

Методы численного решения уравнений электродинамики

Уравнения Максвелла

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

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -c \operatorname{rot} \vec{E}$$

$$\operatorname{div} \vec{D} = 4\pi \rho$$

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0$$

$$\vec{D} = \vec{E} + 4\pi \vec{P}$$

$$\vec{B} = \vec{H} + 4\pi \vec{M}$$

$$\rho_{\text{cb}} = -\operatorname{div} \vec{P}$$

$$\vec{j}_{\text{cb}} = c \operatorname{rot} \vec{M} + \frac{\partial \vec{P}}{\partial t}$$

- В задачах плазменной кинетики, как правило, все заряды считаются свободными (но могут отдельно учитываться поляризация и магнитный момент ионов):

$$\rho_{\text{cb}} \equiv 0$$

$$\vec{j}_{\text{cb}} \equiv \vec{M} \equiv \vec{P} = 0$$

- Таким образом, решается система:

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = c \operatorname{rot} \vec{B} - 4\pi \vec{j}$$

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -c \operatorname{rot} \vec{E}$$

$$\operatorname{div} \vec{E} = 4\pi \rho$$

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0$$

Потенциальное описание

- Вводят векторный \vec{A} и скалярный φ потенциалы:

$$\vec{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c}\vec{A}$$

$$\vec{B} = \text{rot}\vec{A},$$

- Потенциалы определены с точностью до произвольной функции $\psi(\vec{r})$:

$$\vec{A}' = \vec{A} + \nabla\psi$$

$$\varphi' = \varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

- Выбор функции $\psi(\vec{r})$ называется калибровкой

- Калибровка Лоренца:

$$\text{div}\vec{A} + \frac{1}{c}\frac{\partial\varphi}{\partial t} = 0$$

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

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

- Уравнения остаются волновыми (локальными в пространстве)
- Уравнение Пуассона не решается в явном виде
- Калибровка Кулона:

$$\text{div}\vec{A} = 0$$

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

$$\Delta\varphi = -4\pi\rho$$

- В явном виде решается уравнение Пуассона
- Система становится нелокальной

Достоинства потенциального описания

- Явный учёт калибровочной инвариантности (внутренней симметрии уравнений Максвелла)
- Явный учёт вихревого характера магнитного поля
- В случае кулоновской калибровки явный учёт уравнения Пуассона

Недостатки потенциального описания

- Необходимость пересчёта потенциалов в поля для вычисления сил
- Нелокальность уравнения Пуассона

Решение уравнения Пуассона спектральным методом Фурье

- Рассмотрим уравнение Пуассона для электрического потенциала:

$$\Delta\varphi = -4\pi\rho$$

- 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 можно положить на её границе $\varphi = 0$ или воспользоваться периодическими граничными условиями
- Удобно применить спектральный метод преобразования Фурье

Дискретизация

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

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

$$\rho_{jkl} \equiv \rho(x_j, y_k, z_l)$$

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

- Здесь учтено, что $\frac{x_j}{L_x} = \frac{j}{N_x}$, $\frac{y_k}{L_y} = \frac{k}{N_y}$, $\frac{z_l}{L_z} = \frac{l}{N_z}$

Система в Фурье-пространстве

- Подставим Фурье-преобразования в уравнение Пуассона и приравняем нулю коэффициенты при отдельных гармониках:

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

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

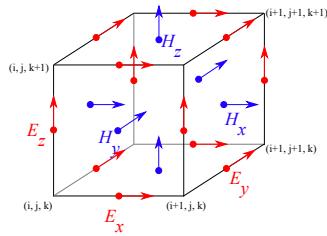
- Зная $\hat{\varphi}_{mnp}$ и взяв обратное преобразование Фурье, можем найти $\varphi(\vec{r})$ в произвольных точках пространства

Метод конечных разностей во временной области

- Уравнения Максвелла — уравнения гиперболического типа (волновые)
- Применимы стандартные методы решения дифференциальных уравнений в частных производных
- Наибольшую точность, как правило, даёт метод Фурье, обеспечивая также отсутствие численной дисперсии
- При сложной геометрии электродов применяют метод конечных элементов
- Для больших задач, требующих эффективного распараллеливания, применяют метод конечных разностей, называемый методом конечных разностей во временной области (Finite Difference in Time Domain, FDTD)

Сетка Йи (Yee)

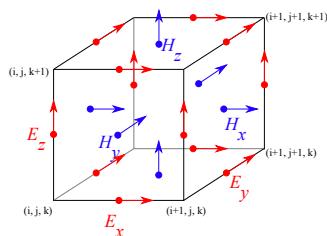
- Сетка Йи представляет собой несколько подсеток, сдвинутых относительно друг другу на половину шага



- Значения на разных подсетках определяются в моменты времени, также сдвинутые на полшага по времени относительно друг друга
- Это позволяет записать уравнения Максвелла в конечных разностях с точностью второго порядка в виде явной схемы
- Например, для временной эволюции E_x имеем:

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = c \frac{\partial B_z}{\partial y} - c \frac{\partial B_y}{\partial z}$$

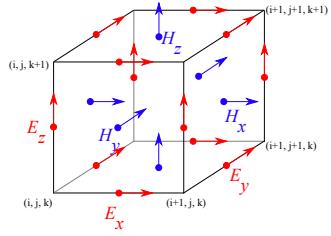
$$\frac{E_x|_{i+1/2,j,k}^{n+1} - E_x|_{i+1/2,j,k}^n}{\Delta t} = c \frac{B_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} - B_z|_{i+1/2,j-1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta y} - c \frac{B_y|_{i+1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} - B_y|_{i+1/2,j,k-1/2}^{n+1/2}}{\Delta z}$$



- И то же самое для B_y :

$$\frac{\partial B_y}{\partial t} = c \frac{\partial E_z}{\partial x} - c \frac{\partial E_x}{\partial z}$$

$$\frac{B_y|_{i+1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} - B_y|_{i+1/2,j,k+1/2}^{n-1/2}}{\Delta t} = c \frac{E_z|_{i+1,j,k+1/2}^n - E_z|_{i,j,k+1/2}^n}{\Delta x} - c \frac{E_x|_{i+1/2,j,k+1}^n - E_x|_{i+1/2,j,k}^n}{\Delta z}$$



- И для остальных компонент:

$$\begin{aligned} \frac{E_y|_{i,j+1/2,k}^{n+1} - E_y|_{i,j+1/2,k}^n}{\Delta t} &= c \frac{B_x|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} - B_x|_{i,j+1/2,k-1/2}^{n+1/2}}{\Delta z} - \\ &\quad - c \frac{B_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} - B_z|_{i-1/2,j+1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta x} \\ \frac{E_z|_{i,j,k+1/2}^{n+1} - E_z|_{i,j,k+1/2}^n}{\Delta t} &= c \frac{B_y|_{i+1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} - B_y|_{i-1/2,j,k+1/2}^{n+1/2}}{\Delta x} - \\ &\quad - c \frac{B_x|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} - B_x|_{i,j-1/2,k+1/2}^{n+1/2}}{\Delta y} \\ \frac{B_x|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} - B_x|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n-1/2}}{\Delta t} &= c \frac{E_y|_{i,j+1/2,k+1}^n - E_y|_{i,j+1/2,k}^n}{\Delta z} - \\ &\quad - c \frac{E_z|_{i,j+1,k+1/2}^n - E_z|_{i,j,k+1/2}^n}{\Delta y} \\ \frac{B_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} - B_z|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n-1/2}}{\Delta t} &= c \frac{E_x|_{i+1/2,j+1,k}^n - E_x|_{i+1/2,j,k}^n}{\Delta y} - \\ &\quad - c \frac{E_y|_{i+1,j+1/2,k}^n - E_y|_{i,j+1/2,k}^n}{\Delta x} \end{aligned}$$

- Плотность тока должна быть определена в тех же точках, что и соответствующие компоненты электрического поля, но сдвинута на полшага по времени:

$$\begin{aligned} \frac{E_x|_{i+1/2,j,k}^{n+1} - E_x|_{i+1/2,j,k}^n}{\Delta t} &= \dots - 4\pi j_x|_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} \\ \frac{E_y|_{i,j+1/2,k}^{n+1} - E_y|_{i,j+1/2,k}^n}{\Delta t} &= \dots - 4\pi j_y|_{i,j+1/2,k}^{n+1/2} \\ \frac{E_z|_{i,j,k+1/2}^{n+1} - E_z|_{i,j,k+1/2}^n}{\Delta t} &= \dots - 4\pi j_z|_{i,j,k+1/2}^{n+1/2} \end{aligned}$$

Сопряжение с уравнением Власова

- Будем определять функцию распределения на сетке (x_i, y_j, z_k) в моменты времени $t^{n+1/2}$
- Вычисление плотности тока:

$$\begin{aligned} j_x|_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} &= \frac{1}{2} \left(j_x|_{i+1,j,k}^{n+1/2} + j_x|_{i,j,k}^{n+1/2} \right) \\ j_y|_{i,j+1/2,k}^{n+1/2} &= \frac{1}{2} \left(j_y|_{i,j+1,k}^{n+1/2} + j_y|_{i,j,k}^{n+1/2} \right) \\ j_z|_{i,j,k+1/2}^{n+1/2} &= \frac{1}{2} \left(j_z|_{i,j,k+1}^{n+1/2} + j_z|_{i,j,k}^{n+1/2} \right) \end{aligned}$$

- В уравнение Власова поля входят только в адвекцию по импульсам:

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

- Пусть использована некая схема решения с постоянной скоростью адвекции:

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

- Для достижения второго порядка точности по времени надо знать поля в момент времени t^n в точках сетки (x_i, y_j, z_k) :

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

- Будем искать значения полей в этих точках путём усреднения по ближайшим значениям:

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

- Применим схему разделения операторов Стрэнга

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

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

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

- В результате получаем следующую последовательность операций на одном итерации:

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

- Адvection функции распределения по пространственным координатам удобно осуществлять на шаге вычисления f'' по схеме разделения операторов Стрэнга

Примечания по схему FDTD

- Схема устойчива при выполнении аналога условия Куранта:

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

- Схема обладает численной дисперсией

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

- Пример: пусть $k_x = k, k_y = k_z = 0, \Delta x = \Delta y = \Delta z, \Delta t = \Delta x/c\sqrt{3}$

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

- Групповая скорость:

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

$\lambda/\Delta x$	6	8	10
v_{ϕ}	0.968	0.983	0.989
v_{gp}	0.905	0.947	0.967

- Схема может быть дополнена внешними источниками, которые будут генерировать излучение с нужными характеристиками
- Убегающие из области взаимодействия волны при этом на границах расчётной области можно поглощать, что моделирует открытые граничные условия
- Идеально согласованные поглощающие слои Беренджера (Berenger's Perfectly matched layers, PML):
 - $\epsilon = 1 + i\epsilon'', \mu = 1 + i\mu''$
 - $\epsilon'' = \mu''$
 - $Z = \sqrt{\epsilon/\mu} = 1$

Литература

- A. Taflove, S. C. Hagness. *Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method*. Artech House. (2000)

- U. S. Inan, A. R. Marshall. *Numerical Electromagnetics*. Cambridge University Press. (2011)
- А. В. Маслов. *Моделирование волновых процессов в электродинамике*. Изд-во ННГУ. (2019)