t$ (при такой скорости для

плазмы сетка выглядит стационарной). В любом случае искажение физических свойств происходит из-за эффектов наложения частот, а не из-за «сглаживания» силы с $p=0$. Обратное утверждение не обязательно выполняется — для гамильтоновых моделей легко доказать сохранение импульса, и пространственное наложение не влияет на сохранение энергии.

Задачи

12.9. Покажите, что при выполнении (12.57) кинетические уравнения (12.54) и (12.55) оставляют величину f положительной. Указание: предположите, что функция f может стать отрицательной при скорости v , но при других скоростях $f \geq 0$. Тогда $f(v)=0$, $\partial f / \partial v = 0$ и $\partial^2 f / \partial v \partial v$ — неотрицательный тензор. Отсюда

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \int d\mathbf{v}' f(\mathbf{v}') Q(\mathbf{v}, \mathbf{v}'): \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{v} \partial \mathbf{v}} > 0.$$

12.10. Покажите, что при выполнении (12.58) уравнения (12.54) и (12.55) сохраняют импульс. Указание: интегрируя по частям, покажите, что

$$\frac{d}{dt} \int d\mathbf{v} \mathbf{v} f = - \int d\mathbf{v} \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathbf{J} = - \int d\mathbf{v} \mathbf{J}(\mathbf{v}).$$

Если выполняется соотношение (12.58), то при перестановке \mathbf{v} и \mathbf{v}' подынтегральное выражение (12.55) изменяет знак.

12.11. Покажите, что кинетическое уравнение для гамильтоновых моделей (12.52) в пределе $\Delta t \rightarrow 0$ сохраняет энергию. Указание: в (12.52) оставьте только член $q=0$. Интегрируя по частям, получите

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int d\mathbf{v} \frac{\mathbf{v}^2}{2} f &= -\pi \frac{\omega_p^4}{n_0} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \times \\ &\times \int d\mathbf{v} d\mathbf{v}' \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \frac{S^2 S'^2}{|\epsilon|^2} \delta(\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{v} - \mathbf{k}_{p'} \cdot \mathbf{v}') \frac{\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{v}}{K^4} (\dots) f f. \end{aligned}$$

Напишите равное выражение, получающееся перестановкой \mathbf{v} , \mathbf{v}' и \mathbf{p} , \mathbf{p}' , сложите их. Наконец, обратите внимание, что появившийся под интегралом множитель $\delta(\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{v} - \mathbf{k}_{p'} \cdot \mathbf{v}') (\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{v} - \mathbf{k}_{p'} \cdot \mathbf{v}')$ равен нулю.

12.7. ЗАМЕЧАНИЯ О КИНЕТИЧЕСКОМ УРАВНЕНИИ

В полученных результатах для флюктуаций и столкновений точно учтено влияние временных и пространственных разностей. Соответствующие результаты для настоящей плазмы получаются в пределе малых размеров пространственной сетки и малого шага по времени. Проверены некоторые свойства интеграла столкновений, которые по физическим причинам должны выполняться точно. Наши кинетические уравнения не сохраняют физических свойств именно в тех случаях, когда это заложено в самих моделях. Следовательно, недостатки заключены в моделях, а не в кинетическом уравнении, и микроскопи-

ческие ошибки при усреднении не исчезают, как можно было бы надеяться. Более того, эти нефизические свойства качественно согласуются с наблюдаемым на практике поведением моделей. Все это позволяет доверять проведенному анализу.

Разумеется, так же, как и в настоящей плазме, область применимости результатов ограничена случаем устойчивых систем и адиабатической гипотезой при малых λ . Тем не менее отсутствуют расходимости классической теории плазмы при больших λ .

При подходящем выборе способа интегрирования по λ эти результаты в равной степени применимы и для случая одного, двух и трех измерений. Заметим, в частности, что в отличие от модели листов одномерный интеграл столкновений не равен тождественно нулю. Тем самым если в одномерном случае сеточные эффекты существенны, то время свободного пробега будет пропорциональным $N_p = n\lambda_D$, а не N_D^2 . Возможно, это объясняет наблюдавшееся [Montgomery, Nielson, 1970] уменьшение, а не увеличение времени свободного пробега при Δx , большем λ_D .

Интересное экспериментальное наблюдение [Hockney, 1971] заключается в том, что при увеличении $v\Delta t/\Delta x$ от меньших до больших единицы значений отношение времен релаксации температуры и скорости быстро уменьшается от значений, заметно больших единицы, до значений, меньших единицы. Как нам кажется, причина этого заключена в изменении характера сеточного шума при $v\Delta t > \Delta x$ (см. § 12.3), уменьшающего трение по сравнению с диффузией. Аккуратные численные проверки предсказаний этой теории в различных режимах не проводились.

Даже без детального численного подтверждения теория позволяет делать эвристические оценки. В гл. 13 мы рассмотрим рассуждения Абе и др. [Abe et al., 1975], Хокни и Иствуда [Hockney, Eastwood, 1981] и др. Теория также позволяет судить о том, что следует ожидать в режимах, эмпирически до сих пор не исследованных.

ГЛАВА 13

КИНЕТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА: ТЕОРИЯ, ПРАКТИКА И ЭВРИСТИЧЕСКИЕ ОЦЕНКИ

13.1. ВВЕДЕНИЕ

В этой главе, следуя пионерским работам Доусона и др., мы обсудим интуитивные представления о кинетическом поведении плазмы. Доусон [Dawson, 1962] показал, что величины

$N_D \sim 5 \div 20$ достаточно для моделирования многих свойств горячей одномерной плазмы. Это явилось откровением для специалистов по физике плазмы, которые ограничивали свои представления реальным трехмерным миром и обычным значением $N_D = 10^5 \div 10^{10}$. Обоснование одномерного моделирования плазмы было сделано в работах Доусона и Елдриджа и Фейкса. Ниже также обсуждаются нефизический нагрев и охлаждение в одном и двух измерениях.

13.2. ОДНОМЕРНАЯ ПЛАЗМА В ТЕПЛОВОМ РАВНОВЕСИИ

Модель листов. В ранних одномерных моделях плазмы [Dawson, 1962; Eldridge, Feix, 1962, 1963] заряды имели форму тонких листов, движущихся через однородный неподвижный нейтрализующий фон. Модель была периодической, так же как и ES1. Поля получались непосредственно из координат частиц, без использования пространственной сетки. Вычисления были ограничены числом листов 100—1000.

Изображенная на рис. 13.1 первоначальная модель Доусона состояла из N подвижных листов с зарядом одного знака (скажем, электронов, $q < 0$), движущихся через неподвижный однородный фон длиной L с плотностью заряда противоположного знака $\rho_0 = -qN/L$. Вначале листы отстоят друг от друга на расстоянии $\delta = L/N = 1/n$. Если нет возмущения, то листы должны оставаться в том же положении. Если же i -й лист x_i отклонен от положения равновесия x_{0i} , причем $|x_i - x_{0i}| < \delta$, то усредненное в поперечном направлении электрическое поле \bar{E} уже не равно нулю и возникает сила, стремящаяся вернуть лист в положение равновесия,

$$\frac{d^2}{dt^2} m(x_i - x_{0i}) = q\bar{E}(x_i) = \quad (13.1)$$

$$= -q\rho_0(x_i - x_{0i}) \quad (13.2)$$

или

$$\frac{d^2}{dt^2}(x_i - x_{0i}) = -\omega_p^2(x_i - x_{0i}). \quad (13.3)$$

Таким образом, если листы не пересекают друг друга, каждый из них движется периодически с плазменной частотой. Смещения с пересечениями листов сводятся или к обмену положениями равновесия, или к идеально упругому отражению с обменом скоростями — вся разница в наименовании частиц. Реализация этой схемы обсуждалась Доусоном [Dawson, 1970].

В своих вычислениях в 1962 г. Доусон сделал некоторые проверки. Во-первых, контролировалось сохранение энергии. Для системы из 1000 листов с $n\lambda_D = 10,5$ за 18 плазменных колебаний (2200 шагов по времени) потерялось энергии 7 частей

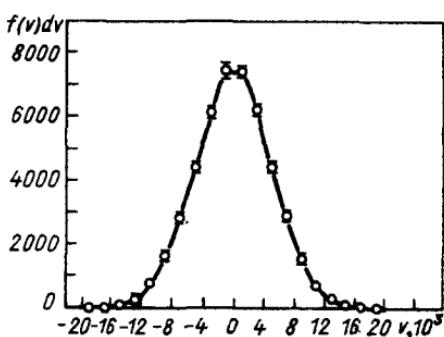
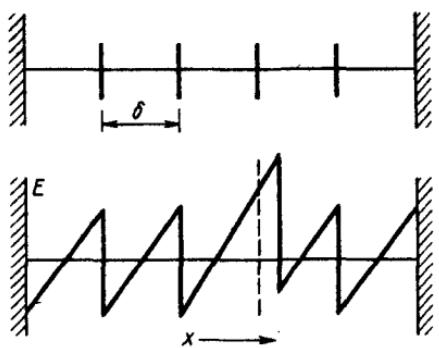


Рис. 13.1. Исходная модель Доусона — тонкие электронные листы, расположенные на расстоянии $\delta = 1/n$ друг от друга (в равновесии) на однородном положительном ионном фоне. Внизу изображено поле $E(x)$ при смещении одного листа

Рис. 13.2. Усредненное распределение по скоростям для системы из 100 листов. Кривой показано распределение Максвелла с дисперсией, определяемой кинетической энергией системы. Скорости выбираются из интервалов шириной $0,4v_i$ ($v_i = 5,1 \cdot 10^{-3}$, $n_0\lambda_D = 5,1$)

из 1000. За это время каждый лист пересек примерно 2000 других листов, так что в среднем заданный лист при пересечении терял энергии 3 части из 10^6 . Уменьшая шаг по времени, можно было увеличить точность за счет скорости вычислений. Не похоже, впрочем, чтобы это имело смысл.

Во-вторых, было обращено движение системы из 9 листов, и оказалось, что система повторяет свой путь с точностью 10^{-3} на протяжении шести колебаний (такая точность была у всех орбит).

В-третьих, сила трения, действующая на частицу, была одинаковой как в отрицательном, так и в положительном направлении времени. Таким образом, несмотря на то что вычисления проводились в определенном направлении, вперед во времени, результаты оказались симметричными по времени.

Распределение Максвелла — равновесное. При получении численных результатов начальное состояние системы выбиралось близким к тепловому равновесию. Для введения распределения Максвелла частицы распределялись по 16 однородным в пространстве группам скоростей; если v — скорость группы, то число частиц в группе выбиралось пропорциональным $\exp(-v^2/2v_i^2)$. Случайная скорость i -й частицы выбиралась следующим образом. Скорости всех частиц заносились на перфокарты (знают ли наши современные читатели о машинных перфокартах?), которые тщательно тасовались. Получившаяся колода использовалась в качестве начального распределения скоростей. Все листы стартовали со своих равноудаленных друг от друга положений равновесия.

На рис. 13.2 показано усредненное по времени распределение скоростей для системы из 1000 листов с $n\lambda_D = 5,16$. Гладкая кривая — это теоретическое распределение Максвелла, полученное в предположении, что кинетическая энергия равна полной энергии за вычетом средней потенциальной энергии (только 8% полной энергии).

Согласие между численными результатами и теоретической кривой хорошее. Тем не менее оно не столь хорошо, как можно было бы ожидать, если бы взятые в различные моменты времени выборки были статистически независимы. Обозначенные черточками ошибки должны быть в этом случае порядка $[N(v)\Delta v]^{1/2}$. В этих вычислениях выборки делались 3 раза за плазменный период $2\pi/\omega_p$. Время релаксации (время, необходимое для того, чтобы после малого возмущения вновь установилось распределение Максвелла) — порядка $(2\pi)^{1/2} N_D / \omega_p$. В течение времени релаксации выборки делались примерно 6 раз, и поэтому ожидаемое отклонение должно быть порядка $[6N(v)\Delta v]^{1/2}$, а не $[N(v)\Delta v]^{1/2}$. Если время между выборками становится сравнимым с временем релаксации, то флуктуации уменьшаются до ожидаемого статистического уровня. Эти результаты показывают, что система постоянно флуктуирует около теплового равновесного состояния и что согласие с теорией объясняется не только тем, что система стартовала примерно с максвелловского распределения.

Дебаевская экранировка. Внесенный в плазму заряд отталкивает заряды одного с ним знака и притягивает заряды противоположного знака. Таким образом, вокруг такого заряда образуется заряженное облако противоположного знака. Это облако содержит заряд, в среднем равный, но противоположный по знаку внесенному. Размер этого заряженного облака равен дебаевской длине $\lambda_D \equiv v_t / \omega_p$. Вне этого облака система частицы плюс облако выглядит нейтральной. Эта дебаевская экранировка внесенного заряда исследовалась в модели отдельных заряженных листов.

На рис. 13.3 изображена дебаевская экранировка для системы из 1000 листов с $n\lambda_D = 5,16$. Точками обозначено среднее число частиц, расположенных на расстоянии от 0 до 1, от 1 до 2 и т. д. средних интервалов от пробного листа. Для получения этих средних из всех листов внутри каждого интервала учитывался каждый десятый. Это повторялось большое число раз в различные моменты времени, и вычислялось среднее по всему набору. Экранировка проявляется в том, что в области с размером, равным длине Дебая и содержащей много листов, в среднем отсутствует один лист (в рассматриваемом случае $2n\lambda_D \approx 10$). Из-за случайного движения плотность в окрестности пробного листа флуктуирует, и это малое отклонение может

Рис. 13.3. Средняя плотность электронов в окрестности расположенного при $x=0$ пробного листа. Кривой показана дебаевская экранировка, $n\lambda_D = 5,16$

оказаться замаскированным. Иногда на дебаевской длине находится 12 листов, а иногда 8 или 9. На рис. 13.3 сплошная кривая представляет теоретический результат, а точки — результат, полученный в численном эксперименте. Указанные погрешности — это статистическая неопределенность, возникающая из-за использования конечного числа пробных листов.

Гладкая кривая получена из линеаризованной теории Дебая. Это — решение линеаризованного уравнения Пуассона

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = qn_0 \left[1 - \exp\left(\frac{q\phi}{T}\right) \right] \approx \frac{q^2 n_0 \phi}{T} = \frac{\phi}{\lambda_D^2}, \quad (13.4)$$

причем предполагается, что $q\phi \lesssim T$. При учете граничного условия на пробном заряде, т. е. при $x=0$,

$$E_{\pm}(0) = -\left(\frac{d\phi}{dx}\right) = \mp \frac{q}{2} \quad (13.5)$$

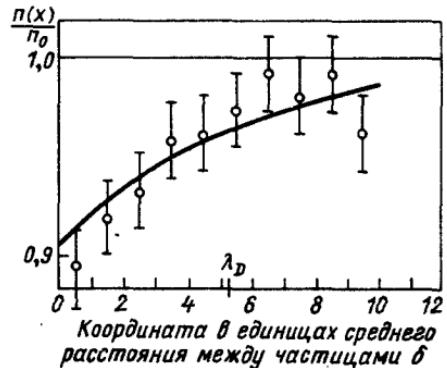
и линеаризованное решение имеет вид

$$n(x) = n_0 \left[1 - (2N_D)^{-1} \exp\left(-\frac{|x|}{\lambda_D}\right) \right], \quad (13.6)$$

$$\phi = \frac{q}{2} \lambda_D \exp\left(-\frac{|x|}{\lambda_D}\right), \quad (13.7)$$

что согласуется с (12.10). Заметим, что при $N_D \gg 1$ уменьшение плотности мало и, следовательно, его трудно обнаружить.

Дебаевская экранировка была одним из самых трудных для машинных вычислений эффектов. Это объясняется тем, что при вычислении плотности статистическая погрешность оказывается порядка $N^{-1/2}$, где N — число пробных частиц, по которым проводится усреднение. Таким образом, в рассмотренном выше случае, где максимальное уменьшение плотности составило 10%, необходимо было повторить процедуру 100 раз, прежде чем изменение плотности сравнялось с флуктуациями. Вычисление уменьшения плотности с 10%-ной точностью потребовало 10^4 выборок. Используя сетку, можно измерить λ_D из пространственного коррелятора электрического поля. Согласие с теорией



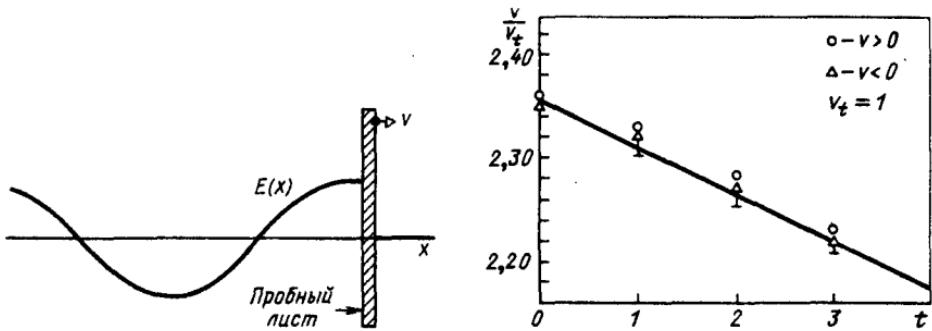


Рис. 13.4. Возбуждаемое быстрым ($v \gg v_t$) движущимся слева направо листом электрическое поле

Рис. 13.5. Среднее трение или замедление группы быстрых частиц для системы из 1000 листов, начиная с $|v| = 2,35v_t$, $N_D = 10$. Прямая линия описывается уравнением (13.8)

при этом оказывается отличным [Hockney, 1971; Okuda, 1972]. Кроме того, в работе [Okuda, 1972] измерены как пространственные, так и временные корреляции и спектры и приведены результаты сравнения с теорией, учитывающей сеточные эффекты.

Трение. Рассмотрим однородную одномерную плазму, состоящую из частиц одного сорта на нейтрализующем фоне. Частица, движущаяся через плазму, или поляризует ее ($v < v_t$), или возбуждает плазменные колебания ($v > v_t$) и тем самым замедляется. Кроме того, она ускоряется случайными электрическими полями, создаваемыми другими частицами. Пусть в момент времени t_0 выделена группа пробных частиц с примерно одинаковыми скоростями. В последующие моменты времени их скорости распределяются по большему интервалу. Средняя скорость группы уменьшается как из-за поляризации или возбуждения волн, так и из-за влияния флюктуационного поля, что часто упускают из виду. Эти процессы описываются уравнениями (12.40), (12.46) и (12.49).

Рассмотрим силу трения, действующую на очень быстрый, или надтепловой, лист в бесконечной плазме. Пусть скорость листа положительна. Плазма впереди такого листа о его приближении ничего не знает. Следовательно, перед листом не может быть никакого возмущения и тем самым электрического поля. Однако при переходе с отрицательной стороны листа на положительную электрическое поле должно уменьшиться на величину q , как показано на рис. 13.4. Электрическое поле, которое чувствует лист, равно среднему полю слева и справа, $\bar{E} = q/2$. Его замедление

$$\frac{dv}{dt} = \frac{q\bar{E}}{m} = -\frac{\omega_p^2}{2n_0} = -\frac{\omega_p v_t}{2N_D} \quad (13.8)$$

не зависит от скорости. Энергия уходит на возбуждение следа плазменных колебаний (см. рис. 13.4, задачи 13.3 и 13.4).

На рис. 13.5 для двух групп быстрых частиц изображена зависимость от времени средней абсолютной скорости. Начальная скорость для группы, представленной кружками, равна $2,35v_t$, а для треугольников — $2,35v_t$. За частицами из этих групп следили и записывали средние скорости обеих групп (в зависимости от времени). Согласие с формулой (13.8) хорошее.

Если система (а следовательно, и код) обратима во времени, то трение при движении в отрицательном направлении времени должно быть таким же, как и при движении вперед по времени. В этом случае так и получилось. В некоторый момент времени t_0 выделялась группа частиц со скоростями, лежащими в окрестности $2v_t$. На графике средней скорости группы как функции $|t - t_0|$ данные для положительных $t - t_0$ и отрицательных $t - t_0$ легли на одну линию.

Елдридж и Фейкс [Eldridge, Feix, 1962] вычислили трение и диффузию и обнаружили соответствие с измерениями Доусона [Dawson, 1962]. У Елдриджа и Фейкса [Eldridge, Feix, 1963] приведены теория и измерения трения и диффузии, а также важные физические представления.

Поляризационные потери получаются из линеаризованного уравнения Власова, как и в задаче 12.6. В пренебрежении сеточными эффектами для одномерной плазмы из выражения (12.49) имеем

$$a_{\text{pol}} = \frac{q^2}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\ell}{2\pi} \operatorname{Im} \frac{1}{\ell \epsilon(\ell, v + i0)}. \quad (13.9)$$

Замечая, что $\epsilon(\ell, \ell v + i0)$ можно записать в виде $\epsilon = 1 + [X(v) + i \operatorname{sgn}(\ell) Y(v)] / \ell^2 \lambda_D^2$, перепишем интеграл следующим образом (см. задачу 13.3):

$$a_{\text{pol}} = \frac{q^2}{m} \int_0^{\infty} \frac{da}{2\pi} \frac{X(v)}{[a + X(v)]^2 + Y^2(v)}, \quad (13.10a)$$

$$a_{\text{pol}} = -\frac{q^2}{2\pi m} \operatorname{arctg} \frac{Y}{X}, \quad (13.10b)$$

где

$$X + iY = \int \frac{dv'}{v - v' + i0} v_t^2 \frac{\partial f}{\partial v}.$$

В случае распределения Максвелла

$$X = 1 - \left(\frac{v}{v_t} \right)^2 + \frac{1}{3} \left(\frac{v}{v_t} \right)^4 - \dots,$$

$$Y = \left(\frac{\pi}{2} \right)^{1/2} \frac{v}{v_t} \exp \left(\frac{-v^2}{2v_t^2} \right).$$

Для малых скоростей ($v \lesssim v_t$) находим

$$a_{\text{pol}} = -\frac{1}{2(2\pi)^{1/2}} \frac{q^2}{m} \frac{v}{v_t} \left[1 + \left(\frac{1}{2} - \frac{\pi}{6} \right) \frac{v^2}{v_t^2} + \dots \right] \approx \frac{v}{2(2\pi)^{1/2}} \frac{\omega_p}{N_D}. \quad (13.11)$$

Для больших скоростей находим (см. задачу 13.4)

$$a_{\text{pol}} \rightarrow \mp \frac{q^2}{2m} = \mp \frac{\omega_p^2}{2n_0} \quad (13.12)$$

при $v/v_t \rightarrow \pm \infty$, что согласуется с выражением (13.8).

Предположим, как в гл. 12, что функция распределения пробных частиц удовлетворяет уравнению типа Фоккера—Планка

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} (a_{\text{pol}} f - a_{\text{fluct}} f + \frac{\partial}{\partial v} (Df)) = \frac{\partial}{\partial v} \left(-a_{\text{pol}} f + D \frac{\partial f}{\partial v} \right), \quad (13.13)$$

где вторая форма записи следует из (12.46): $a_{\text{fluct}} = \partial D / \partial v$. Диффузия D определяется из детального равновесия: если $f(v)$ — функция распределения Максвелла, то она не зависит от времени. Таким образом,

$$D(v) = -\frac{v_t^2 a_{\text{pol}}(v)}{v}. \quad (13.14)$$

Для малых скоростей из формулы (13.12) находим

$$D = \frac{v_t^2}{2(2\pi)^{1/2}} \frac{\omega_p}{N_D}, \quad \left. \begin{aligned} a_{\text{pol}} + a_{\text{fluct}} &= -\frac{\pi v}{6(2\pi)^{1/2}} \frac{\omega_p}{N_D}. \end{aligned} \right\} \quad (13.15)$$

Заметим, что в рассматриваемом случае a_{fluct} составляет только 5% a_{pol} . При малых скоростях D легче измерить, чем потери. Эти выражения, впервые полученные в работе [Eldridge, Feix, 1962], согласуются с измерениями Доусона [Dawson, 1962].

Время релаксации. Для быстрого листа замедление равно

$$\frac{1}{v_t} \frac{dv}{dt} = -\frac{\omega_p}{2N_D}, \quad (13.16)$$

тогда как для медленного листа

$$\frac{1}{v} \frac{dv}{dt} = -\frac{\omega_p}{2N_D} \frac{(\pi/2)^{1/2}}{3}, \quad (13.17)$$

где $(\pi/2)^{1/2}/3 = 0,42$ и

$$\frac{D}{v_t^2} = \frac{\omega_p}{2N_D} \frac{1}{(2\pi)^{1/2}}.$$

Следовательно, видим, что существует время

$$\tau \equiv 2N_D/\omega_p, \quad (13.18)$$

которое существенно для замедления как быстрых, так и медленных частиц. По порядку величины τ равно отрезку времени, за который быстрая и медленная частицы существенно изменяют свою скорость; его можно также представить себе как время стохастизации или (цитируя Доусона) «как время, за которое плазма забывает свое начальное состояние». Если мы хотим, чтобы два измерения распределения скоростей были статистически независимы, необходимо разделить их интервалом времени, по меньшей мере, равным τ . Так как обычно используются величины $N_D \geq 10$, интервалы должны быть больше или равны отношению $20/\omega_p$, т. е. больше трех плазменных периодов.

Для небольших отклонений от распределения Максвелла время релаксации к равновесию примерно равно времени, за которое останавливается медленная частица, или времени, за которое группа частиц с определенной скоростью расплывается по всему распределению Максвелла. Разумеется, единого времени релаксации не существует. Тем не менее выражение (13.18) дает разумную оценку времени релаксации, необходимого для того, чтобы выделенная из распределения Максвелла группа частиц разошлась по всему распределению.

Задачи

13.1. Нарисуйте график зависимости $E(x)$, $\phi(x)$, $n_1(x)$ и давления $(\partial n_1 / \partial x)/n_0$ вблизи стационарного пробного заряда.

13.2. Для $N_D = 5, 20, 100$ составьте таблицу для относительного уменьшения n и числа выборок, необходимых для того, чтобы уменьшение было равным погрешности и одной десятой погрешности.

13.3. Рассчитайте создаваемый быстрой частицей след, изображенный на рис. 13.4, полагая, что при пересечении быстрым листом другого листа равновесное положение последнего x_{0i} смещается влево на расстояние $\delta = 1/n$. Покажите, что плотность энергии (кинетической плюс электрической) колебаний следа равна $q^2/2$. Из-за вовлечения в колебания все большего числа листов скорость нарастания энергии следа в соответствии с выражением (13.8) равна $q^2 v/2$. Покажите, что амплитуда колебаний плотности в следе меньше невозмущенной плотности на множитель, больший или равный N_D .

13.4. Покажите аналитически, что электрическое поле перед и за быстрым листом равно

$$E(x_s + x) = \begin{cases} 0 & ; x > 0, \\ -q \cos \frac{\omega_p x}{v}; & x < 0, \end{cases} \quad (13.19)$$

что и изображено на рис. 13.4. Лист движется направо, x_s — его мгновенное положение. Указание: используйте формулы (12.3) и (12.13), приспособив их к случаю одной частицы и $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$. В качестве ϵ используйте выражения для холодной плазмы $\epsilon(\ell, \omega) = 1 - \omega_p^2 / (\omega + i0)^2$. Преобразование Фурье после тривиального интегрирования по ω приводит к выражению

$$E(x_s + x) = \int \frac{d\ell}{2\pi i} \frac{q}{\ell} \frac{e^{i\ell x}}{1 - \omega_p^2 / (\ell v + i0)^2}. \quad (13.20)$$

У очевидного полюса $\ell = 0$ исчезающий вычет $-(i0)^2 / \omega_p^2$. Обозначение « $i0$ » указывает на то, какие охватываются полюсы при замыкании контура по бесконечной полуокружности выше или ниже действительной оси ℓ .

13.5. Получите выражение (13.10). В выражении (13.9) отделяйте интеграл по $(-\infty, 0)$, замените ℓ на $-\ell$ и сложите с интегралом по $(0, \infty)$.

13.6. Получите выражение (13.12). Указание: при увеличении v/v_t , X проходит через нуль, после чего существенная ветвь арктангенса в (13.10б) будет $\pi/2 < \arctg \leq \pi$.

13.3. ТЕРМАЛИЗАЦИЯ ОДНОМЕРНОЙ ПЛАЗМЫ

Движущийся через плазму лист, как мы увидели, из-за трения в среднем замедляется. В то же время он ускоряется присутствующими в плазме случайными полями. Возникающее из-за этих случайных ускорений изменение скорости проявляется как диффузия или расплывание групп частиц по скоростям. Замедление и случайное ускорение конкурируют друг с другом. В конце концов они создают устойчивое распределение Максвелла. Только для этого распределения диффузия или расплывание в сторону больших скоростей в точности компенсирует замедление частиц.

Рассмотрим сначала эволюцию функций распределения под влиянием трения и диффузии — этот процесс описывается кинетическим уравнением, причем (в одномерном случае) система не релаксирует к тепловому равновесию, в котором все сорта частиц распределены по Максвеллу с одной и той же температурой. Затем мы опишем гораздо более медленное приближение к тепловому равновесию. Наконец, обсудим вкратце дополнительные особенности, связанные с конечностью Δx и Δt .

Быстрая эволюция. Кинетическое уравнение (12.50) можно упростить, если ограничиться одномерным случаем и пренебречь Δx и Δt . В дальнейшем нам понадобится его обобщение на случай нескольких сортов частиц. Для частиц сорта a имеем

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} \int d\mathbf{v}' \sum_b \pi n_b q_b^2 \frac{q_a^2}{m_a} \int \frac{d\mathbf{k}}{2\pi} \times \\ \times \frac{\delta(\mathbf{k}v - \mathbf{k}v')}{\mathbf{k}^2 |\epsilon(\mathbf{k}, \mathbf{k}v)|^2} \left[\frac{1}{m_a} \frac{\partial}{\partial v} - \frac{1}{m_b} \frac{\partial}{\partial v'} \right] f_a(v) f_b(v'), \quad (13.21a)$$

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} \sum_b \frac{1}{2} n_b q_b^2 \frac{q_a^2}{m_a} Q(v) \left(\frac{f_b}{m_a} \frac{\partial f_a}{\partial v} - \frac{f_a}{m_b} \frac{\partial f_b}{\partial v} \right), \quad (13.21b)$$

где

$$Q(v) = \frac{1}{\chi_i} \operatorname{arctg} \frac{\chi_i}{\chi_r} \quad (13.22)$$

и величина $\epsilon = 1 + X_r + iX_i$ содержит вклад всех сортов частиц (см. задачу 13.7).

Для плазмы, состоящей из частиц одного сорта, уравнение (13.21b) (полученное в первом порядке по малому параметру $1/N_D$) предсказывает, что диффузия по скоростям уравновешивает трение и, следовательно, в этом случае нет эволюции к распределению Максвелла. Этому можно дать простое физическое объяснение. Пусть в одном измерении две частицы, взаимодействующие посредством короткодействующей силы, перед соударением имеют скорости v_1 и v_2 , а после соударения — \tilde{v}_1 и \tilde{v}_2 . Для отдельного соударения сохраняются две величины: энергия $1/2m(v_1^2 + v_2^2)$ и импульс $m(v_1 + v_2)$. Существуют только две возможности для \tilde{v}_1 и \tilde{v}_2 , при которых эти величины сохраняются: во-первых, скорости не изменяются: $\tilde{v}_1 = v_1$ и $\tilde{v}_2 = v_2$; и, во-вторых, происходит обмен скоростями: $\tilde{v}_1 = v_2$ и $\tilde{v}_2 = v_1$. В обоих случаях число частиц с определенной скоростью не изменяется. Можно ожидать, что, поскольку, вследствие дальнодействующего характера сил в плазме взаимодействует одновременно много частиц, этот простой двухчастичный аргумент неприменим. Тем не менее теория (существующая) предполагает, что все взаимодействия слабы и даже, если одновременно происходит много столкновений, друг на друга они не влияют и их вклад аддитивен. Таким образом, теория предсказывает, что функция распределения не изменяется.

Этот аргумент применим к плазме, состоящей из частиц одного сорта. Из уравнения (13.21b) следует и более общий результат (см. задачу 13.8):

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_a n_a m_a f_a = 0. \quad (13.23)$$

Данное ограничение препятствует установлению равновесия между частицами отдельных сортов.

Для лучшего понимания эволюции скоростей частиц в однокомпонентной плазме пометим некоторые частицы индекс-

сом a , а остальные — индексом b . В качестве частиц a можно выбрать частицы с начальными скоростями из некоторого малого интервала или, например, с отрицательными скоростями. Уравнение (13.21б) описывает эволюцию их скоростей. В то же время частицы b движутся так, что величина $n_a f_a + n_b f_b$ остается постоянной.

Медленная эволюция. В действительности же одновременные соударения влияют друг на друга и функция распределения немного изменяется. Скорость релаксации к распределению Максвелла была измерена Доусоном [Dawson, 1964]. Исследовалось изменение во времени функции распределения по скоростям, которая в начальный момент имела вид (рис. 13.6) ступеньки. После быстрого (примерно за $1/\omega_p$) изменения, сглаживающего углы распределения, функция распределения эволюционирует очень медленно.

Доусон получал распределение, подсчитывая число частиц в небольших интервалах скоростей размером $\Delta v = \langle v^2 \rangle^{1/2} / 10$ и приписывая это число центру интервала. (Можно действовать более аккуратно и использовать, скажем, линейную интерполяцию.) В эксперименте распределение 1000 листов усреднялось по короткому интервалу времени — за один плазменный период делалось примерно шесть выборок; это усреднение убирало быстрые флуктуации (они обсуждаются ниже), и функция $f(v)$ оказывалась относительно гладкой.

На рис. 13.6 изображена функция $f(v)$ при $N_D = 2,5; 5; 10$ и 20 в моменты времени $6/\omega_p, 21/\omega_p, 41/\omega_p$ и $81/\omega_p$ после начала эксперимента. К этим моментам времени (за исключением первого), как отмечалось выше, группа пробных частиц в распределении Максвелла должна разойтись по всему распределению. Как легко видеть, с ростом N_D функция $f(v)$ стремится сохранить свою начальную форму, даже если времена выборки пропорциональны N_D . Следовательно, время релаксации для немаксвелловского распределения не пропорционально N_D и растет быстрее, чем N_D . На самом деле отличие от начального распределения возникает в основном за время $1/\omega_p$ и связано с установлением корреляций между частицами. После этого перехода $f(v)$ меняется незначительно.

Целиком процесс релаксации показан на рис. 13.7. На первом графике изображена функция $f(v)$ примерно в момент $t = 2N_D/\omega_p$, что соответствует сделанной выше оценке времени релаксации, а на последнем $f(v)$ очень близка к распределению Максвелла.

Доусон [Dawson, 1964] измерил время релаксации следующим образом. Величина $f(0)$ на рис. 13.7 стремится к своему конечному значению так, как при $N_D = 7,5$ показано на рис. 13.8 (как отмечалось выше, каждая точка является результатом усреднения). Прямая линия через точки проведена по методу

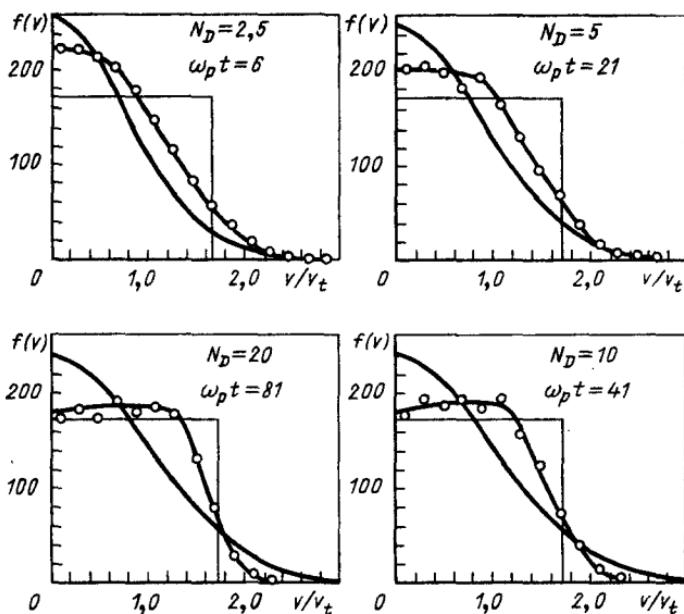


Рис. 13.6. Распределение по скоростям 1000 листов для различных значений N_D в момент времени $\omega_p t = 6, 21, 41, 81$. Эти интервалы времени равны примерно $2\tau = 4N_D/\omega_p$ (за исключением 6)— удвоенное время, необходимое для того, чтобы пробные частицы достигли равновесия с распределением Максвелла. В данном случае этот масштаб времени не применим

наименьших квадратов. Момент времени, при котором $f(0, t)$ достигает значения $f(0)$, соответствующего распределению Максвелла, выбирается в качестве времени релаксации τ . Время релаксации как функция N_D^2 изображено на рис. 13.9 и очень хорошо соответствует зависимости

$$\tau = 10N_D^2. \quad (13.24)$$

Интерпретация Доусона заключается в том, что релаксация обусловлена одновременным взаимодействием трех частиц, поскольку если бы существовал вклад двухчастичных взаимодействий во время релаксации, то он был бы пропорционален $n\lambda_D$.

Доусон также наблюдал быстрые случайные флюктуации на фоне медленно дрейфующего к максвелловскому среднего распределения. При $N_D = 20$, когда релаксация пренебрежимо мала, измерялись флюктуации числа частиц со скоростями из небольшой области вблизи нуля. Быстрые флюктуации обусловлены постоянным обменом энергией между электрическим полем и частицами и приводят к очень незначительному систематическому изменению. На рис. 13.10 нанесено число попаданий величины $f(0)$ в ячейки длиной 5 в интервале от 145 до 215; показано там же распределение Гаусса, типичное для

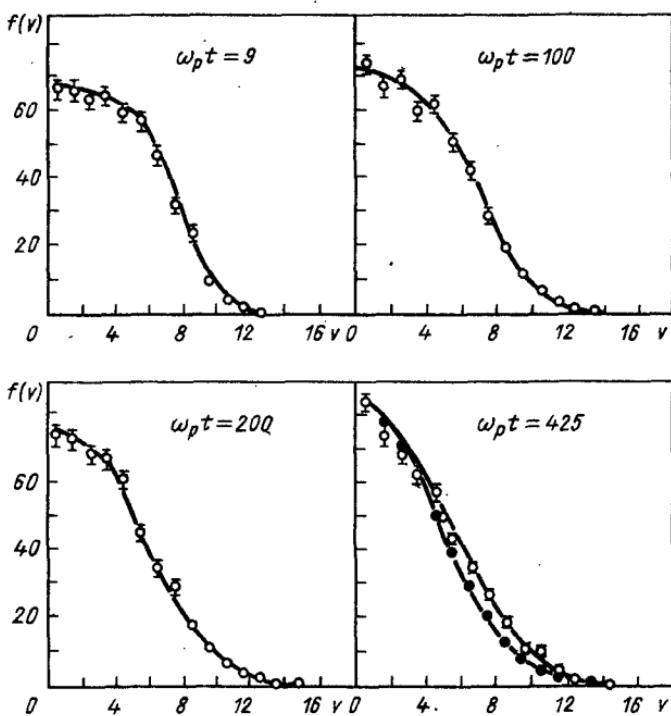


Рис. 13.7. Распределение по скоростям при $N_D = 5$. Темными точками показано распределение Максвелла

полностью случайных флуктуаций вблизи среднего значения, хорошо описывает результат. Все это указывает на то, что медленная релаксация распределения обусловлена очень точным балансом и тем самым вычисления позволяют осуществить важную проверку кинетической теории плазмы.

Для оценки термализации в работе [Montgomery, Nielson, 1970] использовалась H -функция Больцмана. Обнаружено, что в одномерном случае время релаксации пропорционально N_D^2 , а в двухмерном — \bar{N}_D .

В работе [Virtamo, Tuomisto, 1979] показано, что оператор

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{\tau'} \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{v}{\langle v^2 \rangle} f + \frac{\partial f}{\partial v} \right) \quad (13.25)$$

описывает наблюдающуюся релаксацию, тем самым возникает еще один способ определения и измерения времени релаксации τ' . При моделировании использовался код, похожий на ES1 с параметрами $n\lambda_D = 8$, $L = 256$, $\lambda_D = 1000\Delta x$ и $\omega_p \Delta t = 2\pi/25$. В предположении, что $\tau' \sim (n\lambda_D)^2$, измерения дают $\omega_p \tau' = 28,6(n\lambda_D)^2$. Наконец, для начального ступенчатого распределения и $\partial f / \partial t$ из (13.25) метод измерения Доусона дает $\tau = \tau'/2,6$, что находится в хорошем согласии с отношением 10/28,6.

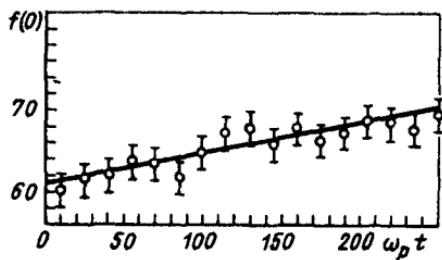
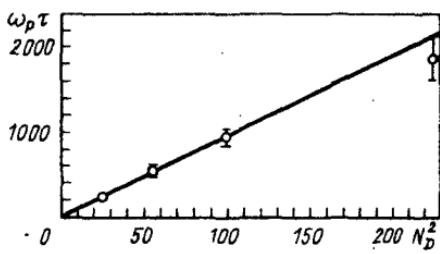


Рис. 13.8. Зависимость $f(v)$ при $v=0$ и $N_D=7,5$ от времени. Прямая линия проведена по методу наименьших квадратов. Для этого значения N_D время релаксации оказалось равным $\omega_p \tau = 536$ [при этом $f(0)$ достигает значения, соответствующего распределению Максвелла]

Рис. 13.9. Зависимость времени релаксации от N_D^2



Влияние пространственных и временных наложений. При учете влияния пространственных и временных разностей, как мы обнаружили в § 12.6, никакое распределение, максвелловское в том числе, не остается стационарным. Тем самым можно ожидать, что при больших N_D в одномерном случае время эволюции по порядку величины будет равно N_D/ω_p , а при малых N_D время эволюции будет порядка N_D^2/ω_p .

В двухмерном случае обнаружено [Montgomery, Nielson, 1970], что если величина $\lambda_D/\Delta x$ становится меньше единицы, то термализация замедляется — возможно, это связано с обрезанием на длинах волн порядка λ_D . Но в одномерном случае при $\lambda_D < \Delta x$ термализация ускоряется, и это наблюдение согласуется с увеличением наложения и предсказанием того, что в одномерном случае временной масштаб N_D/ω_p связан только с наложениями.

Задачи

13.7. Для вывода (13.21а) обобщите (12.50) на случай многих сортов частиц. Сначала пересмотрите § 12.3 и покажите, как изменить числитель и знаменатель в спектре флуктуаций (12.18). Отметим, что D и a_{fluct} пропорциональны q_a^2/m_a , тогда как $a_{\text{pol}} \sim q_a^2/m_a$.

13.8. Получите (13.23) из (13.21б). Покажите, что отсюда тривиально следует сохранение полного импульса и энергии (и других моментов).

13.4. ЧИСЛЕННЫЙ РАЗОГРЕВ И ОХЛАЖДЕНИЕ

Саморазогрев в одном измерении. Измерение саморазогрева осуществлялось при 1d-моделировании однокомпонентной плазмы. Обнаружено, что для теплой плазмы температура $T = mv^2$ растет линейно со временем. Время саморазогрева τ_H определяется как время, за которое величина T (или v^2) удваивается. Абе и др. [Abe et al., 1975] обсуждали увеличение энергии из-за

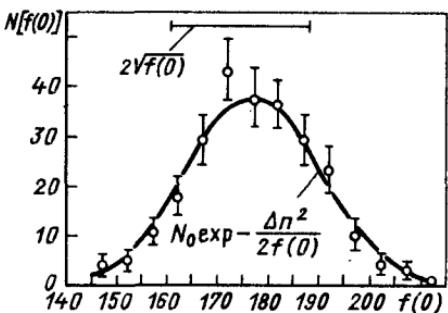


Рис. 13.10. Распределение флуктуаций $f(0)$ вблизи среднего значения, $N_D = 20$

флуктуаций силы, обусловленных нефизическим влиянием сетки; Абе (H. Abe, частное сообщение) отметил, что из их работы следует выражение

$$\omega_p \tau_H \sim \frac{1}{\eta^2} \left(\frac{\lambda_D}{\Delta x} \right)^2 N_D, \quad (13.26)$$

где величина η^{-2} , возрастающая с увеличением порядка взвешивания, определяет, насколько хороша модель. Обнаружено также [Peiravi, Birdsall, 1978], что в области $0,1 \lesssim \omega_p \Delta t \lesssim 0,6$ и $0,5 < \lambda_D / \Delta x < 10$ время разогрева для NGP максимально при $v_t \Delta t / \Delta x \approx 3/2$ и равно

$$\omega_p \tau_H \approx 3 \left(\frac{\lambda_D}{\Delta x} \right)^2 (N_D + N_C); \quad (13.27)$$

для CIC → PIC — максимально при $v_t \Delta t / \Delta x \approx 1/2$:

$$\omega_p \tau_H \approx 600 \left(\frac{\lambda_D}{\Delta x} \right)^2 (N_D + N_C) \quad (13.28)$$

и для QS — также при $v_t \Delta t / \Delta x \approx 1/2$:

$$\omega_p \tau_H \approx 4000 \left(\frac{\lambda_D}{\Delta x} \right)^2 (N_D + N_C), \quad (13.29)$$

где $N_D + N_C = n(\lambda_D + \Delta x)$.

Эти одномерные результаты согласуются с двухмерными [Hockney, 1971]. Время саморазогрева увеличивается при ослаблении на малых длинах волн — обнаружено, что $\omega_p \tau_H$ возрастает примерно как $(k_{\max}/k_l)^s$ при обрезании на k_l , где $s = 1, 2, 3$ для сплайнов нулевого, первого и второго порядков соответственно [Peiravi, Birdsall, 1978]. Таким образом, можно использовать много ячеек с сильным пространственным сглаживанием (больше k_{\max}/k_l) и получить большое τ_H , даже если величина $v_t \Delta t / \Delta x$ многое больше 1/2.

Охлаждение из-за демпфирования в уравнениях движения для частиц. Нефизическое охлаждение наблюдалось как в явных [Adam et al., 1982], так и в неявных [Barnes et al., 1983] кодах, использующих демпфированные уравнения движения. В операторе столкновений Ленарда — Балеску, соответствующем демпфированной схеме интегрирования по времени, содержатся два члена, возникающие из-за фазовых погрешностей при демпфи-

ровании. Один из них — это нерезонансный вклад в поляризационное трение, а другой — фиктивный нерезонансный вклад в динамическое трение a_{fluct} .

В кинетической теории мы пренебрегаем влиянием пространственной сетки. При обобщении оператора столкновений (§ 12.5) на случай демпфированных схем интегрирования сколько-нибудь интересных изменений диффузии по скоростям не возникает, однако члены, соответствующие трению в пространстве скоростей, изменяются.

Поляризационное трение (12.49), связанное с анизотропной поляризацией незамагниченной плазмы пробной частицей, равно

$$\begin{aligned} a_{\text{pol}} &= \frac{q^2}{m} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{k}}{\mathbf{k}^2} \text{Im} \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{k}, \mathbf{k} \cdot \mathbf{v})} = \\ &= -n_0 \frac{q^4}{m^2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{k}}{\mathbf{k}^2} \int d\mathbf{v}' \frac{f(\mathbf{v}')}{|\varepsilon(\mathbf{k}, \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}')|^2} \text{Im} \left(\frac{\mathbf{X}}{\mathbf{A}} \right)_{\mathbf{k} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}') + i0}, \end{aligned} \quad (13.30)$$

где ε при помощи (9.57) выражено через (\mathbf{X}/\mathbf{A}) , а $(\mathbf{X}/\mathbf{A})_{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i0}$ — отношение амплитуд Фурье $\mathbf{x}^{(1)}$ и $\mathbf{a}^{(1)}$, получающееся из конечно-разностных уравнений движения [которое при точном интегрировании должно быть равно $(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i0)^{-2}$]. Смысл члена « $+i0$ » заключается в том, что величина $(\dots)_{\omega + i0}$ понимается как предел $(\dots)_{\omega + i\gamma}$, причем γ положительно и стремится к нулю. Обычно $\text{Im}(\mathbf{X}/\mathbf{A})_{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i0} = -\pi\delta'(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v})$, что дает обычный вклад Ландау, но в данном случае из-за фазовых погрешностей, связанных с численным демпфированием, величина $\text{Im}(\mathbf{X}/\mathbf{A})_{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i0}$ не равна нулю и при $\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} \neq 0$.

Другой член, «динамическое трение» a_{fluct} [см. (12.53)], также выражается через $\text{Im}(\mathbf{X}/\mathbf{A})$ и спектр тепловых флуктуаций (12.18). Легко убедиться в качестве проверки теории, что выражения (13.30) и (12.53) с учетом теплового спектра (12.18) обеспечивают сохранение импульса всей системы частиц.

Эти результаты используются для записи уравнения Фоккера — Планка, описывающего эволюцию функции распределения $f(\mathbf{v})$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot (-f \mathbf{a}_{\text{pol}} - f \mathbf{a}_{\text{fluct}} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot f \mathbf{D}), \quad (13.31)$$

где $\mathbf{D}(\mathbf{v})$ — тензор диффузии (12.40). Поскольку в пределе непрерывного времени резонансные части (13.30) и (12.53) взаимно уничтожаются, уравнение (13.31) сохраняет энергию. Скорость охлаждения, связанная с нерезонансной частью (численной природы), равна

$$\frac{d}{dt} \mathbf{KE} = \int d\mathbf{v} \mathbf{v} \cdot \mathbf{a} f(\mathbf{v}) = -\frac{1}{2} n_0 \frac{q^4}{m^2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{\mathbf{k}^2} \int d\mathbf{v} d\mathbf{v}' f(\mathbf{v}) f(\mathbf{v}') \times$$

$$\times [|\epsilon(\mathbf{k}, \mathbf{k} \cdot \mathbf{v})|^{-2} + |\epsilon(\mathbf{k}, \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}')|]^{-2} \mathbf{k} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}') \operatorname{Im} \left(\frac{\mathbf{X}}{\mathbf{A}} \right)_{\mathbf{k} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}')} \quad (13.32)$$

где теперь подразумевается, что резонансная часть $\operatorname{Im}(\mathbf{X}/\mathbf{A})$ опущена. Для схемы C_1 уравнений движения (см. § 9.8) имеем

$$\operatorname{Im} \left(\frac{\mathbf{X}}{\mathbf{A}} \right)_{\omega} = c_1 \Delta t^2 \sin \omega \Delta t,$$

тогда как для схемы D_1 (см. § 9.8)

$$\operatorname{Im} \left(\frac{\mathbf{X}}{\mathbf{A}} \right)_{\omega} = \frac{\Delta t^2 \sin \omega \Delta t}{5 - 4 \cos \omega \Delta t}.$$

В обоих случаях если разброс скоростей частиц меньше, чем $\pi/k_{\max} \Delta t$, то подынтегральное выражение всюду положительно и поэтому происходит только охлаждение.

Для этих схем с демпфированием третьего порядка в подынтегральном выражении множитель $\mathbf{k} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}') \operatorname{Im}(\mathbf{X}/\mathbf{A})$ пропорционален $[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}') \Delta t]^2$ при малых Δt . При демпфировании первого порядка он стремится к нулевой постоянной [Cohen et al., 1982в]. Различные улучшения схем третьего порядка [Barnes et al., 1983в] дают разные фазовые ошибки и, следовательно, разные скорости охлаждения. Количественные вычисления скоростей охлаждения, основанные на этой кинетической теории, до сих пор не проведены.

Эвристические оценки. Поскольку саморазогрев обусловлен исключительно эффектами пространственного и временного наложения, естественно попытаться оценить скорость разогрева при помощи δF (см. гл. 7) — части силы, связанной с членами $p \neq 0$. Это было проделано в работах [Abe et al., 1975; Hockney, Eastwood, 1981]. Однако надежно оценить разогрев (или охлаждение) трудно, поскольку он является результатом небольшого дисбаланса в соревновании между трением и диффузией.

На эту трудность указывают случаи, для которых известны точные результаты и к которым с равной степенью правдоподобия применимы подобные оценки. Например, метод [Abe et al., 1975], применимый к сохраняющим энергию моделям (см. гл. 10), дает нулевой разогрев даже в пределе $\Delta t \rightarrow 0$.

Поскольку результаты гл. 12 воспроизводят качественные свойства типа законов сохранения, более разумные оценки следует получать при помощи приближенного вычисления выражения кинетической теории.

13.5. ВРЕМЯ СТОЛКНОВЕНИЙ И РАЗОГРЕВА ДЛЯ ДВУХМЕРНОЙ ТЕПЛОЙ ПЛАЗМЫ

Хокни [Hockney, 1971] сослужил хорошую службу электростатическому моделированию, проделав 73 долгих расчета

тепловой (максвелловской) плазмы в $2d2v$, изменяя при этом в широких пределах форму и размеры частиц и Δx и Δt . Из этих вычислений он получил время замедления, время саморазогрева и уровень флуктуаций — часть этих результатов приводится здесь. Читатель отсыпается к его оригинальной статье, а также к работе [Hockney, Eastwood, 1981].

В лабораторной плазме мы ожидаем, что отношение v_{coll}/ω_p и уровень флуктуаций пропорциональны $1/N_B$. Этого же, но с поправкой на сеточные эффекты, можно ожидать и при моделировании. В лабораторной плазме нет саморазогрева. При моделировании мы получаем слабый саморазогрев, пропорциональный t и исчезающий при $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$.

Модель Хокни представляет собой пространственно однородную $2d2v$ плазму, причем используется пятиточечный разностный лапласиан и двухточечный градиент. Модель дважды периодична, магнитного поля нет, и вначале загружается одинаковое число электронов и ионов ($T_e = T_i$ и отношение масс $m_i/m_e = 64$). Координаты частиц выбирались случайно, с однородным распределением по x и y . Скорости частиц выбирались при помощи обратной функции ошибок при $|v| < 3v$, где $v^2 \equiv T/m$. Отслеживалось изменение орбиты электрона из-за столкновений, за ионами тоже следили, но результаты эти не использовались [масштаб ионных времен в $(m_i/m_e)^{1/2}$ или m_i/m_e раз больше]. При $t > 0$ измерялись компоненты скорости $v_{||}(t)$ и $v_{\perp}(t)$, параллельные и перпендикулярные начальному направлению, и угол отклонения $\phi(t)$. Отслеживалось также изменение кинетической энергии каждой частицы по сравнению с ее начальным значением

$$h(t) \equiv \frac{1}{2} m [v^2(t) - v^2(0)]. \quad (13.33)$$

Было получено четыре характерных, обусловленных столкновениями времени $\tau_\phi, \tau_{v_{\perp}}, \tau_s, \tau_{\text{th}}$, которые существенны как в лабораторной, так и в моделируемой плазме. Эти времена определяются следующим образом:

$$\langle \phi^2(\tau_\phi) \rangle^{1/2} = \frac{\pi}{2}, \quad \tau_\phi — время отклонения; \quad (13.34)$$

$$\langle v_{\perp}^2(\tau_{v_{\perp}}) \rangle^{1/2} = \langle v_{||}(0) \rangle, \quad \tau_{v_{\perp}} — время; \quad (13.35)$$

$$\frac{d}{dt} \langle v_{||}(t) \rangle = \left. \frac{\langle v_{||}(t) \rangle}{\tau_s} \right|_{t=0}, \quad \tau_s — время замедления; \quad (13.36)$$

$$\langle h^2(\tau_{\text{th}}) \rangle^{1/2} = \frac{1}{2} m v_t^2 = \frac{T}{2}, \quad \tau_{\text{th}} — время термализации. \quad (13.37)$$

Угловые скобки означают усреднение заключенных в них величин по ансамблю электронов и ионов в отдельности:

$$\langle \alpha(t) \rangle \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \alpha_i(t).$$

Хокни использовал τ_s как меру столкновительных эффектов. При $q_i = q_e$ все эти времена сравнимы, а при $q_i \gg q_e$ для электронов τ_ϕ и τ_{v_\perp} уменьшаются из-за того, что рассеяние на ионах оказывается почти упругим.

Пятое время, время разогрева, находим из соотношения

$$\langle h(\tau_H) \rangle = \frac{1}{2} m v_t^2 = \frac{1}{2} T. \quad (13.38)$$

Время разогрева определяет степень нарушения сохранения энергии в численной модели. Измерения Хокни $h(t)$ для взвешиваний нулевого и первого порядков (NGP и CIC) приведены на рис. 13.11. Заметим, что увеличение порядка взвешивания (при этом с частиц срезаются острые углы и уменьшаются эффекты наложения) увеличивает τ_H в 3 раза. Важное наблюдение Хокни заключается в линейном со временем росте величины $\langle h(t) \rangle$, что указывает на стохастическую природу разогрева. Средняя начальная энергия как электрона, так и иона равна $[(1/2)T + (1/2)T]$, поэтому плотность энергии системы равна $n_e T + n_i T$ или $2n_e T$ и, следовательно, к моменту $t = \tau_H$, когда $\Delta(\text{КЕ}) = T/2$, энергия двухмерной системы возрастает на 25%.

Оказалось, что результаты моделирования зависят от введенного Хокни параметра

$$N_C \equiv n [\lambda_D^2 + (R\Delta x)^2], \quad (13.39)$$

где второй член представляет собой число центров облаков, приходящихся на одно облако. Исходя из наилучшего соответствия со своими данными, Хокни использовал $R = 1, 1$ и 2 соответственно для NGP, CIC и QS. Эти выборы означают, кроме того, что эффективный радиус частицы примерно определяется расположением максимума силы. Из (13.39) видно, что вследствие использования частиц конечных размеров при $R\Delta x > \lambda_D$ для столкновений и флуктуаций радиус частиц важнее дебаевского радиуса.

Время соударения τ_s подбирается по методу наименьших квадратов так, чтобы

$$\tau_s / \tau_{pe} = N_C / K_1, \quad (13.40)$$

где $K_1 = 0,98 \pm 0,20$ для 73 расчетов, причем $0,25 \leq N_C \leq 43$, $0,12 \leq R\Delta x / \lambda_D < 32$. Так как $K_1 \approx 1$, то

$$v_{\text{coll}} / \omega_{pe} \approx 1/2\pi N_C. \quad (13.41)$$

Хокни отметил (частное сообщение), что при учете конеч-

Рис. 13.11. Типичные результаты, полученные при измерении времени разогрева. Кинетическая энергия растет со временем примерно линейно

ных размеров частиц эмпирическое соответствие формуле (13.40) остается удовлетворительным даже в предельном случае $\lambda_D/\Delta x \approx 1/8$, который из-за наложений слабо неустойчив.

Флуктуации электрического поля оказались равными (в единицах СГС)

$$\frac{\langle E_x^2 \rangle / 8\pi}{nmv_i^2} = \frac{K_2}{N_c}, \quad (13.42)$$

где $K_2 = 0,12 \pm 0,04$. Для проверки этого измерения, исходя из теории плазмы, Хокни сделал оценку

$$\frac{\langle E_x^2 \rangle / 8\pi}{nmv_i^2} = \frac{1}{16\pi} \ln \left[\frac{1 + (\ell\lambda_D)^2_{\max}}{1 + (\ell\lambda_D)^2_{\min}} \right] \frac{1}{n\lambda_D^2}. \quad (13.43)$$

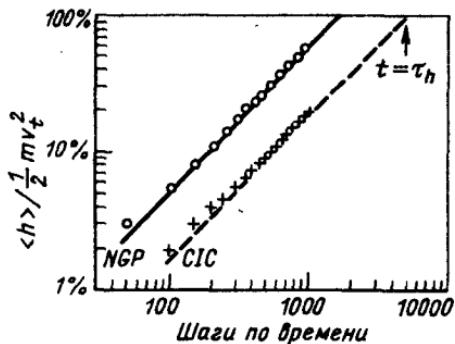
Для сетки $m \times m$ в пренебрежении вкладом наложений $(\ell\lambda_D)_{\max} = \pi\lambda_D/\Delta x$, $(\ell\lambda_D)_{\min} = 2\pi\lambda_D/m\Delta x$ и при $\lambda_D/\Delta x = 6$ ($N_c \approx N_D$) имеем

$$\frac{\langle E_x^2 \rangle / 8\pi}{nmv_i^2} = \frac{0,112}{n\lambda_D^2}, \quad (13.44)$$

что хорошо согласуется с (13.42). Грубо говоря

$$\frac{\text{РЕ}}{\text{КЕ}} \approx \frac{1}{8N_c}. \quad (13.45)$$

Время разогрева оказывается сильно зависящим от Δx и Δt , причем зависимость от N_c та же, что и у τ_s . Зависимость от Δx и Δt демонстрируют линии постоянного отношения τ_H/τ_s (рис. 13.12). Это отношение представляет собой число соударений за время разогрева, причем число это должно быть большим, за исключением тех случаев, когда оба времени превосходят время моделирования. Поскольку разогрев линейно увеличивается со временем и при $t = \tau_H$ погрешность полной энергии составляет 25%, в момент $\tau_H/10$ погрешность равна 2,5% — это позволяет предсказывать ошибку экспериментов с горячей плазмой. Заметим, что для CIC величина τ_H/τ_s примерно в 16 раз больше, чем для NGP, и что в случае CIC для типичных значений $\omega_p \Delta t \approx 0,2$ и $\lambda_D/\Delta x \approx 1,0$ $\tau_H/\tau_s \approx 64$, что вполне приемлемо. Возможная причина уменьшения τ_H/τ_s при увеличении $v_i \Delta t / \Delta x$ обсуждалась в § 12.7.



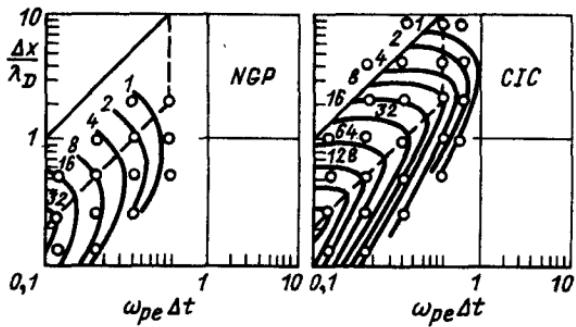


Рис. 13.12. Линии постоянного отношения τ_H/τ_s в плоскости Δx , Δt для взвешиваний NGP и CIC

Для облегчения проектирования Хокни придумал график в координатах Δx и Δt , изображенный на рис. 13.13. Для холодной плазмы область справа от $\omega_{pe}\Delta t=2$ неустойчива, а для горячей плазмы граничную линию нужно немного сдвинуть, $\omega_{pe}\Delta t=1,62$. Другая граница, где возникает нефизическая Δx -неустойчивость, добавляется при $\lambda_D/\Delta x \lesssim 0,2$ ($\Delta x/\lambda_D \gtrsim 5$). При $v_t\Delta t > \Delta x$ за время Δt ячейку пересекает много частиц, и это определяет нижнюю границу. Предложенный им оптимальный путь определен соотношением $v_t\Delta t = \Delta x/2$ вплоть до $\omega_{pe}\Delta t=1$.

При помощи значений τ_H/τ_s на оптимальном пути Хокни затем свел данные на рис. 13.14. Зависимость времени разогрева имела вид

$$\left(\frac{\tau_H}{\tau_s}\right)_{opt} = K_4 \left(\frac{\lambda_D}{\Delta x}\right)^2. \quad (13.46)$$

Замечательно, что для CIC ($K_4 \approx 40$) величина τ_H/τ_s примерно в 20 раз больше, чем для NGP ($K_4 \approx 20$).

Существует очевидное противоречие между NGP и CIC, связанное с тем, что при одном и том же τ_s величины τ_H различаются в 20 раз. В работе [Montgomery, Nielson, 1970] обнаружено, что NGP-модели релаксируют в 10 раз быстрее, чем CIC-модели, однако если релаксация к распределению Максвелла обусловлена только парными соударениями, то не должно возникать различий при моделировании с различными весами (NGP и CIC) и одним и тем же временем столкновений τ_s . Хокни отметил, что противоречия здесь нет, поскольку при моделировании стохастический разогрев связан только с погрешностью в вычислении полей.

Дополнительная информация о временах разогрева, включающая более сложные формы частиц и 9-точечный шаблон для

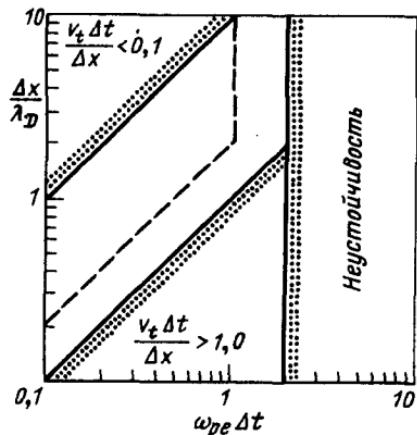
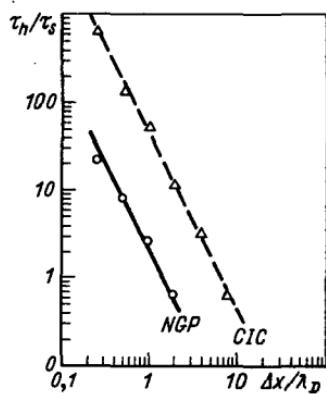


Рис. 13.13. График для исследования времени разогрева. Затененные области нежелательны, штриховой линией указан оптимальный путь, на котором $\omega_{pe}\Delta t = \min[\Delta x/\lambda_D, 1]$

Рис. 13.14. Зависимость отношения времени разогрева и столкновений на оптимальном пути $\omega_{pe}\Delta t = \min[\Delta x/\lambda_D, 1]$ от $\Delta x/\lambda_D$ для моделей NGP и CIC

уравнения Пуассона, приведена в работе [Hockney et al., 1974]. В более поздней статье для CIC приведено значение $K_4 = 100$ — объясняется это тем, что перед измерением скорости разогрева более аккуратно устанавливалось тепловое равновесие. Увеличение шаблона для уравнения Пуассона с 5 до 9 точек для CIC не приводит к изменениям. При использовании QS-взвешивания и 9-точечного шаблона с эффективным радиусом частиц $R = 1,8$ величина K_4 возрастает до 150, а после добавления корректирующего потенциал члена (при этом $R = 3$) оказывается, что $K_4 = 3000$. По сравнению со стандартной CIC-моделью в последнем случае K_4 в 30 раз больше, и при $\lambda_D/\Delta x = 1$ величина τ_s/τ_{pe} увеличивается в 5 раз, а τ_h/τ_{pe} — в 150 раз; время вычислений при этом возрастает в 2 раза — цена вполне разумная. Последние модели, где для уменьшения влияния сетки используется подстройка потенциала (обычно в \mathbb{k} -пространстве), Хокни называет спокойными частично-сеточными моделями (QPM).



13.6. НЕУСТОЙЧИВАЯ ПЛАЗМА

Рассмотренная здесь кинетическая теория предполагает, что в соответствии с дисперсионным соотношением $\epsilon(\mathbf{k}, \omega) = 0$, распределение по скорости линейно устойчиво. Однако недавно было показано, что в линейно-устойчивой одномерной плазме может развиться турбулентность с большими амплитудами

[Berman et al., 1982]. Дрейф электронов относительно ионов, хотя система и находится ниже порога линейной неустойчивости, обеспечивает свободную энергию для нелинейной неустойчивости. При помощи детальных измерений корреляций в фазовом пространстве (x, v), возможных только в численном эксперименте, были обнаружены «комки» и провалы плотности. Такие диагностики облегчают успешное сравнение с теорией [Tetreault, 1983; Dupree, 1983]. Как считают эти авторы, подобные явления, не описываемые в рамках теории возмущений, наводят на мысль о применимости стандартных пертурбативных процедур.

ЧАСТЬ III

ПРАКТИКА. РАЗРАБОТКА ПРОГРАММ В ДВУХ И ТРЕХ ИЗМЕРЕНИЯХ

Ниже представлены более сложные коды, используемые в двух и трех измерениях, и подготовлены некоторые процедуры для кодов с любым числом измерений. Переход от одного пространственного измерения к двум или трем хотя и приближает нас к реальности, но увеличивает сложность программ и необходимое машинное время. Теперь необходимы двух- и трехмерные программы перемещения и взвешивания частиц, решения полевых уравнений и диагностики.

В гл. 14 приведены детали алгоритмов для электростатических программ в двух и трех измерениях.

В гл. 15 описаны моделирование с учетом самосогласованных электромагнитных полей (как продолжение гл. 6 и 7), а также приближения типа модели Дарвина.

В гл. 16 представлена техника, применяемая для загрузки частиц, а именно — для выбора начальных значений (x , v), а также для влета и вылета частиц в процессе счета. При этом учитывается возможность существования внешней электрической цепи.

ГЛАВА 14

ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЕ ПРОГРАММЫ В ДВУХ И ТРЕХ ИЗМЕРЕНИЯХ

14.1. ВВЕДЕНИЕ

Моделирование в двух и трех пространственных измерениях гораздо более реалистично, чем в одном измерении. Действительно, для получения полезной физической информации многие задачи требуют использования более чем одного пространственного измерения. Таким образом, в этой и последующих главах делаются следующие за одномерным шаги — сначала для электростатических, а затем и для электромагнитных моделей. Оценим затраты и сложность программ.

В двух- и трехмерном электростатическом моделировании, также как и в одномерном, можно, не привлекая пространственной сетки, непосредственно использовать закон Кулона. Вычис-

ление парного взаимодействия можно проводить, используя силу между i -м и j -м зарядами: $1/r_{ij}$ или $1/r_{ij}^2$. Этот подход хорош при моделировании изолированной плазмы, когда нет граничных условий на поля (нет изображения зарядов). Тем не менее для общих, ограниченных или периодических плазменных моделей необходимость следить за поведением частиц на удалении λ , меньшем λ_D , для нейтральной плазмы возникает редко и, следовательно, в увеличении времени вычислений, связанном с расчетом межчастичных взаимодействий, нет необходимости. Таким образом, вместо непосредственного применения закона Кулона обычно, используя пространственную сетку, вычисляют поля из плотностей заряда и тока. Для того чтобы наблюдать сеточные величины на достаточно малых масштабах, которые определяются искомой физикой, сетку выбирают довольно плотной, но не больше, чем необходимо. Обычно, в двухмерных программах сетки имеют размер от 32×32 (1024 узла) до 256×256 (65 536 узлов); при этом $E_x, E_y, B_x, B_y, B_z, \rho$ (6 чисел) запоминаются в каждой точке и необходима возможность произвольного доступа к памяти. В трех измерениях при использовании сетки $64 \times 64 \times 64$ (262 144 узла) и при наличии всех компонент E, B, J и ρ в оперативной памяти необходимо держать 2 621 440 чисел, что в настоящее время нетривиально!

Скачок от наблюдения за $f(x, v_x)$ в $1d1v$ с двумя переменными в фазовом пространстве к $f(x, y, z, v_x, v_y, v_z)$ в $3d3v$ с шестью переменными в фазовом пространстве может потребовать перехода к числам вроде $(64)^3$ ячеек и в зависимости от задачи — от 10^4 до 10^7 частиц. Число параметров частицы (т. е. x_i, v_i) скачет от двух до шести чисел, и обычно возникает необходимость во много большем числе частиц. Требование гладкости изменения $f(v)$ и $n(x)$ вплоть до размеров ячейки, что иногда оказывается дорогим даже в $1d$, в $3d3v$ может оказаться непреодолимым, требование того, чтобы и $N_D \equiv n\lambda_D^3$, и L/λ_D были большими, может стать очень дорогим. Каждое дополнительное измерение в фазовом пространстве умножает стоимость памяти и времени счета. К счастью, так же как и в $1d$, каждая задача имеет свои потребности; многие задачи можно решать в $3d3v$ при приемлемых затратах, разумеется, по сравнению, например, с полномасштабным экспериментом по синтезу, для которого имеется лишь приближенная теория.

Может оказаться, что при движении вверх от $1d$ наибольшие проблемы связаны с увеличением сложности программирования в $2d$ и $3d$. Представим себе, например, дополнительные трудности, возникающие при проектировании начальной загрузки и последующей инжекции, проектировании поглощения и отражения частиц, при создании диагностик и последующей

обработки, результаты которой можно было бы легко воспринимать, а также при проведении тестов на точность. Почти все это труднее, и возможно, намного, чем просто получить большую память и более быструю обработку.

Из сделанных выше замечаний вытекает предложение — моделирование должно постепенно прогрессировать через $1d1v$ к $1d3v$, $2d2v$ и $2d3v$, приводя к полному $3d3v$ -моделированию.

Прикинем, что же необходимо для решения двух- и трехмерных электростатических задач. Мы продвигаемся по пути $x \rightarrow \rho \rightarrow \phi \rightarrow E \rightarrow F$ следующим образом:

$\mathbf{x}_{\text{part}} \rightarrow \rho_{\text{grid}}$ — взвешивание в любом порядке;

$\rho_{\text{grid}} \rightarrow \Phi_{\text{grid}}$ — привести $\nabla^2 \phi = -\rho$ к конечно-разностному виду и найти Φ_{grid} ;

$\Phi_{\text{grid}} \rightarrow E_{\text{grid}}$ — привести $-\nabla \phi = E$ к конечно-разностному виду и найти E_{grid} ;

$E_{\text{grid}} \rightarrow F_{\text{part}}$ — взвешивание в любом порядке.

Если ρ , ϕ и E представимы в виде дискретных рядов Фурье, то можно получить, например, $\phi(k)$ из $\rho(k)$ или делением на конечно-разностный оператор $K^2(k)$, или просто на k^2 , или можно использовать комбинацию, скажем, конечно-разностного решения по x и рядов Фурье по y .

Шаги от ускорения $q/m(E + v \times B/c)$ к v_{new} и x_{new} те же, что и в гл. 4. Там приведены центральные по времени алгоритмы с перешагиванием, с последовательными половиной ускорения, вращением и половиной ускорения. Они приведены в векторной форме, применимой как в $1d1v$, так и в $3d3v$.

Процедуры взвешивания частиц в $2d$ и $3d$ являются непосредственными обобщениями уже использовавшихся в $1d$ и приводят к эффективным формам частиц, более или менее похожим на стержни и кубы соответственно в $2d$ и $3d$ (см. § 8.9). Множители формы частиц принимают теперь вид $S(x) = S(x, y, z)$ и обычно примерно симметричны, но из-за того, что частицы конечных размеров представляют собой квадраты или кубы и из-за прямоугольности сетки возникает некоторая (нежелательная) анизотропия. Например, эти эффекты приводят к немного разному распространению волн вдоль осей и между осями, причем при увеличении порядка взвешивания эти эффекты уменьшаются.

Алгоритмы вычисления поля также являются обобщением используемых в $1d$. Необходимо иметь конечно-разностную форму $\nabla^2 \phi$ и $\nabla \phi$, а также некоторую информацию о точности. Представляемые алгоритмы решения уравнения Пуассона являются прямыми (не итеративными) и для перехода от $\rho(x)$ к $\phi(x)$ используют или дискретные ряды Фурье, или обращение матриц.

Для модели с любым числом измерений у вычислителя есть возможность выбирать граничные условия для потенциалов и

частиц, а также свобода использования симметрии. В двух- и трехмерных системах модели могут быть полностью периодическими, или полностью ограниченными, или с различными граничными условиями по двум или трем координатам, а границы могут быть нерегулярными, со смешанными граничными условиями.

Для представления части бесконечной плазмы используются периодические системы. Такие системы с необходимостью являются нейтральными по заряду:

$$0 = \int \mathbf{E} \cdot d\mathbf{S} = \int \rho dv.$$

Поскольку это соотношение выполняется для областей плазмы с размером, большим нескольких дебаевских длин, и расположенных вдалеке от стенок, периодические системы широко используются. Разница в граничных условиях для одно-, двух- и трехмерных периодических систем невелика, и в дальнейшем необходимо остановиться лишь на рассуждениях, связанных с $\kappa=0$.

В ограниченной системе заряды и потенциалы или поля заданы на всех границах. Эти системы не обязаны быть нейтральными. Если система представляет собой заземленный прямоугольный ящик, то она похожа на одномерную систему с заземленными границами при $x=0$ и L [т. е. $\phi(0)=0=\phi(L)$], с которой легко справиться, используя либо синус-ряды Фурье, либо конечные разности; обобщение на двух- и трехмерный случаи очевидно.

Открытая граница применяется для описания поверхности раздела между плазменной областью, описываемой уравнением Пуассона $\nabla^2\phi = -\rho$, и вакуумом, где выполняется уравнение Лапласа $\nabla^2\phi = 0$. На такой границе потенциалы должны подбираться. Пусть, например, в $1d$ плазма расположена при $x < L$, а при $x > L$ будет вакуум, где $\phi(x) = Ax + B$. Однако для той же открытой границы в $2d$ при условии периодичности ϕ по y решение уравнения Лапласа имеет вид $\exp(-\kappa_y(x-L)) \exp(i\kappa_y y)$, что указывает на затухание при удалении от $x=L$ при $\kappa_y \neq 0$; член с $\kappa_y=0$ дает то же решение, что в $1d$.

Возможны смешанные граничные условия, сочетающие периодические, закрепленные и открытые условия, для них комбинируются приемы, приведенные в этой главе.

Итак, мы видим, что существуют определенные различия между одномерными и двух- и трехмерными моделями. В настоящей главе рассмотрены некоторые новые аспекты.

14.2. ДВУХМЕРНАЯ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКАЯ ПРОГРАММА В ЦЕЛОМ

Здесь мы рассмотрим всю программу в целом. Детали отдельных ее частей обсуждаются ниже. Частицы имеют

координаты x_i , y_i и скорости v_{xi} , v_{yi} . Для получения полей из плотностей заряда и тока частиц используется показанная на рис. 14.1 пространственная сетка с узлами $X_j=j\Delta x$, $Y_k=k\Delta y$. Для того чтобы различать представляющиеся необходимыми детали и избежать численных неприятностей, размер сетки выбирается достаточно малым (для горячей плазмы, грубо говоря, необходимо выдерживать $\lambda_B > \Delta x/3$). Достаточно высокая плотность частиц обеспечивает гладкое изменение плотности, а это значит, что на одну ячейку сетки приходится несколько частиц. Так же как и в 1d, частицы выглядят имеющими конечный размер, который автоматически возникает при взвешивании частиц на сетке. Редко применяемое взвешивание опять взвешиванием по методу ближайшего узла. Взвешивание первого порядка также представляет собой линейную интерполяцию и вследствие показанной на рис. 14.2 геометрической интерпретации в дальнейшем будет называться билинейным или взвешиванием по площади. Эти веса определяются выражениями

$$\left. \begin{aligned} \rho_{j,k} &= \rho_c \frac{(\Delta x - x)(\Delta y - y)}{\Delta x \Delta y}, \\ \rho_{j+1,k} &= \rho_c \frac{x(\Delta y - y)}{\Delta x \Delta y}, \\ \rho_{j+1,k+1} &= \rho_c \frac{xy}{\Delta x \Delta y}, \\ \rho_{j,k+1} &= \rho_c \frac{(\Delta x - x)y}{\Delta x \Delta y}, \end{aligned} \right\} \quad (14.1)$$

где ρ_c — постоянная в ячейке плотность заряда ($q/\text{площадь}$), а координаты x , y частицы отсчитываются от нижнего левого узла сетки (j , k вычисляются из полных координат частицы x , y). Плотности заряда во всех узлах сетки теперь определяют правую часть уравнения Пуассона

$$\nabla^2 \phi(x, y) = -\rho(x, y). \quad (14.2)$$

В конечно-разностном виде оно записывается на пяти узлах:

$$\frac{(\phi_{j-1} - 2\phi_j + \phi_{j+1})_k}{\Delta x^2} + \frac{(\phi_{k-1} - 2\phi_k + \phi_{k+1})_j}{\Delta y^2} = -\rho_{j,k}. \quad (14.3)$$

Решение этих уравнений с использованием подходящих граничных условий (периодических, замкнутых, открытых и т. д.)

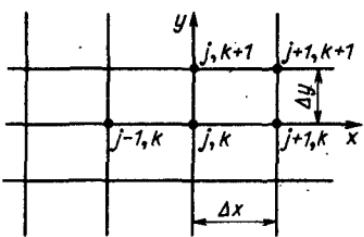


Рис. 14.1. Типичная двухмерная прямоугольная сетка в плоскости x , y

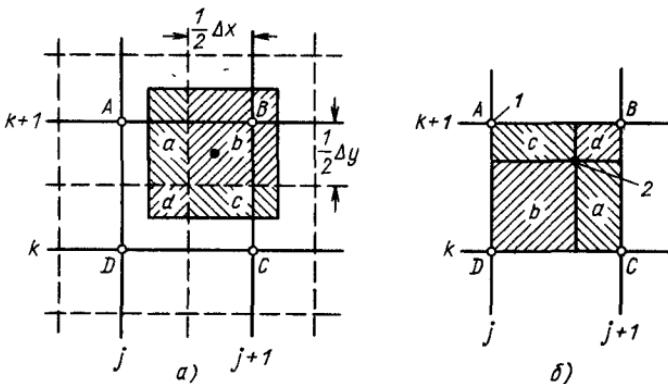


Рис. 14.2. Распределение заряда для линейного взвешивания в 2d. Узлам сетки приписываются различные площади, т. е. при указанном расположении центра частицы площадь a приписывается узлу A , b — узлу B и т. д.:
 а — интерпретация CIS; б — интерпретация при помощи билинейной интерполяции РІС
 (1 — узел сетки; 2 — частица)

приводит к значениям потенциала $\varphi_{j,k}$. Поле \mathbf{E} получается из φ при помощи соотношения

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = \nabla \varphi(\mathbf{x}). \quad (14.4)$$

В обычном двухточечном разностном виде, как показано на рис. 14.3, выражение для E_x имеет вид

$$(E_x)_{j,k} = \frac{(\varphi_{j-1} - \varphi_{j+1})_k}{2 \Delta x}, \quad (14.5)$$

а разность для E_y выглядит аналогично. Поля локализованы в тех же точках, что и потенциалы. Затем поля снова взвешиваются и вычисляются в точках расположения частиц: при линейном взвешивании для каждой компоненты поля в четырех ближайших узлах сетки и для каждой частицы используются те же веса, что и в выражениях (14.1). Наконец, так же как в гл. 4, один временной шаг завершается перемещением частиц от v_{old} к v_{new} и от x_{old} к x_{new} .

При необходимости добавляются диагностики с двухмерными снимками типа контурных графиков плотности заряда или потенциала, что является логичным при работе более чем в одном измерении.

Так выглядит простейший подход. В двухмерных электростатических моделях, тем не менее, может возникнуть необходимость использования других координат, таких как цилиндрические $r-z$ или $r-\theta$, что определяется физикой или естественными граничными условиями, а также может быть шагом в направлении полной трехмерной модели с координатами r, θ, z . Могут потребоваться высшие или низшие порядки взвешивания — их можно вывести из описанных ранее одномерных

моделей. В § 14.9 разбираются уравнения Пуассона и операторы градиента для цилиндрических сеток.

В дальнейшем обсуждаются отдельные части рассмотренного выше алгоритма, так же как точность конечно-разностного уравнения Пуассона, лучшие способы получения \mathbf{E} из ϕ , граничные условия, взвешивание и эффективная форма частиц.

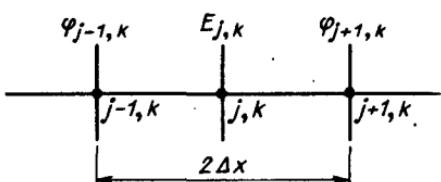


Рис. 14.3. Расположение величин $E_{j,k}$ относительно $\phi_{j,k}$

14.3. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА

Уравнения Пуассона для ϕ и ρ в конечно-разностном виде в прямоугольных координатах записаны выше [см. (14.3)]. Для ознакомления с детальными решениями этого уравнения читатель отсыпается к вводной работе [Potter, 1973] и к более подробным работам [Hockney, 1970; Hockney, Eastwood, 1981]. В начале 60-х годов Хокни, работая в Стэнфордском университете вместе с Бунеманом и Голабом, первым построил быстрые методы прямого решения уравнения Пуассона, совершив тем самым практический скачок от одно- к двух- и трехмерному моделированию частиц или жидкости. Указанные работы содержат изобилие информации, которая здесь не повторяется.

Для получения прямого решения можно, так же как и в ES1, использовать представление Фурье для ϕ и ρ ; решение дважды периодического уравнения Пуассона обсуждается ниже. В дальнейшем мы также продемонстрируем двухмерные модели пластин, которые включают в себя как преобразование Фурье, так и быстрые прямые методы. Эти модели периодичны по y и могут быть периодическими, открытыми, замкнутыми или перевернутыми по x .

Во многих моделях условия на ϕ или \mathbf{E} задаются на регулярных границах плазменных или вакуумных областей, например $x=0$, L_x и $y=0$, L_y . В моделях с электродами под заданными потенциалами внутри плазменной области необходимы заряды на электродах. Их можно получить при помощи метода матриц емкостей. Детали этого метода и его обобщения даны в работе [Hockney, Eastwood, 1981]. Метод включает в себя предварительное вычисление матрицы емкостей \mathbf{C} [Ramo, Whinnery, Van Duzer, 1965], которая связывает потенциалы внутренних электродов и заряды, индуцированные на них окружающей плазмой. Сначала решается уравнение Пуассона без зарядов на электродах, записывается разница между найденными и необходимыми потенциалами электродов. Исходимый поверхностный заряд (с обратным знаком) на каждом

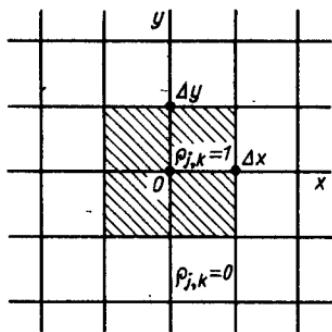


Рис. 14.4. При взвешивании нулевого порядка в $2d$ (NGP) частица имеет форму ячейки с постоянной плотностью с центром в узле сетки

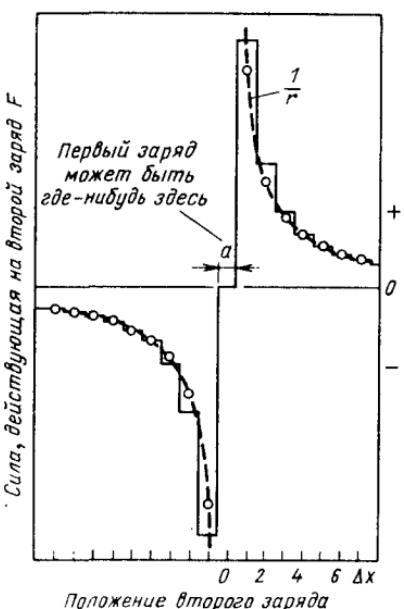


Рис. 14.5. Сила, действующая со стороны заряда из ячейки в начале координат на заряд в точке x для взвешивания нулевого порядка NGP. Второй заряд движется параллельно оси x . Штриховой линией указан физический закон $1/r$ для второй частицы, расположенной в центрах ячеек (кружки). Первый заряд расположен где-нибудь в области a

электроде получается умножением этой разности на C . Затем снова решается уравнение Пуассона с полученными поверхностными зарядами; это решение верно всюду, включая электроды.

14.4. ВЗВЕШИВАНИЕ И ЭФФЕКТИВНЫЕ ФОРМЫ ЧАСТИЦ В ПРЯМОУГОЛЬНЫХ КООРДИНАТАХ $s(x)$, $s(k)$, АНИЗОТРОПИЯ СИЛЫ

Распределение заряда частицы по соседним узлам сетки приводит к тому, что мы уже использовали при взвешивании нулевого, первого и второго порядков в $1d$: к NGP, билинейным и биквадратным сплайнам. Сейчас нас интересует эффективная форма частиц (какова анизотропия), представление Фурье (какова связь с высшими зонами Бриллюэна), а также анизотропия силы. Взвешивание при этом проводится в прямоугольных координатах; взвешивание в цилиндрических координатах обсуждается в § 14.10.

Проще всего выглядит привязка нулевого порядка к одному узлу сетки (NGP). Ближайший узел сетки находится из координат частицы $x=(x, y)$ выделением целой части $x+0,5$, $y+0,5$ (для $x, y > 0$). Заряд частицы приписывается узлу сетки,

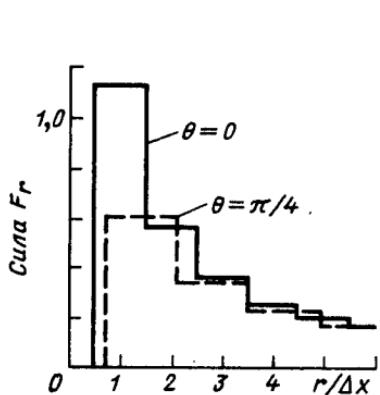
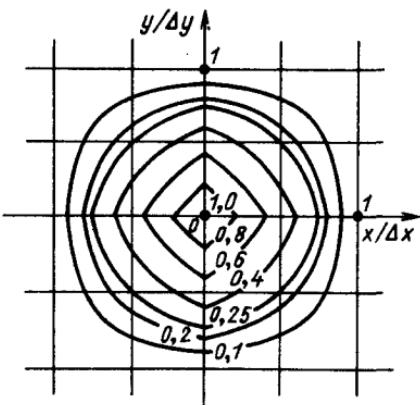


Рис. 14.6. То же, что и на рис. 14.5, но вторая частица движется под углом 45° к оси x — максимум силы уменьшается и скачки в $(2)^{1/2}$ раз длиннее

Рис. 14.7. Линии плотности частиц для линейного взвешивания в $2d$ (CIC, PIC). Полная площадь частицы равна $4\Delta x \Delta y$



если центр частицы оказывается в ячейке $(\Delta x, \Delta y)$ с центром в этом узле; если же центр частицы переходит через края ячейки, то частица приписывается следующему узлу. Форма частицы $S(x)$, изображенная на рис. 14.4, представляет собой прямоугольное облако веса 1 со сторонами Δx и Δy . Показанная на рис. 14.5 сила между двумя частицами разрывна, что приводит к шуму и саморазогреву, но при удалении зарядов на несколько ячеек приближается к физической зависимости $1/r$. Как и для любых взвешиваний, короткодействующие силы пропадают. Прямоугольная форма приводит к показанной на рис. 14.6 анизотропии силы. По этим причинам метод используется редко.

Распределение первого порядка представляет собой в двух измерениях линейное взвешивание по отношению к четырем ближайшим узлам сетки (следовательно, билинейное) и вследствие геометрической интерпретации часто называется взвешиванием по площадям, что показано на рис. 14.2. В работе [Birdsall, Fuss, 1969] использовалось название «облако в ячейке» (CIC) и частица рассматривалась как прямоугольная по определению, а доля частицы, попадающей в каждую ячейку, приписывалась ее центру. При взвешивании скорости жидкости автор работы (Harlow, 1964) использовал название «частица в ячейке» (PIC). Следуя ему, Morse, Nielson (1969) также рассматривали частицу как точечную, но ее заряд при помощи линейной интерполяции приписывали ближайшим узлам сетки. Веса определяются выражениями (14.1). Другой способ взвешивания в точке j, k (при x, y в единицах $\Delta x, \Delta y$) имеет вид

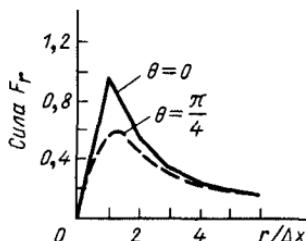
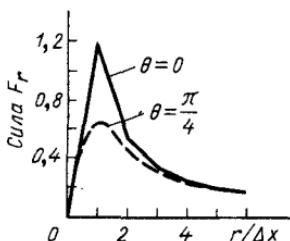


Рис. 14.8. Сила между двумя частицами для линейного взвешивания (CIC, PIC) (слева). Положительный заряд расположен в начале координат. Показана сила, действующая на положительный заряд, движущийся вдоль оси x или под углом 45° к ней. Использован 5-точечный шаблон для уравнения Пуассона. Справа то же, что и слева, но шаблон 9-точечный

$$\Delta x \Delta y S(x, y) = \begin{cases} (1 - |x|)(1 - |y|); & |x| \leq 1, |y| \leq 1, \\ 0 & \text{в противоположном случае.} \end{cases} \quad (14.6)$$

Форму частицы можно воспроизвести, измеряя приписанный узлу сетки заряд при движении частицы относительно этой точки. Следовательно, (14.6) определяет форму частицы. На рис. 14.7 показано улучшение формы по сравнению с плоской прямоугольной ($\Delta x, \Delta y$) частицей в методе NGP, но частица все еще не вполне круглая. Показанная на рис. 14.8 сила теперь кусочно-непрерывна, что приводит к уменьшению шума и саморазогрева по сравнению с методом NGP.

Информативным оказывается преобразование Фурье форм-фактора частицы $S(x, y)$. В частности, $S(\kappa_x, \kappa_y)$ определяет связь основной зоны Бриллюэна ($|\kappa_x \Delta x| < \pi, |\kappa_y \Delta y| < \pi$) с меньшими длинами волн, или эффект наложения. Для линейного взвешивания (CIC, PIC) функция $S(\kappa)$ изображена на рис. 11.8. Отметим, что функции $S(\kappa_x, 0)$ и $S(0, \kappa_y)$ те же, что и в 1d, так что взаимодействие зон $|p_x| = 1, p_y = 0$ и $p_x = 0, |p_y| = 1$ с основной зоной $(0, 0)$ столь же велико, сколь и в 1d [p определено формулой (8.66)]. Взаимодействие с зоной $(1, 1)$ намного меньше, так как $S_{\max}(1, 1) \approx 0,15$ [тогда как $S_{\max}(0, 1) \approx 0,4$]. Отметим, что функция $S(\kappa_x, \kappa_y)$ в зоне $(0, 0)$ очень близка к $S(\kappa)$, где $\kappa = (\kappa_x^2 + \kappa_y^2)^{1/2}$, и остается в достаточной степени изотропной в зонах $(0, 1), (1, 0)$ и $(1, 1)$. Сравните это с соответствующим выражением для изображенного на рис. 11.7 «улучшенного диполя», у которого анизотропия больше, больше величина $|S|$ вне зоны $(0, 0)$ и, следовательно, больше эффект наложения.

Во втором порядке распределение по девяти ближайшим узлам сетки (QS, квадратичный сплайн)

$$S(x, y) = S(x) S(y), \quad (14.7)$$

где $S(x)$ совпадает с S_2 в (8.55) — (8.57). Контуры плотности, профили и сила изображены на рис. 14.9. При взвешивании частиц по девяти точкам возникает дополнительная вычисли-

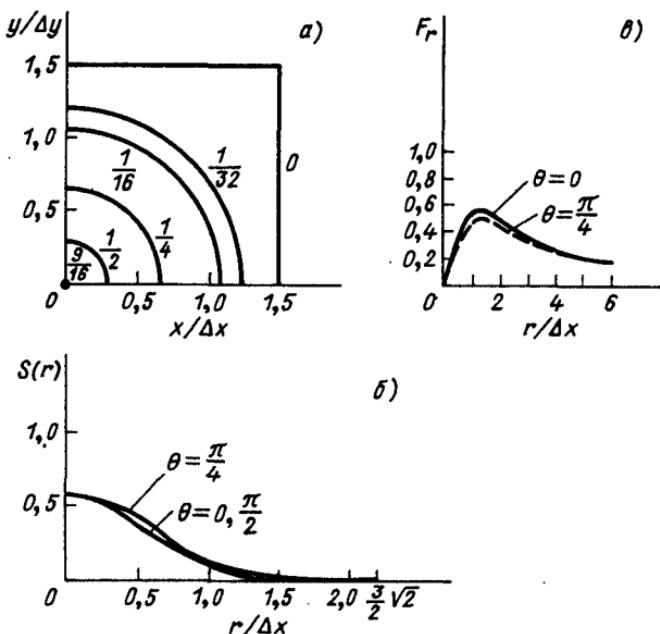


Рис. 14.9. Линии плотности частиц для квадратичного взвешивания в $2d$ (QS). Полная площадь частицы $9\Delta x \Delta y$ (а). Профиль формфактора $S(r)$ (или плотности) вдоль радиуса частицы, вдоль оси x или y и между ними (б). Сила (см. предыдущие рисунки) для квадратичного взвешивания в $2d$ (QS) (в)

тельная погрешность (по сравнению с одной точкой в NGP, четырьмя точками в CIC, PIC), но зато теперь частица почти круглая. Кроме того, увеличивается площадь частицы: при $\Delta x = \Delta y$ в методе NGP площадь частицы $(\Delta x)^2$, для CIC, PIC площадь составляет $4(\Delta x)^2$, а для QS площадь частицы $9(\Delta x)^2$.

Мы рекомендуем читателю, прежде чем использовать какой-либо новый способ взвешивания, получить для него $S(k)$.

14.5. ДВАЖДЫ ПЕРИОДИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ

Поскольку мы знаем много важных подробностей о программе решения уравнения Пуассона в $1d$, полезно описать ее обобщения на $2d$. Подчеркнем также необходимость рассмотрения предела $k=0$ в двухмерных периодических кодах.

Дважды периодический алгоритм решения уравнения Пуассона. Метод дискретного преобразования Фурье непосредственно применим к дважды периодической модели, как это сделано в ZOHAR. Система состоит из $N_x = L_x / \Delta x$ на $N_y = L_y / \Delta y$ ячеек. Здесь используются имена подпрограмм из ZOHAR; читатель может восстановить детали, добавив вызовы используемых при преобразовании подпрограмм RPFTI2 и CPFT, которые приведены в приложении А.

RHO — это преобразование Фурье плотности заряда и его нормализованная величина (приравниваемая RHOPHI):

$$\rho_{l,m} = \Delta x \Delta y \sum_{\ell=0}^{N_y-1} e^{-i k_y y_\ell} \sum_{j=0}^{N_x-1} e^{-i k_x x_j} \rho_{j,\ell}, \quad (14.8)$$

где $k_x = 2\pi l/L_x$; $k_y = 2\pi m/L_y$. Расчет осуществляется подпрограммой RPPFT, которая вычисляет определенные следующим образом синус- и косинус-коэффициенты:

$$\begin{bmatrix} CS_{l,m} & SS_{l,m} \\ CC_{l,m} & SC_{l,m} \end{bmatrix} = \Delta x \Delta y \sum_{\ell} \begin{bmatrix} \cos k_x X_j \sin k_y Y_\ell & \sin k_x X_j \sin k_y Y_\ell \\ \cos k_x X_j \cos k_y Y_\ell & \sin k_x X_j \cos k_y Y_\ell \end{bmatrix}, \quad (14.9)$$

где l изменяется от 0 до $N_x/2$, а m — от 0 до $N_y/2$. Величины $\rho_{l,m}$ можно теперь построить так:

$$\rho_{l,m} = (CC_{l,m} - SS_{l,m}) - i(CS_{l,m} + SC_{l,m}). \quad (14.10)$$

С учетом симметрии синус- и косинус-коэффициентов аналогично можно найти $\rho_{l,m}$ и при лежащих в других квадрантах l, m . Коэффициенты записываются в массиве RHOK, приравненном к RHOPHI в соответствии с

$$RHOK(-L, M) = CS_{l,m}, \quad RHOK(L, M) = SS_{l,m}, \quad (14.11a)$$

$$RHOK(-L, -M) = CC_{l,m}, \quad RHOK(L, -M) = SS_{l,m}. \quad (14.11b)$$

Получаемые из (8.74) коэффициенты потенциала равны

$$\Phi_{l,m} = \rho_{l,m} / K_{l,m}^2, \quad (14.12)$$

где

$$K_{l,m}^2 = k_x^2 \text{dif}^2 \frac{k_x \Delta x}{2} + k_y^2 \text{dif}^2 \frac{k_y \Delta y}{2}. \quad (14.13)$$

В континуальном пределе необходимо положить $K_{l,m}^2 = k_x^2 + k_y^2$.

Осуществляемое RPPFTI обратное преобразование имеет вид

$$\Phi_{j,\ell} = \frac{1}{L_x L_y} \sum_{l=-N_x/2}^{N_x/2-1} \sum_{m=-N_y/2}^{N_y/2-1} e^{-i k_x x_j} e^{-i k_y y_\ell} \Phi_{l,m}. \quad (14.14)$$

Потенциал и его преобразование записываются в массивах PHI и PHIK, которые также приравниваются к RHOPHI. Таким образом, в памяти плотность, потенциал и их преобразования занимают одно и то же место, заменяя друг друга в порядке RHO, RHOK, PHIK, PHI. Использование в этой программе

различных идентификаторов указывает на то, какая величина обрабатывается в данный момент времени и позволяет при преобразованиях использовать удобную индексацию.

Так же как и в континуальном пределе, энергию поля можно вычислять как в действительном, так и в \mathbf{k} -пространстве:

$$\int dx dy \frac{\rho \Phi}{2} \rightarrow \Delta x \Delta y \sum_{j,\ell} \frac{1}{2} \rho_{j,\ell} \Phi_{j,\ell} = \\ = \frac{1}{L_x L_y} \sum_{l=-N_x/2}^{N_x/2-1} \sum_{m=-N_y/2}^{N_y/2-1} \frac{1}{2} \rho_{l,m}^* \Phi_{l,m}. \quad (14.15)$$

Отметим, что в этой сумме заданные синус- и косинус-коэффициенты Фурье могут появляться по меньшей мере 4 раза. Индексы разделяются на две части: от $l=0$ до $N_x/2$ и от $\pm l=1$ до $N_x/2-1$. Для m точно так же.

Периодические граничные условия: поля с $\mathbf{k}=0$. Выше были приведены граничные условия на потенциал и частицы для некоторых двухмерных моделей, таких как периодические по y и открытые или замкнутые или какие-либо другие по x модели пластины. Связь с внешними цепями, включая изменение по времени $\mathbf{E}(\mathbf{k}=0)$, вызванное внешним источником тока, упоминалась в § 4.11 и обсуждается ниже, в гл. 16. Здесь мы добавим кое-что к обсуждению в § 4.11 о важности аккуратного подхода к пространственно-усредненному полному току ($\mathbf{k}=0$).

По отношению к граничным условиям оказывается выделенной постоянная в пространстве ($\mathbf{k}=0$) компонента полной плотности тока

$$\mathbf{J}_{\text{total}, \mathbf{k}=0} = \left(\mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right)_{\mathbf{k}=0}. \quad (14.16)$$

Обычная электростатическая периодическая модель может иметь одно или некоторые из следующих свойств:

нейтральность в целом с $\rho(\mathbf{k}=0)=0$, что иногда ошибочно интерпретируется как $\mathbf{E}(\mathbf{k}=0)=0$;

может не быть полного тока, отличного от плазменного, при этом для любых \mathbf{k} , включая $\mathbf{k}=0$, $\mathbf{J}_{\text{total}}=0$, и в этом случае можно говорить о разомкнутой цепи;

Φ может быть периодичным, например $\Phi(0)=\Phi(L)$ [$\mathbf{E}(\mathbf{k}=0)=0$], следовательно, можно говорить о замкнутой цепи;

нет полного потока энергии в систему или из системы. Такие модели, следовательно, можно назвать неуправляемыми, изолированными или замкнутыми.

Тем не менее нас могут интересовать модели, в которых необходим учет полей с $\mathbf{k}=0$, для того чтобы не возникало «дыр» в спектре мод, существенных для нелинейных процессов типа параметрической неустойчивости, или просто для обеспече-

ния возвращающей силы для плазменных колебаний с $k=0$ (когда все электроны движутся в одном направлении, в результате чего на одном конце системы остаются одни ионы, а на другом — электроны, а в середине возникает постоянное E). Например, для управляемой системы можно независимо от плазменного тока добавить $E(k=0)=E_0 \cos \omega_0 t$ (такая возможность есть в ES1).

Различие между неуправляемыми и управляемыми системами было обнаружено при изучении электростатических солитонов и двухпотоковой неустойчивости. В работе [Morales, Lee, White, 1974] обнаружена релаксация колебаний между хорошо определенной полостью в плазме и флуктуациями малой амплитуды, что соответствует неуправляемой системе. Однако при замене граничных условий условиями, соответствующими управляемой системе, обнаружилось схлопывание кциальному солитону. При одномерном электростатическом моделировании управляемых систем [Valeo, Kruer, 1974] отмечено схлопывание к одному или нескольким солитонам. Показано также [Friedberg, Armstrong, 1968], что для «разомкнутых» условий, при которых сохраняется средний конвективный ток (его величина при $k=0$), нелинейная стабилизация линейно-неустойчивых мод холодной двухпотоковой неустойчивости происходит до захвата. Не обнаружено, однако, никакой нелинейной стабилизации для «замкнутых» граничных условий, для которых сохранялась средняя дрейфовая скорость (ее величина при $k=0$).

Итак, при $k=0$ удержание всего J_{total} или только его части может привести к существенно разным результатам.

Задачи

14.1. При малых Δx , Δy запишите (14.8) в виде двойного интеграла.

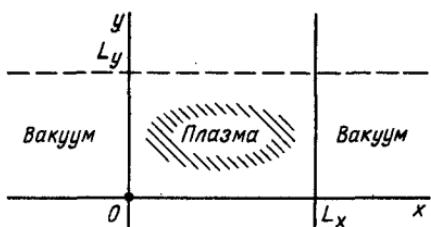
14.2. Покажите, что в (14.9) восемь коэффициентов — нули и нет необходимости записывать их в RHOK. Покажите, что число независимых элементов в RHOK в точности равно $N_x N_y$.

14.6. РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА ДЛЯ ОГРАНИЧЕННЫХ ПО x И ПЕРИОДИЧЕСКИХ ПО y СИСТЕМ

Рассмотрим методы решения уравнения Пуассона для плазменных систем, которые периодичны по y , но ограничены по x , вроде тех, которые могут встретиться при моделировании неоднородной плазмы (рис. 14.10). Решается уравнение Пуассона с граничными условиями, заданными с двух сторон системы, при $x=0$, L_x . Типичными границами являются замкнутые (определенено изменение потенциала по y) или открытые (вакуум при $|x| \rightarrow \infty$).

Внутри моделируемой области $\rho \neq 0$ и потенциал является решением уравнения Пуассона. Если моделируемая область с

Рис. 14.10. Двухмерная, периодичная по y с периодом L_y и открытая при $x=0$, L_x модель плазмы



одной или с обеих сторон граничит с вакуумом, где $\rho=0$ и потенциалы удовлетворяют уравнению Лапласа, то решение уравнения Пуассона внутри необходимо сшить с подходящим (спадающим) решением уравнения Лапласа вне моделируемой области. Эта сшивка не означает, что внутри моделируемого объемадерживаются только уходящие волны—электростатические волны отражаются от открытой границы. Метод решения задач с такими открытыми граничными условиями был разработан Бунеманом [Buneman, 1973]. Мы опишем вариант, который был использован в коде ZOHAR [Langdon, Lasinski, 1976] для границ при $x=0$, L_x и обобщен Невинсом для других случаев.

Совершим сначала преобразование Фурье плотности заряда по y :

$$\rho_{j,m} = \Delta y \sum_{\ell=0}^{N_y-1} \rho_{j,\ell} \exp\left(-i \frac{2\pi m}{N_y} \ell\right), \quad (14.17)$$

где j обозначает узлы сетки по x , ℓ —по y , m —компоненты Фурье по y и N_y —число узлов сетки на одном периоде по y ($N_y=L_y/\Delta y$). При использовании обычного двухмерного пятиточечного оператора Лапласа уравнение Пуассона сводится к виду

$$\Phi_{j+1,m} - 2d_m \Phi_{j,m} + \Phi_{j-1,m} = -\rho_{j,m} \Delta x^2, \quad (14.18)$$

где j принимает значения от 0 до N_x и

$$d_m = 1 + 2 \left(\frac{\Delta x}{\Delta y} \sin \frac{\pi m}{N_y} \right)^2. \quad (14.19)$$

В дальнейшем Δx^2 и m опускаются. Для решения (14.18) добавляется информация о граничных условиях.

Пусть, во-первых, на правой и левой границах расположены электроды под фиксированными, не зависящими от y потенциалами $\Phi_0 = V_0$ и $\Phi_{N_x} = V_L$. При $m=0$, $d_0=1$ и (14.18) совпадает с уравнением для одномерной системы с электродами, решение которой приведено в приложении Г. При $m \neq 0$ и $d_0 \neq 1$ используем стандартный метод исключения Гаусса для трехдиагональных матриц, который также приведен в приложении Г.

Во-вторых, пусть правая и левая границы открыты. Вне моделируемого объема, там, где плотность заряда равна нулю, решение уравнения (14.18) имеет вид (при $m \neq 0$)

$$\Phi_j = ar^j + br^{-j}, \quad (14.20)$$

где r — больший корень квадратного уравнения

$$r^2 - 2d + 1/r = 0 \quad (14.21)$$

(второй корень равен r^{-1}). Решение уравнения Пуассона внутри моделируемого объема приравнивается на границе вакуумному решению, которое не расходится при $|j| \rightarrow \infty$. На открытой границе с правого конца системы эта сшивка дает

$$a=0; b=\phi_{N_x} r^{N_x}; \phi_j=\phi_{N_x} r^{N_x-j}; j \geq N_x; \phi_{N_x+1}=r^{-1} \phi_{N_x}, \quad (14.22)$$

где N_x обозначает крайний правый узел сетки, на котором при моделировании собирается заряд. На открытой границе с левого конца системы эта сшивка дает

$$b=0; a=\phi_0; \phi_j=\phi_0 r^j; j \leq 0; \phi_{-1}=\phi_0 r^{-1}, \quad (14.23)$$

где 0 обозначает крайний левый узел сетки, на котором собирается заряд. Граничные условия вместе с набором (14.18) образуют трехдиагональную систему из N_x+1 уравнений, разрешимую методом, приведенным в приложении Г.

При применении обычного гауссова исключения поддиагонали оказывается, что все, за исключением последних, новые диагональные элементы равны r . Благодаря отмеченной Бунеманом [Винетан, 1973] факторизации, которая обсуждается ниже, эта система уравнений оказывается проще. Систему уравнений (14.18) запишем в виде

$$\left. \begin{array}{l} \vdots \quad \vdots \\ -\phi_{N_x-3} + 2d\phi_{N_x-2} - \phi_{N_x-1} = \rho_{N_x-2}, \\ -\phi_{N_x-2} + 2d\phi_{N_x-1} - \phi_{N_x} = \rho_{N_x-1}, \\ -\phi_{N_x-1} + r\phi_{N_x} = \rho_{N_x}. \end{array} \right\} \quad (14.24)$$

Выписывая последнее уравнение системы (14.24), мы использовали (14.21) и (14.22). Теперь можно исключить верхнюю поддиагональ и получить систему разностных уравнений первого порядка для ϕ :

$$\left. \begin{array}{l} \vdots \\ -r^{-1}\phi_{N_x-3} + \phi_{N_x-2} = r^{-1} [\rho_{N_x-2} + r^{-1} (\rho_{N_x-1} + r^{-1} \rho_{N_x})], \\ -r^{-1}\phi_{N_x-2} + \phi_{N_x-1} = r^{-1} (\rho_{N_x-1} + r^{-1} \rho_{N_x}), \\ -r^{-1}\phi_{N_x-1} + \phi_{N_x} = r^{-1} \rho_{N_x}. \end{array} \right\} \quad (14.25)$$

Система уравнений (14.25) имеет вид

$$-r^{-1}\phi_{j-1} + \phi_j = \psi_j, \quad (14.26)$$

где источник ψ удовлетворяет соотношению

$$r\psi_j - \psi_{j+1} = \rho_j. \quad (14.27)$$

Правое граничное условие на потенциал удовлетворяется, если потребовать

$$\psi_{N_x} = r^{-1} \rho_{N_x} \text{ или } \psi_{N_x + 1} = 0. \quad (14.28)$$

Можно получить (14.26) и (14.27) непосредственно из уравнения Пуассона (14.18), используя предложенную Бунеманом [Buneman, 1973] факторизацию оператора Лапласа

$$-\Phi_{j-1} + 2d\Phi_j - \Phi_{j+1} = (r - e^{+1})(1 - r^{-1}e^{-1})\phi_j, \quad (14.29)$$

где e — оператор смещения для сеточных величин, определяемый соотношением

$$e^{\pm 1}\phi_j \equiv \phi_{j \pm 1}. \quad (14.30)$$

При помощи этой факторизации (14.18) запишем в виде

$$(r - e^{+1})\psi_j \equiv r\dot{\psi}_j - \psi_{j+1} = \rho_j, \quad (14.31)$$

где ψ равно

$$(1 - r^{-1}e^{-1})\phi_j \equiv \phi_j - r^{-1}\phi_{j-1} = \psi_j. \quad (14.32)$$

Эти уравнения совпадают с полученными ранее (14.26) и (14.27).

Теперь, поскольку у нас есть граничное условие для ψ на правой открытой границе, можно при помощи (14.27) осуществить прогонку справа налево и вычислить источники ψ от $j=N_x$ до $j=0$. Граничное условие на левой границе для потенциала (14.23) необходимо для начала прогонки в обратную сторону, слева направо, в процессе которой потенциал вычисляется при помощи разностного уравнения первого порядка (14.26). Случаю $m=0$ посвящена задача 16.4.

Ленгдон и Лазински [Langdon, Lasinski, 1976] использовали другой вид факторизации, а именно $(r - e^{+1})\psi_j$ и $\psi_{-1} = 0$, так что они находили ψ прогонкой слева направо, а ϕ — справа налево. Эта факторизация и прогонка хорошо работают для случая левой открытой границы. Операции в обоих случаях те же, что и для упрощенного исключения Гаусса.

Наконец, пусть правая сторона открыта, а на левой границе потенциал задан. Первые несколько уравнений из нашей приведенной системы (14.26) запишем так:

$$\left. \begin{aligned} -r^{-1}\phi_{0,m} + \phi_{1,m} &= \psi_{1,m}; \\ -r^{-1}\phi_{1,m} + \phi_{2,m} &= \psi_{2,m}; \\ -r^{-1}\phi_{2,m} + \phi_{3,m} &= \psi_{3,m}; \\ &\vdots && \vdots && \vdots \end{aligned} \right\} \quad (14.33)$$

На этой границе ($j=0$) потенциал задан как функция u и после преобразования Фурье получается $\phi_{0,m}$. Эти значения используются в (14.33) или (14.26) для вычисления ϕ при помощи обратной прогонки слева направо.

Окончательно обратное преобразование Фурье

$$\Phi_{j,k} = \frac{1}{L_y} \sum_{m=0}^{N_y-1} \Phi_{j,m} \exp\left(i \frac{2\pi m}{N_y} k\right) \quad (14.34)$$

дает точное, в пределах ошибок округления, решение уравнения Пуассона.

Задачи

14.3. При помощи (14.19) получите d_m .

14.4. Заметим, что при $m=0$ уравнения на левой и правой открытых границах недоопределены. Покажите, что симметричное и не зависящее от положения границ на сетке решение (14.18) имеет вид

$$\Phi_j = -\frac{\Delta x^2}{2} \sum_{j'} |j' - j| \rho_{j'} \quad (14.35)$$

Это выражение можно использовать для определения Φ_{-1} и Φ_0 , что и дает необходимые для решения (14.18) граничные условия. Покажите, что (14.35) обеспечивает сохранение кинетической энергии $+1/2 \int \rho \dot{\phi} dx$ и импульса, даже если система не является нейтральной.

14.5. Рассмотрите систему с открытой левой и замкнутой правой границами. Выражение (14.23) обеспечивает сходимость потенциала при $j \rightarrow -\infty$. Теперь удобно исключить нижнюю поддиагональ системы уравнений (14.18). Найдите систему разностных уравнений первого порядка для ϕ . Каким уравнениям теперь удовлетворяют источники ψ_j ? Указание: используйте факторизацию Ленгдона и Лазински.

14.7. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИНВЕРСИОННОЙ СИММЕТРИИ ДЛЯ ПЕРИОДИЧЕСКИЙ ОТКРЫТОЙ МОДЕЛИ

При моделировании дрейфовых волн в неоднородной плазме типа изображенной на рис. 14.11 можно учитывать только одну сторону профиля плотности $x \geq 0$, уменьшая тем самым в 2 раза необходимую компьютерную память и число операций. Для того чтобы избежать мнимых или нежелательных физических эффектов, необходимо аккуратно выбирать граничные условия при $x=0$. Например, поглощающие стенки нарушают полную зарядовую нейтральность. Рядом с отражающей стенкой может возникнуть переходный слой, который и определяет физику около стенки и может подавить поддерживающий дрейфовую волну гораздо меньший градиент. Ли и Окуда [Lee, Okuda, 1978] предложили граничные условия, позволяющие избежать возникновения переходных слоев, но при этом вводятся нефизические эффекты, а именно — частицы меняют знак заряда при пересечении границы $x=0$. Нэтю и др. [Naitou et al., 1979], продолжая их исследования, продемонстрировали некие численные неустойчивости, а затем предложили некоторые новые граничные условия.

Здесь используется другой набор граничных условий, позво-

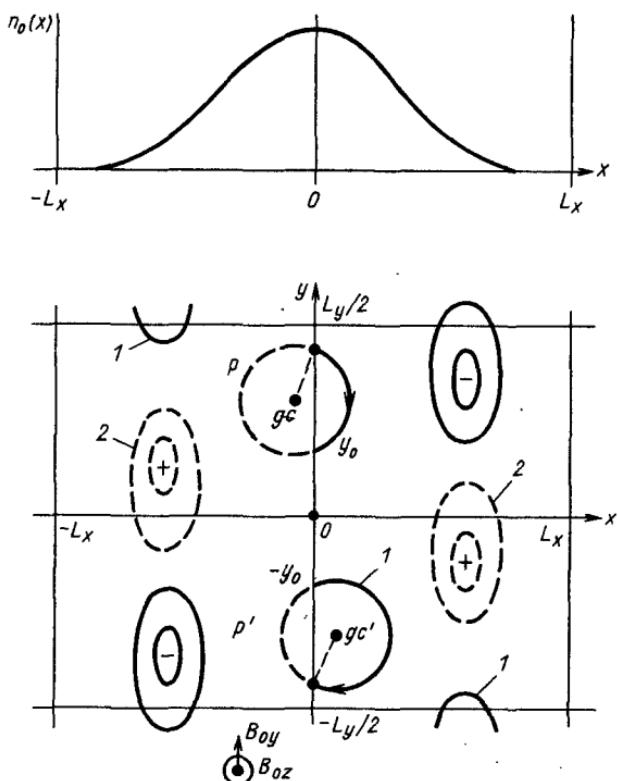


Рис. 14.11. $2\frac{1}{2}$ -мерная модель с инверсионной симметрией. Движение частицы прослеживается только в области $0 < x < L_x$ и $-L_y/2 < y < L_y/2$. Потенциалы и распределение частиц симметричны относительно точки $x=0=y$, в которой потенциал экстремален, а поле равно нулю. Возбуждаемые дрейфовые волны распространяются вверх и вниз, соответственно слева и справа от линии $x=0$. В результате при $x=0$ не нужна стена и нет переходного слоя. \mathbf{B}_0 — псевдовектор, при отражении относительно точки $x=0=y$ он не изменяется; 1 — орбита; 2 — эквипотенциали

ляющий избежать возникновения переходных слоев. Для этой модели характерны следующие свойства: 1) периодичность по y (направление распространения волны); 2) система открыта при $x > L_x$; 3) симметрия по отношению к началу координат $0, 0, 0$. Последнее свойство, называемое инверсионной симметрией, было предложено Джервером и необходимо для подходящей сшивки частиц и полей в плоскости $x=0$. Применения даны в работе [Nevis et al., 1981]. Как показано на рис. 14.11, проходящая через границу $x=0$ при $y=y_0$ частица p помещается на место частицы p' в точке $y=-y_0$ и $x=0$, при этом ее скорость (компоненты x, y, z) меняет знак. Показана также инверсия потенциала $\phi(x, y)$ через точку $(x=0=y)$. Следовательно, плазма обладает инверсионной симметрией вокруг точки $(x=0=y)$. Отсутствуют какие-либо нефизические эффекты. Пере-

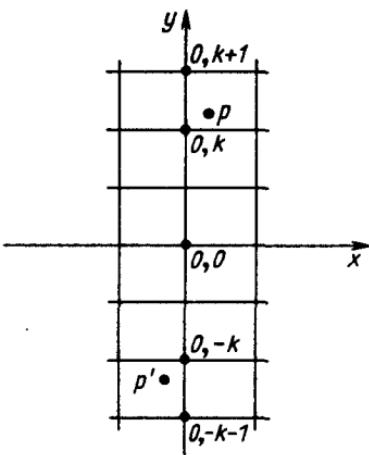


Рис. 14.12. Вклад в заряд на границе дает как частица p , так и ее образ p' (того же знака)

ходных слоев или других специфических эффектов при $x=0$ не возникает, поскольку в соответствии с физической интерпретацией там нет никакой стенки. С левой стороны одна электронная дрейфовая волна движется вверх, а другая, точно такая же, с правой стороны движется вниз. Поскольку \mathbf{B} — псевдовектор, B_{0z} и B_{0y} преобразуются сами в себя. Эти граничные условия можно также использовать на границе с низкой плотностью $x=L_x$, и в этом случае мы фактически получим периодические граничные условия с периодом $2L_x$. Но поскольку при $x=L_x$ плотность достаточно мала и очень немногие частицы достигают $x=L_x$, там можно использовать и другие граничные условия — возникающие нефизические и нежелательные физические эффекты не столь важны. Например, в работе [Chen, Nevins, Birdsall, 1983] при моделировании распространяющихся вдоль y (∇ вдоль x) дрейфовых волн безо всяких видимых затруднений использовалось отражение частиц на границе низкой плотностью $x=L_x$.

Из-за используемой симметрии вблизи плоскости $x=0$ необходима некоторая осторожность при подсчете зарядов [при накоплении зарядов около узлов сетки (j, ℓ) при каком-либо способе взвешивания]. При использовании линейного взвешивания частица в точке (x, y) , где $0 < x < \Delta x$, а y лежит между узлами сетки ℓ и $\ell+1$, распределяется по узлам $(0, \ell)$, $(0, \ell+1)$, $(1, \ell)$ и $(1, \ell+1)$; ее инверсионный «搭档» (образ, но с тем же знаком) распределяется, как показано на рис. 14.12, между узлами $(0, -\ell)$, $(0, -\ell-1)$, $(-1, -\ell)$, $(-1, -\ell-1)$.

Метод нахождения потенциалов аналогичен описанному в деталях методу § 14.5. Рассмотрим открытую правую границу с инверсионной симметрией на левой границе. Потенциал и плотность заряда полагаются имеющими инверсионную симметрию вокруг точки $j=0=\ell$, что означает

$$\left. \begin{aligned} \Phi_{-j, -\ell} &= \Phi_{j, \ell}, \\ \rho_{-j, -\ell} &= \rho_{j, \ell}. \end{aligned} \right\} \quad (14.36)$$

Затем определение дискретного преобразования Фурье (14.17) используется для демонстрации того, что из (14.36) следует

$$\left. \begin{array}{l} \varphi_{-j,m} = \varphi_{j,m}^*, \\ \rho_{-j,m} = \rho_{j,m}^*. \end{array} \right\} \quad (14.37)$$

В частности, имеем

$$\left. \begin{array}{l} \varphi_{-1} = \varphi_1^*; \\ \operatorname{Im} \varphi_0 = 0; \\ \operatorname{Im} \rho_0 = 0. \end{array} \right\} \quad (14.38)$$

Следовательно, уравнение Пуассона при $j=0$ можно записать в виде

$$2d\varphi_0 - 2\operatorname{Re} \varphi_1 = \rho_0. \quad (14.39)$$

Из первого уравнения (14.26) имеем

$$-r^{-1}\varphi_0 + \varphi_1 = \psi_1. \quad (14.40)$$

Найдем φ_0 из (14.39) и (14.40):

$$\left. \begin{array}{l} \operatorname{Re} \varphi_0 = \frac{\rho_0 + 2\operatorname{Re} \psi_1}{r - r^{-1}}, \\ \operatorname{Im} \varphi_0 = 0. \end{array} \right\} \quad (14.41)$$

Соотношения (14.41) дают необходимые граничные условия для начала прогонки слева направо и вычисления потенциала при помощи (14.26).

Задачи

14.6. Сохраняется ли импульс для частиц в области $0 < x < L_x$? Для частиц в области $-L_x < x < L_x$?

14.7. Изобразите движение пересекающей справа плоскость $x=0$ частицы при наличии только B_{0z} ; при наличии только B_{0y} ; при наличии и B_{0z} , и B_{0y} .

14.8. ТОЧНОСТЬ КОНЕЧНО-РАЗНОСТНОГО УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА

В двухмерных электростатических программах потенциал $\varphi(x, y)$ вычисляется из плотности заряда $\rho(x, y)$ при помощи решения уравнения Пуассона (14.2), (14.3). Погрешность $\nabla^2 \varphi$ (т. е. следующие члены разложения Тейлора [Collatz, 1966] имеет вид

$$-\frac{(\Delta x)^2}{12} \left(\frac{\partial^4 \varphi}{\partial x^4} + \frac{\partial^4 \varphi}{\partial y^4} \right) + \dots \quad (14.42)$$

В периодических моделях, использующих разложение Фурье, коэффициенты Фурье потенциала $\varphi_{l,m}$ и плотности заряда $\rho_{l,m}$ связаны при помощи функции $K^2(\mathbf{k}_{l,m})$ (см. § 8.9, 14.5). Разность между конечно-разностным выражением $K^2(\mathbf{k})$ и $k^2 = k_x^2 + k_y^2$ зависит от $k_x \Delta x$ (как и в одном измерении), а также от

направления \mathbf{k} . Влияние прямоугольности сетки на $\varphi_{l,m}$ характеризуется величиной R_5 , определяемой (при $\Delta x = \Delta y$ и малом $\kappa \Delta x$) следующим образом:

$$R_5 \equiv \frac{K^2}{\kappa^2} \approx 1 - \frac{(\kappa \Delta x)^2}{24} \left[\frac{\kappa_x^4 + \kappa_y^4}{(\kappa_x^2 + \kappa_y^2)^2} \right] + \text{члены высшего порядка.} \quad (14.43)$$

Умножающийся на малую величину член в квадратных скобках равен 1 вдоль любой оси и $1/2$ при $\kappa_x = \kappa_y$. Анизотропия K^2 хорошо видна на изображенной на рис. 14.13 контурной карте для R_5 — контуры ближе к квадрату, чем к кругу (как хотелось бы); на радиусе $|\kappa \Delta x| R_5$ изменяется в пределах $\pm 8\%$.

Для того чтобы улучшить $\nabla^2 \varphi$ (уменьшить погрешность) и K^2/κ^2 (уменьшить анизотропию и приблизить эту величину к 1), посмотрим, нельзя ли чего-нибудь добиться при помощи конечно-разностных лапласианов более высокого порядка — это не обязательно означает использование конечно-разностного уравнения Пуассона более высокого порядка — точка зрения, развившаяся, например, в работе [Forsythe, Wasow, 1960]. Тем не менее рассмотрим какой-нибудь из приведенных в книге [Collatz, 1960] шаблонов более высокого порядка для ∇^2 . Одна из этих девятиточечных форм (при $\Delta x = \Delta y$)

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(\Delta x)^2} [8(\varphi_{j+1,\ell} + \varphi_{j,\ell+1} + \varphi_{j-1,\ell} + \varphi_{j,\ell-1}) - 40\varphi_{j,\ell} + \\ & + 2(\varphi_{j+1,\ell+1} + \varphi_{j-1,\ell+1} + \varphi_{j-1,\ell-1} + \varphi_{j+1,\ell-1})] = \\ & = \rho_{j+1,\ell} + \rho_{j,\ell+1} + 8\rho_{j,\ell} + \rho_{j-1,\ell} + \rho_{j,\ell-1} \end{aligned} \quad (14.44)$$

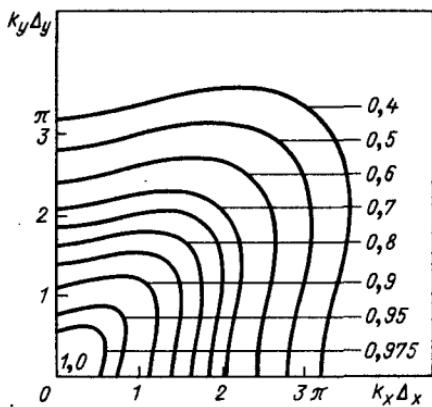
была использована в работе [Birdsall, Fuss, 1969]. Погрешность $\nabla^2 \varphi$ теперь меньше, чем определяемая соотношением (14.42); заряд собирается по пяти точкам. Если использовать двойное преобразование Фурье, то, поскольку φ и ρ легко собрать из точек $j, \ell, j \pm 1, \ell \pm 1$, объем вычислений вырастает незначительно. Контраст между силами, возникающий при использовании пяти- и девятиточечных шаблонов, показан на рис. 14.8. Окончательный результат заключается в более медленном по сравнению с (14.43) изменении K^2/κ^2 , что и приводит к нужному результату — более высокой изотропии при $\vartheta_x \approx 2$ — при радиусе, равном 2; R_9 изменяется на $\pm 4\%$.

Если преобразование $\rho \rightarrow \varphi$ совершается при помощи рядов Фурье, то можно придумать и использовать компенсацию уменьшения и анизотропии K^2/κ^2 . Разумеется, можно вычислить $\varphi(\kappa)$ просто из $\rho(\kappa)/\kappa^2$; тем не менее этот путь подразумевает нелокальный конечно-разностный алгоритм, и его недостатки обсуждаются в приложении Д.

В конце концов как бы подробно мы ни изучали точность этого последнего шага $\rho \rightarrow \varphi$, следует помнить, что интересует нас полная точность всех четырех шагов $\mathbf{x} \rightarrow \rho \rightarrow \varphi \rightarrow \mathbf{E} \rightarrow \mathbf{F}$.

Рис. 14.13. Линии уровня функции $R_5 \equiv K^2(\kappa)/\kappa^2$ демонстрируют анизотропию двухмерного пятиточечного конечно-разностного оператора Лапласа (т. е. линии не являются окружностями)

У пятиточечного уравнения Пуассона, безусловно, погрешность квадратична (что, в общем, приемлемо), а у девятиточечного еще меньше. Тем не менее погрешность на шаге $\phi \rightarrow E$ нам еще предстоит найти. Если эта погрешность превысит погрешность на шаге $\rho \rightarrow \phi$ при использовании пятиточечного лапласиана (а это не исключено), то можно пренебречь «лучшим» девятиточечным оператором.



14.9. ТОЧНОСТЬ КОНЕЧНО-РАЗНОСТНОГО ОПЕРАТОРА ГРАДИЕНТА

Поскольку ϕ получается из ρ , в случае двух измерений E находится при помощи (14.4), (14.5). Компоненты E_x и E_y сначала записываются при помощи обычной двухточечной разностной формы (14.5), где расположение ϕ изображено на рис. 14.3. Погрешность $\partial \phi / \partial x$ равна $-1/6(\Delta x)^2 \partial^3 \phi / \partial x^3$. Двухточечный конечно-разностный оператор градиента для двухмерной периодической системы можно с помощью рядов Фурье представить в виде

$$E(\kappa) = i [\hat{x} \kappa_x \text{dif}(\kappa_x \Delta x) + \hat{y} \kappa_y \text{dif}(\kappa_y \Delta y)] \phi(\kappa). \quad (14.45)$$

Здесь погрешность стоит исследовать как по величине, так и по углу — это может оказаться более существенным, чем погрешности, обнаруженные для разностного уравнения Пуассона. Мы начнем с двухточечной формы, а затем введем предложенные в работе [Boris, 1970a] четырех- и шеститочечные формы, которые также исследовались Ленгдоном в 1970 г.

Приведенная выше двухточечная разностная форма дает

$$E(\kappa) = i \kappa_x \phi(\kappa). \quad (14.46)$$

Погрешность находится из выражения

$$\kappa_{x2}/\kappa_x = \text{dif}(\kappa_x \Delta x) \approx \quad (14.47)$$

$$\approx 1 - \frac{1}{6}(\kappa_x \Delta x)^2 + \frac{1}{120}(\kappa_x \Delta x)^4 + \dots \quad (14.48)$$

При $\kappa_x \Delta x = \pi/3$ или $\lambda = 6 \Delta x$ погрешность составляет 0,17. В одномерном случае эту погрешность в величине $\nabla \phi$ можно

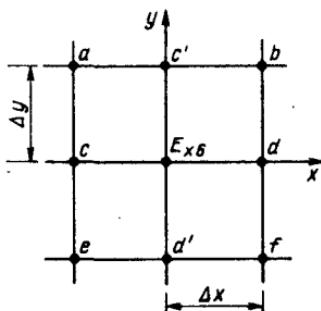
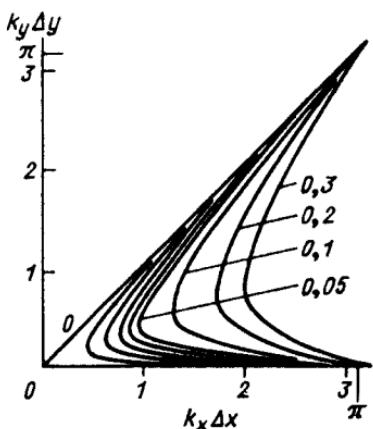


Рис. 14.14. Погрешность направления для двухточечного оператора градиента: контуры A_2 равны 0; 0,01; 0,02; 0,03; 0,04; 0,05; 0,1; 0,2; 0,3. Контуры следует отразить относительно линии 45° ($A_2=0$)

Рис. 14.15. Сетка, используемая для шеститочечной разностной схемы в $2d$. Величина E_x вычисляется по 6 точкам $a-f$. Для E_y используются точки a, e, c', d', b, f . Таким образом, для вычисления $\mathbf{E} = -\nabla \varphi$ нужно 8 точек

скомпенсировать просто, умножая каждое φ_k на $1/\text{dif}(\mathbf{k} \Delta x)$; поскольку E_x и E_y по-разному зависят от \mathbf{k} , в двух- и трехмерном случаях столь простая компенсация невозможна — дающее точное E_x скорректированное значение φ приведет к погрешности в E_y и E_z . Изменение φ влияет только на величину E ; кроме того, возникает изображенная на рис. 14.14 погрешность направления, которая определяется синусом угла между \mathbf{k} и \mathbf{x}_2 :

$$A_2 \equiv \sin \vartheta_2 \equiv \frac{|\mathbf{k} \times \mathbf{x}_2|}{|\mathbf{k}| |\mathbf{x}_2|}, \quad (14.49)$$

$$A_2 = \frac{\vartheta_x \vartheta_y |\text{dif} \vartheta_y - \text{dif} \vartheta_x|}{(\vartheta_x^2 + \vartheta_y^2)^{1/2} (\vartheta_x^2 \text{dif}^2 \vartheta_x + \vartheta_y^2 \text{dif}^2 \vartheta_y)^{1/2}}. \quad (14.50)$$

При $\vartheta_x \approx 2$, $\vartheta_y \approx 0,75$ $A_2 = 0,3$ (это значит, ошибка направления составляет $0,3$ рад, или $17,5^\circ$, что довольно много), и при $\vartheta_x \approx 1$, $\vartheta_y \approx 0,5$ $A_2 = 0,05$. При малых ϑ_x , ϑ_y

$$A_2 \approx \frac{1}{6} \frac{|\mathbf{k}_x \mathbf{k}_y|}{\mathbf{k}_x^2 + \mathbf{k}_y^2} |(\mathbf{k}_y \Delta y)^2 - (\mathbf{k}_x \Delta x)^2|. \quad (14.51)$$

В трехмерной кубической решетке при $\mathbf{k}_x \Delta x$, $\mathbf{k}_y \Delta y$, $\mathbf{k}_z \Delta z$ меньше $\pi/3$ максимальная двухточечная погрешность направления составляет $0,07$ рад, или относительная погрешность равна 7% .

Теперь перейдем к шеститочечной разностной схеме (в двух измерениях) и десятиточечной (в трех измерениях). Можно получить гораздо большую точность, не сдвигая потенциал на полшага сетки. При переходе к шеститочечной формуле (в двух измерениях) после учета всех требований симметрии остается свобода в выборе одного параметра. Этот параметр можно выбрать так, чтобы пропал квадратичный член в выражении для погрешности направления. В результате разностная схема, использующая двухмерную сетку на рис. 14.15, имеет вид

$$E_{x6} = -\frac{1}{3} \left(\frac{1}{2} \frac{\Phi_b - \Phi_a}{2 \Delta x} + 2 \frac{\Phi_d - \Phi_c}{2 \Delta x} + \frac{1}{2} \frac{\Phi_f - \Phi_e}{2 \Delta x} \right). \quad (14.52)$$

Коэффициенты $(1/2, 2, 1/2)$ не зависят от $\Delta x / \Delta y$. Используя значок e , определяемый из соотношения

$$e_x^\alpha \Phi_{j,\ell,l} = \Phi_{j+\alpha,\ell,l}, \quad (14.53)$$

в двухмерном случае получаем

$$E_{x6} = -\frac{1}{3} \frac{e_x^1 - e_x^{-1}}{2 \Delta x} \left(\frac{e_y^1}{2} + 2 + \frac{e_y^{-1}}{2} \right) \Phi_{j,\ell}, \quad (14.54)$$

или в представлении Фурье

$$\kappa_{x6} = \kappa_x \operatorname{dif} \vartheta_x \left(\frac{2 + \cos \vartheta_y}{3} \right). \quad (14.55)$$

При малых ϑ_x и ϑ_y это означает, что

$$\kappa_6 \approx k \left(1 - \frac{\vartheta_x^2 + \vartheta_y^2}{6} \right) + O(\kappa^5) \quad (14.56)$$

(очень хорошо, что здесь нет анизотропии с точностью до κ^5). Погрешность направления равна

$$A_6 = \frac{\vartheta_x \vartheta_y \left| \operatorname{dif} \vartheta_y \left(\frac{2 + \cos \vartheta_x}{3} \right) - \operatorname{dif} \vartheta_x \left(\frac{2 + \cos \vartheta_y}{3} \right) \right|}{(\vartheta_x^2 + \vartheta_y^2)^{1/2} \left[\vartheta_x^2 \operatorname{dif}^2 \vartheta_x \left(\frac{2 + \cos \vartheta_y}{3} \right)^2 + \vartheta_y^2 \operatorname{dif}^2 \vartheta_y \left(\frac{2 + \cos \vartheta_x}{3} \right)^2 \right]^{1/2}}, \quad (14.57)$$

что изображено на рис. 14.16; при $\vartheta_x \approx 2$, $\vartheta_y \approx 1$ $A_6 \approx 0,05$. При малых ϑ_x и ϑ_y

$$A_6 \approx \frac{1}{180} \frac{\vartheta_x \vartheta_y}{\vartheta_x^2 + \vartheta_y^2} |\vartheta_y^4 - \vartheta_x^4|. \quad (14.58)$$

Это значительное уменьшение по сравнению с двухточечной и четырехточечной схемами. Наибольшая погрешность в области $\max(\vartheta_x, \vartheta_y) \leq \pi/3$ при $\Delta x = \Delta y$ составляет теперь около 0,002 рад — примерно в 25 раз меньше, чем A_2 . На больших

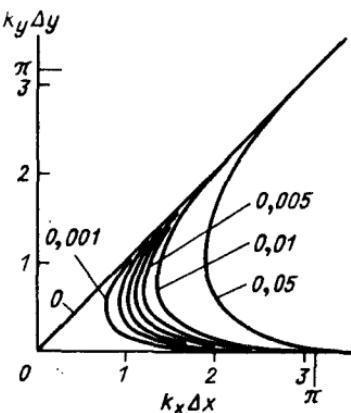


Рис. 14.16. Контуры погрешности направления A_6 для шеститочечной разности в $2d$

можно получить, используя исходный профиль заряда и БПФ для уравнения Пуассона.

Напомним, что до тех пор, пока не доказана возможность уменьшения относительных погрешностей, возникающих в других местах, нет смысла добиваться большей точности и на этом шаге.

В трех измерениях используются 10 точек, где 4 дополнительные расположены в плоскости xz ; x -компоненты равны

$$E_{x10} = -\frac{1}{3} \left(\frac{1}{2} \frac{\Phi_b - \Phi_a}{2 \Delta x} + \frac{\Phi_b - \Phi_a}{2 \Delta x} + \frac{1}{2} \frac{\Phi_f - \Phi_e}{2 \Delta x} + \frac{\Phi_d - \Phi_c}{2 \Delta x} + \frac{1}{2} \frac{\Phi_h - \Phi_g}{2 \Delta x} + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \frac{\Phi_j - \Phi_i}{2 \Delta x} \right). \quad (14.59)$$

Из преобразования Фурье находим

$$\kappa_{x10} = \kappa_x \operatorname{dif} \vartheta_x \left(\frac{1 + \cos \vartheta_y + \cos \vartheta_z}{3} \right). \quad (14.60)$$

Для кубической решетки максимальная погрешность направления A_{10} при всех $\vartheta_x, \vartheta_y, \vartheta_z$ меньше $\pi/3$ и составляет 0,0075 рад.

Задача

14.8. Погрешность можно также уменьшить, используя конечно-разностные операторы более высокого порядка на трех и более точках вдоль оси. Пусть, например, градиент вычисляется по четырем точкам по x

$$-\left[\frac{\alpha(\varphi_{j+1} - \varphi_{j-1})}{2 \Delta x} + \frac{(1-\alpha)(\varphi_{j+2} - \varphi_{j-2})}{4 \Delta x} \right].$$

Покажите, что представление Фурье дает

$$i \kappa_x [\alpha \operatorname{dif} \kappa_x \Delta x + (1-\alpha) \operatorname{dif} 2 \kappa_x \Delta x],$$

длинах волн преимущество гораздо больше из-за зависимости вида $|\vartheta_y^4 - \vartheta_x^4|$.

Шеститочечную формулу можно, разумеется, использовать при любом способе решения уравнения Пуассона — погрешность направления по-прежнему уменьшится. Так, из-за квадратичной зависимости от ϑ_x, ϑ_y использование пятиточечного алгоритма для уравнения Пуассона и шеститочечной разностной формулы для ускорения эквивалентно решению задачи с модифицированным профилем заряда, и примерно ту же относительную точность

能得到 задание с модифицированным профилем заряда, и примерно ту же относительную точность

что при $\alpha=4/3$ и малых $k_x \Delta x$ равно

$$ik_x \left[1 - \frac{1}{30} (k_x \Delta x)^4 + \dots \right].$$

Покажите, что в двух измерениях угловая погрешность при малых $k \Delta x$ для этой восьмиточечной схемы равна $6A_6$, но меньше, чем A_2 и A_4 .

14.10. КОНЕЧНО-РАЗНОСТНОЕ УРАВНЕНИЕ ПУАССОНА В ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ КООРДИНАТАХ

Цилиндрические координаты часто оказываются полезными. Ниже описывается метод получения конечно-разностных уравнений, связывающих E , ϕ и ρ в координатах (r) , (r, z) и (r, θ) , который оказался полезным во многих приложениях, связанных с дифференциальными уравнениями в частных производных с законами сохранения (в данном случае сохранение заряда и потока). Обходятся трудности со взвешиванием и расходностью при $r \rightarrow 0$.

Этот метод допускает неравномерное распределение по r , обобщение на случай неравномерного распределения по θ и z , приводит к симметричным матрицам ϕ , не имеет расходимостей при $r=0$ и точно сохраняет интеграл потока. Такой же метод можно применить и в сферических координатах.

Взвешивания для частиц и полей приведены ниже.

Зависимость только от r . В одномерном случае при зависимости только от радиуса (нет изменений по θ и z) расположим и обозначим (при помощи индекса j) сеточные величины, как показано на рис. 14.17. Частицы представляют собой однородные вдоль z цилиндрические оболочки. Заряды частиц приписываются узлам сетки при помощи взвешивания, обеспечивающего точное сохранение заряда

$$\sum_{i=0}^N q_i = q_{\text{total}} = \sum_{j=0}^{N_r-1} Q_j. \quad (14.61)$$

Использование закона Гаусса гарантирует сохранение потока. Применение закона Гаусса к цилиндрической поверхности $j=1/2$ дает (в рационализованных единицах СГС или МКС с $\epsilon=1$) радиальное электрическое поле зарядов

$$Q_0 = 2\pi r_{1/2} E_{1/2}, \quad (14.62)$$

а между поверхностями $j=1/2, 3/2$

$$Q_1 = 2\pi r_{3/2} E_{3/2} - 2\pi r_{1/2} E_{1/2} \quad (14.63)$$

и т. д., где $r_{j+1/2}$ — какой-то радиус из рассматриваемого интервала, например $1/2(r_{j+1} + r_j)$. Для получения уравнения на ϕ используем простую разность

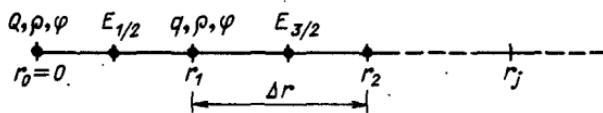


Рис. 14.17. Расположение сеточных величин для одномерной радиальной сетки, $j=0, 1, 2\dots$. Расстояние между узлами сетки не обязательно постоянно

$$E_{j+1/2} = -\frac{\Phi_{j+1} - \Phi_j}{\Delta r_{j+1/2}}, \quad (14.64)$$

где $\Delta r_{j+1/2} \equiv r_{j+1} - r_j$, т. е. закон Гаусса выглядит как

$$\mathcal{Q}_j = -2\pi r_{j+1/2} \frac{\Phi_{j+1} - \Phi_j}{\Delta r_{j+1/2}} + 2\pi r_{j-1/2} \frac{\Phi_j - \Phi_{j-1}}{\Delta r_{j-1/2}}. \quad (14.65)$$

Плотность заряда $\rho_j = Q_j/V_j$. Объемы $V_j = \pi(\Delta r^2)_j$, где

$$\left. \begin{array}{l} (\Delta r^2)_j = r_{j+1/2}^2 - r_{j-1/2}^2, \\ (\Delta r^2)_0 = r_{1/2}^2. \end{array} \right\} \quad (14.66)$$

Уравнение (14.65) приводит к трехточечной конечно-разностной форме уравнения Пуассона

$$\rho_j = -\frac{2r_{j+1/2}}{(\Delta r^2)_j} \frac{\Phi_{j+1} - \Phi_j}{\Delta r_{j+1/2}} + \frac{2r_{j-1/2}}{(\Delta r^2)_j} \frac{\Phi_j - \Phi_{j-1}}{\Delta r_{j-1/2}}; \quad j > 0, \quad (14.67)$$

$$\rho_0 = -\frac{2r_{1/2}}{(\Delta r^2)_0} \frac{\Phi_1 - \Phi_0}{\Delta r_{1/2}}. \quad (14.68)$$

Результат для постоянных Δr — в задаче 14.10. Как и во всех чисто радиальных моделях, $E_r(a)$ зависит только от полного заряда, заключенного в области $r \leq a$, и не зависит от зарядов при $r > a$. Если на оси нет линейного заряда, то $E_0 = 0$.

Зависимость только от $r-z$. В двухмерной системе координат $r-z$ (нет зависимости от θ) ячейки выглядят, как на рис. 14.18, где отмечено расположение сеточных величин с индексами j, ℓ . Пусть Δz постоянно. Частицы представляют собой кольца. Для отмеченного штриховой линией объема с центром в (r_j, z_ℓ) из закона Гаусса имеем

$$\mathcal{Q}_{j,\ell} = 2\pi r_{j+1/2} \Delta z E_{r,j+1/2,\ell} - 2\pi r_{j-1/2} \Delta z E_{r,j-1/2,\ell} + \pi(r_{j+1/2}^2 - r_{j-1/2}^2)(E_{z,j,\ell+1/2} - E_{z,j,\ell-1/2}). \quad (14.69)$$

На оси ($j=0$)

$$\mathcal{Q}_{0,\ell} = 2\pi r_{1/2} \Delta z E_{r,1/2,\ell} + \pi r_{1/2}^2 (E_{z,0,\ell+1/2} - E_{z,0,\ell-1/2}). \quad (14.70)$$

Плотность заряда $\rho_{j,\ell} = \mathcal{Q}_{j,\ell}/V_{j,\ell}$, где

$$V_{j,\ell} = \pi(\Delta r^2)_j \Delta z, \quad (14.71)$$

т. е.

$$\rho_{j,k} = \frac{2}{(\Delta r^2)_j} (r_{j+1/2} E_{r,j+1/2,k} - r_{j-1/2} E_{r,j-1/2,k}) + (E_{z,j,k+1/2} - E_{z,j,k-1/2}) / \Delta z. \quad (14.72)$$

Далее, взяв E_r из (14.64) и E_z в виде

$$E_{z,j,k+1/2} = -\frac{\Phi_{j,k+1} - \Phi_{j,k}}{\Delta z}, \quad (14.73)$$

получаем пятиточечную конечно-разностную форму уравнения Пуассона для $\Phi_{j,k}$ ($j > 0$):

$$-\rho_{j,k} = \frac{2r_{j+1/2}}{(\Delta r^2)_j \Delta r_{j+1/2}} (\Phi_{j+1,k} - \Phi_{j,k}) - \frac{2r_{j-1/2}}{(\Delta r^2)_j \Delta r_{j-1/2}} (\Phi_{j,k} - \Phi_{j-1,k}) + \frac{1}{\Delta z^2} (\Phi_{j,k+1} - 2\Phi_{j,k} + \Phi_{j,k-1}); \quad (14.74)$$

$\rho_{0,k}$ вычисляется как $Q_{0,k}/V_{0,k}$, откуда

$$-\rho_{0,k} = \frac{2r_{1/2}}{(\Delta r^2)_0} \frac{\Phi_{1,k} - \Phi_{0,k}}{\Delta r_{1/2}} + \frac{\Phi_{0,k+1} - 2\Phi_{0,k} + \Phi_{0,k-1}}{\Delta z^2}. \quad (14.75)$$

Если нет линейного заряда при $r=0$, то опять $E_{r,0,k}=0$.

Зависимость только от $r-\vartheta$.

В двухмерной системе координат $r-\vartheta$ (нет изменения по z) ячейки и сеточные величины выглядят, как на рис. 14.19. Частицы представляют собой стержни. Пусть $\Delta\vartheta$ постоянно.

Рис. 14.18. Расположение сеточных величин и область интегрирования для закона Гаусса для двухмерной $r-z$ -сетки, индексы j, k

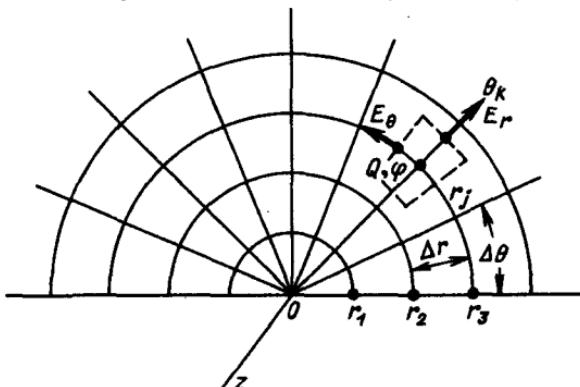
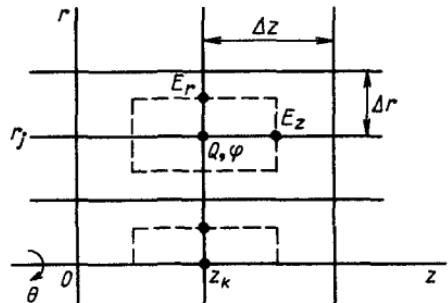


Рис. 14.19. Расположение сеточных величин и область интегрирования для закона Гаусса для двухмерной $r-\vartheta$ -сетки, индексы j, k

Для отмеченного штриховой линией объема с центром в (r_j, ϑ_k) из закона Гаусса имеем

$$Q_{j,k} = \Delta\vartheta \left(r_{j+\frac{1}{2}} E_{r,j+\frac{1}{2},k} - r_{j-\frac{1}{2}} E_{r,j-\frac{1}{2},k} \right) + \Delta r_j (E_{\vartheta,j,k+1/2} - E_{\vartheta,j,k-1/2}), \quad (14.76)$$

где $\Delta r_j \equiv r_{j+1/2} - r_{j-1/2}$. Плотность заряда вычисляется следующим образом: $\rho_{j,k} = Q_{j,k} / V_{j,k}$, где

$$V_{j,k} = \frac{\Delta\vartheta}{2} (\Delta r^2)_j, \quad (14.77)$$

т. е.

$$-\rho_{j,k} (\Delta r^2)_j = 2 \left(r_{j+\frac{1}{2}} E_{r,j+\frac{1}{2},k} - r_{j-\frac{1}{2}} E_{r,j-\frac{1}{2},k} \right) + \frac{2 \Delta r_j}{\Delta\vartheta} (E_{\vartheta,j,k+1/2} - E_{\vartheta,j,k-1/2}). \quad (14.78)$$

Взяв E_r из (14.64) и E_ϑ в виде

$$E_{\vartheta,j,k+1/2} = -\frac{\Phi_{j,k+1} - \Phi_{j,k}}{r_j \Delta\vartheta}, \quad (14.79)$$

получаем пятиточечную конечно-разностную форму уравнения Пуассона для $\Phi_{j,k}$ ($j > 0$):

$$-\rho_{j,k} (\Delta r^2)_j = \frac{2r_{j+1/2}}{\Delta r_{j+1/2}} (\Phi_{j+1,k} - \Phi_{j,k}) - \frac{2r_{j-1/2}}{\Delta r_{j-1/2}} (\Phi_{j,k} - \Phi_{j-1,k}) + \frac{2\Delta r_j}{(\Delta\vartheta)^2 r_j} (\Phi_{j,k+1} - 2\Phi_{j,k} + \Phi_{j,k-1}). \quad (14.80)$$

Применение закона Гаусса вблизи оси не столь очевидно. Рассмотрим $r - \vartheta$ -сетку как прямоугольную $j - k$ -сетку, простирающуюся вплоть до оси ($r = 0 = j$) со взвешенными по некоторому алгоритму зарядами, образующими $\rho_{0,k}$ в каждой точке $(0, k)$. С этой точки зрения закон Гаусса для поверхности $r_{1/2}$ связывает полный заряд на оси

$$Q_0 \equiv \sum_k Q_{0,k} = \sum_k \rho_{0,k} V_{0,k} \quad (14.81)$$

с полем около оси

$$Q_0 = \sum_k E_{r,1/2,k} r_{1/2} \Delta\vartheta. \quad (14.82)$$

Уравнение Пуассона на оси следует из (14.82):

$$Q_0 = - \sum_k \frac{\Phi_{1,k} - \Phi_0}{\Delta r_{1/2}} r_{1/2} \Delta\vartheta. \quad (14.83)$$

Таким образом, полный набор для уравнения Пуассона включает в себя соотношения (14.80) и (14.83). Величины $E_{r,1/2,k}$

вычисляются из $\Phi_{1,\ell}$, Φ_0 , как в (14.83), а $E_{9,1,\ell+1/2}$ вычисляются из $\Phi_{1,\ell}$ и $\Phi_{1,\ell+1}$, как в (14.79).

Поскольку хорошо обращаться с осью трудно, x — у-координаты часто предпочтительнее, чем r — ϑ -координаты.

Задачи

14.9. Частицы и сеточные заряды имеют размерности: при зависимости только от r — заряд/длина вдоль z ; при зависимости от r и z — заряд; при зависимости от r и ϑ — заряд/длина вдоль z .

Проверьте эти утверждения.

14.10. Покажите, что при постоянном Δr (14.67) приводится к виду

$$-\rho_j = \frac{\Phi_{j+1} - 2\Phi_j + \Phi_{j-1}}{(\Delta r)^2} + \frac{\Phi_{j+1} - \Phi_{j-1}}{2r_j \Delta r}, \quad (14.84)$$

где легко определить связь с объемным конечно-разностным лапласианом, приведенным, например, в работах [Sköllermo, Sköllermo, 1978; Sköllermo, 1982] и лапласианом в частных производных

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right).$$

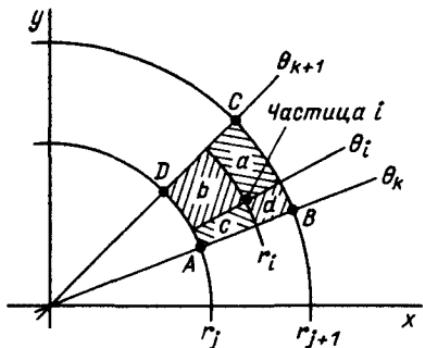
14.11. При разностной аппроксимации E_9 в последнем члене (14.78) типа $\delta E_9 / r \delta \vartheta \approx \Delta E_9 / r \Delta \vartheta$ можно заменить дугу $r_j \Delta \vartheta$ на хорду $2r_j \sin 1/2 \Delta \vartheta$. При аппроксимации φ_2 в (14.79) можно сделать такую же замену. При этом $(\Delta \vartheta)^2$ в (14.80) переходит в $(2 \sin 1/2 \Delta \vartheta)^2$. Покажите, что по отношению к постоянному полю с потенциалом типа $\Phi_{j,\ell} = -E_0 r_j \cos \vartheta_\ell$ эти замены корректны.

14.11. ВЗВЕШИВАНИЕ ЧАСТИЦ И ПОЛЕЙ В ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ КООРДИНАТАХ

Рассмотрим теперь методы взвешивания в цилиндрических координатах r — ϑ , при этом методы для r - и r — z -координат читатель может исследовать самостоятельно. Один метод взвешивания частиц заключается в билинейном (r — ϑ)-взвешивании заряда q_i на ближайших четырех узлах сетки — так же, как это делалось в прямоугольных координатах (14.1). Другой метод заключается в изображенном на рис. 14.20 билинейном (r^2 , ϑ) или квадратичном взвешивании. Пусть частица расположена в точке (r_i, ϑ_i) . Точке $A(r_j, \vartheta_\ell)$ приписывается часть заряда, равная отношению площадь a /площадь $(a+b+c+d)=f_{j,\ell}$, или

$$Q_A = Q_{j,\ell} = q_i \frac{(r_{j+1}^2 - r_j^2)(\vartheta_{\ell+1} - \vartheta_\ell)}{(r_{j+1}^2 - r_j^2)(\vartheta_{\ell+1} - \vartheta_\ell)} = q_i f_{j,\ell} \quad (14.85)$$

и т. д. Отметим, что если узлы сетки A и D лежат на оси, то эти взвешивания пригодны при $r_i < r_1$. В соответствии с изложенной выше точкой зрения $Q_{0,\ell}$ и $Q_{0,\ell+1}$ вычисляются так же, как и в конце предыдущего параграфа, и, следовательно, Q_0 удовлетворяет соотношению (14.83).



узлах сетки при помощи усреднения взвешивания, т. е.

$$E_{r,j,k} \equiv \frac{E_{r,j-1/2,k} + E_{r,j+1/2,k}}{2}. \quad (14.86)$$

Затем, как и выше, используется билинейное и квадратичное взвешивание для вычисления E_r и E_θ в точке расположения частицы, т. е. с учетом рис. 14.20 и (14.85) для i -й частицы находим

$$E_r = E_r(A)f_{j,k} + E_r(B)f_{j+1,k} + E_r(C)f_{j+1,k+1} + E_r(D)f_{j,k+1}. \quad (14.87)$$

Второе предложение состоит в использовании среднего взвешенного потока

$$r_j E_{r,j,k} \equiv \frac{1}{2}(r_{j+1/2} E_{r,j+1/2,k} + r_{j-1/2} E_{r,j-1/2,k}). \quad (14.88)$$

На оси $r=0=j$, а нам нужны E_r и E_θ для вычисления \mathbf{E} на частицах, расположенных при $r_i \leq r_1$. Одно предложение заключается в использовании соотношений

$$E_{r,0,k} = E_{r,1/2,k} \text{ и } E_{\theta,0,k+1/2} = E_{\theta,1,k+1/2}. \quad (14.89)$$

Например, такой выбор подходит для постоянного поля в вакууме (см. задачу 14.11).

Заметим, что из соотношения (14.88) следует

$$r_{j+1} E_{r,j+1,k} - r_j E_{r,j,k} = \frac{Q_{j+1,k} + Q_{j,k}}{4\pi}, \quad (14.90)$$

что является формой $\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho$. Для получения E_r в цилиндрически симметричной системе уравнение (14.90) можно проинтегрировать, что аналогично использованию правила трапеций в линейной системе. Сферически-симметричный вариант (14.90), заменяющий FIELDS, в ES1 использовался и для вычисления E_r в сферически-симметричной системе.

Рис. 14.20. Взвешивание частиц на $r=9$ -сетке — точке A приписывается заряд в соответствии с отношением площадей $a/(a+b+c+d)$, что интерпретируется как взвешивание по площади или " r^2 "-взвешивание

Таким же образом взвешиваются и поля E_r и E_θ . Однако поля, которые мы получили, расположены не в узлах сетки, а примерно в ее середине. Одно предложение состоит в том, чтобы построить поля в

узлах сетки при помощи усреднения без взвешивания, т. е.

$$E_{r,j,k} \equiv \frac{E_{r,j-1/2,k} + E_{r,j+1/2,k}}{2}. \quad (14.86)$$

Затем, как и выше, используется билинейное и квадратичное взвешивание для вычисления E_r и E_θ в точке расположения частицы, т. е. с учетом рис. 14.20 и (14.85) для i -й частицы находим

$$E_r = E_r(A)f_{j,k} + E_r(B)f_{j+1,k} + E_r(C)f_{j+1,k+1} + E_r(D)f_{j,k+1}. \quad (14.87)$$

Второе предложение состоит в использовании среднего взвешенного потока

$$r_j E_{r,j,k} \equiv \frac{1}{2}(r_{j+1/2} E_{r,j+1/2,k} + r_{j-1/2} E_{r,j-1/2,k}). \quad (14.88)$$

На оси $r=0=j$, а нам нужны E_r и E_θ для вычисления \mathbf{E} на частицах, расположенных при $r_i \leq r_1$. Одно предложение заключается в использовании соотношений

$$E_{r,0,k} = E_{r,1/2,k} \text{ и } E_{\theta,0,k+1/2} = E_{\theta,1,k+1/2}. \quad (14.89)$$

Например, такой выбор подходит для постоянного поля в вакууме (см. задачу 14.11).

Заметим, что из соотношения (14.88) следует

$$r_{j+1} E_{r,j+1,k} - r_j E_{r,j,k} = \frac{Q_{j+1,k} + Q_{j,k}}{4\pi}, \quad (14.90)$$

что является формой $\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho$. Для получения E_r в цилиндрически симметричной системе уравнение (14.90) можно проинтегрировать, что аналогично использованию правила трапеций в линейной системе. Сферически-симметричный вариант (14.90), заменяющий FIELDS, в ES1 использовался и для вычисления E_r в сферически-симметричной системе.

Задачи

14.12. Проверьте, что сумма весов в (14.85) равна единице: $Q_A + Q_B + Q_C + Q_D = q_i$. Повторите то же самое для билинейного взвешивания.

14.13. Получите из (14.88) уравнение (14.90).

14.14. Используя веса « r^2 » в (14.85), начертите приписываемую точке r_j долю заряда при изменении координаты частицы r_i от r_{j-1} до r_{j+1} . Какова при этом эффективная форма $S(r)$? Форма $S(\theta)$? Повторите для билинейного взвешивания.

14.12. ПЕРЕМЕЩЕНИЕ ЧАСТИЦ В ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ КООРДИНАТАХ

Полученную в гл. 4 векторную форму скорости можно использовать как в прямоугольной, так и в других системах координат. Тем не менее в цилиндрических координатах при передвижении частицы вблизи оси возникают сложности. Для круговой орбиты, например, использование $\Delta\theta = (v_\theta \Delta t)/r$ приводит к очень большим $\Delta\theta$ при $r \rightarrow 0$. Одно решение, предложенное в работе [Boris, 1970b], заключается в вычислении перемещения частицы в координатах (x, y) и последующем переходе к r и θ . Перемещение вдоль z такое же, как и в прямоугольных координатах. Частица в точке (r_1, θ_1) перемещается с использованием известных в момент времени $t_1 + \Delta t/2$ скоростей v_r и v_θ при помощи показанной на рис. 14.21 оси x' , которая проходит через r_1 (и параллельна v_{r_1}):

$$x'_2 = r_1 + v_{r_1} \Delta t, \quad y'_2 = v_\theta \Delta t,$$

при этом $r_2 = \sqrt{x'^2_2 + y'^2_2} \geq 0$, $\theta_2 = \theta_1 + \alpha$. Затем необходимо при помощи преобразования координат от штрихованных и дважды штрихованных отнести v_2 к новому углу θ_2 (v сохраняется):

$$\begin{pmatrix} v_r \\ v_\theta \end{pmatrix}_2 = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_r \\ v_\theta \end{pmatrix}_1,$$

где $\sin \alpha = y'_2/r_2$; $\cos \alpha = x'_2/r_2$. Если частица останавливается на оси $r_2 = 0$, то положим $\cos \alpha = 1$, $\sin \alpha = 0$, при этом все импульсы становятся радиальными, как и должно быть для остановившейся на оси частицы. Из-за центральности схемы по времени и обратимости этот метод имеет полную точность второго порядка. Плата за исчезновение погрешностей при $r=0$ — квадратный корень и вращение координат.

Задача

14.15. Покажите, что цилиндрический интегратор обратим во времени. Указание: Измените знак и продуманно поверните v .

14.13. НЕЯВНЫЙ МЕТОД ДЛЯ БОЛЬШИХ ВРЕМЕННЫХ ШАГОВ

Характерные временные масштабы коллективных плазменных явлений охватывают много порядков по величине. На наиболее быстрых временных масштабах, где решающую роль играют кинетические эффекты, для изучения нелинейной эволюции плазмы с большим успехом применялись методы частично-го моделирования. Однако как для приложений, так и для фундаментальных исследований все больший интерес представляет обобщение техники моделирования кинетических явлений на более медленные масштабы времени. Один подход к моделированию медленного поведения состоит в изменении исходных уравнений для исключения не интересующих нас высокочастотных мод. Например, в частичном моделировании применяется электростатическое приближение или приближение Дарвина. Другими подходами являются уже упоминавшиеся в § 9.7 организация подциклов, усредненные орбиты и неявное интегрирование по времени.

Самые большие частоты в плазме — это электронная ленг-мюровская ω_p и электронная циклотронная ω_{ce} . Наименьшее время — это время пробега электронов или света на характерное расстояние. Но большие масштабы времени могут определяться инерцией ионов, электромагнитными эффектами и большими пространственными размерами. Соотношение электронных и ионных плазменных и циклотронных частот, а также магнито-гидродинамических и электронных времен определяется малым параметром Zm_e/m_i , где Z — кратность ионизации. В тех случаях, когда преобладают силы, обусловленные магнитным полем и текущими по плазме токами, частоты уменьшаются по сравнению с ω_p по меньшей мере в c/v_e раз, где c и v_e — скорость света и тепловая скорость электронов. В этом параграфе применительно к плазменным кодам описан способ нахождения неявных временных конечных разностей, при котором продвижение по времени осуществляется непосредственно при помощи линеаризованных уравнений движения частиц без использования уравнений для жидкости (момента скорости) [Langdon, Barnes, 1985].

Неявные временные разности для уравнений движения частиц. Первая основная проблема заключается в выборе достаточно устойчивых при большом временном шаге конечно-разностных уравнений движения частиц, которые должны быть достаточно точны для моделирования низкочастотных явлений. Мы решили не рассматривать схемы со смещением назад, относительная погрешность которых порядка Δt . Несложно добиться относительной погрешности порядка Δt^2 — при этом погрешность $I\omega$, т. е. отношения нарастание/затухание, составляет Δt^3 .

Рис. 14.21. Координаты, используемые для перемещения частицы в цилиндрических координатах

Анализировались и применялись различные варианты конечных разностей для частиц [Cohen, Langdon, Friedman, 1982]. Здесь мы обсудим только D_1 -алгоритм (см. 9.8), называемый также схемой 1 [Barnes et al., 1983], который записывается в виде

$$\frac{\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n}{\Delta t} = \mathbf{v}_{n+1/2}, \quad \frac{\mathbf{v}_{n+1/2} - \mathbf{v}_{n-1/2}}{\Delta t} = \bar{\mathbf{a}}_n + \frac{\mathbf{v}_{n+1/2} + \mathbf{v}_{n-1/2}}{2} \times \frac{q\mathbf{B}_n}{mc}, \quad (14.91)$$

где

$$\bar{\mathbf{a}}_n = \frac{1}{2} \left[\bar{\mathbf{a}}_{n-1} + \frac{q}{m} \mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}) \right]. \quad (14.92)$$

Аналогично § 9.8 для проверки точности этой схемы можно получить и разрешить дисперсионное соотношение для гармонических колебаний:

$$(\omega_0 \Delta t)^2 + \left(\frac{2}{z} - \frac{1}{z^2} \right) \frac{(z-1)^2}{z} = 0. \quad (14.93)$$

При $\omega_0 \Delta t \lesssim 1$ получаем [Cohen, Langdon, Friedman, 1982]

$$\pm \operatorname{Re} \frac{\omega}{\omega_0} = 1 - \frac{11}{24} (\omega_0 \Delta t)^2 + \dots, \quad \operatorname{Im} \frac{\omega}{\omega_0} = -\frac{1}{2} (\omega_0 \Delta t)^3 + \dots \quad (14.94)$$

и постороннюю моду с $|z| \rightarrow 1/2$. При $\omega_0 \Delta t \gg 1$ моды сильно затухают: $|z| \rightarrow (\omega_0 \Delta t)^{-2/3}$.

Добавляя в уравнении (14.91) $1/2 \bar{\mathbf{a}}_n \Delta t$ к $\mathbf{v}_{n-1/2}$, совершая поворот и снова добавляя $1/2 \bar{\mathbf{a}}_n \Delta t$, можно найти $\mathbf{v}_{n+1/2}$. В результате получаем

$$\mathbf{v}_{n+1/2} = \frac{1}{2} \bar{\mathbf{a}}_n \Delta t + \mathbf{R} \cdot (\mathbf{v}_{n-1/2} + \frac{1}{2} \bar{\mathbf{a}}_n \Delta t), \quad (14.95)$$

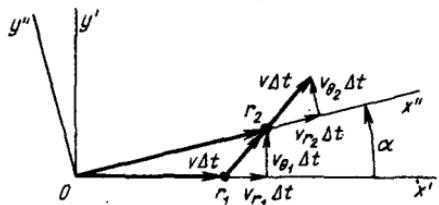
где описывающий вращение на угол $-2\operatorname{arctg}(\Omega \Delta t / 2)$ ($\Omega \equiv q\mathbf{B}_n / mc$) оператор \mathbf{R} имеет следующий вид:

$$(1 + \vartheta^2) \mathbf{R} = (1 - \vartheta^2) \mathbf{I} + 2\vartheta \mathbf{J} - 2\vartheta \times \mathbf{I}, \quad (14.96)$$

причем $\vartheta \equiv \Omega \Delta t / 2$, \mathbf{I} — единичный тензор. При малых $\Omega \Delta t$

$$\mathbf{R} \approx \mathbf{I} - \Omega \Delta t \times \mathbf{I}. \quad (14.97)$$

При больших $\Omega \Delta t$



$$R \approx -I + \frac{2\Omega}{2\Omega} - \frac{4\Omega \times I}{\Omega^2 \Delta t}. \quad (14.98)$$

Прямой метод для электростатических полей: решение неявных уравнений. Вторая основная проблема при использовании неявных кодов заключается в более сложной организации временного цикла. При использовании явных разностей временной цикл разделен между продвигающимися частицами и полями — эти вычисления чередуются и проводятся независимо. Однако неявный код должен решать зацепленную систему уравнений (8.22), (8.23) и (3.5) совместно с (14.91), (14.92) или (14.93), (14.94). Из-за того, что используется электрическое поле E_{n+1} , во всех неявных схемах будущие координаты x_{n+1} зависят от ускорений a_{n+1} . Но это поле еще не известно, так как оно зависит от плотности ρ_{n+1} частиц с координатами $\{x_{n+1}\}$. Задача состоит в решении этой большой нелинейной системы связанных уравнений для частиц и полей.

Исторически в первом методе, применявшемся для решения данной задачи, поля на новом временном уровне предсказывались при помощи решения связанной системы уравнений для полей и жидкости, причем кинетический тензор напряжений вычислялся из известных в более ранние моменты времени скоростей частиц. После того как поля становятся известными, частицы передвигаются на новый временной уровень, при необходимости снова вычисляется тензор напряжений и процесс итерируется. Такой моментный подход детально описан в работах [Denavit, 1981 и Mason, 1981].

Описываемая здесь модификация этого метода заключается в непосредственном предсказании будущих полей E_{n+1} при помощи линеаризованных уравнений движения для полей и частиц. Одна из форм этого метода, а также его улучшение и некоторые примеры, подтверждающие его действенность, приведены в работе [Friedman, Langdon, Cohen, 1981]. Другая форма метода описана в работе [Barnes et al., 1983]. Лэнгдон, Коэн и Фридман [Langdon, Cohen, Friedman, 1983] существенно обобщили алгоритм и рассмотрели много важных деталей, таких как пространственная дискретизация и фильтрация, а также итеративное решение неявных уравнений.

Сущность прямого метода состоит в том, что он имеет дело непосредственно с уравнениями движения частиц и с уравнениями, связывающими частицы и поля. Последние линеаризуются в окрестности своих ожидаемых значений (экстраполяция) на новом, $n+1$ -м временном уровне. Будущие значения $\{x, v\}$ разделяются на две части: 1) приращения $\{\delta x, \delta v\}$, зависящие от (неизвестных) полей на $n+1$ -м временном уровне, и 2) экстраполяции $\{x_{n+1}^{(0)}, v_{n+1/2}^{(0)}\}$, объединяющие все прочие вклады в уравнения движения.

Плотность заряда $\rho_{n+1}^{(0)}$ собирается по координатам $\{x_{n+1}^{(0)}\}$, затем вычисляются коэффициенты в выражении для разности $\delta\rho(\{\delta E\}) = \rho_{n+1} - \rho_{n+1}^{(0)}$ между плотностями, полученными после интегрирования с полем $E_{n+1}^{(0)}$ и с корректированным полем $E_{n+1} = \delta E + E_{n+1}^{(0)}$. В результате получается источник в законе Гаусса

$$\nabla \cdot \mathbf{E}_{n+1} = \delta\rho(\{\delta E\}) + \rho_{n+1}^{(0)}. \quad (14.99)$$

Это — линейное эллиптическое уравнение с переменными коэффициентами для определения $\delta\phi$ или Φ_{n+1} .

Точность выражения для приращений $\{\delta\rho\}$ определяется компромиссом между сложностью и быстрой сходимостью [Langdon, Cohen, Friedman, 1983; Barnes et al., 1983]. При необходимости для каждого сорта частиц $\delta\rho$ можно вычислять непосредственно как производные (8.22) — «прямая разность» [Langdon, Cohen, Friedman, 1983] или как упрощенное разностное представление (8.22) [Langdon, Cohen, Friedman, 1983; Barnes et al., 1983].

Одномерная реализация. Следующий одномерный электростатический незамагниченный пример иллюстрирует прямой неявный метод. Получающуюся в неявной схеме интегрирования по времени координату частицы x_{n+1} на временном уровне t_{n+1} запишем в виде

$$x_{n+1} = \beta \Delta t^2 a_{n+1} + \tilde{x}_{n+1}, \quad (14.100)$$

где $\beta > 0$ — контролирующий неявность параметр, для алгоритма D_1 равен $1/2$; \tilde{x}_{n+1} — координата, получающаяся из уравнений движения при пренебрежении ускорением a_{n+1} , выражена через координаты, скорости и ускорения в моменты времени, предшествующие и равные t_n . Исключая из (14.91) и (14.92) $v_{n+1/2}$, получаем

$$\tilde{x}_{n+1} = x_n + v_{n-1/2} \Delta t + \frac{1}{2} \bar{a}_{n-1} \Delta t^2. \quad (14.101)$$

В своей наиболее очевидной форме, которую мы и примем в этом примере, прямой неявный алгоритм получается при линеаризации положений частиц вблизи \tilde{x}_{n+1} , т. е. $E_{n+1}^{(0)} = 0$ и тем самым $\tilde{x}_{n+1} = \tilde{x}_{n+1}$.

Плотность заряда $\tilde{\rho}_{j,n+1}$ в узле сетки, расположенному при $X_j \equiv j \Delta x$, образуется, так же как и в (8.22), суммированием вкладов моделирующих частиц с координатами $\{\tilde{x}_{i,n+1}\}$:

$$\tilde{\rho}_{j,n+1} = \sum q_i S(X_j - \tilde{x}_{i,n+1}). \quad (14.102)$$

Если разложить S в (8.22) по координате, то

$$\delta\rho_{n+1} = - \sum_i q_i S'(X_j - \tilde{x}_{i,n+1}) \delta x_i, \quad (14.103)$$

при этом $\delta x_i = x_{i,n+1} - \tilde{x}_{i,n+1}$ и $S'(X) \equiv dS/dX$. Ускорение частицы выражается через E_{n+1} при помощи соотношения (8.23), взятого в точке \tilde{x}_{n+1} :

$$m_i a_{i,n+1} = q_i \Delta x \sum_j E_{j,n+1} S(X_j - \tilde{x}_{i,n+1}). \quad (14.104)$$

Записывая (14.103) в виде

$$\delta \rho = -[\nabla \cdot q \delta \mathbf{x} S(\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}_{n+1})]_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_j}, \quad (14.105)$$

получаем, что соотношение (14.103) является конечно-разностным представлением выражения

$$\delta \rho = -\nabla \cdot (\tilde{\rho} \delta \mathbf{x}). \quad (14.106)$$

Следовательно, мы получаем эллиптическое уравнение в частных производных

$$-\tilde{\rho} = \nabla \cdot \{[1 + \chi(\mathbf{x})] \nabla \phi\}, \quad (14.107)$$

где $\chi(\mathbf{x}) = \beta \tilde{\rho}(\mathbf{x}) (q/m) \Delta t^2$ (сумма по сортам частиц), т. е. $\chi = \beta (\omega_p \Delta t)^2$. Поскольку (14.107) похоже на уравнение поля в диэлектрической среде, мы называем χ неявной восприимчивостью. Отметим, что если $\omega_p \Delta t$ велико, а именно этот режим нас и интересует, то в первой части (14.107) преобладает вклад $\chi \gg 1$.

При экстраполяции плотности заряда $\tilde{\rho}_{j,n+1}$ и разумном конечно-разностном представлении линеаризованного неявного вклада $\delta \rho = -\partial(\chi E)/\partial x$ одномерные уравнения поля принимают вид

$$\tilde{\rho}_{j,n+1} = \frac{(1 + \chi_{j+1/2}) E_{j+1/2,n+1} - (1 + \chi_{j-1/2}) E_{j-1/2,n+1}}{\Delta x}. \quad (14.108)$$

Здесь используются два представления

$$\chi_{j+1/2} = \frac{\chi_j + \chi_{j+1}}{2} \quad (14.109a)$$

или

$$\chi_{j+1/2} = \max(\chi_j, \chi_{j+1}), \quad (14.109b)$$

где

$$\chi_j = \Delta t^2 \sum_s \left(\beta \tilde{\rho}_{j,n+1} \frac{q}{m} \right)_s \quad (14.110)$$

— сумма по всем сортам частиц [Langdon, Cohen, Friedman, 1983]. Как в (14.108), так и в (14.110) $\tilde{\rho}_{j,n+1}$ определяется выражением (14.102).

Из \mathcal{E} при полуцелых координатах образуется

$$E_{j,n+1} = \frac{E_{j-1/2,n+1} + E_{j+1/2,n+1}}{2}. \quad (14.111)$$

При помощи (14.104) ускорение частицы в точке \tilde{x}_{n+1} вычисляется через $E_{j,n+1}$. Этот алгоритм — самая короткая схема, которую мы когда-либо видели, и он был опробован Ленгдоном и Барнсом [Langdon, Barnes, 1985].

Общий электростатический случай. Возвращаясь к многомерному случаю, включающему, возможно, создаваемые внешними токами магнитные поля, продемонстрируем, начиная с (14.91) и (14.92), необходимые этапы вычислений. Начнем с формулировки метода в наиболее общем виде. Координаты $\{\mathbf{x}_{n+1}^{(0)}\}$, из которых при помощи (8.22) вычисляется экстраполированная плотность $\rho_{n+1}^{(0)}$, получаются из уравнений движения, в которых \mathbf{a}_{n+1} определяется полем $\mathbf{E}_{n+1}^{(0)}$, что является предсказанием для \mathbf{E}_{n+1} . Плотность заряда при этом не совсем точно соответствует полю $\mathbf{E}_{n+1}^{(0)}$, т. е. $\nabla \cdot \mathbf{E}_{n+1}^{(0)} \neq \rho_{n+1}^{(0)}$. Мы хотим вычислить подправленное поле \mathbf{E}_{n+1} и переместить частицы в положения $\{\mathbf{x}_{n+1}\}$ так, чтобы плотность заряда ρ_{n+1} удовлетворяла соотношению

$$\nabla \cdot \mathbf{E}_{n+1} = \rho_{n+1}. \quad (14.112)$$

Перепишем для этого (14.112) в виде

$$\nabla \cdot \delta \mathbf{E}_{n+1} - \delta \rho_{n+1} = \nabla \cdot \mathbf{E}_{n+1}^{(0)} - \rho_{n+1}^{(0)}, \quad (14.113)$$

где $\mathbf{E}_{n+1} = \mathbf{E}_{n+1}^{(0)} + \delta \mathbf{E}_{n+1}$, величина ρ_{n+1} определяется аналогично; $\delta \rho_{n+1}$ обусловлено поправкой $\{\delta \mathbf{x}\}$ к координатам частиц, которая в свою очередь определяется разницей между \mathbf{E}_{n+1} и $\mathbf{E}_{n+1}^{(0)}$.

При помощи (14.107) и уравнений движения выражим $\delta \rho_{n+1}$ как линейный функционал $\delta \mathbf{E}_{n+1}$. В общем случае поправки $\{\delta \mathbf{x}, \delta \mathbf{v}\}$ получаются при помощи линеаризации каждого уравнения движения координат $\mathbf{x}_{n+1}^{(0)}$ [Langdon, Cohen, Friedman, 1983; Barnes et al., 1983]:

$$\delta \mathbf{x}_{n+1} = \delta \mathbf{v}_{n+1/2} \Delta t \quad (14.114)$$

и

$$\delta \mathbf{v}_{n+1/2} = \frac{q \Delta t}{2m} \delta \mathbf{E}_{n+1} (\mathbf{x}_{n+1}^{(0)}) \quad (14.115)$$

без магнитного поля или

$$\delta \mathbf{v}_{n+1/2} = \mathbf{T} \cdot \frac{q \Delta t}{2m} \delta \mathbf{E}_{n+1} (\mathbf{x}_{n+1}^{(0)}) \quad (14.116)$$

в случае замагниченной плазмы, где, как следует из (14.95), $\mathbf{T} \equiv [\mathbf{I} + \mathbf{R}_n(\mathbf{x}_{n+1}^{(0)})]/2$.

С учетом (14.116) неявный член $\delta\rho = -\nabla \cdot (\rho \delta \mathbf{x}_{n+1}^{(0)})$ в (14.113) принимает вид

$$\delta\rho = -\nabla \cdot (\rho_{n+1}^{(0)} \delta \mathbf{x}) = \quad (14.117)$$

$$= -\nabla \cdot \left[\left(\sum_s \frac{\rho_{n+1,s}^{(0)} q_s \Delta t^2}{2m_s} \mathbf{T}_s \right) \cdot \delta \mathbf{E} \right] = -\nabla \cdot (\chi \cdot \delta \mathbf{E}). \quad (14.118)$$

Суммирование проводится по сортам частиц, а не по каждой частице.

Если неявно рассматриваются только электроны, то только они и дают вклад в (14.112). В этом случае для вычисления суммы нужна электронная плотность ρ [помимо полной плотности ρ , которая используется в правой части (14.113)]. В общем случае достаточно накапливать $\rho_{n+1,s}^{(0)}$ отдельно для каждого сорта частиц с различным отношением q/m . Это требует большей памяти, но не больших вычислений, чем при использовании явного кода.

Неявная восприимчивость

$$\chi = \sum_s \frac{\rho_{n+1,s}^{(0)} q_s \Delta t^2}{2m_s} \mathbf{T}_s \quad (14.119)$$

из-за вращения \mathbf{R} является тензором.

Теперь у нас есть все записи уравнения $\mathbf{E} = -\nabla \delta\phi$. Подставляя выражения $\rho_{n+1}^{(0)}$ и $\delta\rho$ в уравнение (14.113), получаем электростатическое неявное уравнение поля

$$\nabla \cdot [(1 + \chi) \cdot \nabla \delta\phi_{n+1}] = \nabla \cdot \mathbf{E}_{n+1}^{(0)} - \rho_{n+1}^{(0)}. \quad (14.120)$$

Коэффициенты этого эллиптического уравнения непосредственно определяются информацией о частицах, собранной на пространственной сетке в форме эффективной линейной восприимчивости. Ранг матричного уравнения определяется числом полевых величин, а оно не зависит от числа частиц и обычно намного меньше.

Этот формализм позволяет успешно использовать пространственное сглаживание [Langdon, Cohen, Friedman, 1983; Barnes et al., 1983]. Если задаваемое оператором \hat{S} сглаживание применяется к ρ и ϕ на сетке, то для учета влияния сглаживания на поле следует включить \hat{S} в χ . Это оказалось важным в некоторых приложениях. Несогласованное сглаживание существенно влияет на линейную устойчивость.

При перемещении частиц к их положениям $\{\mathbf{x}_{n+1}^{(0)}\}$ поля в (8.23) вычисляются в точках $\{\mathbf{x}_{n+1}^{(0)}\}$. Возникающая при этом погрешность может приводить к ограничениям на Δt , связанным с градиентами поля и плотности [Langdon, Barnes, 1985 и § 9.7 настоящей книги]. Тем не менее полезные результаты получаются при значениях $\omega_{pe} \Delta t$, достигающих 10^3 .

После перемещения каждой частицы в положение x_{n+1} можно сразу же вычислять \tilde{x}_{n+2} и ее вклад в $\tilde{\rho}_{n+2}$. Таким образом, на каждом временном шаге нужно просматривать список частиц один раз — это удобно, если частицы хранятся в медленной памяти типа магнитного диска.

Неявные коды допускают использование сложных граничных условий для частиц. Поглощение или испускание частиц поверхностью зависит от E_{n+1} — тем самым граничные условия для частиц оказываются связанными с неявными уравнениями поля. Оказывается, что для электромагнитных полей можно приспособить методы, используемые в явных кодах; например Адам и Гурден использовали неявный подход для граничного условия с излучением волны [Lindman, 1975].

Гораздо больше деталей читатель может найти в работе [Langdon, Barnes, 1985] и в приведенных там ссылках.

14.14. ДИАГНОСТИКИ

При моделировании мы делаем мгновенные снимки величин (ρ , Φ , E_x) в зависимости от координаты x , графики функций распределения $f(v_x)$ от v_x и графики фазового пространства v_x от x , v_y от x и v_x от v_y . Иногда мы выводим графики зависимости от времени различных величин — потенциальной, кинетической, тепловой, дрейфовой энергий или сеточных величин при каком-либо значении x . Все это должно отражать физику, допускать сравнение между линейной и нелинейной теориями и допускать численный контроль сохранения величин типа энергии или какой-либо компоненты импульса или любой другой величины, которая предполагается инвариантной.

При двух- и трехмерных вычислениях делается примерно то же самое, но графика в координатах $x-y$, или $x-y-z$, или $r-\theta-z$ требует более сложных рутинных построений. Зависимость $\Phi(x)$ от x в $1d$ заменяется на $\Phi(x, y)$ от x, y и имеет вид либо трехмерного графика (скажем, зависимость Φ от x для многих отдельных значений y — перспективный график), либо двухмерных (координаты x, y) эквипотенциальных контуров. Для двухмерной периодической по y системы может оказаться полезным посмотреть на $\Phi(x)$ при определенном значении y , как на функцию x или t . Зная расположение частиц на фазовой плоскости — скажем, v_\perp и v_\parallel , можно построить контуры постоянной фазовой плотности $f(v_\perp, v_\parallel)$, используя, например, линейное взвешивание с каким-либо сглаживанием; это может понадобиться внутри магнитного конуса потерь, когда в процессе счета из-за рассеяния или неустойчивости возникает поток (дрейфовый, диффузионный) через границу конуса. Другой способ: используя принтеры высокого разрешения

(скажем, 1000 на 1000 линии), печатать точки с плотностью, отражающей плотность частиц; при этом получаются полутоно-вые рисунки; например, область из 3×3 точек дает 10 градаций — от белого до черного.

Если мы ищем свидетельство того, что частица захвачена волной, нам необходимо связать частицу (x, v) с некоторой фазой волны. В одномерном случае при распространении волны только вдоль x распознать на плоскости v_x, x для холодного пучка захват частиц волной (формирование вихрей в фазовом пространстве), как мы видели в заданиях гл. 5, очень легко. В двухмерном случае при распространении волны в плоскости (x, y) с некоторым $\mathbf{k}_\perp (\mathbf{B} = \mathbf{k} B_0)$ Коэн и др. [Cohen et al., 1983] использовали одночастичные зависимости v_\perp от относительной гирофазы ψ за некоторый интервал времени (ψ определяется как $\vartheta - \int \omega_{ci} dt'$, где $\operatorname{tg} \vartheta = -v_y/v_x$). Отмечено, что орбита вращающегося и колеблющегося в магнитном поле без флуктуирующих электрических полей иона в плоскости (x, v_x) представляет собой эллипс, в плоскости (v_x, v_y) — круг, в плоскости (ψ, v_\perp) — точку. На орбиту адиабатически взаимодействующего с волной иона накладывалось регуляяное возмущение. У иона, сильно взаимодействующего с волновым полем, отклонение большое и, возможно, стохастическое. В статье приведен рисунок, демонстрирующий захват волной и стохастичность на интервале примерно 8 циклотронных периодов. Отани [Otani, 1983] делал похожие мгновенные снимки, но для многих частиц, причем фаза ψ измерялась относительно локальной фазы поперечной волны $[\arccos(v_\perp \cdot \mathbf{B}_\perp / v_\perp B_\perp)]$, где \mathbf{B}_\perp — поле волны], и обнаружил свидетельство захвата частиц.

В одномерной технике проследить, например, за изменением потенциала ϕ по x и t можно, последовательно накладывая $\phi(x)$ в моменты времени $t_1 < t_2 < t_3$ и т. д. В двухмерном случае проследить за зависимостью ϕ от x, y и t наложением трудно, однако при помощи, скажем, контуров $\phi(x, y)$ в последовательные моменты времени можно снять фильм. Глаз легко замечает волновое движение в плоскости (x, y) — картина похожа на набегающие на берег волны. Подобные фильмы могут оказать большую помощь, например, при отделении каких-либо быстрых волн малой амплитуды, распространяющихся в одном направлении, от медленной эволюции больших, почти стационарных потенциалов и полей. Совмещая в одном кадре графики $\phi(x, y)$, электронные и ионные распределения координат (x, y) и скоростей (v_x, v_y), можно получить очень убедительную демонстрацию доминирующих или существенных физических процессов, при этом глаз отфильтровывает несущественные эффекты [Hockney, 1966; Hockney, Eastwood, 1981]. Оказывается, глаз в кино воспринимает эффекты, которые при рассматривании отдельных графиков почти незаметны или легко теряют-

ся. Наконец, необычайно драматично демонстрируют очень сложную динамику фильмы, снятые в нескольких цветах.

Очень поучительным может оказаться слежение во времени за небольшим числом пробных частиц, с умом расположенных при $t=0$. В раннем фильме о диокотронной неустойчивости (Birdsall, Fuss, 1967) отслеживалось движение отдельной частицы. В фильме показано формирование вихрей в плоскости (x, y) , и при этом возникало ощущение, что большинство электронов захвачено; однако когда наблюдалась выделенная частица, то она захватывалась вихрем, продолжала движение, снова захватывалась и т. д.; при этом частица дрейфует все время в направлении оси. В конце концов все вихри слились в один большой вихрь с центром на оси. Итак, сам по себе фильм может вводить в заблуждение.

Энергия, мощность и совершаемая работа — эти квадратичные величины, полезные для понимания физики дела, могут также быть полезными для численного контроля. Следовательно, диагностики могут учитывать их; однако, как будет показано ниже, здесь необходима некоторая осторожность. Вычислим изменение кинетической энергии (KE) при совершении полем \mathbf{E} над током \mathbf{J} работы в объеме V , сначала полагая электростатическую энергию равной $(1/2)E^2$, а затем $(1/2)\rho\phi$, и посмотрим, будет ли какая-либо разница. Скорость изменения энергии равна

$$-\frac{d(\text{KE})}{dt} = - \int_V \mathbf{E} \cdot \mathbf{J} d\mathbf{x}. \quad (14.121)$$

Введем $\nabla\phi$:

$$-\frac{d(\text{KE})}{dt} = \int_V \nabla\phi \cdot \mathbf{J} d\mathbf{x} = \int_V (\nabla \cdot \phi \mathbf{J} - \phi \nabla \cdot \mathbf{J}) d\mathbf{x}. \quad (14.122)$$

Далее, используя уравнение непрерывности, уравнение Пуассона и закон Гаусса, получаем

$$-\frac{d(\text{KE})}{dt} = \int_S \phi \mathbf{J} \cdot d\mathbf{S} - \int_V \phi \frac{\partial}{\partial t} (\nabla^2 \phi) d\mathbf{x}, \quad (14.123)$$

что в свою очередь превращается в

$$-\frac{d(\text{KE})}{dt} = \int_S \phi \left(\mathbf{J} - \nabla \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) \cdot d\mathbf{S} + \frac{d}{dt} \int_V \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 d\mathbf{x}. \quad (14.124)$$

Аналогичные шаги сделаем и для плотности $(1/2)\rho\phi$, но удержим ρ (используем уравнение непрерывности, а не уравне-

ние Пуассона), в результате получим

$$-\frac{d(\text{KE})}{dt} = -\int_S \phi \mathbf{J} \cdot d\mathbf{S} + \frac{d}{dt} \int_V \frac{1}{2} \rho \phi dx. \quad (14.125)$$

В (14.124) и (14.125) следует помнить, что объем V определен в (14.121) как объем, содержащий интересующие нас частицы. Различие результатов (14.124) и (14.125) можно понять следующим образом. Интеграл от $(1/2) \rho \phi$ в (14.125) берется только по объему, в котором существует ρ , однако включает в себя еще и изменение энергии $\frac{1}{2} E^2$ вне V . Интеграл по S в (14.124) от $\phi \nabla (\partial \phi / \partial t)$ (мощность) представляет собой скорость изменения потока энергии через S . Иными словами, при использовании плотности $(1/2) E^2$ в (14.124) поверхностный интеграл равен плотности мощности $\phi \mathbf{J}_{\text{total}}$ (с учетом тока смещения в $\mathbf{J}_{\text{total}}$), тогда как в (14.125) с плотностью $(1/2) \rho \phi$ он равен $\phi \mathbf{J}$ (только плотность тока частиц). При численном контроле баланса энергии ожидается, что уменьшение частичной KE [равное $-d(\text{KE})/dt$] совпадает с увеличением энергии поля. Для систем периодических или заземленных (ϕ на поверхности S равно нулю) поверхностные интегралы исчезают, так что нужно вычислять только плотность энергии $(1/2) \rho \phi$ или $(1/2) E^2$. В более общих системах выбор плотности энергии в виде $(1/2) \rho \phi$ или $(1/2) E^2$ приводит к использованию в поверхностных интегралах либо $\phi \mathbf{J}_{\text{parl}}$, либо $\phi \mathbf{J}_{\text{total}}$, и одну из величин и следует вычислять. Теоремы о сохранении импульса приведены в работе [Decyk, 1982]¹.

Задача

14.16. Выполните все шаги, необходимые для получения (14.124) и (14.125). В последнем случае докажите, что

$$\int_V \left(\phi \frac{\partial \rho}{\partial t} - \rho \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) dx = 0, \quad (14.126)$$

что также использовалось в § 10.4, после (10.24).

14.15. ХАРАКТЕРНЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ

Статьи и главы, посвященные поведению плазмы при численном моделировании, часто включаются в плазменные журналы и книги. Укажем на некоторые характерные двух- и трехмерные электростатические задачи.

¹ Уравнение (14.125) получено при помощи (14.126), последнее выполняется не всегда. Потенциал внешнего заряда следует рассматривать отдельно (см. § 10.4 и Decyk, 1982).— Прим. авт.

Диффузия поперек B . Диффузия плазмы поперек магнитного поля хорошо изучена в рамках двух- или трехмерного частичного моделирования. Тейлор и Макнамара [Taylor, McNamara, 1971] обнаружили согласие между теорией и моделированием для двухмерной диффузии ведущего центра — они нашли, что в сильном магнитном поле ($r_{Larm} < \lambda_D$, $\omega_p < \omega_c$) коэффициент диффузии имеет бомовскую зависимость ($1/B$), что намного больше обычной зависимости $1/B^2$, а зависимость от размеров системы слаба; последующее развитие дано в работе [Christiansen, Taylor, 1973]. В дальнейшем Джойс и Монтгомери [Joyce, Montgomery, 1973] исследовали этот вопрос на примере двухмерной плазмы и обнаружили формирование квазистабильных пространственно неоднородных состояний. Хсу, Джойс и Монтгомери [Hsu, Joyce, Montgomery, 1973], не используя приближение ведущего центра, проследили за тепловой релаксацией изначально пространственно однородной плазмы в сильном магнитном поле и установили, что при $\omega_{ce}/\omega_p > 4$ время t_{relax} пропорционально $(n_0 \lambda_D)^{1/2}$ и ω_{ce}/ω_p . В работах [Okuda, Dawson, 1973 и Dawson, Okuda, Rosen, 1976] обнаружены три характерные области диффузии частиц поперек B . При малых B (больших ω_p/ω_{ce}) коэффициент диффузии D_\perp оказывается пропорциональным $1/B^2$, что совпадает с предсказанием теории парных столкновений. В промежуточной области D_\perp примерно постоянно. При больших B ($\omega_p/\omega_{ce} \leq 1/2$) оказывается, что $D_\perp \sim 1/B$, — это соответствует диффузии Бома. Авторы также сравнивали перенос в трехмерном случае для замкнутых и разомкнутых магнитных силовых линий — в первом случае результаты похожи на двухмерные; во втором случае $D_\perp \sim 1/B^2$ вплоть до много меньших значений ω_p/ω_{ce} , причем при рациональных углах вращательного преобразования наблюдалось интересное для токамаков и стеллараторов увеличение. Камимура и Доусон [Kamimura, Dawson, 1976], обобщая последнюю работу, ввели магнитные зеркала и обнаружили значительное увеличение конвективного переноса. Цань, Матсуда и Окуда [Tsang, Matsuda, Okuda, 1975] рассматривали поперечную диффузию в модели тороидального трехмерного поля B и обнаружили, что из-за тороидальности электростатических мод Бернштейна на перенос (а также другие эффекты) изучается в работе [Kamimura, Wagner, Dawson, 1978]. Теплоперенос в скрещенных полях рассматривается в работах [Naitou, Kamimura, Dawson, 1979 и Naitou, 1980]. Доусон [Dawson, 1983] подвел общий итог всем работам группы UCLA.

Неустойчивости. Развитие неустойчивостей, начиная с ли-

нейной стадии и кончая нелинейным насыщением или стабилизацией, весьма детально изучено при помощи частичного моделирования. Поскольку существует большое число плазменных неустойчивостей, существует и множество статей. Типичные примеры охватывают моделирование для проверки линейной теории, а также исследования, направленные на определение механизма насыщения (например, захват частиц, квазилинейная диффузия, изменение распределений нулевого порядка и т. д.) и других эффектов больших амплитуд (таких как перенос частиц и тепла). Подобные исследования изучены в работе по нижнегибридной дрейфовой неустойчивости [Chen, Birdsall, 1983], в которой в одномерном случае было обнаружено, что при заданном дрейфе стабилизация происходит из-за захвата ионов и из-за релаксации тока при свободном дрейфе. Позднее было осуществлено двухмерное моделирование [Chen, Nevin, Birdsall, 1983], которое показало, что после начального роста возмущений (когда применима одномерная локальная теория) становятся существенными нелокальные эффекты и когерентная структура мод; обнаружено, что стабилизация наступает из-за локальной релаксации тока, связанной как с квазилинейной диффузией ионов, так и с захватом электронов в скрещенных ($E \times B$) полях. В другом пределе, $\omega_{ce} \ll \omega_p$, Бискамп и Хоруда [Biskamp, Choruda, 1973] исследовали влияние магнитного поля на турбулентность и нелинейное поведение ионно-звуковой неустойчивости, возбуждаемой током, и продемонстрировали разницу между одно- и двухмерными спектрами турбулентности. В последующей работе по этой неустойчивости [Dum, Choruda, Biskamp, 1974] показано, что в двухмерном случае основную роль играет скорее квазилинейный, чем нелинейный механизм насыщения.

Нагрев. Хотелось бы по возможности использовать неустойчивости для нагрева. Например, Макбрайдом и др. [McBride et al., 1972] при помощи одно- или двухмерной теории и моделирования было достигнуто глубокое понимание модифицированной двухпучковой неустойчивости (или нижнегибридной двухпучковой неустойчивости) — они показали, что, начиная с малых относительных скоростей дрейфа между электронами и ионами, эта неустойчивость может обеспечить очень существенный механизм турбулентного нагрева. В работе [Chen, Birdsall, 1973] показано, что, накладывая переменное поле E_0 перпендикулярно постоянному B_0 , можно добиться развития этой неустойчивости и в плазме с конечной температурой и достичь сильного разогрева ионов. Подобное моделирование позволило достичь недоступного другим методам понимания процесса разогрева.

ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ ПРОГРАММЫ В ДВУХ И ТРЕХ ИЗМЕРЕНИЯХ

15.1. ВВЕДЕНИЕ

В этой главе развиты методы описания статических полей и введены алгоритмы, использующие полное электромагнитное поле. Теперь у нас имеются по две компоненты (а иногда и по три) E , B и J , а также скаляр ρ ; наряду с E и B можно использовать векторный и скалярный потенциалы A , ϕ . Гораздо больше возможностей возникает для коллективных эффектов, как физических, так и, случается, нефизических. Электромагнитные программы сложнее электростатических, кроме того, они обычно дороже и с ними труднее работать.

Главными целями создания электромагнитных программ были моделирование взаимодействия интенсивного лазерного излучения с горячей плазмой, изучение неустойчивостей, ударных волн и т. д. в замагниченной плазме, а также исследование систем сильноточный электронный пучок—плазма. Именно для этих приложений были созданы обсуждаемые здесь алгоритмы. Первая работа, использованная в начале этой главы, принадлежит Ленгдону и Лазинскому [Langdon, Lasinski, 1976] и посвящена коду ZOHAR. В добавлениях обсуждаются альтернативные подходы типа кодов Дарвина (безызлучательных) и такие обобщения, как гибридные коды частица—жидкость.

15.2. ИНТЕГРИРОВАНИЕ ПОЛЕЙ ПО ВРЕМЕНИ И РАЗМЕЩЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СЕТКИ

Поля интегрируются при помощи временных производных, определяемых законами Фарадея и Ампера—Максвелла:

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -c\nabla \times \mathbf{E}, \quad (15.1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = c\nabla \times \mathbf{B} - \mathbf{J}. \quad (15.2)$$

Так же как и выше, эти уравнения записаны в рационализованной системе СГС (Хевисайда—Лоренца), в которой при расчете и физической интерпретации результатов исключены почти все случайности с множителями 4π .

Размещение временных производных \mathbf{B} (\mathbf{E}) в левой части, а \mathbf{E} (\mathbf{B})—в правой части предполагает, как показано на рис. 15.1, использование схемы интегрирования по времени с перешагиванием. Из рисунка также видны временная дискретизация

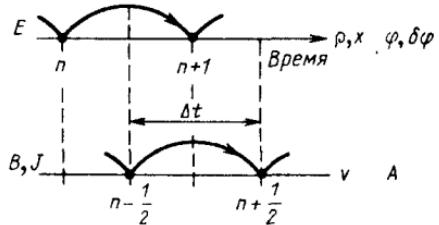


Рис. 15.1. Временная дискретизация полевых и частичных величин, используемая при интегрировании с перешагиванием уравнений Максвелла

плотности тока J , координат частицы x и скорости v , а также поправки к потенциалу $\delta\phi$; на рисунке показаны по-

тенциалы A и ϕ (как альтернатива E , B). Подобная центральная временная разность имеет второй порядок точности.

В двухмерном пространстве поля могут быть разделены на поперечные электрические (TE) и поперечные магнитные (TM). Все величины зависят от координат x , y , тем самым вектор k лежит в той же плоскости (x , y). TM-поля, для которых $k \cdot B = 0$, имеют компоненты E_x , E_y , B_z . TE-поля ($k \cdot E = 0$) имеют компоненты E_z , B_x , B_y . Эти наборы не связаны между собой, в чем можно убедиться, расписывая по компонентам уравнения Максвелла. Взаимное расположение компонент в пространстве можно выбрать так, чтобы получить центральную пространственную разность — это показано на рис. 15.2 для TM-полей (достаточно для $2d$) и TE-полей (необходимо для $21/2d$, $3d$). Полностью полевая сетка изображена на рис. 15.3, причем для того, чтобы индексы были одинаковыми, а граничные условия аналогичными, TM- и TE-поля совмещены. В некоторых приложениях TE-поля остаются равными нулю (см. задачу 15.8) и нет необходимости их вычислять и запоминать.

Теперь, следуя работам [Buneman, 1968; Boris, 1970; Morse, Nielson, 1971], запишем простое явное разностное представление уравнений Максвелла, в котором производные по времени принимают вид

$$(\partial_t E_x)_{j+1/2, k}^{n+1/2} \equiv \frac{E_{x, j+1/2, k}^{n+1} - E_{x, j+1/2, k}^n}{\Delta t}, \quad (15.3)$$

где

$$E_{x, j+1/2, k}^n \equiv E_x([j+1/2] \Delta x, k \Delta y, n \Delta t)$$

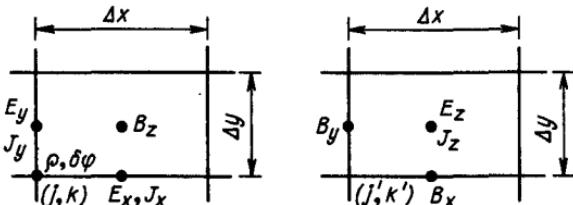


Рис. 15.2. Расположение TM- и TE-компонент полей на пространственной сетке выбирается так, чтобы разностная схема (15.1), (15.2) была центральной. Поскольку TM- и TE-компоненты не зацепляются, относительное расположение узлов (j, k) и (j', k') не имеет значения

Рис. 15.3. Пространственное расположение на полевой сетке двухмерных ТМ-полей (E_x , E_y , B_z) их источников (ρ , J_x , J_y , $\delta\varphi$) по мере интегрирования вперед по времени разностных уравнений Максвелла. Сетка для частиц та же, что и для плотности заряда. В случае $2^{1/2}d$ добавляются ТЕ-поля, при этом B_x и B_y располагаются в точках E_x и E_y , а E_z и J_z располагаются вместе с B_z

и т. д. Аналогично определим пространственные разностные операторы ∂_x и ∂_y . Оператор градиента ∇ записывается как ∂_x . Принятые обозначения оказываются полезными потому, что эти операторы, действующие на определенные на нашей пространственно-временной сетке величины, коммутируют. Тем самым с разностными уравнениями можно обращаться так же, как и с похожими на них дифференциальными уравнениями.

Для ТМ-компонент разностные уравнения Максвелла (15.1) — (15.2) принимают вид

$$(\partial_t B_z)_{j+1/2, k}^n = -c (\partial_x E_y - \partial_y E_x)_{j+1/2, k}^n, \quad (15.4)$$

$$(\partial_t E_x)_{j+1/2, k}^{n+1/2} = (c \partial_y B_z - J_x)_{j+1/2, k}^{n+1/2}, \quad (15.5)$$

$$(\partial_t E_y)_{j, k+1/2}^{n+1/2} = (-c \partial_x B_z - J_y)_{j, k+1/2}^{n+1/2}. \quad (15.6)$$

При известных $B_z^{n-1/2}$ и E^n с помощью (15.4) можно определить $B_z^{n+1/2}$. Точно так же вычисляют электрическое поле. Например, уравнение (15.5) представляют в виде

$$\frac{E_{x, j+1/2, k}^{n+1} - E_{x, j+1/2, k}^n}{\Delta t} = c \frac{B_{z, j+1/2, k}^{n+1/2} + 1/2 - B_{z, j+1/2, k-1/2}^{n+1/2}}{\Delta y} - J_{x, j+1/2, k}^{n+1/2}. \quad (15.7)$$

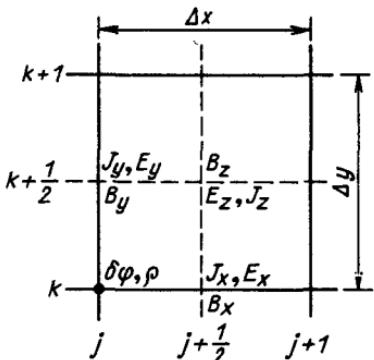
Как показано на рис. 15.1, процесс чередуется — сначала вычисляется E , затем B . На каждом шаге в памяти вместо старых значений полей записываются новые. Нет необходимости запоминать значение каждого поля более одного раза.

Задача

15.1. Раздобыть цитированные в этом и следующем параграфах работы и начертите приведенные в них расположения полей. Сравните с рис. 15.3. Объясните разницу.

15.3. ТОЧНОСТЬ И УСТОЙЧИВОСТЬ ИНТЕГРИРОВАНИЯ ПО ВРЕМЕНИ

Можно многое узнать о точности и устойчивости схемы § 15.2, рассмотрев плоскую электромагнитную волну в вакууме. Полагая, что поля имеют вид $(\mathbf{E}, \mathbf{B}) = (\mathbf{E}_0, \mathbf{B}_0) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega t)$, и



подставляя это в разностные уравнения, получаем

$$\Omega \mathbf{B} = c \mathbf{k} \times \mathbf{E}, \quad (15.8)$$

$$\Omega \mathbf{E} = -c \mathbf{k} \times \mathbf{B}, \quad (15.9)$$

где $\Omega \equiv \omega \operatorname{dif}(\omega \Delta t / 2)$; $\kappa_x \equiv k_x \operatorname{div}(k_x \Delta x / 2)$. В континуальном пределе Ω и κ переходят в ω и k . Исключение \mathbf{E} и \mathbf{B} приводит к соотношению

$$\Omega^2 = c^2 \kappa^2, \quad (15.10)$$

которое представим в виде

$$\left(\frac{\sin \frac{\omega \Delta t}{2}}{c \Delta t} \right)^2 = \left(\frac{\sin \frac{k_x \Delta x}{2}}{\Delta x} \right)^2 + \left(\frac{\sin \frac{k_y \Delta y}{2}}{\Delta y} \right)^2. \quad (15.11)$$

Очевидно, что ω действительно (нет затухания или нарастания), если

$$1 > (c \Delta t)^2 \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right) \quad (15.12)$$

или если при $\Delta x = \Delta y$ $c \Delta t < \Delta x / \sqrt{2}$ — условие Куранта. Если это условие нарушается, то $\sin^2(\omega \Delta t / 2)$ становится больше единицы при $k_x \Delta x$, $k_y \Delta y$, лежащих вблизи π , корни ω становятся комплексными и один из корней дает нефизический рост возмущений, который может быть очень быстрым. Когда условие (15.12) выполнено, нет фазовых и амплитудных различий между \mathbf{E} и \mathbf{B} . Погрешности в величине ω , взаимной ориентации \mathbf{E} , \mathbf{B} и \mathbf{K} имеют второй порядок по Δx , Δy и Δt . Все эти результаты являются прямым следствием центральности разностной схемы в пространстве и во времени.

Как видно из зависимости ω от k , изображенной на рис. 15.4, $\omega \leq c \kappa$ при $c \Delta t \leq \Delta x$. Заметим, что на краю основной зоны, при $k_x \Delta x = \pi = k_y \Delta y$, v_{phase} опускается до значения $2c/\pi = 0,637c$.

Следовательно, на малых длинах волн для релятивистских частиц может оказаться, что $v > v_{\text{phase}}$, и возникает нежелательное нарастание волн или излучение Вавилова — Черенкова. В работах [Boris, Lee, 1973; Haber et al. 1973] упоминается о шуме от этого излучения от частиц со скоростью, большей минимальной фазовой скорости. В

Рис. 15.4. Дисперсия (15.11), определяемая уравнениями Максвелла в вакууме при конечных Δx , Δt . В одном измерении дисперсионной погрешности в нейтрально устойчивом случае $c \Delta t / \Delta x = 1,0$ не возникает

работах [Godfrey, 1974, 1975] исследуются коллективные неустойчивости при взаимодействии релятивистских электронных пучков с этими медленными световыми волнами (этот вопрос обсуждается в § 15.5). Отмеченный недостаток повышает интерес к алгоритмам, для которых световые волны в вакууме распространяются с правильной скоростью и у которых есть другие свойства, также улучшающие устойчивость (см. гл. 6 и § 15.9).

Задачи

15.2. Проверьте сделанное в тексте после формулы (15.12) утверждение относительно фазовых и амплитудных различий между **E** и **B** и взаимной ориентации **k** и **x**.

15.3. Используя (15.11), начертите линии $v_{\text{phase}}/c = 0,9; 0,8; 0,7$ на плоскости $k_x \Delta x$, $k_y \Delta y$ при $\Delta x = \Delta y$ и $c \Delta t / \Delta x = 0,5$. Подумайте, будут ли эти линии кругами (фазовая скорость не зависит от направления **k**), а если нет, то где погрешности будут максимальными.

15.4. Получите уравнения (15.8) и (15.9).

15.4. ИНТЕГРИРОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ

Предположим, что в момент времени $t^n = n\Delta t$ поля в точке расположения частицы вычисляются при помощи описанной в гл. 14 интерполяции. Для учета релятивистских эффектов и изменения магнитного поля обобщим интегратор § 4.3. Релятивистское обобщение (14.6) осуществляется заменой **v** на $\mathbf{u} = \gamma \mathbf{v}$ [Boris, 1970]:

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1/2} - \mathbf{u}^{n-1/2}}{\Delta t} = \frac{q}{m} \left(\mathbf{E}^n + \frac{1}{c} \frac{\mathbf{u}^{n+1/2} + \mathbf{u}^{n-1/2}}{2\gamma^n} \times \mathbf{B}^n \right), \quad (15.13)$$

где m — масса покоя и $\gamma^2 = 1 + u^2/c^2$. В выражении для магнитной силы после центрирования при помощи усреднения по времени **u** и **B** (см. следующий параграф) остается описать только γ^n . Проще всего это сделать при помощи метода Бориса [Boris, 1970]. Без формальных изменений введем электрические импульсы, так же как в уравнениях (4.20) и (4.21):

$$\mathbf{u}^{n-1/2} = \mathbf{u}^- - \frac{q \mathbf{E}^n \Delta t}{2m}, \quad (15.14)$$

$$\mathbf{u}^{n+1/2} = \mathbf{u}^+ + \frac{q \mathbf{E}^n \Delta t}{2m}. \quad (15.15)$$

Подставляя это в (15.13), получаем

$$\frac{\mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^-}{\Delta t} = \frac{q}{2\gamma^n m c} (\mathbf{u}^+ + \mathbf{u}^-) \times \mathbf{B}^n. \quad (15.16)$$

В § 4.3 мы обнаружили, что (15.16) описывает вращение \mathbf{u} вокруг параллельной \mathbf{B} оси на угол $\vartheta = -2 \operatorname{arctg}(qB\Delta t/2\gamma mc)$. Угол уменьшается примерно на множитель γ , и (4.24) принимает вид $\mathbf{t} = qB\Delta t/2\gamma^n mc$, где $(\gamma^n)^2 = 1 + (u^-/c)^2$. Так как, кроме того, $(\gamma^n)^2 = 1 + (u^+/c)^2$, эта схема является обратимой во времени и сохраняет полный импульс с точностью до второго порядка. Для вычисления центральной по времени кинетической энергии можно использовать это же определение γ^n . В компьютерах с малой длиной слова лучше использовать тождество $(\gamma - 1)mc^2 = mu^2(\gamma + 1)^{-1}$ — в этом случае кинетическая энергия намного менее чувствительна к погрешностям округления.

Существует большой класс физических задач, в которых величины v_z , E_z , B_x и B_y не играют роли. Если эти величины изначально равны нулю, то из уравнений движения следует, что они равны нулю всегда (см. задачу 15.8). Определяемое (15.16) плоское вращение очень просто выполняется при помощи алгоритма Бунемана (см. § 4.4):

$$u'_x = u^-_x + u^-_y t, \quad (15.17)$$

$$u^+_y = u^-_y - u'_x s, \quad (15.18)$$

$$u^+_x = u'_x + u^+_y t, \quad (15.19)$$

где $t = -\operatorname{tg}\vartheta/2 = qB_z\Delta t/2\gamma^n mc$; $s = -\sin\vartheta = 2t/(1+t^2)$.

В более общем случае $2^{1/2}$ измерений, когда \mathbf{E} , \mathbf{B} и \mathbf{u} имеют по три ненулевые компоненты, используется вращение Бориса, обобщающее (4.34) и (4.37):

$$\mathbf{u}' = \mathbf{u}^- + \mathbf{u}^- \times \mathbf{t}, \quad (15.20)$$

$$\mathbf{u}^+ = \mathbf{u}^- + \mathbf{u}' \times \mathbf{s}, \quad (15.21)$$

где $\mathbf{t} = qB\Delta t/2\gamma^n mc$; $\mathbf{s} = 2\mathbf{t}/(1+t^2)$.

Погрешность угла между \mathbf{u}^- и \mathbf{u}^+ равна примерно $(\omega_c \Delta t)^3/24$ и вряд ли играет роль в приложениях.

Во всех случаях координаты вычисляются в соответствии с формулой

$$\mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{x}^n + \mathbf{v}^{n+1/2} \Delta t = \mathbf{x}^n + \frac{\mathbf{u}^{n+1/2} \Delta t}{\gamma^{n+1/2}}, \quad (15.22)$$

где $(\gamma^{n+1/2})^2 = 1 + (u^{n+1/2}/c)^2$. Этот шаг также обратим и имеет второй порядок точности.

Во многих приложениях магнитное поле не влияет существенным образом на движение ионов и ионный поперечный ток пренебрежимо мал. В таких случаях можно сберечь время, если учитывать только электрическое поле, в ионных уравнениях движения пренебрегать релятивизмом и вместо тока вычислять только ионный заряд. Как учесть продольный ток — этот вопрос обсуждается в § 15.6.

Задача

15.5. Покажите, что $(\gamma - 1)mc^2$ и $mu^2(\gamma + 1)^{-1}$ равны кинетической энергии частицы. При $u^2 \ll c^2$ исследуйте чувствительность обеих форм к погрешностям округления.

15.5. СОВМЕСТНОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ЧАСТИЦ И ПОЛЕЙ

При интегрировании уравнений для частиц и полей необходимо связывать между собой вычисляемые в разных местах и в разное время величины, относящиеся к полям и частицам.

В простейшем случае для вычисления скорости частицы магнитное поле \mathbf{B} , определяемое полевыми уравнениями в полуцелые моменты времени (при $n \pm 1/2$), необходимо знать в целые моменты времени (n). Поскольку закон Фарадея позволяет вычислить \mathbf{B} раньше, чем \mathbf{E} , можно просто усреднить \mathbf{B} по времени:

$$\mathbf{B}^n = \frac{\mathbf{B}^{n-1/2} + \mathbf{B}^{n+1/2}}{2}. \quad (15.23)$$

Это выражение можно использовать в (15.13), а также для некоторых диагностик. На практике в явном виде среднее не возникает. Для того чтобы избежать дополнительных затрат машинной памяти, интегрирование \mathbf{B} можно разделить на два этапа [Boris, 1970]. На последнем этапе интегрирование \mathbf{B} продвигается на половину пути

$$\mathbf{B}^n = \mathbf{B}^{n-1/2} - \frac{c\Delta t}{2} \partial_x \times \mathbf{E}^n, \quad (15.24)$$

что записывается в памяти вместо $\mathbf{B}^{n-1/2}$. Затем при помощи этого \mathbf{B}^n и (15.13) интегрируются уравнения для частиц. На первом этапе следующего цикла \mathbf{B}^n таким же образом переводится в $\mathbf{B}^{n+1/2}$.

Аналогичная проблема возникает и при вычислении плотности тока $\mathbf{J}^{n \pm 1/2}$ исходя из скоростей (v известно в моменты $n \pm 1/2$) и координат (x известно в момент n) частиц. К центральному по времени выражению $\mathbf{J}^{n+1/2}$ приводит метод работы [Boris, 1970], заключающийся в использовании величины $v^{n+1/2}$, умноженной на среднее от весов S в точках x^n и x^{n+1} . В явном виде

$$\mathbf{J}_j^{n+1/2} = \sum_i v_i^{n+1/2} \frac{S(x_j - x_i^n) + S(x_j - x_i^{n+1})}{2}. \quad (15.25)$$

Видно, что частица дает вклад как в плотность заряда, так и в плотность тока в четырех ближайших узлах сетки. (Когда

частица пересекает границу ячейки при передвижении от x_i^n к x_i^{n+1} , под ее влиянием оказывается большее число узлов.)

Другой способ получения $\mathbf{J}^{n+1/2}$ заключается в использовании весов в срединных точках $\mathbf{x}^{n+1/2} = (\mathbf{x}^n + \mathbf{x}^{n+1})/2 = \mathbf{x}^n + + v^{n+1/2} \Delta t / 2$ [Morse, Nielson, 1971]. По вычислительным затратам оба метода равнозначны. Последний способ был использован в ZOHAR в надежде на его меньший уровень шума. Тем не менее показано [Godfrey, Langdon, 1976], что способ с использованием средних весов (15.25) может оказаться менее подверженным численным неустойчивостям. Сохранение заряда требует специального исследования (см. § 15.6). Кроме того, необходимо отдельно рассмотреть шумовые свойства различных схем взвешивания ρ и \mathbf{J} — это также обсуждается ниже.

Электрические и магнитные поля в точке расположения частицы вычисляются из полей на сетке при помощи интерполяции (взвешивания). В ZOHAR используется линейное взвешивание. Самое очевидное, что можно сделать, — это интерполировать отдельно в рамках каждой комбинации узлов, изображенных на рис. 15.3 [Boris, 1970; Morse, Nielson, 1971; Palevsky, 1980]. Однако при передвижении частиц на это тратится время. Поскольку перемещение частиц занимает большую часть машинного времени, в ZOHAR и других кодах поля заранее перераспределяются по простому набору узлов. Это можно сделать в узлах, в которых локализована плотность ρ , при помощи пространственного усреднения. Существуют и другие преимущества — продольная часть \mathbf{E} теперь та же, что и в сохраняющих импульс электростатических кодах, кроме того, дополнительное сглаживание уменьшает коротковолновые шумы. Упрощаются также диагностики. Кроме того, при изменении разностной схемы для вычисления \mathbf{E} и \mathbf{B} из \mathbf{A} и ϕ возникают некоторые преимущества [Nielson, Lindman, 1973].

После интегрирования уравнений движения усредненные поля следует перераспределить по исходной сетке при помощи еще одного пространственного усреднения. При этом, однако, возникает неприемлемо быстрое затухание электромагнитных волн. Борис заметил, что, например, исходную величину E_x легко восстановить, если перед усреднением запомнить значение E_x с одной из сторон. Восстанавливать значения B_z проще всего сначала совместно с E_x по оси x , а затем вместе с E_y по оси y . Таким образом, можно без существенных затрат машинной памяти восстановить поля на сетке.

Как и при переопределении полей, в ZOHAR оказывается удобным вычислять \mathbf{J} при помощи взвешивания по площадям в тех же узлах сетки, что и ρ , а затем путем усреднения определять токи в нужных для полевых уравнений точках (см. рис. 15.3). Таким образом, y -компоненты тока (она нужна в точке $j, k+1/2$) равна

$$J_{y,j,k+1/2}^{n+1/2} = \frac{J_{y,j,k}^{n+1/2} + J_{y,j,k+1}^{n+1/2}}{2}. \quad (15.26)$$

Аналогично вычисляется и x -компоненты тока, которую нужно знать в точке $j+1/2$, k . Разумеется, нет необходимости восстанавливать неусредненные значения \mathbf{J} .

15.6. УРАВНЕНИЯ $\nabla \cdot \mathbf{B}$ И $\nabla \cdot \mathbf{E}$; ОБЕСПЕЧЕНИЕ СОХРАНЕНИЯ ЗАРЯДА

Существуют еще два уравнения Максвелла. Покажем теперь, что, так же как и в непрерывном случае, разностные уравнения обеспечивают сохранение дивергенции \mathbf{E} и \mathbf{B} . Иными словами,

$$\partial_t (\partial_x \cdot \mathbf{B}) = \partial_x \cdot (\partial_t \mathbf{B}) = -c \partial_x \partial_t \mathbf{E} \equiv 0. \quad (15.27)$$

Аналогично

$$\partial_t (\partial_x \cdot \mathbf{E} - \rho) = \partial_x \cdot \mathbf{J} - \partial_t \rho. \quad (15.28)$$

Таким образом, если \mathbf{J} и ρ удовлетворяют уравнению непрерывности, то выполняется и закон Гаусса.

Каким бы способом ни вычислялась плотность ρ , если она определяется только мгновенными координатами частиц, то ни одна из описанных выше плотностей тока не удовлетворяет уравнению непрерывности. Это можно показать даже в пределе $\Delta t \rightarrow 0$ (см. задачу 15.6).

Методы получения сохраняющего заряд тока \mathbf{J} развивались как для ρ , вычисленного при помощи взвешивания нулевого порядка [NGP, Buleman, 1968], так и для взвешивания первого порядка [Morse, Nielson, 1971]. Последние авторы обнаружили, что уровень электромагнитных шумов растет со временем неприемлемо быстро. Этот эффект наблюдался и в других работах. Причины обсуждаются в § 15.8. Такой подход если и можно рекомендовать, то только для сложных криволинейных координат, в которых неудобно решать уравнение Пуассона (15.32) или (15.37). Здесь, и в следующем параграфе мы покажем, как работать с неконсервативными токами \mathbf{J} .

При помощи закона Ампера и выражения (15.25) для \mathbf{J} вычислим \mathbf{E} , а затем подгоним продольную часть \mathbf{E} так, чтобы $\nabla \cdot \mathbf{E}$ принимала правильное значение. Из-за микроскопической несогласованности \mathbf{J} и ρ , связанной с использованием сеток и взвешивания, использование нескорректированного \mathbf{J} приводит к \mathbf{E} , не удовлетворяющему, вообще говоря, закону Гаусса ($\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho$). Если поправку искать в виде

$$\mathbf{E}' = \mathbf{E} - \nabla \delta \phi, \quad (15.29)$$

причем потребовать, чтобы

$$\nabla \cdot \mathbf{E}' = \rho, \quad (15.30)$$

то это означает, что

$$\nabla \cdot (\mathbf{E} - \nabla \delta\phi) = \rho \quad (15.31)$$

и, таким образом, для вычисления $\delta\phi$ необходимо решить уравнение Пуассона

$$\nabla^2 \delta\phi = \nabla \cdot \mathbf{E} - \rho. \quad (15.32)$$

Эта поправка, введенная в работе [Boris, 1970], удобна с точки зрения вычислений и широко используется. Согласованная с операторами градиента и дивергенции разностная форма Лапласиана (15.32) представляет простой пятиточечный оператор ∂_x^2 . Поскольку эта коррекция осуществляется после вычисления новых полей, процедура в целом центральна по времени и обратима (см. задачу 15.7).

Для усиления волн промежуточной длины (для лучшей дисперсии) и подавления шума на коротких волнах иногда имеет смысл перед использованием (15.32) осуществить пространственную фильтрацию.

Может показаться, что использование уравнения Пуассона приведет к передаче информации о движении частиц со сверхсветовой скоростью. Однако при линейном взвешивании каждая частица дает в (15.32) квадрупольный вклад. Таким образом, вклад каждой частицы в корректирующие поля $-\nabla\xi$ и $-\nabla\delta\phi$ быстро уменьшается с расстоянием и коррекция в значительной степени локальна.

Задачи

15.6. Проверьте упоминаемое во втором абзаце § 15.6 нарушение непрерывности. Один способ заключается в рассмотрении частицы, движущейся по маленькому кругу внутри четверти ячейки. После одного оборота среднее от $\nabla \cdot \mathbf{J}$ не равно нулю, тогда как ρ не изменяется.

15.7. Покажите, что имеющие несимметричный вид процедуры (15.29) и (15.32) дают в точности те же поля, что и явно центральный по времени алгоритм (15.36) и (15.37).

15.8. Покажите, что если при $t=0$ E_z , B_x , B_y и v_z равны нулю, то таковыми они останутся и поэтому нет необходимости их вычислять.

15.7. А — ϕ -ФОРМАЛИЗМ

Для решения проблемы электромагнитных шумов был предложен код [Morse, Nielson, 1971], использующий потенциалы (\mathbf{A} , ϕ) в кулоновской калибровке. Интегрируемые уравнения имеют вид

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\frac{1}{c} \mathbf{J}_T, \quad \mathbf{J}_T = \mathbf{J} - \nabla\eta, \quad (15.33)$$

где величина η , определяемая соотношением

$$\nabla^2 \eta = \nabla \cdot \mathbf{J}, \quad (15.34)$$

обеспечивает калибровочное условие $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$. Затем поля

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (15.35)$$

используются для перемещения частиц. Продольное поле \mathbf{E} определяется из ρ при помощи уравнения Пуассона; на каждом временном шаге для вычисления поперечного тока необходимо решать еще одно уравнение Пуассона.

Эти поля на самом деле совпадают с полученными ранее в настоящей главе непосредственно из уравнений Максвелла. В этом можно убедиться, получив уравнения, которым удовлетворяют поля (15.35). Закон Фарадея (15.1) и уравнения $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ и $\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho$ тривиально удовлетворяются. Остается уравнение (см. задачу 15.9)

$$c\nabla \times \mathbf{B} - \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \mathbf{J}' \equiv \mathbf{J} - \nabla\xi, \quad (15.36)$$

где величина $\xi = \eta - \partial\phi/\partial t$ удовлетворяет соотношению

$$\nabla^2\xi = \nabla \cdot \mathbf{J} + \frac{\partial\rho}{\partial t}. \quad (15.37)$$

Член $\nabla\xi$ представляет собой поправку к \mathbf{J} , необходимую для того, чтобы ток \mathbf{J}' удовлетворял уравнению непрерывности $\nabla \cdot \mathbf{J}' + \partial\rho/\partial t = 0$ и тем самым поддерживалось выполнение закона Гаусса $\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho$. Если использовать \mathbf{J}' в качестве источника, то уравнения Максвелла определяют те же поля, что и уравнения для \mathbf{A} , ϕ . При переходе к конечным разностям (см. § 15.2) это утверждение выполняется тождественно. Более того, поскольку продольную корректировку можно применять не к \mathbf{J} , а к \mathbf{E} после интегрирования (15.36), поля \mathbf{E} и \mathbf{B} совпадают с полученными выше (см. задачу 15.7). Помимо вывода альтернативного алгоритма эти результаты указывают на то, что наблюдавшиеся [Morse, Nielson, 1971] свойства шумов связаны не с использованием потенциалов, а с методами формирования \mathbf{J} .

Задача

15.9. Получите (15.36). Указание: подставьте (15.35) в левую часть (15.36), а затем используйте условие калибровки и (15.33).

15.8. СВОЙСТВА ШУМОВ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ МЕТОДАХ ВЗВЕШИВАНИЯ ТОКА

Для моделирования неустойчивости Вебеля Морс и Нильсон [Morse, Nielson, 1971] использовали два численных метода. В методе А использовались уравнения Максвелла для \mathbf{E} и \mathbf{B} , причем плотность тока строилась так, чтобы удовлетворялось

разностное уравнение непрерывности. В методе В использовались потенциалы А и ф в кулоновской калибровке, причем, так же как в (15.25), применялось взвешивание тока по площади. Оказалось, что в методе В гораздо меньше проблем с шумами полей излучения. Позднее было обнаружено, что преимущества метода В обусловлены не использованием потенциалов, а более гладким изменением плотности сеточного тока при движении частиц через сетку [Langdon, 1972]. Более ранний метод [Buneman, 1968] был проще, однако, по-видимому, более шумящим. Этот упрощенный алгоритм почти эквивалентен алгоритму Бориса [Boris, 1970], чей метод, как можно ожидать, в значительной степени сохраняет шумовые свойства метода В Морса и Нильсона.

В § 15.7 мы показали, что поля, получаемые методом В, можно вычислить из уравнений метода А, заменив плотность тока на взвешенную по площади скорректированную плотность J' (15.36). (Эта корректировка не нужна в методе А, поскольку при вычислении J сохраняется заряд.) Кроме того, при помощи нескорректированной плотности тока метода А можно вычислить те же поля из уравнений метода В. Различие между полями в методах А и В, а также в методе работы [Buneman, 1968] возникает только из-за использования разных способов вычисления тока, и именно здесь следует искать причину различия свойств шумов.

Шумы поперечных полей излучения отличаются от создающих некоторые трудности при электростатическом моделировании шумов продольных полей (они существуют и в электромагнитных кодах). Электростатические флуктуации в данный момент времени обусловлены только флуктуациями плотности в тот же момент времени. Моды поперечного поля ведут себя как вынужденные флуктуации тока гармонические осцилляторы, причем в отсутствие поглощающей среды или границ затухания нет. Тем самым энергия шумов полей излучения зависит от всей предыстории флуктуаций [Morse, Nielson 1971]; эти шумы растут со временем, если их начальная энергия намного ниже уровня теплового равновесия. При изучении коллективных эффектов хотелось бы задержать термализацию полей излучения. Если изучаемая задача позволяет, то можно уменьшить уровень шума, вводя затухание полей излучения.

Побочный эффект заключается в том, что поскольку число степеней свободы поля не превышает числа узлов сетки, даже для классического излучения черного тела нет ультрафиолетовой катастрофы.

Для того чтобы понять разницу в способах определения J , рассмотрим одну частицу, движущуюся с постоянной скоростью $v \ll c$ и проходящую через узлы сетки, в которых определяется J_x (см. рис. 15.3).

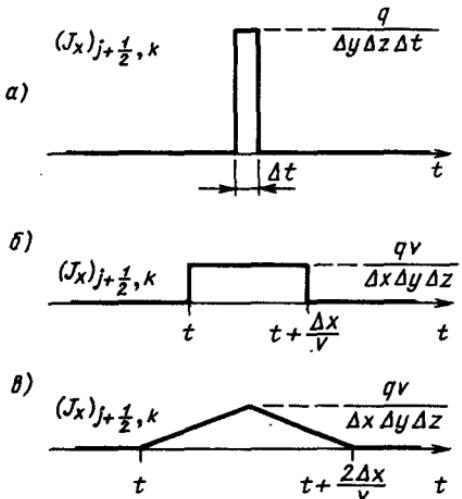


Рис. 15.5. Импульс тока при взвешивании частиц нулевого порядка (а); разрывной ток в методе А (б) и непрерывный ток в методе В (в). Связанные с этими импульсами спектры шумов спадают соответственно как ω^0 , ω^{-1} , ω^{-2}

В методе работы [Buneman, 1968] $J=0$ все время, за исключением одного из примерно $\Delta x/(v\Delta t)$ временных шагов, во время которого частица пересекает границу ячейки — при этом она создает импульс плотности тока величиной $J_x=q/(\Delta y\Delta t)$, соответствующий тому, что полный заряд частицы проходит расстояние Δx за один временный шаг (рис. 15.5, а). В результате возникают импульсы излучения. Поскольку временной спектр J содержит все частоты $|\omega|<\pi/\Delta t$, то и спектр полей содержит большие ω и k .

В методе А $J=0$ всюду, за исключением ближайшего к частице узла сетки, в котором $J_x=qv/(\Delta x\Delta y)$. При передвижении частицы от ячейки к ячейке J изменяется разрывно и кусочно-постоянно, как изображено на рис. 15.5, б. Спектр J при этом завышен на низких частотах ($v/\Delta x$) и спадает медленно (как ω^{-1}).

В методе В или при использовании (15.25) плотность тока $qv/(\Delta x\Delta y)$ распределяется по двум узлам сетки при помощи линейного взвешивания в соответствии с координатой частицы x . При движении частицы J изменяется непрерывно и кусочно-линейно, как изображено на рис. 15.5, в. Спектр оказывается еще более обостренным на низких частотах и спадает быстрее (как ω^{-2}). Это сглаживание осуществляется и для более общих движений частиц.

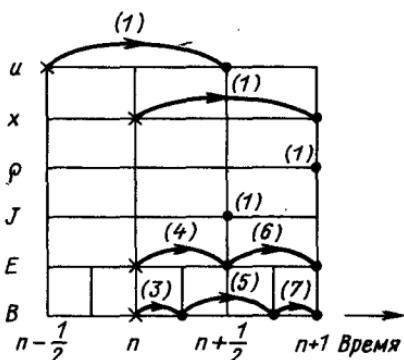


Рис. 15.6. Временные шаги при интегрировании полей вдвое чаще, чем частиц

15.9. СХЕМЫ ПРИ $\Delta t_{\text{part}} > \Delta t_{\text{fields}}$

Для разумного набора параметров (например $c\Delta t \approx \Delta x/2$, радиус Дебая $\lambda_D = \Delta x/2$ и тепловая скорость $v_t = c/20$) оказывает-

ся, что $\omega_p \Delta t = 0,05$. Во многих приложениях для достижения нужной точности временной шаг может быть намного больше. Для того чтобы избавиться от навязываемого полями временного шага, можно в промежутках между перемещениями частиц или сделать несколько шагов для полей, или использовать известный закон распространения Фурье-компонент в вакууме. В другом подходе используется не подвластный условию Куранта алгоритм для полей, см. § 15.16 и [Nelson, Lindman, 1973 a, b].

Организация подцикла для уравнений Максвелла. Интегрирование уравнений для частиц обходится дорого, поэтому полезно перемещать частицы реже, чем поля. Для иллюстрации этого обобщения и описания полного временного цикла приведем операции, совершаемые на одном временном шаге для частиц в случае, когда поля интегрируются в 2 раза чаще. Индекс n соответствует номеру шага для частиц. Необходимо следить за центральностью и усреднением.

Начинаем с E^n , B^n , x^n и $u^{n-1/2}$, продолжаем в соответствии с рис. 15.6, а именно:

- (0) Перераспределяем поля E^n и B^n по сетке для частиц.
- (1) Переходим от $u^{n-1/2}$ к $u^{n+1/2}$, от x^n к x^{n+1} , формируем $J^{n+1/2}$ и ρ^{n+1} .
- (2) Перераспределяем J по полевой сетке. Преобразуем E и B .
- (3) При помощи E^n переходим от B^n к $B^{n+1/4}$.
- (4) При помощи $J^{n+1/2}$ и $B^{n+1/4}$ переходим от E^n к $E^{n+1/2}$.
- (5) При помощи $E^{n+1/2}$ переходим от $B^{n+1/4}$ к $B^{n+3/4}$.
- (6) При помощи $J^{n+1/2}$ и $B^{n+3/4}$ переходим от $E^{n+1/2}$ к E^{n+1} .
- (7) При помощи E^{n+1} переходим от $B^{n+3/4}$ к B^{n+1} .
- (8) При помощи ρ^{n+1} корректируем $\nabla \cdot E^{n+1}$.

Для проверки центральности по времени заметим, что шаги (3) и (7) и шаги (4) и (6) симметричны. Продольная часть E^{n+1} зависит только от $J^{n+1/2}$, при этом неважно, сколько осуществляется временных шагов для достижения времени $n+1$. Тем самым работает приведенный ранее аргумент — коррекция дивергенции не влияет на центральность по времени.

Это расщепление шага по времени может привести к численной неустойчивости. Во многих приложениях неустойчивость приводит к очень большим амплитудам возмущений за несколько тысяч временных шагов. Этот эффект можно подавить, если время от времени с умом проводить усреднение, однако это плохой выход. Теоретический анализ подцикла аккуратно описывает эту неустойчивость, но ее основную причину проще всего уяснить из задачи 15.10.

Интегрирование полей при помощи преобразования Фурье. Для того чтобы, так же как и в гл. 6, волна в вакууме распространялась без дисперсии, но без ограничений, связанных с одномер-

Рис. 15.7. Неограниченная по x и периодичная по y модель: в плазме выполняется уравнение Пуассона, вне плазмы — Лапласа

ностью и условием $\Delta x = c\Delta t$, в некоторых кодах совершается пространственное преобразование Фурье и каждая мода передвигается во времени с нужным фазовым сдвигом [Haber et al., 1973; Lin et al., 1974; Buneman et al., 1980]. Этого можно добиться, заменяя (6.4) и (6.8) на

$$\pm \mathbf{F} = \frac{\mathbf{E} \mp \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{B}}{2}, \quad \hat{\mathbf{k}} \equiv \mathbf{k}/c, \quad (15.38a)$$

$$\pm \mathbf{F}^{n+1} = e^{\mp i\hat{\mathbf{k}} \cdot \Delta t} \left(\pm \mathbf{F}^n - \frac{1}{4} \mathbf{J}^{n+1/4} \Delta t \right) - \frac{1}{4} \mathbf{J}^{n+3/4} \Delta t. \quad (15.38b)$$

Выражая (15.38b) через \mathbf{E} и \mathbf{B} , имеем

$$\mathbf{E}^{n+1} = \mathbf{E}^n \cos c\hat{\mathbf{k}} \Delta t + i\hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{B}^n \sin c\hat{\mathbf{k}} \Delta t - \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{J}^{n+1/4} \cos c\hat{\mathbf{k}} \Delta t + \mathbf{J}^{n+3/4}), \quad (15.39a)$$

$$\mathbf{B}^{n+1} = \mathbf{B}^n \cos c\hat{\mathbf{k}} \Delta t - i\hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{E}^n \sin c\hat{\mathbf{k}} \Delta t + \frac{i}{2} \Delta t \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{J}^{n+1/4} \sin c\hat{\mathbf{k}} \Delta t. \quad (15.39b)$$

Проще всего корректировать $\nabla \cdot \mathbf{E}^{n+1}$ так, что \mathbf{E}^n , $\mathbf{J}^{n+1/4}$ и $\mathbf{J}^{n+3/4}$ содержат как продольную, так и поперечную компоненты.

В случае двух измерений может вызвать затруднения вычисление двух плотностей тока. Плотность (15.25) $\mathbf{J}^{n+1/2} = 1/2(\mathbf{J}^{n+1/4} + \mathbf{J}^{n+3/4})$ можно учитывать на середине пути, при вращении $\pm \mathbf{F}$:

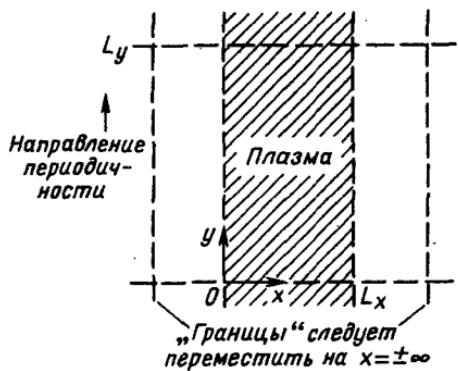
$$\pm \mathbf{F}^{n+1} = e^{\mp i\hat{\mathbf{k}} \cdot \Delta t/2} \left(\pm \mathbf{F}^n e^{\mp i\hat{\mathbf{k}} \cdot \Delta t/2} - \mathbf{J}^{n+1/2} \frac{\Delta t}{2} \right),$$

что изменяет вклад тока в (15.39a) и (15.39b):

$$\mathbf{E}^{n+1} = \mathbf{E}^n \cos c\hat{\mathbf{k}} \Delta t + i\hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{B}^n \sin c\hat{\mathbf{k}} \Delta t - \mathbf{J}^{n+1/2} \alpha \Delta t \cos \frac{c\hat{\mathbf{k}} \Delta t}{2}, \quad (15.40a)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{B}^{n+1} = \mathbf{B}^n \cos c\hat{\mathbf{k}} \Delta t - i\hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{E}^n \sin \frac{c\hat{\mathbf{k}} \Delta t}{2} + \\ + i\hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{J}^{n+1/2} \alpha \Delta t \sin \frac{c\hat{\mathbf{k}} \Delta t}{2} \end{aligned} \quad (15.40b)$$

при этом $\alpha = 1$. Можно поступить иначе — подставить вместо $\mathbf{J}^{n+1/2}$, $\mathbf{J}^{n+1/4}$ и $\mathbf{J}^{n+3/4}$ в (15.39a) и (15.39b), что приведет к (15.40a) и (15.40b), но с $\alpha = \cos 1/2 c\hat{\mathbf{k}} \Delta t$. Схемы работ [Haber



et al., 1973 и Buneman et al., 1980], которые являются точными, если величина \mathbf{J} постоянна во времени, соответствуют $\alpha = (\sin 1/2c\kappa\Delta t) : (1/2c\kappa\Delta t)$. Пространственная фильтрация \mathbf{J} добавляет множитель к выражению $\alpha(\kappa)$. Все эти возможности согласуются с точностью до Δt^2 , однако приводят к разным условиям устойчивости при $c\kappa\Delta t \gtrsim \pi/2$.

Несмотря на то что в вакууме все указанные методы устойчивы для любых Δt , при наличии плазмы возникает неустойчивость, если только $\alpha(\kappa v)$ не будет достаточно малым при $c\kappa\Delta t$, примерно кратном π (см. задачу 15.10).

Задача

15.10. Пусть \mathbf{J} определяется откликом холодной плазмы ($\mathbf{J}^{n+1/2} - \mathbf{J}^{n-1/2} = \omega_p^2 \Delta t \mathbf{E}$). Покажите, что возникающее при интегрировании (15.40a), (15.40b) дисперсионное соотношение имеет вид

$$z - 2 \cos c\kappa\Delta t + z^{-1} = -(\omega_p \Delta t)^2 \alpha \cos \frac{c\kappa\Delta t}{2}.$$

Покажите, что в узкой области волновых векторов, таких что вакуумная частота $c\kappa$ немного меньше $\pi/\Delta t$, может возникнуть неустойчивость. Если $\omega_p \Delta t \lesssim 1$, то максимальные инкременты при $\alpha=1$ равны $\text{Im}(\omega) = \omega_p^2 \Delta t / 4$, при $\alpha = (\sin 1/2c\kappa\Delta t) : (1/2c\kappa\Delta t)$ $\text{Im}(\omega) = \omega_p^2 \Delta t / 2\pi$, тогда как при $\alpha = \cos(1/2)c\kappa\Delta t$ все устойчиво (за исключением $\omega_p \Delta t > 2$). При $c\kappa\Delta t = 2\pi$ и $\alpha=1$ $\text{Im}(\omega) \approx \omega_p$, в то время как для двух других способов выбора α все устойчиво.

15.10. ПЕРИОДИЧЕСКИЕ ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ

Моделируя периодические по x и y системы, можно, так же как и при использовании электростатических кодов, получить много интересных результатов. В этом случае граничные условия не создают каких-либо принципиальных сложностей, за одним возможным исключением — в принятой до сих пор формулировке компонента электрического поля с $\mathbf{k}=0$ определяется из соотношения

$$0 = \mathbf{J}_{\text{tot}} = \left(\mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right)_{\mathbf{k}=0} \quad (15.41)$$

и, вообще говоря, не равняется нулю (случай а). В обычном электростатическом коде поле $\mathbf{E}(\mathbf{k}=0)$ равно нулю или заданной функции времени (обычно подразумевается наложение внешнего поля (случай б). В ZOHAR есть переключатель, позволяющий выбирать между этими двумя возможностями.

Одно из различий заключается в том, что в случае «а» возникает возвращающая сила для плазменных колебаний с $\mathbf{k}=0$. Это означает, что нет дырки в \mathbf{k} -спектре волн, охватываемых нелинейными процессами типа параметрической неустойчивости. Заделывание этой дырки существенным образом

влияет на моделирование самозахвата света вблизи критической точки [Langdon, Lasinski, 1983].

Несмотря на то что возможность выбора есть и в электростатических кодах, отметим, что электростатические и электромагнитные коды естественно приводят обычно к разным режимам.

Задача.

15.11. Покажите, что в однородной плазме правая часть (15.41) равна $(\rho_0 - m\omega^2/q)v$, т. е. если v или E не равны нулю при $k=0$, то $\omega = \pm \omega_p$.

15.11. ОТКРЫТИЕ ГРАНИЦЫ

Коды, применяемые для изучения взаимодействия лазерного излучения с плазмой, периодичны по u и в некотором смысле открыты справа и слева (рис. 15.7). Хочется осветить плазму с одной стороны и позволить рассеянному свету выйти из плазмы с другой стороны. Ниже обсуждаются способы выбора полей в вакууме и некоторые процедуры, связанные с достигающими границы плазмы частицами.

Продольное поле. Нам хотелось бы получить потенциальное решение для ϕ и для поправки $\delta\phi$ в системе, в которой сетка продолжена направо и налево до бесконечности и вне моделируемой области нет пространственного заряда. Эта процедура описана в § 14.8 [Buneman, 1973].

Поглощение уходящих электромагнитных волн в диссипативной области. Во избежание отражения света от границ и возвращения его в плазму по сторонам плазмы обычно размещают диссипативные области. Наиболее очевидный способ достичь этого — ввести в закон Максвелла — Ампера резистивный ток. Недостаток этого подхода заключается в том, что во избежание проникновения и отражения наиболее длинноволнового света резистивная область должна быть достаточно толстой.

Процедуру можно немного улучшить, введя в закон Фарадея магнитный ток:

$$-c\nabla \times E = \frac{\partial B}{\partial t} + J_m, \quad (15.42)$$

где $J_m = \sigma_m(x)B$. Это соответствует потоку магнитных монополей. Эквивалентный подход состоит в умножении B на некоторый меньший единицы множитель [Boris, 1972]. Если σ_m равно электрической проводимости, то падающая нормально ($\chi_y = 0$) волна не отражается, даже если на малом расстоянии проводимость велика. Тем не менее при наклонном падении это уже не так, а как мы увидим ниже, для нормального падения существует более тривиальный способ.

У Бориса [Boris, 1972] есть интересный способ сделать электрическую проводимость чисто поперечной, т. е. ток не

откликается на продольную часть поля и не создает разделения зарядов. Смысл этого в том, что электростатическая активность плазмы не подавляется резистивными токами, индуцированными выходящими из плазмы полями. Метод оказывается эквивалентным добавлению замкнутого тока вокруг каждой ячейки, который пропорционален $\nabla \times \mathbf{E}$ в этой ячейке.

Иными словами, добавляется ток намагничивания

$$\mathbf{J} = c\nabla \times \mathbf{M} = -\nabla \times [\alpha(x)\nabla \times \mathbf{E}], \quad (15.43)$$

дивергенция которого равна нулю и который не зависит от $-\nabla\phi$.

Плохо то, что диссипативная область занимает значительную часть памяти. Для того чтобы в некоторой области частот и углов падения получить хорошее поглощение, а не отражение, область должна быть толщиной порядка максимальной длины волны. Таджима и Ли [Tajima, Lee, 1981] попытались оптимизировать работу с подобными областями. Их метод приспособлен для границ нерегулярной формы.

Простое замыкание уравнений Максвелла на открытых границах. В ZOHAR и в некоторых других кодах выбрано простое граничное условие, которое решает проблему замыкания разностных уравнений Максвелла на открытой границе. В некоторых приложениях оно хорошо работает и, кроме того, иллюстрирует некоторые особенности более сложных граничных условий, рассматриваемых ниже.

Говоря о замыкании, мы имеем в виду следующее: рассмотрим левую границу и предположим, что при $x \geq 0$ поля E_x , E_y и B_z должны вычисляться при помощи уравнений Максвелла. Когда дело доходит до вычисления $E_{y,0,\ell+1/2}$, необходимо знать $B_{z,-1/2,\ell+1/2}$, и для того чтобы набор уравнений был замкнут, нужно какое-либо дополнительное условие для определения этой величины.

Для плоской волны, падающей в направлении $-x$, имеем $E_y = -B_z$. Необходимое добавочное условие определяет среднее по времени поле E_y и пространственное среднее B_z :

$$B_{z,-1/2,\ell+1/2}^{n+1/2} + B_{z,1/2,\ell+1/2}^{n+1/2} + E_{y,0,\ell+1/2}^n + E_{y,0,\ell+1/2}^{n+1} = 0. \quad (15.44)$$

Отсюда следует найти $B_{z,-1/2,\ell+1/2}^{n+1/2}$, учитывая, что

$$(\partial_t E_y + c \partial_x B_z)_{0,\ell+1/2}^{n+1/2} = 0, \quad (15.45)$$

куда входят те же величины. Полученное таким образом значение записывается в нужном столбце массива B_z . При помощи закона Фарадея вычисляются внутренние ($x \geq \Delta x/2$) значения B_z в момент времени $t^{n+1/2}$. Затем используется закон Ампера — Максвелла для вычисления E_x и E_y при $x \geq -\Delta x/2$. Этот алгоритм, принадлежащий Синцу [Sinz, 1973], работает в одномерном случае и в этом виде использовался в коде OREMP [Estabrook].

Та же идея, но без усреднения по времени, используется в конце интегрирования полевых уравнений:

$$B_{z,-1/2,\ell+1/2} + B_{z,1/2,\ell+1/2} + 2E_{y,0,\ell+1/2} = 0. \quad (15.46)$$

Итак, при помощи усреднения определяются все поля при $x \geq 0$.

Для исследования погрешностей, возникающих при наклонном падении и при усреднении, рассмотрим отражение падающей на границу плоской волны. Пусть

$$B_z(x, y, t) = B_i e^{i(-k_x x + k_y y - \omega t)} + B_r e^{i(k_x x + k_y y - \omega t)} \quad (15.47)$$

при $x \geq \Delta x/2$; исключим $B_{z,-1/2,\ell+1/2}$ при помощи (15.44), выразим E_x и E_y через B_z и запишем следующее отношение:

$$\frac{B_r}{B_i} = \frac{c k_x \cos \frac{\omega \Delta t}{2} - \Omega \cos \frac{k_x \Delta x}{2}}{c k_x \cos \frac{\omega \Delta t}{2} + \Omega \cos \frac{k_x \Delta x}{2}}. \quad (15.48)$$

При малых углах $c k_x \rightarrow \Omega$ и наибольшую погрешность дает усреднение

$$\frac{B_r}{B_i} = \frac{\cos \frac{\omega \Delta t}{2} - \cos \frac{k_x \Delta x}{2}}{\cos \frac{\omega \Delta t}{2} + \cos \frac{k_x \Delta x}{2}} \approx \frac{(k_x \Delta x)^2 - (\omega \Delta t)^2}{16}. \quad (15.49)$$

На практике эта величина достигает примерно 0,5%.

Если угол падения ϑ не слишком мал, то наибольшая погрешность возникает вследствие того, что $E_y = -B_z$:

$$\frac{B_r}{B_i} \approx \frac{c k_x - \omega}{c k_x + \omega} = -\tan^2 \frac{\vartheta}{2}. \quad (15.50)$$

При угле 45° погрешность составляет 17° или 3% по энергии. Для многих приложений это вполне приемлемо.

Если нас интересует какое-либо одно значение угла падения, то (15.44) и (15.46) можно модифицировать в соответствии с этим значением.

Во всем этом пока есть один недостаток — мы предположили, что поле \mathbf{E} поперечно. Пусть вблизи границы помещен точечный заряд. Тогда для стационарных полей $B_z = 0$ всюду, а $E_y = 0$ на границе, что соответствует электростатическому полю заряда вблизи проводящей границы. Тем самым точечный заряд притягивается к границе, что в некоторых случаях может вызвать очень большие трудности. Коррекция $\nabla \cdot \mathbf{E}$ на это не влияет. Лечение заключается в вычитании из (15.44) и (15.46) $-\partial \phi / \partial y$ из E_y . Тогда стационарные поля совпадают с полученными при решении уравнения Пуассона с открытыми граничными условиями и не возникают действующие на заряд силы.

Оказалось, что эти граничные условия почти эквивалентны использованным в ранней версии лос-аламосского кода WAVE [Nielson, Lindman, 1973]. Разница заключается в том, что в WAVE для уравнения Пуассона на границе используются условия $\phi=0$ или $\partial\phi/\partial y=0$. Таким образом, изображение или притягивает, или, наоборот, отталкивает заряд.

При изучении взаимодействия лазерного излучения с плазмой требуется, чтобы волна вида $B_{z0} \cos(\kappa_0 x - \omega_0 t)$ распространялась, скажем, слева. Для этого проще всего добавить в правые части (15.44) и (15.46) величину $4B_{z0} \cos \omega_0 t$, вычисленную в подходящие моменты времени. Поля падающих и уходящих волн явно удовлетворяют модифицированным уравнениям. Эта процедура обобщается на случай более сложных падающих волновых образований гораздо легче, чем обычный антенный метод для слоя с током.

Благодаря похожему пространственному размещению граничные условия для полей B_x , B_y и E_z вполне аналогичны.

Отметим, наконец, что указанные условия не приводят к изменению $\nabla \cdot \mathbf{E}$ и $\nabla \cdot \mathbf{B}$ на границе. Для того чтобы убедиться в этом, используем граничные условия для определения только B_z и E_z на границе. Тогда изменение по времени полей E_x , E_y , B_x и B_y всюду определяется разностными уравнениями Максвелла и по-прежнему применимы сделанные в § 15.6 замечания по поводу сохранения $\nabla \cdot \mathbf{E}$ и $\nabla \cdot \mathbf{B}$.

Граничные условия для волн, падающих под (почти) произвольным углом. Во многих задачах плазма рассеивает свет на различные углы; кроме того, падающий свет не обязательно представляет собой плоскую волну. В таких случаях простое граничное условие, описанное выше, применять нельзя. Ниже приведены граничные условия, применяемые в ZOHAR при встрече с подобными проблемами.

Линдман [Lindman, 1975] представляет волну, выходящую из системы, в виде суперпозиции плоских волн. Для каждой плоской волны выполняется соотношение

$$c \frac{\partial A}{\partial x} = C \left(\frac{c \kappa_y}{\omega} \right) \frac{\partial A}{\partial t}, \quad (15.51)$$

где A — y - или z -компоненты вектор-потенциала в коде WAVE и $C \approx \cos \theta = (1 - c^2 \kappa_y^2 / \omega^2)^{1/2}$. Для определения $\partial A_x / \partial x$ используется условие кулоновской калибровки $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$. Затем Линдман рассматривает C как линейный оператор, зависящий от $\partial/\partial y$ и $\partial/\partial t$, действие которого на границе можно определить без экстраполяции. Он нашел устойчивую и точную форму этого оператора в виде разложения на элементарные дроби. Валео [Valeo, 1973] разработал подход, применяемый непосредственно к полям, и именно этот обсуждаемый ниже подход используется в ZOHAR. Для учета падающего света запишем

$$B_z(0, y, t) = C^{-1} \left(-c \frac{\partial_y}{\partial_t} \right) E_y(0, y, t) = 2B_{z0}(y, t), \quad (15.52)$$

где B_{z0} соответствует падающей волне при $x=0$ и

$$C^{-1} \approx \left(1 - c^2 \frac{\partial_y^2}{\partial_t^2} \right)^{-1/2} = \quad (15.53)$$

$$= 1 + \sum_n \frac{\alpha_n}{\partial_t^2 / c^2 \partial_y^2 - \beta_n}. \quad (15.54)$$

В терминах компьютерного кода это означает, что

$$-B_z + 2B_{z0} = C^{-1} E_y + \sum_n E_n, \quad (15.55)$$

где E_n — решение уравнения

$$\left(\frac{\partial_t^2}{c^2} - \beta_n \partial_y^2 \right) E_n = \alpha_n \partial_y^2 E_y. \quad (15.56)$$

Так же, как и выше, в этих соотношениях следует вычесть из E_y величину $\partial_y \phi$, и для того чтобы достичь второго порядка точности в (15.55), следует осуществить временное и пространственное усреднение. Единственное различие между (15.55) и (15.44) заключается в членах с E_n — они известны в тех же точках и временах, что и E_y , и тем самым граничные условия оказываются усредненными по времени.

Рассматривая еще раз отражение падающей на границу плоской волны, находим

$$\frac{B_r}{B_i} = \frac{c \kappa_x \cos \frac{\omega \Delta t}{2} - \Omega C \cos \frac{\ell_x \Delta x}{2}}{c \kappa_x \cos \frac{\omega \Delta t}{2} + \Omega C \cos \frac{\ell_x \Delta x}{2}}. \quad (15.57)$$

Если пренебречь погрешностями, связанными с введением конечных разностей, то

$$\frac{B_r}{B_i} = \frac{\cos \theta - C}{\cos \theta + C}. \quad (15.58)$$

В стационарном состоянии коэффициент отражения равен половине относительной погрешности разложения $C(c \ell_y / \omega)$. Это следует помнить при выборе коэффициентов α и β .

Полезную для диагностики информацию можно извлечь из соотношения $B_z - B_{z0} \approx (B_z - C^{-1} E_y) / 2$, куда входят только поля рассеянных волн.

Коэффициенты Линдмана для трех членов разложения равны $\alpha = 0,3264; 0,1272; 0,0309$, $\beta = 0,7375; 0,98384; 0,99965$.

Объем вычислений и затраты памяти при использовании такого небольшого числа членов разложения намного меньше, чем при работе с диссипативной областью. Поскольку коэффициенты $\beta < 1$, соотношение (15.56) не приводит к ухудшению устойчивости и не требует уменьшения шага по времени, диктуемого уравнениями Максвелла.

Линдман также рассмотрел трудности, связанные с нестационарным откликом граничных условий. При слишком быстром включении падающей волны на установление стационарного состояния полей уходит много времени. Если угол падения θ близок к 90° , то может оказаться, что «слишком быстро» — это неприемлемо долго. Он получил более сложное разложение, улучшающее нестационарный отклик. Эксперименты с ZOHAR, в которых используются отличные от (15.52) линейные комбинации, также указали на плохой нестационарной отклик. С этой точки зрения соотношение (15.52) выглядит весьма удовлетворительно. Причины различий в нестационарном отклике не вполне поняты. Как отмечено в работе [Lindman, 1975], нестационарное поведение в значительной степени определяется тем, что возмущения содержат компоненты Фурье с $\omega < c\kappa_y$. Эти гармоники не уходят от границы, а разложение (15.53) не может аппроксимировать аналитическое продолжение $(1 - c^2 \kappa_y^2 / \omega^2)^{-1/2}$ в область $\text{Re } \omega < c\kappa_y$ и $\text{Im } \omega > 0$. Новейшее разложение Линдмана отличается тем, что оно аппроксимирует и аналитическое продолжение.

Мы сталкивались еще с одной проблемой, вызванной характером разложения при $\omega < c\kappa_y$. Поля E_x , E_y и B_z оказываются неустойчивыми, если недалеко от границы и параллельно ей расположен скачок плотности. На скачке удерживается поверхностная волна с $\omega < c\kappa$. В этой области для некоторого диапазона частот разложение C отрицательно. Таким образом, направление вектора Пойнтинга меняется на обратное и энергия втекает в систему, раскачивая поверхностную волну. Это не создавало никаких осложнений до тех пор, пока расстояние от скачка плотности до границы не уменьшилось, например, до $4c/\omega_p$. Возможно, новейшее разложение Линдмана могло бы решить эту проблему. Для подавления неустойчивости необходимо, чтобы разложение оставалось положительным.

Границные условия для частиц. Границные условия для частиц при электростатическом и электромагнитном моделировании в основном схожи, они обсуждаются в гл. 16.

15.12. ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ НА ПРОВОДЯЩЕЙ СТЕНКЕ

В дальнейшем обсуждаются периодические по y системы с идеально проводящими стенками при $x=0$ и L_x . Более общие

формы границ, типа применяемых в магнетронах, рассмотрены в работе [Palevsky, 1980].

Замыкание уравнений Максвелла на стенке. Для интегрирования по времени уравнений Максвелла необходимы граничные условия только на тангенциальную компоненту \mathbf{E} :

$$E_y = 0 \rightarrow E_{y,0,k+1/2} = 0, \quad (15.59)$$

$$E_z = 0 \rightarrow \frac{E_{z,-1/2,k+1/2} + E_{z,1/2,k+1/2}}{2} = 0 \quad (15.60)$$

при $x=0$ ($j=0$) и аналогично при $x=L_x$ ($j=N_x$), где j и k обозначают узлы сетки по x и y . На рис. 15.8 изображены места определения полей. Второй порядок точности и центральность схемы достигаются усреднением E_z . Этих граничных условий достаточно для замыкания разностных уравнений Максвелла.

Если разностная схема для уравнений Максвелла определена так же, как в § 15.2, то поток тангенциальной компоненты \mathbf{B} сохраняется точно:

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \int_0^{L_y} dy \int_0^{L_x} dx B_y \rightarrow \frac{d}{dt} \Delta y \sum_{k=0}^{N_y-1} \Delta x \times \\ & \times \left(\frac{1}{2} B_{y,0,k+1/2} + \sum_{j=1}^{N_x-1} B_{y,j,k+1/2} + \frac{1}{2} B_{y,N_x,k+1/2} \right) = 0, \end{aligned} \quad (15.61)$$

$$\frac{d}{dt} \int_0^{L_y} dy \int_0^{L_x} dx B_z \rightarrow \frac{d}{dt} \Delta y \sum_{k=0}^{N_y-1} \sum_{j=1}^{N_x-1} \Delta x B_{z,j+1/2,k+1/2} = 0. \quad (15.62)$$

Кроме того, через любую поверхность ($x=\text{const}$) магнитный поток постоянен:

$$\frac{d}{dt} \int_0^{L_y} dy B_x \rightarrow \frac{d}{dt} \Delta y \sum_{k=0}^{N_y-1} B_{x,j+1/2,k} = 0. \quad (15.63)$$

Из-за зависимости от времени уравнения $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ возникает дополнительное граничное условие $B_x(x=0, y, t)=0$ [или, возможно, $B_{x_0}(y)$ — функция, возникающая из-за более медленного включения поля \mathbf{B} при помощи внешних токов]. Таким образом,

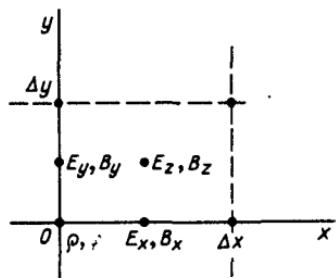


Рис. 15.8. Двухмерная сетка на проводящей стенке ($x=0$)

$$B_x \rightarrow \frac{B_{x,-1/2,\ell} + B_{x,1/2,\ell}}{2} = B_{x0}(y). \quad (15.64)$$

Это граничное условие не нужно для замыкания системы уравнений.

Полная энергия электрического поля

$$W_E = \frac{\Delta x \Delta y}{2} \sum_{\ell=0}^{N_y-1} \left(\sum_{j=0}^{N_x-1} E_{x,j+1/2,\ell}^2 + \sum_{j=1}^{N_x-1} E_{y,j,\ell+1/2}^2 \right). \quad (15.65)$$

При помощи (15.65) и (15.73) (см. ниже) можно показать, что энергия поперечного электрического поля

$$W_{tr} = W_E - W_{es}$$

неотрицательна.

Электростатические решения в 2d. Рассмотрим решение уравнения $-\nabla^2\phi = \rho$ для электростатического потенциала при помощи стандартного пятиточечного шаблона (см. § 14.2). Преобразование Фурье ρ и ϕ по y дает величины $\phi_{j,m}$ и $\rho_{j,m} \equiv \rho_m(X_j)$, где m — номер гармоники по y , причем m может быть равно нулю. Так же как в § 14.6, уравнение Пуассона принимает вид конечно-разностного уравнения по x . Граничные условия на идеально проводящей стенке имеют вид $E_y(0, y) = 0 = E_y(L_x, y)$, т. е. стенки при $x=0$ и $x=L_x$ являются эквипотенциалами: $\Phi_{0,m} = 0 = \Phi_{N_x,m}$ для любых $m \neq 0$. При $m=0$ имеем

$$\Phi_{0,0} - \Phi_{1,0} = +(\rho_{0,0}\Delta x + \langle \sigma_0 \rangle)\Delta x, \quad (15.66)$$

$$\Phi_{N_x-1,0} - \Phi_{N_x,0} = -(\rho_{N_x,0}\Delta x + \langle \sigma_L \rangle)\Delta x, \quad (15.67)$$

где поверхностные заряды на стенках q_0 и q_L ($q_0 \equiv L_y \langle \sigma_0 \rangle$) добавляются к зарядам, возникающим на стенах при взвешивании. Плотность поверхностного заряда на границе зависит от y [$\sigma(0, y) = \sigma_0(y)$ и $\sigma(L_x, y) = \sigma_L(y)$]; на левой границе поверхностный заряд на одном периоде по y равен

$$q_0 = \Delta y \sum \sigma_0(y) \equiv L_y \langle \sigma_0 \rangle, \quad (15.68)$$

на правой границе заряд q_L получается аналогично.

Теперь при помощи шаблона из одной ячейки для $\Phi_{j,\ell}$, наилучшего с точки зрения сохранения заряда [гауссов ящик с центром в точке (j, ℓ) , а E_x вычисляется в точке $(j \pm 1/2, \ell)$, E_y — в точке $(j, \ell + \frac{1}{2})$], в центрах ячеек вычисляются электростатические поля E_x , E_y .

Величины $\{\rho_{j,\ell}\}$ определяются зарядом активных частиц; часть заряда оказывается при $j=0$ и N_x . Полный заряд системы на периоде L_y при $0 \leq x \leq L_x$ равен

$$Q_{\text{tot}} = q_0 + q_L + \Delta x \Delta y \sum_{j=0}^{N_x} \sum_{\ell=0}^{N_y-1} \rho_{j,\ell} = 0. \quad (15.69)$$

Полный же заряд $Q_{\text{tot}} = 0$, поскольку внутри проводящих стенок электрического поля нет и тем самым его поток через поверхность, охватывающую Q , равен нулю. Ток во внешней цепи переносит заряд от q_0 к q_L , которые изменяются по мере того, как рождаются и поглощаются активные частицы (см. гл. 16). Таким образом, полный заряд остается постоянным (равным нулю) и соотношения (15.66) и (15.67) оказываются лишними, т. е. для однозначного определения ϕ необходимо какое-то другое условие.

Недостающим условием является соглашение об аддитивной константе в ϕ . Пусть левая стенка заземлена:

$$\Phi_{0,\ell} \equiv \Phi_0 = 0, \quad \Phi_{N_x,\ell} = \Phi_L. \quad (15.70)$$

Решение (14.18) с учетом (15.66) или (15.67) позволяет определить ϕ всюду. Найти это решение можно, введя Фурье-компоненту поля с $m=0$

$$E_{x,j+1/2,0} = \frac{\Phi_{j,0} - \Phi_{j+1,0}}{\Delta x}, \quad (15.71)$$

при помощи которой получаем

$$E_{x,j+1/2,0} - E_{x,j-1/2,0} = \rho_{j,0} \Delta x, \quad j = 1, \dots, N_x - 1, \quad (15.72a)$$

$$E_{x,1/2,0} = \rho_{0,0} \Delta x + \langle \sigma_0 \rangle. \quad (15.72b)$$

Поле E_x вычисляется при прогонке слева направо уравнений (15.72a), (15.72b), после этого при помощи (15.71) находятся $\Phi_{j,0}$.

Энергия электростатического поля равна

$$W_{es} = \frac{1}{2} q_0 \Phi_0 + \frac{1}{2} q_L \Phi_L + \Delta x \Delta y \sum_{j=0}^{N_x} \sum_{\ell=0}^{N_y-1} \frac{1}{2} \rho_{j,\ell} \Phi_{j,\ell}. \quad (15.73)$$

С учетом равенства (15.69) W_{es} не зависит от произвола в (15.70).

Совмещение вычислений для частиц и полей. Вычисление корректирующей продольную часть E потенциала $\delta\phi$ (§ 15.6) производится точно так же, при этом источник в (15.32) не изменяется, за тем исключением, что на стенках $\nabla \cdot \mathbf{E}$ вычисляется с учетом $E_{x,-1/2,\ell} = E_{x,N_x+1/2,\ell} = 0$. Эту процедуру просто контролировать, применив ее дважды; во второй раз $\delta\phi$ должно обратиться в нуль.

Можно определить зависимость поверхностных зарядов q_0 и q_L от y , что используется, например, для контроля излучения

(см. гл. 16). Применяя закон Гаусса к любой ячейке на левой стенке, получаем

$$\sigma_{0,\ell} = E_{x,1/2,\ell} - \rho_{0,\ell} \Delta x. \quad (15.74)$$

Закон Гаусса, примененный к поверхности $x_{1/2} = 1/2\Delta x$ на одном периоде по y , приводит к соотношению

$$\sum_{\ell=0}^{N_y-1} E_{x,1/2,\ell} \Delta y = \sum_{\ell=0}^{N_y-1} (\rho_{0,\ell} \Delta x + \sigma_{0,\ell}) \Delta y = \quad (15.75)$$

$$= q_0 + \Delta x \Delta y \sum_{\ell=0}^{N_y-1} \rho_{0,\ell}. \quad (15.76)$$

Здесь использовано соотношение (15.68).

Так же, как и в § 15.5, для удобства интегрирования и диагностики поля усредняются в пространстве и вычисляются в тех же точках, что и ρ . Перед следующим интегрированием уравнения Пуассона восстанавливаются исходные неусредненные поля.

Значения полей E_y , E_z и $B_x = B_{x0}(y)$ на стенках вычисляются из (15.59), (15.60) и (15.64). Для получения $E_{x,0,\ell}$ следовало бы взять среднее от $E_{x,1/2,\ell}$ и $E_{x,-1/2,\ell}$, но если, так же как и при вычислении поправок к $\nabla \cdot E$, последняя величина равна нулю, то нельзя описать даже простой случай заряженного конденсатора без свободных зарядов, в котором E_x постоянно. Вместо этого положим $E_{x,0,\ell} = E_{x,1/2,\ell}$. Таким же образом поступим и с B_z . Если в граничных ячейках есть свободные заряды или токи ($\rho_{0,\ell}$ или $J_{y,0,\ell}$ не равны нулю), то можно поступать по-разному, в зависимости от того, нужно ли нам учитывать коллективное поведение в этих ячейках и насколько хорошо это следует сделать. Для E_x различные возможности включают в себя:

- (а) $E_{x,0,\ell} = E_{x,1/2,\ell}$;
- (б) $E_{x,0,\ell} = \sigma_{0,\ell} + 1/2 \rho_{0,\ell} \Delta x = E_{x,1/2,\ell} - 1/2 \rho_{0,\ell} \Delta x$,
- (в) $E_{x,0,\ell} = \sigma_{0,\ell} = E_{x,1/2,\ell} - \rho_{0,\ell} \Delta x$.

Все это при $\rho_{0,\ell} = 0$ переходит в упомянутый выше случай без свободных зарядов: в способе (а) при «рождении» частицы около стенки и продвижении ее в глубь среды все величины изменяются гладко, тогда как в способах (б) и (в) при эмиссии частицы возникает скачок поверхностной плотности. Если поток однороден по y , то способ (б) приводит к правильному закону притяжения частиц в крайних ячейках к эмиттирующей стенке, тогда как в способе (а) притяжение слишком мало, а в способе (в) велико.

15.13. ИНТЕГРИРОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА В ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ КООРДИНАТАХ

Пространственная сетка для уравнений Максвелла в координатах $r-z$ описана в работе [Boris, 1970]. В работе [Palevsky, 1980] рассмотрены как координаты $r-z$, так и $r-\theta$. Годфри [Godfrey] использовал более общие криволинейные координаты. Ниже электростатические вычисления (см. § 14.10—14.12) обобщаются на случай электромагнитного поля в координатах.

Прежде всего, переписав уравнения из § 14.10, введем компактное обозначение, удобное в более сложном случае электромагнитного поля. Из (14.69) следует, что дивергенция равна

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \Delta z (\Delta r^2)_j (\nabla \cdot E)_{j,\ell} &= \Delta z (\Delta_r r E_r)_{j,\ell} + \\ &+ \frac{1}{2} (\Delta r^2)_j (\Delta_z E_z)_{j,\ell}, \end{aligned} \quad (15.77)$$

где индексы (j, ℓ) соответствуют координатам (r, z) , а действие операторов Δ_r и Δ_z описывается выражениями

$$(\Delta_r r E_r)_{j,\ell} \equiv r_{j+1/2} E_{z,j+\frac{1}{2},\ell} - r_{j-\frac{1}{2}} + E_{z,j-\frac{1}{2},\ell}, \quad (15.78)$$

$$(\Delta_z E_z)_{j,\ell} \equiv E_{z,j,\ell+\frac{1}{2}} - E_{z,j,\ell-\frac{1}{2}} \quad (15.79)$$

Аналогично

$$\Delta r_{j+1/2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)_{j+1/2,\ell} = \Phi_{j+1,\ell} - \Phi_{j,\ell} \quad (15.80)$$

и т. д.

Так же как выражения для дивергенции получаются после применения теоремы Гаусса к некоторым объемам, выражения для ротора получаются при помощи теоремы Стокса для интегралов по определенным кривым. Из интеграла от E по прямоугольнику в плоскости $r-z$ (см. рис. 14.18) имеем

$$\begin{aligned} \Delta r_{j+1/2} \Delta z (\nabla \times E)_{\theta,j+1/2,\ell+1/2} &= \Delta z (\Delta_r E_z)_{j+\frac{1}{2},\ell+\frac{1}{2}} + \\ &+ \Delta r_{j+1/2} (\Delta_z E_r)_{j+1/2,\ell+1/2}. \end{aligned} \quad (15.81)$$

Эти разностные выражения тождественно удовлетворяют соотношению $(\nabla \times \nabla \Phi)_\theta \equiv 0$ (см. задачу 15.12).

Компоненты $\nabla \times E$ равны (см. задачу 15.13)

$$\Delta z (\nabla \times E)_{r,j+1/2,\ell} = -(\Delta_z E_\theta)_{j+1/2,\ell}, \quad (15.82a)$$

$$\frac{(\Delta r^2)_{j+1/2}}{2} (\nabla \times \mathbf{E})_{z, j+1/2, \ell} = (\Delta_r r E_9)_{j+1/2, \ell}. \quad (15.826)$$

Полученные выражения удовлетворяют тождеству для $\nabla \cdot \nabla \times \mathbf{E}$ (см. задачу 15.14).

Наконец, часто бывают нужны разностные выражения для $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = -(\nabla^2 \mathbf{E}) + \nabla \nabla \cdot \mathbf{E}$. Поскольку оператор ∇^2 действует на единичные векторы $\hat{\mathbf{r}}$ и $\hat{\mathbf{9}}$, величины $(\nabla^2 \mathbf{E})_r$ и $\nabla^2 E_r$ не равны. Тем не менее $(\nabla^2 \mathbf{E})_r$ зависит только от E_r , что можно отразить, записав разностное уравнение в точке $(j+1/2, \ell)$:

$$[\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E})]_r = \frac{1}{\Delta z} \Delta_z \left(\frac{\Delta_z E_r}{\Delta z} \right) - \frac{1}{\Delta r} \Delta_r \left(\frac{\Delta_r r E_r}{\Delta r^2 / 2} \right) + \frac{1}{\Delta r} \Delta_r (\nabla \cdot \mathbf{E}), \quad (15.83)$$

где первые два члена соответствуют $-(\nabla^2 \mathbf{E})_r$. Похоже выглядят и 9 - и z -компоненты.

При перемещении частиц вычисляются токи I_r , I_9 , I_z и заряды Q , а не плотности J , ρ . Это позволяет, так же как и в § 14.10, организовать выполнение законов сохранения. Однако остается важная тонкость: в § 14.12 мы обсуждали вращение, осуществляющееся после перемещения частиц. Чтобы избежать погрешности в направлении J , возникающей из-за соответствующего вращения, в первой (второй) части (15.25) следует использовать v до (после) вращения. В кодах Дарвина вычисление J_{n+1} из неправильно повернутых v_{n+1} может приводить к макроскопическому накоплению фиктивного углового момента [Hewett, 1983].

Задачи

15.12. Используя свойство коммутации $\Delta_r (\Delta_z \varphi) \equiv \Delta_z (\Delta_r \varphi)$, которое основано на петле (см. рис. 14.18), покажите, что $(\nabla \times \nabla \varphi)_9 = 0$.

15.13. Выполните соотношения (15.82a), (15.82б). Указание: (15.82a) следует из интеграла по сегменту цилиндра, разделенного на $2\pi r$, (15.82б) следует из разности интегралов по внешнему и внутреннему краям кольцевого сегмента.

15.14. При помощи коммутационного соотношения $\Delta_r (\Delta_z E_r) \equiv \Delta_z (\Delta_r r E_9)$ покажите, что $(\nabla \cdot \nabla \times \mathbf{E})_9 \equiv 0$.

15.14. ПРИБЛИЖЕНИЕ ДАРВИНА

В некоторых приложениях можно избежать ограничений на шаг по времени, связанных с введением разностных уравнений Максвелла, изменяя уравнения таким образом, чтобы подавить распространение волн. Таким подходом является использование модели Дарвина, или магнитоиндуктивной модели.

В кодах Дарвина опускается поперечный ток смещения Максвелла и тем самым снимается ограничение Куранта $\Delta t \leq \lambda/c$. В рамках этих «домаксвелловских уравнений» невозможно распространение волн, тогда как электростатические, магнитостатические и индуктивные эффекты сохраняются. Эквивалентность этого безызлучательного приближения лагранжиану Дарвина, который учитывает все возможные электромагнитные взаимодействия без запаздывания, продемонстрирована в работе [Kaufman, Rostler, 1971]. Здесь мы следуем работе [Nielson, Lewis, 1976], где можно найти многочисленные ссылки, отражающие историю вопроса.

В приближении Дарвина уравнения поля имеют вид

$$c\nabla \times \mathbf{B} = \mathbf{J}_T = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{E}_L}{\partial t}, \quad (15.84)$$

$$c\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}. \quad (15.85)$$

Для заданных \mathbf{E}_n и \mathbf{B}_n при помощи явной схемы для частиц вычисляются $\mathbf{v}_{n+1/2}$ и \mathbf{x}_{n+1} . Экстраполяция от $\mathbf{v}_{n+1/2}$ к \mathbf{v}_{n+1} позволяет построить \mathbf{J}_{n+1} , откуда вычисляется \mathbf{B}_{n+1} , т. е. решается уравнение $c\nabla^2 \mathbf{B} = -\nabla \times \mathbf{J}$. В отличие от обычных электромагнитных кодов уравнение Ампера (15.84) не позволяет передвигать \mathbf{E}_T во времени. Вместо этого на $n+1$ -м временном уровне используется соотношение

$$c^2 \nabla^2 \mathbf{E}_T = \frac{\partial \mathbf{J}_T}{\partial t}. \quad (15.86)$$

При этом возникает проблема центральности по времени. Для сохранения второго порядка точности в (15.86) необходимо использовать сдвинутое вперед выражение для $\partial \mathbf{J}_T / \partial t$. Для обеспечения устойчивости при помощи моментов, собранных из частиц, $\partial \mathbf{J} / \partial t$ выражается через новые значения \mathbf{E} :

$$\frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho \langle \mathbf{v} \mathbf{v} \rangle + \frac{q\rho}{m} \mathbf{E} + \frac{q\rho \langle \mathbf{v} \rangle}{mc} \times \mathbf{B}, \quad (15.87)$$

при этом проводится суммирование по сортам частиц. В результате для новых полей в момент времени $n+1$ получается эллиптическое уравнение вида

$$c^2 \nabla^2 \mathbf{E}_T - \omega_p^2(x) \mathbf{E}_T = -\sum \nabla \cdot \rho \langle \mathbf{v} \mathbf{v} \rangle + \\ + \left(\sum \frac{q\rho \langle \mathbf{v} \rangle}{mc} \right) \times \mathbf{B} + \omega_p^2 \mathbf{E}_L - \nabla \Xi.$$

Дивергенция этого уравнения совместно с условием $\nabla \cdot \mathbf{E}_T = 0$ определяет Ξ . Эллиптическое уравнение обеспечивает необхо-

димое для устойчивости мгновенное распространение \mathbf{B} и \mathbf{E}_T . Для решения (15.88) обычно применяются итерационные методы.

Варианты этого алгоритма описаны в работах [Busnardo-Neto et. al., 1977; Aizawa et. al., 1980].

15.15. ГИБРИДНЫЕ КОДЫ ЧАСТИЦА—ЖИДКОСТЬ

Для приложений, не требующих кинетического описания электронов, используются коды, в которых ионы являются частицами, а электроны описываются как жидкость. При использовании приближения Дарвина, или квазистатического приближения, достижимы такие же масштабы времени, что и для полностью явных кодов, однако шумы при этом меньше. Иногда небольшое число энергетических электронов моделируется при помощи частиц, а холодные ионы и электронный фон являются жидкостью. Ранние модели этого типа [Dickman et al.; 1969; Byers et al., 1974] учитывали поперечную к плоскости моделирования компоненту тока, однако другие компоненты тока частиц и жидкости описывались очень приближенно; часто жидкость просто нейтрализовала заряд частиц.

В пределе пренебрежимо малой массы электронов более полный подход к токам частиц и жидкости используется в работе [Byers et al., 1977]. Похожий алгоритм применялся в двухмерном случае [Mankofsky et al., 1981; Harned, 1982a]. Поперечный ток был получен при помощи явного интегрирования уравнения для импульса жидкости [Hewett, Nielson, 1978]. Продольный же ток жидкости вычислялся так, чтобы скомпенсировать продольный ток ионов, но при этом пропадали ленгмюровские колебания. Однако некоторые плазменные эффекты, зависящие от инерции электронов, сохранялись (ниже гибридные и электронные циклотронные волны).

При низких плотностях, там где частота альфвеновской волны велика, эти коды неустойчивы из-за использования явного интегрирования по времени. Для решения проблем, в которых существенны области с низкой плотностью или вакуум, необходимо вводить границу или применять другие стабилизирующие изобретения. Хьюэтт [Hewett, 1980] избавился от этих ограничений, решив одновременно систему связанных уравнений для электронов и ионов при помощи неитеративного неявного метода переменных направлений. Приложения гибридных кодов описаны в § 15.18.

15.16. НЕЯВНЫЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ КОДЫ

Неявные решения для полей воспроизводят распространение электромагнитных волн с большой длиной волны ($\lambda \gg c\Delta t$). На малых длинах волн, как и в кодах Дарвина, сохраняются

электростатические, магнитостатические и индукционные эффекты. Неявное интегрирование для полей можно использовать одновременно с явным интегрированием для частиц.

Если и частицы интегрируются неявно, то ленгмюровские колебания стабилизируются для любых длин волн, так же как и в неявном электростатическом коде. Электростатическое поле вычисляется точно для длин волн, больших длины пробега электронов $v_{te}\Delta t$. Эти свойства делают неявные электромагнитные коды привлекательными для моделирования, например, электронного потока в условиях пинч-эффекта, неустойчивости Вейбеля [Brackbill, Forslund, 1982] и других процессов с генерацией магнитного поля, которое изменяет электронный поток [Forslund, Brackbill, 1982].

Детали неявного электромагнитного моделирования обсуждаются в работах [Forslund, Brackbill, 1985; Langdon, Barnes 1985].

15.17. ДИАГНОСТИКИ

Мы опишем минимальный набор диагностик, необходимый для понимания результатов моделирования взаимодействия лазерного излучения с плазмой. Многие из них очевидны; необходимость других обусловлена опытом решения конкретных проблем. Эти части программ меняются чаще всего и должны быть достаточно гибкими.

Частицы. Наиболее знакомая диагностика, относящаяся к частицам,— это график распределения в фазовом пространстве. Точки наносятся в положениях, определяемых какими-либо двумя координатами частиц, например u_x и u_y . Зачастую эти графики непосредственно связаны с теоретическим описанием; хорошо известный пример— захват частиц волной.

Несмотря на идеиную простоту осуществить это непросто, потому что не все частицы хранятся в памяти вместе. Если график фазового пространства должен выводиться на следующем шаге, то ZOHAR проверяет частицы на минимум и максимум и определяет, не следует ли изменить границы графика. Другая проблема связана с использованием нескольких систем координат и различных каналов— необходимо описать выбор величин и интервал выдачи графиков. Так, один график выводится на временных шагах 0, 100, 200, ..., другой может выводиться на шагах 49, 99, ... и т. д. Обычно небольшая разница во времени построения графиков не затрудняет их сравнения.

Дальнейшие усложнения заключаются в нанесении зависимости одной линейной комбинации координат от другой, пропуске частиц, не удовлетворяющих двум линейным ограничениям. Например, построение зависимости $u_x - u_y$ от $x - y$ для

частиц $a < x < b$ демонстрирует захват частиц волной, распространяющейся под углом 45° к определенному сечению системы. Морс и Нильсон [Morse, Nielson, 1971] обнаружили захват при моделировании неустойчивости Вейбеля с помощью графика v_y , от y для каждой из трех групп частиц, отличающихся значением постоянного канонического импульса $v_x + qA_x/mc$.

Можно также строить графики $f(q)$ и контуры $f(q_1, q_2)$, где q, q_1 и q_2 — какие-либо координаты в фазовом пространстве; q может быть равно u^2 . Таким образом выводят, например, зависимости $f(u_x), f(u^2)$ и $\rho(x, y)$. В случае открытых границ часто используется преобразование $\rho(x, \lambda_y)$ и выводится статистика для частиц, покидающих систему.

Поля. Обычно строятся контурные графики B_z, E_z и ϕ . Полезно также выводить поля $(E_x, E_y), (B_x, B_y)$ и $-\nabla\phi$ в виде набора маленьких стрелок, направление и длина которых соответствуют значению вектора в данной точке пространства.

Распределение энергии по модам описывается при помощи набора вертикальных линий, длина которых пропорциональна логарифму энергии мод; при этом охватывается диапазон порядка 10^4 . Таким образом, можно обнаружить моды, которые следует более детально исследовать другими способами.

В случае открытых границ графики величин типа $B_z(x, \lambda_y)$ при фиксированных значениях λ_y позволяют интерпретировать результаты и отделить полезный сигнал от других эффектов или шумов.

История. Для построения временных графиков многие величины запоминаются на каждом шаге по времени. Как правило, это энергия и импульс полей и различных сортов частиц. Запоминаются также определенные полевые величины, энергии и амплитуды мод, например для $E_z(x, \lambda_y)$. Сюда включаются поля E_z и B_z , вычисленные (в соответствии с § 15.11) при $x=0$ только для уходящих волн. Время от времени в процессе счета запоминаемые величины, а также связанные с ними наносятся на графики. Для более детального изучения применяется постпроцессор ZED, который считывает файл, производит операции типа вычисления частотного спектра и строит графики.

Замечания. Обычно невозможно точно предсказать, какие графики в процессе счета окажутся решающими. По сравнению с электростатическим кодом здесь выводить можно гораздо большее число величин. Довольно трудно правильно выбрать то, что нужно в первую очередь, поэтому мы предпочитаем выводить побольше информации, чем пропустить что-либо. Результат несколько напоминает телефонный справочник: множество данных, большая часть которых не понадобится, однако

вам необходимо все это, поскольку заранее неизвестно, что же будет нужно.

По-видимому, подобными вычислениями нельзя серьезно заниматься без доступа к выходному устройству с высоким разрешением, например к кинескопу и камере. Механические графопостроители оказываются слишком медленными, особенно при построении контуров и графиков фазового пространства. «Печатные графики» слишком грубы — они часто скрывают или искажают ценные детали. Наиболее компактным и удобным форматом является микрофиш.

Иногда приходится обращаться к численным распечаткам. Аналогия с телефонным справочником уместна и в этом случае, и удобнее всего использовать микрофиши.

15.18. НЕКОТОРЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ

Ниже приведен неполный обзор приложений электромагнитных кодов. Приводимая библиография не полна, однако она отражает разнообразие физических задач и численных моделей. Много дополнительных ссылок можно найти в цитируемых здесь статьях, некоторые работы цитируются в гл. 6 и 7. Не освещаются многие важные области, такие как ионосферная, межпланетная и астрофизическая плазма, лазеры на свободных электронах и коллективное ускорение. Прежде всего назовем несколько статей на различные темы, а затем некоторые вопросы обсудим подробнее.

Одним из первых применений электромагнитных кодов было исследование неустойчивости Вейбеля и связанной с ней филаментации электронного потока [Morse, Nielson, 1971; Dovidson et al., 1972; Lee, Lampe, 1973]. Сейчас эта задача хорошо решается при помощи неявных кодов [Brackbill, Forslund, 1982].

Диссипативные процессы в бесстолкновительных ударных волнах обсуждаются, например, в работах [Biskamp, Welter, 1972; Forslund, 1972]; неустойчивости свистов и ионных циклотронных волн — в работах [Hasegawa, Birdsall, 1964; Ossakow et al., 1972a, b]; подавление потерь и ВЧ-нагрев при помощи низкочастотных радиоволн — в работе [Ohsawa et al., 1979].

Электронные потоки в микроволновых приборах являются заряженной плазмой. При помощи электромагнитных кодов моделировались магнетроны [Palevsky, 1980] и другие приборы [Kwan, 1984].

Бесстолкновительная тиринг-неустойчивость и связанный с ней перенос тепла исследовались в работах [Katanuma, 1981; Katanuma, Kamitura, 1980].

Взаимодействие интенсивного лазерного излучения с плазмой. Первоначально это направление разрабатывалось для поджига

термоядерной реакции при помощи очень больших потоков энергии, излучаемых мощными лазерами. Обычно плазма также создается лазером, и поэтому зависимость плотности и температуры плазмы от координат связана с интенсивностью и длиной волны лазерного излучения. Моделируется часть плазменной короны, включающая в себя область критической плотности (плотности, при которой плазменная частота ω_{pe} равна частоте лазера ω_0), причем плотность может понижаться до нескольких процентов критической.

Сделаем некоторые замечания о единицах измерения: при использовании ZOHAR для задач взаимодействия лазерного излучения с плазмой мы полагали c , частоту лазера ω_0 и $-q_e/m_e$ равными единице. Это определяет систему единиц, для которой получаемые в процессе счета числа легко связать с физическими величинами. Поскольку в рационализованной системе СГС теперь $\omega_{pe}^2 = -\rho_e$, плотность измеряется в единицах критической плотности. Равный единице потенциал $\phi = 1$ означает $-q_e \phi = m_e c^2$, т. е. 511 кВ. Циклотронная частота $\omega_{ce} = |q_e| B_z / (m_e c)$, т. е. единица B_z означает $\omega_{ce} = \omega_0$, что при длине волны 1,06 мкм равно примерно 100 Тл. Заряд других сортов частиц выбирают так, чтобы получить правильный полный ток, а их массы находят из отношения q/m . Энергетические характеристики системы и прочие величины перед выводом на график делятся на L_y , т. е. результаты не изменяются при изменении N_y, L_y, N_e и т. д., а зависят только от физики процесса. В других группах приняты похожие соглашения, например электрическое поле в системе СГС нормализуется на $(4\pi m_e c^2)^{1/2}$.

Вблизи критической плотности бесстолкновительное поглощение обусловлено в основном «резонансным» поглощением, когда часть энергии света туннелирует за классическую точку поворота и возбуждает плазменную волну. Эта волна ускоряет электроны до значительных энергий. Давление плазменной волны может существенно изменить поток плазмы через критическую точку, что приводит к укручению профиля плотности и в свою очередь влияет на поглощение и температуру горячих электронов. Этот нелинейный сценарий подтверждается численным моделированием [Forlund et al., 1975; Estabrook et al., 1975]. Связанная с резонансным поглощением генерация магнитного поля, как с учетом, так и без учета столкновений, обсуждается в работе [Adam et al., 1982] и приведенных там ссылках. Генерация магнитного поля и связанный с ней теплоперенос исследовались и при помощи неявных кодов [Forlund, Brackbill, 1982].

В области разреженной плазмы существуют две высокочастотные неустойчивости: 1) $2\omega_p$ — распад падающей волны на две электронные плазменные волны при плотности, примерно

равной четверти критической; 2) рамановское рассеяние — распад на электронную плазменную и электромагнитную волны при плотности, меньшей или равной четверти критической. Вынужденное томсоновское или комптоновское рассеяние представляет собой частный случай рамановского, когда продольные возмущения не являются плазменной волной (из-за затухания Ландау), т. е. происходит поперечное рассеяние на электронах. Кроме того, в разреженной плазме возможно вынужденное рассеяние Бриллюэна — распад на звуковую и электромагнитную волны. Другие процессы типа филаментации здесь не обсуждаются. Названия всех этих процессов происходят от аналогичных явлений в жидкостях и газах.

Впервые одномерное моделирование рамановского и бриллюэновского рассеяния описано в работах [Forlund et al., 1973; Kruer et al., 1973]. Позднее в рамках $2\frac{1}{2}$ -мерной модели исследовалось боковое рассеяние Рамана и Бриллюэна — рассеянная волна в этом случае распространяется под углом к падающей [Klein et al., 1973; Ott et al., 1974; Biskamp, Welter, 1975; Langdon, Lasinski, 1976, 1983].

Моделирование при помощи ZOHAR $2\omega_p$ -неустойчивости (двуихимонный распад) продемонстрировало нелинейное насыщение неустойчивости из-за генерации коротковолновых ионных флуктуаций и локального укручивания профиля плотности [Langdon, Lasinski, 1976; Langdon et al., 1979]. Оба механизма впоследствии экспериментально наблюдались при помощи томсоновского рассеяния [Ebrahim et al., 1979; Baldis, Walsh, 1983].

В работе [Aizawa et al., 1980] исследовался разлет лазерной плазмы во внешнем магнитном поле.

Конфигурации с обращенным полем; пинчи. Гибридные коды использовались для моделирования конфигураций с обращенным полем, возникающих при инжекции электронов [Byers et al., 1978], ионов [Mankofsky et al., 1981; Harned, 1982] и нейтральных пучков [Byers et al., 1978]. Бунеман и др. [Buneman et al., 1980] моделировали неустойчивость Z-пинча, что возможно только при помощи их трехмерного кода. При моделировании θ -пинча была неожиданно обнаружена генерация торoidalного магнитного поля, которая впоследствие наблюдалась и на эксперименте [Hewett, 1984].

15.19. ЗАМЕЧАНИЯ О ПОЛНОМАСШТАБНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ПЛАЗМЫ

Теперь обсудим некоторые вопросы, существенно влияющие на практическую ценность двухмерного электромагнитного моделирования.

Часто утверждается, что для получения «бесстолкновительного» поведения времена между столкновениями должны быть

больше времени счета. К счастью, это чересчур пессимистичная точка зрения. Ближе к истине то, что времена между столкновениями должны превосходить, например, времена экспоненциального нарастания или захвата. В частности, при использовании кода с открытыми границами, когда пополняется энергия волн и быстрых частиц, время счета может быть намного большим.

Можно было бы ожидать, что для хорошего воспроизведения распределения по скоростям в дебаевской сфере должно быть достаточно много частиц. При использовании трех компонент скоростей ($2^{1/2}d$) в этом случае полное число частиц должно быть практически недостижимым. Тем не менее в известных нам приложениях детали распределения по v_z не играли роли, необходимо было воспроизвести лишь первые несколько моментов по v_z . Обычно для задач с двумя компонентами скорости ($2d$) требовалось примерно столько же частиц. Точно так же при распространении продольной плоской волны вдоль оси x несущественны детали распределения по v_y , а для хорошего воспроизведения распределения по v_x необходимо иметь достаточное число частиц в области порядка квадрата длины волны. По-видимому, это верно и для нескольких накладывающихся волн, распространяющихся в разных направлениях: необходимая плотность частиц оказывается гораздо меньше, чем можно было бы ожидать, опираясь на опыт одномерного моделирования. Иными словами, хорошая статистика нужна не во всем фазовом пространстве, а лишь в проекциях распределения. (Разумеется, для некоторых проблем в замагниченной плазме типа циклотронных волн необходимая размерность проекции не столь мала, и для таких проблем может понадобиться намного больше частиц.) В этом заключается основная причина, по которой метод частиц может успешно конкурировать с многомерными власовскими кодами.

Необходима осторожность, но можно поддаться консервативной точке зрения и пропустить полезную задачу.

Наконец, некоторые замечания о стоимости и эффективности кода: из-за все возрастающего использования дорогих компьютерных систем дешевле нанять несколько человек, чем использовать электромагнитный код. В этом случае экономически целесообразно настроить код на машину, т. е. при помощи ассемблера аккуратно переписать отдельные части кода на родном машинном языке. Например, в ZOHAR программа, передвигающая x , v и собирающая p , J , была переведена на машинный язык в самом начале разработки кода, а затем это пришлось повторить при переносе кода на более современный компьютер. Эти усилия окупились за несколько месяцев. Но часто приходится менять граничные условия для частиц, и эта часть кода написана на ФОРТРАНе.

ЗАГРУЗКА И ИНЖЕКЦИЯ ЧАСТИЦ; ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ И ВНЕШНЯЯ ЦЕПЬ

16.1. ВВЕДЕНИЕ

Основной вопрос этой главы — размещение частиц в фазовом пространстве (x, v) при $t=0$ и создание или уничтожение частиц в процессе счета. При начальном размещении следует, исходя из заданных распределений по координатам $n_0(x)$ и скоростям $f_0(v)$, подобрать координаты и скорости частиц. Используемый для этого формальный процесс называется обращением интегральной плотности.

Другой вопрос — моделирование ограниченных систем с зарядами на стенках, полным током и элементами внешней цепи. В последнем случае необходимо одновременно решать уравнения Кирхгофа для цепи.

При изучении плазмы с очень большими пространственными размерами моделируется обычно небольшая ее часть длиной L (т. е. L_x на L_y и на L_z); при возможности используется периодичность по одной или нескольким координатам, причем в процессе счета число частиц сохраняется, поскольку на границах частицы либо отражаются, либо снова инжектируются. В подобных моделях для определения поведения системы очень важны начальные условия на функцию распределения $f(x, v, t=0)$. Следовательно, необходимо аккуратно загружать частицы при $t=0$. Ниже приведены некоторые шаги, часто используемые для обращения заданных плотностей $n_0(x)$ и $f_0(v)$ и вычисления координат и скоростей частиц $(x, v)_i$.

При изучении эволюции ограниченных систем, когда на границах частицы могут рождаться и уничтожаться, очень важны граничные условия, такие как поток частиц $\Gamma = v_{\text{normal}} f_0(x_{\text{wall}}, v, t)$. В некоторых случаях, начиная с системы пустой или заполненной частицами, можно через определенное время прийти к исходному положению. В других случаях, например при изучении устойчивости, может быть очень важным установление при $t=0$ хотя бы приближенного равновесия $f_0(x, v)$, так как инжектируя частицы в пустую систему, можно никогда не получить функцию распределения, близкую к исследуемой f_0 . Ниже представлены также некоторые методы формирования потоков на стенах.

16.2. ЗАГРУЗКА НЕОДНОРОДНЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ $f_0(v)$, $n_0(x)$; ОБРАЩЕНИЕ ИНТЕГРАЛЬНЫХ ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

В физических задачах начальные плотности $f_0(v)$ и $n_0(x)$ обычно задаются в простой форме, например $\exp(-v^2/2v_t^2)$ или

$1 + \psi \sin \ell x$. По этим функциям следует построить величины $(x, y)_i$. Ниже рассмотрены некоторые общие идеи о расположении частиц в фазовом пространстве.

Предположим, что нам нужно расположить частицы таким образом, чтобы в интервале от $x=a$ до $x=b$ функция распределения (или плотность) равнялась $d(x)$. Пусть при $a \leq x \leq b$ функция $d(x)$ задается или аналитически, или численно. Построим интегральную функцию распределения

$$D(x) \equiv \frac{\int_a^x d(x') dx'}{\int_a^b d(x') dx'}, \quad (16.1)$$

где

$$D(a)=0, \quad D(b)=1 \quad (16.2)$$

и

$$\frac{dD(x)}{dx} = d(x) \left[\int_a^b d(x') dx' \right]^{-1}. \quad (16.3)$$

Мы видим, что если $D(x_s)$ приравнять однородному распределению чисел R_s ($0 < R_s < 1$), то распределение x_s будет соответствовать $d(x_s)$. [Читатель может убедиться в этом, нарисовав графики $D(x)$ и $D'(x)$.] Возьмем, например,

$$d(x) = d_0(1 + \varepsilon x), \quad (16.4)$$

т. е.

$$D(x) = \frac{(x-a) + \frac{\varepsilon}{2}(x^2 - a^2)}{(b-a) + \frac{\varepsilon}{2}(b^2 - a^2)}. \quad (16.5)$$

Пусть R_s — это набор из 10 чисел от 0 до 1 ($S=0, \dots, 9$) типа 0,05, 0,15, ..., 0,95 (или случайный набор), тогда первая частица помещается в точку x_1 , получаемую при решении $D(x_1)=0,05$, вторая — в точку x_2 , получаемую при решении $D(x_2)=0,15$, и т. д. Можно решить эти квадратные уравнения [см. задачу 16.1] или, если $d(x)$ не интегрируется в явном виде, можно численно, небольшими шагами, интегрировать (16.1), пока не будет достигнуто значение 0,05, затем 0,15 и т. д. Спокойный старт в ES1 осуществляет подпрограмма INIT, использующая для создания нужного распределения по скорости быструю аппроксимацию метода интегрирования (см. § 3.7; см. также работу [Hockney, Eastwood, 1981]).

Задача

16.1. Подумайте, как определить ненужный корень уравнения $D(x_s) = R_s$. Покажите, что если решить это уравнение и найти $1/x_s$, то

$$x_s = a + \frac{R_s L (2 + \varepsilon L)}{1 + \sqrt{1 + 2\varepsilon L (2 + \varepsilon L)}},$$

где $L = b - a$. При такой форме записи нет деления на нуль при $\varepsilon = 0$ и точность повышается.

16.3. ЗАГРУЗКА ХОЛОДНОЙ ПЛАЗМЫ ИЛИ ХОЛОДНОГО ПУЧКА

Начнем с холодных систем — они достаточно просты, но и здесь есть некоторые тонкости. Предположим, что используется линейное взвешивание.

Построить холодную однородную плазму можно несколькими способами. Наиболее очевидный и простой — распределить электроны однородно, по несколько электронов в ячейке, а ионы представить в виде стационарного однородного фона. (Обсуждение нежелательных пиков плотности — эффект Кайзера Вильгельма — см. в § 5.4.) При использовании линейного (или более высокого порядка) взвешивания любое маленькое искажение расположения (или скорости) частиц приводит к возбуждению плазменных колебаний, а для взвешивания нулевого порядка (NGP) не возникает никаких полей до тех пор, пока искажение не станет большим и электрон не пересечет границу между ячейками. Следующий шаг заключается в учете ионов как частиц, что подразумевает задание q_i/m_i .

Холодный пучок, все частицы которого имеют одинаковую дрейфовую скорость v_0 (и, как правило, движущийся через неподвижный нейтрализующий фон), в периодической модели оказывается численно неустойчивым, т. е., как показано в § 8.12, из-за эффектов наложения холодный пучок нефизически разогревается до тех пор, пока отношение $\lambda_D/\Delta x$ не достигнет примерно 0,05 (при $\lambda_B/\Delta x \geq 0,3$), а затем система становится устойчивой, но шумящей. Следовательно, можно позволить неустойчивостям нарасти и постепенно стабилизироваться, а можно начать с небольшого разброса по скоростям ($v_i \ll v_0$, но $\lambda_D/\Delta x \geq 0,05$), и уровень шума при этом будет намного меньше.

16.4. ЗАГРУЗКА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МАКСВЕЛЛА

Ниже рассмотрены распределения Максвелла или Гаусса по \mathbf{v} вида $\exp(-v^2/2v_i^2)$. Подобные распределения появляются во многих областях физики и обычно являются устойчивыми. Следовательно, необходимы методы создания распределения Гаусса по координатам или скоростям. Полезную информацию

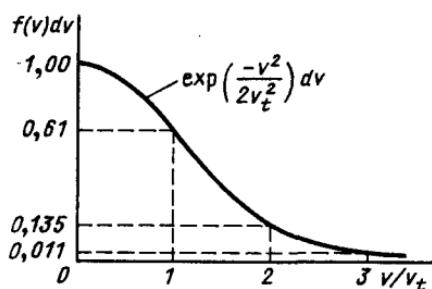


Рис. 16.1. Нормализованное тепловое распределение по скоростям

Рис. 16.2. Средняя скорость $\langle v \rangle$, полученная при помощи генератора случайных чисел (16.10) при $M=6$ для N частиц. Нужное значение равно нулю

общего характера по этому вопросу можно найти в книге [Hammersley, Handscomb, 1964].

Нормализованное тепловое распределение изображено на рис. 16.1. Большинство частиц имеют скорость $v < 3v_t$ (на самом деле 99% из них имеют скорость меньше $2v_t$), так что размещать частицы со скоростями, большими $3v_t$ или $4v_t$, приходится редко.

Получим набор (x_i, v_i) для пространственно однородной плазмы с изотропной гауссовой функцией распределения $f_0(v)$. Для того чтобы получить v_i , необходимо приравнять интегральную функцию распределения

$$R_s(0 \rightarrow 1) = F(v) = \frac{\int_0^\infty dv \exp\left(-\frac{v^2}{2v_t^2}\right)}{\int_0^\infty dv \exp\left(-\frac{v^2}{2v_t^2}\right)} \quad (16.6)$$

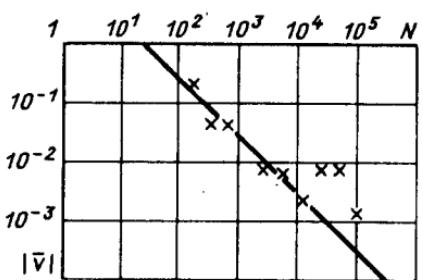
набору однородно распределенных чисел R_s , принимающих значения от 0 до 1.

Для одномерного теплового распределения интеграл от $f(v)$ явно не вычисляется, однако для создания «спокойного максвелловского распределения» с тепловой скоростью v_t интеграл можно вычислить численно (INIT в ES1, см. § 3.6).

Для двухмерного изотропного распределения [имеются две скорости v_x , v_y или скорость $v = (v_x^2 + v_y^2)^{1/2}$ и угол $\theta = \arctg v_y/v_x$] дифференциал $d\mathbf{v} = 2\pi v dv$, т. е. интегралы вычисляются. Скорости v выражаются через R_s (с заменой R_s на $1 - R_s$):

$$v_s = v_t \sqrt{-2 \ln R_s}. \quad (16.7)$$

Для выбора значений θ в диапазоне от 0 до 2π используется другой однородный набор чисел R_θ , причем $\theta_\theta = 2\pi R_\theta$. Можно также использовать метод Бокса и Мюллера [Hammersley,



Handscomb, 1964], в котором величина $\sqrt{-2 \ln R_s}$ умножается на синус или косинус $2\pi R_g$ и получаются независимые распределения Гаусса по v_x и v_y . Вычисления синусов и косинусов можно избежать, применяя технику фон Неймана [Hammersley, Handscomb, 1964]; для создания однородного распределения по углам используются однородные наборы чисел R_1 , R_2 :

$$\cos \theta = \frac{R_1^2 - R_2^2}{R_1^2 + R_2^2}, \quad \sin \theta = \pm \frac{2R_1 R_2}{R_1^2 + R_2^2}, \quad (16.8)$$

причем пары с $R_1^2 + R_2^2 > 1$ отбрасываются, а знак $\sin \theta$ либо выбирается случайно, либо R_1 выбирается из интервала $(-1, 1)$.

Одна выборка имеет вид

$$v_{s, 9} = v_t \sqrt{-2 \ln R_s} \cos 2\pi R_9, \quad (16.9a)$$

а вторая с теми же R_s и R_9 — вид

$$v_{s, 9} = v_t \sqrt{-2 \ln R_s} \sin 2\pi R_9, \quad (16.9b)$$

Другой способ заключается в непосредственном использовании набора случайных чисел R_1 , R_2 , ..., R_M , лежащих в интервале от нуля до единицы; при этом величина

$$v_M = v_t \left(\sum_{i=1}^M R_i - \frac{M}{2} \right) \left(\frac{M}{12} \right)^{-1/2} \quad (16.10)$$

распределена нормально (по Максвеллу, по Гауссу) [Abromowitz, Stegun, 1964; Hammersley, Handscomb, 1964]. Этот метод также используется в INIT в ES1 для создания случайного распределения Максвелла с тепловой скоростью v_{t1} , при этом $M = 12$ ($v < v_{\max} = v_t \sqrt{3M} = 6v_t$). Метод проверил Нейл Марон [Neil Maron], который вычислил N скоростей с $N = 200$, 400 , ..., $102\,400$ (рис. 16.2); заметим, что простой результат для $\langle v \rangle$ (эта величина должна быть равной нулю, а оказывается примерно равной $30/N$) не уникален — величины $\langle v^2 \rangle$ и $\langle (v - \langle v \rangle)^2 \rangle = \langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2$ для любых N на несколько процентов отличаются от единицы. Теоретическая скорость $v_{\max} = v_t \sqrt{3M}$ ($4,24 v_t$ при $M = 6$) весьма маловероятна, и наблюдавшаяся v_{\max} оказалась намного меньше. Заметим, что при больших v/v_t функция $f(v)$ спадает быстрее, чем распределение Гаусса.

Пусть координаты частиц, скорости которых были найдены выше, выбираются так, чтобы плазма была однородной в x -пространстве. Если выбранные v_i в каком-либо смысле упорядочены, то соответствующие x_i следует размешать. Можно выбрать координаты $(0 < x_i < L)$ частиц, движущихся со скоростями, описываемыми формулами (16.9) или (16.10) и равными $L R_x$ (R_x — случайная величина); можно также исполь-

зовать числа с обращенными разрядами, описанные в связи со спокойными стартами в следующем параграфе.

Разумеется, величины R_s , R_g и R_x должны быть нескорелированными. Использование генераторов случайных чисел для вычисления R приводит к нежелательной группировке частиц (т. е. к корреляции) в пространстве x , v_x , v_y .

Описанные выше методы довольно грубы, и их можно модифицировать. Наши методы не позволяют распределять частицы по x и v таким образом, чтобы возникла дебаевская экранировка,—она появится после того, как программа некоторое время поработает (примерно от $\tau_p/4$ до $\tau_p/2$). После использования случайных R следует скорректировать низшие моменты распределения. В работе [Morse, Nielson, 1971] частицы в каждой ячейке размещались так, чтобы их суммарный импульс равнялся нужному значению, например нулю в максвелловском случае. Можно пойти дальше [Gitomer, 1971] и, используя средние по нескольким ячейкам, контролировать второй момент. Однако, даже если использованы эти и другие модификации, уровень шумов при моделировании $\langle E^2 \rangle / m v_i^2 \sim (N_c + N_d)^{-1}$, что обычно намного больше, чем в лабораторной плазме, так как $(N_c + N_d)_{\text{simul}} \ll N_{\text{Lab}}$, где N_c —число частиц в ячейке. Если исследуются слабые эффекты, в частности линейное начало неустойчивостей, необходимо использовать другие методы. Одним из них является описываемый ниже спокойный старт.

Задачи

16.2. Покажите, что если в числителе (16.6) интеграл берется от 0 до ∞ , то, хотя (16.7) изменяется, распределение скоростей остается прежним.

16.3. Разберитесь в деталях получения нескоррелированных величин v_x , v_y и v_z при помощи (16.6). При этом понадобятся три интеграла и (возможно) три набора R .

16.5. СПОКОЙНЫЕ СТАРТЫ: ГЛАДКАЯ ЗАГРУЗКА В x - v -ПРОСТРАНСТВЕ; ИСПОЛЬЗОВАНИЕ НАБОРОВ ЧИСЕЛ С ОБРАЩЕННЫМИ РАЗРЯДАМИ СО СМЕШАННЫМИ ОСНОВАНИЯМИ

Как отмечалось выше, использование обычных однородных случайных наборов чисел для вычисления (x , v)_i приводит к созданию компьютерной плазмы с сильно развитыми флуктуациями, уровень которых выше, чем для лабораторных условий,—для некоторых моделей такой уровень шума может быть приемлем, однако эти шумы могут помешать исследованию некоторых физических процессов. Кроме того, хотя на больших масштабах воспроизводятся нужные вариации плотности, на малых масштабах моменты распределения ведут себя плохо. При использовании однородных случайных последовательнос-

тей, например, функция Гаусса $f_0(v)$ для системы длиной L задается хорошо, однако на масштабах, меньших $L/20$, уже первые несколько моментов $f_0(v)$ заметно отличаются от нужных значений. Необходимо, следовательно, улучшить процедуру использования однородных случайных последовательностей, и это можно сделать различными способами. Ниже обсуждается приписываемый Байерсу метод [Byers, Grewal, 1970], который использует много пучков и называется спокойным стартом.

Как уже упоминалось в § 3.6 и 16.4, подобный подход используется в подпрограмме INIT в ES1. Рассмотрим детально отдельные шаги. Для создания нужной функции $f_0(v)$ распределение численно интегрируется и функция $F_0(v)$ приравнивается $(i+1/2)/N$ при $i=0, 1, \dots, N-1$. Для вычисления подходящих значений v_i в (16.6) полагается $R_s = (i+1/2)/N$. Если таким же образом выбирать $x_i = [(i+1/2)/N]L$, то локально распределение не будет гауссовым. Необходимо, следовательно, разбросать x_i так, чтобы до некоторого масштаба, равного, например, $L/20$, распределение было примерно гауссовым, т. е. следует найти более однородную последовательность, чем обычные случайные числа, причем она должна хорошо работать при небольших значениях N . В настоящее время хорошие результаты получены с использованием чисел с обращенными разрядами [Hammersley, Handscomb, 1964].

Пусть N частиц пронумерованы от $i=0$ до $N-1$ и распределены однородно по x , а по скоростям $v_i \equiv |v|$ имеется двухмерное изотропное распределение Максвелла. Величины v_i получаются из (16.6), если положить $R_i = [1 - (i+1/2)/N]$, при этом из (16.7) следует, что

$$v_{ri} = v_t \left[-2 \ln \frac{i+1/2}{N} \right]^{1/2}. \quad (16.11)$$

Величины x_i и ϑ_i вычисляются из соотношений

$$x_i = L_x R_{x,i}, \quad 0 \leq R_{x,i} < 1; \quad (16.12)$$

Таблица 16.1. Двоичные дроби с обращенными разрядами

Десятичное число	Двоичное число	$R_{x,i}$	
		Двоичная дробь	Десятичная дробь
0	0	0,0	0
1	1	0,1	1/2 = 0,5
2	10	0,01	1/4 = 0,25
3	11	0,11	3/4 = 0,75
4	100	0,001	1/8 = 0,125
5	101	0,101	5/8 = 0,625

$$g_i = 2\pi R_{g,i}, \quad 0 \leq R_{g,i} < 1, \quad (16.13)$$

т. е. числа R размешивают частицы по x и g . Пусть [Hammersley, Handscomb, 1964] $R_{x,i}$ находится в результате двоичного обращения разряда — двоичная дробь получается после зеркального отражения индекса в двоичной системе и превращения его в дробь, как показано в табл. 16.1. Углы в пространстве скоростей размешиваются при помощи троичного обращения, как показано в табл. 16.2. Хотя выбор N произведен, предлагалось выбирать $N=2^a 3^b$, что означает неполноту той или иной последовательности и, по-видимому, не приносит большого вреда.

Случайные числа, числа с обращенными разрядами, а также числа Фибоначчи проверялись с точки зрения однородности перемешивания [H. S. Au-Yeung, Y.-J. Chen, C. K. Birdsall, 1980, 1981]. При помощи метода Вика [J. Wick, 1979] оценивалась невозможность однородного заполнения пространства x, y, z N точками, причем x_i выбирались однородно, а y_i — с перемешиванием, случайное перемешивание дало результат, пропорциональный $1/\sqrt{N}$, а в двух других случаях результат оказался гораздо лучше — $3/N$. Числа с обращенными разрядами и числа Фибоначчи гораздо лучше, чем случайные числа, воспроизводили первые три момента функции распределения Гаусса $f(v)$ на малых масштабах по x . Все три способа сравнивались как аналитически, при помощи графов, так и численно [Denavit, Walsh, 1981]; в этой работе можно найти дополнительные ссылки.

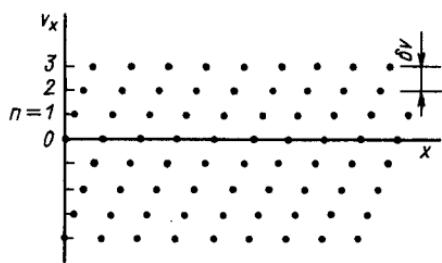
16.6 СПОКОЙНЫЙ СТАРТ: МНОГОПУЧКОВЫЕ И КОЛЬЦЕВЫЕ НЕУСТОЙЧИВОСТИ И ИХ НАСЫЩЕНИЕ; ВОЗВРАТ

Для примера создадим $1d1v$ -распределение Максвелла при помощи M пучков, состоящих из N частиц каждый ($M, N \gg 1$) и однородно расположенных на расстоянии δv друг от друга ($v=0, \pm \delta v, \pm 2\delta v, \dots, \sim 3v_t$), причем как масса, так и заряд уменьшается по закону

Таблица 16.2. Троичные дроби с обращенными разрядами

Десятичное число	Троичное число	$R_{g,i}$	
		Троичная дробь	Десятичная дробь
0	0	0,0	0
1	1	0,1	$1/3 = 0,3333$
2	2	0,2	$2/3 = 0,6666$
3	10	0,01	$1/9 = 0,1111$
4	11	0,11	$4/9 = 0,4444$
5	12	0,21	$7/9 = 0,7777$

Рис. 16.3. Упорядоченное фазовое пространство — торговая марка спокойного старта. Для гауссова распределения по скоростям величины q и m спадают как $\exp(-v^2/2v_i^2)$, а отношение q/m остается постоянным для всех частиц



$$q(v) = q(n) = q(0) \exp\left(-\frac{v^2}{2v_i^2}\right) = q(0) \exp(-\alpha n^2), \quad (16.14)$$

а отношение q/m поддерживается одинаковым для всех частиц. При однородном пространственном распределении фазовое пространство выглядит так, как изображено на рис. 16.3. Система упорядочена, флуктуаций нет (по крайней мере, на низких частотах и больших длинах волн). Таким образом, в системе можно возбудить волны с амплитудой намного меньшей, чем уровень флуктуаций при случайной загрузке. Можно например, наблюдать затухание Ландау на протяжении многих десятков периодов [Byers, 1970], что почти невозможно при случайной загрузке, если не использовать огромного числа частиц.

Существуют некоторые сложности, которые могут помешать использованию загрузки такого типа несмотря на всю ее привлекательность. Предположим, что при $t=0$ специально возбуждается волна малой амплитуды длиной λ . Существует время возврата $\tau_r = \lambda/\delta v$, за которое $n+1$ -й пучок проскальзывает мимо n -го пучка на расстояние $\lambda = 2\pi/\kappa$, и система восстанавливается. В момент τ_r наблюдался скачок величины E^2 по сравнению со значением E^2 при $t=0$ [Byers, 1970]; впоследствии наблюдаются спад и новые скачки. Эти скачки изображены на рис. 16.4 из работы [Denavit, 1980]. Наблюдающийся после момента τ_r экспоненциальный рост приводит к установлению уровня тепловых флуктуаций, который был бы при чисто случайному старте, и насыщается, когда тепловой разброс скорости пучка достигает δv . Это физический рост, связанный с многопучковой неустойчивостью (см. ниже), возникающей для многих гармоник исходной волны (если ограничиться основной гармоникой, то инкремент нарастания соответствует вычисленному [Denavit]). Выбором достаточно больших λ и малых δv можно сделать время возврата τ_r большим. Предположим, что мы хотим увидеть 10 периодов колебаний ($\text{Re}\omega \approx \omega_p$) и соответствующее затухание ($\text{Im}\omega = \gamma_{\text{Landau}}$) за время $t=t_1$. Пусть имеется $N=60$ пучков в области $\pm 3v_i$ (т. е. $v_i/\delta v = 10$), тогда необходимо, чтобы $\lambda > 2\pi\lambda_D$ или $\kappa\lambda_D < 1$, что нас и интересует.

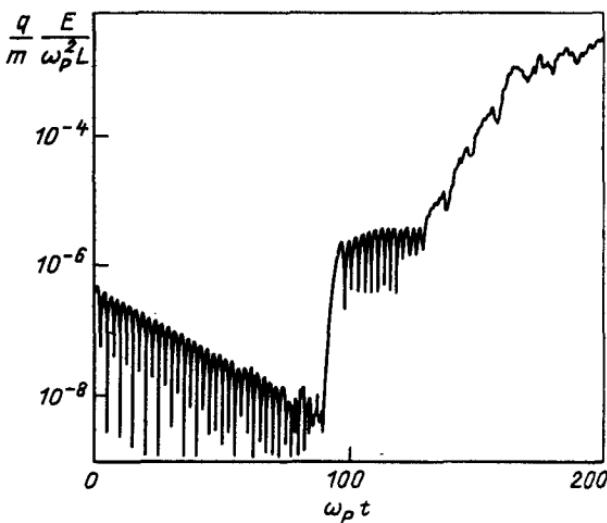


Рис. 16.4. Эволюция электрического поля при затухании Ландау электронных колебаний в случае дискретных пучков с одинаковыми начальными скоростными интервалами $\delta v = v_i/6$. Колебания возбуждаются при $\lambda_D = 0,377$. Оценка времени возврата дает $t_2 = 2\pi/\lambda_D = 100/\omega_p$, что очень близко к наблюдаемому (L — длина системы). (Из работы [Denavit, 1980])

Вторая проблема заключается в том, что из-за взаимодействия между пучками почти любая система пучков физически неустойчива. Мы уже хорошо знакомы с двухпучковой неустойчивостью — тот же механизм действует и в случае многих пучков, т. е. из-за ошибок округления система в целом оказывается неустойчивой. Этот результат, предсказанный Доусоном [Dawson, 1960], впоследствии многими наблюдался [Denavit, 1972, 1974].

Особенно аккуратно применение спокойного старта в рамках моделирования распределения Максвелла (считающегося всегда устойчивым!) исследовано в работе [Gitomer, Adam, 1976]. Для равноудаленных по скорости пучков наибольшая активность развивается вблизи $v=0$ (у этих пучков наибольший заряд). Энергия поля растет экспоненциально с небольшим инкрементом $\gamma \approx 0,05\omega_p$ (рис. 16.5). Насыщение происходит на уровне $\epsilon_0 \langle E^2 \rangle / n m v_i^2 \approx 0,0005$ — это ниже теоретического уровня тепловых флуктуаций (пропорциональных $1/N_p$), который при чисто случайном начальном распределении Максвелла составляет 0,003. Старт при этом действительно спокойный — примерно на 20 порядков (200 дБ) ниже теплового уровня. Таким образом, так же как и в случае нефизической неустойчивости в модели холодного пучка или в термической модели со слишком малым отношением $\lambda_D/\Delta x$, развитие физической неустойчивости стабилизируется вблизи некоторой формы теплового равн-

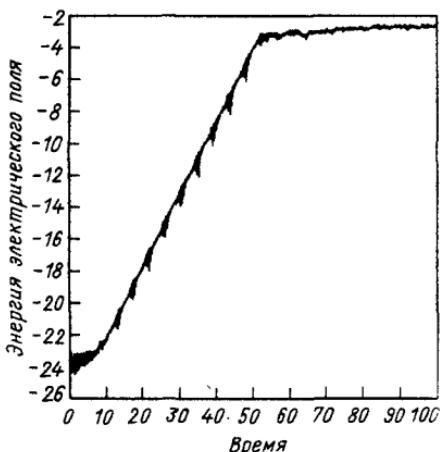
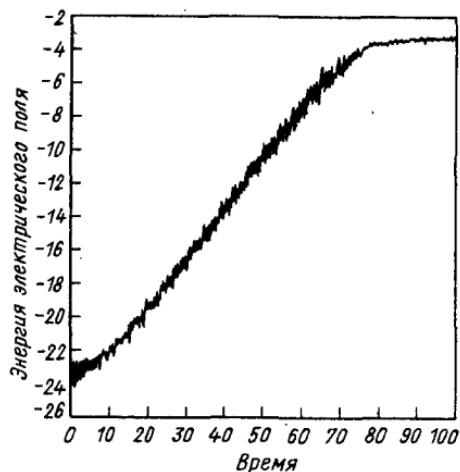


Рис. 16.5. Зависимость логарифма энергии электрического поля (нормализованной на полную начальную энергию) от времени для равноудаленных при $t=0$ пучков

Рис. 16.6. Рост энергии поля для распределения Максвелла с пучками одинакового веса

весия, однако флюктуации при этом могут быть как больше, так и меньше тепловых.

Второй подход состоит в использовании многих одинаковых пучков, которые для создания распределения Гаусса неравномерно распределены по v . Для всех частиц q и m одинаковы. Расположение по скорости получается при помощи интегральной функции распределения, причем минимальное удаление получается при $v=0$, а максимальное — при больших v (скажем, $3v_t$). Поскольку теперь пучки распределены неравномерно, можно ожидать, что обсуждавшиеся выше скачки не возникнут. Тем не менее многопучковая неустойчивость по-прежнему существует. Этот случай также моделировался в работе [Gitomer, Adam, 1976]. Теперь сильнее всего взаимодействуют пучки с максимальным удалением по скорости, лежащие на хвосте распределения. Энергия поля растет экспоненциально с небольшим инкрементом, и насыщение происходит на уровне 0,002 — немного меньшем, чем упомянутый выше тепловой уровень 0,003 (рис. 16.6).

В приложениях можно использовать любую из многопучковых моделей. Если представляют интерес взаимодействия на хвосте ($v_{\text{phase}} \gg v_t$), то лучше использовать первую модель с постоянным δv . Если же представляют интерес случай $v_{\text{phase}} \ll v_t$, то рекомендуется модель с неравномерным расположением пучков. Подобные исследования обычно оказываются успешными, если при этом инкременты неустойчивостей $\gamma > \gamma_{\text{many beams}}$, а $\text{Re}\omega$ существенно отличается от характерной частоты

многопучковых неустойчивостей — последнее требование позволяет разделить эффекты при помощи временного Фурье-анализа. Если есть сомнения насчет использования разных q и t , то следует использовать модель с постоянными q и t .

Многопучковую неустойчивость можно рассматривать как неустойчивость пар пучков — при равномерном расположении пучков максимальный инкремент определяется взаимодействием пар при $v=0$, а при постоянной массе — взаимодействием самой быстрой пары. Следовательно, для подавления неустойчивости можно добавить тепловой разброс к какой-либо из этих пар (или даже ко всем пучкам). В работах [Denavit, Krieg, 1971, 1980], в которых для моделирования двухпучковой неустойчивости с тепловым разбросом использовались 100 пучков одинаковой массы, обнаружено, что введение разброса скоростей двух самых быстрых пучков приводит к замедлению раскачки нежелательных многопучковых колебаний, и, по-видимому, инкремент неустойчивости в этом случае определяется следующей парой с меньшим δv . Когда в той же модели использовались 1600 пучков без разброса, никаких фиктивных колебаний в процессе счета не возникало. Чен [Chen] повторила это исследование для распределения Максвелла и пучков одинакового веса и обнаружила, что разогрев последнего пучка приводит только к небольшому повышению начальной энергии поля (по сравнению с рис. 16.6) и несколько более раннему насыщению неустойчивости, а при добавлении $v \approx \delta v$ ко всем пучкам результаты оказались похожими. Она также показала, что в периодической модели раскачка наиболее быстрых пучков происходит даже тогда, когда на каждый пучок приходится всего одна частица; тем не менее при использовании 16 384 частиц инкремент у нее составлял $(128/16\,384)^{1/2} \approx 1/10$ инкремента Житомера и Адама (см. рис. 16.6). При наложении возмущения конечной амплитуды наблюдалось также затухание Ландау с последующими скачками, которые, однако, по величине были меньше, чем изображенные на рис. 16.4.

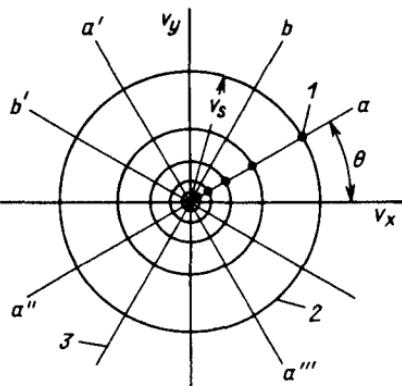
Денавит [Denavit, 1972] описал подход, основанный на комбинации методов крупных частиц и функции распределения, в котором после каждого N_s шагов по времени проводится реконструкция или сглаживание. Было также показано [Matsuda, Crawford, 1975], что при $N_s \leq 16$ этот метод подавляет многопучковую неустойчивость (с равномерно распределенными пучками); при этом получаются отличные энергетические спектры и затухание Ландау вплоть до $\lambda_D \approx 0,5$. Сглаживание не подавляет скачки, связанные с возвратом (см. рис. 16.4), однако при моделировании процессов с большими или малыми амплитудами никаких проблем не возникло.

Идею спокойного старта можно применять и к другим распределениям. При моделировании неустойчивости Дори —

Рис. 16.7. Распределенные по Гауссу кольца (2) и однородно распределенные спицы (3) образуют двухмерное ($2v$) распределение Максвелла по скоростям (1). Для обеспечения равенства нулю полной скорости можно одновременно располагать частицы в точках a и a'' или a , a' , a'' , a'''

Геста — Харриса в $2d2v$ Бедсел и Фасс [Birdsall, Fuss, 1969] устанавливали распределение замагниченных ионов при помощи случайных чисел в виде холодного кольца в пространстве скоростей; обнаруженный закон роста (пропорционально $t^{1/2}$) обусловлен, по-видимому, стохастическими процессами. Затем они использовали процедуру спокойного старта с вполне упорядоченным кольцевым распределением [Byers, Grewal, 1970], в которой для каждого λ 64 одинаковые спицы располагались по кругу. Эти вычисления позволили проследить ожидавшийся экспоненциальный рост для многих мод на огромном интервале потенциальных энергий (10^{24} , 250 дБ), измерить комплексную частоту ω , которая совпала с точностью меньше 1% с теоретической (при наличии шумов инкременты уменьшались), и наблюдать больший, чем при случайном и шумном стартах, уровень насыщения (E^2)_{max}.

Рассмотрим снова загрузку двухмерного (v_x и v_y) изотропного, не зависящего от $\theta = \arctg(v_y/v_x)$ распределения Гаусса по скоростям. Выберем теперь однородное по углу θ распределение в виде равномерно распределенных в пространстве v_x , v_y спиц и колец (рис. 16.7). Азимуты спиц распределены по 2π однородно, а радиусы колец вычисляются при помощи интегральной функции распределения (16.6) или (16.11) и однородного набора чисел R_s . Ким, Отани и Коэн [Kim, Otani, Cohen, 1980] исследовали устойчивость двухмерной максвелловской замагниченной плазмы при таком способе загрузки. Для максвелловского распределения по скоростям, составленного из N_{v_\perp} колец и N_{v_3} спиц (равнораспределенных по гирофазе $\theta = \arctg v_y/v_x$), т. е. всего из $N = N_{v_\perp} N_{v_3}$ частиц, они получили и решили дисперсионное уравнение для электростатических мод ($kB = 0$). В отличие от многопучковой незамагниченной максвелловской модели (которая всегда неустойчива) в магнитном поле распределение, составленное из большого числа спиц и колец, может быть устойчивым. Оказалось, что влияние спиц на дисперсионное соотношение несущественно, если



$$N_{v_3} > 2 \left(\frac{k v_\perp}{\omega_c} \right)_{\max} \approx 6 \frac{\epsilon_{\max} v_\perp}{\omega_c}, \quad (16.15)$$

где $v_{\perp \max}$ выбирается равным $3v_i$, а κ_{\max} — максимальное удерживаемое значение κ_{\perp} . Если неравенство (16.15) выполнено, то распределение по скоростям $f(v_{\perp})$ выглядит составленным из одних колец, в этом случае Ким и Отани определили границу устойчивости:

$$N_{v_{\perp}} > \frac{1}{3} \left(\frac{\omega_p}{\omega_c} \right)^2. \quad (16.16)$$

На пороге неустойчивости параметры приблизительно равны

$$\begin{aligned} \frac{\omega}{\kappa_{\perp} v_t} &\approx \frac{1}{3}, & v_{\text{phas}} &\approx \frac{v_t}{3}, & \frac{\kappa_{\perp} v_{\perp}}{\omega_c} &\approx \frac{2}{3} \left(\frac{\omega_p}{\omega_c} \right)^2, \\ \frac{\omega}{\omega_c} &\approx \frac{2}{9} \left(\frac{\omega_c}{\omega_p} \right)^2. \end{aligned} \quad (16.17)$$

Если частицами являются электроны и изучаются электронные моды Бернштейна, то отношение $(\omega_p/\omega_c)^2$ вычисляется для электронов; если же исследуются ионные моды Бернштейна, то $(\omega_p/\omega_c)^2$ следует заменить на $(\omega_{pi}/\omega_{ci})^2/(1+(\omega_{pe}/\omega_{ce})^2)$. Изучая условия устойчивости для достаточно большого числа спиц и колец [$N > 3(\kappa_{\max} v_t / \omega_c)(\omega_p / \omega_c)^2$], Коэн обнаружил, что как в случае пространственного перемешивания, так и в периодическом случае получается устойчивый спокойный старт, что очень важно при исследовании дрейфовой циклотронной неустойчивости. Отметим, что в типичных задачах магнитного удержания плазмы N_{\min} далеко не мало: $\kappa_{\max} v_t / \omega_c \approx 30$, $(\omega_p / \omega_c)^2 \approx 1000$.

Следует отметить, что при загрузке одной частицы на пучок или кольцо и одной спицами на кольцо описанный в § 16.6 подход, использующий обращенные числа со смешанными основаниями, работает очень хорошо.

16.7. ЗАГРУЗКА ЗАМАГНИЧЕННОЙ ПЛАЗМЫ С ЗАДАННЫМ ПРОСТРАНСТВЕННЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ ВЕДУЩИХ ЦЕНТРОВ $n_0(x_{gc})$

Здесь рассмотрен еще один пример загрузки неоднородной плазмы.

Предположим, что нам нужно создать распределение ведущих центров $n_{gc}(x_{gc})$, изображенное на рис. 16.8, а. Пусть плазма однородна и ведущие центры можно загружать рядами (рис. 16.8, б). Для каждого ведущего центра (или для группы ВЦ) необходимо создать нужное распределение по скоростям, т. е. для ионов с распределением $f(v_{\perp}) = f(v_{\perp}, \vartheta)$ координаты частицы x и v определяются выражениями (рис. 16.9)

$$x = x_{gc} - a_i \sin \vartheta; \quad (16.18)$$

$$y = y_{gc} + a_i \cos \vartheta; \quad (16.19)$$

Рис. 16.8. Нужная плотность ведущих центров (*a*) и расположение ведущих центров (*b*), приводящее к однородному по *y* распределению (*a*)

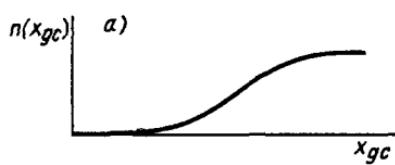
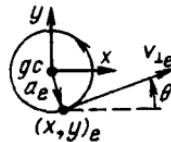
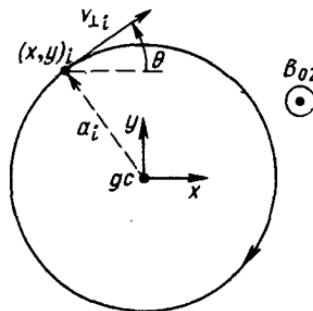
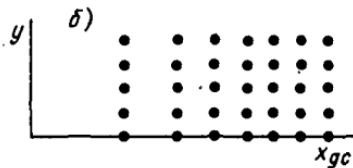


Рис. 16.9. Расположение ионов и электронов (*x*, *y*) и ведущего центра (*gc*)



$$v_x = v_{\perp} \cos \theta; \quad (16.20)$$

$$v_y = v_{\perp} \sin \theta. \quad (16.21)$$

Здесь a_i — ионный гирорадиус $|v_{\perp}/\omega_{ci}|$, а $\omega_{ci} = (q/m)_i B_{0z}$. Для электронов следует заменить a_i на $-a_e$.

Теория предсказывает плотность частиц $n_{\text{part}}(x)$, нам нужно загружать n_{gc} , причем $n_{gc}(x_{gc}) \neq n_{\text{part}}(x)$; поэтому необходимо установить связь между этими двумя плотностями. Пусть имеется максвелловское распределение ионов по скоростям с распределением ведущих центров вида

$$n_{gc}(x_{gc}) = 1 + \Delta_i \cos \kappa_0 x_{gc}, \quad (16.22)$$

где Δ_i — заданный множитель, а

$$x_{gc} = x + \frac{v_y}{\omega_{ci}}. \quad (16.23)$$

Если пренебречь зависимостью от v_z , то плотность ионов равна

$$\begin{aligned} n_i &= \int f(x, v) dv = \int F(v) n_{gc}(x_{gc}) dv = \\ &= \int F_{\perp}(v_{\perp}) n_{gc}\left(x + \frac{v_y}{\omega_{ci}}\right) dv_x dv_y. \end{aligned} \quad (16.24)$$

Электроны считаются холодными, и в силу зарядовой нейтральности их плотность равна плотности ионов

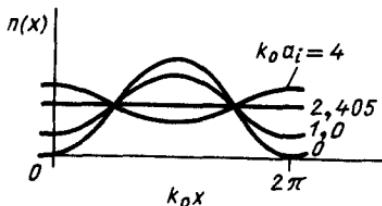
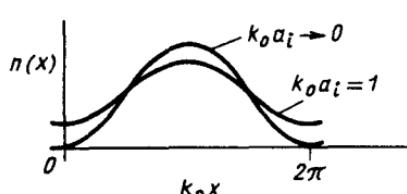
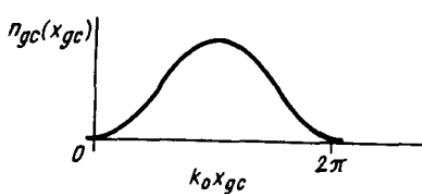
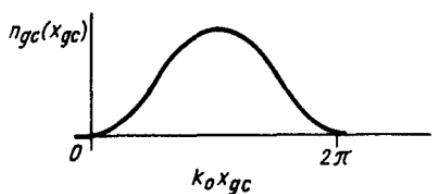


Рис. 16.10. Изменение плотности ведущих центров ($\Delta_i = -1$) и плотности частиц для распределенных по Максвеллу ионов

Рис. 16.11. То же, что на рис. 16.12, но в пространстве скоростей распределение ионов имеет вид холодного кольца. При $k_0 a_i > 2,405$ зависимость $n(x)$ изменяется по сравнению с $n_{gc}(x_{gc})$

$$n_i(x) = n_e(x) = 1 + \Delta_e \cos k_0 x, \quad (16.25)$$

откуда следует, что

$$\Delta_e = \Delta_i \exp\left(-\frac{k_0^2 v_{ii}^2}{2\omega_{ci}^2}\right). \quad (16.26)$$

Следовательно, загружать ионные ведущие центры следует при помощи (16.22), электроны же — при помощи (16.25), а Δ_e и Δ_i связаны соотношением (16.26). При $\Delta_i = -1$, n и n_{gc} изображены на рис. 16.10.

Пусть теперь функция распределения ионов равна

$$F_\perp(v_\perp) 2\pi v_\perp dv_\perp = \frac{1}{2\pi v_{\perp 0}} \delta(v_\perp - v_{\perp 0}) 2\pi v_\perp dv_\perp. \quad (16.27)$$

В этом случае

$$n_i = \int f(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = \int F_z(v_z) \frac{1}{2\pi v_{\perp 0}} \delta(v_\perp - v_{\perp 0}) 2\pi v_\perp dv_\perp dv_z, \quad (16.28)$$

что для холодных электронов в предположении зарядовой нейтрализации приводит к соотношению

$$\Delta_e = \Delta_i \int_{-v_0}^{v_0} dv_y \frac{\exp(i k_0 v_y / \omega_{ci})}{\pi(v_{\perp 0}^2 - v_y^2)^{1/2}} = \Delta_i J_0\left(\frac{k_0 v_{\perp 0}}{\omega_{ci}}\right). \quad (16.29)$$

Для случая $\Delta_i = -1$ пространственное распределение изображено на рис. 16.11. Если величина $k_0 a_i$, изменяясь, проходит через

2,405 (первый нуль J_0), то зависимость плотности частиц от координат ослабляется, а затем наклон меняет знак.

Похожие результаты получены Нэту и др. [Naitou et al., 1980]—при помощи преобразования Фурье учитывались как градиенты плотности, так и температуры. Их инструкции по загрузке (именуемые «модифицированная загрузка ведущих центров» MGCL) совпадают с приведенными здесь. Никаких нежелательных потенциалов, связанных с разделением зарядов, при этом не возникает.

16.8. ИНЖЕКЦИЯ И ПОГЛОЩЕНИЕ ЧАСТИЦ НА ГРАНИЦАХ; ИЗЛУЧЕНИЕ ПОЛЕЙ, ИОНИЗАЦИЯ И ПЕРЕЗАРЯДКА

Часто приходится моделировать плазменные приборы со стенками на концах, где электроны, ионы или нейтральные частицы постоянно инжектируются или поглощаются. При исследовании небольшой, но активной части большей, но спокойной плазмы бывает полезно ввести разделяющую обе части плоскость, через которую спокойная часть плазмы эмитирует частицы с полумаксвелловским распределением и какая-то доля частиц возвращается обратно. Назовем такую модель продольно ограниченной плазмой. Для одномерной модели фазовое пространство показано на рис. 16.12.

Прибор может представлять собой термоионный преобразователь с одной горячей, эмитирующей электроны стенкой и с одной холодной, поглощающей стенкой, или Q -машину, в которой одна или две горячие поверхности эмитируют электроны и ионы, а плазма направляется (удерживается в поперечном направлении) сильным продольным магнитным полем. Разделение на активную и спокойную части можно использовать при исследовании большой системы с магнитным удержанием, например магнитную пробку можно отделить от остальной части системы. Другие примеры встречаются в астрофизике (ограниченная пространственным зарядом эмиссия нейтронной звезды) и в физике ионосферы (формирование двойных слоев).

Инжекцию частиц можно осуществить различными методами, которые обычно похожи на применяемые при начальной загрузке частиц. Например, на стенке может быть задано распределение по скоростям инжектируемых частиц или распределение потока частиц $v_x f(v_x) dv_x = \Gamma_x(v_x)$ в элементе dv_x в единицу времени, где ось x направлена нормально к стенке. Вычисляем теперь интегральную функцию распределения потока $F(v_x)$, интегрируя $v_x f(v_x) dv_x$ по v_x , приравниваем ее однородному набору чисел (случайных, с обращенными разрядами или каких-либо еще) и находим скорости v_x (нескоррелированные по порядку и индексам). Этот процесс прослежен на рис. 16.13. Скорости можно генерировать по мере необходимости.



Рис. 16.12. Возможные граничные условия на частицы в фазовом пространстве одномерной продольно ограниченной плазмы

Рис. 16.13. Функция распределения загружаемых частиц и распределение потока на эмитирующую стенку ($x=0$)

ности или записать в массив (скажем, сразу 1024) и использовать в процессе инжекции. Обычные физические или лабораторные параметры, такие как плотность тока или плотность числа частиц, переводятся в машинный параметр — число инжектируемых на одном шаге частиц. Эти частицы размещаются в активной моделируемой области в точках $x=Rv_x dt$, где $0 < R < 1$ — новое, свое для каждой частицы случайное число, что приводит к заполнению слоя от $x=0$ до $x=v_x \Delta t$. Ясно, что любой метод начальной загрузки частиц $f(v_x) dv_x$ можно приспособить для инжекции частиц, т. е. загрузки $v_x f(v_x) dv_x$. При инжекции, рождении и поглощении число активных частиц в системе изменяется, что должно быть предусмотрено в организации программы.

Поглощение частиц на стенках может означать связь с элементами внешней цепи, т. е. преобразование плазменного тока в ток внешней цепи. Например, когда электрон или ион пересекает стенку, он вычеркивается из списка активных частиц, а его заряд добавляется к заряду стенки. Полный заряд стенки зависит, кроме того, от внешней цепи, что обсуждается ниже.

Используется множество других способов работы с частицами на правой и левой границах плазмы. Например, в ZOHAR влет частиц контролируется выбором:

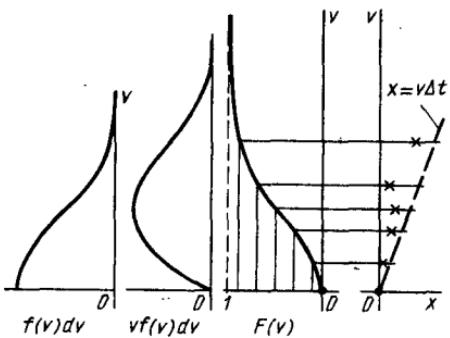
$I=0$ — не эмитировать;

$I=1$ — эмитировать;

$I=2$ — эмитировать, если при этом уменьшается $|\langle \tilde{\sigma}_0 \rangle|$, $\langle |\sigma_L| \rangle$.

Инжекция осуществляется с тепловыми или дрейфовыми скоростями, как описано выше. Выходящие частицы контролируются выбором:

$E=0$ — вычеркнуть;



$E=1$ — условно вычеркнуть или зеркально отразить;

$E=2$ — условно вычеркнуть или вернуть с новой тепловой скоростью.

Контроль условий осуществляется так:

$F=0$ — вернуть частицу, если при этом уменьшается $\langle |\sigma_0| \rangle$,
 $\langle |\sigma_L| \rangle$;

$F>0$ — вернуть часть F со случайным выбором. Например, для того чтобы послать все частицы назад с новыми тепловыми скоростями, следует положить $E=2$, $F=1$ — это используется для электронов при закрепленных ионах. Если плазма вытекает со скоростью, большей ионной тепловой скорости, то для ионов полагают $E=0$, а для электронов $E=1$ или 2 (условие $E=0$ для электронов ускоряет истечение плазмы, так как граница становится отрицательной). Для влетающей плазмы на границе полагают $I=1$, $E=0$ для ионов, а для получения только тепловых влетающих электронов $I=2$, $E=0$. В любом случае подсчитываются энергии частиц и все прочие представляющие интерес величины.

В идеале частицы с зарядом q вытягиваются полем со стенки (скажем, при $x=0$), если величина qE_x на поверхности «достаточно» положительна. Для ограниченного пространственным зарядом потока нормальное электрическое поле E_x должно равняться нулю. При вычислении полей, однако, E_x нельзя контролировать так, как, скажем, E_y : E_x скорее контролируется неявно, при помощи алгоритма инжекций. В простейшем случае вытягивание полем одного сорта частиц моделируется инжецией частицы заряда q в точке y на стенке, причем величина $q\sigma(x=0, y)$, где σ — поверхностная плотность заряда, должна быть положительной до и после инжекции. Частице можно придать небольшую скорость v_x и, для того чтобы получить гладкое распределение заряда, положить $x=Rv_x\Delta t$, где R — случайные числа из интервала $(0,1)$. В одномерном случае этого условия достаточно для определения числа частиц, которые следует инжектировать на одном временном шаге. Если полем вытягиваются электроны и ионы, то могут возникнуть проблемы. Представим, например, что E_x на стенке имеет высокочастотную компоненту, обусловленную электромагнитной волной в системе. На одних полупериодах эмитируются ионы. Если они не выталкиваются на стенку на других полупериодах, то происходит накопление ионов вблизи стенки и возникаетнейтрализующая их электронная эмиссия. В результате такого нарастания плотности плазмы величина $\omega_{pe}\Delta t$ может стать достаточно большой и разовьется неустойчивость.

В активной моделируемой области можно осуществить ионизацию. Необходимо знать вероятность рождения электронной пары быстрым электроном, а также энергию электрон-ионной пары и потерю энергии исходного электрона. Полный

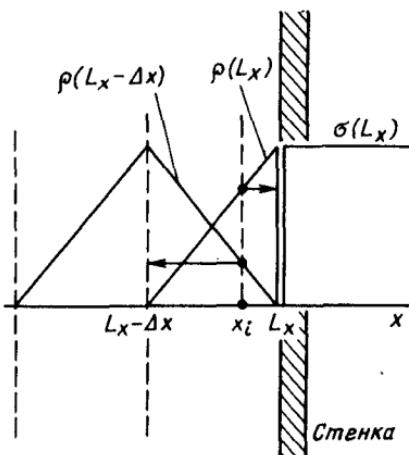
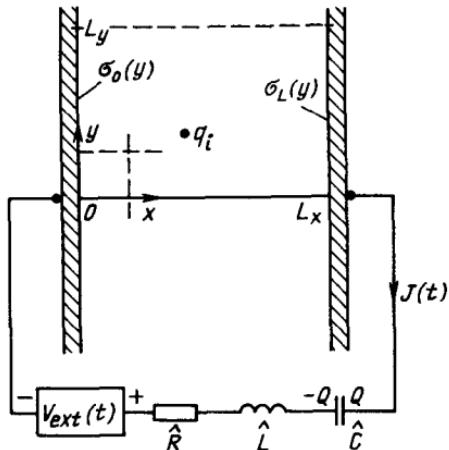


Рис. 16.14. Модель продольно ограниченной плазмы с внешней цепью. Система включает в себя частицы плазмы q_i , поверхностные заряды на левой и правой плоскостях σ_0 , σ_L и заряд внешнего конденсатора Q

Рис. 16.15. Частица в точке x_i , как показано стрелками, линейно взвешивается на ближайших сеточных плоскостях: если частица передвигается за L_x , т. е. $x_i > L_x$, то ее заряд добавляется к поверхностному заряду $\sigma(L_x)$

заряд не изменяется. В объеме можно осуществить и перезарядку — при этом быстрый ион ударяется о нейтральный атом, в результате чего получается быстрый нейтральный атом и медленный ион. Этот электрический процесс означает просто скачок ионной скорости. Для программирования нужна вероятность. Заряд при этом не изменяется. Этот процесс важен при изучении взаимодействия нейтральных пучков с плазмой. Возможность учета фотовозбуждения, фотоионизации и других процессов определяется изобретательностью исследователя.

16.9. ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ ДЛЯ ЧАСТИЦ И ПОЛЕЙ В ПРОДОЛЬНО ОГРАНИЧЕННЫХ СИСТЕМАХ; ПЛАЗМЕННЫЕ ПРИБОРЫ

Ниже исследуются детали моделей с плоскими приводящими границами при $x=0$, L_x . Сначала обрабатываются граничные условия для частиц и полей в одномерном электростатическом случае. Обобщение на двухмерный, периодический по y случай приведено в § 15.12. Граничные электроды могут излучать и поглощать электроны и ионы. К электродам могут быть подсоединенны элементы внешней цепи; ниже показано, как решать уравнения цепи одновременно с уравнениями движения.

Модель изображена на рис. 16.14 — основная ось направлена вдоль x , сеточный индекс j , а перпендикулярно ей — ось y , сеточный индекс k .

Рис. 16.16. Разность между плотностью тока плазмы J_p и плотностью тока внешней цепи равна величине $\partial\sigma/\partial t$ на проводящей границе

Границные условия для зарядов и полей в 1d. Новая физика здесь связана с плотностью поверхностного заряда на граничных электродах. Связь с полями на границе дается соотношениями

$$\left. \begin{aligned} \sigma(0) &= \sigma_0 = E_0; \\ \sigma(L_x) &= \sigma_L = -E_{N_g}. \end{aligned} \right\} \quad (16.30)$$

Алгоритм линейного взвешивания для частицы в последней ячейке, распределяющий заряд между $\rho(L_x)$ и $\rho(L_x - \Delta x)$, показан на рис. 16.15. Заряды, ушедшие за границу за один временной шаг ($x_i > L_x$), добавляются в $\sigma(L_x)$ (эта величина измеряется в единицах $\rho\Delta x$) и вычеркиваются из списка активных зарядов (возможны и другие алгоритмы). При вычислении, например, E в середине крайней ячейки используются активные частицы

$$\left. \begin{aligned} E_{1/2} &= \sigma_0 + \rho_0 \Delta x = -\frac{\Phi_1 - \Phi_0}{\Delta x}; \\ -E_{N_g - 1/2} &= \sigma_L + \rho_{L_x} \Delta x = \frac{\Phi_{N_g} - \Phi_{N_g - 1}}{\Delta x}. \end{aligned} \right\} \quad (16.31)$$

Для проверки этих результатов рассмотрим среду, равномерно заполненную от $x=0$ до x зарядами с плотностью ρ_{uniform} , тогда как в ρ_0 (и в ρ_{L_x}) включается ровно половина заряда первой (последней) ячейки, $\rho_0 = \rho_{\text{uniform}}/2$. Так как аналитически

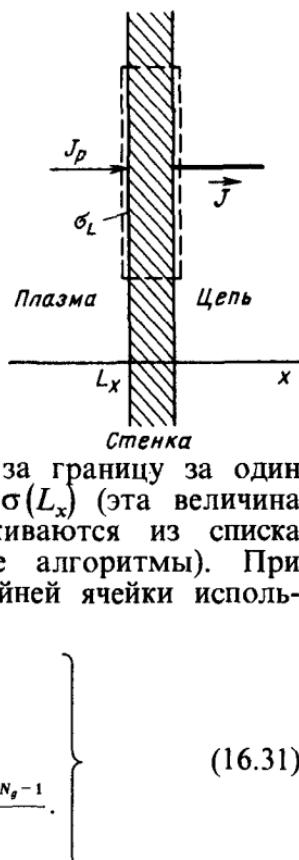
$$E(x) = E_0 + \rho_{\text{uniform}}x,$$

то численно

$$E_{1/2} = \sigma_0 + \rho_{\text{uniform}} \frac{\Delta x}{2},$$

что совпадает с $\sigma_0 + \rho_0 \Delta x$ в (16.31). Поскольку заряд собирается с половиной ячейки, ρ_0 может быть равна $1/2 \rho(0)$ и в таком виде ее используют при программировании [ρ_0 — это обозначение машинной переменной, которую не следует путать с физической переменной $\rho(0)$].

Интегральная форма закона Гаусса, примененная к изображенному на рис. 16.16 ящику, с учетом



$$J_p - J = \frac{\partial \sigma_L}{\partial t}, \quad (16.32)$$

где J_p и J — ток плазмы и ток внешней цепи соответственно, гарантирует сохранение заряда (здесь $J_p - \partial \sigma_L / \partial t = J_p + \partial E_{N_q} / \partial t$ — полный ток системы, в точности равный току цепи J). Плотность σ , которая нужна для вычисления полей и потенциалов, слагается из активных зарядов, покидающих плазму и размещаемых при $x=0$ и $x=L$, и зарядов, переносимых токами внешней цепи.

Уравнения поля для ρ , ϕ , E можно записать в конечно-разностном виде и решить обычными методами.

Аналогичное рассмотрение двухмерных зарядов и граничных условий проведено в § 15.12.

Связанные с граничными условиями неустойчивости типа отмеченной в работе [Swift, Ambrosiano, 1981] в разумных приложениях не возникают — такие неустойчивости развиваются, если пересекающие границу частицы снова инжектируются в систему через другую границу с большим $q\phi$ (например, периодические граничные условия для частиц с апериодическим потенциалом!). Это не та процедура, к которой можно притти из физических соображений, за исключением случая, когда внешняя цепь вкладывает энергию в плазму.

Решения вместе с внешней цепью. Поведение активных зарядов в пространстве между металлическими стенками определяется так же, как и в предыдущих моделях. Связанные с внешней цепью заряды на стенках описываются при помощи уравнений Кирхгофа.

Искусству моделирования одномерных электронных приборов посвящена книга [Birdsall, Bridges, 1966], в которой дан обзор успешно применявшейся с 30-х годов техники. В этой технике неявно предполагается, что: 1) существует только одномерное электростатическое поле E_x ; 2) нерелятивистское движение происходит только вдоль x ; 3) в приборе отношение диаметра к длине велико, поэтому зависимостью полей от y и z можно пренебречь; 4) краевыми эффектами, связанными с конечностью диаметра прибора, можно пренебречь; 5) токи J_x и $\partial E_x / \partial t$ существуют, но создаваемое этими токами магнитное поле не влияет на движение (пренебрегается пинч-эффектом, обусловленным как постоянным током, так и переменным); 6) диаметр прибора достаточно мал, т. е. в поперечном направлении волны распространяются практически мгновенно; 7) стенки эквипотенциальны, и поверхностные токи не играют роли.

Не все эти предположения независимы, они позволяют исследовать много интересных эффектов, но многие явления остаются в стороне. Описываемая здесь одномерная модель

плазменного прибора опирается на те же предположения, что и сформулированная выше модель электронного прибора.

Тем не менее двухмерная модель плазменного прибора (металлические электроды при $x=0$, L_x , периодичность по y с периодом L_y , нет зависимости от z), и в особенности ее электромагнитная версия, опирается на меньшее число предположений (в действительности ограничений). Поскольку улучшается учет токов и магнитных полей, могут возникнуть более интересные эффекты (например, распространение волн вдоль оси y). Для периодической модели, которая полностью описывается в области $0 \leq x \leq L_x$, $0 \leq y \leq L_y$, не нужна внешняя цепь — внешние (или обратные) токи, не зависящие от y , могут течь через прибор, создавая такое же изменение зарядов на стенах, какое создало бы однородное по y поле $E_x(t)$, не создающее, однако, разделения зарядов или магнитного поля. Такое же влияние оказывает добавление внешней цепи, которая приводит только к изменению зарядов на стенах (в дополнение к изменению, связанному с активными зарядами). Полная плотность тока, усредненная по y , равна

$$\hat{J}_x(x, t) \equiv \frac{1}{L_y} \int_0^{L_y} dy \left[J_x(x, y, t) + \frac{\partial E_x(x, y, t)}{\partial t} \right] - J_{\text{ext}}, \quad (16.33)$$

где знак J_{ext} выбран для удобства. Но эта плотность равна

$$\hat{J}_x(x, t) = \frac{1}{L_y} \int_0^{L_y} dy (\nabla \times \mathbf{H})_x = \frac{1}{L_y} \int_0^{L_y} dy \frac{\partial H_z}{\partial y}. \quad (16.34)$$

Поскольку H_z периодично по y , интеграл равен нулю и $\hat{J}_x = 0$. Интегрирование уравнения для $\hat{J}_x(x, t)$ по y дает

$$J_{\text{ext}} = J_{\text{ind}} - \frac{1}{L_y} \frac{dV}{dt}, \quad (16.35)$$

где

$$J_{\text{ind}} \equiv \frac{1}{L_x L_y} \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} dx dy J_x(x, y, t) \quad (16.36)$$

— понятие, используемое в электронных приборах [Birdsall, Bridges, 1966]. В (16.35) потенциал прибора равен интегралу E_x вдоль прибора и после усреднения по y имеет вид

$$V(t) = \frac{1}{L_y} \int_0^{L_y} dy \left[- \int_0^{L_x} dx E_x(x, y, t) \right], \quad (16.37)$$

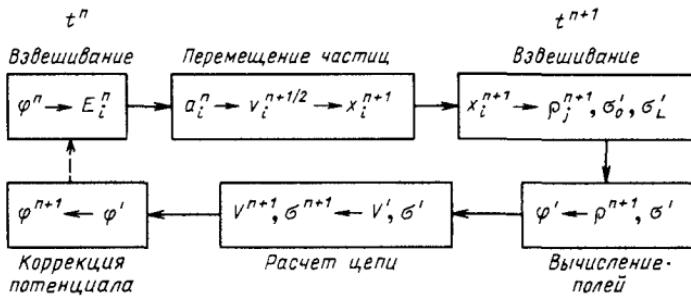


Рис. 16.17. Схема вычислений для RC -цепи. Штрихи означают моменты времени между t_n и t_{n+1}

причем $V(t) = \varphi(L_x, t) - \varphi(0, t)$. Заметим, что второй член в (16.35) равен $-\hat{C}_v dV/dt$, где $\hat{C}_v \equiv 1/L_x$ (емкость на единицу площади).

Предположения, заложенные в одномерную модель, где ток J_{ext} замыкается вне прибора (см. рис. 16.14), легко понять в рамках двухмерной модели. Внутри прибора существует поле H_z , но в соответствии с предположениями 1—6 радиальный размер (по y) системы мал и поэтому интеграл в (16.34) равен нулю и выполняются соотношения (16.35)—(16.37). Но величину $(\nabla \times \mathbf{H}) dS$ на пересекающей прибор поверхности S_1 можно представить в виде $(J_x + dE_x/dt) dy dt$, а на поверхности S_2 , пересекающей внешнюю цепь,— в виде $(-J_{\text{ext}}) dy dz$, тогда полный интеграл по $S_1 + S_2$ равен нулю (поскольку равен нулю интеграл по объему от ∇J_{total}), что эквивалентно $\hat{J}_x = 0$. Следовательно, выполняется соотношение (16.35), а в (16.36) и (16.37) не нужно усреднение.

Теперь мы готовы интегрировать систему по времени. Рассмотрим сначала простую внешнюю цепь, содержащую сопротивление, емкость и источник напряжения (см. рис. 16.14), но не содержащую индуктивности, $L=0$. Последовательность операций изображена на рис. 16.17. В момент времени t_n величины σ_0 и σ_L зависят от переноса заряда частицами и внешней цепью в предшествующие моменты времени. По мере передвижения частиц на новые места на $n+1$ -м временном уровне покидающие и входящие в систему частицы изменяют заряд на стенах и в результате устанавливаются промежуточные значения σ'_0 , σ'_L . Иными словами, в конце процесса перемещения и взвешивания частиц величины ρ , σ'_0 , σ'_L учитывают вклад всех частиц, но не учитывают изменений полей и заряда на стенах, связанных с током во внешней цепи. Решение уравнений для полей в этот момент времени дает промежуточные значения потенциалов φ'_j и полного напряжения прибора V'^{n+1} . Уравнение Кирхгофа для замкнутого контура является уравнением первого порядка для заряда конденсатора Q .

$$V = V_{\text{ext}} + \hat{R} \frac{dQ}{dt} + \frac{Q}{C}, \quad (16.38)$$

где учтено, что $J_{\text{ext}} = dQ/dt$. Полевые уравнения в системе линейны, поэтому выполняется принцип суперпозиции и можно сложить напряжение V'_{n+1} (обусловленное частицами) и напряжение, связанное с током во внешней цепи в интервале от t_n до t_{n+1} :

$$V_{n+1} = V'_{n+1} - \frac{Q_{n+1} - Q_n}{C_v}. \quad (16.39)$$

Уравнения (16.38) и (16.39) используются для перехода от Q_n к Q_{n+1} и вычисления V'_{n+1} . Второй член выглядит как $\Delta Q = J_{\text{ext}, n+1/2} \Delta t$. Уравнение (16.39) не центрально по времени, что обеспечивает устойчивость при любых временах затухания $\hat{R}\hat{C}$ и гарантирует, что при $\hat{R} \rightarrow 0$, $\hat{C} \rightarrow \infty$ $V_{n+1} = V_{\text{ext}, n+1}$. Следовательно, уравнение цепи, записанное в виде

$$V_{n+1} = V'_{n+1} - \frac{Q_{n+1} - Q_n}{C_v} = V_{\text{ext}, n+1} + \hat{R} \frac{Q_{n+1} - Q_n}{\Delta t} + \frac{Q_{n+1}}{\hat{C}} \quad (16.40)$$

(dQ/dt для устойчивости берется в момент $n+1/2$), следует решить относительно Q_{n+1} или ΔQ :

$$\Delta Q = \left(V'_{n+1} - V_{\text{ext}, n+1} - \frac{Q_n}{C} \right) \left(\frac{\hat{R}}{\Delta t} + \frac{1}{C_v} + \frac{1}{\hat{C}} \right)^{-1}. \quad (16.41)$$

Отметим, что при закорачивании емкости (при этом $\hat{C} \rightarrow \infty$) никаких проблем не возникает. Это уравнение определяет ΔQ и тем самым правильную величину напряжения на приборе V'_{n+1} . Заряд ΔQ прибавляется к σ'_0 и вычитается из σ'_L — полученные величины соответствуют теперь моменту времени t_{n+1} . Заряд ΔQ создает постоянное поле $\Delta E_x = -\Delta Q$, которое определяет поправку к внутренним потенциалам в момент t_{n+1} :

$$\varphi_j = \varphi'_j + \Delta Q X_j. \quad (16.42)$$

Поля получаются при помощи обычных пространственных разностей.

Если нужна корректировка продольной части E (в ЕМ-моделях), то корректирующий потенциал вычисляется, как в гл. 15. Этот шаг можно скомбинировать с поправкой (16.42).

При добавлении внешней индуктивности необходимо изменить последовательность операций (рис. 16.18). Теперь уравнения цепи оказываются второго порядка:

$$V_n = V_{\text{ext}, n} + \hat{R} J_n + \hat{L} \left(\frac{dJ}{dt} \right)_n + \frac{Q_n}{C}, \quad (16.43)$$

$$\left(\frac{dQ}{dt} \right)_{n+1/2} = J_{n+1/2}. \quad (16.44)$$

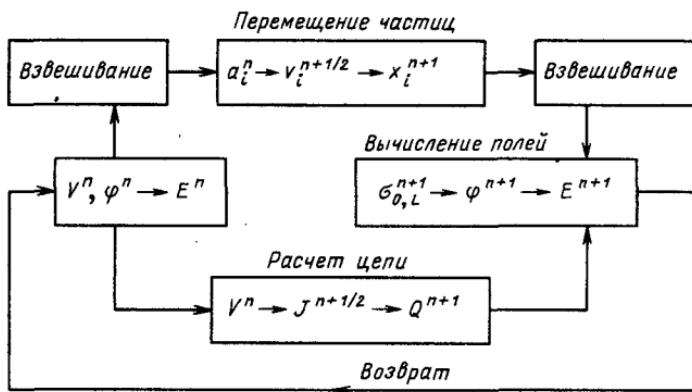


Рис. 16.18. Схема вычислений для RLC-цепи

Эта система используется для нахождения $J_{n+1/2}$ и тем самым Q_{n+1} . В качестве первого подхода построим

$$J_n = \frac{J_{n+1/2} + J_{n-1/2}}{2} \quad (16.45)$$

и

$$\left(\frac{dJ}{dt} \right)_n = \frac{J_{n+1/2} - J_{n-1/2}}{\Delta t}. \quad (16.46)$$

Здесь мы узнаем центральный по времени метод с перешагиванием второго порядка точности. Теперь можно вычислить новый ток

$$J_{n+1/2} = \left[V_n - V_{\text{ext},n} - \frac{Q_n}{C} + J_{n-1/2} \left(-\hat{R} + \frac{\hat{L}}{\Delta t} \right) \right] \left[\frac{\hat{R}}{2} + \frac{\hat{L}}{\Delta t} \right]^{-1} \quad (16.47)$$

и новый заряд конденсатора

$$Q_{n+1} = Q_n + J_{n+1/2} \Delta t. \quad (16.48)$$

Затем ΔQ добавляется к σ'_0 и вычитается из σ'_L . Наконец, при помощи $(\rho, \sigma_0, \sigma_L)$ в момент t_{n+1} вычисляются поля. Можно показать (см. задачи), что этот способ устойчив при $\Delta t \ll \hat{L}/\hat{R}$, $\hat{R}\hat{C}$ и $(\hat{L}\hat{C})^{1/2}$, т. е. он неприменим, если \hat{R} , \hat{L} или $\hat{C} \rightarrow 0$, или $\hat{R} \rightarrow \infty$ (разомкнутая цепь).

В качестве другого подхода запишем уравнение цепи (16.43) в момент $n+1$ (изменив соответствующим образом рис. 16.20) и используем (16.40). Затем построим представление второго порядка точности:

$$J_{n+1} = \frac{3J_{n+1/2} - J_{n-1/2}}{2} \quad (16.49)$$

и

$$\left(\frac{dJ}{dt}\right)_{n+1} = \frac{2(J_{n+1/2} - J_{n-1/2})}{\Delta t} - \frac{J_{n-1/2} - J_{n-3/2}}{\Delta t}. \quad (16.50)$$

Далее имеем

$$J_{n+1/2} = \left[V'_{n+1} - V_{\text{ext}, n+1} - \frac{Q_n}{\hat{C}} + \frac{\hat{L}}{\Delta t} (3J_{n-1/2} - J_{n-3/2}) + \frac{\hat{R}}{2} J_{n-1/2} \right] \times \\ \times \left[\frac{3}{2} \hat{R} + \frac{2\hat{L}}{\Delta t} + \Delta t \left(\frac{1}{\hat{C}_v} + \frac{1}{\hat{C}} \right) \right]^{-1}, \quad (16.51)$$

что используется для перехода от Q_n к Q_{n+1} и вычисления полей. В различных пределах этот метод устойчив, и, следовательно, можно ожидать, что он устойчив и при любых значениях \hat{R} , \hat{L} , \hat{C} и Δt (см. задачу 16.4).

Задачи

16.4. При помощи соотношений (16.49), (16.50) и (16.51) исследуйте устойчивость (16.43) и (16.44). Например, покажите, что если в (16.51) величина Q неизвестна и $Q_n = Qz^n$, $Q_{n+1} = Qz^{n+1}$, то устойчивость определяется нулями функции

$$P(z) = \left(\frac{1}{\hat{C}_v} + \frac{1}{\hat{C}} \right) z + \frac{\hat{R}}{\Delta t} \left[\frac{3}{2}(z-1) - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{z} \right) \right] + \frac{\hat{L}}{\Delta t^2} \left[2 \left(z - 2 - \frac{1}{z} \right) - \right. \\ \left. - 1 + \frac{2}{z} + \frac{1}{z^2} \right], \quad (16.52)$$

лежащими внутри единичного круга $|z|=1$. У этого кубического [а не квадратного, как можно было бы ожидать из квадратичных по Q выражений (16.43) и (16.44)] многочлена при $\hat{L} \neq 0$ есть один дополнительный сильно затухающий корень.

16.5. Следуя задаче 16.4, проанализируйте устойчивость (16.43) и (16.44) при помощи (16.45) – (16.47).

ЧАСТЬ IV

ПРИЛОЖЕНИЯ

A. ПОДПРОГРАММЫ БЫСТРОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФУРЬЕ

Комплексное периодическое дискретное преобразование Фурье.
Требуется вычислить дискретное преобразование Фурье (ДПФ)

$$\hat{x}(\hat{t}) = \sum_{t=0}^{N-1} x(t) e\left(\frac{nt}{N}\right) \quad (\text{A.1})$$

для $\hat{t}=0, 1, \dots, N-1$, где $e(x) \equiv \exp(2\pi i x)$. Последовательности x и \hat{x} комплексны. Если предположить, что комплексные экспоненты уже вычислены, то для непосредственного вычисления (A.1) при каждом \hat{t} требуется N комплексных умножений (по 6 арифметических операций) и $N-1$ комплексное сложение (по 2 арифметические операции). Итого для непосредственной обработки всей последовательности требуется $8N^2 + O(N)$ операций. Очевидные усовершенствования заключаются в использовании специальных значений, симметрии и периодичности экспоненты. Изобретательность и техника, быть может, позволят вам вычислить (A.1) так же быстро, как и хорошая программа БПФ, но опыт показывает, то из этого вряд ли что-нибудь получится. Если же вам все-таки это удалось, то скорее всего вы вновь изобрали алгоритм БПФ или какую-либо его часть.

Следуя обозначениям работы [Gentleman, Sande, 1966], мы обсудим форму БПФ, принадлежащую Сэнду и Тьюки, вместо формы Кули и Тьюки. Ограничимся также для начала простым случаем, когда N является степенью 2.

Для четных и нечетных \hat{t} сумма (A.1) вычисляется по-разному.

Для четных $\hat{t}=2\hat{\delta}$

$$\hat{x}(2\hat{\delta}) = \sum_{t=0}^{N-1} x(t) e\left(\frac{t\hat{\delta}}{N/2}\right) = \sum_{t=0}^{N/2-1} [x(t) + x(t+N/2)] e\left(\frac{t\hat{\delta}}{N/2}\right). \quad (\text{A.2})$$

Для нечетных $\hat{t} = 2\hat{b} + 1$

$$\hat{x}(2\hat{b}+1) = \sum_{t=0}^{N-1} x(t) e\left(\frac{2t}{N}\right) e\left(\frac{i\hat{b}}{N/2}\right) = \sum_{t=0}^{N/2-1} e\left(\frac{2t}{N}\right) [x(t) - x(t+N/2)] e \times \\ \times \left(\frac{2i\hat{b}}{N}\right). \quad (\text{A.3})$$

Заметим, что каждое из выражений (A.2) и (A.3) представляет собой прямое преобразование Фурье (ППФ) длиной $N/2$. Поскольку на вычисление ППФ длиной N уходит примерно N^2 операций, мы получили примерно двойной выигрыш (для больших N), заменив $8N^2 + O(N)$ операций на формирование двух последовательностей в квадратных скобках (A.2) и (A.3), на что уходит $O(N)$ операций, плюс два ППФ длиной $N/2$, на что уходит $2 \times 8(N/2)^2 + O(N)$ операций, или всего $4N^2 + O(N)$.

Групповыми свойствами экспоненты, которые позволяют осуществить эту редукцию, являются

$$e(x+y) = e(x)e(y); \quad (\text{A.4})$$

$$e(x+1) = e(x). \quad (\text{A.5})$$

Свойства такого типа настолько редки, что известно всего лишь несколько преобразований, для которых существуют высокоэффективные алгоритмы.

Следующим ключевым моментом является то, что, применяя тот же трюк к обоим ППФ длиной $N/2$ (A.2) и (A.3), мы можем опять получить примерно двойной выигрыш, и в результате останется четыре преобразования длиной $N/4$. Эту редукцию можно повторить $\lg_2 N$ раз, и в конце концов останется вычислить $N/2$ преобразований длиной 2. В этом суть алгоритма быстрого преобразования Фурье. Более аккуратный подсчет показывает, что число операций пропорционально $N \lg_2 N$. Кроме того, погрешность округления меньше, чем при непосредственном вычислении (A.1). Описание вычисления ППФ в терминах более коротких ППФ является примером рекурсивного определения алгоритма.

Прежде чем написать хорошую программу БПФ, остается решить некоторые проблемы. Одна из них — генерация комплексных экспонент в квадратных скобках в (A.3). Простой и быстрый путь заключается в запоминании большой таблицы синусов и косинусов. На это уходит большой объем памяти, чего можно избежать. Благодаря тому что в БПФ типа Сэнда аргументы у экспонент возникают в определенном порядке, существуют простые и эффективные способы вычисления, хотя их используют немногие. Синглтон [Singleton, 1967, 1969] генерировал все экспоненты при помощи многоуглового рекур-

сивного метода, который устроен так, чтобы не накапливались ошибки округления, и для которого нужна короткая таблица из $\lg_2 N_{\max}$ синусов, где N_{\max} — максимальная длина БПФ.

Другая проблема заключается в минимизации объема памяти, используемой при вычислении. Некоторые программы помимо последовательностей x и \hat{x} и некоторых таблиц синусов и косинусов используют $2N$ ячеек памяти. Обычно удобно записывать результат каждого из $\lg_2 N$ шагов в том же месте, что и x . Покажем теперь, как решается эта логистическая проблема.

В табл. А.1 записаны шаги БПФ длиной 8 и содержание памяти в каждый момент времени. Величины β_0 и β_4 вычисляются из x_0 и x_4 и записываются в те же места; с остальными величинами поступают аналогично. В соответствии с (А.2) и (А.3) теперь следует вычислить БПФ последовательностей $(\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3)$ и $(\beta_4, \dots, \beta_7)$. Это делается при помощи расщепления на 4 последовательности $(\gamma_0, \gamma_1), (\gamma_2, \gamma_3)$ и т. д., которые записываются на месте последовательностей β , и обычно вычисления осуществляются параллельно. БПФ этих последовательностей равны (δ_0, δ_1) и т. д. Величины δ являются элементами \hat{x} , но записаны они в другом порядке. Для приведения последовательности в порядок следует переставить местами пары δ — дополнительные массивы для этого не нужны.

Таблица А.1. Организация БПФ Сэнда и Тьюки

Начало	1-й уровень	2-й уровень	3-й уровень	Сортировка
x_0	$\beta_0 = x_0 + x_4$	$\gamma_0 = \beta_0 + \beta_2$	$\delta_0 = \gamma_0 + \gamma_1$	$\hat{x}_0 = \delta_0$
x_1	$\beta_1 = x_1 + x_5$	$\gamma_1 = \beta_1 + \beta_3$	$\delta_1 = \gamma_0 - \gamma_1$	$\hat{x}_1 = \delta_4$
x_2	$\beta_2 = x_2 + x_6$	$\gamma_2 = \beta_0 - \beta_2$	$\delta_2 = \gamma_2 + \gamma_3$	$\hat{x}_2 = \delta_2$
x_3	$\beta_3 = x_3 + x_7$	$\gamma_3 = i(\beta_1 - \beta_3)$	$\delta_3 = \gamma_2 - \gamma_3$	$\hat{x}_3 = \delta_6$
x_4	$\beta_4 = x_0 - x_4$	$\gamma_4 = \beta_4 + \beta_6$	$\delta_4 = \gamma_4 + \gamma_5$	$\hat{x}_4 = \delta_1$
x_5	$\beta_5 = e(1/8)(x_1 - x_5)$	$\gamma_5 = \beta_5 + \beta_7$	$\delta_5 = \gamma_4 - \gamma_5$	$\hat{x}_5 = \delta_5$
x_6	$\beta_6 = e(2/8)(x_2 - x_6)$	$\gamma_6 = \beta_4 - \beta_6$	$\delta_6 = \gamma_6 + \gamma_7$	$\hat{x}_6 = \delta_3$
x_7	$\beta_7 = e(3/8)(x_3 - x_7)$	$\gamma_7 = i(\beta_5 - \beta_7)$	$\delta_7 = \gamma_6 - \gamma_7$	$\hat{x}_7 = \delta_7$

$$\beta(a+2b+4\hat{c}) = e\left(\frac{\hat{c}(a+2b)}{8}\right) \sum_{c=0}^1 e\left(\frac{c\hat{c}}{2}\right) x(a+2b+4c);$$

$$\gamma(a+2\hat{b}+4\hat{c}) = e\left(\frac{ab}{4}\right) \sum_{b=0}^1 e\left(\frac{bb}{2}\right) \beta(a+2b+4\hat{c});$$

$$\delta(\hat{a}+2\hat{b}+4\hat{c}) = \sum_{a=0}^1 e\left(\frac{a\hat{a}}{2}\right) \gamma(a+2\hat{b}+4\hat{c});$$

$$\hat{x}(\hat{t}) = \hat{x}(\hat{c} + 2\hat{b} + 4\hat{a}) = \delta(\hat{a} + 2\hat{b} + 4\hat{c})$$

$\hat{a}, \hat{b}, \hat{c} = 0, 1$.

Преобразование сразу двух действительных последовательностей. В процессе моделирования обычно приходится преобразовывать действительные величины. Если при помощи подпрограммы CPFT комплексного БПФ преобразуется действительная последовательность, то сначала массив I заполнен нулями. Аналогично из-за эрмитовой симметрии

$$[\hat{x}(\hat{t})]^* = \hat{x}(-\hat{t}) = \hat{x}(N, \hat{t}), \quad (\text{A.6})$$

которая следует из (A.1), массивы преобразованных величин R и I содержат излишнюю информацию. Можно осуществить БПФ действительной последовательности, затратив примерно вдвое меньше памяти, чем при непосредственном применении CPFT [Cooley, Lewis, Welch, 1970], но этот алгоритм намного сложнее приводимой ниже подпрограммы RPFT2. Если нужно выполнить много преобразований, например при обработке строк или столбцов двухмерного массива, то время преобразования играет существенную роль, и их можно выполнять параллельно.

Пусть $z(t) = a(t) + ib(t)$, где a и b — действительные величины. Тогда преобразованные величины \hat{a} и \hat{b} можно выделить из \hat{z} при помощи соотношений

$$\hat{z}(t) = \hat{a}(t) + i\hat{b}(t); \quad (\text{A.7})$$

$$\hat{z}(N - \hat{t}) = [\hat{a}(\hat{t})]^* + i[\hat{b}(\hat{t})]^*, \quad (\text{A.8})$$

которые следуют из (A.6). Эти соотношения используются в RPFT2, где $\operatorname{Re}\hat{a}$ ($\operatorname{Im}\hat{a}$) записывается в нижней (верхней) части массива, используемого для a (см. задачу A.3). Обратная процедура используется в RPFTI2.

Синус-преобразование сразу двух действительных последовательностей. Синус-преобразование имеет вид

$$\hat{a}(\hat{t}) = \sum_{t=1}^{N-1} a(t) \sin \frac{\pi}{N} t \hat{t}, \quad (\text{A.9})$$

где $\hat{t} = 0, \dots, N$; $a(0) = a(N) = 0$. Его можно выполнить, определив последовательность $a(t)$ длиной $2N$ при помощи симметрии

$$a(2N - t) = a(-t) = -a(t) \quad (\text{A.10})$$

и совершив периодическое преобразование длиной $2N$. Вместо этого мы приспособим алгоритм [Cooley, Lewis, Welch, 1970] и при помощи только одного комплексного периодического преобразования длиной N выполним синус-преобразование пары последовательностей a и b .

Сначала при помощи (A.10) перепишем (A.9) в виде

$$\hat{a}(\hat{t}) = \frac{1}{2} \sum_{t=0}^{2N-1} a(t) \sin \frac{\pi}{N} t \hat{t} = \frac{1}{2} \sum_{t=0}^{N-1} a(2t) \sin \frac{2\pi}{N} t \hat{t} + 4 \left(\sin \frac{\pi}{N} \hat{t} \right)^{-1} \sum_{t=0}^{N-1} \times \\ \times [a(2t+1) - a(2t-1)] \cos \frac{2\pi}{N} t \hat{t} \quad (\text{A.12})$$

(см. задачу А.4), причем эти преобразования являются периодическими. Теперь можно определить комплексную периодическую последовательность

$$z(t) = [a(2t+1) - a(2t-1) - ia(2t)] + i [b(2t+1) - b(2t-1) - ib(2t)] \quad (\text{A.13})$$

при $t=0, 1, \dots, N-1$, которая преобразуется при помощи CPFT. Синус-преобразование \hat{a} выделяется из $\operatorname{Re}\hat{z}(\hat{t})$, т. е.

$$4\hat{a}(\hat{t}) = \operatorname{Re}\hat{z}(\hat{t}) - \operatorname{Re}\hat{z}(N-\hat{t}) + \frac{\operatorname{Re}\hat{z}(\hat{t}) + \operatorname{Re}\hat{z}(N-\hat{t})}{2 \sin \frac{\pi}{N} \hat{t}}. \quad (\text{A.14})$$

Точно так же из $\operatorname{Im}\hat{z}(\hat{t})$ выделяется \hat{b} .

Этот алгоритм применялся для двухмерного преобразования периодических по y величин, имеющих синус-симметрию по x и возникающих при вычислении потенциалов между двумя плоскими проводящими поверхностями.

Задачи

A.1. Предположим, что N кратно 3. Покажите, что при помощи преобразований, похожих на ведущие к (A.2) и (A.3), ППФ можно разбить на три ППФ длиной $N/3$.

A.2. Часто говорят, что последовательности δ — это последовательность x в «обращенном» порядке. Для понимания этого термина перепишите последнюю колонку табл. А.1 с индексами в двоичной системе, содержащими по три цифры, например $\hat{x}_{001} = \delta_{100}$.

A.3. Проверьте, действительно ли подпрограммы RPFT2 и RPFTI2 выполняют то, что написано в комментариях.

A.4. Получите (A.12). Указание: запишите (A.11) в виде сумм по четным и нечетным t . Покажите, что как нечетная сумма, так и вторая часть (A.12) равны

$$\sum_{t=0}^{N-1} a(2t+1) \frac{\cos \frac{2\pi}{N} t \hat{t} - \cos \frac{2\pi}{N} (t+1) \hat{t}}{4 \sin \frac{\pi}{N} \hat{t}}. \quad (\text{A.15})$$

Листинги CPFT, RPFT2, RPFTI2

SUBROUTINE CPFT (R, I, N, INCP, SIGNP)

C ТРАНСЛИТЕРАЦИЯ БПФ—КОДА СИНГЛТОНА С АССЕМБЛЕРА
C 6600 НА ФОРТРАН. ПОМОГАЕТ ПОНЯТЬ КОД И ОБЛЕГЧАЕТ
C ПРОГРАММИРОВАНИЕ БПФ ДЛЯ ДРУГИХ МАШИН. ЭТА ПРО-

ГРАММА ДОСТАТОЧНО ГИБКА И ЭФФЕКТИВНА, ЕЕ МОЖНО ИСПОЛЬЗОВАТЬ В РАЗЛИЧНЫХ ЦЕЛЯХ, ПОЭТОМУ ЕЕ СЛЕДУЕТ ПЕРЕВЕСТИ НА МАШИННЫЙ КОД. ОНА ДОСТАТОЧНО ПРОСТА И КОРОТКА, ЧТОБЫ БЫСТРО И АККУРАТНО ПЕРЕПИСАТЬ ЕЕ В КОДАХ, А ВОЗНИКАЮЩИЕ ПРИ ЭТОМ ПРЕИМУЩЕСТВА ОГРОМНЫ А. БРЮС ЛЕНГДОН, МАТ. ОТДЕЛ L.L.L., 1971

КОММЕНТАРИИ В ОСНОВНОМ ОТНОсятся к версии
6600—7600

R ДЕЙСТВИТЕЛЬНАЯ ЧАСТЬ ВЕКТОРА ДАННЫХ
I МНИМАЯ ЧАСТЬ ВЕКТОРА ДАННЫХ
N ЧИСЛО ЭЛЕМЕНТОВ (=1, 2, 4, 8...32768)
INC РАСПОЛОЖЕНИЕ ДАННЫХ В ПАМЯТИ (ОБЫЧНО 1, СМ.
НИЖЕ)
SIGN РАВЕН ЗНАКУ АРГУМЕНТА ЭКСПОНЕНТЫ
НА ВХОДЕ МАССИВЫ R И I СОДЕРЖАТ ПРЕОБРАЗУЕМЫЕ
ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ, НА ВЫХОДЕ ОНИ СОДЕРЖАТ ПРЕ-
ОБРАЗОВАНИЕ. ВХОДНЫЕ И ВЫХОДНЫЕ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬ-
НОСТИ РАСПОЛОЖЕНЫ В ЕСТЕСТВЕННОМ ПОРЯДКЕ (Т. Е.
БЕЗ ОБРАЩЕННОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ).

ВЫЗОВ CPFT С SIGN = +1 И ПОВТОРНЫЙ ВЫЗОВ С НЕИЗМЕН-
НЫМИ ПЕРВЫМИ ЧЕТЫРЬЯ ПАРАМЕТРАМИ И SIGN = -1
ПРИВЕДЕТ К УМНОЖЕНИЮ R И I НА N. ТОЖЕ ВЕРНО ЕСЛИ,
СНАЧАЛА SIGN = -1, А ПОТОМ SIGN = +1
ПОЛЕЗНОСТЬ ПАРАМЕТРА INC МОЖНО ПРОИЛЛЮСТРИРО-
ВАТЬ НА ДВУХ ПРИМЕРАХ: ПУСТЬ КОМПЛЕКСНАЯ ПОСЛЕДО-
ВАТЕЛЬНОСТЬ ХРАНИТСЯ В ВИДЕ КОМПЛЕКСНОГО МАССИ-
ВА, Т. Е. ДЕЙСТВИТЕЛЬНАЯ И МНИМАЯ ЧАСТИ ЗАПИСАНЫ В
ЯЧЕЙКАХ ПАМЯТИ ПООЧЕРЕДНО, ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫЕ
ДЕЙСТВИТЕЛЬНЫЕ (ИЛИ МНИМЫЕ) ЭЛЕМЕНТЫ РАЗДЕЛЕНЫ
ДВУМЯ СЛОВАМИ, ПРИ ЭТОМ INC = 2. ВЫЗОВ ИМЕЕТ ВИД
CALL CPFT(REAL(Z),AIMAG(Z),N,2,SIGN)

ДЛЯ МНОГИХ КОМПИЛЯТОРОВ ВМЕСТО ЭТОГО СЛЕДУЕТ
ЗАПИСАТЬ ЧТО-НИБУДЬ ВРОДЕ

CALL CPFT(RI,RI(2),N,2,SIGN)
ГДЕ RI — ДЕЙСТВИТЕЛЬНЫЙ МАССИВ, ЭКВИВАЛЕНТНЫЙ Z
ПУСТЬ ИМЕЕТСЯ МАССИВ С РАЗМЕРНОСТЬЮ N1, N2. МАССИВ
R СОВПАДАЕТ СО СТРОКОЙ 11, AI — СО СТРОКОЙ 12 ПОСЛЕДО-
ВАТЕЛЬНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ ОТДЕЛЕНЫ НА N1, А НАЧАЛЬНЫЕ
АДРЕСА — С(11,1) И С(12,1); ПОЭТОМУ ОБРАЩЕНИЕ ИМЕЕТ
ВИД

CALL CPFT(C(11,1),C(12,1),N2,N1,SIGN)

ПРИ МИНИМАЛЬНЫХ ЗАТРАТАХ НА ОБРАЩЕНИЕ К ПАМЯТИ
ДЛЯ 6400 ПРИ N = 1024 ВРЕМЯ РАВНО 220000 = 21.5 * N * LOG2N MCS
ДЛЯ 6600 ПРИ N = 1024 ВРЕМЯ РАВНО 44500 = 4.35 * N * LOG2N MCS
ДЛЯ 7600 ПРИ N = 1024 ВРЕМЯ РАВНО 8300 = 0.81 * N * LOG2N MCS

ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ БПФ С ОСНОВАНИЕМ 2 НЕ ВОЗНИКАЕТ

ПРОБЛЕМ С ПАМЯТЬЮ, НО ЕСЛИ ЭЛЕМЕНТЫ R И I СОДЕРЖАТСЯ В ОДНОМ МАССИВЕ, И/ИЛИ INC КРАТНО СТЕПЕНИ 2, ТО ВРЕМЯ ВЫЧИСЛЕНИЙ ЗАМЕТНО ВОЗРАСТАЕТ. В ХУДШЕМ СЛУЧАЕ ДЛЯ ВЕРСИИ 7600 СКОРОСТЬ УМЕНЬШАЛАСЬ В 3 РАЗА

ТАКИМ ОБРАЗОМ, ЕСЛИ В ПРИВЕДЕННОМ ВЫШЕ ПРИМЕРЕ N1 КРАТНО 32, ТО МОЖНО, ЗАТРАТИВ НЕМНОГО ПАМЯТИ, УВЕЛИЧИТЬ N1 ДО 33 И ТЕМ САМЫМ ИЗБЕЖАТЬ СЛОЖНОСТЕЙ С ПРЕОБРАЗОВАНИЕМ СТРОК ИЛИ СТОЛБЦОВ

СОСТАВЛЕНО Р. С. СИНГЛТОНОМ, СТАНФОРДСКИЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ, НОЯБРЬ 1968

КОММЕНТАРИИ И НЕЗНАЧИТЕЛЬНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ—А. БРЮС ЛЕНГДОН, РАДИАЦИОННАЯ ЛАБОРАТОРИЯ ИМ. ЛОУРЕНСА, ЛИВЕРМОР, АПРЕЛЬ 1971

ССЫЛКИ:

(1) R.C.SINGLTON. 'ON COMPUTING THE FAST FOURIER TRANSFORM' COMM.ASSOC.COMP.MASH.VOL. 10,PP. 647 -654(1967)

(2) R.C.SINGLTON.ALGORITHM 354'AN ALGOL CONVOI UTION PROCEDURE BASED ON THE FAST FOURIER TRANSFORM' COMM.ACM VOL. 12,PP. 179 -184(1969)

(3) W.M.GENTLEMAN AND G. SANDE. 'FAST FOURIER TRANSFORMS-FOR FUN AND PROFIT'.PROC.AFIPS 1966 FALL JOINT COMPUTER CONF.,VOL. 29, PP. 563—578

REAL R(I), I(I)
INTEGER SIGNP, SPAN, RC
REAL SINES(15),10,I1

ТАБЛИЦА СИНУСОВ

СИНУСЫ ДОЛЖНЫ БЫТЬ ХОРОШИ ДО ПОСЛЕДНЕГО БИТА ДЛЯ ТОГО ЧТОБЫ ИЗБЕЖАТЬ ПОГРЕШНОСТЕЙ В РАБОТЕ АССЕМБЛЕРА, ИХ СЛЕДУЕТ ПРЕДСТАВИТЬ В ВОСЬМЕРИЧНОЙ СИСТЕМЕ. СИНУСЫ НУЖНО ВЫЧИСЛИТЬ С ДВОЙНОЙ ТОЧНОСТЬЮ И ЗАТЕМ ПЕРЕВЕСТИ ИХ В ВОСЬМЕРИЧНЫЙ ФОРМАТ (ОБЫЧНОЙ ТОЧНОСТИ ПОДПРОГРАММЫ СИНУСОВ НЕДОСТАТОЧНО)

В ДАННОЙ ВЕРСИИ ВСЕ ЭТО ОСУЩЕСТВЛЯЕТСЯ ПРИ ПЕРВОМ ВЫЗОВЕ

```
DATA SINES(1)/0./  
IF(SINES(1).EQ.1.) GO TO 1  
SINES(1)=1  
T=ATAN(1.)  
DO 2 IS=2.15  
SINES(IS)=SIN(T)  
2 T=T/2  
1 CONTINUE  
IF( N.EQ.1) RETURN
```

УСТАНОВКА РАЗЛИЧНЫХ ИНДЕКСОВ

INC=INCP

```
SGN=SIGNP  
NINC=N*INC  
SPAN=NINC  
IT=N/2  
DO 3 IS=1,15  
IF(IT.EQ.1) GO TO 12  
IT=IT/2
```

3 ЗДЕСЬ 2 ВНУТРЕННИХ ЦИКЛА, КОТОРЫЕ ОХВАТЫВАЮТ
C N/(2*SPAN) КОПИЙ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ ДЛИНЫ (2*SPAN). ЭТИ
C ЦИКЛЫ ПОДХОДЯТ ДЛЯ СИСТЕМЫ КОМАНД 6600 ИЛИ 7600.
C ОДИН ЦИКЛ ПРЕДНАЗНАЧЕН ДЛЯ ПРОИЗВОЛЬНОГО ФАКТО-
C РА ВРАЩЕНИЯ УГЛА. ДРУГОЙ ЗАБОТИТСЯ О СПЕЦИАЛЬНЫХ
C СЛУЧАЯХ, КОГДА УГОЛ РАВЕН НУЛЮ И НЕ НУЖНО КОМП-
C ЛЕКСНОЕ УМНОЖЕНИЕ. ЭТО ЭФФЕКТИВНЕЕ, ЧЕМ ЧАСТО
C ИСПОЛЬЗУЕМАЯ ПРОВЕРКА И ВЕТВЛЕНИЕ ВО ВНУТРЕННЕМ
C ЦИКЛЕ. КОМПЛЕКСНОЕ УМНОЖЕНИЕ НЕ НУЖНО В ДРУГОМ
C СПЕЦИАЛЬНОМ СЛУЧАЕ, КОГДА УГОЛ=PI (Т. Е. ФАКТОР=
C =1) — ЭТОТ СЛУЧАЙ ОТДЕЛЬНО НЕ УЧИТЫВАЕТСЯ. УКАЗАН-
C НЫЕ МЕРЫ НАИБОЛЕЕ ПОЛЕЗНЫ ПРИ МАЛЫХ N

C ОРГАНИЗАЦИЯ ПРОЦЕДУРЫ ПРИНАДЛЕЖИТ СЭНДУ (ССЫЛКА
C (3), СТР. 566—568), Т. Е. ДАННЫЕ СНАЧАЛА ЗАПИСАНЫ В НОР-
C МАЛЬНОМ ПОРЯДКЕ И ПЕРЕМЕШИВАЮТСЯ ПОЗДНЕЕ, А ФАК-
C ТОРЫ ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОГО УГЛОВОГО ВРАЩЕНИЯ ИСПОЛЬ-
C ЗУЮТСЯ В ВОЗРАСТАЮЩЕМ ПОРЯДКЕ НА КАЖДОМ УРОВНЕ
C РЕКУРСИИ. ВСЕ НЕОБХОДИМЫЕ СИНУСЫ И КОСИНУСЫ ПО-
C ЛУЧАЮТСЯ ИЗ КОРОТКОЙ ТАБЛИЦЫ ПРИ ПОМОЩИ УСТОЙ-
C ЧИВОЙ МНОГОУГЛОВОЙ РЕКУРСИИ (ССЫЛКИ (1), СТР. 651 И
C (2), СТР. 179—180). ЭТОТ МЕТОД ЭКОНОМИЧЕН, И ЕГО ТОЧ-
C НОСТЬ СРАВНИМА С ТОЧНОСТЬЮ ХОРОШЕЙ БИБЛИОТЕКИ
C СИНУС — И КОСИНУС — ПРОГРАММ. НУЖНЫ ЗНАЧЕНИЯ
C УГЛОВ ОТ 0 ДО PI. РЕКУРРЕНТНАЯ ПРОЦЕДУРА ИСПОЛЬЗУЕТ-
C СЯ ДЛЯ УГЛОВ, МЕНЬШИХ PI/2, БОЛЬШИЕ УГЛЫ ПОЛУЧАЮТСЯ
C ОТРАЖЕНИЕМ ОТ МНИМОЙ ОСИ (УГОЛ=PI — УГОЛ). ТАКИЕ
C ПАРЫ УГЛОВ ИСПОЛЬЗУЮТСЯ ОДНА ЗА ДРУГОЙ

C ДЛЯ ПРОСТОТЫ ДАЛЬНЕЙШИЕ КОММЕНТАРИИ ОТНОсятся
C К СЛУЧАЮ INC=1

C ЕСЛИ ИСПОЛЬЗУЕТСЯ АРИФМЕТИКА С ОТБРАСЫВАНИЕМ, А
C НЕ С ОКРУГЛЕНИЕМ, ТО К С И S СЛЕДУЕТ ПРИМЕНИТЬ
C КОРРЕКЦИЮ СИНГЛТОНА

10 T=S+(S0*C-C0*S)
C=C-(C0*C+S0*S)
S=T

11 K1=K0+SPAN
R0=R(K0+1)
R1=R(K1+1)
I0=I(K0+1)
II=I(K1+1)
R(K0+1)=R0+R1

I(K0+1)=I0+I1
R0=R0-R1
I0=I0-I1
R(K1+1)=C*R0-S*I0
I(K1+1)=S*R0+C*I0
K0=K1+SPAN
IF(K0.LT.NINC) GO TO 11

K1=K0-NINC
C=-C
K0=SPAN-K1
IF(K1.LT.K0) GO TO 11
K0=K0+INC
IF(K0.LT.K1) GO TO 10

C РЕКУРСИЯ НА СЛЕДУЮЩИЙ УРОВЕНЬ

I2 CONTINUE

SPAN=SPAN/2
K0=0

C ЦИКЛ УГОЛ = 0

I3 K1=K0+SPAN

R0=R(K0+1)

R1=R(K1+1)

I0=I(K0+1)

I1=I(K1+1)

R(K0+1)=R0+R1

I(K0+1)=I0+I1

R(K1+1)=R0-R1

I(K1+1)=I0-I1

K0=K1+SPAN

IF(K0.LT.NINC) GO TO 13

C ЕЩЕ НЕ ЗАКОНЧИЛИ...

IF(SPAN.EQ.INC) GO TO 20

C НЕТ ЕЩЕ. ПРИГОТОВИТЬ НЕНУЛЕВЫЕ УГЛЫ.

C0=2.*SINES(IS)**2

IS=IS-1

S=SIGN(SINES(IS),SGN)

S0=S

C=1.-C0

K0=INC

GO TO 11

C
C МАССИВЫ R И I ТЕПЕРЬ СОДЕРЖАТ ПРЕОБРАЗОВАННЫЕ ВЕ-
C
C ЛИЧИНЫ, НО ЗАПИСАНЫ ОНИ В ДВОИЧНО-ОБРАЩЕННОМ
C ПОРЯДКЕ. ПРИВЕДЕНИЕ В ПОРЯДОК ОСУЩЕСТВЛЯЕТСЯ ПАР-
C НЫМИ ПЕРЕСТАНОВКАМИ. ПРИНЦИП СОРТИРОВКИ СМ. В (2),
C СТР. 180, 182

C
C ЕЩЕ РАЗ: КОММЕНТАРИИ ОТНОсятся к случаю INC = 1
C ИНДЕКСЫ РАВНЫ:IJ : =0,1,2...N/2-1 (ПРОСТОЙ СЧЕТЧИК)
C J :=IJ В ОБРАЩЕННОМ ПОРЯДКЕ
C RC := 0,2,4... N/2 В ОБРАТНОМ ПОРЯДКЕ (ПРИРАЩЕНИЕ N/4 РАЗ)
C RC ИЗМЕНЯЕТСЯ ТАК: НАЧИНАЯ С СОСЕДНЕГО К КРАЙНЕМУ
C ЛЕВОМУ РАЗРЯДУ КАЖДЫЙ РАЗРЯД ИЗМЕНЯЕТСЯ, ПОКА НЕ

C ПОЛУЧИТСЯ 0
 C (КОДИРОВКА ОСУЩЕСТВЛЯЕТСЯ ТАК, ЧТОБЫ ЭФФЕКТИВ-
 CНОСТЬ ДЛЯ ЛЮБЫХ INC БЫЛА ОДИНАКОВОЙ)
 C ПРИ ЛЮБЫХ ПЕРЕСТАНОВКАХ ИJ ПОДПАДАЕТ ПОД ОДИН ИЗ
 C СЛУЧАЕВ:
 C (1) В ПЕРВОМ И ПОСЛЕДНЕМ РАЗРЯДЕ 0 (IJ, JI ЧЕТНЫ, $< N/2$)
 C ИJ < -JI
 C (2) ДОПОЛНЕНИЕ СЛУЧАЯ (1) (ОБА НЕЧЕТНЫ ИJ > N/2)
 C (3) В ПЕРВОМ РАЗРЯДЕ 0, В ПОСЛЕДНЕМ 1 (IJ НЕЧЕТНО ИJ < N/2,
 C JI > N/2)
 C С ЧЕТНОЙ МЕТКИ ПРОЦЕДУРА НАЧИНАЕТСЯ ПРИ ИJ ЧЕТНОМ
 C ИJ < =JI.
 C ПЕРВЫЙ РАЗ ОСУЩЕСТВЛЯЕТСЯ СЛУЧАЙ (3), ВТОРОЙ РАЗ—
 C СЛУЧАЙ (1). ТАКИМ ОБРАЗОМ, ПАРА ЭЛЕМЕНТОВ В ПЕРВОЙ
 C ПОЛОВИНЕ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ ПЕРЕСТАВЛЯЕТСЯ С ДРУ-
 C ГОЙ ПАРОЙ ИЗ ВТОРОЙ ПОЛОВИНЫ. ПОСКОЛЬКУ ИJ < JI,
 C ПОВТОРНОЙ ПЕРЕСТАНОВКИ НЕ ПРОИСХОДИТ
 20 N1=NINC-INC
 N2=NINC/2
 RC=0
 IJ=0
 JI=0
 IF(N2.EQ.INC) RETURN
 GO TO 22
 C ЧЕТНЫЙ СЛУЧАЙ
 21 IJ=N1-IJ
 JI=N1-JI
 T=R(IJ+1)
 R(IJ+1)=R(JI+1)
 R(JI+1)=T
 T=I(IJ+1)
 I(IJ+1)=I(JI+1)
 I(JI+1)=T
 IF(IJ.GT.N2) GO TO 21
 C НЕЧЕТНЫЙ СЛУЧАЙ
 22 IJ=IJ+INC
 JI=JI+N2
 T=R(IJ+1)
 R(IJ+1)=R(JI+1)
 R(JI+1)=T
 T=I(IJ+1)
 I(IJ+1)=I(JI+1)
 I(JI+1)=T
 IT=N2
 C ОБРАТНЫЙ СЧЕТЧИК ПРИРАЩЕНИЙ
 23 IT=IT/2
 RC=RC-IT
 IF(RC.GE.0) GO TO 23
 RC=RC+2*IT
 JI=RC
 IJ=IJ+INC
 IF(IJ.LT.JI) GO TO 21

```
IF(IJ.LT.N2) GO TO 22  
RETURN  
END
```

```
SUBROUTINE RPFT2(A,B,N,INC)  
REAL A(1),B(1)
```

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ ОДНОВРЕМЕННО ДВУХ ДЕЙСТВИТЕЛЬНЫХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН

ИНТЕРФЕЙС КОМПЛЕКСНОГО ПЕРИОДИЧЕСКОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФУРЬЕ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ПАР ПРЕОБРАЗОВАНИЙ ДЕЙСТВИТЕЛЬНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ

ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ ОБРАЗОВАНЫ ЭЛЕМЕНТАМИ 0, INC,
2*INC...(N-1)*INC МАССИВОВ A,B

ПОСЛЕ КОМПЛЕКСНОГО ПЕРИОДИЧЕСКОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФУРЬЕ, ГДЕ А И В - ДЕЙСТВИТЕЛЬНАЯ И МНИМАЯ ЧАСТИ, RPFT2 РАЗДЕЛЯЕТ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ А И В И УКЛАДЫВАЕТ ИХ, УМНОЖАЯ НА 2, ОБРАТНО В МАССИВЫ А И В ТАКИМ ОБРАЗОМ, СОДЕРЖИМОЕ А И В ПРИ ВЫЗОВЕ

CPFT(A,B,N,INC,SIGN)

RPFT2(A,B,N,INC)

ЗАМЕНЯЕТСЯ НА УДВОЕННОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ ЕСЛИ INC = 1, ТО УДВОЕННЫЕ ДЕЙСТВИТЕЛЬНЫЕ ЧАСТИ ПЕРВОЙ ПОЛОВИНЫ КОМПЛЕКСНЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ ФУРЬЕ А (КОСИНУС - КОЭФФ.) ЗАПИСАНЫ В А(0), А(1) ... А(N/2) УДВОЕННЫЕ МНИМЫЕ ЧАСТИ (СИНУС - КОЭФФ.) ЗАПИСЫВАЮТСЯ В ОБРАТНОМ ПОРЯДКЕ В А(N-1), А(N-2) ...А(N/2+1) ДЛЯ В - АНАЛОГИЧНО

ДЛЯ ИЗМЕНЕНИЯ ЗНАКА СИНУС - КОЭФФИЦИЕНТОВ ПАРАМЕТР SIGN НЕ ПРЕДУСМОТРЕН. ЭТО МОЖНО СДЕЛАТЬ ПАРАМЕТРОМ SIGN В CPFT

ЗАТРАТЫ ВРЕМЕНИ В 10 РАЗ МЕНЬШЕ, ЧЕМ ДЛЯ CPFT

СЛЕДУЕТ ПЕРЕПИСАТЬ НА ЯЗЫКЕ АССЕМБЛЕР

СОСТАВЛЕНО А.БРЮСОМ ЛЕНГДОНОМ, LRL. ЛИВЕРМОР, МАЙ, 1971

REAL IP,IM

INC=INCP

NINC=N*INC

A(1)=A(1)+A(1)

B(1)=B(1)+B(1)

LP=INC

LM=NINC-LP

IF(LP.GE.LM) GO TO 2

RP=A(LP+1)

RM=A(LM+1)

IP=B(LP+1)

IM=B(LM+1)

A(LP+1)=RM+RP

B(LM+1)=RM-RP

B(LP+1)=IP+IM

A(LM+1)=IP-IM

LP=LP+INC

LM=NINC-LP

IF(LP.LT.LM) GO TO 1

2 IF (LP.GT.NINC) RETURN

A(LP+1)=A(LP+1)+A(LP+1)

B(LP+1)=B(LP+1)+B(LP+1)

RETURN

END

SUBROUTINE RPFTI2(A,B,N,INCP)

REAL A(1),B(1)

C ОБРАТНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ФУРЬЕ СРАЗУ ДВУХ ДЕЙСТВИТЕЛЬНЫХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН

C ИНТЕРФЕЙС КОМПЛЕКСНОГО ПЕРИОДИЧЕСКОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФУРЬЕ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ПАР ПРЕОБРАЗОВАНИЙ ДЕЙСТВИТЕЛЬНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ

C КОМБИНИРУЕТ СИНУС -- И КОСИНУС

C КОЭФФИЦИЕНТЫ А И В ТАК, ЧТОБЫ А+iB ЯВЛЯЛОСЬ КОМПЛЕКСНЫМ ПЕРИОДИЧЕСКИМ ПРЕОБРАЗОВАНИЕМ ФУРЬЕ ИСХОДНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ. ЗА ИСКЛЮЧЕНИЕМ УДВОЕНИЯ А И В ,RPFTI2 ОСУЩЕСТВЛЯЕТ ОПЕРАЦИЮ, ОБРАТНУЮ

RPFT2

ВЫЗОВЫ

RPFTI2(A,B,N,INC)

CPFT(A,B,N,INC,—SIGN)

C ОБРАЩАЮТ СДЕЛАННОЕ РАНЕЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ, ОДНАКО МАССИВЫ УМНОЖАЮТСЯ ТЕПЕРЬ НА 2*N

C СЛЕДУЕТ ПЕРЕПИСАТЬ НА ЯЗЫКЕ АССЕМБЛЕР

C СОСТАВЛЕНО А.БРЮСОМ ЛЕНГДОНОМ, LRL , ЛИВЕРМОР, МАЙ,

1971.

INC=INCP

NINC=N*INC

LP=INC

LM=NINC-LP

IF(LP.GE.LM) RETURN

3 CA=A(LP+1)

SB=B(LM+1)

CB=B(LP+1)

SA=A(LN+1)

A(LP+1)=CA-SB

A(LM+1)=CA+SB

B(LP+1)=CB+SA

B(LM+1)=CB-SA

LP=LP+INC

LM=NINC-LP

IF(LP.LT.LM) GO TO 3

RETURN

END

Б. КОМПЕНСИРУЮЩИЕ И ОСЛАБЛЯЮЩИЕ ФУНКЦИИ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ В ES1

Функция $SM(\kappa)$, используемая в подпрограмме FIELDS, зависит от двух параметров a_1 и a_2 :

$$SM(\kappa) \equiv \exp \left[a_1 \sin^2 \frac{\kappa \Delta x}{2} - a_2 \operatorname{tg}^4 \frac{\kappa \Delta x}{2} \right]. \quad (\text{Б.1})$$

Эта функция используется в произведении $\rho(\kappa) SM^2(\kappa)$. Выбор $a_1 > 0$ используется для подавления погрешности $O(\kappa^2)$ в дисперсионном соотношении нормальных алгоритмов, связанной с величинами $S(\kappa)$, κ и K^2 при $\kappa \Delta x \lesssim 1$, что называется компенсацией или поднятием. При $a_2 > 0$ функция $\rho(\kappa)$ уменьшается на коротких волнах, что обычно называется сглаживанием. $SM(\kappa) = 1$ при $a_1 = 0 = a_2$. В этом приложении предлагаются некоторые значения a_1 и a_2 .

Пусть определяемое a_1 поднятие при $\kappa \Delta x \lesssim 1$ используется для компенсации погрешности в дисперсионном соотношении холодной плазмы. Если дисперсия определяется усреднением силы (8.105 б)

$$\omega^2 \approx \omega_p^2 \left[\frac{\kappa \nu(\kappa) S^2(\kappa)}{K^2(\kappa)} \right] SM^2(\kappa), \quad (\text{Б.2})$$

то, используя обычные формулы, получаем

$$\left. \begin{aligned} \nu(\kappa) &= \kappa \frac{\sin(\kappa \Delta x)}{\kappa \Delta x}, \\ S^2(\kappa) &= \left(\frac{\sin \frac{\kappa \Delta x}{2}}{\frac{\kappa \Delta x}{2}} \right)^4; \end{aligned} \right\} \quad (\text{Б.3})$$

$$K^2(\kappa) = \kappa^2 \left(\frac{\sin \frac{\kappa \Delta x}{2}}{\frac{\kappa \Delta x}{2}} \right)^2,$$

и так как $\operatorname{dif} \vartheta \equiv \sin \vartheta / \vartheta$, то

$$\omega^2 \approx \omega_p^2 \operatorname{dif}(\kappa \Delta x) \operatorname{dif}^2 \frac{\kappa \Delta x}{2} \exp \left(2a_1 \sin^2 \frac{\kappa \Delta x}{2} - 2a_2 \operatorname{tg}^4 \frac{\kappa \Delta x}{2} \right). \quad (\text{Б.4})$$

При $\kappa \Delta x \equiv \vartheta \ll 1$ с точностью до $(\kappa \Delta x)^2$

$$\omega^2 \approx \omega_p^2 \left(1 - \frac{\vartheta^2}{6} + \dots \right) \left(1 - \frac{\vartheta^2}{12} \right) \left(1 + a_1 \frac{\vartheta^2}{2} \right) \approx \quad (\text{Б.5})$$

$$\approx \omega_p^2 \left[1 + \vartheta^2 \left(-\frac{1}{4} + \frac{a_1}{2} \right) \right]. \quad (\text{Б.6})$$

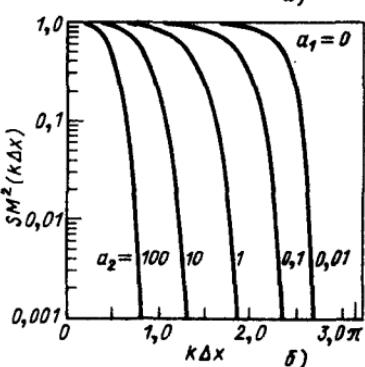
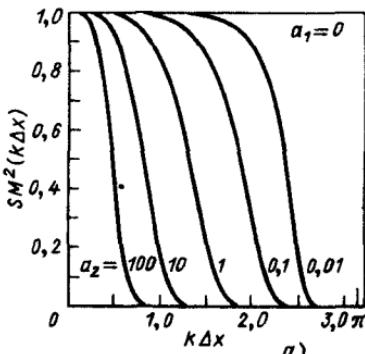
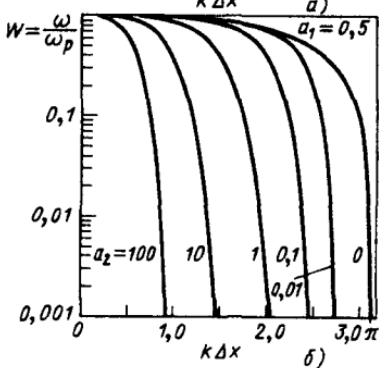
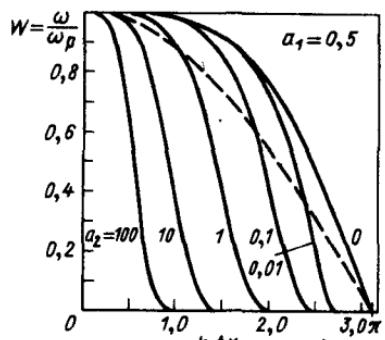


Рис. Б.1. Влияние компенсаций и сглаживания на дисперсионные кривые холодной плазмы - зависимость $\omega(\ell)/\omega_p \equiv W$ от $\ell\Delta x = \theta$. Штриховая линия соответствует $W = \cos \frac{\ell\Delta x}{2}$, т. е. дисперсии холодной плазмы без компенсации и ослабления ($a_1 = 0 = a_2$). Сплошные кривые соответствуют $a_1 = 0.5$ [при этом при $\ell \rightarrow 0$ $W = 1 + O(\ell^4)$] и различным значениям a_2 (а). То же, но в логарифмическом масштабе (б)

Рис. Б.2. Зависимость создаваемого сглаживающим множителем SM^2 ослабления Фурье-компоненты $\rho(\ell)$ от $\ell\Delta x \equiv \vartheta$ без компенсации ($a_1 = 0$) и при различных значениях a_2 . То же, но в логарифмическом масштабе (б)

Следовательно, при $a_1 = 0.5$ с точностью до $(\ell\Delta x)^4$ $\omega = \omega_p$. [Заметим, что поскольку используется $\operatorname{tg}^4(\vartheta/2)$, а не $\operatorname{tg}^2(\vartheta/2)$, выбор значения a_2 несуществен.] Если учесть все пространственные гармоники (все наложения), то при $a_1 = 0$ дисперсия холодной плазмы определяется точно из (8.92):

$$\omega^2 = \omega_p^2 \cos^2 \frac{\ell\Delta x}{2} SM^2(\ell). \quad (\text{Б.7})$$

При малых $\ell\Delta x$ (Б.7) принимает вид

$$\omega^2 = \omega_p^2 \left(1 - \frac{\vartheta^2}{4} + \dots \right) SM^2(\ell) \quad (\text{Б.8})$$

и, следовательно, при $a_1=0,5$ корректируется с точностью до $(\kappa \Delta x)^4$. Графики функции

$$\frac{\omega}{\omega_p} \equiv W(\theta) \equiv \cos \frac{\theta}{2} \text{SM}(\theta) \quad (\text{Б.9})$$

при различных значениях a_2 и $a_1=0,5$ изображены на рис. Б.1.

При $a_1=0$, т. е. при наличии только ослабления, сглаживание, применяемое к $\rho(\kappa)$, а именно $\text{SM}^2(\theta)$, показано на рис. Б.2. Пользователь может выбрать минимальную длину волны (имеется в виду величина $\kappa_{\max} \Delta x$), нанести ее на график и получить значение a_2 , при котором $\text{SM}^2(\kappa_{\max} \Delta x)$ равно, например, 0,01; теперь можно игнорировать вклад $\kappa > \kappa_{\max}$, так как при больших κ происходит эффективное отключение источника.

Иногда пространственная сетка дает нефизические эффекты. В одномерном случае в ES1, например, можно позволить себе использовать большее число ячеек (т. е. $\Delta x \ll \lambda$, где λ — характерный масштаб задачи), а затем подобрать a_2 так, чтобы $\text{SM}(2\pi/\lambda) \sim 0,5$. В этом случае длинные волны немного ослабляются, тогда как волны с длиной $\lambda \sim \Delta x$ сильно подавлены. Влияние пространственной сетки при этом обычно исключается.

Иногда применяется другой простой подавляющий множитель (но не в ES1)

$$\text{SM}_N(\alpha) \equiv \exp(-\alpha^N), \quad (\text{Б.10})$$

где $\alpha \equiv \kappa / \kappa_{\max}$ (рис. Б.3). Заметим, что

$$\text{SM}_N(0) = 1,$$

$\text{SM}_N(1) = 1/e = 0,368$ не зависит от N ;

$\text{SM}_0(\alpha) = 1/e = 0,368$ не зависит от α ;

$\text{SM}_{N \rightarrow \infty}(\alpha) = \begin{cases} 1, & \alpha < 1, \\ 0, & \alpha > 1 \end{cases}$ функция скачка,

$\text{SM}_N^2(\alpha) = \exp(-2\alpha^N) \neq \exp(-\alpha^{2N})$, т. е. удвоение N не эквивалентно возведению в квадрат SM_N

Обычно при использовании SN_N следует выбрать значение κ_{\max} и положить, например, $N=8$.

Легко построить и другие сглаживающие множители. Следует напомнить, что чем резче проводится обрезание в κ -пространстве (например, используются большие N во втором аттенюаторе), тем сильнее величина последней удерживаемой гармоники зависит от низкочастотного фильтра. Например, пропущенная через фильтр с резким обрезанием сходящаяся в пространстве волна возвращается с рябью $\rho(x)$ или $\phi(x)$ с $\kappa = \kappa_{\max}$ (выбросы Гиббса составляют примерно 9%), а в точке кумуляции размер возвышения составляет примерно $\lambda_{\min}/2 =$

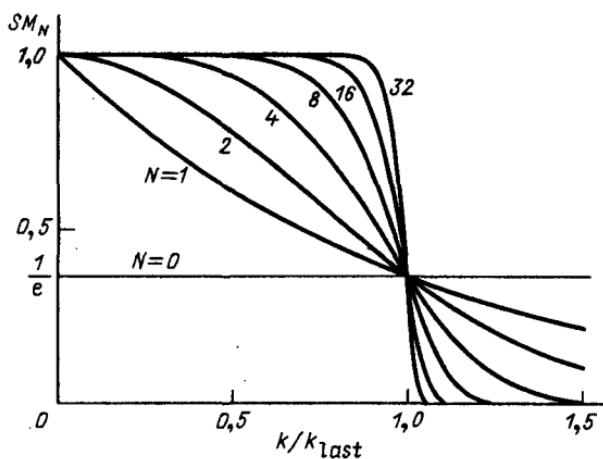


Рис. Б.3. Подавляющий множитель $SM_N(\alpha) \equiv \exp(-\alpha^N)$ для различных $N = \pi/\kappa_{\max}$. Если для ослабления применяется сигма-фактор Ланцоша [Hamming, 1977] и обрезание происходит при $\kappa = \kappa_{\max}$

$$SM_L\left(\frac{\kappa}{\kappa_{\max}}\right) \equiv \frac{\sin(\pi\kappa/\kappa_{\max})}{\pi\kappa/\kappa_{\max}}, \quad \kappa < \kappa_{\max}, \quad (\text{Б.11})$$

то выбросы практически исключаются, но ухудшается разрешение — длина возвышения удваивается и достигает примерно λ_{\min} . Оказывается, что второй аттенюатор SM_N (Б.10) хотя и создает некоторую рябь и выбросы, но сохраняет и длинноволновую динамику и небольшой, порядка $\lambda_{\min}/2$, размер возвышения, и, следовательно, лучше использовать SM_N , а не SM_L .

В. ЦИФРОВАЯ ФИЛЬТРАЦИЯ В ОДНОМ И ДВУХ ИЗМЕРЕНИЯХ

При моделировании фильтрация сеточных величин обычно используется для того, чтобы:

1) на больших длинах волн $\kappa\Delta x \rightarrow 0$ ($\kappa\Delta x \ll \pi$) улучшить согласие с теорией [дисперсию $\omega(\kappa)$], что называется компенсацией или поднятием;

2) на малых длинах волн $\kappa\Delta x \rightarrow \pi$, где конечно-разностные алгоритмы для ∇ , ∇^2 и т. д. имеют наименьшую точность и сильны эффекты наложения, улучшить точность и уменьшить шумы — это называется ослаблением или сглаживанием.

В кодах, использующих преобразование Фурье сеточных величин, фильтрация осуществляется непосредственно в κ -пространстве. Если преобразование Фурье сеточных величин неприменимо, то фильтрацию приходится делать в x -пространстве, и в этом случае она называется цифровой фильтрацией (рекурсивные цифровые фильтры описаны в работах [Hamming,

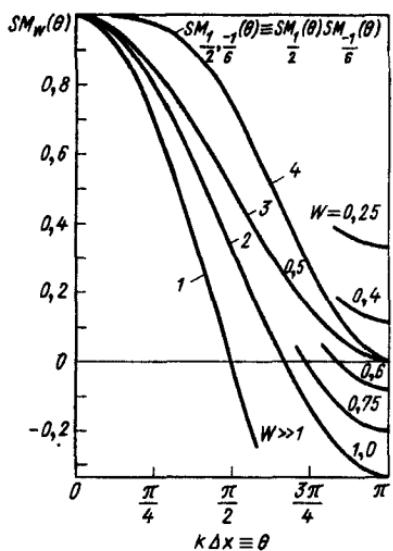


Рис. В.1. Сглаживающая функция $SM_W(\theta)$ (В.5) для различных W . Двух (1)- и трехточечные (2) средние (а также любые средние при $W > 0,5$) приводят к $SM_W(\theta) < 0$, что нежелательно. Кривая 3 соответствует биномиальному фильтру. Применение сначала $W = 0,5$, затем $W = -1/6$ дает изображенную скомпенсированную кривую (4)

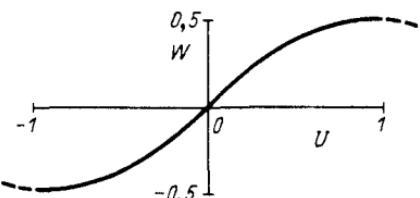


Рис. В.2. Связь между W и U для одно- и двухпроходного цифрового сглаживающего фильтра

1977 и Collatz, 1966]). Это приложение представляет собой введение в технику цифровой фильтрации, применимую к скалярным сеточным величинам в одном и двух измерениях. Для того чтобы сделать более понятным влияние фильтрации, в предположении периодичности системы выводятся представления Фурье предложенных фильтров.

Пусть фильтруемая величина $\phi(X_j) \equiv \phi_j$ определена на узлах сетки $X_j \equiv j\Delta x$ и периодична. Простая фильтрация осуществляется заменой

$$\phi_j \rightarrow \frac{W\phi_{j-1} + \phi_j + W\phi_{j+1}}{1 + 2W}. \quad (\text{B.1})$$

(Предостережение: величины в правой части всегда задаются на исходных узлах.) Для обеспечения сохранения импульса необходима симметрия.

Фурье-представление фильтра можно получить, связывая величины

$$\phi_{\text{orig}}(\ell) \text{ и } \sum_{j=1}^N \phi(X_j) e^{i\ell X_j}. \quad (\text{B.2})$$

Следовательно, подставляя фильтрованное значение ϕ из (B.1) в (B.2) вместо $\phi(X_j)$, получаем

$$\phi_f(\ell) = \sum_{j=1}^N \frac{W\phi_{j-1} + \phi_j + W\phi_{j+1}}{1 + 2W} e^{i\ell X_j} \quad (\text{B.3})$$

и имеем (полагая $p=j-1$, $q=j+1$)

$$\Phi_f(\ell) = \frac{W \sum_{p=0}^{N-1} \phi(X_p) e^{i\ell X_{p+1}} + \sum_{j=1}^N \phi(X_j) e^{i\ell X_j} + W \sum_{q=2}^{N+1} \phi(X_q) e^{i\ell X_{q-1}}}{1+2W}. \quad (\text{B.4})$$

Нужный результат получается после учета периодичности, которая позволяет отсчитывать номера узлов сетки откуда угодно:

$$\Phi_f(\ell) = \frac{1+2W \cos \ell \Delta x}{1+2W} \Phi_0(\ell) = \text{SM}_W(9) \Phi_0(\ell). \quad (\text{B.5})$$

Сглаживающая функция $\text{SM}_W(9)$ изображена на рис. В.1. Рассмотрим различные значения W . При $W > 0,5$ функция $\text{SM}_W(9)$ меняет знак в первой зоне $0 < \ell \Delta x < \pi$, что неприемлемо; следовательно, фильтры, представляющие собой одинаково взвешенные двух- и трехточечные средние ($W \gg 1$ и $W=1$), рекомендуется использовать нельзя. Если $W \leq 0,5$, то функция $\text{SM}_W(9)$ всегда положительна и при $9 \rightarrow \pi$ квадратично обращается в нуль. Применение процедуры N раз дает фильтр $\cos^{2N}(9/2)$, который при помощи биномиальных коэффициентов можно записать как однопроходный:

$$\text{три точки: } \frac{1}{4} (1, 2, 1) \rightarrow \cos^2 \frac{9}{2};$$

$$\text{пять точек: } \frac{1}{16} (1, 4, 6, 4, 1) \rightarrow \cos^4 \frac{9}{2};$$

$$\text{семь точек: } \frac{1}{64} (1, 6, 15, 20, 15, 6, 1) \rightarrow \cos^6 \frac{9}{2}.$$

Фильтр с $W=0,5$ поэтому называется биномиальным. Заметим, что при $N \rightarrow \infty$ биномиальное сглаживание приближается к гауссовому. Использование $W < 0$ дает $\text{SM}_W(9) > 1$, т. е. компенсирующий фильтр. При $W = -1/6$ компенсация просто уничтожает ослабления $O(9^2)$ при $W=0,5$, т. е. применение сначала $W=0,5$, а затем $W=-1/6$ дает $\text{SM}_W(9)=1+O(9^4)$ при малых 9. Применение двух этих фильтров эквивалентно одному пятиточечному фильтру с весами $(1/16) (-1, 4, 10, 4, -1)$.

Для использования (B.1) необходимо удерживать несколько неотфильтрованных значений ϕ , что в 1 d не создает никаких проблем с памятью. Тем не менее в 2 d и 3d могут возникнуть сложности с запоминанием старых значений ϕ_j , поскольку сглаживающая матрица увеличивается от 3 точек в 1 d до 9 точек в 2 d и 27 в 3 d. Кроме того, может оказаться, что сглаживание проще запрограммировать при помощи нескольких проходов по каждой строке сетки. Хорошо бы в этой связи поискать факторизующийся алгоритм. Сначала прогонка впе-

ред, заменяющая все φ_j на $\varphi_j + U\varphi_{j+1}$, затем прогонка назад с заменой всех φ_j на $\varphi_j + U\varphi_{j-1}$. Дополнительная память при этом не нужна. Представление Фурье этого циклического процесса имеет вид

$$SM_U(\theta) = \frac{Ue^{i\theta} + 1}{U+1} \frac{1+Ue^{-i\theta}}{1+U} = \frac{1+U^2 + 2U\cos\theta}{(1+U)^2}. \quad (B.6)$$

Это совпадает с однопроходным фильтром $SM_W(\theta)$ с

$$W = \frac{U}{1+U^2}, \quad U = \frac{1}{2W} + \left(\frac{1}{(2W)^2} - 1 \right)^{1/2}. \quad (B.7)$$

Условие действительности U дает $-1/2 \leq W \leq 1/2$ (рис. В. 2), т. е. факторизация допустима при $|W| \leq 1/2$. Биноминальная форма сглаживателя $(1, 2, 1)/4$ с $W=1/2$ соответствует $U=1$ с $(0, 1, 1)/2$ при прогонке вперед и с $(1, 1, 0)/2$ при обратной прогонке. После сглаживания применяется компенсатор с $W=-1/6$ или $U=-3+8^{1/2}=0,171573$.

Двухмерная цифровая фильтрация в общем выполняется так же, как и в 1 d, но для того чтобы фильтрация была изотропной и эффективной с точки зрения памяти и скорости, требует большей аккуратности. Мы ограничимся рассмотрением фильтра на сетке (j, ℓ) , использующего восемь соседних точек.

Фильтрация заключается в замене $\Phi(X_j, Y_\ell) \equiv \Phi_{j, \ell}$, где $X_j=j\Delta x$, $Y_\ell=\ell\Delta y$, на взвешенную по соседним точкам величину вида

$$\Phi_{j, \ell} \leftarrow \frac{M\Phi_{j, \ell} + S \text{ (стороны)} + K \text{ (углы)}}{M+4(S+K)}, \quad (B.8)$$

где

$$\text{стороны} = \Phi_{j-1, \ell} + \Phi_{j+1, \ell} + \Phi_{j, \ell+1} + \Phi_{j, \ell-1},$$

$$\text{углы} = \Phi_{j-1, \ell-1} + \Phi_{j-1, \ell+1} + \Phi_{j+1, \ell+1} + \Phi_{j+1, \ell-1},$$

а M , S , K — веса в центре, на сторонах и углах в соответствии с пространственным шаблоном

$$\begin{bmatrix} K & S & K \\ S & M & S \\ K & S & K \end{bmatrix}.$$

Фурье-представление фильтра имеет вид

$$\Phi_f(\theta_x, \theta_y) = \left[\frac{M + 2S(\cos\theta_x + \cos\theta_y) + 4K(\cos\theta_x \cos\theta_y)}{M+4(S+K)} \right] \Phi_{\text{исх}}(\ell_x, \ell_y), \quad (B.9)$$

где $\theta_x = \ell_x \Delta x$, $\theta_y = \ell_y \Delta y$. Член в квадратных скобках является сглаживающим множителем.

Различные фильтры обозначаются величинами (M , S , K). Применение полого восьмиточечного фильтра (0, 1, 1) [Hockney, 1971; Hockney, Eastwood, 1981] может дать разумный способ пространственного усреднения, однако его Фурье-представление становится отрицательным примерно посреди первой зоны ($0 < \vartheta_x, \vartheta_y < \pi$). Это может привести к нефизическим эффектам и в том числе к серьезным неустойчивостям, см. задачу 4.11 и работу [Langdon, Birdsall, 1970].

Применение сначала биномиального по x , а затем биномиального по y шаблонов

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

определяет биномиальный девятиточечный фильтр, Фурье-представление которого почти изотропно и демонстрирует отличное сглаживание. Шаблон имеет вид

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}.$$

Каждый шаг цикличен, поэтому Фурье-представление является произведением функций ϑ_x и ϑ_y , т. е. $(\cos \vartheta_x/2)^2 (\cos \vartheta_y/2)^2$. В ZOHAR эта фильтрация осуществляется за четыре прохода

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

— соответственно вперед, назад, вверх и вниз, что без привлечения дополнительной памяти дает тот же результат. Подходящими компенсаторами являются (20, -1, -1) или (36, -6, 1)

Г. ПРЯМОЕ РЕШЕНИЕ КОНЕЧНО-РАЗНОСТНЫХ УРАВНЕНИЙ

В этом приложении мы получим решения одномерных (§ 2.5) и двухмерных (см. § 14.5) конечно-разностных представлений уравнений $\nabla^2 \Phi = -\rho$ и $\nabla \cdot E = \rho$.

Пусть уравнение Пуассона записано в виде

$$\Phi_{j-1} - 2\Phi_j + \Phi_{j+1} = p_j, \quad (\Gamma.1)$$

где

$$p_j \equiv -(\Delta x)^2 \rho_j. \quad (\Gamma.2)$$

Задача состоит в вычислении Φ_j из p_j и граничных или каких-либо еще (например, зарядовая нейтральность $\sum p_j = 0$) условий. Пусть система длиной L (от $x=0$ до $x=L$)

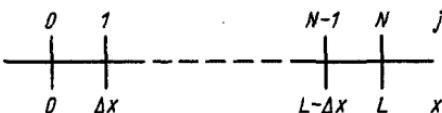


Рис. Г.1. Нумерация сетки для N ячеек

разделена на N ячеек (рис. Г.1). Коэффициенты 1, -2, 1 образуют квадратную

матрицу A , неизвестные величины ϕ_j образуют столбец ϕ , а известные p_j — столбец p . Следовательно, для нахождения ϕ нужно решить уравнение $A\phi = p$.

В модели, ограниченной электродами, заданы значения $\phi_0 = V_0$ и $\phi_N = V_L$. Система не обязана быть нейтральной по заряду. При $j=1, 2, \dots, N-1$ для получения ϕ_j нужны величины p_j с теми же значениями j . Матричное уравнение $A\phi = p$ имеет вид

$$\begin{bmatrix} -2 & 1 & & \\ 1 & -2 & 1 & \\ & 1 & -2 & 1 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & & 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \vdots \\ \phi_{N-2} \\ \phi_{N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_1 - V_0 \\ p_2 \\ p_3 \\ \vdots \\ p_{N-1} - V_L \end{bmatrix}. \quad (\text{Г.3})$$

В этой системе $N-1$ неизвестное ϕ_j и $N-1$ независимое уравнение. Следовательно, можно использовать любой метод решения (например, приспособленное для трехдиагональных матриц исключение Гаусса [Potter, 1973]). Простое решение рассмотрено в задаче Г.1.

В периодической модели значения E и ρ повторяются на расстоянии L и, как отмечалось в § 4.11, полный заряд системы равен нулю:

$$N \langle \rho \rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \rho_j = \sum_{j=1}^N \rho_j = 0. \quad (\text{Г.4})$$

При условии периодичности ($\phi_0 = \phi_N$, $\phi_{-1} = \phi_{N-1}$ и т. д.) матричная система содержит одно лишнее уравнение — из равенства нулю суммы в левой части (Г.4) следует, что набор из N уравнений не является независимым. Опустим поэтому одно из уравнений системы, например с ρ_0 или ρ_N . В результате остается система

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & & \\ & 1 & -2 & 1 & \\ & & 1 & -2 & . \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & & 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_0 \\ \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_{N-2} \\ \phi_{N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \\ \vdots \\ p_{N-1} \end{bmatrix}, \quad (\text{Г.5})$$

которая отличается от (Г.8) только левым столбцом. Подобные системы уравнений обсуждаются в работе [Temperton, 1975]. Мы не знаем величины ϕ_0 , но нам она и не нужна — при перемещении частиц используется только $\nabla\phi$. Можно, следовательно, придать ϕ_0 определенное значение (называемое смещением) и найти $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{N-1}$ и тем самым $\nabla\phi$. Простейшее смещение — это $\phi_0=0$, при этом левый столбец A зануляется и система (Г.5) принимает вид (Г.3) с $V_0=0=V_L$. Другой выбор смещения $\langle\phi\rangle=0$ соответствует способу решения, принятому в ES1, — при этом $\phi(\ell=0)=0$. Электростатическая энергия (модель периодична, зарядов на стенах нет)

$$W_E \equiv \frac{\Delta x}{2} \sum_{j=0}^{N-1} \rho_j \phi_j \quad (\text{Г.6})$$

не зависит от выбора смещения. Если в (Г.6) подставить решение (Г.5), имеющее вид $\phi_j=\phi_j$ (ист.) + ($\phi_0+\text{const}$), то, поскольку $\langle \rho \rangle=0$,

$$W_E = \frac{\Delta x}{2} \sum \rho_j \phi_j \text{ (ист.)} + \frac{\Delta x}{2} (\phi_0 + \text{const}) \sum \rho_j = \quad (\text{Г.7})$$

$$= \frac{\Delta x}{2} \sum \rho_j \phi_j \text{ (ист.).} \quad (\text{Г.8})$$

К потенциалам, вычисленным по расположенным на одном периоде зарядам, можно прибавить решение однородного уравнения $\nabla^2\phi=0$. Можно представить себе, что этот добавочный потенциал обусловлен равными и противоположными по знаку зарядами, расположенными при $x=\pm\infty$ (или двойными слоями при $x=0, L, 2L$ и т. д.).

Но можно вычислять E , непосредственно интегрируя (см. § 2.14) от точки к точке (используя закон Гаусса):

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}} \frac{\partial E}{\partial x} dx = \int_{x_j}^{x_{j+1}} \rho dx. \quad (\text{Г.9})$$

При помощи правила трапеций для правой части (Г.9) получаем

$$E_{j+1} - E_j = \frac{\rho_{j+1} + \rho_j}{2} \Delta x. \quad (\text{Г.10})$$

Заметим, что E и ρ задаются в одних и тех же узлах сетки, т. е. E - и ρ -сетки не являются смещенными или переплетенными. Для полноты нужно задать то или иное граничное значение для E [поскольку (2.12) — дифференциальное уравнение первого порядка]. Например, в случае ограниченной пространственным зарядом эмиссии при $x=0$ следует выбрать $E_0=0$. Для

периодической модели необходимо, чтобы $E_0 = E_N$, при этом, суммируя (Г.10) от $j=0$ до $N-1$, мы снова получаем (Г.4). Найти E можно, положив сначала $E_0=0$ и применив (Г.10). Получившееся среднее поле

$$\langle E \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} E_j = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N E_j \quad (\text{Г.11})$$

теперь уже не равно нулю. Если же мы хотим, чтобы поле $\langle E \rangle$ равнялось нулю, то от каждого E_j нужно отнять определяемую при помощи (Г.11) величину. Новые поля удовлетворяют уравнению (Г.10), и если снова вычислить (Г.11), то окажется, что $\langle E \rangle=0$. Похожая процедура использовалась в работе [Denavit, Kruer, 1980], где сначала вычислялась величина

$$E_0 = -\frac{\Delta x}{2N} \sum_{s=0}^{N-1} \sum_{j=0}^s (\rho_j + \rho_{j+1}), \quad (\text{Г.12})$$

что обеспечивало $\langle E \rangle=0$, а затем осуществлялась прогонка вдоль системы.

Таким же образом записываются конечно-разностные уравнения и для двухмерных задач. Если конфигурация допускает использование быстрого преобразования Фурье по одному из направлений, то система преобразованных уравнений трехдиагональна и ее можно решить при помощи исключения Гаусса или каким-либо еще методом. Уравнение Пуассона из § 14.5 имеет вид

$$\Phi_{j+1} - 2d\Phi_j + \Phi_{j-1} = p_j. \quad (\text{Г.13})$$

Для модели, ограниченной электродами под фиксированными потенциалами $\Phi_0 = V_0$ и $\Phi_N = V_L$, исключение Гаусса можно осуществить следующим образом [Forsythe, Wasow, 1960]. Пусть источники (заданные) определяются соотношениями

$$s_1 = p_1 - V_0, \dots; s_n = p_n, \dots; s_{N-1} = p_{N-1} - V_L. \quad (\text{Г.14})$$

Исключение вперед:

$$w_1 = (-2d)^{-1}; w_{n+1} = (-2l - w_n)^{-1}, \quad n = 1, 2, \dots, N-2, \quad (\text{Г.15})$$

$$g_1 = s_1 w_1; g_{n+1} = (s_{n+1} - g_n) w_{n+1}, \quad n = 1, 2, \dots, N-2. \quad (\text{Г.16})$$

Обратная подстановка:

$$\Phi_{N-1} = g_{N-1}; \quad \Phi_n = g_n - w_n \Phi_{n+1}, \quad n = N-2, N-3, \dots, 1. \quad (\text{Г.17})$$

Разумеется, эта процедура работает и для уравнения Пуассона в 1d, когда $d=1$ (см. задачу Г.1).

Задачи

Г.1. Для решения (Г.3) умножьте последнее уравнение на 1, предпоследнее на 2 и т. д., затем сложите все уравнения и покажите, что

$$\phi_1 = \frac{V_0(N-1) + V_L}{N} - \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N-1} np_{N-n}. \quad (\text{Г.18})$$

Следовательно, ϕ_2 можно вычислить из первого уравнения, ϕ_3 из второго и т. д. Переписывая сумму в виде

$$\sum_{m=1}^{N-1} p_m(N-m), \quad (\text{Г.19})$$

покажите, что для периодической модели с нулевым смещением ($V_0 = V_L = 0$)

$$\phi_1 = \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N mp_m. \quad (\text{Г.20})$$

Этот результат согласуется с результатом работы [Hockney, Eastwood, 1981].

Г.2. Получите (Г.12).

Г.3. Покажите, что если E вычисляется из ϕ с шагом $2\Delta x$, то уравнение (Г.10) эквивалентно (Г.1).

Д. ЛОКАЛЬНЫЕ И НЕЛОКАЛЬНЫЕ РАЗНОСТНЫЕ ОПЕРАТОРЫ ($\nabla \rightarrow i\ell$, $\nabla^2 \rightarrow -\ell^2$)

При численном решении задач физики плазмы дифференциальное уравнение часто преобразуют в конечно-разностное, определенное на пространственной (или временной) сетке. Для осуществления такого преобразования нужно выбрать подходящие разностные операторы, причем необходимо знать привносимые или локальные и нелокальные эффекты. Например, первая производная функции f в j -м узле сетки определяется следующим образом:

$$(\hat{D}_L f)_j = \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{2\Delta x}, \quad (\text{Д.1})$$

где шляпка обозначает оператор, а индекс L — локальность.

Разностные операторы являются линейными. Такой оператор, следовательно, можно записать в виде

$$(\hat{K} f)_i = \sum_{j=1}^N K(i-j)f_j, \quad (\text{Д.2})$$

где $K(j)$ — определенные коэффициенты, и для системы длиной L узлы сетки занумерованы от 1 до N . Набор коэффициентов $\{K(j)\}$ является представлением оператора \hat{K} в конфигурационном пространстве.

Возвращаясь к примеру (Д.1), видим, что представление в конфигурационном пространстве оператора первой производной \hat{D}_L имеет вид

$$D_L(j) = \begin{cases} \frac{1}{2\Delta x} & j = +1; \\ -\frac{1}{2\Delta x} & j = -1; \\ 0 & |j| \neq 1. \end{cases} \quad (\text{Д.3})$$

Оператор первой производной \hat{D}_L является примером локального оператора, т. е. производная функции в j -м узле сетки зависит только от значений функции в ближайших узлах.

При работе в конфигурационном пространстве выражать производные как локальные операторы следует по двум важным причинам. В непрерывном пространстве производная функции определяется локально. При моделировании непрерывной системы дискретной хотелось бы сохранить локальный характер производной. Особенно это желательно вблизи границ или отмеченных внутренних неоднородностей. Кроме того, решать систему конечно-разностных уравнений, которые содержат только локальные разностные операторы, проще.

Мощным методом решения линейных конечно-разностных уравнений является преобразование Фурье. При помощи теоремы о свертке можно показать, что линейный оператор \hat{K} в (Д.3) преобразуется в

$$(\hat{K}f)_k = K(k)f_k, \quad (\text{Д.4})$$

где f_k — комплексная амплитуда Фурье, а $K(k)$ — представление оператора \hat{K} в k -пространстве. Функция $K(k)$ связана с представлением того же оператора в конфигурационном пространстве:

$$K(k) = \sum_{j=1}^N K(j) \exp\left(-ik\frac{2\pi}{N}j\right). \quad (\text{Д.5})$$

Величина k принимает целые значения, соответствующее волновое число равно $k(2\pi/L)$. Из (Д.5) следует, что представление любого линейного оператора \hat{K} в k -пространстве является периодической функцией k с периодом N .

Используем уравнение (Д.5) для получения представления в k -пространстве оператора первой производной D_L (Д.1). Имеем

$$D_L(k) = ik\frac{2\pi}{L} \operatorname{dif}\frac{2\pi k}{N}, \quad (\text{Д.6})$$

где дифракционная функция определена как

$$\text{dif}(x) \equiv \frac{\sin x}{x}. \quad (\text{Д.7})$$

Если уж мы собрались решать систему конечно-разностных уравнений в \mathbb{k} -пространстве, то локальные операторы не имеют при вычислении больше никаких преимуществ перед нелокальными.

Часто предлагается использовать «точное» выражение

$$D_E(\mathbb{k}) \equiv i\mathbb{k} \frac{2\pi}{L} \quad (\text{Д.8})$$

в качестве представления первой производной в \mathbb{k} -пространстве. Аналогично «точную» вторую производную следовало бы представить в виде

$$D_E^2(\mathbb{k}) = -\mathbb{k}^2 \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2. \quad (\text{Д.9})$$

Строго говоря, эти выражения нельзя считать представлениями операторов производных первого и второго порядков — они не являются периодическими функциями \mathbb{k} . Трудностей можно избежать, если предположить, что \mathbb{k} -представления первой и второй производных определяются выражениями (Д.8) и (Д.9) в первой зоне Бриллюэна (т. е. при $-N/2 < \mathbb{k} \leq N/2$). Для других значений \mathbb{k} представления этих операторов определяются по периодичности.

Эти представления первой и второй производных широко используются [Matsuda, Okuda, 1975; Vineman, 1976]. Часто утверждается, что при работе с этими «точными» операторами не возникает никаких вычислительных погрешностей, тогда как локальные операторы типа (Д.1) погрешности содержат. Это неправильное заключение следует из слишком упрощенного подхода к анализу погрешностей. При моделировании методом частиц корректный анализ точности разностных операторов сильно усложнен тем, что плотности заряда и тока определены между узлами сетки (при помощи фазовых переменных частиц). Это приводит к рассмотренным в гл. 8 наложениям. В любом случае ясно, что при представлении непрерывной функции (например, плотности заряда или электростатического потенциала) ее значениями на дискретной сетке теряется множество информации. Если используются «точные» разностные операторы, эта потеря информации приводит к сильно нелокальным представлениям первой и второй производных.

Хотя вычислительных преимуществ при работе в \mathbb{k} -пространстве у локальных операторов перед нелокальными нет, физика, которая моделируется конечно-разностными уравнения-

ми, часто определяется локальными явлениями. Полезно поэтому знать конфигурационные представления разностных операторов. Из (Д.5) и свойства ортогональности дискретного преобразования Фурье следует, что конфигурационное представление линейного оператора связано с представлением в \mathcal{E} -пространстве соотношением

$$K(j) = \frac{1}{N} \sum_{j=-N/2+1}^{N/2} K(\mathcal{E}) \exp\left(i\mathcal{E} \frac{2\pi}{N} j\right). \quad (\text{Д.10})$$

Следовательно, конфигурационные представления «точных» операторов производных равны

$$D_E(j) = \begin{cases} \frac{(-1)^j}{j\Delta x} \frac{j\pi/N}{\operatorname{tg} j\pi/N} & j \neq 0; \\ 0 & j = 0; \end{cases} \quad (\text{Д.11})$$

$$D_E^2(j) = \begin{cases} \frac{(-1)^j}{(j\Delta x)^2} \frac{-2}{\operatorname{dif}^2(j\pi/N)} & j \neq 0; \\ -\frac{\pi^2}{3} \frac{1}{\Delta x^2} \left(1 + \frac{2}{N^2}\right) & j = 0. \end{cases} \quad (\text{Д.12})$$

Важно осознавать, что эти «точные» производные являются очень нелокальными операторами. Из (Д.11) и (Д.12) видно, что производная функции в j -м узле сетки зависит от значения функции в любом другом узле системы.

Полезно записать «точные» производные в конфигурационном пространстве. После перегруппировки членов получаем

$$(D_E f)_i = \sum_{j=1}^{N/2} \frac{f_{i+j} - f_{i-j}}{2j\Delta x} W_1(j), \quad (\text{Д.13})$$

где весовая функция

$$W_1(j) = 2(-1)^j \frac{j\pi/N}{\operatorname{tg}(j\pi/N)}. \quad (\text{Д.14})$$

Соотношение (Д.13) указывает, что «точную» производную можно интерпретировать как взвешенное среднее всевозможных центральных разностей. Весовая функция, при помощи которой производится усреднение, спадает очень медленно с увеличением интервала, из которого берутся эти разности. Так, для определения значения «точной» производной центральная разность на половине длины системы почти так же важна, как локальная разность (Д.1).

Похожие рассуждения показывают, что «точную» вторую производную можно записать в конфигурационном пространстве в виде

Рис. Д.1. Абсолютные значения использованных в (Д.14) и (Д.16) функций веса. Величина $|W_1|$ медленно спадает с увеличением разностного интервала, тогда как $|W_2|$ увеличивается, демонстрируя тем самым нелокальную природу «точных» разностных операторов

$$(D_E^2 f)_i = \sum_{j=1}^{N/2} \frac{f_{i+j} - 2f_i + f_{i-j}}{(j\Delta x)^2} W_2(j), \quad (\text{Д.15})$$

где весовая функция

$$W_2(j) = 2(-1)^j \operatorname{dif}^{-2} \frac{j\pi}{N}. \quad (\text{Д.16})$$

Весовые функции $W_1(j)$ и $W_2(j)$ изображены на рис. Д.1. В ES1 $\phi(\ell)$ вычисляется из $\rho(\ell)$ при помощи соотношения

$$\phi(\ell) = \frac{\rho(\ell)}{K^2(\ell)},$$

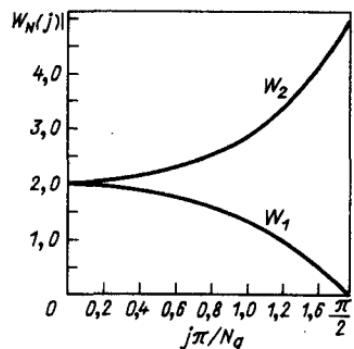
где для получения нужных результатов $K^2(\ell)$ можно свободно выбирать в первой зоне Бриллюэна. Однако на самом деле функция K^2 выбирается так, чтобы она давала представление Фурье трехточечной конечной разности для ∇^2 , т. е.

$$\frac{\Phi_{j-1} - 2\Phi_j + \Phi_{j+1}}{(\Delta x)^2} \text{ дает } K^2(\ell) = \ell^2 \operatorname{dif}^2 \frac{\ell \Delta x}{2}. \quad (\text{Д.17})$$

Если эту функцию $K^2(\ell)$ преобразовать при помощи (Д.10), то, разумеется, получится левая часть (Д.17)—локальная вторая производная с относительной погрешностью $O(\ell^2)$.

Урок, который из всего этого можно извлечь, заключается в том, что не существует идеального выбора конечно-разностного оператора. Всегда приходится идти на компромисс и выбирать разностный оператор в соответствии с изучаемой проблемой. В приближенно однородных системах нелокальный характер «точных» производных, возможно, и не приводит к осложнениям, и эти выражения для производных можно применять. Если изучаемая система неоднородна, то важно сохранить локальный характер производных. Поэтому в неоднородных системах лучше взять локальный разностный оператор типа \hat{D}_L .

Это обсуждение не ставит своей целью определить выбор того или иного алгоритма для ∇ или ∇^2 или для взвешивания частиц—истинная проверка заключается в воспроизведении правильных физических эффектов, например в получении правильной силы или нужной дисперсии, которая зависит от комбинации всех факторов. В лучшем случае методы крупных



частич дают правильную силу только на больших расстояниях, а колебания и волны — на больших длинах волн. Работа создателя программы заключается в воспроизведении этих эффектов при минимальных затратах машинной памяти и времени. Нам представляется, что среди различных возможностей [сокращенные дипольные коды с сильным сглаживанием при $\kappa\Delta x \approx \pi/2$; коды Фурье ($\nabla \rightarrow i\kappa$, $\nabla^2 \rightarrow -\kappa^2$ с нелокальными производными), использующие взвешивание частиц высокого порядка (типа квадратичных сплайнов); коды с линейным взвешиванием (CIC, PIC), использующие или локальные производные, или их Фурье-представления и сглаживание при больших $\kappa\Delta x$] для получения хорошей точности, высокой скорости и максимального использования имеющихся узлов сетки в общем предпочтительнее последняя.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Abe H., Miyamoto J., Itatani R.** Grid effects on the plasma simulation by the finite-sized particle. *J. Comput. Phys.* 19, 134-149, October 1975.
- * **Abramovitz M., Stegun I.** *Handbook of Mathematical Functions*, Nat'l Bureau of Standards. Appl. Math. Series 55, U.S. Government Printing Office, Wash., D. C., 1964.
- Adam J. C., Gonrdin Serveniere A., Mora P., Pellat R.** Effect of collisions on dc magnetic field generation in a plasma by resonance absorption of light. *Phys. Fluids* 25, 812-814, May 1982a.
- Adam J. C., Gonrdin Serveniere A., Langdon A. B.** Electron sub-cycling in particle simulation of plasmas. *J. Comput. Phys.* 47, 229-244, August 1982b.
- Aizawa M., Ohsawa Y., Sato K., Kamimura T., Sekiguchi T.** Particle simulation studies on behavior of rapidly-expanding high-beta plasma column in a uniform magnetic field. *Japanese Jour. of Appl. Phys.* 19, 2211-2227, November 1980.
- Albritton J. R., Langdon A. B.** Profile modification and hot electron temperature from resonant absorption. *Phys. Rev. Lett.* 45, 1794-1797, December 1980.
- Alder B., Fernbach S., Rotenberg M.** *Meth. Comput. Phys.* 9, Plasma Physics, Academic, New York, 1970.
- Auer P. L., Hurwitz H., Kilb R. W.** Low Mach number magnetic compression waves in a collision-free plasma, *Phys. Fluids* 4, 1105-1121, September 1961.
- Auer P. L., Hnrwitz H., Kilb R. W.** Large-amplitude magnetic compression of a collision-free plasma. II. Development of a thermalized plasma. *Phys. Fluids* 5, 298-316, March 1962.
- Baldis H. A., Walsh C. J.** Growth and saturation of the two-plasmon decay instability. *Phys. Fluids* 26, 1364-1375, May 1983.
- Balescu R.** Irreversible processes in ionized gasses. *Phys. Fluids* 3, 52-63, February 1960.
- Barnes D. C., Kamimura T., Le Boeuf J.—N., Tajima T.** Implicit particle simulation of magnetized plasmas. *J. Comput. Phys.* 52, 480-502, December 1983.
- Berman R. H., Tetreault D. J., Dupree T. H., Bontros-Ghali T.** Computer simulation of nonlinear ion-electron instability. *Phys. Rev. Lett.* 48, 1249-1252, May 1982.
- Bernstein I. B.** Waves in a plasma in a magnetic field. *Phys. Rev.* 109, 10-21, January 1958.
- Bers A.** *Linear Waves and Instabilities. Plasma Physics*, Les Houches, 1972, section XXII, Gordon and Breach, New York, 1975.
- Birdsall C. K.** Interaction Between Two Electron Streams for Microwave Amplification, Ph. D. Dissertation, Stanford University, Stanford Electronic Research Laboratory Report 36, June 1951.
- Birdsall C. K.** Sheath formation and fluctuations with dynamic electrons and ions, International Conference on Plasma Physics, Goteborg, Sweden, June 1982.
- Birdsall C. K., Bridges W. B.** *Electron Dynamics of Diode Regions*, Academic, New York, 1966.
- Birdsall C. K., Fuss D.** Cloud-in-cell computer experiments in two and three dimensions. Proc. Second Conf. Num. Sim. Plasmas, Los Alamos Sci. Labs. LA-3990, 18-20 September 1968.
- Birdsall C. K., Langdon A. B., McKee C. F., Okuda H., Wong D.** Theory and experiments for a plasma consisting of clouds interacting with clouds (CIC) with and without a spatial grid, Proc. Second Conf. Num. Sim. Plasmas, Los Alamos Sci. Labs. LA-3990, 18-20 September 1968.
- Birdsall C. K., Fuss D.** Clouds-in-clouds, clouds-in cells physics for many-body simulation. *J. Comput. Phys.* 3, 494-511, April 1969.

- Birdsall C. K., Maron N., Smith G.** Cold beam nonphysical instabilities and cures. Proc. Seventh Conf. Num. Sim. Plasmas, New York Univ., NY, 2-4 June 1975.
- Birdsall C. K., Maron N.** Plasma self-heating and saturation due to numerical instabilities. J. Comput. Phys. 36, 1-9, June 1980.
- Biskamp D., Welter H.** Ion heating in high-mach-number, oblique, collisionless shock waves. Phys. Rev. Lett. 28, 410-413, February 1972.
- Biskamp D., Chodura R.** Collisionless dissipation of a cross-field electric current. Phys. Fluids 16, 893-901, June 1973.
- Biskamp D., Welter H.** Stimulated Raman scattering from plasmas irradiated by normally and obliquely incident laser light. Phys. Rev. Lett. 34, 312-316, February 1975.
- Blackman R., Tukey J. W.** The Measurement of Power Spectra, Dover, New York, 1958.
- Boris J. P.** The acceleration calculation from a scalar potential. Plasma Physics Laboratory, Princeton University MATT-152, March 1970a.
- Boris J. P.** Relativistic plasma simulation-optimization of a hybrid code. Proc. Fourth Conf. Num. Sim. Plasmas, Naval Res. Lab., Wash. D. C., 3-67, 2-3 November 1970b.
- Boris J. P., Roberts K. V.** Optimization of particle calculations in 2 and 3 dimensions. J. Comput. Phys. 4, 552-571, December 1969.
- Boris J. P., Lee R.** Nonphysical self forces in some electromagnetic plasma-simulation algorithms. J. Comput. Phys. 12, 131-136, May 1973.
- Boyd G., Field L. M., Could R.** Excitation of plasma oscillations and growing plasma waves. Phys. Rev. 109, 1393-1394, February 1958.
- Brackbill J. U., Forslund D. W.** An implicit method for electromagnetic plasma simulation in two dimensions. J. Comput. Phys. 46, 271-301, May 1982.
- Brackbill J. U., Forslund D. W.** Simulation of low frequency electromagnetic phenomena in plasmas, in the volume Multiple Time Scales, in the series Computational Techniques, Academic, New York, 1985.
- Brand L.** Vector Analysis, Wiley, New York, 1957.
- Briggs R. J.** Two-stream instabilities, Advances on Plasma Physics 4, A. Simon and W. B. Thompson, eds, J. Wiley and Sons, Inc., p. 43-78, 1971.
- Brillouin L.** Wave Propagation in Periodic Structures, Dover, New York, 1953.
- Brown D. I., Gitomer S. J., Lewis H. R.** The two-stream instability studied with four one-dimensional plasma simulation models. J. Comput. Phys. 14, 193-199, February 1974.
- Buneman O.** Dissipation of currents in ionized media. Phys. Rev. 115, 503-517, August 1959.
- Buneman O.** Instability of electrons drifting through ions across a magnetic field. J. Nucl. Energy, Part C (Plasma Physics) 4, 111-117, 1962.
- Buneman O.** Time reversible difference procedures. J. Comput. Phys. 1, 517-535, June 1967.
- Buneman O.** Fast numerical procedures for computer experiments on relativistic plasmas. Relativistic Plasmas (The Coral Gables Conference, University of Miami), O. Buneman, W. Pardo, eds., Benjamin, New York, 205-219, 1968.
- Buneman O.** Subgrid Resolution of Flow and Force Fields. J. Comput. Phys. 11, 250-268, February 1973a.
- Buneman O.** Inversion of the Helmholtz (or Laplace-Poisson) operator for slab geometry. Comput. Phys. 12, 124-130, May 1973b.
- Buneman O.** The advance from 2d electrostatic to 3d electromagnetic particle simulation. Computer Phys. Comm. 12, 21-31, 1976.
- Buneman O., Dunn D.** Computer experiments in plasma physics. Science Journal 2, 34-43, July 1966.
- Buneman O. C., Barnes C. W., Green J. C., Nielson D. E.** Principles and capabilities of 3d, E-M particle simulations. J. Comput. Phys. 38, 1-44, November 1980.
- Burger P., Dunn D. A., Halsted A. S.** Computer experiments on the randomization of electrons in a collisionless plasma. Phys. Fluids 8, 2263-2272, December 1965.

Busnardo-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.* 23, 300-312, March 1977.

Byers J. A. Noise suppression techniques in macroparticle models of collisionless plasmas. *Proc. Fourth Conf. Num. Sim. Plasmas*, Naval Res. Lab., Wash., D. C., 496-510, 2-3 November 1970.

Byers J. A., Grewal M. Perpendicularly propagating plasma cyclotron instabilities simulated with a one-dimensional computer model. *Phys. Fluids* 13, 1819-1830, July 1970.

Byers J. A., Holdren J. P., Killeen J., Langdon A. B., Mirin A. A., Rensink M. E., Tull C. G. Computer simulation of pulse trapping and stacking of relativistic electron layers in astron. *Phys. Fluids* 17, 2061-2080, November 1974.

Byers J. A., Cohen B. I., Condit W. C., Hanson J. D. Hybrid simulations of quasineutral phenomena in magnetized plasma. *J. Comput. Phys.* 27, 363-396, June 1978.

Chen, Liu, Birdsall C. K. Heating of magnetized plasmas by a large-amplitude low-frequency electric field. *Phys. Fluids* 16, 2229-2240, December 1973.

Chen, Liu, Langdon A. B., Birdsall C. K. Reduction of grid effects in simulation plasmas. *J. Comput. Phys.* 14, 200-222, February 1974.

Chen, Liu, Hideo Okuda. Theory of plasma simulation using multipole expansion scheme. *J. Comput. Phys.* 19, 339-352, December 1975.

Chen Y.—J., Birdsall C. K. Lower-hybrid drift instability saturation mechanisms in one-dimensional simulations. *Phys. Fluids* 26, 180-189, January 1983.

Chen Y.—J., Nevins W. M., Birdsall C. K. Stabilization of the lower-hybrid drift instability by resonant electrons. *Phys. Fluids* 26, 2501-2508, September 1983.

Chodorow M., Susskind C. Fundamentals of Microwave Electronics. McGraw-Hill, New York, 1964.

Christiansen J. P., Taylor J. B. Numerical simulation of guiding center plasma. *Plasma Phys.* 15, 585-597, 1973.

Cohen B. I. Theoretical studies of some nonlinear laserplasma interactions, Ph. D. thesis, University of California, Berkeley, C. A., August 1975.

Cohen B. I., Mostrom M. A., Nicholson D. R., Kaufman A. N., Max C. E., Langdon A. B. Simulation of laser beat heating of a plasma. *Phys. Fluids* 18, 470-474, April 1975.

Cohen B. I., Maron N. Simulation of drift-cone modes. *Phys. Fluids* 23, 974-980, May 1980.

Cohen B. I., Brengle T. A., Conley D. B., Freis R. P. An orbit-averaged particle code. *J. Comput. Phys.* 38, 45-63, November 1980.

Cohen B. I., Freis R. P., Thomas V. Orbit-averaged implicit particle codes. *J. Comput. Phys.* 45, 345-366, March 1982a.

Cohen B. I., Freis R. P. Stability and application of an orbit-averaged magneto-inductive particle code. *J. Comput. Phys.* 45, 367-373, March 1982.

Cohen B. I., Langdon A. B., Friedman A. Implicit time integration for plasma simulation. *J. Comput. Phys.* 46, 15-38, April 1982b.

Cohen B. I., Smith G. R., Maron N., Nevins W. M. Particle simulations of ion-cyclotron turbulence in a mirror plasma. *Phys. Fluids* 26, 1851-1865, July 1983.

***Collatz L.** The Numerical Treatment of Differential Equations, Springer-Verlag, New York, 1966.

Cooley J. W., Lewis P. A. W., Welch P. D. The fast Fourier transform algorithm: Programming considerations in the calculation of sine, cosine and Laplace transforms. *J. Sound Vib.* 12, 315-337, 1970.

Grawford F. W., Tataronis J. A. Absolute instabilities of perpendicularly propagating cyclotron harmonic plasma waves. *J. Appl. Phys.* 36, 2930-2934, September 1965.

Crume E. C., Meier H. K., Eldridge O. Nonlinear stabilization of single, resonant, loss-cone flute instabilities. *Phys. Fluids* 15, 1811-1821, October 1972.

Davidson R. C., Hammer D. A., Haber I., Wagner C. E. Nonlinear development of electromagnetic instabilities in anisotropic plasmas. *Phys. Fluids* 15, 317-333, February 1972.

Dawson J. M. Plasma oscillations of a large number of electron beams. Phys. Rev. 118, 381-389, April 1960.

Dawson J. M. One-dimensional plasma model. Phys. Fluids 5, 445-459, April 1962.

Dawson J. M. Thermal relaxation in a one-species, one-dimensional plasma. Phys. Fluids 7, 419-425, March 1964.

Dawson J. M. The electrostatic sheet model for plasma and its modification to finite-size particles. Meth. Comput. Phys. 9, 1-28, V. Alder, S. Fernbach, M. Rotenberg, eds., Academic, New York, 1970.

Dawson J. M. Particle simulations of plasmas. Rev. Mod. Phys. 55, 403-447, April 1983.

Dawson J. M., Nakayama T. Kinetic structure of a plasma. Phys. Fluids 9, 252-264, February 1966.

Dawson J. M., Okuda H., Rosen B. Collective transport in plasmas. Meth. Comput. Phys. 16, 281-325, B. Alder, S. Fernbach, M. Rotenberg, J. Killeen, eds., Academic, New York, 1976.

Decyk V. K. Energy conservation theorem for electrostatic systems. Phys. Fluids 25, 1205-1206, July 1982.

Denavit J. Numerical simulation of plasmas with periodic smoothing in phase space. J. Comput. Phys. 9, 75-98, February 1972.

Denavit J. Discrete particle effects in whistler simulation. J. Comput. Phys. 15, 449-475, August 1974.

Denavit J. Collisionless plasma expansion into a vacuum. Phys. Fluids 22, 1384-1392, July 1979.

Denavit J. Pitfalls in Particle Simulations and in Numerical Solutions of the Vlasov Equation, in Methoden und Verhaften de Mathematischen Physik 20, 247-269, Peter Lang., 1980.

Denavit J. Time filtering particle simulations with J. Comput. Phys. 42, 337-366, August 1981.

Denavit J., Kruer W. L. Comparison of numerical solutions of the Vlasov equation with particle simulation of collisionless plasmas. Phys. Fluids 14, 1782-1791, August 1971.

Denavit J., Kruer W. L. How to get started in particle simulation. Comments Plasma Phys. Control. Fusion 6, 35-44, April 1980.

Denavit J., Walsh J. M. Nonrandom initializations of particle codes. Comments Plasma Phys. Control. Fusion 6, 209-223, September 1981.

Dickman D. O., Morse R. L., Nielson C. W. Numerical simulation of axisymmetric, collisionless, finite- plasma. Phys. Fluids 12, 1708-1716, August 1969.

Dory R. A., Guest G. E., Harris E. G. Unstable electrostatic plasma waves propagating perpendicular to a magnetic field. Phys. Rev. Lett. 14, 131-133, February 1965.

Drummond W. E., Malmberg J. H., O'Neil T. M., Thompson J. R. Nonlinear development of the beam-plasma instability. Phys. Fluids 13, 2422-2425, September 1970.

Dum C. T., Chodnra R., Biskamp D. Turbulent heating and quenching of the ion-sound instability. Phys. Rev. Lett. 32, 1231-1234, 3 June 1974.

Dunn D. A., Ho I. T. Computer experiments on ion-beam neutralization with initially cold electrons, Stanford Electronics Research Laboratory SEL-73-046, Stanford, CA, April 1963.

Dupree T. H. Growth of phase-space density holes. Phys. Fluids 26, 2460-2481, September 1983.

Eastwood J. W., Hockney R. W. Shaping the force law in two-dimensional particle-mesh models. J. Comput. Phys. 16, 342-359, December 1974.

Ebrahim N. A., Baldis H., Joshi C., Benesch R. Phys. Rev. Lett. 45, 1179, 1979.

Eldridge O. C., Feix M. One-dimensional plasma model at thermodynamic equilibrium. Phys. Fluids 5, 1076-1080, September 1962a.

Eldridge O. C., Feix M. Fokker-Planck coefficients for a one-dimensional plasma. Phys. Fluids 5, 1307-1308, October 1962b.

Eldridge O. C., Feix M. Numerical experiments with a plasma model. *Phys. Fluids* 6, 398-406, March 1963.

Emmert G. A., Wieland R. M., Morse A. T., Davidson J. N. Electric sheath and presheath in a collisionless, finite ion temperature plasma. *Phys. Fluids* 23, 803-812, April 1980.

Estabrook K. G., Valeo E. J., Kruer W. L. Two-dimensional relativistic simulations of resonance absorption. *Phys. Fluids* 18, 1151-1159, September 1975.

Estabrook K., Tull J. An 880 ns 1d electrostatic particle mover for the CDC 7600. *Proc. Ninth Conf. Num. Sim. Plasmas*, Northwestern Univ., Evanston, IL, 30 June-2 July 1980.

Feix M. R. Mathematical models of a plasma, in *Nonlinear Effects in Plasmas*, Gordon and Breach, New York, 1969.

Forslund D., Morse R., Nielson C., Fu J. Electron cyclotron drift instability and turbulence. *Phys. Fluids* 15, 1303-1318, July 1972a.

Forslund D. W., Kindel J. M., Lindman E. L. Parametric excitation of electromagnetic waves. *Phys. Rev. Lett.* 29, 249-252, July 1972b.

Forslund D. W., Kindel J. M., Lindman E. L. Nonlinear behavior of stimulated Brillouin and Raman scattering in laserirradiated plasmas. *Phys. Rev. Lett.* 30, 739-743, April 1973.

Forslund D. W., Kindel J. M., Lindman E. L., Morse R. L. Theory and simulation of resonance absorption in a hot plasma. *Phys. Rev. A* 11, 679-683, February 1975a.

Forslund D. W., Brackbill J. U. Magnetic field induced surface transport on laser irradiated foils. *Phys. Rev. Lett.* 48, 1614-1617, June 1982b.

***Forsythe G. E., Wasow W. R.** *Finite-Difference Methods for Partial Differential Equations*; Wiley, New York, 1960.

Fried B. D., Conte S. D. *Plasma Dispersion Function*, Academic, New York, 1961.

Friedberg J., Armstrong T. Nonlinear development of the two-stream instability. *Phys. Fluids* 11, 2669-2679, December 1968.

Friedman A., Langdon A. B., Cohen B. I. A direct method for implicit particle-in-cell simulation, *Comments Plasma Phys. Control. Fusion* 6, 225-236, September 1981.

Gentle K. W., Lohr J. Phase-space evolution of a trapped electron beam. *Phys. Rev. Lett.* 30, 75-77, January 1973a.

Gentle K. W., Lohr J. Experimental determination of the nonlinear interaction in a one dimensional beam-plasma system. *Phys. Fluids* 16, 1464-1471, September 1973b.

Gentleman W. M., Sande G. Fast fourier transforms—for fun and profit. *Proc. AFIPS, Fall Joint Computer Conf.* 29, 563-578, 1966.

Gitomer S. J. Comments on numerical simulation of the Weibel instability in one and two dimensions. *Phys. Fluids* 14, 1591-1592, July 1971.

Gitomer S. J., Adam J. C. Multibeam instability in a Maxwellian simulation plasma. *Phys. Fluids* 19, 719-722, May 1976.

Godfrey B. B. Numerical Cherenkov instabilities in electromagnetic particle codes. *J. Comput. Phys.* 15, 504-521, August 1974.

Godfrey B. B. Canonical momenta and numerical instabilities in particle codes. *J. Comput. Phys.* 19, 58-76, September 1975.

Godfrey B. B., Langdon A. B. Stability of the Langdon-Dawson advective algorithm. *J. Comput. Phys.* 20, 251-255, February 1976.

***Goldstein H.** *Classical Mechanics*, Addison-Wesley, Cambridge, MA, 1950.

Guernsey R. L. Kinetic equation for a completely ionized gas. *Phys. Fluids* 5, 322-328, March 1962.

Haber I., Lee R., Klein H. H., Boris J. P. Advances in electromagnetic plasma simulation techniques. *Proc. Sixth Conf. Num. Sim. Plasmas*, Lawrence Livermore Lab., Lawrence Berkeley Lab., Berkeley, CA, 46-48, 16-18 July 1973.

Haefl A. V. The electron-wave—a novel method of generation and amplification of microwave energy. *Proceedings of I.R.E.* 37, 4-10, January 1949.

Hammersley J. M., Handscomb D. C. Monte Carlo Methods, Methuen, London, 1964.

***Hamming R. W.** Numerical Methods for Scientists and Engineers, McGraw-Hill, New York, 1962.

***Hamming R. W.** Digital Filters, Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1977.

Harlow F. H. The particle-in-cell computing method for fluid dynamics. *Meth. Comput. Phys.* 3, 319-343, B. Alder, S. Fernbach, M. Rotenberg, eds., Academic, New York, 1964.

Harned D. S. Quasineutral hybrid simulation of macroscopic plasma phenomena. *J. Comput. Phys.* 47, 452-462, September 1982a.

Harned D. S. Kink instabilities in long ion layers. *Phys. Fluids* 25, 1915-1921, October 1982b.

Harris E. G. Unstable plasma oscillations in a magnetic field. *Phys. Rev. Lett.* 2, 34-36, January 1959.

Hasegawa A. Plasma Instabilities and Nonlinear Effects, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1975.

Hasegawa A., Birdsall C. K. Sheet-current plasma model for ion cyclotron waves. *Phys. Fluids* 7, 1590-1600, October 1964.

Hewett D. W. A global method of solving the electron-field equations in a zero-inertia-electron-hybrid plasma simulation code. *J. Comput. Phys.* 38, 378, December 1980.

Hewett D. W. Spontaneous development of toroidal magnetic field during formation of the field reversed theta pinch. *Nucl. Fusion* 24, 349-357, March 1984.

Hewett D. W., Nielson C. W. A multidimensional quasineutral plasma simulation model. *J. Comput. Phys.* 29, 219-236, 1978.

Hockney R. W. A fast direct solution of Poisson's equation using Fourier analysis. *J. Assoc. Comput. Mach.* 12, 219-236, January 1965.

Hockney R. W. Computer simulation of anomalous plasma diffusion and numerical solution of Poisson's equation. *Phys. Fluids* 9, 1826-1835, September 1966.

Hockney R. W. Characteristics of noise in a two-dimensional computer plasma. *Phys. Fluids II*, 1381-1383, June 1968.

Hockney R. W. The potential calculation and some applications. *Meth. Comput. Phys.* 8, 135-211, B. Alder, S. Fernbach, M. Rotenberg, eds., Academic, New York, 1970.

Hockney R. W. Measurements of collision and heating times in a two-dimensional thermal computer plasma. *J. Comput. Phys.* 8, 19-44, August 1971.

Hockney R. W., Goel S. P., Eastwood J. W. Quiet high-resolution computer models of a plasma. *J. Comput. Phys.* 14, 148-158, February 1974.

Hockney R. W., Eastwood J. W. Computer Simulation Using Particles, McGraw-Hill, New York, 1981.

Hsu J. Y., Joyce G., Montgomery D. Thermal relaxation of a two-dimensional plasma in a d.c. magnetic field. Part 2, Numerical simulation. *J. Plasma Phys.* 12, 27-31, 1974.

Hubbard J. The friction and diffusion coefficients of the Fokker-Planck equation in a plasma. *Proc. R. Soc. London. Ser. A260*, 114-126, February 1961.

Hudson M. K., Potter D. W. Electrostatic shocks in the auroral magnetosphere. Physics of Auroral Arc Formation, S.-I. Aka-solu, J. R. Kan, eds., Geophysical Monograph 25, American Geophysical Union, Wash. D. C., 1981.

Ishihara O., Hirose A., Langdon A. V. Nonlinear saturation of the Buneman instability. *Phys. Rev. Lett.* 44, 1404-1407, May 1980.

Ishihara O., Hirose A., Langdon A. B. Nonlinear evolution of Buneman instability. *Phys. Fluids* 24, 452-463, March 1981.

Ishihara O., Hirose A., Langdon A. B. Nonlinear evolution of Buneman instability. II. Ion Dynamics, *Phys. Fluids* 25, 610-616, April 1982.

Jackson J. D. Longitudinal plasma oscillations. *J. Nucl. Energy. Part C (Plasma Physics)* I, 171-189, 1960.

***Jackson J. C.** Classical Electrodynamics, Wiley, New York, 2d.ed., 1975.

Jones M. E., Fukai J. Evolution of the explosive instability in a simulated beam plasma. *Phys. Fluids* 22, 132-138, January 1979.

Joyce G., Montgomery D. Negative temperature states for the two-dimensional guiding center plasma. *J. Plasma Phys.* 10, 107-121, 1973.

Jury E. L. Theory and Applications of the x-Transform Method, Wiley, New York, 1964.

Kainer S., Dawson J. M., Shanny R. Interaction of a highly energetic electron beam with a dense plasma. *Phys. Fluids* 15, 493-501, March 1972.

Kamimura T., Dawson J. M. Effect of mirroring on convective transport in plasmas. *Phys. Rev. Lett.* 36, 313, 9 February 1976.

Kamimura T., Wagner T., Dawson J. M. Simulation study of Bernstein modes. *Phys. Fluids* 21, 1151-1167, July 1978.

Katanuma I. Heat transport due to collisionless tearing instabilities. *Jour. of the Phys. Soc. of Japan* 50, 1689-1697, May 1981.

Katanuma I., Kamimura T. Simulation studies of collisionless tearing instabilities. *Phys. Fluids* 23, 2500-2511, October 1980.

Kaufman A. N., Rostler P. S. The Darwin model as a tool for electromagnetic plasma simulation. *Phys. Fluids* 14, 446-448, February 1971.

Klein H. H., Manheimer W. M., Ott E. Effect of side-scattering instabilities on the propagation of an intense laser beam in an inhomogenous plasma. *Phys. Rev. Lett.* 31, 1187, 1190, November 1973.

***Klimontovich Y. L.** The Statistical Theory of Non-Equilibrium Processes in a Plasma, MIT Press, Cambridge, MA, 1967.

Krall N. A., Liewer P. C. Low-frequency instabilities in magnetic pulsés. *Phys. Rev. A.* 2094-2103, November 1971.

Krall N. A., Liewer P. C. Turbulent heating and resistivity in cool-electron pinches. *Phys. Fluids* 15, 1166-1168, June 1972.

***Krall N. A., Trivelpiece A. W.** Principles of Plasma Physics, McGraw-Hill, New York, 1973.

Kruer W. L., Dawson J. M. Sideband instability. *Phys. Fluids* 13, 2747-2751, November 1970.

Kruer W. L., Dawson J. M. Anomalous high-frequency resistivity of a plasma. *Phys. Fluids* 15, 446-453, March 1972.

Kruer W. L., Dawson J. M., Rosen B. The dipole expansion method for plasma simulation. *J. Comput. Phys.* 13, 114-129, September 1973a.

Krner W. L., Estabrook K., Sinz K. H. Instability-generated laser reflection in plasmas. *Nucl. Fusion* 13, 952-955, November 1973b.

Kwan T. J. T. High-power coherent microwave generation from oscillating virtual cathodes. *Phys. Fluids* 27, 228-232, January 1984.

***Lamb S. H.** Hydrodynamics, Dover, New York, 1945.

Langdon A. B. Investigations of a sheet model for a bounded plasma with magnetic field and radiation, Ph. D. thesis, Princeton University, Electronics Research Laboratory 41-M257, Univ. Calif., Berkeley, January 1969.

Langdon A. B. Effects of the spatial grid in simulation plasmas. *J. Comput. Phys.* 6, 247-267, October 1970a.

Langdon A. B. Nonphysical modifications to oscillations, fluctuations, and collisions due to space-time differencing. *Proc. Fourth Conf. Num. Sim. Plasmas*, Naval Res. Lab., Wash., D. C., 467-495, 2-3 November 1970b.

Langdon A. B. Some electromagnetic plasma simulation models and their noise properties. *Phys. Fluids* 15, 1149-1151, June 1972.

Langdon A. B. Energy conserving plasma simulation alrogithms. *J. Comput. Phys.* 12, 247-268, June 1973.

Langdon A. B. Kinetic theory of fluctuations and noise in computer simulation of plasma. *Phys. Fluids* 22, 163-171, January 1979a.

Langdon A. B. Analysis of the time integration in plasma simulation. *J. Comput. Phys.* 30, 202-221, February 1979b.

Langdon A. B., Dawson J. M. Investigations of a sheet model for a bounded plasma field and radiation. *Proc. First Conf. Num. Sim. Plasmas*, College of William and Mary, Williamsburg, VA, 39-40, 19-21 April 1967.

Langdon A. B., Birdsall S. K. Theory of plasma simulation using finite-size particles. *Phys. Fluids* 13, 2115-2122, August 1970.

Langdon A. B., Lasinski B. F. Electromagnetic and relativistic plasma simulation models. *Meth. Comput. Phys.* 16, 327-366, B. Alder, S. Fernbach, M. Rothenberg, J. Killeen, eds., Academic, New York, 1976.

Langdon A. B., Lasinski B. F., Kruer W. L. Nonlinear saturation and recurrence of the two-plasmon decay instability. *Phys. Rev. Lett.* 43, 133-136, July 1979.

Langdon A. B., Lasinski B. F. Frequency shift of selftrapped light. *Phys. Fluids* 26, 582-587, February 1983.

Langdon A. B., Cohen B. I., Friedman A. Direct implicit large time-step particle simulation of plasmas. *J. Comput. Phys.* 51, 107-138, July 1983.

Langdon A. B., Barnes D. C. Direct implicit plasma simulation in the volume Multiple Time Scales, in the series Computational Techniques, J. U. Brackbill, B. I. Cohen, eds., Academic Press, New York, 1985.

Lee J. K., Birdsall C. K. Velocity space ring-plasma instability, magnetized, Part I: Theory, *Phys. Fluids* 22, 1306-1314, July 1979a.

Lee J. K., Birdsall C. K. Velocity space ring-plasma instability, magnetized, Part II: Simulation. *Phys. Fluids* 22, 1315-1322, July 1979b.

Lee R., Lampe M. Electromagnetic instabilities, filamentation, and focusing of relativistic electron beams. *Phys. Rev. Lett.* 31, 1390-1343, December 1973.

Lee W. W., Okuda H. A simulation model for studying lowfrequency micro-instabilities. *J. Comput. Phys.* 26, 139, March 1978.

Lenard A. On Bogoliubov's kinetic equation for a spatially homogeneous plasma. *Ann. Phys.* 10, 390-400, July 1960.

Lewis H. R. Energy-conserving numerical approximations for Vlasov plasmas. *J. Comput. Phys.* 6, 136-141, August 1970a.

Lewis H. R. Applications of Hamilton's Principle to the numerical analysis of Vlasov plasmas. *Meth. Comput. Phys.* 9, 307-339, B. Alder, S. Fernbach, M. Rothenberg, eds., Academic, New York, 1970b.

Lewis H. R. Variational algorithms for numerical simulation of collisionless plasma with point particles including electromagnetic interactions. *J. Comput. Phys.* 10, 400-419, December 1972.

Lewis H. R., Sykes A., Wesson J. A. A comparison of some particle-in-cell plasma simulation methods. *J. Comput. Phys.* 10, 85-106, August 1972.

Lewis H. R., Nielson C. W. A comparison of three two-dimensional electrostatic plasma simulation models. *J. Comput. Phys.* 17, 1-9, January 1975.

Lighthill M. N. Fourier Analysis and Generalized Functions. Cambridge University, London, 1962.

Lin A. T., Dawson J. M., Okuda H. Application of electromagnetic particle simulation to the generation of electromagnetic radiation. *Phys. Fluids* 18, 1995-2001, November 1974.

Lin A. T., Tsintsadze N. L. Electrostatic parametric instabilities arising from relativistic electron mass oscillations. *Phys. Fluids* 19, 708-710, May 1976.

Lindgren N. E., Langdon A. B., Birdsall C. K. Electrostatic waves in an inhomogeneous collisionless plasma. *Phys. Fluids* 19, 1026-1034, July 1976.

Lindman E. L. Dispersion relation for computer-simulated plasmas. *J. Comput. Phys.* 5, 13-22, February 1970.

Lindman E. L. Free-space boundary conditions for the time dependent wave equation. *J. Comput. Phys.* 18, 66-78, May 1975.

Mankovsky A., Friedman A., Sudan R. N. Numerical simulation of injection and resistive trapping of ion rings. *Plasma Phys.* 23, 521-537, 1981.

Mason R. J. Implicit moment particle simulation of plasmas. *J. Comput. Phys.* 41, 233-244, June 1981.

Matsuda Y., Okuda H. Collisions in multi-dimensional plasma simulations. *Phys. Fluids* 18, 1740-1747, December 1975.

McBride J. B., Ott E., Boris J. P., Orens J. H. Theory and simulation of turbulent heating by the modified two-stream instability. *Phys. Fluids* 15, 2367-2383, December 1972.

Montgomery D., Nielson C. W. Thermal relaxation in one- and two-dimensional plasma models. *Phys. Fluids* 13, 1405-1407, May 1970.

Montgomery D., Joyce G. Statistical mechanics of 'negative temperature' states. *Phys. Fluids* 17, 1139-1145, June 1974.

Morales G. J., Lee Y. C., White R. B. Nonlinear Schrodinger equation model of oscillating-two-stream instability. *Phys. Rev. Lett.* 32, 457-460, 4 March 1974.

Morse R. L., Nielson C. W. Numerical simulation of a warm two-beam plasma. *Proc. Second Conf. Num. Sim. Plasmas, Los Alamos Sci. Labs.* LA-3990, 18-20 September 1968.

Morse R. L., Nielson C. W. Numerical simulation of warm two-beam plasma. *Phys. Fluids* 12, 2418-2425, November 1969.

Morse R. L., Nielson C. W. Numerical simulation of the Weibel instability in one and two dimensions. *Phys. Fluids* 14, 830-840, April 1971.

Mynick H. E., Gerver M. J., Birdsall C. K. Stability regions and growth rates for two-ion component plasma, unmagnetized. *Phys. Fluids* 20, 606-612, April 1977.

Naitou H. Cross-field electron heat transport due to high frequency electrostatic waves. *J. Phys. Soc. Japan* 48, 608, February 1980.

Naitou H., Kamimura T., Dawson J. M. Kinetic effects on the convective plasma diffusion and the heat transport. *J. Phys. Soc. Japan* 46, 258, January 1979a.

Naitou H., Tokuda S., Kamimura T. On boundary conditions for a simulation plasma in a magnetic field. *J. Comput. Phys.* 33, 86-101, October 1979b.

Naitou H., Tokuda S., Kamimura T. Initial particle loadings for nonuniform simulation plasma in a magnetic field. *J. Comput. Phys.* 38, 265-274, December 1980.

Nevins W., Harte J., Gell Y. Pseudo classical transport in a sheared magnetic field theory and simulation. *Phys. Fluids* 22, 2108-2121, November 1979.

Nevins W., Matsuda J., Gerver M. Plasma simulations using inversion symmetry as a boundary condition. *J. Comput. Phys.* 39, 226-232, January 1981.

Nielson C. W., Lindman E. L. An implicit, two-dimensional electromagnetic plasma simulation code. *Proc. Sixth Conf. Num. Sim. Plasmas, Lawrence Livermore Lab., Lawrence Berkeley Lab., Berkeley, CA*, 148-151, 16-18 July 1973.

Nelson C. W., Lewis H. R. Particle-code models in the nonradiative limit. *Meth. Comput. Phys.* 16, 367-388, B. Alder, S. Fernberg, M. Rotenberg, J. Killeen, eds., Academic, New York, 1976.

Ohsawa Y., Inutake M., Tajima T., Hatori T., Kamimura T. Plasma paramagnetism in radio-frequency field. *Phys. Rev. Lett.* 43, 1246-1249, 22 October 1979.

Okuda H. Nonphysical instabilities in plasma simulation due to small $\lambda_p/\Delta x$. *Proc. Fourth Conf. Num. Sim. Plasmas, Naval Res. Lab., Wash., D. C.*, 511-525, 2-3 November 1970.

Okuda H. Verification of theory for plasma of finite-size particles. *Phys. Fluids* 15, 1268-1274, July 1972a.

Okuda H. Nonphysical noises and instabilities in plasma simulation due to a spatial grid. *J. Comput. Phys.* 10, 475-486, December 1972b.

Okuda H. Effects of spatial grid in plasma simulations using higher order multipole expansions. *Princeton Plasma Physics Laboratory report PPPL-1355*, July 1977.

Okuda H., Birdsall C. K. Collisions in a plasma of finitesize particles. *Phys. Fluids* 13, 2123-2134, August 1970.

Okuda H., Dawson J. M. Theory and numerical simulation of plasma diffusion across a magnetic field. *Phys. Fluids* 16, 408-426, March 1973.

Okuda H., Cheng C. Z. Higher order multipoles and splines in plasma simulation. *Computer Phys. Comm.* 14, 169-176, 1978.

O'Neil T. M., Malmberg J. H. Transition of the dispersion roots from beam-type to Landau-type solutions. *Phys. Fluids* 11, 1754-1760, August 1968.

O'Neil T. M., Winfrey J. H., Malmberg J. H. Nonlinear interaction of a small cold beam and a plasma, I. Phys. Fluids 14, 1204-1212, June 1971.

Ossakow S. L., Haber I., Ott E. Simulation of whistler instabilities in anisotropic plasmas. Phys. Fluids 15, 1538-1540, August 1972a.

Ossakow S. L., Ott E., Haber I. Nonlinear evolution of whistler instabilities. Phys. Fluids 15, 2314-2326, December 1972b.

Ou E., Manheimer W. M., Klein H. H. Stimulated Compton scattering and self-focusing in the outer regions of a laserproduced plasma. Phys. Fluids 17, 1757-1761, September 1974.

Palevsky A. Generation of intense microwave radiation by the relativistic e-beam magnetron experiment (and numerical simulation), Ph. D. thesis, Mass. Inst. of Tech., June 1980.

***Panofsky W. K. H., Phillips M.** Classical Electricity and Magnetism, Addison-Wesley, Reading, MA, 1962.

Peiravi A., Birdsall C. K. Self-heating of 1d thermal plasma: comparison of weightings; optimal parameter choices. Proc. Eighth Conf. Num. Sim. Plasmas, Monterey, Calif., PD-9, 28-30 June 1978.

Pierce J. R. Possible fluctuations in electron streams due to ions. J. Appl. Phys. 19, 231-236, March 1948.

Portis A. M. Electromagnetic Fields: Sources and Media, Wiley, New York, 1978.

***Potter D.** Computational Physics, Wiley, London, 1973.

Ramo S., Whinnery J. R., VanDuzer T. Fields and Waves in Communications Electronics, Wiley, New York, 1965.

Rayleigh B. The Theory of Sound, Dover, New York, 1945.

Reitz J. R., Milford F. J. Foundations of electromagnetic theory, Addison—Wesley, Reading, MA, 1960.

Rostoker N. Fluctuations of a plasma (I), Nucl. Fusion 1, 101-120, March 1961.

Rostoker N., Rosenbluth M. N. Test particles in a completely ionized plasma. Phys. Fluids 3, 1-14, January 1960.

Schmidt G. Physics of High Temperature Plasmas, Academic, New York, 1966.

Singleton R. C. On computing the fast Fourier transform. Commun. Assoc. Comput. Mach. 10, 647-654, 1967.

Singleton R. C. Algorithm 345, an algol convolution procedure based on the fast Fourier transform. Commun. Assoc. Comput. Mach. 12, 179-184, 1969.

Skölleramo A. A Better Difference Scheme for the Laplace Equation in Cylindrical Coordinates. J. Comput. Phys. 47, 160-163, 1982.

Skölleramo A., Skölleramo G. A Fourier Analysis of Some Difference Schemes for the Laplace Equation in a System of Rotation Symmetry. J. Comput. Phys. 103-114, 1978.

***Sommerfeld A.** Optics, Academic, New York, 1954.

Stringer T. E. Electrostatic instabilities in currentcarrying and counterstreaming plasmas. J. Nucl. Energy, Part C (Plasma Physics) C6, 267-279, May 1964.

Swift D. W., Ambrosiano J. J. Boundary conditions which lead to excitation of instabilities in plasma simulations. J. Comput. Phys. 44, 302-317, 1981.

Tajima T., Lee Y. C. Absorbing boundary condition and Budden turning point technique for electromagnetic plasma simulations. J. Comput. Phys. 42, 406-412, August 1981.

Tataronis J. A., Crawford F. W. Cyclotron harmonic wave propagation and instabilities, I, perpendicular propagation. J. Plasma Phys. 4, 231-248, May 1970.

Taylor J. B., McNamara B. Plasma diffusion in two dimensions. Phys. Fluids 14, 1492-1499, July 1971.

Temperton C. Algorithms for the solution of cyclic tridiagonal systems. J. Comput. Phys. 19, 317-323, 1975.

Thomas V., Birdsall C. K. Plasma hybrid oscillations as affected by aliasing. Proc. Ninth Conf. Num. Sim. Plasmas, Northwestern Univ., Evanston, IL, PB6, 30 June-2 July 1980.

Tsang K. T., Matsuda Y., Okuda H. Numerical simulation of neoclassical diffusion. Phys. Fluids 18, 1282-1286, October 1975.

Valeo E. J., Krue W. L. Solitons and resonance absorption. Phys. Rev. Lett. 33, 750-753, 23 September 1974.

***Vlasov A. A.** Many Particle Theory and Its Application to Plasma, Russian original 1950, translation to English, Gordon and Breach, New York, 1961.

Walsh J. E., Hagelin S. S. Van der Pol's equation and nonlinear oscillations in a beam plasma system. Phys. Fluids 19, 339-340, February 1976.

Yu S. P., Kooyers G. P., Buneman O. A time dependent computer analysis of electron-wave interaction in crossed-fields. J. Appl. Phys. 36, 2550-2559, August 1965.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ НА РУССКОМ ЯЗЫКЕ

1. Климонтович Ю. Л. Статистическая теория неравновесных процессов в плазме. М.: Изд-во МГУ, 1964.
2. Власов А. А. Теория многих частиц. М.: Гостехтеориздат, 1950.
3. Абрамович М., Стиган Ю. Справочник по специальным функциям: Пер. с англ. М.: Мир, 1979.
4. Коллатц Л. Численные методы решения дифференциальных уравнений: Пер. с англ. М.: Изд-во иностр. лит., 1953.
5. Форсайт Дж., Вазов В. Разностные методы решения дифференциальных уравнений: Пер. с англ. М.: Изд-во иностр. лит., 1963.
6. Голдстейн Г. Классическая механика: Пер. с англ. М.: Наука, 1975.
7. Хемминг Р. В. Численные методы для научных работников и инженеров: Пер. с англ. М.: Наука, 1972.
8. Хемминг Р. В. Цифровые фильтры: Пер. с англ. М.: Советское радио, 1980.
9. Джексон Дж. Классическая электродинамика: Пер. с англ. М.: Мир, 1965.
10. Кролл Н., Трайвельпинс А. Основы физики плазмы: Пер. с англ. М.: Мир, 1975.
11. Ламб Г. Гидродинамика: Пер. с англ. М.-Л.: Гостехтеориздат, 1947.
12. Пановский В., Филипп М. Классическая электродинамика: Пер. с англ. М.: Физматгиз, 1963.
13. Поттер Д. Вычислительные методы в физике: Пер. с англ. М.: Мир, 1975.
14. Стретт Дж. В. (Лорд Релей). Теория звука: Пер. с англ. М.: Гостехтеориздат, 1955.
15. Зоммерфельд А. Оптика: Пер. с нем. М.: Изд-во иностр. лит., 1953.

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЙ СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ромаль А. С. Моделирование заряженных пучков. М.: Атомиздат, 1979.
2. Березин Ю. А., Вшивцов В. А. Метод частиц в динамике разреженной плазмы. Новосибирск: Наука, 1980.
3. Березин Ю. А., Вшивцов В. А. Численные модели плазмы и процессы пересоединения. М.: Наука, 1985.
4. Днестровский Ю. Н., Костомаров Д. П. Математическое моделирование плазмы. М.: Наука, 1982.
5. Ильин В. П. Численные методы решения задач электрофизики. М.: Наука, 1985.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие авторов к русскому изданию	3
Предисловие к русскому изданию	4
Предисловие авторов	5
ЧАСТЬ I. ОСНОВЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЛАЗМЫ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА КРУПНЫХ ЧАСТИЦ. ОДИОМЕРНЫЕ ЭЛЕКТРОСТАТИ- ЧЕСКИЙ И ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЙ КОДЫ	7
Глава 1. Возможно ли изучение физики плазмы с помощью численного моделирования с использованием метода крупных частиц	8
Глава 2. Общая характеристика одиомерной электростатической про- граммы	13
2.1. Введение	13
2.2. Основы построения электростатической модели плазмы	13
2.3. Принципы построения вычислительного цикла	16
2.4. Интегрирование уравнений движения	18
2.5. Интегрирование уравнений поля	21
2.6. Связь между величинами, описывающими частицы, и разностной сеткой; взвешивание сил и частиц	24
2.7. Выбор начальных величин; общие замечания	27
2.8. Выбор формы представления результатов работы программы; общие замечания	28
2.9. Способы проверки правильности работы программы	30
Глава 3. Одиомерная электростатическая программа ESI	31
3.1. Введение	31
3.2. Общая структура программы ESI	32
3.3. Входные данные к ESI	37
3.4. Преобразование входных параметров в компьютерные величины	38
3.5. Нормировка, компьютерные переменные	38
3.6. Подпрограмма INIT; вычисление начальных скоростей и коорди- нат зарядов	39
3.7. SETRHO, начальное задание плотности заряда	43
3.8. Подпрограмма FIELDS; определение напряженности и энергии электростатического поля	44
3.9. Подпрограммы быстрого преобразования Фурье	48
3.10. Подпрограмма для начального полушага по скорости SETV	48
3.11. Подпрограмма вычисления скоростей ACCEL	49
3.12. Подпрограмма вычисления координат MOVE	54
3.13. Изменение времени на один шаг	56
3.14. Подпрограмма построения графиков в зависимости от времени, HISTRY	56
3.15. Графопостроительные и прочие подпрограммы	58

Глава 4. Основы используемых численных методов	62
4.1. Введение	62
4.2. Точность метода решения уравнений движения частиц	62
4.3. Сила Ньютона—Лоренца; трехмерный метод интегрирования $v \times B$	64
4.4. Выполнение вращения $v \times B$	67
4.5. Применение формул вращения в одномерных программах	68
4.6. Связь между частицами и разностной сеткой; формфакторы $S(x)$, $S(k)$	70
4.7. Горячая плазма частиц конечных размеров	73
4.8. Сила взаимодействия частиц конечных размеров при наличии разностной сетки	75
4.9. Точность метода решения уравнения Пуассона	77
4.10. Энергия поля и кинетические энергии частиц	78
4.11. Граничные условия для заряда, тока, поля и потенциала	80
Глава 5. Задания по использованию программы ES1	84
5.1. Введение	84
5.2. Связь начальных значений разных величин в линейном приближении	85
5.3. Анализ ленгмюровских колебаний холодной плазмы	88
5.4. Проект по колебаниям холодной плазмы	92
5.5. Задание по гибридным колебаниям	95
5.6. Линейный анализ двухпучковой неустойчивости	97
5.7. Приближенный нелинейный анализ двухпотоковой неустойчивости	101
5.8. Задание по изучению двухпотоковой неустойчивости	106
5.9. Некоторые результаты моделирования двухпотоковой неустойчивости	107
5.10. Линейный анализ плазменно-пучковой неустойчивости	112
5.11. Приближенный нелинейный анализ плазменно-пучковой неустойчивости	115
5.12. Задания по моделированию плазменно-пучковой неустойчивости	119
5.13. Линейный анализ циклотронной неустойчивости пучка	122
5.14. Задание по циклотронной неустойчивости пучка	124
5.15. Затухание Ландау	125
5.16. Распределение замагниченных колец по скоростям и линейный анализ неустойчивости Дори—Геста—Харриса	128
5.17. Задание по замагниченному кольцеобразному распределению	131
5.18. Применение ES1 в исследованиях	132
Глава 6. Одномерная электромагнитная программа EM1	133
6.1. Введение	133
6.2. Одномерная модель	133
6.3. Интегрирование одномерных уравнений поля	134
6.4. Устойчивость метода	137
6.5. Код EM1 для периодических систем	138
6.6. Код EM1BND для ограниченных систем; задание функции распределения $f(x, v)$	139
6.7. Граничные условия в коде EM1BND	141
6.8. Представление выходных данных в EM1 и EM1BND	143

Г л а в а 7. Задания по использованию EM1	144
7.1. Введение	144
7.2. Резонансный нагрев плазмы	146
7.3. Наблюдение предвестника	148
Ч А СТЬ II. ТЕОРИЯ. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАЗМЫ МЕТОДОМ КРУПНЫХ ЧАСТИЦ ПРИ УЧЕТЕ КОНЕЧНОСТИ ВРЕМЕННЫХ И ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ШАГОВ	150
Г л а в а 8. Эффекты пространственной сетки	151
8.1. Введение. Ранние работы по использованию сеток и ячеек в описании плазмы	151
8.2. Введение в теорию пространственной сетки	155
8.3. Основные эффекты периодической пространственной неоднородности	156
8.4. Обозначения и определения	159
8.5. Взвешивание частиц на сетке; формфакторы	160
8.6. Сохранение импульса в полной системе	162
8.7. Преобразование Фурье для зависимых величин; наложение частот, возникающее из-за конечных рядов Фурье	163
8.8. Более точный алгоритм для $S(x)$ с использованием сплайнов	167
8.9. Обобщение на случай двух и трех измерений	168
8.10. Линейная дисперсия волны	170
8.11. Исследование холодной дрейфующей плазмы; частоты колебаний	170
8.12. Нефизическая неустойчивость холодного пучка	173
8.13. Решение для максвелловской плазмы; нефизические неустойчивости, вызванные сеткой	176
Г л а в а 9. Эффекты конечного шага по времени	180
9.1. Введение	180
9.2. Диэлектрическая проницаемость горячей незамагниченной плазмы; алгоритм с перешагиванием	182
9.3. Альтернативный анализ на основе суммирования по траекториям частиц	188
9.4. Численная неустойчивость	191
9.5. Дисперсионная функция, включающая конечные значения Δx и Δt	194
9.6. Дисперсия замагниченной горячей плазмы и нефизическая неустойчивость	195
9.7. Моделирование медленно меняющихся явлений; подциклы, усреднение орбит и неявные методы	202
9.8. Другие алгоритмы для незамагниченной плазмы	205
Г л а в а 10. Численные модели с сохранением энергии	211
10.1. Введение	211
10.2. Нарушение сохранения энергии в кодах с сохранением импульса	212
10.3. Алгоритм с сохранением энергии	213
10.4. Сохранение энергии	217
10.5. Алгоритмы, выведенные из вариационных принципов	219

10.6. Пространственное преобразование Фурье зависимых величин	220
10.7. Разностное уравнение Пуассона в форме Левиса и кулоновские поля	221
10.8. Малые колебания холодной плазмы	222
10.9. Несохранение импульса	224
10.10. Наложение частот и дисперсионное уравнение колебаний горячей плазмы	225
10.11. Пример модели с линейной интерполяцией	228
10.12. Модель с квадратичным сплайном	231
Г л а в а 11. Мультипольные модели	232
11.1. Введение	232
11.2. Метод разложения по мультиполям	233
11.3. Сокращенное мультипольное разложение	237
11.4. Мультипольная интерпретация других алгоритмов	239
11.5. Связь между преобразованиями Фурье частичных и сеточных величин	242
11.6. Полная точность вычисления силы; дисперсионное соотношение	245
11.7. Заключение и перспективы	249
Г л а в а 12. Кинетическая теория флуктуации и шума; столкновения	250
12.1. Введение	250
12.2. Пробный заряд и дебаевское экранирование	251
12.3. Флуктуации	254
12.4. Замечания об экранировке и флуктуациях	260
12.5. Вывод кинетического уравнения	261
12.6. Точные свойства кинетического уравнения	267
12.7. Замечания о кинетическом уравнении	270
Г л а в а 13. Кинетические свойства: теория, практика и эвристические оценки	271
13.1. Введение	271
13.2. Одномерная плазма в тепловом равновесии	272
13.3. Термализация одномерной плазмы	280
13.4. Численный разогрев и охлаждение	285
13.5. Время столкновений и разогрева для двухмерной теплой плазмы	288
13.6. Неустойчивая плазма	293
Ч А СТЬ III. ПРАКТИКА. РАЗРАБОТКА ПРОГРАММ В ДВУХ И ТРЕХ ИЗМЕРЕНИЯХ	295
Г л а в а 14. Электростатические программы в двух и трех измерениях	295
14.1. Введение	295
14.2. Двухмерная электростатическая программа в целом	298
14.3. Решение уравнения Пуассона	301
14.4. Взвешивание и эффективные формы частиц в прямоугольных координатах $S(x)$, $S(k)$, анизотропия силы	302
14.5. Дважды периодическая модель и граничные условия	305
14.6. Решения уравнения Пуассона для ограниченных по x и периодических по y систем	308
	449

14.7. Использование инверсионной симметрии для периодически открытой модели	312
14.8. Точность конечно-разностного уравнения Пуассона	315
14.9. Точность конечно-разностного оператора градиента	317
14.10. Конечно-разностное уравнение Пуассона в цилиндрических координатах	321
14.11. Взвешивание частиц и полей в цилиндрических координатах	325
14.12. Перемещение частиц в цилиндрических координатах	327
14.13. Неявный метод для больших временных шагов	328
14.14. Диагностики	335
14.15. Характерные приложения	338
Глава 15. Электромагнитные программы в двух и трех взмерениях	341
15.1. Введение	341
15.2. Интегрирование полей по времени и размещение пространственной сетки	341
15.3. Точность и устойчивость интегрирования по времени	343
15.4. Интегрирование уравнений движения	345
15.5. Совместное интегрирование уравнений для частиц и полей	347
15.6. Уравнения $\nabla \cdot \mathbf{B}$ и $\nabla \cdot \mathbf{E}$; обеспечение сохранения заряда	349
15.7. А—ф-формализм	350
15.8. Свойства шумов при различных методах взвешивания тока	351
15.9. Схемы при $\Delta t_{part} > \Delta t_{fields}$	353
15.10. Периодические граничные условия	356
15.11. Открытые границы	357
15.12. Граничные условия на проводящей стенке	362
15.13. Интегрирование уравнений Максвелла в цилиндрических координатах	367
15.14. Приближение Дарвина	368
15.15. Гибридные коды частица—жидкость	370
15.16. Неявные электромагнитные коды	370
15.17. Диагностики	371
15.18. Некоторые приложения	373
15.19. Замечания о полномасштабном моделировании плазмы	375
Глава 16. Загрузка и инжекция частиц; граничные условия и внешняя цепь	377
16.1. Введение	377
16.2. Загрузка неоднородных распределений $f_0(\mathbf{v})$, $n_0(\mathbf{x})$; обращение интегральных функций распределения	377
16.3. Загрузка холодной плазмы или холодного пучка	379
16.4. Загрузка распределения Максвелла	379
16.5. Спокойные старты: гладкая загрузка в \mathbf{x}—\mathbf{v}-пространстве; использование наборов чисел с обращенными разрядами со смешанными основаниями	382
16.6. Спокойный старт: многопучковые и кольцевые неустойчивости и их насыщение; возврат	384
16.7. Загрузка замагниченной плазмы с заданным пространственным распределением ведущих центров $n_0(x_{gc})$	390
16.8. Инжекция и поглощение частиц на границах; излучение полей, ионизация и перезарядка	393
16.9. Граничные условия для частиц и полей в продольно ограниченных системах; плазменные приборы	396

ЧАСТЬ IV. ПРИЛОЖЕНИЯ	404
A. Подпрограммы быстрого преобразования Фурье	404
Б. Компенсирующие и ослабляющие функции, используемые в ES1 ...	416
В. Цифровая фильтрация в одном и двух измерениях	419
Г. Прямое решение конечно-разностных уравнений	423
Д. Локальные и нелокальные разностные операторы ($\nabla \rightarrow i\kappa$, $\nabla^2 \rightarrow -\kappa^2$)	427
Список литературы	433
Список литературы на русском языке	444
Дополнительный список рекомендуемой литературы	445

Научное издание

Бэдсэл Ч. Ленгдон А.

ФИЗИКА ПЛАЗМЫ И ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Заведующий редакцией *А. Б. Желдыбин*

Редактор *Л. В. Белова*

Художественный редактор *А. Т. Кирьянов*

Технический редактор *Т. Ю. Андреева*

Корректор *М. Г. Гулина*

ИБ № 2495

Сдано в набор 13.07.88. Подписано в печать 23.11.88. Формат 60×88¹/₁₆. Бумага
оффсетная № 2. Гарнитура Таймс. Печать оффсетная. Усл. печ. л. 27,93.
Усл. кр.-отт. 27,93 Уч.-изд. л. 31,03. Тираж 2400 экз. Заказ 3723. Цена 5 р.

Энергоатомиздат. 113114 Москва, М-114, Шлюзовая наб., 10

Ордена Октябрьской Революции и ордена Трудового Красного Знамени МПО
«Первая Образцовая типография» Союзполиграфпрома при Госкомиздате СССР.
113054, Москва, Валовая, 28

УВАЖАЕМЫЕ ЧИТАТЕЛИ!

Энергоатомиздат выпустит в 1989 году следующие книги:

Кирсанов В. В. ЭВМ—эксперимент в атомном материаловедении.—19 л.: 4 р. 10 к.

Рассмотрена новая методология исследований—вычислительный эксперимент, особенно успешно проявившая себя при имитации с помощью ЭВМ сложных многопараметрических процессов, характерных для атомного материаловедения: дефектообразование, радиационные повреждения, деформации и разрушение, плавление, фазово-структурные превращения, физики твердого тела. Может быть полезна студентам вузов соответствующих специальностей.

Окс Е. А. Спектроскопия плазмы с квазимохроматическими электрическими полями.—15,5 л.: 3 р. 10 к.

Изложены основы спектроскопии плазмы, в которой имеются квазимохроматические электрические поля (КЭП)—поля продольных колебаний плазмы (ленгмюровских и др.) или проникающее извне когерентное излучение. Исследован новый класс плазменно-спектроскопических задач—об излучении (спонтанном) квантовой системы, взаимодействующей одновременно с сильным КЭП и плазменной средой. Разработаны различные методы измерений параметров внутриплазменных КЭП и плазменной среды. Обсуждены эксперименты и наблюдения, в которых эти методы были применены для диагностики лабораторной или космической плазмы.

Для научных работников, инженеров, аспирантов и студентов старших курсов, занимающихся спектроскопической диагностикой лабораторной или космической плазмы.

Плазменные процессы в технологических электронных пушках / И. А. Завьялов, Ю. Е. Крейндель, А. А. Новиков, Л. П. Шантурин.— 16,5 л.: 3 р. 60 к.

Посвящена плазменным процессам, которые используются в технике получения мощных электронных пучков, а также плазменным явлениям, возникающим при прохождении пучков в газе технологических электронно-лучевых установок. Рассмотрены вопросы генерации электронных пучков в системах с ионно-электронным эмиттером и плазменным катодом, а также в биполярных электронно-оптических системах с плазменным анодом. Описаны особенности транспортировки электронных пучков в условиях образования пучковой плазмы. Приведены конструкции электронно-лучевых систем, в которых проявляются плазменные процессы.

Для научных работников и инженеров, специализирующихся в области электронно-лучевой технологии физической электроники.

Туманов Ю. Н. Низкотемпературная плазма и высокочастотные электромагнитные поля в процессах получения материалов для ядерной энергетики.— 16,5 л.: 3 р. 60 к.

Рассмотрены новые плазмотехнологические и высокочастотные процессы получения и обработки материалов, необходимых в ядерной энергетике. Значительное внимание уделено плазменным процессам в технологии получения и применения дисперсных материалов в процессах синтеза тугоплавких веществ и вторичных энергоносителей. Рассмотрены механизм взаимодействия электрических и магнитных полей с химически активными системами, а также применение этих полей для обработки и синтеза тугоплавких материалов.

Для научных работников и инженеров, занимающихся разработкой и применением плазменных и высокочастотных процессов для технологий.

Тучин В. В. Динамические процессы в газоразрядных лазерах.— 16,5 л.: 3 р. 60 к.

Представлена информация об основных релаксационных процессах, протекающих в плазме газового разряда лазеров и определяющих динамический отклик плотности инверсии и параметров генерации на возмущения в плазме. Рассмотрены источники этих возмущений, выявлены основные каналы их передачи из плазмы в излучение и обратно. Изучена динамика наиболее распространенных типов газоразрядных лазеров непрерывного действия. Представлены примеры практического использования исследований в лазерной спектроскопии и диагностике плазмы.

Для научных работников и инженеров, аспирантов и студентов соответствующих специальностей.

Химия плазмы: Сб. ст. Вып. 16/Под общ. ред. Б. М. Смирнова.—20 л.: 4 р. 30 к.

Представлена информация по колебательной релаксации трехатомных молекул, по процессам столкновения с участием синглетного кислорода и возбужденного атома гелия. Рассмотрена ионизация паров металлов резонансным излучением. Исследован газовый разряд между твердыми и жидкими электродами. Проанализирована плазма продуктов сгорания. Дано современное состояние газоразрядной полимеризации фторуглеродов, а также лазерной технологии получения неорганических материалов.

Для научных работников и инженеров в области физики плазмы.

1990 г.

Дюррани С., Балл Р. Твердотельные ядерные детекторы: Пер. с англ.—22 л.: 4 р. 70 к.

Посвящена относительно новой и быстро развивающейся области методики физического эксперимента—разработке и применению диэлектрических трековых детекторов тяжелых заряженных частиц. Показаны достижения в области разработки детекторов, методов электрохимического травления, идентификации и спектрометрии быстрых ядер.

Для научных работников в области ядерной физики.

Математическое моделирование процессов в низковольтном плазменно-пучковом разряде / Ф. Г. Бакшт, Б. И. Колосов, А. А. Костин и др.— 12,5 л.: 2 р. 50 к.

Анализируются основные физические процессы в низковольтном плазменно-пучковом разряде (НППР): механизмы релаксации катодного пучка, возбуждение волн, нагрев электронов плазмы, возбуждение и ионизация атомов электронами. Рассмотрены стационарные и нестационарные режимы горения разряда. Изложена теория ключевых элементов с сеточным управлением током разряда. Описаны методы и алгоритмы численного моделирования процессов в стационарном и нестационарном НППР.

Для научных работников и инженеров в области физики низкотемпературной плазмы.

Книги, которые выйдут в 1989 г., Вы можете приобрести во всех книжных магазинах, распространяющих научно-техническую литературу. Прием заказов на книги по плану 1990 г. магазины проводят без ограничений до 1 ноября 1989 г.