Модуль 3. Математическое моделирование процессов в плазме (часть 2)

4. Решение уравнений Власова для бесстолкновительной плазмы.

5. Метод частиц для решения уравнений Власова.

3.4. Решение уравнений Власова для бесстолкновительной плазмы

● Методы решения уравнений Власова можно разделить на следующие группы:

- конечно-разностные методы;
- метод «водяного мешка»;
- метод преобразований;
- метод частиц.

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

- **Общая схема метода частиц.**

Плазма представляется набором достаточно большого числа модельных частиц, траектории которых являются характеристиками уравнений Власова (координаты и скорости частиц определяют $\boldsymbol{f_a(\vec{r},\vec{v},t)}$).

Частицы движутся в соответствии с законами классической механики в самосогласованном электромагнитном поле, определяемом из уравнений Максвелла с использованием зарядов и токов в качестве источников.

Плотности этих зарядов и токов, в свою очередь, вычисляются по координатам и скоростям частиц с помощью какой-либо процедуры.

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

Общая схема алгоритма метода частиц

1. Каждой частице приписывается заряд e_j и масса m_j, а также распределение плотности внутри частицы R;
2. Задание начального распределения частиц, т.е. устанавливаются координаты {r} и скорости {v} для каждой частицы.

   Требования:

   - должно быть установлено дебаевское экранирование;

   - должно быть равновесное состояние (максвелловское распределение по скоростям для заданной T

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

● **Общая схема алгоритма метода частиц** (продолжение)

3. Восстановление (построение) плотности заряда и тока в каждом узле расчетной сетки (в каждом узле сетки рассчитываются $\tilde{\rho}_k$ *и* $\tilde{j}_k$ по известным распределениям {r} и {v} частиц.
4. Решение уравнений Максвелла по найденным $\tilde{\rho}_k$ *и* $\tilde{j}_k$.

3.5. **Метод частиц для решения уравнений Власова**

● **Общая схема алгоритма метода частиц** (продолжение)

5. Используя поле сил, рассчитанных при решении системы уравнений Максвелла (т.е. по найденным {E} и {H}), решаются уравнения движения частиц.

   В результате определяются {r} и {v} частиц на новом шаге по времени.

   Затем выполняется шаг 2, т.е. находятся плотности и заряды в узлах сетки и т.д.

6. Зная {r} и {v}, можно найти макроскопические характеристики: концентрацию, скорости , температуры

3.5. **Метод частиц для решения уравнений Власова**

● Восстановление плотности заряда и тока

Пусть $\boldsymbol{R}(\vec{\boldsymbol{r}},\vec{\boldsymbol{r}}')$ - функция, характеризующая геометрическую форму, размер частицы и распределение плотности заряда внутри частицы.

Она получила название **ядра**.

Главная задача **ядра** – проводить сглаживание сил и устранять близкие взаимодействия (соударения), которые не играют существенной роли в разреженной плазме.

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

● **Восстановление плотности заряда и тока**

Для частиц конечного размера функция распределения будет иметь следующий вид:

$$f_a(\vec{r},\vec{v},t)=\int f_a(\vec{r}',\vec{v},t)R(\vec{r},\vec{r}')d\vec{r}'=\sum_{j=1}^{J}R(\vec{r},\vec{r}_j(t))\delta(\vec{v}-\vec{v}_j(t)) \tag{18}$$

Ядро удовлетворяет условию нормировки:

$$\int_V R(\vec{r},\vec{r}')d\vec{r}'=1 \quad , \tag{19}$$

которое означает сохранение заряда в каждой частице

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

Из выражения (18) могут быть найдены выражения для плотности заряда и тока в любой точке пространства с координатами {r}:

$$\tilde{\rho}(\vec{r},t)=\sum_{j=1}^{J} e_j R(\vec{r},\vec{r}_j(t)) \qquad (20)$$

$$\tilde{\vec{j}}(\vec{r},t)=\sum_{j=1}^{J} e_j \vec{v}_j(t) R(\vec{r},\vec{r}_j(t)) \qquad (21)$$

Полный заряд системы:

$$Q=\int_V \tilde{\rho}(\vec{r},t)d\vec{r}=\sum_{j=1}^{J} e_j \int_V R(\vec{r},\vec{r}_j)d\vec{r}=\sum_{j=1}^{J} e_j=\int_V \rho(\vec{r},t)d\vec{r} \qquad (22)$$

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

- **Виды ядер**

1). Частицы с равномерно распределенной плотностью заряда

$$R(\vec{r},\vec{r}\,')=\begin{cases}(2\Delta)^{-1}, & |x-x'|\le\Delta\\ 0, & |x-x'|>\Delta\end{cases} \qquad (23)$$

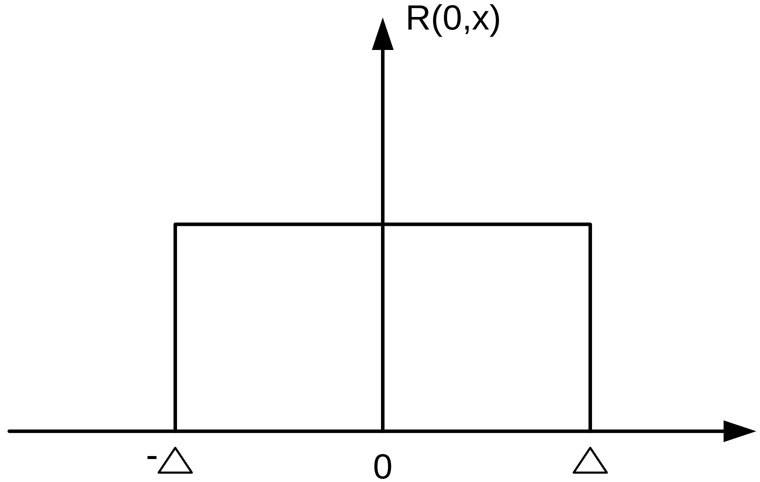


Рис. 1

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

● **Виды ядер**

2). Частицы с неоднородным распределением плотности заряда

$$R(\vec{r},\vec{r}\,')=\begin{cases}\Delta^{-1}(1-\left|x-x'\right|/\Delta, & \left|x-x'\right|\le\Delta;\\ 0, & \left|x-x'\right|>\Delta.\end{cases} \qquad (24)$$

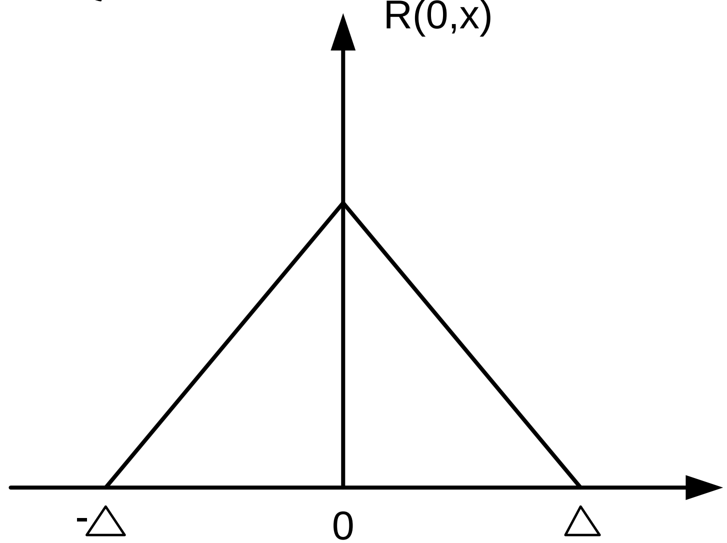


Рис. 2

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

- **Сеточные ядра**

Пользуясь ядрами $R(\vec{r},\vec{r}')$, по известным координатам и скоростям частиц можно найти плотность заряда и тока всюду в расчетной области, а по ним, решая уравнения Максвелла, определить значения электрического и магнитного полей тоже всюду в области.

Уравнения Максвелла решаются конечно-разностными методами, для чего вводится пространственная сетка. В связи с этим возникает важная проблема, каким образом аппроксимировать плотность заряда и тока в узлах сетки.

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

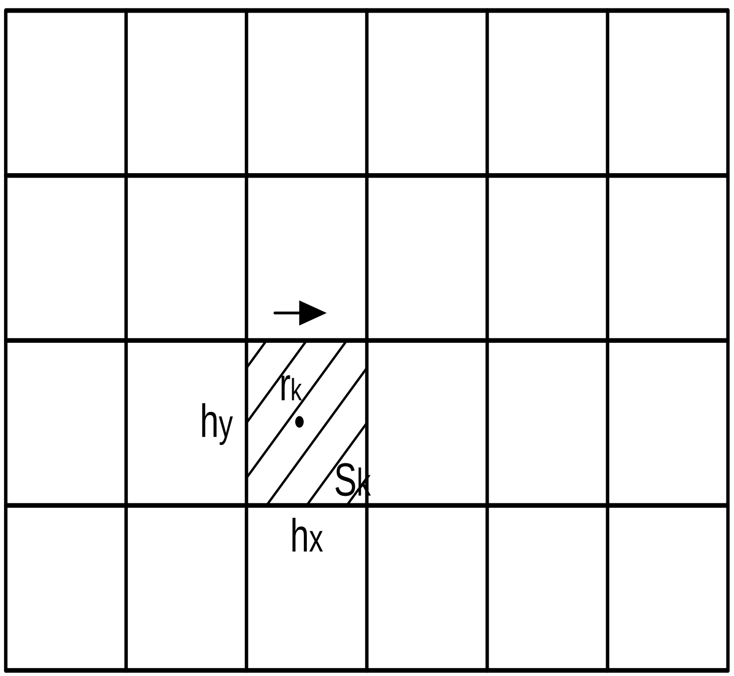
● **Сеточные ядра**

Для уменьшения погрешности задания функций плотности заряда и тока в узлах конечно-разностной сетки вводятся сеточные ядра.

Сеточное ядро – функция для расчета вклада каждой частицы в величину плотности заряда узла.

Существуют разные способы учета вклада заряда каждой частицы в величину плотности заряда и тока каждого узла пространственной сетки.

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова



Рассмотрим расчетную область S, в которой находятся частицы, моделирующие какое-то распределение плотности заряда $\rho(\vec{r})$.

Введем в этой области пространственную сетку с узлами $\vec{r}_k$.

В ней будем определять $\rho_k = \tilde{\rho}(\vec{r}_k)$.

Покроем всю область S непересекающимися ячейками S_k так, чтобы внутри каждой ячейки находился один узел $\vec{r}_k$.

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

- **Классификация моделей частиц**

Сеточные ядра определяют способ восстановления плотности заряда и тока в узлах расчетной сетки и, соответственно, определяют тот или иной вид модели частиц.

Выделяют три вида моделей частиц:

- **модель NGP (nearest-grid-point model);**
- **модель PIC(particle-in cell model);**
- **модель CIC (cloud-in-cell model).**

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

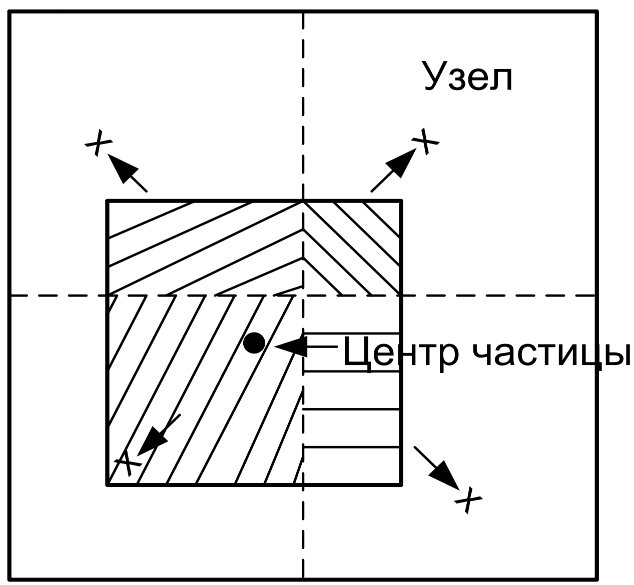


Рис. 4. Распределение заряда каждой частицы между узлами сетки в двумерном случае

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

● **Решение уравнений Максвелла**

Система уравнений Максвелла, описывающих эволюцию электромагнитных полей, имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = c\, rot\vec{H} - 4\pi \vec{j} \qquad \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -c\, rot\vec{E}$$

$$div\vec{E} = 4\pi\rho \qquad div\vec{H} = 0$$

Применительно к разреженной бесстолкновительной плазме:

$$\vec{j} = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \int f_{\alpha} \vec{v} d\vec{v}; \qquad \rho = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \int f_{\alpha} d\vec{v};$$

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

Рассмотрим конечно-разностный метод решения уравнений Максвелла.

Здесь очень удобной является схема с перешагиванием, которую мы опишем для двумерного случая в декартовых координатах x и y.

Будем считать плотность тока заданной функцией координат и времени: $\vec{j} = \left\{ j_x, j_y, j_z \right\}$

Искомые функции:

$$\vec{E} = \left\{ E_x, E_y, E_z \right\} \qquad \vec{H} = \left\{ H_x, H_y, H_z \right\}$$

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

В общем виде $rot\vec{H}$ записывается следующим образом:

$$rot\vec{H} = \begin{pmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ H_x & H_y & H_z \end{pmatrix} = \vec{i} \cdot \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right) + \vec{j} \cdot \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) + \vec{k} \cdot \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right)$$

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

В двумерном случае (плоскость (x, y)) производная по z равна нулю, поэтому:

$$rot\vec{H} = \vec{i} \cdot \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} \right) - \vec{j} \cdot \left(\frac{\partial H_z}{\partial x} \right) + \vec{k} \cdot \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right)$$

$$rot\vec{E} = \vec{i} \cdot \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} \right) - \vec{j} \cdot \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} \right) + \vec{k} \cdot \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right)$$

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

Тогда для плоского случая в плоскости (x, y) уравнения Максвелла принимают следующий вид:

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = c\frac{\partial H_z}{\partial y} - 4\pi j_x \qquad \frac{\partial E_y}{\partial t} = -c\frac{\partial H_z}{\partial x} - 4\pi j_y$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = c\left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y}\right) - 4\pi j_z \qquad \frac{\partial H_x}{\partial t} = -c\frac{\partial E_z}{\partial y}$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = c\frac{\partial E_z}{\partial x} \qquad \frac{\partial H_z}{\partial t} = -c\left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y}\right)$$

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

Блок-схема для реализации численного алгоритма решения уравнений Максвелла, основанного на конечно-разностной схеме с перешагиванием:

1). Задание начальных условий:

- E_x, E_y, E_z на слое n=0 (т.е. при t=0),
- j_x , j_y, j_z на слое n=1/2 ($t=1/2\tau$),
- t = 0, n=0.

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

Блок-схема (продолжение)

2). Цикл по слоям:

- нахождение $j_x^{n+1/2}$, $j_y^{n+1/2}$, $j_z^{n+1/2}$;

- по известным значениям E_x, E_y, E_z на слое n и известным H_x, H_y, H_z на полуцелом слое n+½ находим E_x, E_y, E_z на целом слое n+1 из уравнений (23.1), (23.2), (23.6);

- корректировка напряженности электрического поля;

- по известным значениям H_x, H_y, H_z на слое n+½ и уже известным значениям E_x, E_y, E_z на целом слое n+1 (откорректированным) находим H_x, H_y, H_z на полуцелом слое n+3/2 (из уравнений (23.3), (23.4), (23.5)).

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

● **Уравнения движения частиц**

$$\dot{\vec{r}}_j = \vec{v}_j \qquad (25)$$

$$m\dot{\vec{v}}_j = \int F(\vec{r},t)R(\vec{r}-\vec{r}_j)d\vec{r} \equiv \vec{F}_j(t), \quad j = 1..J \qquad (26)$$

Примечание. Здесь мы полагаем, что частицы имеют некоторый конечный объем.

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

● **Уравнения движения частиц**

Аппроксимация сил

Запишем силу $\vec{F}(\vec{r},t)$ через ее значения в узлах сетки:

$$\vec{F}(\vec{r},t) = \sum_k \vec{F}_k(t) S(\vec{r}-\vec{r}_k) \qquad (27)$$

Здесь $\vec{F}(\vec{r}_k,t) \equiv \vec{F}_k(t)$ - сила в узле r_k,

S – весовая функция, удовлетворяющая условию нормировки: $\sum_k S(\vec{r}-\vec{r}_k) = 1$. Она определяет долю каждого узла в формировании силы, действующей на каждую частицу с координатой $\vec{r}$.

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

● **Уравнения движения частиц**

Аппроксимация сил

Вид функции S определяет характер интерполяции силы.

Примеры интерполяции

1). На частицу x_j действует сила, которая определена в ближайшем узле r_k:

$$S(x-x_k)=\begin{cases}1, & |x-x_k|\le \frac{h}{2}\\ 0, & |x-x_k|>\frac{h}{2}\end{cases}$$

$$R(x-x_j)=\delta(x-x_j)$$

$$F_j=\sum_{k=1}^{K}F_k S(x_j-x_k)=F_{k'}$$

Здесь k' – ближайший узел

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

● **Уравнения движения частиц**

<u>Аппроксимация сил; примеры интерполяции</u>

2). Действующая на частицу сила определяется обратной линейной интерполяцией между значениями полей в двух ближайших к частице узлах:

$$S(x-x_k)=\begin{cases}1, & |x-x_k|\le \dfrac{h}{2}\\[2ex] 0, & |x-x_k|>\dfrac{h}{2}\end{cases}$$

$$R(x-x_j)=\begin{cases}\dfrac{1}{h}, & |x-x_j|\le \dfrac{h}{2}\\[2ex] 0, & |x-x_j|>\dfrac{h}{2}\end{cases}$$

$$F_j=\frac{1}{h}\sum_k F_k\int\limits_{x_j-\frac{h}{2}}^{x_j+\frac{h}{2}} S(x-x_k)dx$$

Если $x_{k-1}<x_j<x_k$, то:

$$F_j=\frac{1}{h}\Big[(x_k-x_j)F_{k-1}+(x_j-x_{k-1})F_k\Big]$$

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

● **Решение уравнений движения**

- уравнения движения релятивистской частицы с зарядом q и массой покоя m:

$$\frac{d}{dt}\frac{m\vec{v}}{\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2}}=q\left(\vec{E}+\frac{1}{c}\left[\vec{v}\vec{H}\right]\right),\ \frac{d\vec{r}}{dt}=\vec{v} \qquad (28)$$

- в нерелятивистском случае:

$$m\frac{d\vec{v}}{dt}=q\left(\vec{E}+\frac{1}{c}\left[\vec{v}\vec{H}\right]\right),\ \ \frac{d\vec{r}}{dt}=\vec{v} \qquad (29)$$

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

● **Решение уравнений движения**

1). <u>Нерелятивистское движение частицы в электрическом поле</u>

В этом случае:

$$\vec{E} = -\nabla\varphi, \ \vec{H} = 0 \tag{30}$$

Закон сохранения энергии имеет вид:

$$\frac{m}{2}\left[v^2(t) - v^2(0)\right] = -q\left[\varphi(\vec{r}(t)) - \varphi(\vec{r}(0))\right] \tag{31}$$

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

● Решение уравнений движения

1). <u>Нерелятивистское движение частицы в электрическом поле;</u>

Примеры разностных схем

А).
$$\frac{\vec{r}^{\,n+1}-\vec{r}^{\,n}}{\tau}=\vec{v}^{\,n+\frac{1}{2}}, \quad \frac{\vec{v}^{\,n+\frac{1}{2}}-\vec{v}^{\,n-\frac{1}{2}}}{\tau}=q\vec{E}(\vec{r}^{\,n})/m \tag{32}$$

Б).
$$\frac{\vec{v}^{\,n+1}-\vec{v}^{\,n}}{\tau}=\left(\frac{q}{m}\right)\vec{E}(\vec{r}^{\,n}+\frac{\tau}{2}\vec{v}^{\,n}) \qquad \frac{\vec{r}^{\,n+1}-\vec{r}^{\,n}}{\tau}=\left(\vec{v}^{\,n}+\vec{v}^{\,n+1}\right)/2 \tag{33}$$

В).
$$\frac{\vec{v}^{\,n+1}-\vec{v}^{\,n}}{\tau}=\left(\frac{q}{m}\right)E\left(\frac{\vec{r}^{\,n}+\vec{r}^{\,n+1}}{2}\right) \qquad \frac{\vec{r}^{\,n+1}-\vec{r}^{\,n}}{\tau}=\left(\vec{v}^{\,n}+\vec{v}^{\,n+1}\right)/2 \tag{34}$$

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

● **Решение уравнений движения**

2) Нерелятивистское движение частицы в электрическом и магнитном полях

Движение частицы можно разложить на:

- продольное движение (вдоль вектора магнитного поля), оно происходит только под действием компоненты электрического поля, параллельной $\vec{H}$;
- поперечное движение – в плоскости, перпендикулярной $\vec{H}$.

Они могут быть рассмотрены независимо.

При существовании магнитного поля частицы совершают движение по циклоидам.

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

● **Решение уравнений движения**

2) Нерелятивистское движение частицы в электрическом и магнитном полях

А). $$\frac{\vec{v}^{\,n+1}-\vec{v}^{\,n}}{\tau}=\left(\frac{q}{m}\right)\vec{E}+\left[\left(\frac{\vec{v}^{\,n}+\vec{v}^{\,n+1}}{2}\right)\times\vec{\omega}\right] \qquad \textbf{(35)}$$

$$\vec{\omega}=\frac{q\vec{H}}{mc}$$

- модуль этого вектора – частота вращения частицы по окружности

$$\frac{\vec{r}^{\,n+1}-\vec{r}^{\,n}}{\tau}=\left(\vec{v}^{\,n}+\vec{v}^{\,n+1}\right)/2$$

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

● **Решение уравнений движения**

2) Нерелятивистское движение частицы в электрическом и магнитном полях

- Для описания циклотронного движения (т.е. точного описания движения по окружностям) необходимо выполнение условия $\omega\tau \ll 1$.
- Если нас интересует не циклотронное вращение, а некоторое осредненное движение частицы, то желательно проводить расчет с бóльшими по сравнению с величиной ω^{-1} шагами τ ($\omega\tau \gg 1$). В этом случае алгоритм (36) описывает дрейф в скрещенных полях .

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

● **Решение уравнений движения**

2) Нерелятивистское движение частицы в электрическом и магнитном полях $\vec{E},\vec{H}$

Б). Алгоритм, использующий расщепление движения частицы на циклотронное вращение и дрейф в полях :

$$\vec{v}_1 = \vec{v}^n - c\left[\vec{E}\vec{H}\right]/H^2 \qquad \frac{\vec{v}_2 - \vec{v}_1}{\tau} = \left[\left(\frac{\vec{v}_1 + \vec{v}_2}{2}\right)\times\vec{\omega}\right] \qquad (36)$$

$$\vec{v}^{n+1} = \vec{v}_2 + c\left[\vec{E}\vec{H}\right]/H^2 \qquad \vec{\omega} = \frac{q\vec{H}}{mc}$$

Здесь $\vec{v}_1$ *и* $\vec{v}_2$ - циклотронная скорость в моменты времени τ^n *и* τ^{n+1}.

$$\vec{v}_{\partial p} = c\left[\vec{E}\vec{H}\right]/H^2$$

- скорость дрейфа в скрещенных электрическом и магнитном полях

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

● **Решение уравнений движения**

2) Нерелятивистское движение частицы в электрическом и магнитном полях

B). Производится расщепление движения частицы на движение под действием только электрического и только магнитного поля:

$$\frac{\vec{v}_1 - \vec{v}^n}{\tau/2} = q\vec{E}/m \qquad \frac{\vec{v}_2 - \vec{v}_1}{\tau} = \left[\left(\frac{\vec{v}_1 + \vec{v}_2}{2}\right) \times \vec{\omega}\right] \qquad (37)$$

$$\frac{\vec{v}^{n+1} - \vec{v}_2}{\tau/2} = q\vec{E}/m$$

В этой схеме движение в магнитном поле центрировано по отношению к моменту времени $t^{n+1/2}$.

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

- **Начальное распределение частиц**

Начальное распределение частиц в плазме должно удовлетворять следующим условиям:

а) наличие дебаевского экранирования;

б) существование максвелловского распределения частиц по скоростям.

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

● **Начальное распределение частиц**

Алгоритм размещения частиц для создания эффекта дебаевского экранирования.

1). Ионы размещаются хаотически в заданной расчетной области.

2). Около каждого иона располагается один электрон на расстоянии, которое задается случайным образом со следующей плотностью вероятности:

$$\varphi(r) = (\pi D^2)^{-1} K_0(\sqrt{2}r / D) \tag{38}$$

где D – дебаевский радиус, $K_0(z)$ – функция Макдональда

3.5. Метод частиц для решения уравнений Власова

● **Начальное распределение частиц**

Разработан эффективный способ приближенного определения случайных чисел с плотностью вероятности (38).

Пусть ξ – случайная величина с однородным распределением в интервале (0, 1). Тогда нужное нам расстояние от электрона до иона находится по формуле:

$$\boldsymbol{r = 2^{-1/2} D(1,0721a + 0,6601a^2 + 0,0697a^3)/(1 + 0,0867a - 0,1840\ln a)}$$

где $\boldsymbol{a^2 = -\ln \xi}$