

# 一个功能较强的等离子体 电磁波粒子模拟程序

陈德明 王 闽

(应用物理系)

**摘 要** 本文发展了一个功能较强的  $1\frac{2}{2}D$  等离子体粒子模拟程序。文中就一维情况, 论述了等离子体粒子模拟的原理、方法和计算机编程中的处理技巧。最后讨论了电磁模拟的应用。

**关键词** 等离子体, 粒子模拟, 数值计算

**分类号** O532

等离子体粒子模拟是70年代发展起来的, 借助于计算机解决复杂等离子体物理问题的数值模拟技术。因它是直接跟踪大量的等离子体粒子, 求解粒子在其自洽场中的运动, 因此, 得到的信息详尽, 得出的结果直接、可靠。在等离子体不稳定性研究、托卡马克等离子体、激光聚变、束—等离子体相互作用、自由电子激光等研究领域, 有着广泛的应用。我单位自1984年以来, 首家在全国高校开展这方面的工作, 并已取得了一定的成果。我们发展的  $1\frac{2}{2}D$  完全电磁模拟程序 EMCODE, 功能强, 易读性好, 能解决静电和电磁模拟问题, 对等离子体物理的基本现象都能模拟。对于各种应用问题, 程序只需作很小的改动, 是一个较为方便的模拟程序。本文结合 EMCODE, 说明等离子体中电磁波粒子模拟的原理、方法、技巧和应用。

## 1 粒子模拟的原理和方法

### 1.1 等离子体粒子模拟的一般步骤

等离子体粒子模拟的过程是反复求解运动方程和麦克斯韦方程组。首先, 在一初始场分布下, 对初始分布的各个粒子求解运动方程, 求得在稍后一个时间步长  $\Delta t$  后的粒子位置和速度, 从而得到新的电荷密度和电流密度分布, 在这种新的分布下, 求解麦克斯韦方程组得到新的场分布, 然后再回到求解各粒子在下一个时间步长后的位置和速度, 如此

国家自然科学基金资助项目

1989年6月27日收稿

反复跟踪，直到所要求的步数为止。计算中，根据所处理的问题，记录等离子体内部的运动信息，然后再作分析处理，如频谱分析等。

## 1.2 物理公式的无量纲化

对于  $1\frac{1}{2}D$  粒子模拟，我们考虑三个坐标方向的速度，但只考虑一个空间坐标的变化。假定坐标变量为  $x$ ，我们只能计算一个有限的空间长度。  $L$  为计算场量，也只能在一定的坐标网格点上计算，为此，将  $L$  分成  $N_0$  个网格点，每格长为  $\delta$ ，即  $L = N_0\delta$ 。受计算机容量的限制，我们不能模拟实际等离子体中的每个微观粒子的运动，而只能处理有限的  $N$  个粒子。  $N$  通常为  $10^3 \sim 10^5$ 。对于封闭系统，实际的微观粒子数  $n_0L$  远比  $N$  大，这里  $n_0$  为等离子体平均密度。为使模拟的结果不受粒子数  $N$  和网格数  $N_0$  的影响，我们将所能计算的单位网格上的粒子数  $n_1$ （无量纲）与等离子体密度  $n$  以如下方式联系起来： $n = n_1 n_0 L / N \delta$ 。这可以这样理解，对于封闭系统， $n_0$  为平均粒子密度，对于非封闭系统，即系统总粒子数不固定， $n_0$  理解为某一基准密度，每个模拟粒子相当于  $n_0 L / N$  个实际的微观粒子团。为方便计算，全部采用无量纲物理量，用下标“1”表示。它们与有量纲物理量的关系为：时间  $t = t_1 \omega_p^{-1}$ ，质量  $m = m_1 m_e$ ，电荷  $q = q_1 e$ ，长度  $x = x_1 \delta$ ，速度  $v = v_1 \delta \omega_p$ ，动量  $p = p_1 m_e \delta \omega_p$ ，电场  $E = E_1 \delta \omega_p^2 m_e / e$ ，磁场  $B = B_1 \delta \omega_p^2 m_e / e$ ，电荷密度  $\rho = \rho_1 e n_0 L / N \delta$ ，电流密度  $J = J_1 e n_0 L \omega_p / N$ ，能量  $W = W_1 n_0 m_e \delta^3 \omega_p^2$ ，其中  $\omega_p^2 = 4\pi n_0 e^2 / m_e$  为电子等离子体频率， $e$ ， $m_e$  为电子电荷和静止质量。在一维模拟下，粒子的电荷和质量应理解为单位面积的电量和单位面积的质量，因这时的一个“粒子”实际上是一个无限大的电荷片。这样，各物理公式除涉及电荷密度和电流密度的以外，均保持形式不变。关于这些无量纲量的几个重要的麦克斯韦—牛顿方程为（以下均省掉下标“1”）：

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{N}{N} \rho \quad (1)$$

$$\nabla \times \vec{B} = \frac{N_g \vec{J}}{Nc} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (2)$$

$$\nabla \times \vec{E} = - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (3)$$

$$\frac{d\vec{p}_s}{dt} = q_s \left( \vec{E} + \frac{\vec{v}_s \times \vec{B}}{c} \right) \quad (4)$$

$$\frac{d\vec{x}_s}{dt} = \vec{v}_s \quad (5)$$

其中  $\vec{p}_s = \gamma_s m_s \vec{v}_s$ ， $\gamma = (1 + p_s^2 / m_s^2 c^2)^{1/2}$ ， $s$  表示粒子种类，可以为电子、离子等。

## 1.3 有限大小粒子模型

在模拟中，若认为粒子无大小，即点粒子模型，将带来严重的短程作用，即碰撞效应。通常，我们更加关心长程相互作用。因此，我们采用有限大小粒子模型<sup>[1]</sup>。将质量为  $m$ 、电荷为  $q$  的点粒子修正成一团有一定形状和大小的电荷云，总质量和总电荷保持不变。通常引进一形状函数  $\mathcal{S}(\vec{x})$ ，中心为  $\vec{x}_0$  处的有限大小粒子的电荷分布为  $q\mathcal{S}(\vec{x} - \vec{x}_0)$ ，

其中  $S$  满足  $\int S(\vec{x} - \vec{x}_0) d\vec{x} = 1$ . 通常  $S(\vec{x})$  为一对称函数。这样, 粒子之间相互作用时, 相应代之以电荷云间的相互作用, 这样, 有限大小粒子可以互相重迭、穿透, 且完全重迭时, 相互作用力为零, 不象点粒子那样为无穷大。当粒子间距离远大于粒子线度时, 相互作用的行为逼近通常的点粒子的行为。这样, 在电磁场中的有限大小粒子所受的力为:

$$\vec{F}(\vec{x}) = q \int S(\vec{x} - \vec{x}') \left( \vec{E}(\vec{x}') + \frac{\vec{v} \times \vec{B}(\vec{x}')}{c} \right) d\vec{x}' \quad (6)$$

电荷密度和电流密度与点粒子的相应密度的关系为:

$$\rho(\vec{x}) = \int \rho_p(\vec{x}') S(\vec{x} - \vec{x}') d\vec{x}' \quad (7)$$

$$\vec{J}(\vec{x}) = \int \vec{J}_p(\vec{x}') S(\vec{x} - \vec{x}') d\vec{x}' \quad (8)$$

其中  $\rho_p$  和  $\vec{J}_p$  分别为点粒子的电荷密度与电流密度。

#### 1.4 快速付里叶变换

由于采用有限大小粒子模型, 计算中出现(6)~(8)式中的关于形状函数的积分, 不便于计算。然而, 这种积分在对空间作付里叶变换后, 形式十分简单, 故可通过付里叶正反变换处理这种积分, 况且, 在求解微分方程时, 付里叶变换也是一种很好的求解方法。因此, 在粒子模拟中, 广泛使用快速付里叶变换技术。

对于周期系统, 对坐标空间作离散付里叶变换后, 有限大小粒子模型下的麦克斯韦方程组成为:

$$i\vec{k} \cdot \vec{E}(\vec{k}, t) = \frac{Nq}{N} \rho_p(\vec{k}) S(\vec{k}) \quad (9)$$

$$i\vec{k} \times \vec{B}(\vec{k}, t) = \frac{Nq}{N} \frac{1}{c} \vec{J}_p(\vec{k}) S(\vec{k}) + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}(\vec{k}, t)}{\partial t} \quad (10)$$

$$i\vec{k} \times \vec{E}(\vec{k}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}(\vec{k}, t)}{\partial t} \quad (11)$$

其中对于一维问题,  $\vec{k} = k\hat{e}_x$ .  $s$  类粒子的运动方程为

$$\frac{d\vec{p}_s}{dt} = q_s \left( \vec{E}_R + \frac{\vec{v}_s \times \vec{B}_R}{c} \right) \quad (12)$$

其中  $\vec{E}_R = \text{FFT}^{-1}[\vec{E}(\vec{k}, t) S(\vec{k})]$ ,  $\vec{B}_R = \text{FFT}^{-1}[\vec{B}(\vec{k}, t) S(\vec{k})]$ , 并已用到了  $S(-\vec{k}) = S(\vec{k})$ , 因为  $S(\vec{x})$  是实的对称函数。

#### 1.5 偶极展开与电荷分配

为计算电荷密度  $\rho(\vec{x})$  与电流密度  $\vec{J}(\vec{x})$ , 须先在坐标空间中求得点粒子对应的密度, 且只需算得网格点上的密度。但各离散电荷并不都落在网格点上, 因而给求解带来困难。实际上, 考虑有限大小粒子时

$$\rho(\vec{x}) = \sum_j q_j S(\vec{x} - \vec{x}_j) \quad (13)$$

我们将  $S$  在离电荷  $q_j$  的位置  $\vec{x}_j$  最近的网格点  $\vec{x}_{0,j}$  附近作偶极展开<sup>[2]</sup>, 保留一阶导数项, 即

$$\rho(\vec{x}) = \sum_j q_j [\mathcal{S}(\vec{x} - \vec{x}_{g,j}) + \Delta\vec{x} \cdot \nabla_g \mathcal{S}(\vec{x} - \vec{x}_{g,j})] \quad (14)$$

其中  $\Delta\vec{x}_j = \vec{x}_j - \vec{x}_{g,j}$ ,  $\nabla_g$  表示网格点  $\vec{x}_{g,j}$  处的导数。上式可化为网格点的求和。即

$$\rho(\vec{x}) = \sum_g [Q(\vec{x}_g)\mathcal{S}(\vec{x} - \vec{x}_g) + \vec{D}(\vec{x}_g) \cdot \nabla_g \mathcal{S}(\vec{x} - \vec{x}_g)] \quad (15)$$

这里  $Q(\vec{x}_g) = \sum_{j \in g} q_j$  表示所有离网格点  $\vec{x}_g$  最近的电荷之和,  $\vec{D}(\vec{x}_g) = \sum_{j \in g} q_j (\vec{x}_j - \vec{x}_g)$  是离网格点  $\vec{x}_g$  最近的所有电荷对它的偶极矩之和。所以网格点上电荷密度的空间频域的表达式为

$$\rho(\vec{k}) = \left\{ \sum_g \text{FFT}[Q(\vec{x}_g)] + i\vec{k} \cdot \text{FFT}[\vec{D}(\vec{x}_g)] \right\} \mathcal{S}(\vec{k}) \quad (16)$$

但要计算这里的  $\vec{D}(\vec{x}_g)$  要花费许多机时。用下面一种电荷分配方案, 则更简单。将每个离散电荷分解成几部分按一定的法则分配到邻近的几个网格点上。这样, 由于重新分配的电荷全落在网格点上, 故容易直接算得网格点上的电荷密度。在一维问题中, 我们将(15)式中的导数近似以  $[\mathcal{S}(x - x_{g+1}) - \mathcal{S}(x - x_{g-1})]/2\delta$  代替, 并重整求和号得:

$$\rho(x) = \sum_g \left[ Q(x_g) + \frac{D(x_{g-1}) - D(x_{g+1})}{2\delta} \right] \mathcal{S}(x - x_g) \quad (17)$$

上式等效于如下分配方案: 把每个电荷分配到邻近三个网格点上, 设电荷  $q$  的位置为  $x$ , 最靠近的网格点是  $x_i$ , 则分配到  $x_{i-1}$ ,  $x_i$ ,  $x_{i+1}$  三个网格点的电荷分别为

$$\left. \begin{aligned} q_{i-1} &= -q(x - x_i)/2\delta \\ q_i &= q \\ q_{i+1} &= q(x - x_i)/2\delta \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

这样, 按分配后的电荷计算出密度  $\rho_p(x)$ , 再根据付里叶变换, 由

$$\rho(k) = \rho_p(k) \mathcal{S}(k) \quad (19)$$

计算出空间频域的电荷密度  $\rho(k)$ 。对于电流密度, 按同样的分配方案处理。

## 1.6 差分格式

上面我们对坐标空间的处理是变换到空间频域中进行的, 在跟踪粒子过程中, 我们对各量的随时间演化的求解, 采用时域差分格式, 这种格式是 Leap-frog 格式。我们在整数倍时间步长处计算粒子的坐标、电荷密度和电场值; 而在半整数倍时间步长处计算粒子的速度、动量、电流密度分布和磁场等值, 这样, 对于一维情形, 方程(9)至(12)以及(5)式的时间中心差分格式为

$$E_z^n(k) = -i \frac{N_g \mathcal{S}(k)}{Nk} \rho^n(k) \quad (20)$$

$$E_y^n(k) = E_y^{n-1} - ick \Delta t B_z^{n-\frac{1}{2}}(k) - \frac{N_g \mathcal{S}(k)}{N} \Delta t J_y^{n-\frac{1}{2}}(k) \quad (21)$$

$$E_z^n(k) = E_z^{n-1} + ick \Delta t B_y^{n-\frac{1}{2}}(k) - \frac{N_g \mathcal{S}(k)}{N} \Delta t J_z^{n-\frac{1}{2}}(k) \quad (22)$$

$$B_y^{n+\frac{1}{2}}(k) = B_y^{n-\frac{1}{2}} + ick \Delta t E_z^n(k) \quad (23)$$

$$B_z^{n+\frac{1}{2}}(k) = B_z^{n-\frac{1}{2}} - ick \Delta t E_y^n(k) \quad (24)$$

$$\vec{p}_s^{n+\frac{1}{2}} = \vec{p}_s^{n-\frac{1}{2}} + q_s \Delta t \vec{E}_R^n + q \Delta t \frac{\vec{p}_s^{n+\frac{1}{2}} + \vec{p}_s^{n-\frac{1}{2}}}{2 \langle \gamma_s \rangle^n m_s c} \cdot \langle \vec{B}_R \rangle^n \quad (25)$$

$$x_s^{n+1} = x_s^n + \frac{\vec{p}_s^{n+\frac{1}{2}}}{\gamma_s^{n+\frac{1}{2}} m_s} \Delta t \quad (26)$$

这里, 对于电荷密度和电流密度, 我们已省去了表示点粒子密度的下标“ $p$ ”。其中上标表示时间步数,  $\langle \vec{B}_R \rangle^n = (\vec{B}_R^{n+\frac{1}{2}} + \vec{B}_R^{n-\frac{1}{2}})/2$ ,  $\Delta t$  为时间步长。格式(25)可以表示成如下矩阵形式:

$$\begin{bmatrix} p_x^{n+\frac{1}{2}} \\ p_y^{n+\frac{1}{2}} \\ p_z^{n+\frac{1}{2}} \end{bmatrix} = \frac{\alpha_s}{1 + f_x^2 + f_y^2 + f_z^2} A \begin{bmatrix} E_{Rx}^n \\ E_{Ry}^n \\ E_{Rz}^n \end{bmatrix} + \frac{1}{1 + f_x^2 + f_y^2 + f_z^2} B \begin{bmatrix} p_x^{n-\frac{1}{2}} \\ p_y^{n-\frac{1}{2}} \\ p_z^{n-\frac{1}{2}} \end{bmatrix} \quad (27)$$

其中  $\alpha_s = q_s \Delta t$ , 矩阵  $A$ ,  $B$  分别为

$$A = \begin{bmatrix} 1 + f_x^2 & f_x f_y + f_z & f_x f_z - f_y \\ f_x f_y - f_z & 1 + f_y^2 & f_y f_z + f_x \\ f_x f_z + f_y & f_y f_z - f_x & 1 + f_z^2 \end{bmatrix} \quad (28)$$

$$B = \begin{bmatrix} 1 + f_x^2 - f_y^2 - f_z^2 & 2(f_x f_y + f_z) & 2(f_x f_z - f_y) \\ 2(f_x f_y - f_z) & 1 + f_y^2 - f_x^2 - f_z^2 & 2(f_y f_z + f_x) \\ 2(f_x f_z + f_y) & 2(f_y f_z - f_x) & 1 + f_z^2 - f_x^2 - f_y^2 \end{bmatrix} \quad (29)$$

而

$$\vec{f} = f_x \hat{e}_x + f_y \hat{e}_y + f_z \hat{e}_z = \beta_s \frac{\langle \vec{B}_R \rangle^n}{\langle \gamma_s \rangle^n} \quad (30)$$

$$\beta_s = \frac{q_s \Delta t}{2 m_s c} \quad (31)$$

在(25)式的计算中, 要用到  $\langle \gamma_s \rangle^n$ , 但我们只在半整数倍步长处计算了粒子的动量, 不能直接得到  $\langle \gamma_s \rangle^n$ 。我们可对动量方程(12)在无磁场时的形式:

$$\frac{d\vec{p}_s}{dt} = q_s \vec{E}_R \quad (32)$$

求解半个步长, 即

$$\vec{p}_s^n = \vec{p}_s^{n-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} q_s \Delta t \vec{E}_R^n \quad (33)$$

然后, 按公式  $\gamma = (1 + p_s^2/m_s^2 c^2)^{1/2}$  计算近似得到  $\langle \gamma_s \rangle^n$ 。因为磁场不作功, 所以这样计算所得的值与有磁场时的值是一样的。在整个计算过程中, 上述格式中与时间无关的函数  $\frac{N_g}{N} \frac{S(k)}{k}$ 、 $\frac{N_g}{N} S(k) \Delta t$  和  $ck \Delta t$  可以先计算好分别存入三个常数组  $G_1(k)$ 、 $G_2(k)$  和  $G_3(k)$  中, 以节省机时。在求解(20)~(24)式中的场量过程中, 由于实际的电场和磁场均是实数, 由付里叶变换的知识可知,  $E(k_m)$  和  $B(k_m)$  都满足:  $E(k_{N_g-m}) = E^*(k_m)$ ,  $B(k_{N_g-m}) = B^*(k_m)$ , 其中  $k_m (m=0, 1, \dots, N_g-1)$  为离散空间频率, 星号表示复共轭。这个关系可直接用来求  $m > N_g/2$  的分量  $E(k_m)$  和  $B(k_m)$ , 而不必去解差分格式(20)

~(24), 从而大大减少计算量。

### 1.7 模拟过程监视

为了监视模拟过程是否正确, 计算中每步检查系统的总能量, 对于封闭系统 (或周期系统), 系统的总能量应当是守恒的。系统的总能量为

$$W = \int \frac{E^2 + B^2}{8\pi} d\vec{x} + \sum_s \int n_s m_s c^2 (\gamma_s - 1) d\vec{x}$$

这里求和是对粒子种类求和。采用1.2节的无量纲量, 则系统总能量为 (省去下标)

$$\begin{aligned} W &= \int \frac{E^2 + B^2}{2} d\vec{x} + \frac{N_g}{N} \sum_s \int n_s m_s c^2 (\gamma_s - 1) d\vec{x} \\ &= \int \frac{E^2 + B^2}{2} d\vec{x} + \frac{N_g}{N} \sum_s \sum_{j=1}^{N_s} m_s c^2 (\gamma_{s,j} - 1) \\ &= W_E + W_B + \sum_s K_s \end{aligned} \quad (34)$$

这里  $\gamma_{s,j}$  是  $s$  类第  $j$  个粒子的相对论因子,  $N_s$  是  $s$  类粒子的总数目。  $W_E = \int \frac{E^2}{2} dx$ ,

$W_B = \int \frac{B^2}{2} dx$ ,  $K_s = \frac{N_g}{N} \sum_{j=1}^{N_s} m_s c^2 (\gamma_{s,j} - 1)$ , 分别为电场能, 磁场能和  $s$  类粒子的总动能。由于电场和磁场是在空间频域计算的, 所以, 根据巴什瓦定理, 在空间频域可以按下式计算电场能和磁场能:

$$W_E = \frac{1}{2L} \sum_{m=0}^{N_g/2-1} |E(k_m)|^2 \quad (35)$$

$$W_B = \frac{1}{2L} \sum_{m=0}^{N_g/2-1} |B(k_m)|^2 \quad (36)$$

这里无量纲量  $L = N_g$ 。由于  $E(k_m)$  与  $B(k_m)$  都满足  $E(k_{N_g-m}) = E^*(k_m)$ ,  $B(k_{N_g-m}) = B^*(k_m)$ , 故(35)~(36)式中的运算量可以按下述公式减少一半。

$$W_E = \frac{1}{N_g} \left( \frac{|E(0)|^2 + |E(k_{N_g/2})|^2}{2} + \sum_{m=1}^{N_g/2-1} |E(k_m)|^2 \right) \quad (37)$$

$$W_B = \frac{1}{N_g} \left( \frac{|B(0)|^2 + |B(k_{N_g/2})|^2}{2} + \sum_{m=1}^{N_g/2-1} |B(k_m)|^2 \right) \quad (38)$$

## 2 EMCODE的特点和应用

基于上述原理和方法下发展的EMCODE, 具有较强的功能, 可对等离子体现象作多种模拟。程序考虑了粒子的三维速度和外加磁场, 可模拟有无外场下的等离子体中的电磁波行为。EMCODE中同时考虑了静电波和电磁波, 可根据需要选择。电子和离子的运动都被考虑进去了, 且可以是多电荷的, 因此, 如要模拟离子效应显著的现象, 可通过选择适当的参数进行模拟。

利用 $1\frac{2}{2}D$ 电磁模拟,有作者进行了等离子体中基本物理现象的模拟<sup>[3]</sup>,如对于电磁波,横越磁场和顺着磁场传播的电磁波等。它还可用来模拟自由电子激光中的物理现象,亦可用于非中性等离子体—强流相对论电子束的研究中。利用EMCODE的思想和方法,我们对强流相对论电子束产生虚阴极振荡与激励微波的粒子模拟作了初步尝试<sup>[4,5]</sup>。它还可以对等离子体中许多复杂的非线性现象进行模拟研究,是一个很好的科研工具,我们正利用它作更多的工作。

作者对常文蔚副教授给予的帮助表示感谢。

### 参 考 文 献

- [1] Langdon A B, Birdsall C K. *Phys. Fluids*, 1970, 13: 215
- [2] Kruer W L, Dawson J M. J. *Comput. Phys.* 1973, 13: 114
- [3] 王闯, 林励平, 李传胪. *核聚变与等离子体物理*, 1989, 9(1): 46
- [4] 陈德明, 王闯. 承德: 第三届全国高功率粒子束学术交流会, 1988
- [5] 舒挺. 硕士学位论文. 国防科技大学, 1989

## A Good Electromagnetic Particle Simulation Code of Plasmas

Chen Deming · Wang Min  
(Department of Applied Physics)

### Abstract

A multi-functional  $1\frac{2}{2}D$  plasma simulation code is developed in this paper. The principles, methods and programming techniques are described. Finally, the applications of the electromagnetic simulation is discussed.

Key words plasmas, particle simulation, numerical calculation