

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский
государственный университет им. Н.И. Лобачевского»

А.В. Коржиманов

**МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ
КИНЕТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ПЛАЗМЫ**

Учебное пособие

Рекомендовано Учёным советом радиофизического факультета для
студентов ННГУ, обучающихся по направлению подготовки 03.04.03
«Радиофизика»

Нижний Новгород
2024

УДК 533.9, 519.6
ББК 22.317, 22.193
К-66

Рецензенты:

д.т.н., профессор **С.В. Оболенский**
д.ф.-м.н., член-корр. РАН **В.В. Кочаровский**

К-66 Коржиманов А.В. МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ПЛАЗМЫ: Учебное пособие. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2024. – 96 с.

В пособии изложены современные подходы к анализу поведения плазмы в условиях, когда частота столкновений мала и достижение термодинамического равновесия требует значительного времени. Излагаются основы кинетического описания плазмы, вводится кинетическое уравнение, описывающее эволюцию функции распределения частиц во времени. Основная часть пособия посвящена изложению аналитических и численных методов решения кинетического уравнения. Изложены также основные сведения о подходах к численному решению уравнений электродинамики.

Для студентов старших курсов радиофизического факультета ННГУ, обучающихся по направлению подготовки «Радиофизика».

Ответственный за выпуск:

заместитель председателя методической комиссии
радиофизического факультета ННГУ, д.ф.-м.н. **Е.З. Грибова**

УДК 533.9, 519.6
ББК 22.317, 22.193

© Национальный исследовательский
Нижегородский государственный
университет им. Н.И. Лобачевского, 2024

Содержание

Введение	5
1. Кинетическое описание плазмы	7
1.1. Кинетическая модель	7
1.2. Моменты функции распределения	11
1.3. Интеграл столкновений	12
1.4. Свойства уравнения Власова	15
2. Метод характеристик	17
2.1. Характеристики и их свойства	17
2.2. Пример: свободный одномерный поток	18
2.3. Пример: электронный пучок вблизи нуля линейно нарастающего поля	19
3. Метод интегралов движения	22
3.1. Общие сведения	22
3.2. Энергетическая подстановка	22
3.3. Нейтральные токовые структуры	29
4. Введение в методы численного решения кинетических уравнений	35
4.1. Метод разделения операторов	35
4.2. Общие представления об одномерном уравнении переноса	38
5. Метод конечных разностей	41
5.1. Общие сведения о конечных разностях	41
5.2. Схема интегрирования вперёд по времени, центрированная в пространстве	42
5.3. Схема Лакса — Фридрихса	43
5.4. Схема Лакса — Вендроффа	44
6. Спектральные методы	48
6.1. Общие сведения о спектральных методах	48

6.2. Метод преобразования Фурье	49
6.3. Метод преобразования Эрмита	56
7. Метод конечных объёмов	60
7.1. Общие сведения о методе конечных объёмов	60
7.2. Схема Годунова	61
7.3. Ограничители потока	64
8. Методы, основанные на интегрировании характеристик	68
8.1. Полулагранжев метод	68
8.2. Консервативный полулагранжевый метод	71
9. Метод частиц в ячейках	76
9.1. Форм-фактор частиц и процедура взвешивания	76
9.2. Интегрирование уравнений движения методом Бориса	79
10. Методы численного решения уравнений электродинамики	82
10.1. Общие сведения	82
10.2. Решения уравнения Пуассона спектральным методом Фурье . .	85
10.3. Решение уравнений Максвелла методом конечных разностей во временной области	86
Список литературы	93

Введение

В основу данного учебного пособия положен курс лекций, читаемый автором студентам магистратуры радиофизического факультета Нижегородского государственного университета имени Н. И. Лобачевского. Предполагается, что читатели знакомы хотя бы в общих чертах с курсами теоретической механики, электродинамики, физики плазмы и основ вычислительных методов, а также математическим анализом в части линейной алгебры, векторного и тензорного анализа, преобразований Фурье и решения дифференциальных уравнений в частных производных. При этом при написании пособия автор пытался всюду, где возможно, кратко приводить все необходимые из других курсов сведения, чтобы при чтении не приходилось обращаться к другим источникам.

Учебное пособие посвящено проблеме анализа поведения плазмы, то есть ионизированного газа, в условиях, когда частота столкновений мала и достижение термодинамического равновесия требует значительного времени. Для описания такой неравновесной динамики принято применять так называемый кинетический подход, в котором предметом описания является функция распределения, определяющая состояние отдельных частиц в веществе. Уравнение её эволюции во времени принято называть кинетическим.

Особенностью плазмы является большая роль, которую в её динамике играют электромагнитные поля, генерируемые частицами самой плазмы. При этом во многих практически важных случаях поведение плазмы полностью определяется усреднёнными в статистическом смысле полями, а влиянием флуктуаций микрополей и, как следствие, столкновениями частиц можно во все пренебречь. Соответствующая система кинетических уравнений и уравнений электродинамики носит название уравнений Власова — Максвелла.

Несмотря на то, что разработано несколько методов аналитического решения этой системы, их возможности сильно ограничены, и в большинстве случаев требуется непосредственное решение системы уравнений численными методами, поэтому значительная часть пособия посвящена именно их описанию. Тем не менее, ценность аналитических методов заключается в том, что они развивают физическую интуицию и дают простые модели, позволяющие анализировать более сложное поведение плазмы, выделяя в нём более простые паттерны.

Целью пособия не является всеобъемлющее изложение всех аспектов затрагиваемых тем. В рамках столь небольшого текста это и невозможно. Вместо этого здесь сделана попытка изложить необходимые основы, которые с одной стороны позволили бы читателям при необходимости углубиться в заинтересовавшую тему, а с другой — дали бы необходимый базис для понимания чужих результатов, основанных на описанных в пособии методах и подходах, их ограничений и приближений. В конце пособия приведён список литературы, который можно рассматривать как входную точку для более глубокого изучения затронутых тем.

Неравновесная плазма встречается в широком круге явлений, представляющих как фундаментальный, так и прикладной интерес. Среди них можно выделить проблему термоядерного синтеза и поведения плазмы при развитии неустойчивостей в магнитных ловушках и при инерциальном сжатии мишеней, проблему взаимодействия космических плазменных потоков с магнитосферами планет, проблему взаимодействия интенсивного излучения с веществом, абляции образующейся плазмы, генерации пучков быстрых частиц и высокоэнергичного излучения.

Автор надеется, что данное пособие откроет для читателей мир современной физики плазмы и вдохновит на исследование богатого разнообразия физических эффектов и их взаимовлияния в неравновесной плазме.

Глава 1

Кинетическое описание плазмы

1.1. Кинетическая модель

Наиболее полным описанием динамики классической системы, состоящей из большого количества частиц, является решение уравнений движения для их совокупности, например, в форме второго закона Ньютона:

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i \quad (1.1)$$

$$\frac{d\vec{p}_i}{dt} \equiv \frac{d(\gamma_i m_i \vec{v}_i)}{dt} = q_i \left(\vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{v}_i \times \vec{B}] \right) \quad (1.2)$$

$$\gamma_i = \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{v_i}{c}\right)^2}} = \sqrt{1 + \left(\frac{p_i}{m_i c}\right)^2} \quad (1.3)$$

Здесь $\vec{r}_i, \vec{v}_i, \vec{p}_i, \gamma_i$ — радиус-вектор, скорость, импульс и гамма-фактор i -й частицы, m_i, q_i — её масса и заряд, $i = 1 \dots N$, N — количество частиц, c — скорость света, \vec{E}, \vec{B} — напряжённость электрического и индукция магнитного полей. Здесь и далее в рамках пособия при записи уравнений применяется система СГС. Такая модель носит название модели N тел.

Важным свойством системы взаимодействующих зарядов является её гамильтоновость, то есть для неё можно ввести функцию Гамильтона, которая в простейшем случае учёта только электростатических сил имеет вид:

$$H = \sum_i \sqrt{(m_i c^2)^2 + (p_i c)^2} + \sum_{i \neq j} \frac{q_i q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \sum_i q_i \Phi_{\text{внеш}}(\vec{r}_i), \quad (1.4)$$

где $\Phi_{\text{внеш}}$ — потенциал внешнего электростатического поля.

Уравнения движения тогда можно получить из уравнений Гамильтона:

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \quad (1.5)$$

$$\frac{d\vec{p}_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} \quad (1.6)$$

Последовательное обобщение гамильтонового подхода на случай полностью электродинамического взаимодействия требует, вообще говоря, включения в функцию Гамильтона обобщённых координат для полей. Это приводит, однако, к значительному усложнению выкладок. При этом основные выводы в целом остаются теми же, что и в электростатическом случае, поэтому в рамках данного раздела мы ограничимся им, добавляя магнитное взаимодействие там, где это не приводит к чрезмерному усложнению.

В кинетической модели система многих тел описывается функцией распределения. Эта функция в общем случае определена в $6N$ -мерном фазовом пространстве $\mathbf{x} \equiv \{\vec{r}_1, \vec{p}_1 \dots \vec{r}_N, \vec{p}_N\}$. По определению функция распределения $\rho(t, \mathbf{x})$ равна плотности вероятности обнаружить систему в фазовом объёме $d\mathbf{x}$. Отметим, что сам переход к функции распределения не означает автоматического перехода к статистическому описанию. В частности, кинетическое описание будет полностью эквивалентно описанию в модели N тел, если задать функцию вероятности в виде суммы дельта-функций:

$$\rho(t, \mathbf{x}) = \sum_i \delta(\vec{r}_i - \vec{R}_i(t)) \delta(\vec{p}_i - \vec{P}_i(t)), \quad (1.7)$$

где $\vec{R}_i(t)$, $\vec{P}_i(t)$ — положение и импульс i -й частицы в момент времени t .

Для гамильтоновых систем функция распределения подчиняется теореме Лиувилля:

$$\frac{d\rho}{dt} \equiv \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial \rho}{\partial \vec{r}_i} \frac{d\vec{r}_i}{dt} + \frac{\partial \rho}{\partial \vec{p}_i} \frac{d\vec{p}_i}{dt} \right) = 0 \quad (1.8)$$

Или если ввести скобки Пуассона

$$\{fg\} \equiv \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial \vec{p}_i} \frac{\partial g}{\partial \vec{r}_i} - \frac{\partial g}{\partial \vec{p}_i} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}_i} \right), \quad (1.9)$$

то уравнение Лиувилля может быть переписано в более компактной форме:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \{H\rho\} = 0, \quad (1.10)$$

Функцию распределения можно себе представлять как функцию плотности абстрактной фазовой жидкости, движущейся в фазовом пространстве. Теорема Лиувилля, таким образом, утверждает, что фазовая жидкость гамильтоновой системы является несжимаемой.

Докажем теорему Лиувилля. Для этого воспользуемся законом сохранения частиц в дифференциальной форме:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (1.11)$$

где оператор дивергенции действует в $6N$ -мерном пространстве, и введена скорость фазовой жидкости в этом пространстве:

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{x}}{dt} \quad (1.12)$$

Распишем дивергенцию в явном виде:

$$\begin{aligned} \sum_i \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \left(\rho \frac{d\vec{r}_i}{dt} \right) + \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \left(\rho \frac{d\vec{p}_i}{dt} \right) \right) = \\ = \sum_i \left(\frac{\partial \rho}{\partial \vec{r}_i} \frac{d\vec{r}_i}{dt} + \frac{\partial \rho}{\partial \vec{p}_i} \frac{d\vec{p}_i}{dt} \right) + \rho \sum_i \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \left(\frac{d\vec{r}_i}{dt} \right) + \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \left(\frac{d\vec{p}_i}{dt} \right) \right) \end{aligned} \quad (1.13)$$

Распишем второй член получившейся суммы:

$$\sum_i \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \left(\frac{d\vec{r}_i}{dt} \right) + \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \left(\frac{d\vec{p}_i}{dt} \right) \right) = \sum_i \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \left(\frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \right) - \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \left(\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} \right) \right) = 0 \quad (1.14)$$

Откуда и следует уравнение Лиувилля.

Описание системы в $6N$ -мерном пространстве, однако, является технически невозможным для сколь-нибудь больших значений N . Поэтому вводят упрощённое описание через n -частичные функции распределения ($n \leq N$).

По определению, n -частичная функция распределения $F_n(t, \vec{r}_1, \vec{p}_1, \dots, \vec{r}_n, \vec{p}_n)$ равна плотности вероятности обнаружить n произвольных частиц системы вблизи точки $6n$ -мерного пространства $\{\vec{r}_1, \vec{p}_1 \dots \vec{r}_n, \vec{p}_n\}$. Таким образом, n -частичная функция распределения является интегральной проекцией полной функции распределения на $6n$ -мерное подпространство:

$$F_n \equiv \int \rho(t, \vec{r}_1, \vec{p}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_N) d\vec{r}_{n+1} d\vec{p}_{n+1} \dots d\vec{r}_N d\vec{p}_N \quad (1.15)$$

Из уравнения Лиувилля для электростатической системы заряженных частиц можно получить следующее уравнение для n -частичных функций распределения:

$$\frac{\partial F_n}{\partial t} + \{H_n F_n\} = \sum_{i=1}^n (N - n) \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \int \frac{\partial \Phi_{in+1}}{\partial \vec{r}_i} F_{n+1} d\vec{r}_{n+1} d\vec{p}_{n+1}, \quad (1.16)$$

где введён потенциал

$$\Phi_{in+1} \equiv \frac{q_i q_{n+1}}{|\vec{r}_i - \vec{r}_{n+1}|} \quad (1.17)$$

Таким образом, уравнения для n -частичных функций распределения образуют цепочку связанных друг с другом уравнений. Число этих уравнений равно N . Полная система таких уравнений полностью эквивалентна уравнению Лиувилля для полной функции распределения и носит название цепочки уравнений Боголюбова.

Решение полученной системы сцепленных уравнений технически также невозможно. Однако она позволяет перейти к приближённому описанию, основанному на пренебрежении межчастичными корреляциями высокого порядка или на их описании в рамках модельных представлений. В этом случае описание ограничивается небольшим количеством n -частичных функций распределения с малыми n . В простейшем случае система описывается исключительно одночастичной функцией распределения, для которой уравнение принимает вид:

$$\frac{\partial F_1}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial F_1}{\partial \vec{r}} - q_i \frac{d\Phi_{\text{сред}}}{d\vec{r}} \frac{\partial F_1}{\partial \vec{p}} = \frac{N}{V} \int \hat{\Theta}_{12} F_2(t, \vec{r}, \vec{p}, \vec{r}_2, \vec{p}_2) d\vec{r}_2 d\vec{p}_2, \quad (1.18)$$

где

$$\hat{\Theta}_{12} \equiv \frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \vec{r}} \frac{\partial}{\partial \vec{p}} + \frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \vec{r}_2} \frac{\partial}{\partial \vec{p}_2} \quad (1.19)$$

Правая часть полученного уравнения описывает изменение состояния отдельной частицы при учёте её взаимодействия со всеми другими частицами. Физически такое воздействие отвечает двухчастичным столкновениям. В плазме, однако, столкновениями зачастую можно вовсе пренебречь, тогда уравнение для одночастичной функции распределения может быть сведено к уравнению, известному как уравнение Власова. В полностью электродинамическом случае оно имеет следующий вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{\gamma m} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + q \left(\vec{E} + \frac{1}{\gamma m c} [\vec{p} \times \vec{B}] \right) \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = 0, \quad (1.20)$$

где введено обозначение $f(t, \vec{r}, \vec{p})$ для одночастичной функции распределения и

$$\gamma = \sqrt{1 + \left(\frac{p}{mc} \right)^2}. \quad (1.21)$$

Поля \vec{E} и \vec{B} , фигурирующие в этом уравнении, являются усреднёнными в статистическом смысле полями, действующими на отдельную частицу. Аккуратный анализ показывает, что эти поля совпадают с макроскопическими полями, входящими в уравнения Максвелла. Таким образом, уравнение Власова может быть дополнено самосогласованным образом уравнениями для полей:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \text{rot} \vec{B} - \frac{4\pi}{c} \vec{j} \quad (1.22)$$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\text{rot} \vec{E} \quad (1.23)$$

$$\text{div} \vec{E} = 4\pi \rho \quad (1.24)$$

$$\text{div} \vec{B} = 0 \quad (1.25)$$

в которых плотность тока \vec{j} и плотность заряда ρ определяются движением и положением всех зарядов, в том числе и составляющих плазму.

1.2. Моменты функции распределения

Рассмотрим плазму, состоящую из электронов и ионов, возможно, нескольких типов. Каждый тип частиц будем описывать своей функцией распределения f_s . Для этих функций распределения можно ввести моменты, имеющие ясный физический смысл.

0-й момент представляет собой скаляр и имеет смысл концентрации частиц:

$$n_s(t, \vec{r}) = \int f_s(t, \vec{r}, \vec{p}) d\vec{p} \quad (1.26)$$

С её помощью можно определить также плотность полного заряда:

$$\rho(t, \vec{r}) = \sum_s q_s n_s(t, \vec{r}), \quad (1.27)$$

где q_s — заряд частицы типа s .

1-й момент функции распределения является вектором и имеет смысл плотности импульса

$$n_s \vec{P}_s(t, \vec{r}) = \int \vec{p} f_s(t, \vec{r}, \vec{p}) d\vec{p}, \quad (1.28)$$

с помощью которой можно определить гидродинамический (усреднённый по частицам) импульс $\vec{P}_s(t, \vec{r})$. Гидродинамическая скорость определяется похожим образом:

$$\vec{u}_s(t, \vec{r}) = \frac{1}{n_s(t, \vec{r})} \int \frac{\vec{p}}{\sqrt{1 + (p/m_s c)^2}} f_s(t, \vec{r}, \vec{p}) d\vec{p}, \quad (1.29)$$

и с ней связана также плотность электрического тока:

$$\vec{j}(t, \vec{r}) = \sum_s q_s n_s(t, \vec{r}) \vec{u}_s(t, \vec{r}) \quad (1.30)$$

2-й момент функции распределения — это тензор. Физически в нерелятивистском случае он представляет собой плотность потока импульса:

$$\Pi_s^{ij}(t, \vec{r}) = \frac{1}{m_s} \int p^i p^j f_s(t, \vec{r}, \vec{p}) d\vec{p}, \quad (1.31)$$

где верхним индексом обозначены компоненты векторов и тензора. Часто также вводят так называемый тензор давления:

$$\mathbb{P}_s^{ij}(t, \vec{r}) = \frac{1}{m_s} \int (p^i - P_s^i) (p^j - P_s^j) f_s(t, \vec{r}, \vec{p}) d\vec{p} \quad (1.32)$$

Скалярное давление может быть получено взятием следа от этого тензора:

$$P_s = \frac{1}{3} \text{Tr } \hat{\mathbb{P}} \equiv \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \mathbb{P}^{ii} \equiv \frac{1}{3m_s} \int |\vec{p} - \vec{P}_s|^2 f_s(t, \vec{r}, \vec{p}) d\vec{p} \quad (1.33)$$

Со 2-м моментом функции распределения связана также плотность внутренней энергии. Для идеальной плазмы можно пренебречь потенциальной энергией взаимодействия частиц, и тогда для электронов внутренняя энергия будет определяться только их кинетической энергией. В нерелятивистском случае она может быть вычислена следующим образом:

$$w_e = \int \frac{1}{2m_e} |\vec{p} - \vec{P}_e|^2 f_e(t, \vec{r}, \vec{p}) d\vec{p} \quad (1.34)$$

Таким образом, между давлением и внутренней энергией существует связь, называемая уравнением состояния. Для идеального электронного газа оно имеет вид, аналогичный идеальному одноатомному газу:

$$P_e = \frac{2}{3} w_e = \frac{2}{3} n_e \frac{3}{2} k T_e = n_e k T_e \quad (1.35)$$

1.3. Интеграл столкновений

Во многих задачах столкновения хоть и относительно редки, но могут играть существенную роль. В этом случае в кинетическую модель можно ввести их приближённое описание через некий функционал, зависящий только от одночастичной функции распределения:

$$\frac{df_s}{dt} = \sum_p Q(f_s, f_p), \quad (1.36)$$

где функция $Q(f_s, f_p)$ носит название интеграла столкновения. Уравнение в таком виде принято называть уравнением Больцмана.

Конкретный вид интеграла столкновения определяется из физических соображений и использованных приближений. Если столкновения упругие, то есть сохраняют импульс и энергию, и обусловлены действием центрально-симметричных сил, то в нерелятивистском пределе в самом общем виде интеграл столкновений может быть записан в виде:

$$Q \equiv \frac{1}{m_s} \iint B(|\vec{v}_s - \vec{v}_p|, \vartheta) [f_s(\vec{p}_s + \vec{q}) f_p(\vec{p}_p - \vec{q}) - f_s(\vec{p}_s) f_p(\vec{p}_p)] d\vec{v}_p d\vec{q}, \quad (1.37)$$

где введён угол рассеяния ϑ , определяемый следующим соотношением:

$$\cos \vartheta = \frac{(\vec{v}_s - \vec{v}_p) \cdot (\vec{v}_s' - \vec{v}_p')}{|\vec{v}_s - \vec{v}_p|^2} \quad (1.38)$$

Функцию $B(v, \vartheta)$ называют ядром интеграла столкновений. Его вид определяется физическим механизмом столкновения. Можно показать, что интеграл в таком виде сохраняет число частиц, полный импульс и энергию системы.

Простейшим приближением для интеграла столкновений является так называемое τ -приближение. Оно используется при малых отклонениях от равновесия, при которых возмущения можно линеаризовать. В этом случае интеграл также должен быть линеен по функции распределения, и поэтому может быть представлен в следующем виде:

$$Q(f_s, f_p) = \frac{1}{\tau_{sp}} (f_s - f_{s0}) \quad (1.39)$$

Параметр τ_{sp} определяет характерное время релаксации возмущения и, как правило, по порядку величины равняется обратной частоте столкновений. Равновесная функция распределения f_{s0} представляет собой распределение Максвелла:

$$f_{s0} \sim \exp\left(-\frac{p^2}{2m_s kT}\right) \quad (1.40)$$

В случае значительных отклонений от равновесия τ -приближение нарушается, и следует использовать более сложные модели релаксации. Одной из самых распространённых является модель столкновений Ландау. В этой модели столкновения рассматриваются как рассеяние точечных заряженных частиц в отсутствии внешних полей. Удобно в этом случае связать ядро интеграла столкновений с дифференциальным сечением рассеяния $d\sigma$:

$$B(|\vec{v}_s - \vec{v}_p|, \vartheta) d\vec{q} = |\vec{v}_s - \vec{v}_p| d\sigma(|\vec{v}_s - \vec{v}_p|, \vartheta) \quad (1.41)$$

Дифференциальное сечение рассеяния точечного заряда на другом заряде было получено Резерфордом:

$$d\sigma(v, \vartheta) = \left(\frac{q_s q_p}{2\mu_{sp} v^2}\right)^2 \frac{d\omega}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}}, \quad (1.42)$$

где q_s, q_p — электрические заряды сталкивающихся частиц, $\mu_{sp} = m_s m_p / (m_s + m_p)$ — их приведённая масса, $d\omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$ — единичный телесный угол.

Проблема с ядром в такой форме заключается в том, что при его использовании соответствующий интеграл столкновений расходится. К счастью, это расхождение носит логарифмический характер и может быть обрезано.

Действительно, в плазме взаимодействие частиц обусловлено электростатическими силами, которые носят дальнодействующий характер, то есть спадают по закону $\sim \frac{1}{r^2}$. В случае слабых столкновений (близкой к идеальной плазмы) кинетическая энергия частиц значительно превышает их энергию

взаимодействия друг с другом:

$$\frac{q_s^2}{d} \ll m_s v_T^2, \quad (1.43)$$

где $v_T \sim \sqrt{kT_s/m_s}$ — характерная (тепловая) скорость движения частиц, $d \sim n_s^{-1/3}$ — характерное расстояние между ними. Это условие эквивалентно условию большого числа частиц в сфере с радиусом Дебая r_D , например, для электронов:

$$n_e r_D^3 \sim n_e \left(\frac{T_e}{e^2 n_e} \right)^{3/2} = \left(\frac{T_e}{e^2 n_e^{1/3}} \right)^{3/2} \sim \left(\frac{m_e v_T^2 d}{e^2} \right)^{3/2} \gg 1 \quad (1.44)$$

Таким образом, в случае слабых столкновений частица плазмы взаимодействует сразу с большим количеством частиц. Каждое такое взаимодействие, однако, изменяет импульс частицы незначительно. Другими словами, столкновения происходят в малоугловом приближении. В импульсном пространстве это приводит к медленной диффузии частиц. Математически это означает, что интеграл столкновений может быть записан следующим образом:

$$\frac{df_s}{dt} = -\nabla_{\vec{p}} \vec{I} \quad (1.45)$$

Выражение для потока импульса \vec{I} было получено Ландау и имеет вид

$$I_i = \sum_j 2\pi (q_s q_p)^2 L J_{ij}, \quad (1.46)$$

где

$$J_{ij} = \int \left(f_s \frac{\partial f_p}{\partial p_{pj}} - f_p \frac{\partial f_s}{\partial p_{sj}} \right) \frac{|\vec{v}_s - \vec{v}_p|^2 \delta_{ij} - (v_{si} - v_{pi})(v_{sj} - v_{pj})}{|\vec{v}_s - \vec{v}_p|^3} d\vec{p}_p \quad (1.47)$$

Величина L носит название кулоновского логарифма. Он равен

$$L = \ln \left(\frac{1}{\vartheta_{\min}} \right), \quad (1.48)$$

где ϑ_{\min} — минимальный угол отклонения частицы при сохранении кулоновского характера столкновения. Выделяют два предельных случая. Если неопределённость положения частицы мала, так что её кинетическая энергия $E_{\text{kin}} \ll |q_s q_p|/\lambda_{\text{дВ}}$ и, следовательно, $|q_s q_p| \gg \hbar v$, то есть столкновение носит классический характер, и экранировка заряда определяется дебаевским механизмом, то

$$\vartheta_{\min} \sim \frac{|q_s q_p|}{\mu_{sp} v^2 r_D}, \quad (1.49)$$

что соответствует максимальному прицельному параметру порядка радиуса Дебая. В обратном случае максимальный прицельный параметр имеет величину порядка длины волны де Бройля и получаем:

$$\vartheta_{\min} \sim \frac{\hbar}{\mu_{sp} v r_D} \quad (1.50)$$

1.4. Свойства уравнения Власова

В отсутствии столкновений из закона сохранения частиц аналогично теореме Лиувилля можно доказать, что выполняется:

$$\frac{df}{dt} = 0 \quad (1.51)$$

Это свойство также называют свойством несжимаемости фазовой жидкости: плотность фазовой жидкости сохраняется вдоль траекторий частиц. Из него следует, в частности, так называемый принцип максимума:

$$0 \leq f(\vec{r}, \vec{p}, t) \leq \max_{\vec{r}, \vec{p}} f(\vec{r}, \vec{p}, 0) \quad (1.52)$$

Для функции распределения также справедлив закон сохранения L^p -норм:

$$\frac{d}{dt} \left(\int f^p d\vec{r} d\vec{p} \right) = 0, \quad p = 1, 2, \dots \quad (1.53)$$

В отсутствии внешних полей и при учёте только электростатического взаимодействия можно также записать законы сохранения импульса и энергии в простой форме:

$$\frac{d}{dt} \sum_s \left(\int \vec{p} f_s d\vec{r} d\vec{p} \right) = 0 \quad (1.54)$$

$$\frac{d}{dt} \sum_s \left(\int (\gamma m_s c^2 + q_s \Phi(\vec{r})) f d\vec{r} d\vec{p} \right) = 0 \quad (1.55)$$

Уравнение Власова может быть записано также в так называемой дивергентной форме. Для этого рассмотрим его в изначальной форме (далее для краткости индекс типа частиц опустим):

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{\gamma m} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + q \left(\vec{E} + \frac{1}{\gamma m c} [\vec{p} \times \vec{B}] \right) \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = 0 \quad (1.56)$$

С учётом независимости переменных \vec{r} и \vec{p} имеем:

$$\frac{\vec{p}}{\gamma m} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \equiv \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left(\frac{\vec{p}}{\gamma m} f \right) \quad (1.57)$$

Поскольку поле \vec{E} не зависит от импульса частиц, а для магнитной составляющей силы выполняется следующее тождество

$$\frac{\partial}{\partial \vec{p}} \left[\frac{\vec{p}}{\gamma m c} \times \vec{B} \right] = 0, \quad (1.58)$$

то имеем также:

$$q \left(\vec{E} + \frac{1}{\gamma m c} [\vec{p} \times \vec{B}] \right) \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} \equiv \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \left[q \left(\vec{E} + \frac{1}{\gamma m c} [\vec{p} \times \vec{B}] \right) f \right] \quad (1.59)$$

В результате получаем, что уравнение Власова может быть представлено в виде:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\vec{r}, \vec{p}}(\mathbf{A}f) = 0, \quad (1.60)$$

где введён 6-мерный вектор \mathbf{A} в пространстве (\vec{r}, \vec{p}) :

$$\mathbf{A} = \left\{ \frac{\vec{p}}{\gamma m}, q\vec{E} + \frac{q}{\gamma mc} [\vec{p} \times \vec{B}] \right\} \quad (1.61)$$

и векторный дифференциальный оператор набла в этом же пространстве:

$$\nabla_{\vec{r}, \vec{p}} \equiv \left\{ \frac{\partial}{\partial \vec{r}}, \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \right\} \quad (1.62)$$

Уравнение (1.60) называется дивергентной формой уравнения Власова. Физически она выражает собой в явном виде закон сохранения частиц. При этом величина $\mathbf{A}f$ имеет смысл потока частиц, а вектор \mathbf{A} — смысл скорости частиц в фазовом пространстве.

Глава 2

Метод характеристик

2.1. Характеристики и их свойства

Уравнение Власова относится к классу гиперболических уравнений первого порядка, поэтому для его решения можно применить метод характеристик.

Запишем уравнение Власова в следующем виде:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{A} \cdot \nabla_{\vec{r}, \vec{p}} f = 0, \quad (2.1)$$

где 6-мерные вектор \mathbf{A} и векторный дифференциальный оператор набла $\nabla_{\vec{r}, \vec{p}}$ уже были введены выше:

$$\mathbf{A} = \left\{ \frac{\vec{p}}{\gamma m}, q\vec{E} + \frac{q}{\gamma mc} [\vec{p} \times \vec{B}] \right\} \quad (2.2)$$

$$\nabla_{\vec{r}, \vec{p}} \equiv \left\{ \frac{\partial}{\partial \vec{r}}, \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \right\} \quad (2.3)$$

В таком виде уравнение Власова представляет собой уравнение переноса (или адвекции) жидкости с плотностью f в 6-мерном фазовом пространстве со скоростью \mathbf{A} .

Характеристиками уравнения называют семейство кривых $\mathbf{X}(t; s, \mathbf{x})$, удовлетворяющих уравнению

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{A}(\mathbf{X}, t) \quad (2.4)$$

для всех возможных начальных условий в некий момент времени s :

$$\mathbf{X}(s) = \{\vec{r}, \vec{p}\} \equiv \mathbf{x} \quad (2.5)$$

Физически характеристики в данном случае отвечают траекториям частиц в фазовом пространстве.

Для характеристик справедливы следующие утверждения. Во-первых, характеристики транзитивны:

$$\mathbf{X}(t_3; t_2, \mathbf{X}(t_2; t_1, \mathbf{x})) = \mathbf{X}(t_3; t_1, \mathbf{x}) \quad (2.6)$$

Во-вторых, семейство характеристик порождает взаимно однозначное и гладкое отображение (диффеоморфизм) фазового пространства само в себя: если $\mathbf{y} = \mathbf{X}(t; s, \mathbf{x})$, то $\mathbf{x} = \mathbf{X}(t; s, \mathbf{y})$. Физически это свойство связано с непрерывной и гладкой зависимостью сил, действующих на частицы, от точки пространства, а также с симметрией законов движения относительно обращения во времени.

В-третьих, якобиан отображения, порождаемого семейством характеристик, равен единице:

$$J(t; s) \equiv \det(\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{X}(t; s, \mathbf{x})) = 1 \quad (2.7)$$

Это свойство является следствием бездивергентности фазовых потоков $\nabla \mathbf{A} = 0$ и отражает собой всё тот же принцип несжимаемости фазовой жидкости.

Наконец, из несжимаемости фазовой жидкости следует, что её плотность f сохраняется вдоль траекторий частиц. Таким образом, зная характеристики уравнения, можно найти его решение при заданных начальных условиях $f(t = 0, \mathbf{x}) \equiv f_0(\mathbf{x})$:

$$f(t, \mathbf{x}) = f_0(\mathbf{X}(0; t, \mathbf{x})) \quad (2.8)$$

То есть, чтобы получить решение в данный момент времени, надо провести характеристику из каждой точки фазового пространства обратно во времени к моменту времени $t = 0$ и посмотреть, чему равнялась функция распределения на этой характеристике в этот момент времени.

2.2. Пример: свободный одномерный поток

Рассмотрим одномерное движение нерелятивистского газа в отсутствии как внешних сил, так и сил взаимодействия между частицами газа. В этом случае кинетическое уравнение сведётся к виду:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} = 0, \quad (2.9)$$

где $f \equiv f(t, x, v)$, v — скорость движения частиц газа вдоль оси x .

Уравнения характеристик будут иметь вид:

$$\frac{dX}{dt} = V \quad (2.10)$$

$$\frac{dV}{dt} = 0 \quad (2.11)$$

Решением этой системы уравнений является:

$$V(t; s, x, v) = v \quad (2.12)$$

$$X(t; s, x, v) = x + v(t - s) \quad (2.13)$$

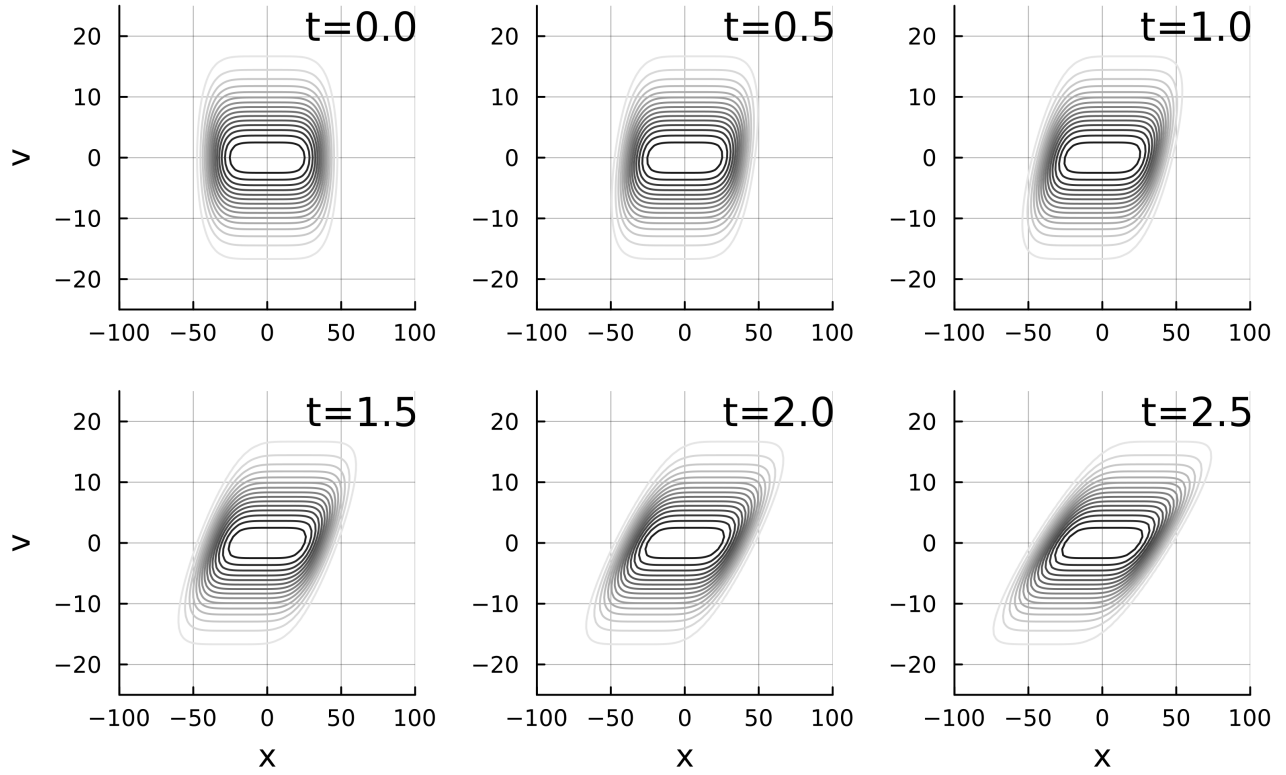


Рис. 2.1. Эволюция функции распределения одномерного свободного потока

Тогда решение исходного уравнения при заданной функции распределения $f_0(x, v)$ в момент времени $t = 0$ может быть записано в следующем виде:

$$f(x, v, t) = f_0(x - vt, v) \quad (2.14)$$

Пример такого решения для начальных условий вида

$$f_0(x, v) = \exp \left\{ - \left(\frac{x}{40} \right)^6 - \left(\frac{v}{10} \right)^2 \right\} \quad (2.15)$$

приведён на Рис. 2.1.

2.3. Пример: электронный пучок вблизи нуля линейно нарастающего поля

Рассмотрим теперь другой пример задачи, решаемой методом характеристик. Пусть имеется пучок нерелятивистских электронов во внешнем электрическом поле, при этом поле линейно нарастает и электроны находятся вблизи точки, в которой поле пересекает нуль. Будем также пренебрегать взаимодействием между электронами, считая его пренебрежимо малым по сравнению со внешним полем.

Выбором единиц измерения можем положить массу и заряд электронов равными единице и представить действующее на них поле в виде

$$E_x = -x, \quad (2.16)$$

тогда уравнение Власова примет вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} - x \frac{\partial f}{\partial v} = 0 \quad (2.17)$$

Уравнения характеристик в этом случае имеют следующий вид:

$$\frac{dX}{dt} = V \quad (2.18)$$

$$\frac{dV}{dt} = -X \quad (2.19)$$

Решение этой системы уравнений имеет вид:

$$V(t; s, x, v) = v \cos(t - s) - x \sin(t - s) \quad (2.20)$$

$$X(t; s, x, v) = x \cos(t - s) + v \sin(t - s) \quad (2.21)$$

То есть траектории движения частиц представляют собой эллипсы в фазовом пространстве. Это отвечает гармоническим колебаниям вдоль оси x .

Зная решение уравнений характеристик, можем теперь записать решение исходного уравнения:

$$f(x, v, t) = f_0(x \cos t - v \sin t, v \cos t + x \sin t) \quad (2.22)$$

На Рис. 2.2 приведён пример решения для начальных условий вида

$$f_0(x, v) = \exp \left\{ - \left(\frac{x}{40} \right)^6 - \left(\frac{v}{10} \right)^2 \right\} \quad (2.23)$$

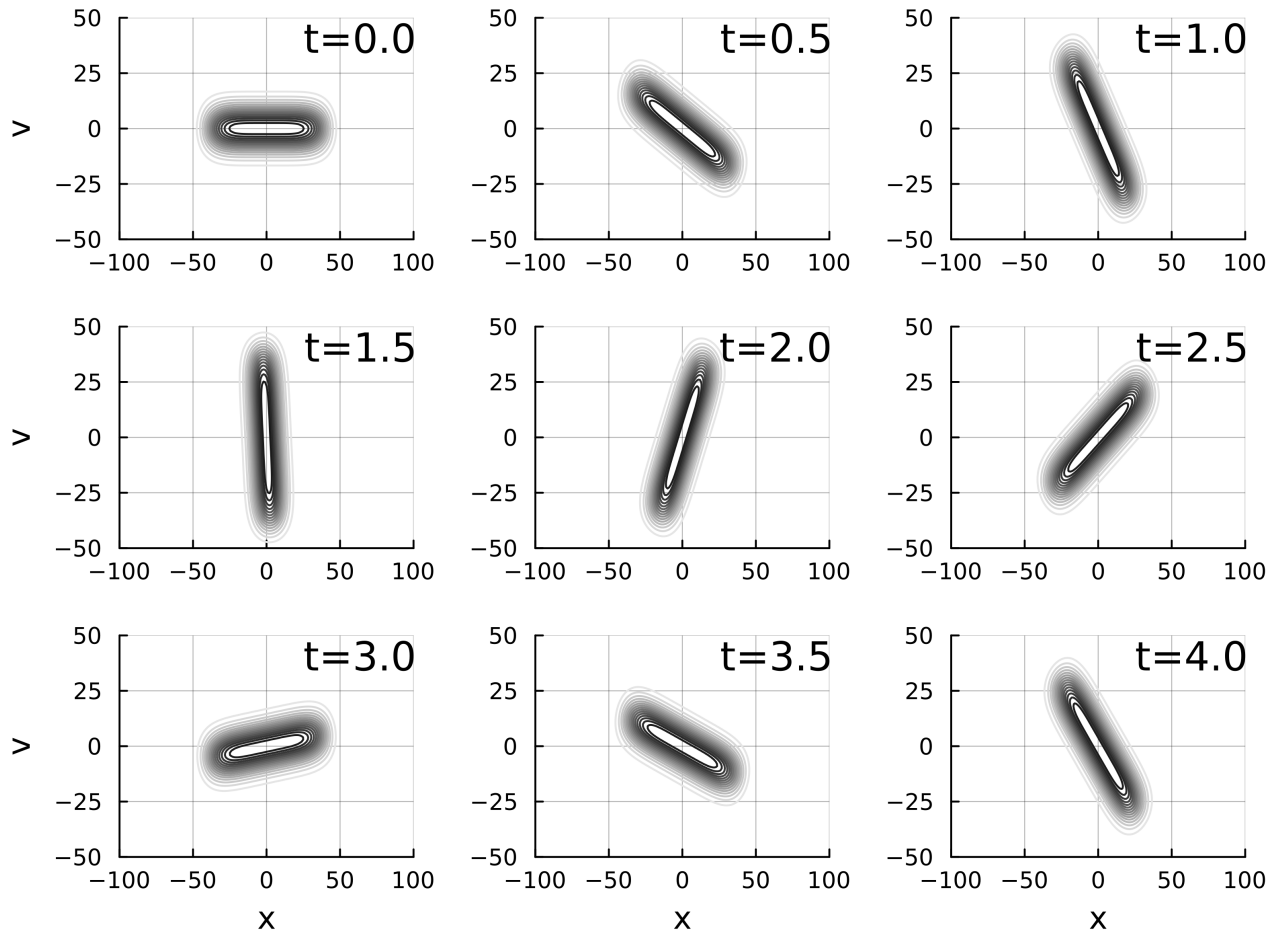


Рис. 2.2. Эволюция функции распределения электронного пучка вблизи нуля линейно нарастающего электрического поля

Глава 3

Метод интегралов движения

3.1. Общие сведения

Из гамильтоновой механики известно, что в стационарном случае, когда гамильтониан не зависит явно от времени, траектория движения частицы в 6-мерном фазовом пространстве однозначно определяется пятью независимыми интегралами движения — первыми интегралами соответствующей системы Гамильтона. Если эти интегралы движения $\{\mathcal{I}_1(\vec{r}, \vec{p}) \mathcal{I}_2(\vec{r}, \vec{p}) \dots \mathcal{I}_5(\vec{r}, \vec{p})\}$ известны, то поскольку они сохраняются вдоль траекторий частиц, то есть вдоль характеристик уравнения Власова, то его решение может быть представлено как функция этих интегралов:

$$f(t, \vec{r}, \vec{p}) \equiv g(\mathcal{I}_1, \mathcal{I}_2 \dots \mathcal{I}_5) \quad (3.1)$$

При этом уравнение Власова будет удовлетворено при произвольной форме функции g .

Особенно эффективен такой способ в случае, когда несколько интегралов движения можно выписать в аналитическом виде, а от остальных функция распределения не зависит. Чаще всего в качестве соответствующих интегралов движения выступают аддитивные интегралы, связанные с симметрией системы: энергия, обобщённый импульс, обобщённый момент импульса.

Если найти все интегралы движения не удаётся, то их использование хоть и не позволяет найти решение уравнения Власова, однако позволяет уменьшить число переменных в нём, упростив дальнейший анализ.

3.2. Энергетическая подстановка

Если функция Гамильтона частиц не зависит явно от времени, то вдоль траектории сохраняется их энергия. В этом случае уравнение Власова может быть упрощено так называемой энергетической подстановкой. В случае одномерного движения в отсутствии магнитных полей и поперечных электрических полей это позволяет полностью исключить уравнение Власова.

Действительно, в этом случае функция распределения будет зависеть только от двух переменных: $f(\vec{r}, \vec{p}) \equiv f(x, p_x)$ и введение интеграла движения

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + q\phi(x), \quad (3.2)$$

где $\phi(x)$ — электростатический потенциал, позволяет подстановкой

$$f(x, p_x) = g(H) \quad (3.3)$$

тождественно удовлетворить уравнению Власова:

$$\begin{aligned} \frac{p_x}{m} \frac{\partial f}{\partial x} - q \frac{d\phi}{dx} \frac{\partial f}{\partial p_x} &= \frac{p_x}{m} \frac{dg}{dH} \frac{\partial H}{\partial x} - q \frac{d\phi}{dx} \frac{dg}{dH} \frac{\partial H}{\partial p_x} = \\ &= \frac{p_x}{m} \frac{dg}{dH} q \frac{d\phi}{dx} - q \frac{d\phi}{dx} \frac{dg}{dH} \frac{p_x}{m} = 0 \end{aligned} \quad (3.4)$$

Распределение плазмы в пространстве при этом будет определяться решением уравнением Пуассона:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -4\pi \sum_s \int_{-\infty}^{+\infty} q_s f_s(x, p_x) dp_x \quad (3.5)$$

Или с учётом подстановки:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -4\pi \sum_s \int_{-\infty}^{+\infty} q_s g_s(H(x, p_x)) dp_x \quad (3.6)$$

В качестве примера рассмотрим полностью ионизированную плазму, занимающую половину пространства $x \leq 0$. Ионы будем для простоты считать неподвижными и однократно ионизированными, их концентрация тогда может быть записана в виде:

$$N_i(x) = N_{i0} \Theta(-x), \quad (3.7)$$

где $\Theta(x)$ — функция включения:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & \Longleftrightarrow x \geq 0 \\ 0 & \Longleftrightarrow x < 0 \end{cases} \quad (3.8)$$

Таким образом, уравнение Пуассона может быть переписано в виде:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -4\pi e \left(N_i(x) - \int_{-\infty}^{+\infty} g(H(x, p_x)) dp_x \right), \quad (3.9)$$

где функция $g(H)$ определяет распределение по энергиям электронов. Предположим, что это распределение представляет собой одномерное распределение Максвелла с температурой T (выраженной в энергетических единицах):

$$g(H) = \frac{N_{e0}}{\sqrt{2\pi m_e T}} \exp \left\{ -\frac{H}{T} \right\}, \quad (3.10)$$

где N_{e0} — фоновая концентрация электронов в области, где потенциал равен нулю. Тогда получаем:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\phi}{dx^2} &= -4\pi e \left(N_i(x) - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{N_{e0}}{\sqrt{2\pi m_e T}} \exp \left\{ -\frac{p_x^2}{2mT} + \frac{e\phi}{T} \right\} dp_x \right) = \\ &= -4\pi e \left(N_i(x) - N_{e0} \exp \left\{ \frac{e\phi}{T} \right\} \right) \end{aligned} \quad (3.11)$$

Будем считать, что поле и потенциал спадают к нулю внутри плазмы, так что $N_{i0} = N_{e0}$ и введём безразмерные величины

$$\varphi = \frac{e\phi}{T}, \quad (3.12)$$

$$\xi = x \left(\frac{4\pi e^2 N_{e0}}{T} \right)^{\frac{1}{2}} \equiv \frac{x}{r_D}, \quad (3.13)$$

где r_D — радиус Дебая. Тогда уравнение сведётся к виду:

$$\frac{d^2\varphi}{d\xi^2} = e^\varphi - \Theta(-x) \quad (3.14)$$

Это нелинейное уравнение не имеет аналитического решения, однако оно может быть решено численно. Если решение найдено, то распределение концентрации электронов в пространстве может быть вычислено следующим образом:

$$\begin{aligned} N_e(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} g(H(x, p_x)) dp_x = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{N_{e0}}{\sqrt{2\pi m_e T}} \exp \left\{ -\frac{p_x^2}{2mT} + \frac{e\phi}{T} \right\} dp_x = \\ &= N_{e0} \exp \left\{ \frac{e\phi}{T} \right\} \end{aligned} \quad (3.15)$$

Хотя уравнение (3.14) не поддаётся аналитическому решению, его можно частично проанализировать без применения численных методов. Рассмотрим его в области $x > 0$:

$$\frac{d^2\varphi}{d\xi^2} = e^\varphi \quad (3.16)$$

Обозначим $y = d\varphi/d\xi$ и перепишем уравнение в виде системы:

$$\frac{d\varphi}{d\xi} = y \quad (3.17)$$

$$\frac{dy}{d\xi} = e^\varphi \quad (3.18)$$

Поделим нижнее уравнение на верхнее и получим:

$$\frac{dy}{d\varphi} = \frac{e^\varphi}{y} \quad (3.19)$$

$$ydy = e^\varphi d\varphi \quad (3.20)$$

$$y^2 - 2e^\varphi = C \quad (3.21)$$

Положим константу интегрирования $C = 0$. Это соответствует тому, что в области где поле $E = -d\phi/dx$ отсутствует, потенциал устремляется в бесконечность: $\varphi \rightarrow -\infty$ при $y = 0$. Тогда:

$$y^2 = 2e^\varphi \quad (3.22)$$

$$y_{\pm} = \pm\sqrt{2} \exp\left\{\frac{\varphi}{2}\right\} \quad (3.23)$$

$$\frac{d\varphi_{\pm}}{d\xi} = \pm\sqrt{2} \exp\left\{\frac{\varphi}{2}\right\} \quad (3.24)$$

$$\frac{d\varphi_{\pm}}{\exp\{\varphi/2\}} = \pm\sqrt{2}d\xi \quad (3.25)$$

$$-2 \exp\left\{-\frac{\varphi_{\pm}}{2}\right\} = \pm\sqrt{2}(\xi - \xi_0) \quad (3.26)$$

$$\varphi_{\pm} = -2 \ln \left\{ \mp \frac{\xi - \xi_0}{\sqrt{2}} \right\} \quad (3.27)$$

Мы получили два решения, одно из которых определено в области $\xi > \xi_0$, а другое — в области $\xi < \xi_0$. Поскольку мы ищем решение во всей области $\xi > 0$, выберем решение φ_- .

Таким образом, в области, где ионы отсутствуют, потенциал электронного газа логарифмически расходится с характерным масштабом порядка дебаевского радиуса. Концентрация электронов при этом ведёт себя следующим образом:

$$N_e = N_{e0} \exp\left\{\frac{e\phi}{T}\right\} = \frac{2N_{e0}}{(\xi - \xi_0)^2} \quad (3.28)$$

То есть концентрация спадает до нуля обратно пропорционально квадрату расстоянию.

Рассмотрим теперь уравнение (3.14) в области $x \leq 0$:

$$\frac{d^2\varphi}{d\xi^2} = e^\varphi - 1 \quad (3.29)$$

Проинтегрируем его один раз аналогично случаю $x > 0$:

$$\frac{d\varphi}{d\xi} = y \quad (3.30)$$

$$\frac{dy}{d\xi} = e^\varphi - 1 \quad (3.31)$$

$$\frac{dy}{d\varphi} = \frac{e^\varphi - 1}{y} \quad (3.32)$$

$$y dy = (e^\varphi - 1) d\varphi \quad (3.33)$$

$$y^2 - 2e^\varphi + 2\varphi = C \quad (3.34)$$

В глубине плазмы ($x \rightarrow -\infty$) поле и потенциал спадают до нуля: $\varphi \rightarrow 0$, $y \rightarrow 0$, следовательно, $C = -2$. Получаем:

$$\frac{d\varphi_\pm}{d\xi} = \pm\sqrt{2}(e^{\varphi_\pm} - \varphi_\pm - 1)^{\frac{1}{2}} \quad (3.35)$$

Решение этого уравнения надо сшить с решением уравнения в области $x > 0$. Для этого выберем в качестве решения снова φ_- и приравняем выражения для y^2 в точке $x = 0$:

$$2e^{\varphi_0} = 2(e^{\varphi_0} - \varphi_0 - 1), \quad (3.36)$$

где $\varphi_0 \equiv \varphi(0)$. Отсюда получаем $\varphi_0 = -1$. Найдём также значение константы интегрирования ξ_0 :

$$\varphi_0 = -2 \ln \left\{ -\frac{\xi_0}{\sqrt{2}} \right\} \quad (3.37)$$

$$\xi_0 = -\sqrt{2}e^{-\varphi_0/2} = -\sqrt{2}e \quad (3.38)$$

Значение φ_0 следует использовать в качестве граничного условия при численном решении уравнения (3.35). Результат приведён на Рис. 3.1. Полученное решение описывает структуру приповерхностного дебаевского слоя, образующегося в результате разлёта нагретых электронов.

Уравнения, получающиеся в результате энергетической подстановки, однако, имеют одну особенность в случае наличия в плазме потенциальных ям. Проиллюстрируем этот случай для решения, у которого потенциал имеет вид, показанный на Рис. 3.2. В таком потенциале не могут существовать ионы с энергией $E_+ < q\varphi_{min}$ и электроны с энергией $E_- > -e\varphi_{max}$. При этом движение ионов с энергией $E_+ > q\varphi_{max}$ и электронов с энергией $E_- < -e\varphi_{min}$ ничем не ограничено. Для частиц же с промежуточной энергией $q\varphi_{min} \leq E_+ \leq q\varphi_{max}$ и $-e\varphi_{min} < E_- < -e\varphi_{max}$ существуют две независимые друг от друга области, в которых они могут находиться. Например, ионы с энергией $E_+ = q\varphi_1$ могут или осциллировать между точками поворота x_1 и x_2 , в которых их скорость и кинетическая энергия обращаются в нуль, или,

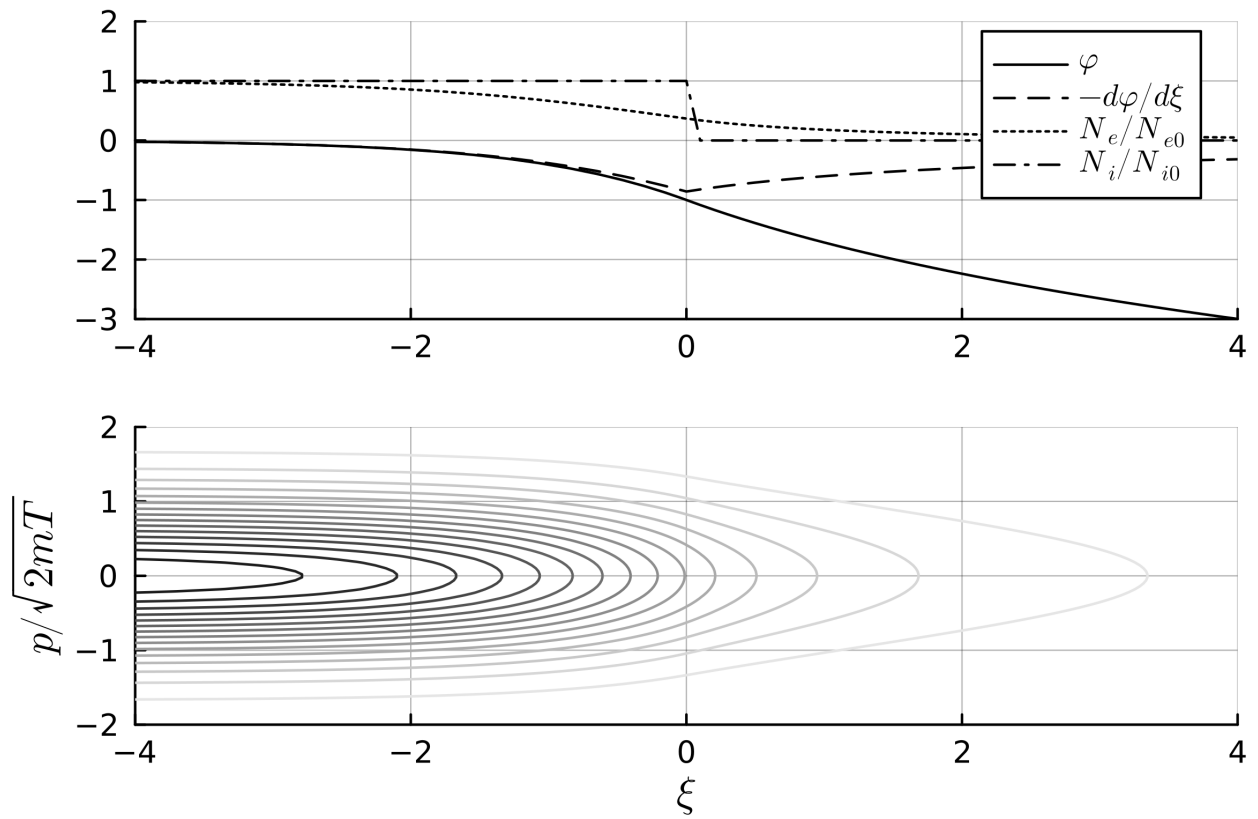


Рис. 3.1. Решение уравнения (3.14). Сверху приведены распределения потенциала, электрического поля и концентрация электронов и ионов. Снизу приведена функция распределения электронов

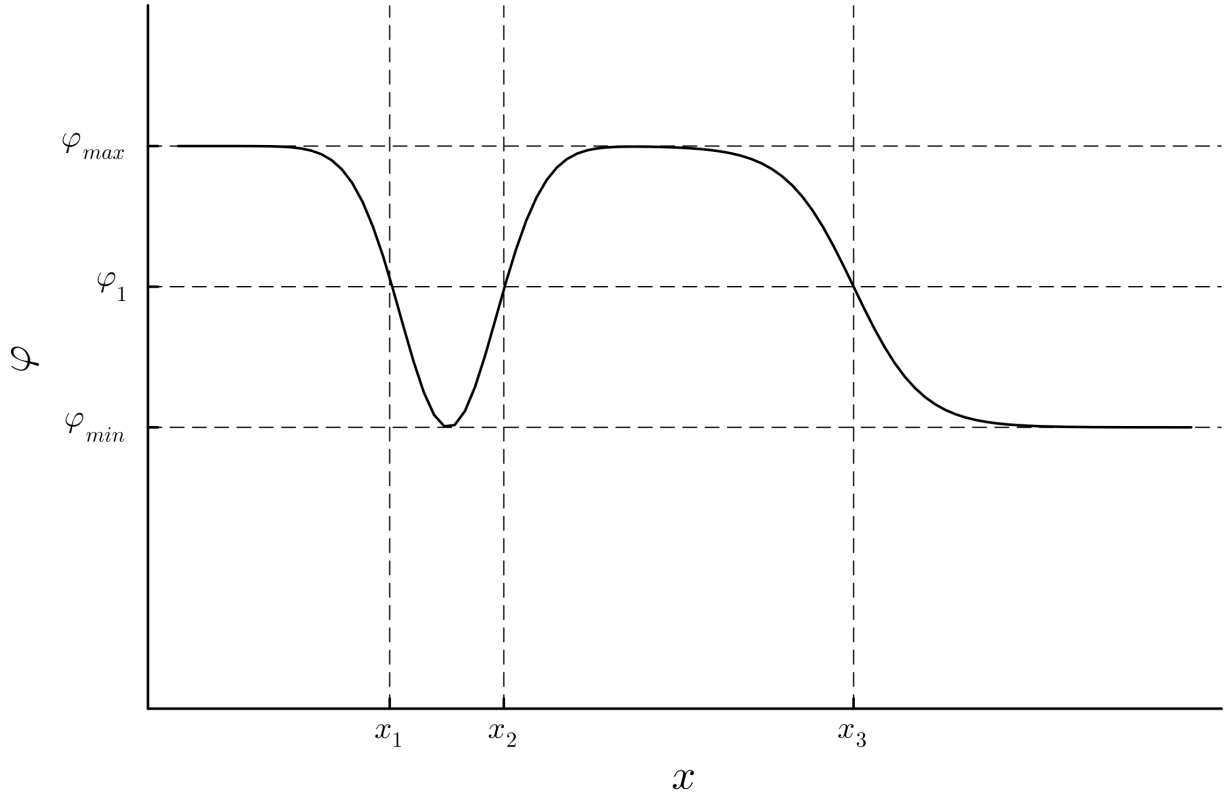


Рис. 3.2. Пример решения с потенциальной ямой, в которой оказываются захваченными частицы

налетев из области $x > x_3$, отразиться в точке x_3 и улететь обратно. Для электронов с энергией $E_- = -e\varphi_1$ осцилляции возможны между точками x_2 и x_3 , а инфинитное движение — в области $(-\infty, x_1)$.

Частицы, совершающие финитные движения внутри потенциальной ямы, называют захваченными. Их распределение по энергиям в несвязанных друг с другом областях может быть разным. При этом поскольку поток частиц осциллирует, то на функцию распределения накладывается только требование симметричности по импульсам относительно $p_x = 0$. Самосогласованные решения такого типа принято называть модами Бернштейна — Грина — Крускала (БГК). Эти решения могут описывать в том числе и бегущие потенциальные волны: для этого надо построить решение, в котором средняя скорость плазмы на обеих бесконечностях одинакова и не равна нулю, тогда в системе отсчёта этого потока решение БГК будет описывать нелинейную ленгмюровскую волну.

Отметим, что для ленгмюровских волн, вообще говоря, наблюдается эффект затухания Ландау, заключающийся в том, что между полем и частицами происходит обмен энергией. В модах БГК, однако, этот эффект в точности равен нулю благодаря изначальному требованию самосогласованности решения. По этой причине ленгмюровские волны в максвелловской плазме не

являются точным решением уравнений Власова, в то время как моды БГК — являются. В некотором смысле эти моды можно считать предельным результатом затухания Ландау на временах, когда обмен энергией между частицами и полем прекращается.

3.3. Нейтральные токовые структуры

Рассмотрим теперь другой пример одномерных структур, в которых имеются поперечные токи и самосогласованное с ними магнитное поле. При этом будем предполагать, что разделение зарядов и электростатическое поле отсутствуют. Тогда в стационарном случае функция распределения будет зависеть только от 4-х переменных: $f(t, \vec{r}, \vec{p}) \equiv f(x, p_x, p_y, p_z)$, следовательно, должны существовать 3 интеграла движения. Ими являются энергия H и две поперечные проекции обобщённого импульса частиц P_y, P_z . Таким образом, получаем:

$$f(x, p_x, p_y, p_z) = g(H, P_y, P_z) \quad (3.39)$$

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \quad (3.40)$$

$$P_y = p_y + \frac{q}{c} A_y \quad (3.41)$$

$$P_z = p_z + \frac{q}{c} A_z, \quad (3.42)$$

где A_y, A_z — проекции векторного потенциала на соответствующие оси. Распределение поля и токов в этом случае могут быть получены из теоремы о циркуляции тока, которая для одномерного распределения векторного потенциала имеет вид:

$$\frac{d^2 A_{y,z}}{dx^2} = \frac{4\pi}{c} j_{y,z}, \quad (3.43)$$

где плотность тока:

$$j_{y,z}(x) = q \iiint \frac{p_{y,z}}{m} f(x, p_x, p_y, p_z) dp_x dp_y dp_z \quad (3.44)$$

Получившееся уравнение на векторный потенциал принято называть уравнением Грэда — Шафранова.

Рассмотрим одно из частных решений этого уравнения, известное как токовый слой Харриса. Предположим, что токи создаются только электронами и направлены только вдоль оси z , тогда $A_y \equiv 0$, $P_y \equiv p_y$. Будем искать решение для функции распределения электронов в следующем виде:

$$g(H, p_y, P_z) = C \exp \left\{ -\frac{H}{T} \right\} \exp \left\{ \frac{P_z v}{T} \right\} \quad (3.45)$$

Выясним физический смысл скорости v . Для этого распишем выражение для функции распределения:

$$\begin{aligned}
f(x, p_x, p_y, p_z) &= C \exp \left\{ -\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2mT} + \frac{(p_z - eA_z/c)v}{T} \right\} = \\
&= C \exp \left\{ -\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 - 2(p_z - eA_z/c)mv}{2mT} \right\} = \\
&= C \exp \left\{ -\frac{p_x^2 + p_y^2 + (p_z - mv)^2 - (mv)^2 + 2eA_zmv/c}{2mT} \right\} = \\
&= \tilde{C} \exp \left\{ -\frac{p_x^2 + p_y^2 + (p_z - mv)^2}{2mT} \right\} \exp \left\{ \frac{eA_zv}{cT} \right\},
\end{aligned}$$

где мы ввели новую нормировочную константу $\tilde{C} = C \exp(-mv^2/2T)$. Отсюда видно, что v играет роль средней скорости электронов (гидродинамической скорости потока) вдоль оси z . Пусть в области, где $A_z = 0$, концентрация электронов равна N_{e0} , вычислим нормировочную константу:

$$\begin{aligned}
N_{e0} &= \int f d\vec{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int \int \tilde{C} \exp \left\{ -\frac{p_x^2 + p_y^2 + (p_z - mv)^2}{2mT} \right\} dp_x dp_y dp_z = \\
&= \tilde{C} (2\pi mT)^{\frac{3}{2}},
\end{aligned} \tag{3.46}$$

откуда получаем:

$$C = \tilde{C} \exp \left(\frac{mv^2}{2T} \right) = \frac{N_{e0}}{(2\pi mT)^{\frac{3}{2}}} \exp \left(\frac{mv^2}{2T} \right) \tag{3.47}$$

Найдём теперь связь плотности тока и векторного потенциала A_z :

$$\begin{aligned}
j_z &= -e \int_{-\infty}^{+\infty} \int \int \frac{p_z}{m} f(x, p_x, p_y, p_z) dp_x dp_y dp_z = \\
&= -\frac{eN_{e0}}{m} \exp \left\{ \frac{eA_zv}{cT} \right\} I,
\end{aligned} \tag{3.48}$$

где

$$\begin{aligned}
I &= \iiint_{-\infty}^{+\infty} p_z \exp \left\{ -\frac{p_x^2 + p_y^2 + (p_z - mv)^2}{2mT} \right\} \frac{dp_x dp_y dp_z}{(2\pi mT)^{\frac{3}{2}}} = \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} p_z \exp \left\{ -\frac{(p_z - mv)^2}{2mT} \right\} \frac{dp_z}{(2\pi mT)^{\frac{1}{2}}} = \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} (p_z - mv) \exp \left\{ -\frac{(p_z - mv)^2}{2mT} \right\} \frac{d(p_z - mv)}{(2\pi mT)^{\frac{1}{2}}} + \\
&+ mv \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\frac{(p_z - mv)^2}{2mT} \right\} \frac{d(p_z - mv)}{(2\pi mT)^{\frac{1}{2}}} = mv
\end{aligned} \tag{3.49}$$

Здесь учтено, что первый интеграл в последней сумме является антисимметричным относительно $p_z - mv = 0$, и следовательно равен нулю. Таким образом, получаем:

$$j_z = -eN_{e0}v \exp \left\{ \frac{eA_z v}{cT} \right\} \tag{3.50}$$

Подставим это выражение в теорему о циркуляции тока и получим уравнение

$$\frac{d^2 A_z}{dx^2} = -\frac{4\pi eN_{e0}v}{c} \exp \left\{ \frac{eA_z v}{cT} \right\} \tag{3.51}$$

Введём безразмерные величины:

$$a = \frac{eA_z v}{cT} \tag{3.52}$$

$$\xi = x \left(\frac{8\pi e^2 N_{e0}}{T} \right)^{1/2} \frac{v}{c} = \frac{x\sqrt{6}}{d_{e0}} \frac{v}{v_T}, \tag{3.53}$$

где $d_{e0} = c/\omega_{pe0}$ носит название инерционной электронной длины и имеет смысл глубины плазменного скин-слоя (ω_{pe0} — электронная плазменная частота), и $v_T = \sqrt{3T/m}$ — тепловая скорость электронов. В безразмерном виде уравнение принимает вид:

$$\frac{d^2 a}{d\xi^2} = -2e^a \tag{3.54}$$

Обозначим $y = da/d\xi$ и перепишем это уравнение в виде системы двух уравнений 1-го порядка:

$$\frac{dy}{d\xi} = -2e^a \tag{3.55}$$

$$\frac{da}{d\xi} = y \tag{3.56}$$

Поделим верхнее на нижнее и после некоторых преобразований получим:

$$ydy = -2e^a da \quad (3.57)$$

$$y^2 = -4e^a + C \quad (3.58)$$

Положим $C = 4$, что соответствует тому, что в точке, где магнитное поле обращается в нуль ($y = 0$), векторный потенциал также обращается в нуль ($a = 0$). Получаем:

$$y^2 = 4(1 - e^a) \quad (3.59)$$

$$\frac{da}{d\xi} = \pm 2\sqrt{(1 - e^a)} \quad (3.60)$$

$$\frac{da}{\sqrt{1 - e^a}} = \pm 2d\xi \quad (3.61)$$

Рассмотрим интеграл от правой части:

$$\begin{aligned} \int \frac{da}{\sqrt{1 - e^a}} &= \int \frac{e^{-a/2} da}{\sqrt{e^{-a} - 1}} = \left[t = e^{-a/2} \right] = \int \frac{-2dt}{\sqrt{t^2 - 1}} \\ &= [t = \cosh u] = \int -2du = -2u + C = -2\operatorname{arccosh} \left(e^{-a/2} \right) + C \end{aligned}$$

Таким образом, получаем:

$$-2\operatorname{arccosh} \left(e^{-a/2} \right) + C = \pm 2\xi \quad (3.62)$$

Константа C может быть выбрана равной нулю соответствующим выбором начала отсчёта оси x , и тогда имеем:

$$a = -2 \ln \cosh \xi \quad (3.63)$$

Найдём распределение магнитного поля:

$$B_y = -\frac{dA_z}{dx} = -\frac{cT d_{e0}}{ev} \frac{da}{d\xi} = \sqrt{8\pi N_{e0} T} \tanh \xi, \quad (3.64)$$

распределение плотности тока:

$$j_z = -eN_{e0}v \exp \left\{ \frac{eA_z v}{cT} \right\} = -\frac{eN_{e0}v}{\cosh^2 \xi} \quad (3.65)$$

и распределение концентрации:

$$N_e = \int f d\vec{p} = N_{e0} \exp \left\{ \frac{eA_z v}{cT} \right\} = \frac{N_{e0}}{\cosh^2 \xi} \quad (3.66)$$

Найденная структура отвечает токовому плазменному слою, разделяющему области с противоположно направленным магнитным полем. Графический вид полученного решения приведён на Рис. 3.3.

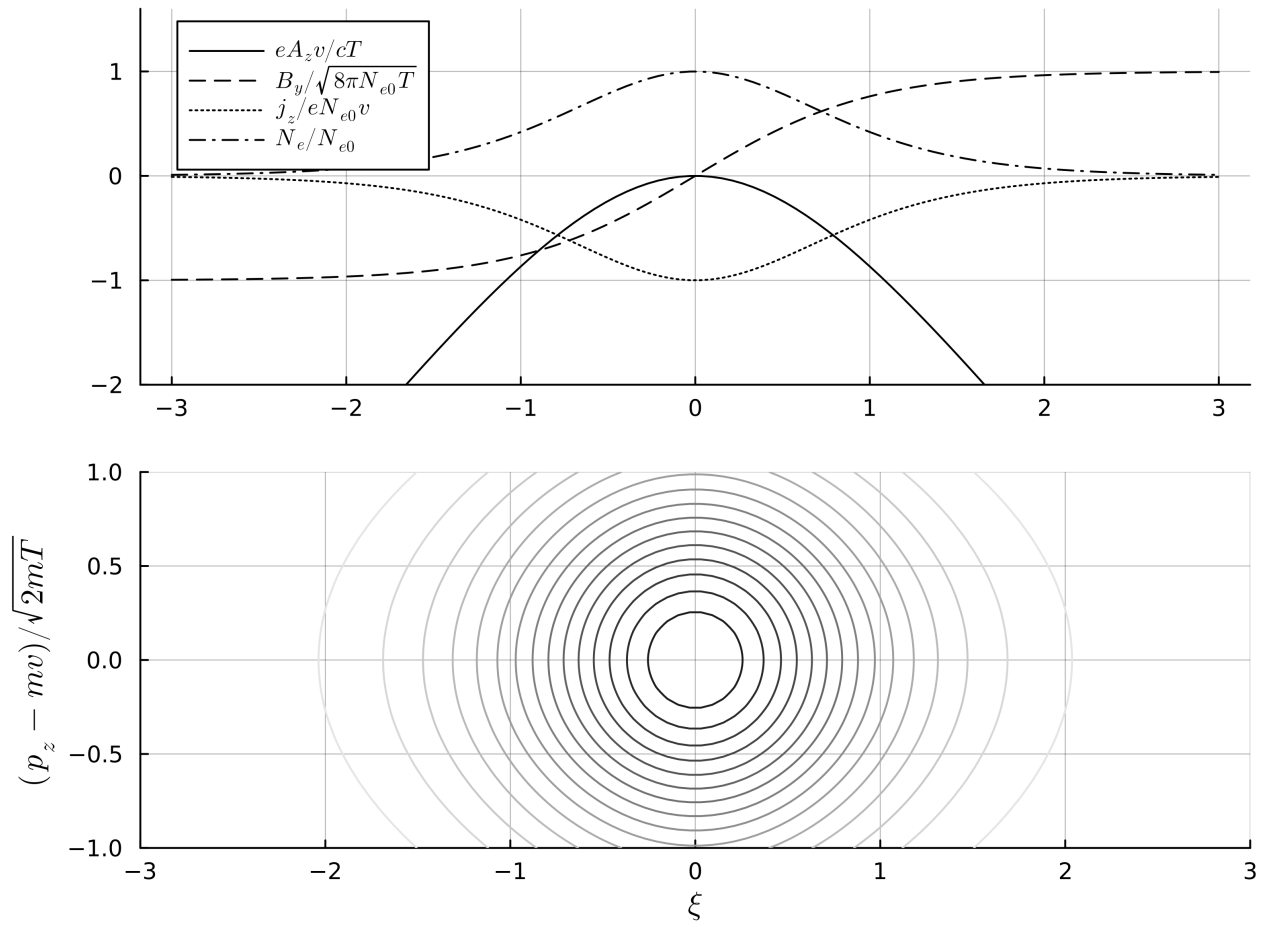


Рис. 3.3. Решение уравнения Грэда — Шафранова для токового слоя Харриса. Сверху приведены распределения векторного потенциала, магнитного поля, плотности тока и концентрации электронов. Снизу приведена функция распределения электронов

Физический смысл полученного решения заключается в том, что в так называемой нулевой плоскости, в которой магнитное поле обращается в нуль, в стационарном случае должно образовываться уплотнение плазмы, такое чтобы кинетическое давление плазмы уравновешивало бы давление магнитного поля. Действительно, при $|x| \gg 1$ модуль магнитного поля равен:

$$|B_y^\infty| = \sqrt{8\pi N_{e0}T},$$

откуда получаем:

$$\frac{(B_y^\infty)^2}{8\pi} = N_{e0}T,$$

где слева стоит выражение для магнитного давления на бесконечности, а справа — выражение для кинетического давления в точке $x = 0$.

Глава 4

Введение в методы численного решения кинетических уравнений

4.1. Метод разделения операторов

К сожалению, аналитические методы решения уравнения Власова позволяют изучать лишь узкий класс задач. В общем случае уравнение Власова приходится решать численно. Главная вычислительная проблема при этом заключается в том, что кинетические уравнения описывают эволюцию функции в фазовом пространстве, которое имеет шесть измерений. Чтобы частично облегчить задачу численного интегрирования часто применяют метод, известный как метод разделения операторов, позволяющий разбить многомерную задачу на последовательность одномерных.

Рассмотрим простейший пример, в котором разделение операторов даёт точный ответ. Пусть имеется уравнение адвекции в двумерном пространстве с постоянными скоростями:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_x \frac{\partial f}{\partial x} + v_y \frac{\partial f}{\partial y} = 0 \quad (4.1)$$

Найдём решение методом характеристик. Соответствующие уравнения для поиска характеристик имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{dX}{dt} &= V_x & \frac{dV_x}{dt} &= 0 \\ \frac{dY}{dt} &= V_y & \frac{dV_y}{dt} &= 0 \end{aligned}$$

В силу постоянства скоростей их решение легко находится:

$$\begin{aligned} V_x(t; s, x, v_x, y, v_y) &= v_x \\ V_y(t; s, x, v_x, y, v_y) &= v_y \\ X(t; s, x, v_x, y, v_y) &= x + v_x(t - s) \\ Y(t; s, x, v_x, y, v_y) &= y + v_y(t - s) \end{aligned}$$

И тогда решение исходного уравнения может быть записано в виде:

$$f(t, x, y, v_x, v_y) = f_0(x - v_x t, y - v_y t, v_x, v_y), \quad (4.2)$$

где $f_0(x, y, v_x, v_y)$ — функция распределения в момент времени $t = 0$.

Идея метода разделения операторов заключается в том, чтобы разделить оператор адвекции $\hat{A} = v_x \partial / \partial x + v_y \partial / \partial y$ на два: $\hat{A}_x = v_x \partial / \partial x$ и $\hat{A}_y = v_y \partial / \partial y$ и решить два уравнения адвекции последовательно.

Рассмотрим сначала уравнение адвекции вдоль оси x :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_x \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (4.3)$$

с начальным условием $f(0, x, y, v_x, v_y) = f_0(x, y, v_x, v_y)$. Применяя метод характеристик, получаем промежуточное решение:

$$\tilde{f}(t, x, y, v_x, v_y) = f_0(x - v_x t, y, v_x, v_y) \quad (4.4)$$

Теперь рассмотрим уравнение адвекции вдоль оси y :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_y \frac{\partial f}{\partial y} = 0 \quad (4.5)$$

с начальным условием, определяемым промежуточным решением $f(0, x, y, v_x, v_y) = \tilde{f}(t, x, y, v_x, v_y)$. Снова применим метод характеристик и получим окончательное решение:

$$f(t, x, y, v_x, v_y) = \tilde{f}(t, x, y - v_y t, v_x, v_y) = f_0(x - v_x t, y - v_y t, v_x, v_y) \quad (4.6)$$

Полученный ответ в данном случае совпадает с результатом решения уравнения двумерной адвекции. В общем случае это, однако, не так.

Действительно, рассмотрим уравнение вида

$$\frac{\partial u}{\partial t} = (\hat{A} + \hat{B}) u, \quad (4.7)$$

в котором операторы \hat{A}, \hat{B} не зависят от времени. Формально его решение можно записать в виде

$$u(t + h) = e^{h(\hat{A} + \hat{B})} u(t) \quad (4.8)$$

Решение уравнений с разделённым оператором

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \hat{A} u \quad (4.9)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \hat{B} u \quad (4.10)$$

тогда можно представить в виде

$$u(t+h) = e^{h\hat{A}}u(t) \quad (4.11)$$

$$u(t+h) = e^{h\hat{B}}u(t) \quad (4.12)$$

Полное решение разделённой системы тогда будет иметь вид

$$\tilde{u}(t+h) = e^{h\hat{B}} \left(e^{h\hat{A}}u(t) \right) \quad (4.13)$$

Если операторы \hat{A} и \hat{B} коммутируют друг с другом, то приближённое решение \tilde{u} будет совпадать с точным. В обратном случае точность аппроксимации можно оценить следующим образом (ниже \hat{I} — единичный оператор):

$$\begin{aligned} e^{h(\hat{A}+\hat{B})} - e^{h\hat{B}}e^{h\hat{A}} &= \hat{I} + h(\hat{A} + \hat{B}) + \frac{h^2}{2}(\hat{A} + \hat{B})^2 - \\ &- \left(\hat{I} + h\hat{B} + \frac{h^2}{2}\hat{B}^2 \right) \left(\hat{I} + h\hat{A} + \frac{h^2}{2}\hat{A}^2 \right) + O(h^3) = \\ &= \frac{h^2}{2}(\hat{A}^2 + \hat{B}^2 + \hat{B}\hat{A} + \hat{A}\hat{B}) - \\ &- \frac{h^2}{2}(\hat{A}^2 + \hat{B}^2 + 2\hat{B}\hat{A}) + O(h^3) = \\ &= \frac{h^2}{2}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) + O(h^3), \end{aligned} \quad (4.14)$$

то есть ошибка аппроксимации пропорциональна h^2 , или другими словами, метод имеет 1-ый порядок точности.

Точность аппроксимации метода разделения операторов можно повысить, если использовать так называемую схему разделения Стрэнга, которая математически может быть представлена следующим образом:

$$e^{h(\hat{A}+\hat{B})} \approx e^{h\hat{A}/2}e^{h\hat{B}}e^{h\hat{A}/2} \quad (4.15)$$

Действительно:

$$\begin{aligned} e^{h\hat{A}/2}e^{h\hat{B}}e^{h\hat{A}/2} &= \left(\hat{I} + \frac{h}{2}\hat{A} + \frac{h^2}{8}\hat{A}^2 \right) \left(\hat{I} + h\hat{B} + \frac{h^2}{2}\hat{B}^2 \right) \times \\ &\times \left(\hat{I} + \frac{h}{2}\hat{A} + \frac{h^2}{8}\hat{A}^2 \right) + O(h^3) = \\ &= \hat{I} + h(\hat{A} + \hat{B}) + \frac{h^2}{2}(\hat{A}^2 + \hat{B}^2 + \hat{B}\hat{A} + \hat{A}\hat{B}) + O(h^3) \end{aligned} \quad (4.16)$$

и, таким образом:

$$e^{h(\hat{A}+\hat{B})} - e^{h\hat{A}/2}e^{h\hat{B}}e^{h\hat{A}/2} \approx O(h^3), \quad (4.17)$$

то есть метод разделения операторов Стрэнга имеет 2-ой порядок точности аппроксимации.

Метод Стрэнга можно обобщить на случай суммы нескольких операторов. Если оператор $\hat{A} = \hat{A}_1 + \dots + \hat{A}_n$, то

$$e^{h\hat{A}} = e^{h\hat{A}_1/2} \dots e^{h\hat{A}_{n-1}/2} e^{h\hat{A}_n} e^{h\hat{A}_{n-1}/2} \dots e^{h\hat{A}_1/2} + O(h^3) \quad (4.18)$$

Это позволяет разбивать уравнение адвекции в многомерном пространстве на цепочку одномерных уравнений. При этом, однако, следует проявлять осторожность, поскольку, вообще говоря, разделённые уравнения не обязательно обладают теми же свойствами, что и исходное. В частности, они могут не обладать теми же интегралами движения, то есть могут не удовлетворять законам сохранения.

4.2. Общие представления об одномерном уравнении переноса

Поскольку метод разделения операторов позволяет свести задачу моделирования многомерного уравнения адвекции, в том числе уравнения Власова, к моделированию одномерных уравнений, то далее мы рассмотрим численные методы решения одномерного уравнения адвекции. В общем случае его можно представить в виде

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (4.19)$$

Отметим, что при разделении операторов в нерелятивистском уравнении Власова в разделённых одномерных уравнениях скорость адвекции v не зависит явным образом от координаты x для всех шести измерений. В релятивистском случае, однако, адвекция вдоль проекций импульсов зависит от соответствующей проекции, например, для p_x имеем:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + q \left(E_x + \frac{p_y B_z - p_z B_y}{\sqrt{1 + (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)/(mc)^2}} \right) \frac{\partial f}{\partial p_x} = 0 \quad (4.20)$$

Кроме того, скорость адвекции вдоль проекций импульсов в общем случае зависит также от времени t , поскольку электромагнитные поля могут меняться во времени. К вопросу аппроксимации полей в этом случае мы обратимся позднее в разделе, посвящённому их интегрированию, сейчас же будем считать, что поля можно считать на каждой итерации численной схемы приближённо постоянными, и ограничимся нерелятивистским случаем, так что скорость адвекции v в разделённых уравнениях на каждой итерации можно считать константой.

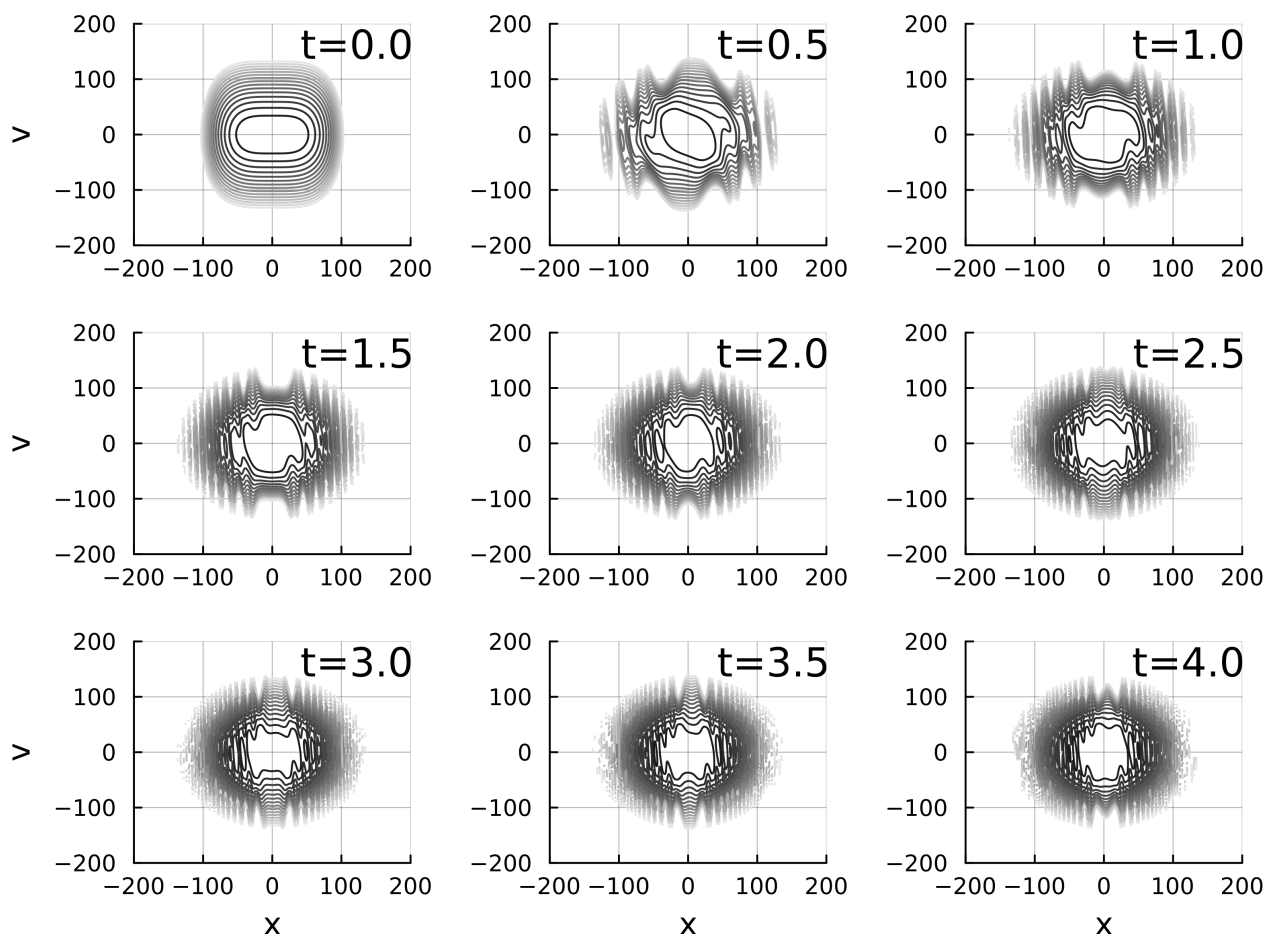


Рис. 4.1. Пример численного решения кинетического уравнения для функции распределения в непараболической потенциальной яме

Уравнение адвекции относится к уравнениям гиперболического типа. Для него решается либо начальная задача (задача Коши), когда заданы только начальные условия, а пространство считается неограниченным, или начально-краевая задача, когда дополнительно также поставлены граничные условия.

Одной из главных вычислительных проблем при решении кинетических уравнений является то, что в ходе эволюции функция распределения, как правило, стремится к образованию высокочастотной структуры. В качестве примера рассмотрим поведение газа в слегка непараболическом потенциале:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} - (x + \varepsilon x^3) \frac{\partial f}{\partial v} = 0 \quad (4.21)$$

На Рис. 4.1 приведён пример численного решения этого уравнения для значения параметра $\varepsilon = 10^{-3}$.

Мы видим, что гладкое изначально распределение через несколько осцилляций становится сильно изрезанным. Такое поведение является характерным для функции распределения. Чтобы сохранять эту изрезанность, методы, численно интегрирующие уравнение адвекции, должны обладать минимально возможной численной диффузией.

Среди известных методов решения уравнения адвекции выделим следующие:

- Метод конечных разностей
- Спектральные методы Фурье и Эрмита
- Метод конечных (или контрольных) объёмов
- Полулагранжев метод (метод интегрирования характеристик)

Они будут рассмотрены далее в соответствующих разделах. Для решения уравнения адвекции можно также применять метод конечных элементов, являющийся универсальным методом решения эволюционных уравнений. Кроме того, особняком стоят лагранжевы методы, основанные на решении кинетического уравнения в лагранжевых координатах, и методы, основанные на представлении функции распределения как набора частиц и интегрировании уравнений движения этих частиц. Метод конечных элементов и лагранжевы методы в рамках данного учебного пособия мы рассматривать не будем. Среди методов, основанных на представлении через частицы, наиболее популярным является так называемый метод частиц в ячейках — он также будет рассмотрен далее в соответствующем разделе.

Глава 5

Метод конечных разностей

5.1. Общие сведения о конечных разностях

Идея метода конечных разностей заключается в аппроксимации производных, входящих в интегрируемое уравнение, через конечные разности. Для этого неизвестная функция аппроксимируется значениями в вершинах некоторой сетки $\{x_i, i = 1 \dots N\}$ в дискретные моменты времени $\{t^n, n = 0, 1 \dots\}$:

$$f_i^n \equiv f(t^n, x_i) \quad (5.1)$$

Задача заключается в том, чтобы задав функцию в начальный момент времени t^0 , найти её значение в следующие моменты времени во всех точках сетки.

Рассмотрим простейшие конечно-разностные аппроксимации производных. Для простоты будем предполагать, что заданная сетка имеет постоянный шаг равный a . Тогда для аппроксимации первой производной можно использовать центрально-взвешенную схему:

$$\frac{df(x_i)}{dx} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2a} + O(a^3), \quad (5.2)$$

которая имеет 2-ой порядок точности.

С точки зрения уравнения адвекции недостатком такой аппроксимации может являться то, что значение производной определяется значением функции как справа, так и слева от данной точки. В уравнениях адвекции же жидкость переносится в одном из двух направлений, и поэтому её значение не может зависеть от состояния потока ниже по течению: например, если поток движется слева направо, то на изменение состояния потока в данной точке не может влиять состояние потока справа от неё. По этой причине часто используются односторонние аппроксимации, называемые также *upwind* (вверх по течению):

$$\frac{df(x_i)}{dx} = \begin{cases} \frac{f_i - f_{i-1}}{a} + O(a^2) & \Longleftrightarrow v > 0 \\ \frac{f_{i+1} - f_i}{a} + O(a^2) & \Longleftrightarrow v < 0 \end{cases} \quad (5.3)$$

Эта аппроксимация, однако, имеет только 1-ый порядок точности, поэтому иногда вместо неё используют также схему аппроксимации *upwind* 2-го порядка точности:

$$\frac{df(x_i)}{dx} = \begin{cases} \frac{3f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2}}{2a} + O(a^3) & \Longleftrightarrow v > 0 \\ \frac{-f_{i+2} + 4f_{i+1} - 3f_i}{2a} + O(a^3) & \Longleftrightarrow v < 0 \end{cases} \quad (5.4)$$

У неё, однако, другая проблема: она становится более нелокальной, требуя для вычисления производных в точке x_i значения функции не только в соседних точках $x_{i\pm 1}$, но и более дальних $x_{i\pm 2}$, что может привносить дополнительную численную диффузию.

5.2. Схема интегрирования вперёд по времени, центрированная в пространстве

Простейшей схемой численного интегрирования уравнения переноса является схема *Forward in time, centered in space* (*FTCS*, вперёд по времени, центрированная в пространстве). В ней производная по времени аппроксимируется по методу Эйлера через одностороннюю конечную разность, а для пространственной производной используется центрально-взвешенная схема:

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{h} + v \frac{f_{i+1}^n - f_{i-1}^n}{2a} = 0 \quad (5.5)$$

$$f_i^{n+1} = f_i^n - \frac{vh}{2a} (f_{i+1}^n - f_{i-1}^n) \quad (5.6)$$

К сожалению, эта схема является неустойчивой при любом выборе параметров. Анализ устойчивости можно провести так называемым методом фон Неймана, представив решение в виде суммы гармонических волн и рассмотрев эволюцию отдельной гармоники:

$$f_i^n = \xi^n \exp(jkia), \quad (5.7)$$

где $\xi = \xi(k)$ — комплексный коэффициент усиления гармоники, k — волновое число гармоники, j — мнимая единица. Подставив это выражение в схему *FTCS*, получим:

$$\begin{aligned} \xi^{n+1} \exp(jkia) &= \xi^n \exp(jkia) - \frac{vh}{2a} (\xi^n \exp(jk(i+1)a) - \xi^n \exp(jk(i-1)a)) \\ \xi &= 1 - \frac{vh}{2a} (\exp(jka) - \exp(-jka)) \\ \xi(k) &= 1 - j \frac{vh}{a} \sin(ka) \end{aligned} \quad (5.8)$$

Видим, что $|\xi(k)| > 1$ и, таким образом, все моды будут экспоненциально расти со временем.

5.3. Схема Лакса — Фридрихса

Побороть проблему устойчивости метода *FTCS* можно в схеме, предложенной Лаксом и Фридрихсом, в которой несколько видоизменена аппроксимация временной производной:

$$\frac{f_i^{n+1} - \frac{1}{2}(f_{i+1}^n + f_{i-1}^n)}{h} + v \frac{f_{i+1}^n - f_{i-1}^n}{2a} = 0 \quad (5.9)$$

После несложных преобразований имеем:

$$f_i^{n+1} = \frac{1}{2}(f_{i+1}^n + f_{i-1}^n) - \frac{vh}{2a}(f_{i+1}^n - f_{i-1}^n) \quad (5.10)$$

Проверим устойчивость, используя ту же подстановку $f_i^n = \xi^n \exp(jkia)$:

$$\begin{aligned} \xi^{n+1} \exp(jkia) &= \frac{1}{2}(\xi^n \exp(jk(i+1)a) + \xi^n \exp(jk(i-1)a)) - \\ &\quad - \frac{vh}{2a}(\xi^n \exp(jk(i+1)a) - \xi^n \exp(jk(i-1)a)) \\ \xi &= \frac{1}{2}(\exp(jka) + \exp(-jka)) - \frac{vh}{2a}(\exp(jka) - \exp(-jka)) \\ \xi(k) &= \cos(ka) - j \frac{vh}{a} \sin(ka) \end{aligned} \quad (5.11)$$

В этом случае имеем

$$|\xi(k)|^2 = \cos^2(ka) + \left(\frac{vh}{a}\right)^2 \sin^2(ka), \quad (5.12)$$

и следовательно, $|\xi(k)| \leq 1$, если $vh \leq a$. Последнее условие называется условием Куранта — Фридрихса — Леви (КФЛ) или просто условием Куранта. Безразмерное число $C = vh/a$ иногда также называют числом КФЛ или числом Куранта. Наличие условия $C \leq 1$ является типичным для схем интегрирования эволюционных уравнений. Оно связано с тем, что аппроксимация производных использует, как правило, значения функции только в соседних точках сетки, и следовательно, не может корректно описывать ситуацию, когда за одну итерацию по времени сигнал распространяется на расстояние, превышающее пространственный шаг сетки, то есть скорость распространения сигналов v должна быть меньше, чем a/h .

Метод Лакса — Фридрихса обладает двумя нежелательными свойствами. Во-первых, он обеспечивает лишь 1-ый порядок точности по времени, а во-вторых, он обладает высокой численной диффузией. Последний факт можно продемонстрировать, переписав схему в следующем виде:

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{h} + v \frac{f_{i+1}^n - f_{i-1}^n}{2a} = \frac{1}{2} \frac{f_{i+1}^n - 2f_i^n + f_{i-1}^n}{h} \quad (5.13)$$

В последнем члене здесь угадывается аппроксимация 2-го уровня точности второй пространственной производной. Таким образом, схема Лакса — Фридрихса является, фактически, аппроксимацией уравнения

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{a^2}{2h} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}, \quad (5.14)$$

которое относится к типу адвективно-диффузионных. Добавленная в этой схеме численная диффузия, однако, является необходимой для её стабильности. Тем не менее степень этой диффузии можно уменьшить.

5.4. Схема Лакса — Вендроффа

Достичь уменьшенной диффузии позволяет, в частности, схема Лакса — Вендроффа. Её построение основано на введении дополнительной вспомогательной точки $t^{n+1/2} = (t^{n+1} + t^n)/2$ и на использовании разновидности метода, известного как метод предиктор-корректора. Суть метода заключается в том, что сначала, на стадии предиктора, значения функции в момент времени t^{n+1} вычисляются с небольшой точностью, а затем, на стадии корректора, эти значения используются для получения более точных значений производных и уточнения значения функции в момент времени t^{n+1} .

В методе Лакса — Вендроффа на стадии предиктора используется следующая аппроксимация уравнения переноса:

$$\frac{\tilde{f}_i^{n+1} - f_i^n}{h} + v \frac{f_{i+1}^n - f_i^n}{a} = 0, \quad (5.15)$$

откуда получаем:

$$\tilde{f}_i^{n+1} = f_i^n - \frac{vh}{a} (f_{i+1}^n - f_i^n) \quad (5.16)$$

На стадии корректора используем ту же аппроксимацию, но симметричную по односторонней производной:

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^{n+\frac{1}{2}}}{h/2} + v \frac{\tilde{f}_i^{n+1} - \tilde{f}_{i-1}^{n+1}}{a} = 0, \quad (5.17)$$

где для вычисления $f_i^{n+\frac{1}{2}}$ воспользуемся средним:

$$f_i^{n+\frac{1}{2}} = \frac{f_i^n + \tilde{f}_i^{n+1}}{2} \quad (5.18)$$

Получаем:

$$f_i^{n+1} = \frac{f_i^n + \tilde{f}_i^{n+1}}{2} - \frac{vh}{2a} (\tilde{f}_i^{n+1} - \tilde{f}_{i-1}^{n+1}) \quad (5.19)$$

и окончательно:

$$f_i^{n+1} = f_i^n - \frac{vh}{2a} (f_{i+1}^n - f_{i-1}^n) + \frac{v^2 h^2}{2a^2} (f_{i+1}^n - 2f_i^n + f_{i-1}^n) \quad (5.20)$$

Как видим, в этой схеме по сравнению со схемой *FTCS* также добавлен член, аппроксимирующий вторую производную, и следовательно добавляющий численную диффузию. Эквивалентное уравнение в частных производных имеет вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{v^2 h}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (5.21)$$

Тем не менее, коэффициент диффузии в методе Лакса — Вендроффа $D_{LW} = v^2 h/2$ меньше, чем в методе Лакса — Фридрихса $D_{LF} = a^2/2h$ при выполнении условия Куранта: $D_{LW}/D_{LF} = v^2 h^2/a^2 = C^2 < 1$. Более того, можно показать, что метод Лакса — Вендроффа обладает наименьшим коэффициентом диффузии среди всех методов 2-го порядка точности по шагу сетки, устойчивых при выполнении условия Куранта.

Дополнительно, благодаря использованию метода предиктора-корректора, схема Лакса — Вендроффа оказывается 2-го порядка точности и по времени.

У этой схемы, однако, есть один недостаток, который может оказаться существенным в некоторых задачах. Схема Лакса — Вендроффа не удовлетворяет принципу максимума, то есть в процессе численного интегрирования значения функции f в некоторых точках могут выйти за пределы изначального интервала $[f_{\min}^0, f_{\max}^0]$. Действительно, если мы рассмотрим следующее представление схемы:

$$f_i^{n+1} - f_i^n = -\frac{vh}{2a} (f_{i+1}^n - f_{i-1}^n) + \frac{v^2 h^2}{2a^2} (f_{i+1}^n - 2f_i^n + f_{i-1}^n), \quad (5.22)$$

то можем заметить, что, например, если $f_{i-1}^n = f_i^n = f_{\max}^n$, то $f_i^{n+1} - f_i^n = C(1-C)(f_{\max}^n - f_{i+1}^n)$ и это выражение всегда положительно при выполнении условия Куранта $C < 1$, то есть $f_i^{n+1} > f_{\max}^n$, и следовательно, принцип максимума будет нарушен.

Нарушение принципа максимума приводит, во-первых, к возникновению нефизичных осцилляций функции f , которые особенно ярко проявляются вблизи точек с сильным изменением градиента функции, а во-вторых, к тому, что функция может стать отрицательной, что не имеет физического смысла.

Можно показать, что нарушение принципа максимума свойственно всем схемам с порядком точности выше 1-го, поэтому в ситуациях, когда это критично, используют схему пониженной точности, основанную на использовании односторонних конечных разностей по пространству:

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{h} = \begin{cases} -v \frac{f_i^n - f_{i-1}^n}{a} & \Longleftrightarrow v > 0 \\ -v \frac{f_{i+1}^n - f_i^n}{a} & \Longleftrightarrow v < 0 \end{cases} \quad (5.23)$$

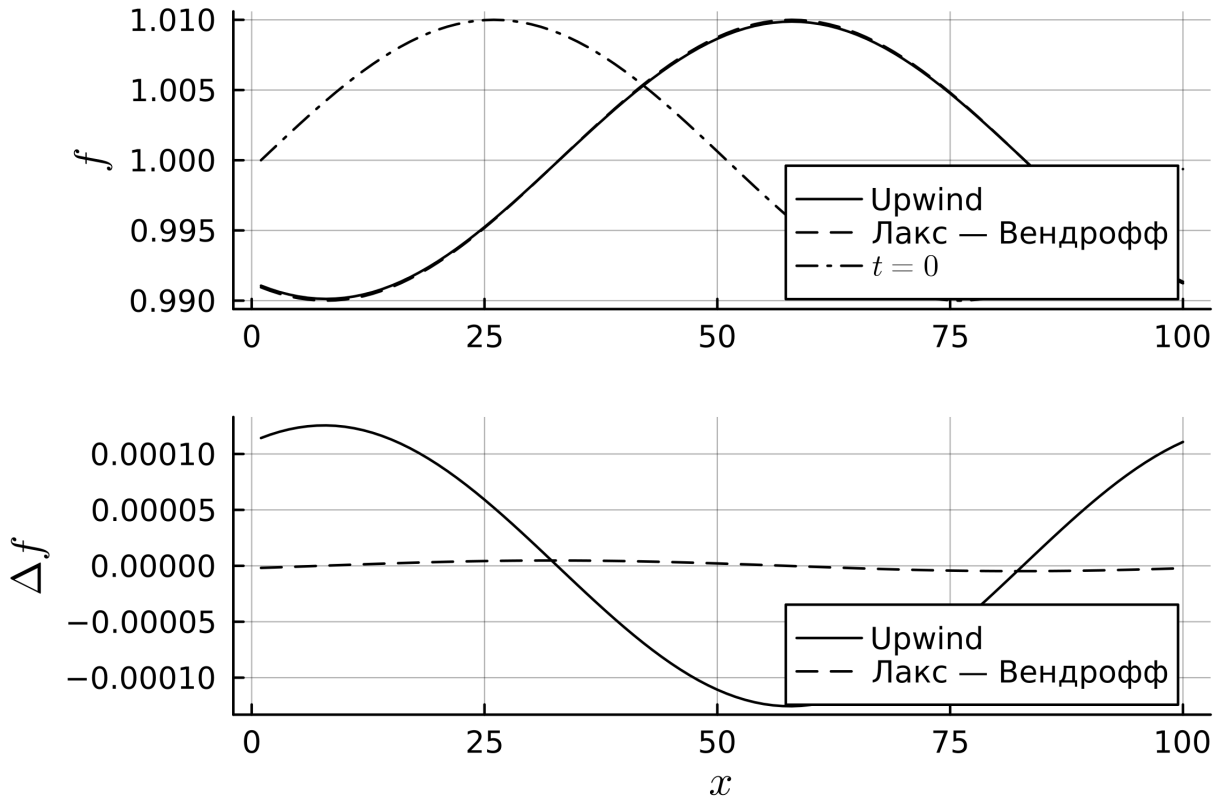


Рис. 5.1. Результат численного решения одномерного уравнения адвекции с постоянной скоростью методами Лакса — Вендроффа и *upwind* для случая синусоидальных начальных и периодических граничных условий. Сверху приведено изначальное распределение и распределения, полученные через некоторое время обеими методами. Снизу показана абсолютная ошибка численного решения по отношению к точному решению

Эта схема устойчива при выполнении условия Куранта и не нарушает принципа максимума, однако из-за 1-го порядка точности по пространству она обладает высокой диффузией и для достижения высокой точности требует использования малых значений шагов по времени и пространству, что делает её непрактичной.

Чтобы продемонстрировать отличия схемы Лакса — Вендроффа и схемы *upwind* на Рис. 5.1 приведён результат численного решения уравнения адвекции обеими методами для синусоидальных начальных и периодических граничных условий. Мы видим, что хотя визуально решения практически неотличимы друг от друга и в целом относительная ошибка невелика, абсолютная ошибка метода Лакса — Вендроффа для выбранных параметров на порядок меньше метода *upwind*.

На Рис. 5.2 приведён результат численного решения уравнения адвекции теми же методами для начальных условий в виде гауссовой функции. Здесь мы видим, что визуально метод Лакса — Вендроффа даёт более точное решение, что связано с сильным расплыванием решения методом *upwind* из-за более высокой численной диффузией. Тем не менее абсолютная ошибка обоих

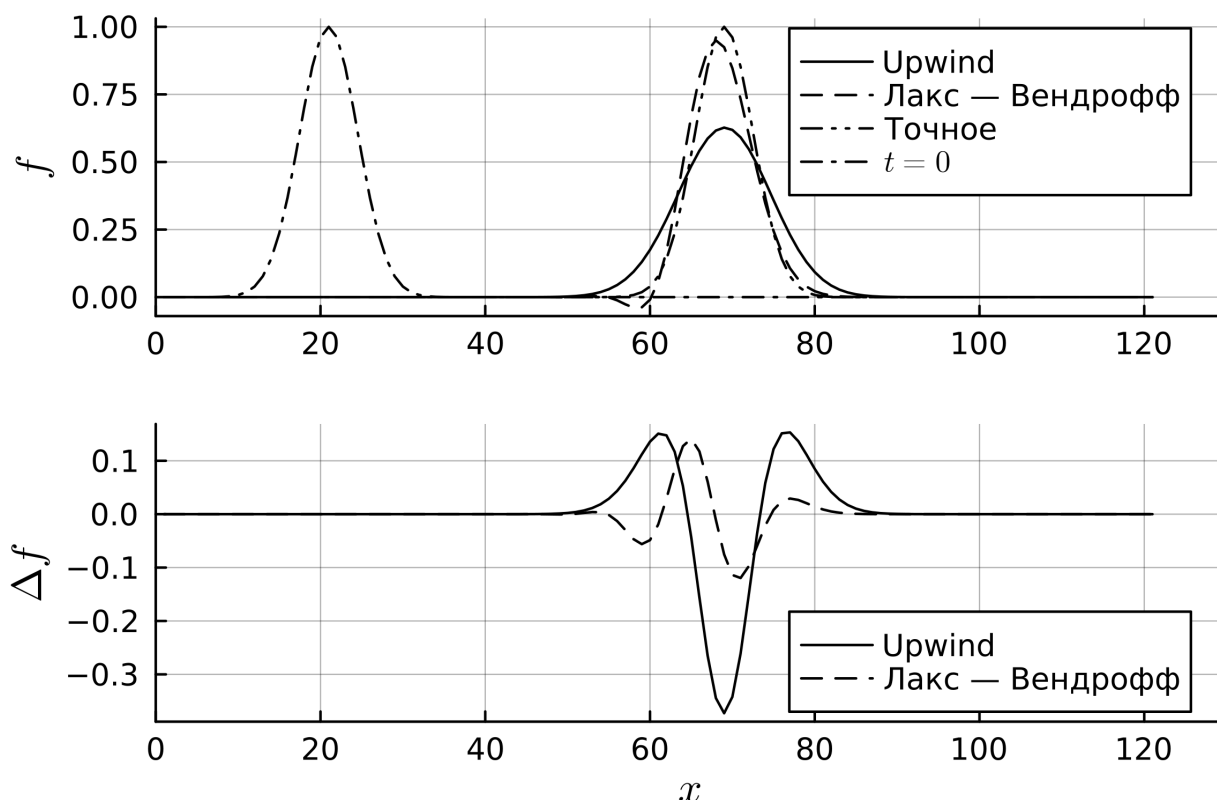


Рис. 5.2. Результат численного решения одномерного уравнения адвекции с постоянной скоростью методами Лакса — Вендроффа и *upwind* для случая гауссового начального распределения. Сверху приведено изначальное распределение и распределения, полученные через некоторое время обеими методами, а также точное решение уравнений. Снизу показана абсолютная ошибка численного решения по отношению к точному решению

методов уже не отличается так значительно, поскольку проявляется свойство метода Лакса — Вендроффа искажать первоначальное распределение из-за использования в конечных разностях значений функции вниз по течению. Кроме того, метод Лакса — Вендроффа даёт заведомо нефизичный результат в виде отрицательных значений функции распределения. Таким образом, для распределений с большим перепадом значений преимущества методов 2-го порядка точности нивелируются их недостатками.

Существуют также гибридные схемы, которые в области, где функция распределения достаточно гладкая, используют метод 2-го порядка точности, и только в областях, где её использование может привести к нарушению принципа максимума, используется схема 1-го порядка точности. Такие схемы также называют схемами с ограничителем наклона, поскольку их использование основано на искусственном уменьшении наклона функции, то есть разности $f_{i+1} - f_i$ при аппроксимации производных в опасных точках. Этот метод по своей сути аналогичен методу ограничения потоков, который мы рассмотрим далее в разделе про метод конечных объёмов, поэтому здесь мы его подробно описывать не будем.

Глава 6

Спектральные методы

6.1. Общие сведения о спектральных методах

Идея спектральных методов заключается в том, чтобы разложить неизвестную функцию по ортогональному набору функций так, чтобы дифференциальное уравнение в частных производных обратилось в систему обыкновенных дифференциальных уравнений для образов. Поскольку, однако, полный набор ортогональных функций, как правило, бесконечен, численное разложение является приближённым, что вводит ошибку аппроксимации.

Наиболее хорошо спектральные методы работают для линейных уравнений, однако часть из них поддаются обобщению на нелинейный случай. При этом нелинейный оператор аппроксимируется на малом шаге по времени линейным. Уравнения Власова в заданных полях являются линейными, однако если поля вычисляются самосогласованным образом, то задача в целом становится нелинейной.

Рассмотрим одномерное уравнение переноса следующего вида:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v(x, t) \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (6.1)$$

Дадим несколько определений. Базисными функциями (ϕ_0, \dots, ϕ_N) называют набор функций, по которым производится разложение неизвестной функции в ряд:

$$f(t, x) \approx f^N(t, x) = \sum_{k=0}^N g_k(t) \phi_k(x) \quad (6.2)$$

Вектор $\{g_k, k = 0 \dots N\}$ будем называть образом функции f . От базисных функций, как правило, требуют ортонормированность:

$$\int \phi_m(x) \phi_n(x) w(x) dx = \delta_{mn}, \quad (6.3)$$

где $w(x)$ называют весом (часто его кладут равным единице).

Невязкой называют точность аппроксимации, которая определяется следующим образом:

$$R_N = \frac{\partial f^N}{\partial t} + v(x, t) \frac{\partial f^N}{\partial x} \quad (6.4)$$

Задачей построения схемы интегрирования является поиск такого алгоритма, который минимизировал бы невязку. Для этого вводят тестовые функции (ψ_0, \dots, ψ_N) и требуют, чтобы выполнялись следующие равенства:

$$\int \psi_n(x) R_N(x) dx = 0, \quad n \in 0 \dots N \quad (6.5)$$

Чаще всего применяют два метода построения спектральных схем. В методе Галёркина тестовые функции совпадают с базисными, то есть требуется, чтобы

$$\int \phi_n(x) R_N(x) dx = 0, \quad n \in 0 \dots N \quad (6.6)$$

или, другими словами, чтобы невязка была ортогональна всем базисным функциям.

В псевдоспектральном методе или методе коллокаций тестовые функции представляют собой дельта-функции в некотором специальном подобранном наборе точек, называемых точками коллокации: $\psi_n(x) = \delta(x - x_n)$. Таким образом, требуется, чтобы

$$\int R_N(x) \psi_n(x) dx = \int R_N(x) \delta(x - x_n) dx = R_N(x_n) = 0 \quad (6.7)$$

или, другими словами, чтобы невязка равнялась нулю в точках коллокации.

6.2. Метод преобразования Фурье

Рассмотрим, как работают метод Галёркина и псевдоспектральный метод в случае преобразования Фурье. Пусть требуется найти решение уравнения переноса в области $x \in [0, L]$ в предположении периодических граничных условий. Выберем в качестве базисных функций набор гармонических функций:

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \exp\left(in \frac{2\pi x}{L}\right), \quad -N \leq n \leq N, \quad 0 \leq x \leq L, \quad (6.8)$$

тогда решение уравнения $f(t, x)$ будет аппроксимировано функцией

$$f^N(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \sum_{k=-N}^N g_k(t) \exp\left(ik \frac{2\pi x}{L}\right) \quad (6.9)$$

Для поиска уравнения для коэффициентов $g_k(t)$ применим вначале метод Галёркина, то есть потребуем, чтобы выполнялось

$$\begin{aligned} & \int R_N(x) \phi_n(x) dx = \\ & = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \int \left(\frac{\partial f^N}{\partial t} + v(x, t) \frac{\partial f^N}{\partial x} \right) \exp \left(-in \frac{2\pi x}{L} \right) dx = 0, \end{aligned} \quad (6.10)$$

$n = -N \dots N$

Учтём свойства Фурье-преобразования, которые приводят к следующим соотношениям между функциями и их образами:

$$f^N \Rightarrow g_k(t) \quad (6.11)$$

$$\frac{\partial f^N}{\partial t} \Rightarrow \dot{g}_k(t) \quad (6.12)$$

$$\frac{\partial f^N}{\partial x} \Rightarrow ik \frac{2\pi}{L} g_k(t) \quad (6.13)$$

$$v(x, t) \Rightarrow u_k(t) \quad (6.14)$$

$$v(x) \frac{\partial f^N}{\partial x} \Rightarrow u * g \equiv \sum_{k=-N}^N u_{n-k} ik \frac{2\pi}{L} g_k(t) \quad (6.15)$$

Таким образом, из уравнения (6.10) получаем следующее уравнение для образов:

$$\dot{g}_n(t) + i \sum_{k=-N}^N u_{n-k} k \frac{2\pi}{L} g_k(t) = 0, \quad n \in -N \dots N \quad (6.16)$$

Это система обыкновенных дифференциальных уравнений, которая может быть решена стандартными численными методами, например, из семейства методов Рунге — Кутты. Фигурирующие здесь коэффициенты Фурье-разложения $u_k(t)$, а также начальные условия $g_k(0)$ можно определять численно. Недостатком метода является необходимость вычисления свёртки $u * g$, которая представляет собой коэффициенты матрицы размером $(2N + 1) \times (2N + 1)$, и следовательно, имеет вычислительную сложность пропорциональную N^2 . Кроме того, обобщение этой свёртки на нелинейный случай не является тривиальным и требует особого подхода. В связи с этим более предпочтительным на практике оказывается использование псевдоспектрального метода, лишённого этих недостатков.

В псевдоспектральном методе Фурье мы используем те же базисные функции:

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \exp \left(in \frac{2\pi x}{L} \right), \quad -N \leq n \leq N, \quad 0 \leq x \leq L \quad (6.17)$$

и ту же аппроксимацию неизвестной функции:

$$f^N(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \sum_{k=-N}^N g_k(t) \exp\left(ik \frac{2\pi x}{L}\right) \quad (6.18)$$

Однако теперь потребуем, чтобы выполнялось

$$R_N(x_n) = 0, \quad x_n = n \frac{L}{N}, \quad n = 0 \dots N \quad (6.19)$$

То есть точки коллокации в данном случае выбирают равномерно распределёнными по всему промежутку $x \in [0, L]$.

Введём обозначения

$$f_n \equiv f^N\left(x_n \equiv n \frac{L}{N}\right) \quad (6.20)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_n \equiv \frac{\partial f^N}{\partial x}\left(x_n \equiv n \frac{L}{N}\right) \quad (6.21)$$

$$v_n \equiv v\left(x_n \equiv n \frac{L}{N}\right), \quad (6.22)$$

тогда

$$f_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \sum_{k=-N}^N g_k \exp\left(ik \frac{2\pi n}{N}\right) \quad (6.23)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} \sum_{k=-N}^N \left(ik \frac{2\pi}{L}\right) g_k \exp\left(ik \frac{2\pi n}{N}\right), \quad (6.24)$$

и уравнение (6.19) приводит к системе уравнений

$$\frac{\partial f_n}{\partial t} + v_n \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_n = 0, \quad n = 0 \dots N, \quad (6.25)$$

из которой получаем систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\dot{f}_n = -\frac{v_n}{\sqrt{2\pi L}} \sum_{k=-N}^N \left(ik \frac{2\pi}{L}\right) g_k \exp\left(ik \frac{2\pi n}{N}\right), \quad n = 0 \dots N \quad (6.26)$$

В этой схеме отсутствует операция свёртки, и всё сводится к взятию прямого и обратного преобразования Фурье, которое можно выполнить численно. Особенно эффективно схема работает при применении численного метода быстрого преобразования Фурье. Схема также может быть легко обобщена на нелинейный случай $v = v(x, f)$, в котором лишь поменяется определение $v_n = v(x_n, f_n)$.

Рассмотрим пример решения одномерного уравнения адвекции с постоянной скоростью псевдоспектральным методом Фурье. Для аппроксимации временной эволюции воспользуемся вначале методом Эйлера, имеющим 1-ый порядок точности:

$$f_n^{m+1} = f_n^m - h\hat{F}_n\{f^m\}, \quad (6.27)$$

где h — шаг по времени и введено обозначение

$$\hat{F}\{f\} = \mathfrak{F}^{-1}[ikv\mathfrak{F}(f)], \quad (6.28)$$

и \mathfrak{F} и \mathfrak{F}^{-1} — прямое и обратное преобразование Фурье, аппроксимированное рядом длины N . Результат численного решения для начальных условий в виде синусоидальной функции и периодических граничных условий приведён на Рис. 6.1. Отметим, что численные параметры моделирования (шаг по координате и времени) здесь выбраны такими же, как и на Рис. 5.1, при этом время моделирования выбрано короче из-за неустойчивости схемы на больших временах. Видим, что метод Фурье со схемой Эйлера оказывается сравним по точности с методом *upwind*, но значительно уступает методу Лакса — Вендроффа из-за 1-го порядка точности интегрирования по времени.

Построим схему второго порядка точности по времени, используя метод предиктор-корректора. На шаге предиктора вычислим

$$f_n^{m+1/2} = f_n^m - \frac{h}{2}\hat{F}_n\{f^m\}, \quad (6.29)$$

а на шаге корректора используем это решение для получения более точного результата:

$$f_n^{m+1} = f_n^m - h\hat{F}_n\{f^{m+1/2}\} \quad (6.30)$$

Результат решения той же задачи этим методом приведён на Рис. 6.2. Как видим, метод достигает той же точности, что и метод Лакса — Вендроффа на Рис. 5.1.

На Рис. 6.3 приведён результат численного решения тем же методом задачи с начальным гауссовым распределением. Как видим, результат получился неудовлетворительным как по точности, которая сравнима с конечно-разностными методами, так и физически в связи с появлением отрицательных значений функции распределения.

Отметим, что в этих расчётах шаг по времени выбирался таким же, как и в примерах для конечно-разностных методов с целью их сравнения по точности. Число Куранта здесь равнялось $C = 0,8$. Этого, однако, оказывается недостаточно для сколь-нибудь долговременной устойчивости псевдоспектрального метода Фурье. Причиной неустойчивости является эффект алиасинга, то есть ошибки дискретизации спектра, который приводит к тому, что для самой высокой дискретной частоты происходит накопление ошибки

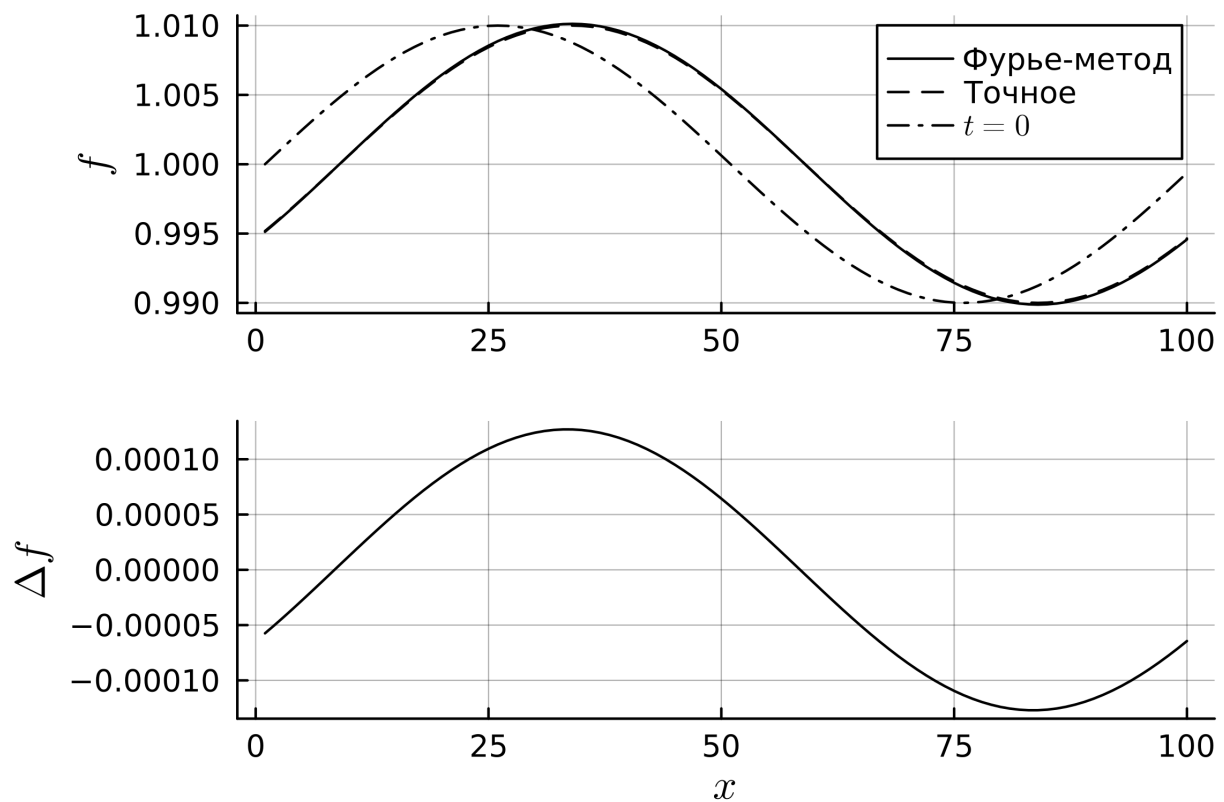


Рис. 6.1. Результат численного решения одномерного уравнения адвекции с постоянной скоростью псевдоспектральным методом Фурье в схеме Эйлера для случая синусоидальных начальных и периодических граничных условий. Сверху приведено изначальное распределение и распределение, полученное численно, а также точное решение. Снизу показана абсолютная ошибка численного решения по отношению к точному решению

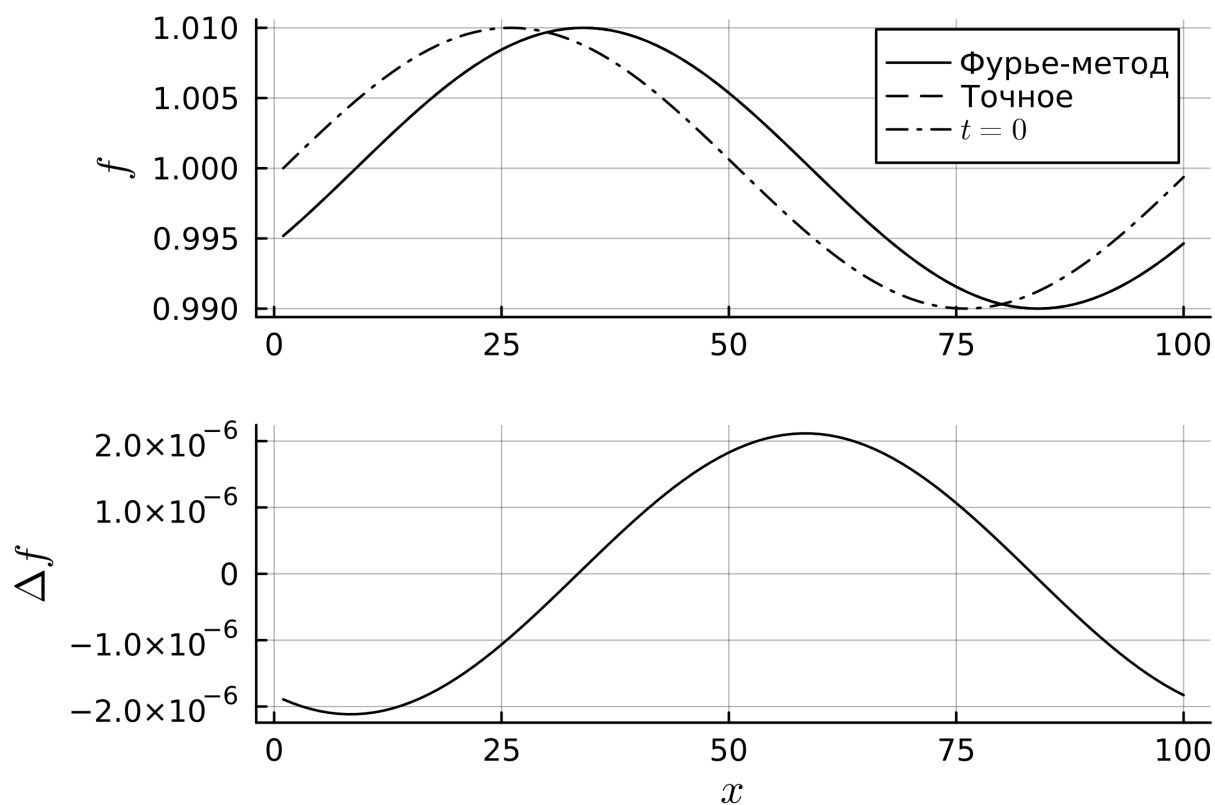


Рис. 6.2. Результат численного решения одномерного уравнения адвекции с постоянной скоростью псевдоспектральным методом Фурье в схеме предиктор-корректора для случая синусоидальных начальных и периодических граничных условий. Сверху приведено изначальное распределение и распределение, полученное численно, а также точное решение. Снизу показана абсолютная ошибка численного решения по отношению к точному решению

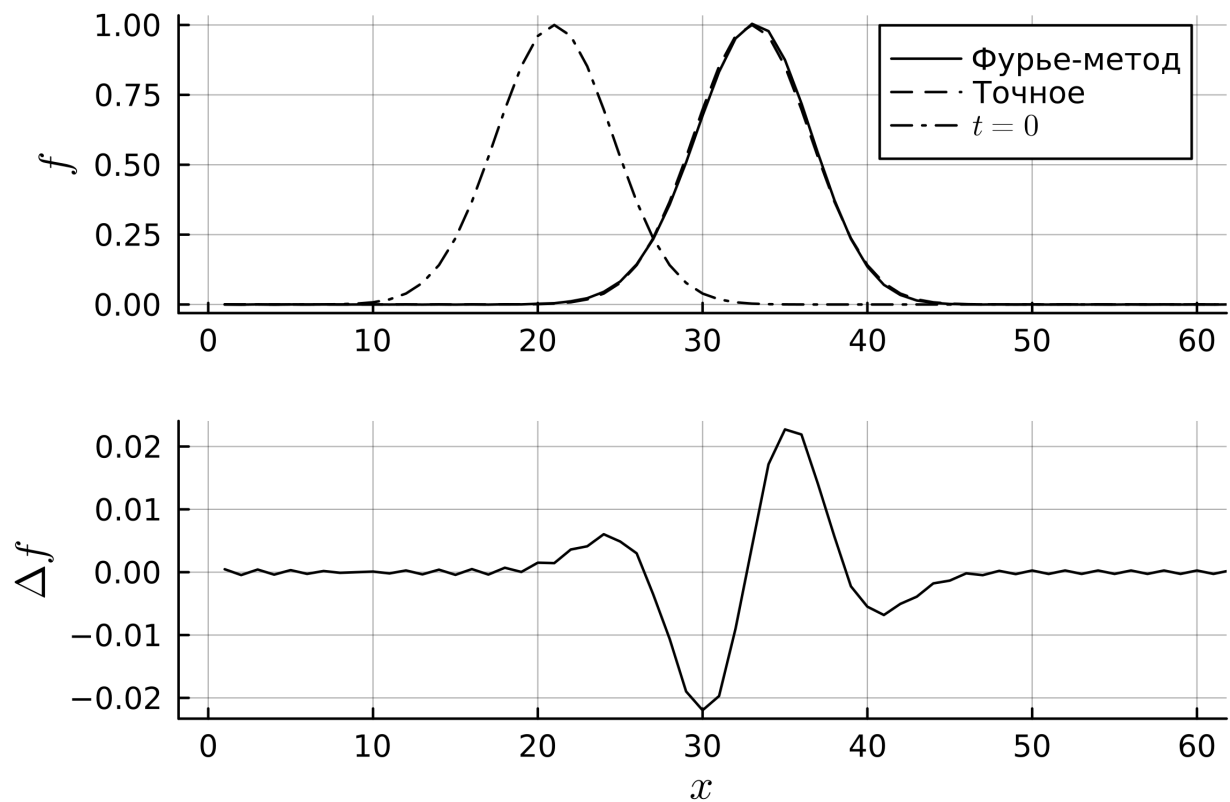


Рис. 6.3. Результат численного решения одномерного уравнения адвекции с постоянной скоростью псевдоспектральным методом Фурье в схеме предиктор-корректора для случая начального распределения в виде гауссовой функции. Сверху приведено изначальное распределение и распределение, полученное численно, а также точное решение. Снизу показана абсолютная ошибка численного решения по отношению к точному решению

аппроксимации. Это хорошо заметно на Рис. 6.3, где во всей области интегрирования появляется мелкая рябь с периодом порядка пространственного шага. В конце концов эта рябь нарастает до уровня сигнала и начинает доминировать. Увеличить устойчивость расчёта удаётся за счёт уменьшения шага по времени, однако более универсальным решением является использование спектральной фильтрации: на каждой итерации спектральное разложение домножается на некую функцию, равную единице всюду, кроме нескольких высоких частот, где она плавно спадает до нуля. Это делает схему диссипативной и добавляет численную диффузию, поэтому подбор оптимальной маски определяется конкретным видом решаемой задачи. Другой способ борьбы: использование неявных схем интегрирования по времени, что, однако, увеличивает вычислительную сложность схемы.

6.3. Метод преобразования Эрмита

Спектральный метод Фурье работает наилучшим образом, когда граничные условия периодические. Однако для зависимости функции распределения от импульсных координат это никогда не выполняется. В этом случае, однако, функция распределения часто с хорошей точностью аппроксимируется функцией Гаусса при больших значениях импульса. Для её разложения тогда удобно использовать преобразование Эрмита.

Отнормированное преобразование Эрмита имеет следующий вид:

$$\hat{\mathcal{H}}\{f(x)\}(n) \equiv \int f(x)H_n(x)e^{-x^2}dx, \quad (6.31)$$

где $H_n(x)$ — многочлены Эрмита. Соответствующие базисные функции будут иметь следующий вид:

$$\phi_n(x) \equiv \tilde{H}_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2}, \quad (6.32)$$

где $\alpha > 0$ — масштабный фактор, определяющий ширину гауссовых функций. α является параметром преобразования и может быть выбран из соображений удобства. Для наиболее точного разложения квазиравновесного распределения с температурой T этот параметр следует выбирать равным $\alpha^2 = 1/(2mT)$.

Для базисных функций преобразования Эрмита справедливы следующие

соотношения:

$$\alpha x \tilde{H}_n(x) = \sqrt{\frac{n+1}{2}} \tilde{H}_{n+1}(x) + \sqrt{\frac{n}{2}} \tilde{H}_{n-1}(x) \quad (6.33)$$

$$\frac{d}{dx} \tilde{H}_n(x) = -\alpha \sqrt{2(n+1)} \tilde{H}_{n+1}(x) \quad (6.34)$$

$$x \frac{d}{dx} \tilde{H}_n(x) = -\sqrt{(n+1)(n+2)} \tilde{H}_{n+2}(x) - (n+1) \tilde{H}_n(x) \quad (6.35)$$

$$\int \tilde{H}_m(x) \tilde{H}_n(x) w(x) dx = \delta_{mn} \quad (6.36)$$

$$\int \frac{d}{dx} \tilde{H}_m(x) \frac{d}{dx} \tilde{H}_n(x) w(x) dx = 2\alpha(n+1) \delta_{mn} \quad (6.37)$$

$$w(x) \equiv \exp(\alpha^2 x^2) \quad (6.38)$$

Кроме того, для образов преобразования Эрмита выполняются следующие соотношения:

$$f(t, x) = \sum_{n=0}^N g_n(t) \tilde{H}_n(x) \quad (6.39)$$

$$g_n(t) = \int f(x, t) \tilde{H}_n w(x) dx \quad (6.40)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t, x) = \sum_{n=0}^N \dot{g}_n(t) \tilde{H}_n(x) \quad (6.41)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} f(t, x) = -\alpha \sum_{n=1}^N g_{n-1}(t) \sqrt{2n} \tilde{H}_n(x) \quad (6.42)$$

Если можно считать, что скорость v в уравнении переноса

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (6.43)$$

постоянная в пространстве, то тогда применение метода Галёркина для преобразования Эрмита даёт особо простую систему уравнений:

$$\begin{aligned} \dot{g}_0 &= 0 \\ &\vdots \\ \dot{g}_n &= \alpha \sqrt{2n} v g_{n-1} \\ &\vdots \\ \dot{g}_N &= \alpha \sqrt{2N} v g_{N-1} \end{aligned} \quad (6.44)$$

Скорость адвекции v вдоль импульсной координаты p_x , однако, содержит x -проекцию магнитной силы $[(\vec{p}/\gamma) \times \vec{B}]$, которая в релятивистском случае

зависит от p_x . В этом случае удобнее использовать псевдоспектральный метод.

Для псевдоспектрального метода Эрмита точки коллокации удобнее брать в соответствии с квадратурной формулой Гаусса — Эрмита:

$$\{\xi_k\}, \quad k = 0 \dots N, \quad H_{N+1}(\xi_k) = 0 \quad (6.45)$$

Эти точки выделены тем, что для них следующее равенство выполняется точно, если функция $f(x)$ — многочлен степени $2N - 1$ или ниже:

$$\int f(x) e^{-\alpha^2 x^2} dx = \sum_{k=0}^N w_k f\left(\frac{\xi_k}{\alpha}\right) \quad (6.46)$$

где w_k — весовые коэффициенты, определяемые по следующей формуле:

$$w_k \equiv \frac{1}{\alpha} \int L_k(x) e^{-x^2} dx \quad (6.47)$$

Здесь $L_k(x)$ — так называемый многочлен Лагранжа, то есть многочлен $N + 1$ степени такой, что $L_k(\xi_m) = \delta_{km}$. На практике весовые коэффициенты можно вычислить по формуле

$$w_k = \frac{1}{\sum_{m=0}^N \left[\sqrt{\frac{\alpha}{2^m m! \sqrt{\pi}}} H_m(\xi_k) \right]^2} \quad (6.48)$$

Снова введём базисные функции, на этот раз в виде

$$\bar{H}_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2}, \quad \alpha > 0, \quad (6.49)$$

тогда

$$f(t, x) = \sum_{k=0}^N g_k(t) \bar{H}_k(x) \quad (6.50)$$

и

$$g_k(t) = \sum_{j=0}^N f\left(\frac{\xi_j}{\alpha}, t\right) \bar{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \frac{1}{C_j}, \quad (6.51)$$

где

$$C_j = \sum_{k=0}^N \left[\bar{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \right]^2 \quad (6.52)$$

Для производной имеем:

$$\frac{\partial}{\partial x} f\left(\frac{\xi_j}{\alpha}, t\right) = \sum_{k=0}^N g_k(t) \bar{H}'_k(x) \quad (6.53)$$

Введём обозначение:

$$f_j(t) \equiv f\left(t, \frac{\xi_j}{\alpha}\right), \quad (6.54)$$

тогда $\{f_j\}$ образует вектор, который мы обозначим F . Для него получаем следующее уравнение:

$$\dot{F} = -vDF \quad (6.55)$$

где $D \equiv \{d_{ij}\}$ — матрица, определяемая выражением

$$\begin{aligned} d_{ij} = & \frac{\alpha}{C_j} \sum_{k=1}^{N-1} \bar{H}_k\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \left[\sqrt{\frac{k}{2}} \bar{H}_{k-1}\left(\frac{\xi_i}{\alpha}\right) - \sqrt{\frac{k+1}{2}} \bar{H}_{k+1}\left(\frac{\xi_i}{\alpha}\right) \right] - \\ & - \sqrt{\frac{1}{2}} \bar{H}_0\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \bar{H}_1\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) + \sqrt{\frac{N}{2}} \bar{H}_N\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \bar{H}_{N-1}\left(\frac{\xi_j}{\alpha}\right) \end{aligned} \quad (6.56)$$

Таким образом, снова получаем систему обыкновенных дифференциальных уравнений, которую можно решать стандартными методами.

Эрмитово разложение хорошо работает для кинетики, близкой к равновесной. При этом при значительном нагреве можно использовать перемасштабирование функций Эрмита с новой температурой. Так же, как и для Фурье-преобразования псевдоспектральный метод допускает простое обобщение на нелинейный случай.

Общая проблема спектральных методов заключается в сложности их эффективной параллелизации, то есть выполнения на вычислительных системах с распределённой памятью, в частности, суперкомпьютерных кластерах. Это обусловлено тем, что используемые преобразования носят глобальный характер: требуется вычисление интегралов во всём пространстве. Это также может приводить к нарушению лоренц-инвариантности: вообще говоря, не существует способов ограничения скорости распространения возмущений в аппроксимированных уравнениях. Кроме того, для спектральных методов затруднительно реализовать ограничители, которые обеспечили бы выполнение принципа максимума. Наконец, для спектральных методов, как правило, значительно сложнее проводить анализ устойчивости, что может приводить к её нарушению при незначительном изменении параметров моделирования.

Глава 7

Метод конечных объёмов

7.1. Общие сведения о методе конечных объёмов

Для уравнений, выражающих собой законы сохранения часто бывает важным, чтобы численная схема обеспечивала выполнение закона сохранения точно (по крайней мере с машинной точностью), а не приближённо. Например, если численная схема не сохраняет число частиц, то в плазме спорадически возникает нескомпенсированный заряд и соответствующее электростатическое поле, которое приводит к сильному ускорению частиц и их искусственному нагреву. Хотя методы конечных разностей и спектральные методы в простейших случаях обеспечивают выполнение законов сохранения, это свойство не зашито в них в явном виде, и при усложнении схемы может пропасть. При использовании этих схем обеспечение закона сохранения становится нетривиальной задачей.

Такого недостатка лишены методы, учитывающие законы сохранения явно. Они получили название методов конечных или контрольных объёмов, поскольку в них переходят от дифференциального уравнения к эквивалентному интегральному, и дискретизируются не производные, а интегралы для малых объёмов и ограничивающих их поверхностей.

Уравнения кинетики выражают собой закон сохранения числа частиц в фазовом пространстве. В явном виде это видно из дивергентной формы уравнения [1.60]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\vec{r}, \vec{p}}(\mathbf{A}f) = 0 \quad (7.1)$$

$$\mathbf{A} = \left\{ \vec{v}, q\vec{E} + \frac{q}{c} [\vec{v} \times \vec{B}] \right\} \quad (7.2)$$

Величина, стоящая под дивергенцией, $\Phi \equiv \mathbf{A}f$ имеет смысл потока частиц.

Для применения метода конечных объёмов разобьём всё пространство сеткой. В одномерном случае сетка представляет собой набор точек

$$\{x_i\}_{i=1\dots N} \quad (7.3)$$

Окружим каждую точку сетки конечным (контрольным) объёмом:

$$V_i \equiv \left(x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}} \right) \quad (7.4)$$

$$x_{i+\frac{1}{2}} \equiv \frac{x_{i+1} + x_i}{2} \quad (7.5)$$

$$x_{i-\frac{1}{2}} \equiv \frac{x_i + x_{i-1}}{2} \quad (7.6)$$

и будем аппроксимировать функцию средним значением по этому объёму:

$$f_i^n \equiv \frac{1}{V_i} \int_{V_i} f(t^n, \mathbf{r}) dV = \frac{1}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f(t^n, x) dx \quad (7.7)$$

Для построения схемы интегрирования воспользуемся уравнением в дивергентной форме:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial \Phi(t, x)}{\partial x} = 0, \quad (7.8)$$

проинтегрируем его по конечному объёму:

$$\frac{d}{dt} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f(t, x) dx + \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\partial \Phi(t, x)}{\partial x} dx = 0 \quad (7.9)$$

и воспользуемся теоремой Остроградского — Гаусса:

$$\left(x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}} \right) \frac{df_i}{dt} + \Phi_{i+\frac{1}{2}}(t) - \Phi_{i-\frac{1}{2}}(t) = 0, \quad (7.10)$$

где по определению

$$\Phi_{i+\frac{1}{2}}(t) \equiv \Phi(t, x_{i+\frac{1}{2}}) \quad (7.11)$$

$$\Phi_{i-\frac{1}{2}}(t) \equiv \Phi(t, x_{i-\frac{1}{2}}) \quad (7.12)$$

Получившееся уравнение выражает собой баланс жидкости в объёме с учётом её потоков через границы объёма.

7.2. Схема Годунова

Существует несколько подходов к вычислению потоков в получившемся уравнении. Рассмотрим один из наиболее часто использующихся, называемый схемой Годунова. Для этого проинтегрируем уравнение по времени в интервале $[t^n, t^{n+1}]$:

$$f_i^{n+1} - f_i^n = - \frac{1}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left[\Phi_{i+\frac{1}{2}}(t) - \Phi_{i-\frac{1}{2}}(t) \right] dt, \quad (7.13)$$

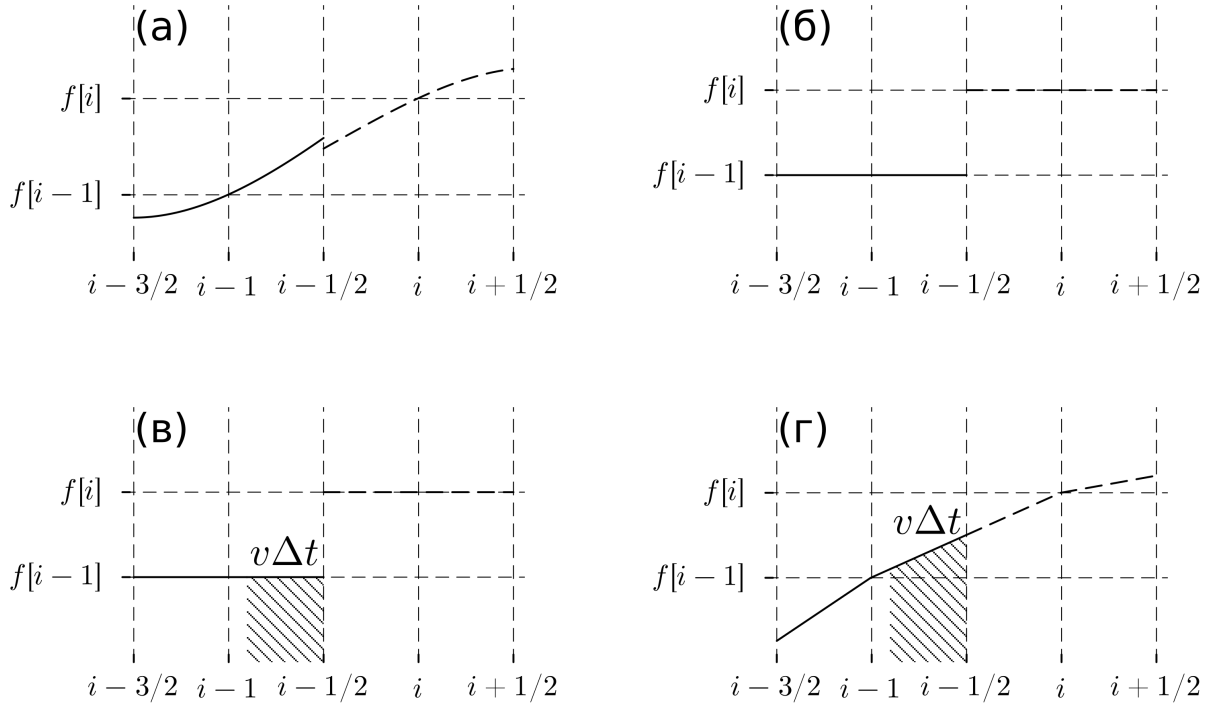


Рис. 7.1. (а) Пример аппроксимации функции распределения в соседних конечных объёмах, приводящей к возникновению разрыва функции на границе объёмов. (б) Аппроксимация функций распределения в контрольных объёмах постоянными значениями. (в) Принцип вычисления интегрального потока через границу объёмов

а для вычисления интегралов от потоков воспользуемся точным или численным решением так называемой задачи Римана. Преимуществом такого подхода является то, что вся физическая суть схемы оказывается заключенной в решение отдельной, относительно простой по своей постановке задачи.

Задачей Римана называют задачу об эволюции разрыва во времени. Если мы проведём аппроксимацию функции внутри каждого объёма тем или иным образом, то в общем случае на границе конечных объёмов функция будет иметь разрыв, как приведено на Рис. 7.1 (а). Со временем такая конфигурация будет как-то эволюционировать. Если мы знаем решение этой задачи, то можем вычислить и поток в каждый момент времени, и интеграл от него во времени. Пусть решение соответствующей задачи может быть представлено в виде:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \Phi_{i-\frac{1}{2}}(t) dt = \Delta t \Phi_{\text{Riemann}}(t^n, x_{i-1}, x_i, f_{i-1}^n, f_i^n), \quad (7.14)$$

где $\Delta t \equiv t^{n+1} - t^n$.

Потребуем, чтобы в самом общем случае решение задачи Римана удовлетворяло следующим свойствам. Во-первых, если в соседних объёмах средние плотности фазовой жидкости равны, то поток должен равняться потоку од-

нородной в пространстве жидкости:

$$\Phi_{\text{Riemann}}(f_{i-1}^n, f_i^n) = \Phi(f_{i-1}^n) \iff f_{i-1}^n = f_i^n \quad (7.15)$$

А во-вторых, потребуем, чтобы увеличение плотности жидкости в объёме никогда не приводило к снижению потока из этого объёма:

$$\frac{\partial \Phi_{\text{Riemann}}}{\partial f_{i-1}^n} \geq 0 \quad (7.16)$$

$$\frac{\partial \Phi_{\text{Riemann}}}{\partial f_i^n} \leq 0 \quad (7.17)$$

Простейшим случаем является аппроксимация профиля f внутри объёма постоянным значением (см. Рис. 7.1 (б)). В этом случае решение задачи Римана для постоянной скорости потока запишется следующим образом (см. Рис. 7.1 (в)):

$$\Phi_{\text{Riemann}} = \begin{cases} \Phi(t^n, x_{i-1}, f_{i-1}^n) = v f_{i-1} & \iff \frac{\partial \Phi}{\partial f} = v > 0 \\ \Phi(t^n, x_i, f_i^n) = v f_i & \iff \frac{\partial \Phi}{\partial f} = v < 0 \end{cases} \quad (7.18)$$

В таком виде схема Годунова точно сохраняет число частиц во всём пространстве, поскольку по построению потока на границе в соседних объёмах в точности равны. При этом выполняется также принцип максимума. Построенная схема, однако, имеет 1-ый порядок точности по шагу пространственной сетки и по шагу по времени. А кроме того она оказывается чрезмерно диффузионной.

Повысить порядок точности и снизить её диффузионность можно за счёт использования более высокого порядка аппроксимации функции в конечном объёме. Например, можно использовать кусочно-линейную центрально-взвешенную схему, как изображено на Рис. 7.1 (г). Потoki в задаче Римана в этом случае аппроксимируются следующим образом:

$$\Phi_{\text{Riemann}} \approx \Phi\left(\frac{f_i + f_{i-1}}{2}\right) = v \frac{f_i + f_{i-1}}{2} \quad (7.19)$$

Оказывается, однако, что все схемы Годунова с порядком аппроксимации выше первого, не обеспечивают выполнения принципа максимума. Связано это с тем, что они не сохраняют монотонность функции.

Говорят, что схема сохраняет монотонность функции, если для любой возрастающей (убывающей) функции $\{f_i^n\}$, последовательность $\{f_i^{n+1}\}$ также возрастает (убывает). Оказалось, что свойство сохранения монотонности однозначно связано с другим свойством, более удобным для определения, называемым убыванием полной вариации функции.

Полной вариацией функции называют величину

$$\text{TV}[f] = \int \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right| dx \quad (7.20)$$

Или в случае аппроксимирующей последовательности $\{f_i^n\}$:

$$\text{TV}[f] = \sum |f_i - f_{i-1}| \quad (7.21)$$

Говорят, что схема обеспечивает убывание полной вариации, если

$$\text{TV}[f^{n+1}] \leq \text{TV}[f^n] \quad (7.22)$$

Для обеспечения убывания полной вариации вводят так называемые ограничители потока, которые модифицируют величину потока на отдельных границах, на которых может возникнуть нарушение принципа сохранения монотонности.

7.3. Ограничители потока

Как правило, ограничители потока переключают схему более высокого порядка на схему первого порядка при выполнении некоторого условия. Наибольшую опасность представляют точки, в которых градиент функции терпит значительный скачок.

Формально решение задачи Римана с ограничителем потока можно записать в следующем виде:

$$\Phi_{\text{Riemann}}(f_{i-1}, f_i) = \Phi\left(\tilde{f}_{i-\frac{1}{2}}\right), \quad (7.23)$$

где $\tilde{f}_{i-\frac{1}{2}}$ — аппроксимация значения $f\left(x_{i-\frac{1}{2}}\right)$, точность которой варьируется в зависимости от величины локального скачка конечной разности $|f_i - f_{i-1}|$. Для введённых выше константной и кусочно-линейной центрально-взвешенной аппроксимаций выбор осуществляется следующим образом:

$$\tilde{f}_{i-\frac{1}{2}} = \begin{cases} f_{i-1} + \phi(r_{i-1}) \frac{f_i - f_{i-1}}{2} & \iff \frac{\partial \Phi}{\partial f} > 0 \\ f_i - \phi(r_i) \frac{f_i - f_{i-1}}{2} & \iff \frac{\partial \Phi}{\partial f} < 0 \end{cases} \quad (7.24)$$

Функция $\phi(r)$ называется ограничителем потока. Она зависит от относительной величины перепада функции слева и справа от рассматриваемого объёма:

$$r_i = \frac{f_i - f_{i-1}}{f_{i+1} - f_i} \quad (7.25)$$

При этом, как правило, требуют, чтобы в отсутствии скачка градиента $\phi(1) = 1$, что соответствует выбору аппроксимации высокого порядка, а при его максимальном относительном скачке $\phi(0) = 0$ и $\phi(+\infty) = 2$, что соответствует выбору аппроксимации 1-го порядка. Для остальных значений r выбирается некоторое промежуточное значение. При этом было показано, что для того, чтобы схема 2-го порядка точности обеспечивала убывание полной вариации, ограничитель потока должен удовлетворять следующим свойствам:

$$r \leq \phi(r) \leq 2r \iff 0 \leq r \leq 1 \quad (7.26)$$

$$1 \leq \phi(r) \leq r \iff 1 \leq r \leq 2 \quad (7.27)$$

$$1 \leq \phi(r) \leq 2 \iff r \geq 2 \quad (7.28)$$

Дополнительно часто требуют, чтобы ограничитель потока был симметричным, то есть при замене скачка градиента на противоположный по знаку поток не менялся. Математически это приводит к требованию:

$$\frac{\phi(r)}{r} = \phi\left(\frac{1}{r}\right) \quad (7.29)$$

Приведём несколько примеров используемых на практике ограничителей. Один из первых ограничителей был предложен ван Леером, носит его имя и имеет вид

$$\phi(r) = \frac{r + |r|}{1 + |r|} \quad (7.30)$$

Другим популярным вариантом, также предложенным ван Леером, является монотонизированная центрально-взвешенная схема:

$$\phi(r) = \max\left(0, \min\left(2r, \frac{1+r}{2}, 2\right)\right) \quad (7.31)$$

Для гидродинамических уравнений хорошие результаты показывает также ограничитель потока *minmod*:

$$\phi(r) = \max(0, \min(1, r)) \quad (7.32)$$

Ограничители потока обеспечивают выполнение принципа максимума, а также подавляют спорадические численные осцилляции, возникающие вблизи сильных скачков градиента функции. При этом ограничитель понижает точность схемы, и вносит свою ошибку, в частности, увеличивая диффузионность схемы. По этой причине универсального ограничителя потока, который давал бы одинаково хороший результат на всех возможных задачах, не существует. Для каждой отдельной задачи следует проводить тестирование различных ограничителей для выбора оптимального.

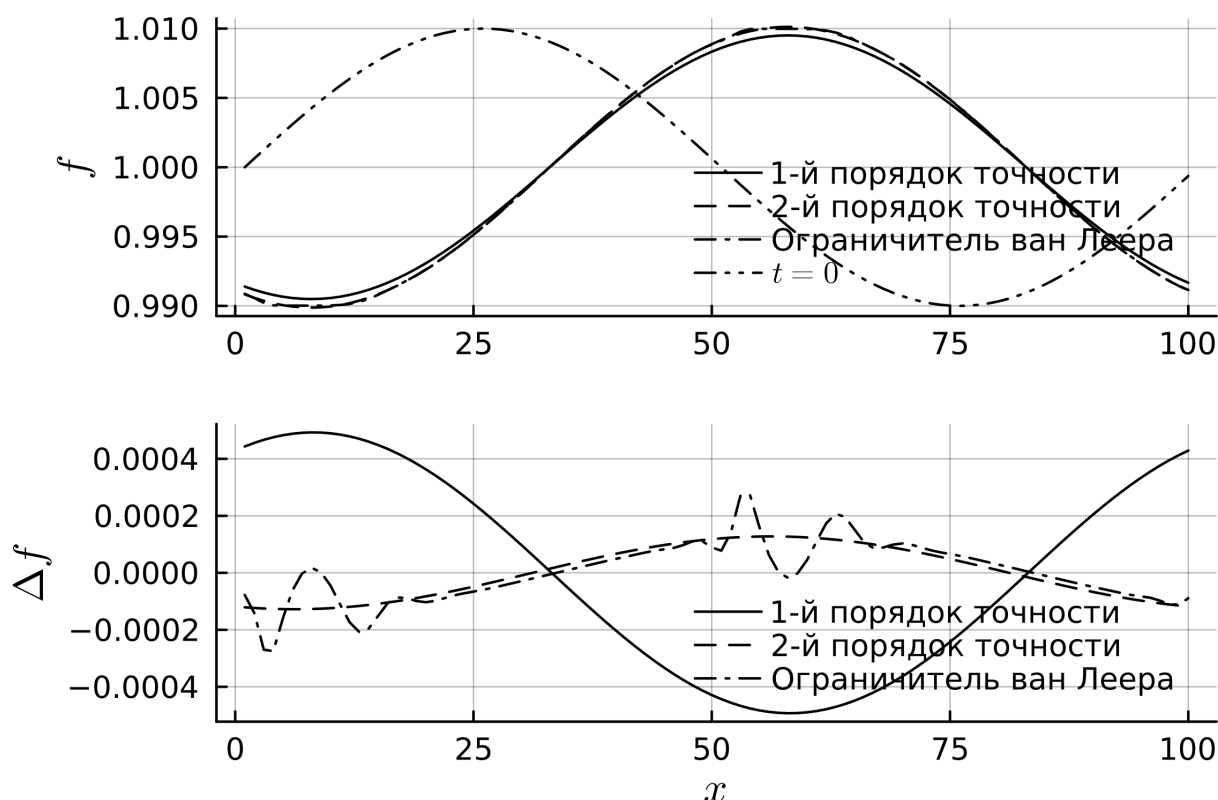


Рис. 7.2. Результат численного решения одномерного уравнения адвекции с постоянной скоростью методом Годунова для случая синусоидального начального распределения. Сверху приведено изначальное распределение и распределение, полученное численно с применением аппроксимаций функции 1-го и 2-го порядков точности, а также с применением ограничителей потока ван Леера. Снизу показана абсолютная ошибка полученных численно решений по отношению к точному решению

В конце отметим также, что, как и разностные схемы, схема Годунова для устойчивости требует выполнения условия Куранта. Как правило, это условие является также и достаточным, однако при использовании более сложных аппроксимаций это может быть и не так.

Примеры численного решения одномерного уравнения адвекции с постоянной скоростью методом Годунова для синусоидального начального распределения приведены на Рис. 7.2. Видим, что величина ошибки этих методов в данном случае сравнима с величиной ошибки конечно-разностных методов (см. Рис. 5.1), при этом схема 1-го порядка точности вносит диссипацию (амплитуда распространяющегося возмущения уменьшается), а схема 2-го порядка без ограничителя наоборот приводит к нарушению принципа максимума и повышает амплитуду возмущения. Добавление ограничителя обеспечивает выполнение принципа максимума, однако искажает форму возмущения.

Преимущества схемы с ограничителями более явно проявляются при возмущениях на фоне нулевого уровня. Например, на Рис. 7.3 приведены приме-

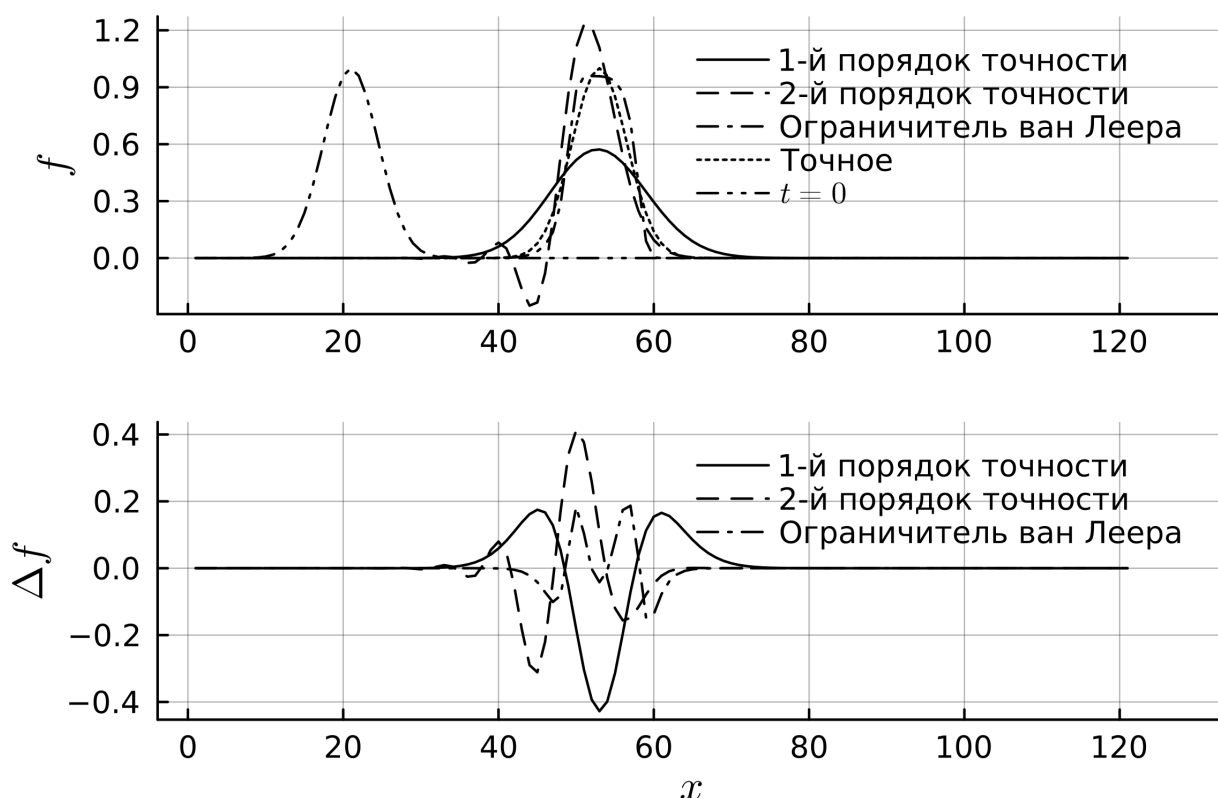


Рис. 7.3. Результат численного решения одномерного уравнения адвекции с постоянной скоростью методом Годунова для случая начального распределения в виде гауссовой функции. Сверху приведено изначальное распределение и распределение, полученное численно с применением аппроксимаций функции 1-го и 2-го порядков точности, с применением ограничителей потока ван Леера, а также точное решение. Снизу показана абсолютная ошибка полученных численно решений по отношению к точному решению

ры численных расчётов методом Годунова для гауссового начального распределения. Видим, что величина ошибки в этом случае для всех использованных аппроксимаций сравнимы. При этом схема 1-го порядка точности приводит к сильной диссипации и диффузии возмущения, а схема 2-го порядка — к появлению областей с отрицательным значение функции распределения. Схема с ограничителем при этом выступают в роли компромисса: она с одной стороны обеспечивает неотрицательность функции распределения, а с другой хотя и модифицирует изначальное распределение, но наблюдаемая диффузия значительно меньше, чем для чистой схемы 1-го порядка. При этом и амплитуда абсолютной ошибки оказывается наименьшей.

Глава 8

Методы, основанные на интегрировании характеристик

8.1. Полулагранжев метод

Дифференциальные уравнения гиперболического типа первого порядка допускают применение также специфических для этого типа уравнений методов, основанных на интегрировании уравнений характеристик. Полный переход к описанию эволюции методом характеристик принято называть лагранжевым методом, поскольку он эквивалентен описанию системы в лагранжевых координатах, то есть слежению за частицами жидкости. Однако полностью лагранжевые численные методы сталкиваются с рядом трудностей. Во-первых, часто требуется стыковать интегрируемое уравнение с другими уравнениями, например, для электромагнитного поля, которые заданы в эйлеровых координатах, таким образом, требуется вычислять плотность и токи в эйлеровых координатах, а перерасчёт лагранжевых координат в эйлеровы трудозатратен. А во-вторых, часто эволюция жидкости приводит к её закручиванию или в случае кинетических уравнений филаментации, что в свою очередь приводит к сильному искажению сетки в лагранжевых координатах вплоть до самопересечения граней сетки и необходимости вводить новую сетку. По этой причине более широкое распространение получил гибридный подход, который принято называть полулагранжевым.

В полулагранжевых методах на каждой итерации значения функции определены на сетке в эйлеровых координатах, однако для их вычисления на следующей итерации используется лагранжев подход, эквивалентный интегрированию характеристик уравнения.

Рассмотрим бесстолкновительное кинетическое уравнение в общем виде:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{A}(t, \mathbf{x}) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f = 0 \quad (8.1)$$

Характеристики этого уравнения являются решением семейства уравнений:

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{X}}{dt} &= \mathbf{A}(t, \mathbf{X}) \\ \mathbf{X}(t = s) &= \mathbf{x}\end{aligned}\tag{8.2}$$

При этом значение функции f вдоль характеристик сохраняется:

$$\frac{d}{dt}f(t, \mathbf{X}(t)) = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{d\mathbf{X}}{dt} \cdot \nabla_{\mathbf{X}}f \equiv \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{A}(t, \mathbf{X}) \cdot \nabla_{\mathbf{X}}f = 0\tag{8.3}$$

Таким образом, если известна характеристика и значение функции в момент времени $t = s$, то можно получить её значение и в любой другой момент времени:

$$f(t, \mathbf{X}(t; s, \mathbf{x})) = f(s, \mathbf{X}(s; s, \mathbf{x})) = f(s, \mathbf{x})\tag{8.4}$$

Рассмотрим, как это свойство используется в классической реализации полулагранжева метода на примере одномерного уравнения адвекции:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v(x, t) \frac{\partial f}{\partial x} = 0\tag{8.5}$$

Введём сетку:

$$\{x_i\}_{i=1\dots N}\tag{8.6}$$

Пусть известны значения функции в вершинах сетки в момент времени t^n :

$$f_i^n \equiv f(t^n, x_i)\tag{8.7}$$

Чтобы определить значения функции f в вершинах сетки в момент времени t^{n+1} , найдём характеристики, проходящие через точки x_i в этот момент времени, то есть решим уравнения:

$$\frac{dX}{dt} = v(t, X)\tag{8.8}$$

с начальными условиями вида

$$X(t^{n+1}) = x_i\tag{8.9}$$

И для каждой полученной характеристики определим значение в момент времени t^n :

$$X_i = X(t^n; t^{n+1}, x_i)\tag{8.10}$$

Интерполируем тем или иным способом функцию $f(t, x)$ в момент времени t^n по её значениям в вершинах сетки и определим её значения в точках X_i . Тогда согласно свойству характеристик:

$$f_i^{n+1} \equiv f(t^{n+1}, x_i) = f(t^n, X(t^n; t^{n+1}, x_i)) \equiv f(t^n, X_i)\tag{8.11}$$

Свойства полулагранжевого метода существенно зависят от выбранного метода интерполяции. Простейшей является линейная интерполяция, в которой значение функции в точке X_i определяется как среднее взвешенное значение в двух ближайших точках сетки. Такая схема, однако, оказывается чрезмерно диффузной и, кроме того, не использует в полной мере преимущество метода характеристик, поскольку сводится к некоторой разностной схеме.

Наиболее распространённым методом интерполяции, который с одной стороны относительно прост, а с другой обеспечивает относительно высокую точность и низкую численную диффузию, является применение кубических В-сплайнов.

Кубическим В-сплайном называют функцию, составленную из полиномов третьей степени, коэффициенты которых подобраны так, что функция в целом всюду непрерывна вместе с первой и второй производными и при этом проходит через заданный набор точек. Математически функция представляется в виде:

$$f_{\text{CBS}} = \sum_{j=0}^N a_j S^3(x - x_j), \quad (8.12)$$

где кубические сплайны S^3 задаются следующим образом:

$$S^3(x) = \frac{1}{6} \begin{cases} 4 - 6 \left(\frac{|x|}{\Delta x} \right)^2 + 3 \left(\frac{|x|}{\Delta x} \right)^3 & \Longleftrightarrow 0 \leq |x| \leq \Delta x \\ \left(2 - \frac{|x|}{\Delta x} \right)^3 & \Longleftrightarrow \Delta x \leq |x| \leq 2\Delta x \\ 0 & \Longleftrightarrow |x| \geq 2\Delta x \end{cases} \quad (8.13)$$

Величина $\Delta x = x_{i+1} - x_i$ здесь соответствует шагу сетки, который для простоты считается постоянным, однако метод может быть обобщён и на случай неравномерной сетки.

Коэффициенты a_j находятся из условия прохождения сплайнов через известные значения функции в точках сетки:

$$f_i \equiv f(x_i) = f_{\text{CBS}}(x_i) = \sum_{j=0}^N a_j S^3(x_i - x_j), \quad (8.14)$$

Эти условия приводят к линейной системе $N + 1$ алгебраических уравнений, которая может быть решена численно.

Полулагранжевый метод допускает простое обобщение на многомерный случай: в этом случае уравнения для характеристик становятся системой уравнений, и вместо кубических сплайнов следует применять методы интерполяции в многомерном пространстве. Порядок точности метода по вре-

мени определяется порядком точности интегрирования уравнений характеристик. В случае зависимости скорости адвекции от значения функции f , повысить порядок точности можно за счёт использования схемы предиктор-корректора. Одно из достоинств метода: для его стабильности не требуется выполнения условия Куранта, однако требуется выполнение, как правило, более слабого условия $|(\partial v / \partial x) \Delta t| < 1$. В частности, в случае постоянной скорости адвекции величина шага по времени может и вовсе быть любой. Можно также показать, что классический метод для линейного уравнения сохраняет число частиц, однако в более сложных вариантах это уже может быть не так.

К проблемам полулагранжевого метода относится также невыполнение в общем случае принципа максимума. Его можно, однако, обеспечить выбором схемы интерполяции, в которой интерполируемое значение никогда не превышает значения функции в точках сетки. Наконец, при использовании сплайнов возникает проблема с вычислительной сложностью, поскольку задача поисков коэффициентов разложения является нелокальной, то есть требует знания о значении функции во всех точках сетки одновременно. Поскольку для повышения скорости вычислений используются вычислительные системы с распределённой памятью, на локальном вычислительном узле могут быть известны значения функции только в ограниченном количестве точек сетки, что понижает точность построения сплайна и нивелирует его преимущества.

8.2. Консервативный полулагранжевый метод

Чтобы решить проблему точного выполнения законов сохранения, принципа максимума и исключить нелокальные операции был предложен консервативный полулагранжевый метод, объединяющий идеи методов конечных объёмов и полулагранжевого метода.

Консервативный полулагранжевый метод строится аналогично методам конечных объёмов. Зададим сетку:

$$\{x_i\}_{i=1\dots N} \quad (8.15)$$

и будем аппроксимировать функцию средним значением по некоторому конечному объёму, окружающему каждую точку сетки:

$$f_i^n \equiv \frac{1}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f(t^n, x) dx, \quad (8.16)$$

где

$$x_{i+\frac{1}{2}} \equiv \frac{x_{i+1} + x_i}{2} \quad (8.17)$$

$$x_{i-\frac{1}{2}} \equiv \frac{x_i + x_{i-1}}{2} \quad (8.18)$$

Тогда для дивергентной формы уравнения адвекции, проинтегрированной по каждому конечному объёму, после применения теоремы Остроградского — Гаусса получаем:

$$\left(x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}\right) \frac{df_i}{dt} + \Phi_{i+\frac{1}{2}}(t) - \Phi_{i-\frac{1}{2}}(t) = 0, \quad (8.19)$$

где $\Phi \equiv vf$ — поток, и по определению

$$\Phi_{i+\frac{1}{2}}(t) \equiv \Phi(t, x_{i+\frac{1}{2}}) \quad (8.20)$$

$$\Phi_{i-\frac{1}{2}}(t) \equiv \Phi(t, x_{i-\frac{1}{2}}) \quad (8.21)$$

В отличие от схемы Годунова, однако, для вычисления потоков воспользуемся решением уравнений характеристик для точек, соответствующих границам конечных объёмов:

$$\begin{aligned} \frac{dX}{dt} &= v(t, X) \\ X(t^{n+1}) &= x_{i-\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (8.22)$$

Обозначим:

$$X_{i-\frac{1}{2}} \equiv X(t^n; t^{n+1}, x_{i-\frac{1}{2}}), \quad (8.23)$$

тогда интегральный поток через соответствующую границу может быть определён следующим образом:

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \Phi_{i-\frac{1}{2}} dt = \int_{X_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i-\frac{1}{2}}} f(x, t^n) dx \quad (8.24)$$

Для вычисления интеграла осталось только аппроксимировать функцию f внутри i -го объёма. Для обеспечения второго порядка точности и низкой численной диффузии схемы будем аппроксимировать функцию квадратичным многочленом f_h для вычисления коэффициентов которого будем использо-

вать следующие уравнения:

$$\int_{x_{i-\frac{3}{2}}}^{x_{i-\frac{1}{2}}} f_h(x) dx = f_{i-1} \quad (8.25)$$

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f_h(x) dx = f_i \quad (8.26)$$

$$\int_{x_{i+\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{3}{2}}} f_h(x) dx = f_{i+1} \quad (8.27)$$

В результате получаем следующую аппроксимацию:

$$\begin{aligned} f_h(x) = & f_i + \frac{1}{6\Delta x^2} [2(x - x_i)(x - x_i + 3\Delta x/2) + \\ & + (x - x_i + \Delta x/2)(x - x_i - \Delta x/2)] (f_{i+1} - f_i) - \\ & - \frac{1}{6\Delta x^2} [2(x - x_i)(x - x_i - 3\Delta x/2) + \\ & + (x - x_i + \Delta x/2)(x - x_i - \Delta x/2)] (f_i - f_{i-1}), \end{aligned} \quad (8.28)$$

где $\Delta x \equiv x_{i+1} - x_i$ — шаг сетки, считающийся для простоты постоянным.

Для обеспечения принципа максимума аналогично методам конечных объёмов воспользуемся ограничителями потока. Для этого в уравнении (8.28) сделаем замены:

$$(f_{i+1} - f_i) \rightarrow 2\phi(r_i)(f_{i+1} - f_i) \quad (8.29)$$

$$(f_i - f_{i-1}) \rightarrow 2\phi(r_{i-1})(f_i - f_{i-1}), \quad (8.30)$$

где функция $\phi(r)$ введена аналогично уравнению (7.24) и

$$r_i = \frac{f_i - f_{i-1}}{f_{i+1} - f_i} \quad (8.31)$$

В результате получаем:

$$\begin{aligned} f_i^{n+1} = & f_i^n - \frac{1}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left(\Phi_{i+\frac{1}{2}} - \Phi_{i-\frac{1}{2}} \right) dt \approx \\ \approx & f_i^n - \frac{1}{\Delta x} \int_{X_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i-\frac{1}{2}}} f_h(x, t^n) dx \end{aligned} \quad (8.32)$$

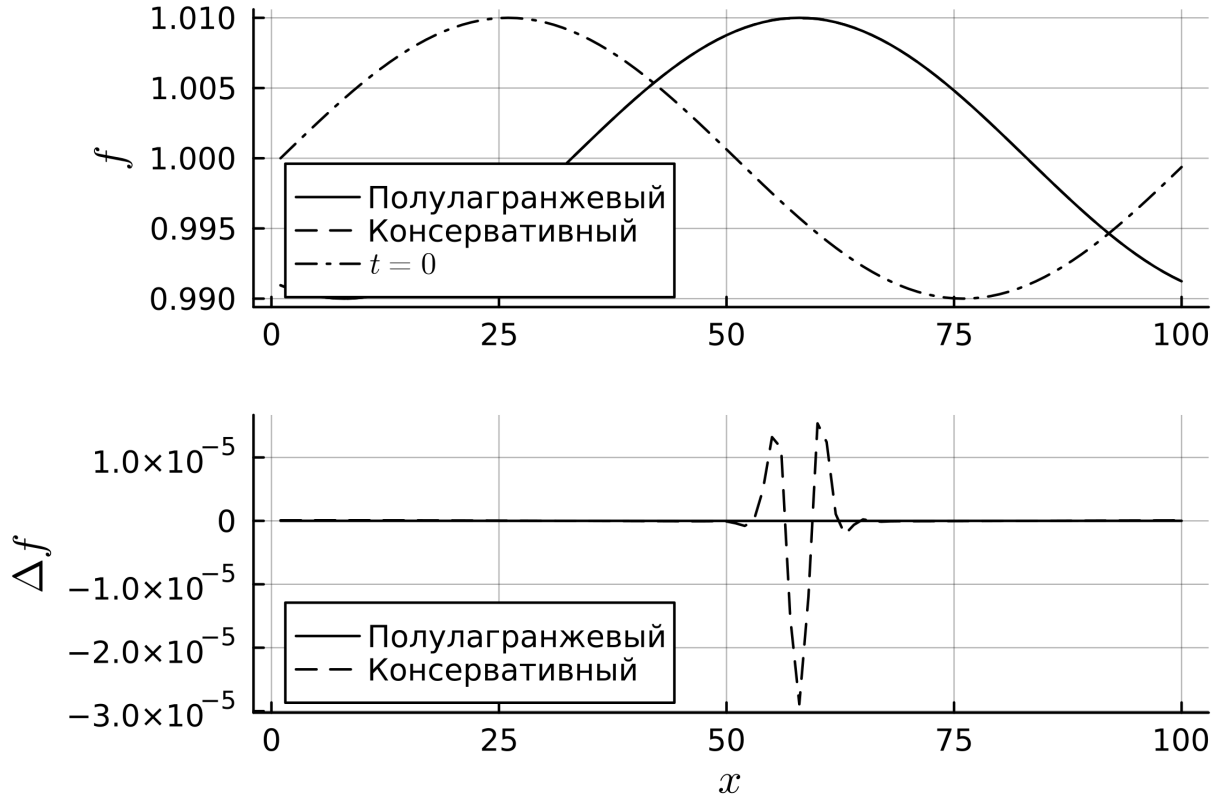


Рис. 8.1. Результат численного решения одномерного уравнения адвекции с постоянной скоростью полулагранжевыми методами для случая синусоидального начального распределения. Сверху приведено изначальное распределение и распределения, полученные численно. Снизу показана абсолютная ошибка полученных численно решений по отношению к точному решению

Если скорость постоянна, то $X_{i-\frac{1}{2}} = x_{i-\frac{1}{2}} - v\Delta t$, где $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ — шаг по времени. В этом случае интеграл можно вычислить в явном виде:

$$f_i^{n+1} = f_i^n - \frac{v\Delta t}{\Delta x} \left[f_i + \frac{\phi(r_i)}{3} \left(1 - \frac{v\Delta t}{\Delta x} \right) \left(2 - \frac{v\Delta t}{\Delta x} \right) (f_{i+1} - f_i) - \frac{\phi(r_{i-1})}{3} \left(1 - \frac{v\Delta t}{\Delta x} \right) \left(1 + \frac{v\Delta t}{\Delta x} \right) (f_i - f_{i-1}) \right] \quad (8.33)$$

Примеры численного решения одномерного уравнения адвекции с постоянной скоростью обычным и консервативным полулагранжевыми методами для синусоидального возмущения приведены на Рис. 8.1. Видим, что точность консервативного полулагранжевого метода сравнима с точностью конечно-разностного метода 2-го порядка (см. Рис. 5.1), а точность обычного полулагранжевого метода и вовсе выше (на графике не видно, но абсолютная ошибка составляет порядка 10^{-8} – 10^{-7}).

Для гауссового начального распределения результаты численного моделирования показаны на Рис. 8.2. Снова видим, что точность консервативного полулагранжевого метода сравнима с точностью конечно-разностного мето-

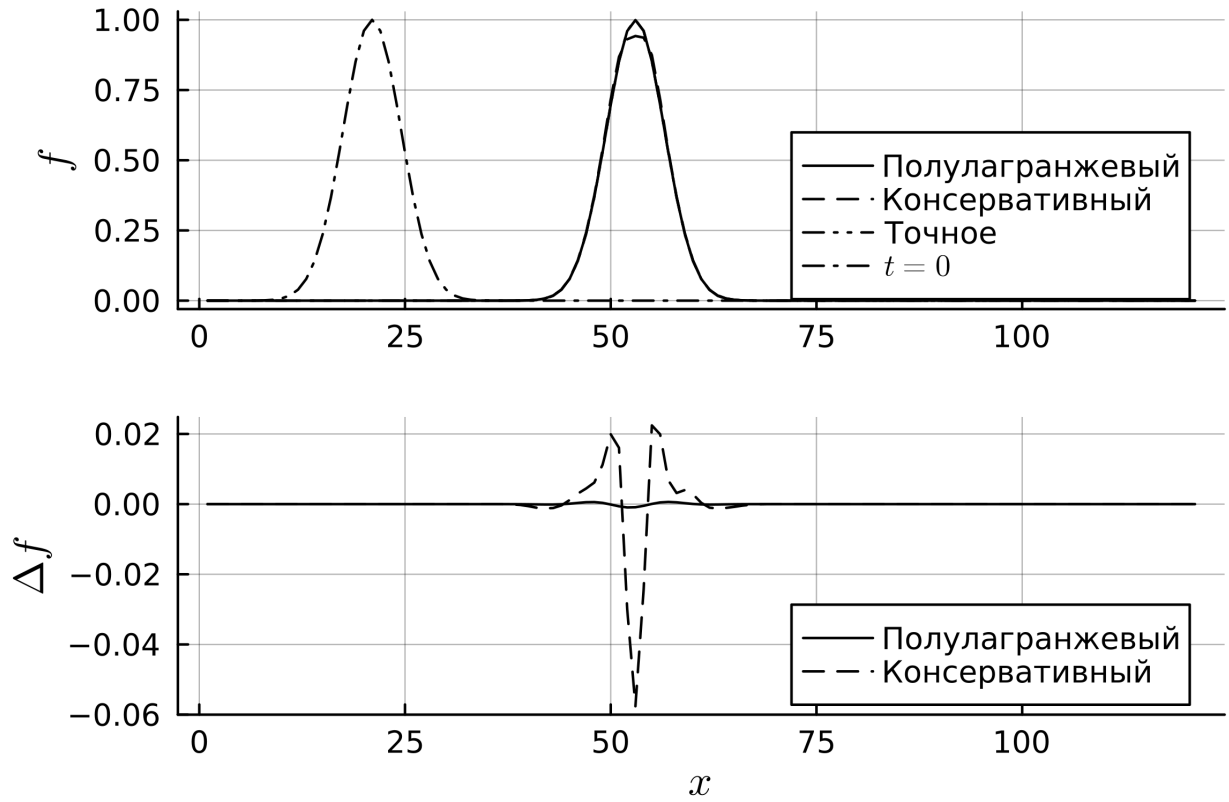


Рис. 8.2. Результат численного решения одномерного уравнения адвекции с постоянной скоростью полулагранжевыми методами для случая синусоидального начального распределения. Сверху приведено изначальное распределение и распределения, полученные численно. Снизу показана абсолютная ошибка полученных численно решений по отношению к точному решению

да 2-го порядка (см. Рис. 5.2), а точность обычного полулагранжевого метода ещё выше (абсолютная ошибка составляет порядка 10^{-3} в данном случае).

Более аккуратное изучение решений, однако, показывает, что в некоторых точках решение обычным полулагранжевым методом оказывается отрицательным с абсолютной величиной $\approx -10^{-10}$. Хотя эта величина мала, она может быть больше при других начальных условиях и другом выборе параметров моделирования, а также может приводить к численным проблемам, если предполагается, что функция распределения должна быть гарантированно неотрицательной, как, например, при вычислении энтропии: $S = \sum_i f_i \ln f_i \Delta x$.

Глава 9

Метод частиц в ячейках

9.1. Форм-фактор частиц и процедура взвешивания

Рассмотренные выше методы численного решения кинетических уравнений так или иначе основаны на задании неизвестной функции на сетке, при этом размер сетки с ростом размерности пространства растёт экспоненциально. Например, если по каждой координате количество точек сетки равняется 100, то общее количество точек в 6-мерном пространстве будет равняться $100^6 = 10^{12}$, что даже при размере 4 байта на точку (что соответствует, например, типу *float* в языке Си — наиболее короткому, и потому неточному, представлению числа с плавающей точкой) требует объём оперативной памяти в 4 терабайта, что достижимо только на больших суперкомпьютерах. Более реалистичные требования к размеру сетки и хранимым данным приводят к необходимости иметь десятки и сотни терабайт памяти, что практически неосуществимо.

По этой причине полномасштабное трёхмерное моделирование кинетических уравнений сеточными методами оказывается на практике неосуществимым. Оказалось, однако, что во многих случаях приемлемой точности вычислений можно достичь методами, основанными на описании плазмы как совокупности частиц. Наиболее успешным среди них оказался метод частиц в ячейках (*Particle-In-Cell*, *PIC*).

В простейшем случае метод частиц в ячейках основан на представлении функции распределения в виде взвешенной суммы N дельта-функций (см. Рис. 9.1 (а, б)):

$$f(t, \vec{r}, \vec{p}) = \sum_{k=1}^N w_k \delta(\vec{r} - \vec{r}_k) \delta(\vec{p} - \vec{p}_k), \quad (9.1)$$

где \vec{r}_k, \vec{p}_k отвечают положению и импульсу k -й частицы, а w_k определяет её относительный вклад (вес) в распределение. Поскольку количество реальных частиц в моделируемой системе, как правило, огромно — порядка числа Авогадро — то в моделировании следят за движением только ограниченного их

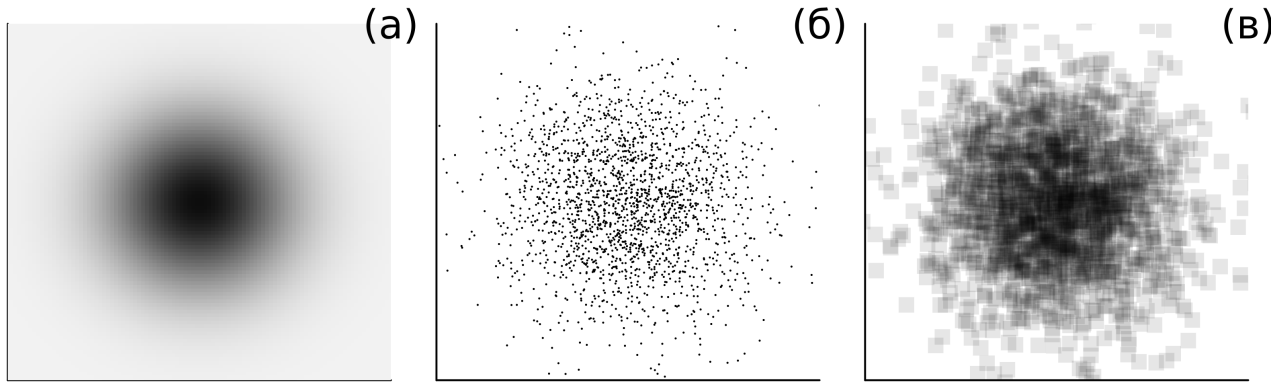


Рис. 9.1. (а) Пример аппроксимируемой функции распределения. (б) Аппроксимация при помощи 2000 случайно расположенных частиц, имеющих дельта-образный профиль. (в) Аппроксимация при помощи 2000 случайно расположенных частиц, имеющих кубический профиль

числа, считая, что каждая из моделируемых частиц отвечает усреднённому движению какого-то множества реальных частиц. Частицы, за движением которых следят в расчёте, называют макрочастицами, а w_k в этом случае имеет смысл количества реальных частиц, усреднённое движение которых моделируется движением k -й макрочастицы.

Представление функции распределения в виде суммы дельта-функций, однако, приводит к скачкам плотности заряда и тока при пересечении макрочастицами точек сетки, на которой определены электромагнитные поля. В связи с этим на практике для функции распределения производится операция регуляризации, аналогичная интерполяции её значений в пространстве между точками положения частиц. Эта процедура носит названия взвешивания.

Для взвешивания частиц принято применять полиномы различной степени. При этом для достижения наибольшей гладкости результирующих распределений в качестве таких полиномов используют В-сплайны. Чаще всего используются сплайн 0-го порядка:

$$S^0(x) = \frac{1}{\Delta x} \begin{cases} 1 & \Longleftrightarrow |x| \leq \frac{\Delta x}{2}, \\ 0 & \Longleftrightarrow |x| > \frac{\Delta x}{2}, \end{cases} \quad (9.2)$$

сплайн 1-го порядка:

$$S^1(x) = \frac{1}{\Delta x} \begin{cases} 1 - \frac{|x|}{\Delta x} & \Longleftrightarrow |x| \leq \Delta x, \\ 0 & \Longleftrightarrow |x| > \Delta x, \end{cases} \quad (9.3)$$

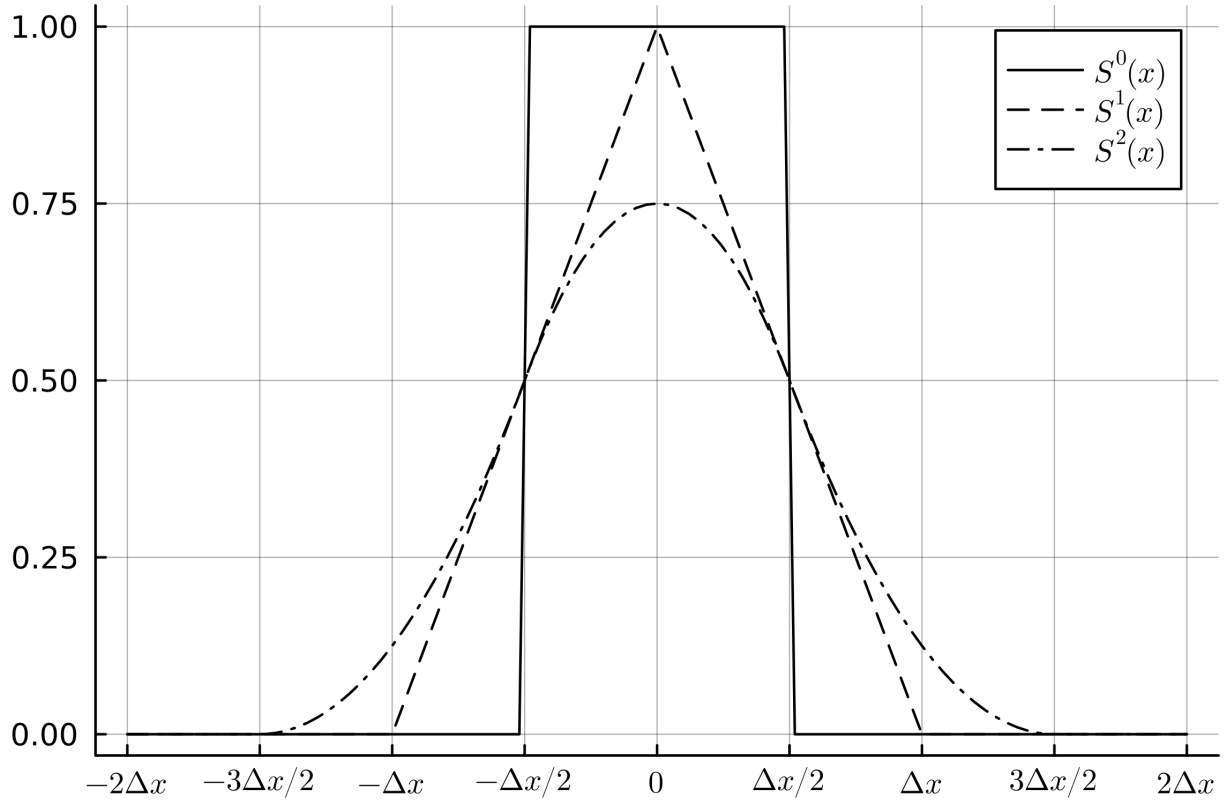


Рис. 9.2. Форм-факторы частиц, определяемые В-сплайнами различных порядков

или реже сплайн 2-го порядка:

$$S^2(x) = \frac{1}{\Delta x} \begin{cases} \frac{3}{4} - \left(\frac{|x|}{\Delta x}\right)^2 & \Longleftrightarrow |x| \leq \frac{\Delta x}{2}, \\ \frac{1}{2} \left(\frac{3}{2} - \frac{|x|}{\Delta x}\right)^2 & \Longleftrightarrow \frac{\Delta x}{2} < |x| \leq \frac{3\Delta x}{2}, \\ 0 & \Longleftrightarrow |x| > \frac{3\Delta x}{2} \end{cases} \quad (9.4)$$

Графическое изображение этих функций приведено на Рис. 9.2.

Встречается также применение сплайнов более высокого порядка, выражения для которых можно получить из следующего рекуррентного соотношения:

$$S^m(x) = \frac{1}{\Delta x} \int_{x-\Delta x/2}^{x+\Delta x/2} S^{m-1}(y) dy \quad (9.5)$$

В этих выражения Δx — шаг сетки, на которой требуется определение взвешенных величин. Как правило, он диктуется схемой интегрирования электромагнитных полей.

Значение плотности заряда в некоторой точке пространства определяется путём свёртки сплайнов по пространственным координатам с функцией

распределения:

$$\rho(t, \vec{r}) = q \int_{\vec{p}} \int_{\vec{s}} S(\vec{r} - \vec{s}) f(t, \vec{s}, \vec{p}) d\vec{s} d\vec{p} = q \sum_k w_k S(\vec{r} - \vec{r}_k) \quad (9.6)$$

Здесь по определению:

$$S(\vec{r}) \equiv S(x)S(y)S(z) \quad (9.7)$$

Из выражения для плотности заряда видно, что функция $S(\vec{r})$ имеет также смысл распределения заряда отдельной частицы в пространстве, и поэтому её также часто называют форм-фактором частицы. Можно, таким образом, считать, что при использовании форм-фактора функция распределения аппроксимируется кусочками кубической формы, как изображено на Рис. 9.1 (в). По этой причине использование сплайна 0-го порядка называют схемой с кубическими частицами или схемой облака в ячейке (*Cloud in cell, CIC*), а сплайна 1-го — схемой с облаками треугольной формы (*Triangular shaped cloud, TSC*).

Аналогично можно найти и величину плотности заряда в произвольной точке пространства:

$$\vec{j}(t, \vec{r}) = q \int_{\vec{p}} \int_{\vec{s}} \vec{v} S(\vec{r} - \vec{s}) f(t, \vec{s}, \vec{p}) d\vec{s} d\vec{p} = q \sum_k w_k \vec{v}_k S(\vec{r} - \vec{r}_k) \quad (9.8)$$

Использование сплайнов более высокого порядка уменьшает величину шумов в моделировании и повышает устойчивость схемы, однако увеличивает время вычислений и нелокальность метода, поскольку чем выше степень сплайна, тем больше размер результирующего форм-фактора в пространстве.

9.2. Интегрирование уравнений движения методом Бोरиса

Эволюция функции распределения во времени в методе частиц в ячейках осуществляется путём решения уравнений движения для макрочастиц, эквивалентное поиску характеристик кинетического уравнения:

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\vec{p}}{\gamma m} \quad (9.9)$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = q \left(\vec{E} + \left[\frac{\vec{p}}{\gamma m c} \times \vec{B} \right] \right) \quad (9.10)$$

$$\gamma = \sqrt{1 + \frac{p^2}{(mc)^2}} \quad (9.11)$$

При численном решении этих уравнений требуется удовлетворить двум основным требованиям: схема интегрирования должна иметь второй порядок по времени, и должна быть устроена таким образом, чтобы работа магнитного поля всегда равнялась нулю. Этого удаётся достичь с использованием схемы интегрирования Бóриса. В этой схеме предполагается, что положение частиц и их импульсы определены со сдвигом на полшага по времени: если координаты частиц заданы в моменты времени t^n , $n = 0, 1, \dots$, то их импульсы определяются в моменты времени $t^{n+1/2} = (t^{n+1} + t^n)/2$. Схема Бориса тогда аппроксимирует уравнения движения следующим образом:

$$\frac{\vec{r}^{n+1} - \vec{r}^n}{h} = \frac{\vec{p}^{n+1/2}}{\gamma^{n+1/2} m} \quad (9.12)$$

$$\frac{\vec{p}^{n+1/2} - \vec{p}^{n-1/2}}{h} = q \left(\vec{E}^n + \left[\frac{\vec{p}^{n+1/2} + \vec{p}^{n-1/2}}{2\gamma^n m c} \times \vec{B}^n \right] \right), \quad (9.13)$$

где $h = t^{n+1} - t^n$ — шаг по времени. Второе из этих уравнений, однако, записано в неявном виде, поскольку $\vec{p}^{n+1/2}$ в нём присутствует и в правой, и в левой части. В явном виде эта схема может быть представлена следующим образом:

$$\vec{p}^- = \vec{p}^{n-1/2} + \frac{qh}{2} \vec{E}^n \quad (9.14)$$

$$\gamma^n = \sqrt{1 + \left(\frac{p^-}{mc} \right)^2} \quad (9.15)$$

$$\vec{p}' = \vec{p}^- + \frac{qh}{2\gamma^n m c} [\vec{p}^- \times \vec{B}^n] \quad (9.16)$$

$$\vec{p}^+ = \vec{p}^- + \frac{qh}{\gamma^n \left(1 + \left(\frac{qhB^n}{2\gamma^n m c} \right)^2 \right)} [\vec{p}' \times \vec{B}^n] \quad (9.17)$$

$$\vec{p}^{n+1/2} = \vec{p}^+ + \frac{qh}{2} \vec{E}^n \quad (9.18)$$

В этой форме угадывается разделение операторов методом Стрэнга: сначала вычисляется ускорение полем \vec{E} за время $h/2$, затем поворот в магнитном поле за время h , а затем снова ускорение полем \vec{E} за время $h/2$. Для поворота в магнитном поле при этом используется схема типа предиктор-корректора, с поправкой к углу поворота в виде множителя $\left(1 + (qhB^n/2\gamma^n m c)^2 \right)^{-1}$, которая и обеспечивает точное равенство нулю работы магнитного поля.

При интегрировании уравнений движения надо знать поля в точке расположения заряда \vec{r}_k . Для их определения используют интерполяцию, которая должна быть согласована с методом взвешивания частиц для исключения

проблемы самовоздействия частиц. Таким образом, поля определяются по формулам:

$$\vec{E}^n(\vec{r}_k) = \sum_j \vec{E}_j(t^n) S(\vec{r}_k - \vec{r}_j) \quad (9.19)$$

$$\vec{B}^n(\vec{r}_k) = \sum_j \vec{B}_j(t^n) S(\vec{r}_k - \vec{r}_j), \quad (9.20)$$

где суммирование производится по всем точкам сетки, но ненулевой вклад дают только несколько ближайших к положению частицы, и функции взвешивания $S(\vec{r})$ в точности совпадают со сплайнами, использованными для взвешивания частиц.

Метод частиц в ячейках в точности сохраняет число частиц, а также в случае согласованного использования методов взвешивания частиц и интерполяции полей — импульс. Метод можно также немного усложнить, чтобы выполнялось точно сохранение энергии. По умолчанию, однако, метод не удовлетворяет уравнению Пуассона, из-за чего в ходе расчёта могут возникать существенные искусственные электростатические поля. Эта проблема решается применением более изощрённых методов интегрирования движения частиц и согласованных решателей для электромагнитного поля. Метод устойчив при выполнении условия Куранта, однако дополнительно требует также, чтобы размер радиуса Дебая был достаточно большим: при использовании 1-го порядка интерполяции он должен быть, как минимум, порядка шага по сетке, однако каждое увеличение порядка интерполяции на единицу уменьшает это требование в несколько раз.

Главным преимуществом метода частиц в ячейках является его вычислительная эффективность, связанная с тем, что поведение системы, как правило, определяется значением функции распределения в узкой области фазового пространства, что делает сеточные методы, которые вычисляют её эволюцию сразу во всём 6-мерном пространстве, неэффективными. В методе частиц в ячейках частицы можно задать только в области фазового пространства, где число частиц велико, что экономит вычислительные ресурсы. В результате там, где сеточным методам требуется порядка 10^{12} точек сетки, метод частиц в ячейках может работать с порядка 10^8 – 10^9 частиц, что вполне осуществимо на современных суперкомпьютерах. Это привело к повсеместному использованию этого метода в самых разных задачах физики плазмы от взаимодействия солнечного ветра с магнитосферой Земли до лабораторного взаимодействия интенсивного лазерного излучения с веществом.

Глава 10

Методы численного решения уравнений электродинамики

10.1. Общие сведения

Кинетические уравнения для плазмы требуется, как правило, решать самосогласованным образом с уравнениями электродинамики для полей, генерируемых самой плазмой. Таким образом, численные схемы для решения кинетического уравнения следует решать одновременно с уравнениями электродинамики. При этом требуется решить две основные проблемы: выбрать схему решения уравнений электродинамики и метод её согласования со схемой решения кинетических уравнений.

В общем случае эволюция электромагнитных полей описывается системой уравнений Максвелла:

$$\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = c \operatorname{rot} \vec{H} - 4\pi \vec{j} \quad (10.1)$$

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -c \operatorname{rot} \vec{E} \quad (10.2)$$

$$\operatorname{div} \vec{D} = 4\pi \rho \quad (10.3)$$

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0, \quad (10.4)$$

где \vec{E}, \vec{H} — напряжённости электрического и магнитного полей, \vec{D}, \vec{B} — индукции электрического и магнитного полей, ρ, \vec{j} — плотности заряда и тока. Напряжённости и индукции полей связаны следующим образом:

$$\vec{D} = \vec{E} + 4\pi \vec{P} \quad (10.5)$$

$$\vec{B} = \vec{H} + 4\pi \vec{M}, \quad (10.6)$$

где \vec{P}, \vec{M} — соответственно вектора поляризации и намагниченности, опреде-

ляемые плотностью связанных зарядов $\rho_{\text{св}}$ и их токами $\vec{j}_{\text{св}}$:

$$\rho_{\text{св}} = -\text{div}\vec{P} \quad (10.7)$$

$$\vec{j}_{\text{св}} = c \text{rot}\vec{M} + \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} \quad (10.8)$$

Зависимость величин $\rho_{\text{св}}$ и $\vec{j}_{\text{св}}$, и соответственно, \vec{P} и \vec{M} от величины полей называют материальными уравнениями.

При изучении плазменной кинетики, как правило, плотность заряда составляющих её электронов и ионов и соответствующие токи не учитываются в материальных уравнениях, а считаются свободными зарядами и их токами, явным образом входящими в уравнения Максвелла в виде величин ρ и \vec{j} . При этом поляризация и намагниченность плазмы, связанные с неионизированными электронами, как правило, могут считаться пренебрежимо малыми, и следовательно, можно положить $\vec{M} = \vec{P} = 0$, и оставить для описания электромагнитного поля только два вектора: напряжённость электрического поля \vec{E} и индукцию магнитного поля \vec{B} . В этом случае уравнения Максвелла примут вид:

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = c \text{rot}\vec{B} - 4\pi\vec{j} \quad (10.9)$$

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -c \text{rot}\vec{E} \quad (10.10)$$

$$\text{div}\vec{E} = 4\pi\rho \quad (10.11)$$

$$\text{div}\vec{B} = 0 \quad (10.12)$$

Напомним также, что не все уравнения Максвелла являются независимыми. Вообще говоря, при задании начальных условий, удовлетворяющих двум последним уравнениям, и при решении только первой пары, дивергентные уравнения будут удовлетворяться автоматически во все моменты времени. Это, однако, в общем случае не так для аппроксимирующих уравнений, предназначенных для численного решения. В этом случае иногда требуется проведение дополнительных действий для точного удовлетворения дивергентным уравнениям.

Для электромагнитных полей можно ввести векторный \vec{A} и скалярный φ потенциалы:

$$\vec{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c}\vec{A} \quad (10.13)$$

$$\vec{B} = \text{rot}\vec{A}, \quad (10.14)$$

определённые с точностью до произвольной функции ψ , так что замена $\vec{A}' = \vec{A} + \nabla\psi$, $\phi' = \phi - 1/c(\partial\psi/\partial t)$ не меняет уравнений Максвелла. Выбор функции

ψ называется калибровкой. Наиболее популярны калибровка Лоренца:

$$\operatorname{div} \vec{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0, \quad (10.15)$$

и калибровка Кулона:

$$\operatorname{div} \vec{A} = 0 \quad (10.16)$$

В случае изучения плазменной динамики калибровка Лоренца удобна тем, что уравнения Максвелла заменяются волновыми уравнениями для потенциалов:

$$\frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} - c^2 \Delta \vec{A} = 4\pi c \vec{j} \quad (10.17)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - c^2 \Delta \varphi = 4\pi c^2 \rho \quad (10.18)$$

Это оставляет уравнения волнового типа, локальные в пространстве. При этом однако, в ходе численного моделирования может нарушиться выполнение уравнения Пуассона, что будет приводить к значительным искусственным электростатическим полям, ускорению частиц плазмы и её численному нагреву.

По этой причине иногда удобнее применять калибровку Кулона, в которой уравнение Пуассона остаётся частью системы уравнений в явном виде. Уравнение на векторный потенциал, однако, усложняется. В целом уравнения Максвелла в этом случае заменяются следующими уравнениями:

$$\frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} - c^2 \Delta \vec{A} = 4\pi c \vec{j} - c \frac{\partial}{\partial t} \nabla \varphi \quad (10.19)$$

$$\Delta \varphi = -4\pi \rho \quad (10.20)$$

Недостатком такой калибровки является нелокальность уравнения Пуассона, требующая для вычисления поля в данной точке знания плотности заряда во всём пространстве.

Главным достоинством перехода к потенциальному описанию полей является явный учёт внутренних симметрий уравнений Максвелла, в частности, калибровочной симметрии, а также вихревого характера магнитного поля и, в случае кулоновской калибровки, уравнения Пуассона. Недостатком при этом является необходимость пересчёта потенциалов в поля для вычисления сил, действующих на частицы плазмы, что добавляет вычислительной сложности. На практике в большинстве случаев численно аппроксимируются два волновых уравнения для полей, при этом выполнение двух других уравнений обеспечивается выбором схемы интегрирования. Иногда также отдельно решается уравнение Пуассона для электрического потенциала: это удобнее в

случае, во-первых, чисто электростатических задач, когда генерацией магнитного поля можно вовсе пренебречь, и во-вторых, в одномерном случае, в котором продольное электрическое поле не может быть описано волновым уравнением.

10.2. Решение уравнения Пуассона спектральным методом Фурье

Рассмотрим уравнение Пуассона для электрического потенциала:

$$\Delta\varphi = -4\pi\rho \quad (10.21)$$

Это уравнение параболического типа, для которого решается краевая задача, то есть это уравнение требуется также дополнить граничными условиями. Как правило, считается, что плазма глобально нейтральна и поэтому её потенциал на бесконечности спадает достаточно медленно, и следовательно, выбрав достаточно большую область моделирования, можно положить на её границе $\phi = 0$ или воспользоваться периодическими граничными условиями.

Существует несколько подходов к численному решению краевых задач в целом и уравнений параболического типа в частности. Для уравнения Пуассона наиболее удобным из них является спектральный метод преобразования Фурье.

Предполагая периодические граничные условия, аппроксимируем функцию $\varphi(\vec{r})$ дискретным рядом Фурье по всем трём координатам:

$$\begin{aligned} \varphi(x, y, z) &= \mathcal{F}_N^{-1}[\hat{\varphi}] \equiv \\ &\equiv \frac{1}{L_x L_y L_z} \sum_{m=0}^{N_x-1} \sum_{n=0}^{N_y-1} \sum_{p=0}^{N_z-1} \hat{\varphi}_{mnp} \exp \left[-2\pi i \left(\frac{mx}{L_x} + \frac{ny}{L_y} + \frac{pz}{L_z} \right) \right] \end{aligned} \quad (10.22)$$

Числа N_x, N_y, N_z определяют число учитываемых членов ряда и, соответственно, точность аппроксимации. Обычно их выбирают равным числу точек сетки, на которой аппроксимирована плотность заряда. Величины L_x, L_y, L_z имеют смысл длины интегрируемой области вдоль соответствующих осей. То же самое преобразование Фурье можно выполнить и для функции $\rho(\vec{r})$:

$$\rho(x, y, z) = \mathcal{F}_N^{-1}[\hat{\rho}] \quad (10.23)$$

Коэффициенты Фурье-разложения при этом можно определить численно, если значения $\rho_{jkl} \equiv \rho(x_j, y_k, z_l)$ известны:

$$\hat{\rho}_{mnp} = \mathcal{F}_N[\rho] \equiv \sum_{j=0}^{N_x-1} \sum_{k=0}^{N_y-1} \sum_{l=0}^{N_z-1} \rho_{jkl} \exp \left[2\pi i \left(\frac{mj}{N_x} + \frac{nk}{N_y} + \frac{pl}{N_z} \right) \right], \quad (10.24)$$

где учтено, что $x_j/L_x = j/N_x$, $y_k/L_y = k/N_y$, $z_l/L_z = l/N_z$.

После подстановки Фурье-преобразования в уравнение Пуассона и приравнивания нулю коэффициентов при отдельных гармониках получаем систему уравнений вида:

$$4\pi^2 \hat{\varphi}_{mnp} \left(\frac{m^2}{L_x^2} + \frac{n^2}{L_y^2} + \frac{p^2}{L_z^2} \right) = -4\pi \hat{\rho}_{mnp}, \quad (10.25)$$

откуда находим:

$$\hat{\varphi}_{mnp} = -\frac{\hat{\rho}_{mnp}}{\pi \left(\frac{m^2}{L_x^2} + \frac{n^2}{L_y^2} + \frac{p^2}{L_z^2} \right)} \quad (10.26)$$

Зная теперь коэффициенты $\hat{\varphi}_{mnp}$ и взяв обратное преобразование Фурье, мы можем найти и значения потенциала $\varphi(\vec{r})$ в произвольных точках пространства.

10.3. Решение уравнений Максвелла методом конечных разностей во временной области

Рассмотрим теперь методы численного решения уравнений Максвелла. Для них применимы стандартные методы решения волновых уравнений, то есть уравнений гиперболического типа. В частности, методы конечных разностей, спектральные методы, методы конечных элементов, а также после некоторых преобразований, сводящих уравнения Максвелла к дивергентной форме, — методы конечных объёмов.

Наибольшую точность, как правило, обеспечивает спектральный метод Фурье, дополнительным преимуществом которого является отсутствие численной дисперсии, то есть зависимости скорости волн от их длины волны. Недостатком этого метода, однако, является его нелокальность.

Методы конечных элементов обычно применяют в случае, когда взаимодействие происходит в сложной системе электродов, аппроксимация поверхностей которых на квадратной сетке затруднена. Недостатком метода является его относительно низкая производительность.

На практике поэтому чаще всего применяются методы конечных разностей. Для уравнений Максвелла при этом был предложен специальный метод, называемый методом конечных разностей во временной области (*Finite Difference in Time Domain, FDTD*), отличительной особенностью которого является выбор сетки, называемой сеткой Ёи (в честь впервые предложившего её *Kane S. Yee*).

Сетка Ёи, ячейка которой приведена на Рис. 10.1, представляет собой несколько однородных подсеток с одинаковыми шагами $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ (возможно, не равными друг другу), сдвинутых относительно друг друга на по-

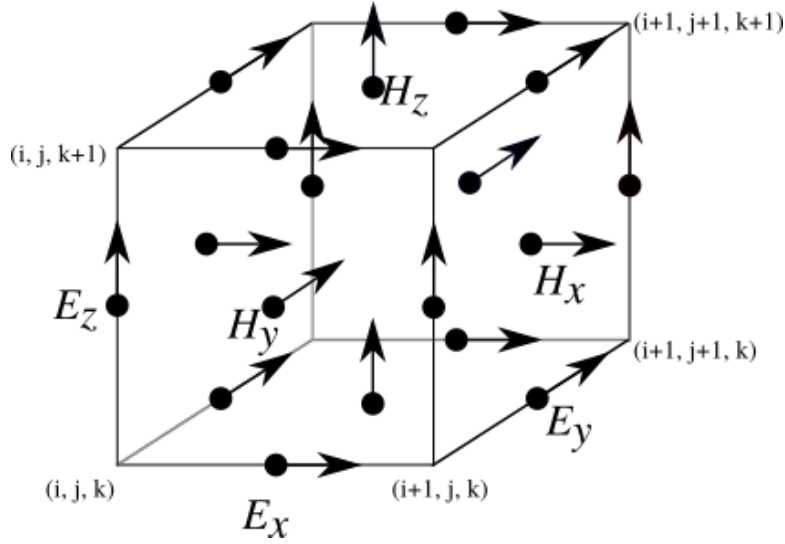


Рис. 10.1. Ячейка сетки Йи, используемая в методе конечных разностей во временной области

ловину шага по одной или нескольким осям. При этом значения на некоторых из подсеток определяются в моменты времени, также сдвинутые на полшага по времени относительно других подсеток. Такая сложная система позволяет записать уравнения Максвелла в конечных разностях с точностью второго порядка как по координатам, так и по времени, при этом получившаяся численная схема оказывается явной.

Чтобы понять, как это достигается, рассмотрим уравнение временной эволюции компоненты E_x в отсутствии внешних токов:

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = c \frac{\partial B_z}{\partial y} - c \frac{\partial B_y}{\partial z} \quad (10.27)$$

Его аппроксимация в *FDTD* имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{E_x|_{i+1/2,j,k}^{n+1} - E_x|_{i+1/2,j,k}^n}{\Delta t} = c \frac{B_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} - B_z|_{i+1/2,j-1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta y} - \\ - c \frac{B_y|_{i+1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} - B_y|_{i+1/2,j,k-1/2}^{n+1/2}}{\Delta z} \end{aligned} \quad (10.28)$$

Как видим, все компоненты этого уравнения определены в одной плоскости $x = x_{i+1/2}$, при этом компоненты поля \vec{B} определены в моменты времени $t^{n+1/2}$, а компоненты поля \vec{E} — в моменты времени t^n . Это позволяет использовать центрально взвешенную конечную разность по времени 2-го порядка точности с шагом Δt . При этом по осям y и z сетки для проекций B_z и B_y соответственно сдвинуты на полшага по отношению к сетке для проекции E_x , что позволяет использовать и по пространству центрально взвешенную конечную разность 2-го порядка точности с шагом равным шагу сетки. Геометрически точка, в которой определено E_x , в плоскости $x = \text{const}$ окружена 4-мя точками, в которых определены B_y и B_z , таким образом, правая часть уравнения

(10.28) выражает собой аппроксимацию интеграла по контуру $\oint \vec{B} \cdot \vec{dr}$, то есть является конечно-разностной аппроксимацией операции ротора.

Рассмотрим теперь уравнение временной эволюции компоненты B_y :

$$\frac{\partial B_y}{\partial t} = c \frac{\partial E_z}{\partial x} - c \frac{\partial E_x}{\partial z} \quad (10.29)$$

Его аппроксимация в $FDTD$ имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{B_y|_{i+1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} - B_y|_{i+1/2,j,k+1/2}^{n-1/2}}{\Delta t} = c \frac{E_z|_{i+1,j,k+1/2}^n - E_z|_{i,j,k+1/2}^n}{\Delta x} - \\ - c \frac{E_x|_{i+1/2,j,k+1}^n - E_x|_{i+1/2,j,k}^n}{\Delta z} \end{aligned} \quad (10.30)$$

Опять же все компоненты оказываются определены в одной плоскости $y = y_j$, и выражение справа также оказывается конечно-разностной аппроксимацией интеграла по контуру $\oint \vec{E} \cdot \vec{dr}$. При этом выбор подсетки для проекций B_y и E_x оказывается согласованным с уравнением (10.28).

То же самое справедливо и для оставшихся четырёх уравнений. Выпишем их в явном виде:

$$\begin{aligned} \frac{E_y|_{i,j+1/2,k}^{n+1} - E_y|_{i,j+1/2,k}^n}{\Delta t} = c \frac{B_x|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} - B_x|_{i,j+1/2,k-1/2}^{n+1/2}}{\Delta z} - \\ - c \frac{B_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} - B_z|_{i-1/2,j+1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta x} \end{aligned} \quad (10.31)$$

$$\begin{aligned} \frac{E_z|_{i,j,k+1/2}^{n+1} - E_z|_{i,j,k+1/2}^n}{\Delta t} = c \frac{B_y|_{i+1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} - B_y|_{i-1/2,j,k+1/2}^{n+1/2}}{\Delta x} - \\ - c \frac{B_x|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} - B_x|_{i,j-1/2,k+1/2}^{n+1/2}}{\Delta y} \end{aligned} \quad (10.32)$$

$$\begin{aligned} \frac{B_x|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} - B_x|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n-1/2}}{\Delta t} = c \frac{E_y|_{i,j+1/2,k+1}^n - E_y|_{i,j+1/2,k}^n}{\Delta z} - \\ - c \frac{E_z|_{i,j+1,k+1/2}^n - E_z|_{i,j,k+1/2}^n}{\Delta y} \end{aligned} \quad (10.33)$$

$$\begin{aligned} \frac{B_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} - B_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n-1/2}}{\Delta t} = c \frac{E_x|_{i+1/2,j+1,k}^n - E_x|_{i+1/2,j,k}^n}{\Delta y} - \\ - c \frac{E_y|_{i+1,j+1/2,k}^n - E_y|_{i,j+1/2,k}^n}{\Delta x} \end{aligned} \quad (10.34)$$

Плотность тока добавляется в эти уравнения естественным образом, если её значение определено в тех же точках, что и соответствующая компонента

поля \vec{E} , но со сдвигом на полшага по времени:

$$\frac{E_x|_{i+1/2,j,k}^{n+1} - E_x|_{i+1/2,j,k}^n}{\Delta t} = \dots - 4\pi j_x|_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} \quad (10.35)$$

$$\frac{E_y|_{i,j+1/2,k}^{n+1} - E_y|_{i,j+1/2,k}^n}{\Delta t} = \dots - 4\pi j_y|_{i,j+1/2,k}^{n+1/2} \quad (10.36)$$

$$\frac{E_z|_{i,j,k+1/2}^{n+1} - E_z|_{i,j,k+1/2}^n}{\Delta t} = \dots - 4\pi j_z|_{i,j,k+1/2}^{n+1/2} \quad (10.37)$$

Таким образом, функцию распределения следует определять на сетке (x_i, y_j, z_k) в моменты времени $t^{n+1/2}$, при этом значения плотности тока в промежуточных точках можно определять простым усреднением по соседним значениям:

$$j_x|_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} = \frac{1}{2} \left(j_x|_{i+1,j,k}^{n+1/2} + j_x|_{i,j,k}^{n+1/2} \right) \quad (10.38)$$

$$j_y|_{i,j+1/2,k}^{n+1/2} = \frac{1}{2} \left(j_y|_{i,j+1,k}^{n+1/2} + j_y|_{i,j,k}^{n+1/2} \right) \quad (10.39)$$

$$j_z|_{i,j,k+1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{2} \left(j_z|_{i,j,k+1}^{n+1/2} + j_z|_{i,j,k}^{n+1/2} \right) \quad (10.40)$$

В уравнение эволюции функции распределения электромагнитные поля входят только в часть, связанную с адвекцией по импульсам. Рассмотрим её:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + q \left(\vec{E} + \frac{\vec{p}}{\gamma mc} \times \vec{B} \right) \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = 0 \quad (10.41)$$

Если мы воспользуемся одной из численных схем, в которых предполагается постоянство скорости адвекции, то есть постоянных во времени и пространстве полей, то её можно условно представить в виде:

$$f^{n+1/2} = \Delta t \mathcal{F} \left(f^{n-1/2}, \vec{E}, \vec{B} \right), \quad (10.42)$$

где \mathcal{F} — оператор, реализующий выбранную численную схему.

В случае если поля меняются во времени и пространстве, мы можем воспользоваться той же самой схемой, если выберем аппроксимацию скорости адвекции достаточно высокого порядка. Для обеспечения второго порядка точности достаточно использовать значение полей в тех же точках пространства, в которых определена функция f , но в момент времени t^n :

$$f^{n+1/2} = \Delta t \mathcal{F} \left(f^{n-1/2}, \vec{E}^n, \vec{B}^n \right) \quad (10.43)$$

Поскольку в схеме *FDTD* все поля определены на сдвинутых на полшага сетках, а функцию f удобно определить в точках (x_i, y_j, z_k) , то значения полей

в этих точках следует искать путём усреднения по ближайшим значениям:

$$\begin{aligned}
E_x|_{i,j,k}^n &= \frac{E_x|_{i+1/2,j,k}^n + E_x|_{i-1/2,j,k}^n}{2} \\
E_y|_{i,j,k}^n &= \frac{E_y|_{i,j+1/2,k}^n + E_y|_{i,j-1/2,k}^n}{2} \\
E_z|_{i,j,k}^n &= \frac{E_z|_{i,j,k+1/2}^n + E_z|_{i,j,k-1/2}^n}{2} \\
B_x|_{i,j,k}^{n+1/2} &= \frac{B_x|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} + B_x|_{i,j-1/2,k+1/2}^{n+1/2} + B_x|_{i,j+1/2,k-1/2}^{n+1/2} + B_x|_{i,j-1/2,k-1/2}^{n+1/2}}{4} \\
B_y|_{i,j,k}^{n+1/2} &= \frac{B_y|_{i+1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} + B_y|_{i-1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} + B_y|_{i+1/2,j,k-1/2}^{n+1/2} + B_y|_{i-1/2,j,k-1/2}^{n+1/2}}{4} \\
B_z|_{i,j,k}^{n+1/2} &= \frac{B_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} + B_z|_{i-1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} + B_z|_{i+1/2,j-1/2,k}^{n+1/2} + B_z|_{i-1/2,j-1/2,k}^{n+1/2}}{4}
\end{aligned}$$

Поле \vec{E} , как и требуется, определено в момент времени t^n , однако поле \vec{B} сдвинуто на полшага по времени. Чтобы достичь 2-го порядка точности, в этом случае можно применить схему разделения Стрэнга, одну половину шага используя поле $\vec{B}^{n-1/2}$, а вторую половину — поле $\vec{B}^{n+1/2}$:

$$f' = \frac{\Delta t}{2} \mathcal{F} \left(f^{n-1/2}, 0, \vec{B}^{n-1/2} \right) \quad (10.44)$$

$$f'' = \Delta t \mathcal{F} \left(f', \vec{E}^n, 0 \right) \quad (10.45)$$

$$f^{n+1/2} = \frac{\Delta t}{2} \mathcal{F} \left(f'', 0, \vec{B}^{n+1/2} \right) \quad (10.46)$$

В результате одна итерация во времени представляет собой последовательную цепочку вычислений:

$$\begin{aligned}
f^{n-1/2}, \vec{E}^n, \vec{B}^{n-1/2} &\implies f'', \vec{E}^n, \vec{B}^{n-1/2} \implies f'', \vec{E}^n, \vec{B}^{n+1/2} \implies \\
&\implies f^{n+1/2}, \vec{E}^n, \vec{B}^{n+1/2} \implies f^{n+1/2}, \vec{E}^{n+1}, \vec{B}^{n+1/2}
\end{aligned} \quad (10.47)$$

Адвекцию функции распределения по пространственным координатам в этой схеме удобно осуществлять на шаге вычисления f'' по схеме разделения операторов Стрэнга.

Мы здесь рассмотрели только базовые особенности схемы *FDTD*. За более полным её описанием в случае необходимости следует обращаться к специализированным источникам. Отметим здесь лишь следующие моменты. Схема *FDTD* может быть записана также в двумерном и одномерном случаях, при этом её вид упрощается. Схема устойчива при выполнении аналога условия Куранта:

$$\Delta t \leq \frac{1}{c \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}} \quad (10.48)$$

Все конечно-разностные схемы обладают численной дисперсией: скорость волн в моделировании оказывается зависящей от их длины волны. Для *FDTD* дисперсионное уравнение имеет вид:

$$\sin^2\left(\frac{\omega\Delta t}{2}\right) = \left(\frac{c\Delta t}{\Delta x}\right)^2 \sin^2\left(\frac{k_x\Delta x}{2}\right) + \left(\frac{c\Delta t}{\Delta y}\right)^2 \sin^2\left(\frac{k_y\Delta y}{2}\right) + \left(\frac{c\Delta t}{\Delta z}\right)^2 \sin^2\left(\frac{k_z\Delta z}{2}\right) \quad (10.49)$$

Оценим величину этой дисперсии для следующих условий: пусть плоская монохроматическая волна бежит вдоль оси x , $k_x = k$, шаги сетки по всем осям одинаковые и равны Δx , и шаг Δt выбран максимальным необходимым для обеспечения устойчивости $\Delta t = \Delta x/c\sqrt{3}$. Получаем:

$$\sin\left(\frac{\omega\Delta x}{2\sqrt{3}c}\right) = \frac{1}{\sqrt{3}} \sin\left(\frac{k\Delta x}{2}\right) \quad (10.50)$$

Групповая скорость будет равняться:

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = c \frac{\cos\left(\frac{k\Delta x}{2}\right)}{\cos\left(\frac{\omega\Delta x}{2\sqrt{3}c}\right)} \quad (10.51)$$

К примеру, при использовании 8 точек на период волны, то есть $k\Delta x = 2\pi/8$, получаем $\omega \approx 0,983ck$, фазовую скорость волны $v_{\text{ф}} \approx 0,983c$ и групповую скорость $v_{\text{гр}} \approx 0,947c$, то есть огибающая такого импульса будет отставать от правильного положения на одну длину волны при распространении на приблизительно 20 длин волн. Для сравнения при использовании 6 точек на период волны ошибка групповой скорости увеличивается в два раза $v_{\text{гр}} \approx 0,905c$, а при использовании 10 точек на длину волны почти вдвое уменьшается $v_{\text{гр}} \approx 0,967c$. Таким образом, уменьшить дисперсию можно за счёт уменьшения шага сетки, в пределе $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta t \rightarrow 0$ дисперсионное уравнение стремится к $\omega = c\sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$. Существуют также модификации схемы *FDTD*, в которых дисперсия может быть ликвидирована в одном из направлений.

Схема *FDTD* может быть дополнена внешними источниками, которые будут генерировать излучение с нужными характеристиками. Это позволяет не задавать, например, падающий на вещество электромагнитный импульс в виде начальных условий в области моделирования, а сгенерировать его в области источников в ходе моделирования, что уменьшает область пространства, моделирование которой требуется проводить.

Убегающие из области взаимодействия волны при этом на границах расчётной области можно поглощать, что моделирует открытые граничные условия. Существует несколько подходов к реализации поглощающих граничных

условий. Один из наиболее успешных и распространённых — идеально согласованные поглощающие слои Беренджера (*Bérenger's Perfectly matched layers, PML*). Их идея заключается в том, что вблизи границ располагаются слои толщиной в несколько точек сетки, в которых в уравнения Максвелла добавлены чисто мнимые электрическая и магнитная проницаемости $\varepsilon = 1 + i\varepsilon''$, $\mu = 1 + i\mu''$. Таким образом, в этих слоях электромагнитные волны затухают. При этом, если выбрать $\varepsilon'' = \mu''$ то волновое сопротивление поглощающих слоёв будет в точности равно вакуумному: $Z = \sqrt{\varepsilon/\mu} = 1$, и отражение от них будет отсутствовать.

В заключении отметим, что в настоящее время связка методов *FDTD* и частиц в ячейках является де-факто стандартом для проведения численного моделирования системы уравнений Власова — Максвелла. В открытом доступе находятся сразу несколько многофункциональных программ, реализующих эти методы. Несколько из них приведены в списке литературы. В большинстве случаев возможностей этих программ должно быть достаточно для проведения физических исследований, поэтому необходимость писать свой программный код, как правило, отсутствует. Часть из этих программ допускает расширение функционала за счёт написания своих модулей, что требует значительно меньшего времени, чем разработка программы с нуля. Таким образом, кинетическое моделирование оказывается доступным всем желающим.

Список литературы

1. Кинетическое описание плазмы

[1.1] Климонтович Ю. Л. Статистическая теория неравновесных процессов в плазме. — М.: URSS, ЛЕНАНД, 2019.

[1.2] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. В 10 т. Т. 5. Статистическая физика. Ч. 1. — М.: Наука, 1976.

[1.3] Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Теоретическая физика. В 10 т. Т. 10. Физическая кинетика. — М.: Наука, 1979.

[1.4] Bertrand P., Del Sarto D., Ghizzo A. The Vlasov equation 1: History and general properties. — Hoboken: ISTE Ltd / John Wiley & Sons Inc, 2019.

2. Метод интегралов движения

[2.1] Bernstein I. B., Greene J. M., Kruskal M. D. Exact Nonlinear Plasma Oscillations // Physical Review. — 1957. — V. 108. — P. 546–550.

[2.2] Harris E. G. On a plasma sheath separating regions of oppositely directed magnetic field // Il Nuovo Cimento. — 1962. — V. 23. — P. 115–121.

[2.3] Hutchinson I. H. Electron holes in phase space: What they are and why they matter // Physics of Plasmas. — 2017. — V. 24. — Art. no. 055601.

[2.4] Кочаровский В. В., Кочаровский Вл. В., Мартьянов В. Ю., Тарасов С. В. Аналитическая теория самосогласованных токовых структур в бесстолкновительной плазме // Успехи физических наук. — 2016. — Т. 186. — С. 1267–1314.

[2.5] Eliasson B., Shukla P. K. Formation and dynamics of coherent structures involving phase-space vortices in plasmas // Physics Reports. — 2006. — V. 422. — P. 225–290.

3. Введение в численные методы

[3.1] Strang G. On the Construction and Comparison of Difference Schemes // SIAM Journal of Numerical Analysis. — 1968. — V. 5. — P. 506–517.

[3.2] Cheng C. Z., Knorr G. The integration of the Vlasov equation in configuration space // Journal of Computational Physics. — 1976. — V. 22. — P. 330–351.

[3.3] Dimarco G., Pareschi L. Numerical methods for kinetic equations // Acta Numerica. — 2014. — V. 23. — , P. 369–520.

[3.4] Palmroth M. et al. Vlasov methods in space physics and astrophysics // Living Reviews in Computational Astrophysics. — 2018. — V. 4. — P. 1-54.

4. Метод конечных разностей

[4.1] LeVeque R. J. Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations. — Philadelphia: SIAM, 2007.

[4.2] Press W. H., Teukolsky S. A., Vetterling W. T., Flannery B. P. Numerical recipes in C: The art of scientific computing, 2nd ed. — Cambridge; New York: Cambridge University Press, 1992.

5. Спектральные методы

[5.1] Canuto C., Hussaini M. Y., Quarteroni A., Zang T. A. Spectral Methods. In Scientific Computation. — Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2006.

[5.2] Schumer J. W., Holloway J. P. Vlasov Simulations Using Velocity-Scaled Hermite Representations // Journal of Computational Physics. — 1998. — V. 144. — P. 626–661.

[5.3] Le Bourdieu S., de Vuyst F., Jacquet L. Numerical solution of the Vlasov–Poisson system using generalized Hermite functions // Computer Physics Communications. — 2006. — V. 175. — P. 528–544.

6. Метод конечных объёмов

[6.1] LeVeque R. J. Finite-Volume Methods for Hyperbolic Problems. — Cambridge: Cambridge University Press, 2002.

[6.2] Mangeney A., Califano F., Cavazzoni C., Travnicek P. A Numerical Scheme for the Integration of the Vlasov–Maxwell System of Equations // Journal of Computational Physics. — 2002. — V. 179. — P. 495–538.

7. Полулагранжевые методы

[7.1] Sonnendrücker E., Roche J., Bertrand P., Ghizzo A. The Semi-Lagrangian Method for the Numerical Resolution of the Vlasov Equation // Journal of Computational Physics. — 1999. — V. 149. — P. 201–220.

[7.2] Filbet F., Sonnendrücker E., Bertrand P. Conservative Numerical Schemes for the Vlasov Equation // Journal of Computational Physics. — 2001. — V. 172. — P. 166–187.

8. Метод частиц в ячейках

[8.1] Birdsall C. K., Langdon A. B. Plasma physics via computer simulation. In Series in Plasma Physics. — New York, New York; London: Taylor & Francis, 2004.

[8.2] Arber T. D. et al. Contemporary particle-in-cell approach to laser-plasma modelling // Plasma Physics and Controlled Fusion. — 2015. — V. 57. — Art. no. 113001.

[8.3] Gonoskov A. et al. Extended particle-in-cell schemes for physics in ultrastrong laser fields: Review and developments // Physical Review E. — 2015. — V. 92. — Art. no. 023305.

[8.4] Fonseca R. A. et al. OSIRIS: A Three-Dimensional, Fully Relativistic Particle in Cell Code for Modeling Plasma Based Accelerators // Computational Science — ICCS 2002 / Lecture Notes in Computer Science, vol. 2331. — Berlin, Heidelberg: Springer, 2002. — P. 342–351.

[8.5] Derouillat J. et al. Smilei: A collaborative, open-source, multi-purpose particle-in-cell code for plasma simulation // Computer Physics Communications. — 2018. — V. 222. — P. 351–373.

[8.6] Bureau H. et al. PIconGPU: A Fully Relativistic Particle-in-Cell Code for a GPU Cluster // IEEE Transactions on Plasma Science. — 2010. — V. 38. — P. 2831–2839.

9. Метод конечных разностей во временной области

[9.1] Yee K. Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media // IEEE Transactions on Antennas and Propagation. — 1966. — V. 14. — P. 302–307.

[9.2] Taflov A., Hagness S. C. Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method, 2nd ed. In Artech House antennas and propagation library. — Boston, MA London: Artech House, 2000.

[9.3] Inan U. S., Marshall R. A., Numerical Electromagnetics. — Cambridge: Cambridge University Press, 2011.

[9.4] Маслов А. В. Моделирование волновых процессов в электродинамике: учебное пособие. — Нижний Новгород: Изд-во ННГУ, 2019.

Артем Владимирович **Коржиманов**

МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ПЛАЗМЫ

Учебное пособие

Компьютерная верстка – А.В. Коржиманов

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный
университет им. Н.И. Лобачевского».
603950, Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23.

Подписано в печать . Формат 60×84 1/16.

Бумага офсетная. Печать офсетная. Гарнитура Таймс.

Усл. печ. л. 6 п. л. Уч.-изд. л.

Заказ № . Тираж 20 экз.

Отпечатано в типографии Нижегородского госуниверситета
им. Н.И. Лобачевского.

603600, г. Нижний Новгород, ул. Большая Покровская, 37.