

二维粒子模拟的多时标法^{*}

曹莉华 刘大庆 常文蔚 岳宗五 赵伊君

(国防科技大学应用物理系 长沙 410073)

摘要 将多时标法应用于二维激光等离子体全电磁相对论粒子模拟程序中,对共振吸收及相关的物理现象进行了模拟计算,既正确地描述了等离子体的动力学行为,又大大节省了计算时间。

关键词 二维粒子模拟,多时标法

分类号 O561.4

Multi-time-scale Algorithm for Two-dimensional Particle Simulation Code

Cao Lihua Liu Daqing Chang Wenwei Yue Zongwu Zhao Yijun

(Department of Applied Physics, NUDT, Changsha, 410073)

Abstract Multi-time-scale algorithm is used in two-dimensional electromagnetic relativistic particle simulation of plasma produced by laser beam. It described correctly the collective effects of plasmas and reduced much computational cost.

Key words particle simulation of plasma, multi-scale algorithm FPGA

等离子体粒子模拟方法是研究等离子体非线性效应的强有力的工具,30多年来已日趋完善,尤其是随着大容量高速计算机的问世,该方法显示出其特殊的优越性。它是通过跟踪大量在自洽电磁场中运动的电子和离子来描述等离子体集体性质的一种动力学方法,该方法需联立求解 Maxwell 方程和粒子运动方程。欲正确描述等离子体的集体行为,推动电子时间步长 Δt_e 必须满足条件 $\omega_e \Delta t_e \ll 1$ (ω_e 是电子等离子频率),模拟粒子数也应足够多,尽管采用了有限大小粒子模型^[1],模拟粒子数仍需 $10^4 \sim 10^6$ 量级。对如此巨大数目的粒子进行跟踪模拟需要花费大量机时。在80年代提出了双时标^[2]和多时标法^[3],双时标法已成功地应用于一维半粒子模拟程序中,数值计算表明双时标法可节省 $1/2 \sim 1/4$ 的计算时间^[4]。二维粒子模拟中网格数多,模拟粒子数目大,计算量更大,因而寻求

* “863 计划”基金资助项目
1995年12月27日收稿

一种快速正确的算法具有更重要的现实意义。本文在二维全电磁相对论粒子模拟程序中成功地对电磁场和粒子运动采用了多时标推动方法,既大大节省了计算时间,又真实地描述了等离子体的行为,并对P极化斜入射激光与非均匀等离子体相互作用进行了模拟计算,取得了比较满意的结果。

1 多时标法

对电子和离子的运动方程求解需花费的计算时间要比求解 Maxwell 方程大得多,因此粒子模拟的工作量主要决定于运动方程求解的时间,在解运动方程时采取一定措施可以大大提高计算效率。考虑到离子质量较电子质量大许多,电子运动的特征频率 ω_e 和离子运动的特征频率 ω_i 差别较大,求解粒子运动方程时可对电子和离子采用不同的时间步长,若 Δt_i 、 Δt_e 分别代表推动电子和离子的时间步长,则 $\Delta t_i = N\Delta t_e$, N 是一整数,这样推进离子的工作量仅是推进电子工作量的 $1/N$ 倍,从而大大缩短了计算时间,这便是双时标法的基本思想。可以证明当 $N \leq \frac{2}{\omega_e \Delta t_e}$, 且 $N \leq \sqrt{m_i/m_e}$ 时,双时标方法是稳定的^[4], m_i 、 m_e 分别代表离子、电子的质量。对运动方程离散化时,电子相应的量定义在以小步长 Δt_e 划分的时间网络上,离子相应的量则定义在以大步长 Δt_i 划分的时间网络上。

双时标算法中,电子相对论运动方程的跳蛙格式为

$$\frac{U_e^{m\Delta t_i+(n+1/2)\Delta t_e} - U_e^{m\Delta t_i+(n-1/2)\Delta t_e}}{\Delta t_e} = \frac{q_e}{m_e} \left[E_e^{m\Delta t_i+n\Delta t_e} + \frac{U_e^{m\Delta t_i+(n+1/2)\Delta t_e} + U_e^{m\Delta t_i+(n-1/2)\Delta t_e}}{2c\gamma_e^{m\Delta t_i+n\Delta t_e}} \times B_e^{m\Delta t_i+n\Delta t_e} \right],$$

$$\frac{x_e^{m\Delta t_i+(n+1)\Delta t_e} - x_e^{m\Delta t_i+n\Delta t_e}}{\Delta t_e} = U_e^{m\Delta t_i+(n+1/2)\Delta t_e}$$

式中, $n=0,1,\dots,N-1$; $m=0,1,\dots$ 。

离子相对论运动方程的跳蛙格式为

$$\frac{U_i^{(m+1/2)\Delta t_i} - U_i^{(m-1/2)\Delta t_i}}{\Delta t_i} = \frac{q_i}{m_i} \left[E_i^{m\Delta t_i} + \frac{U_i^{(m+1/2)\Delta t_i} + U_i^{(m-1/2)\Delta t_i}}{2c\gamma_i^{m\Delta t_i}} \times B_i^{m\Delta t_i} \right],$$

$$\frac{x_i^{(m+1)\Delta t_i} - x_i^{m\Delta t_i}}{\Delta t_i} = U_i^{(m+1/2)\Delta t_i}$$

式中 $U_a = \gamma_a V_a$, V_a 是粒子运动速度, q_a 、 m_a 和 x_a 是粒子的电荷、质量的位置, γ_a 为相对论因子, E_a 、 B_a 是粒子所感受到的电场、磁场, ρ_a 、 J_a 是粒子的电荷密度、电流密度, 脚标 $a=i, e$ 分别代表与电子、离子相应的量。

粒子云方程为

$$\rho_a = \sum_{i=1}^{N_a} q_{ai} S(X_j - x_{ai})$$

$$J_a = \sum_{i=1}^{N_a} V_{ai} S(X_j - x_{ai})$$

式中 N_a 是模拟粒子总数, q_{ai} 、 V_{ai} 和 x_{ai} 分别是第 i 个粒子的电荷、速度和位置, $S(X_j - x_{ai})$ 是粒子云形状因子, 本文选矩形云分布, X_j 是空间网格的位置。

具体计算时,在 $[m\Delta t_i, (m+1)\Delta t_i]$ 内按电子的小步长 Δt_e 向前推进电子时,并不向前推进离子,离子对电流密度 J 和电荷密度 ρ 的贡献保持不变,即

$$\rho_i^{n\Delta t_i+n\Delta t_e} = \rho_e^{n\Delta t_i+n\Delta t_e} + \rho_i^{n\Delta t_i}$$

$$\mathbf{J}^{n\Delta t_i+n\Delta t_e} = \mathbf{J}_e^{n\Delta t_i+n\Delta t_e} + \mathbf{J}_i^{n\Delta t_i}$$

按大步长时间 Δt_i 向前推进离子时, 不需要解场方程, 该时刻离子感受到的电磁场可以由 $[m\Delta t_i, (m+1)\Delta t_i]$ 内 N 个时刻电子感受到的电磁场的平均值给出^[5], 即

$$\mathbf{E}_i^{m\Delta t_i} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \mathbf{E}_e^{m\Delta t_i+n\Delta t_e}$$

$$\mathbf{B}_i^{m\Delta t_i} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \mathbf{B}_e^{m\Delta t_i+n\Delta t_e}$$

因此每推进 N 次电子才推进一次离子, 解 N 次电子运动方程才解一次离子运动方程, 可大大缩短计算时间。

二维全电磁模粒子模拟中, 解 Maxwell 方程时组采用跳蛙格式, 粒子在 xy 平面运动, 速度具有 V_x 、 V_y 分量, 电磁场有 E_x 、 E_y 、 B_z 分量, 为使其满足中心差分格式, 电场分量 E_x 和电流密度分量 J_x 定义在以 Δx 划分的空间网格的半整点上, 电场分量 E_y 和电流密度分量 J_y 定义在以 Δy 划分的空间网格的半整点上, 磁场 B_z 定义在空间网格的半整点上, 电荷密度 ρ 和修正势 $\delta\Phi$ 则定义在空间网格的整点上。电场 \mathbf{E} 和电荷密度 ρ 定义在以小步长 Δt_e 划分的时间网格的整点上, 磁场 \mathbf{B} 、电流密度 \mathbf{J} 和粒子运动速度 \mathbf{V} 定义在以小步长 Δt_e 划分的时间网格的半整点上。在一个小时间步长 Δt_e 内, Maxwell 方程差分格式为

$$\frac{B_{z,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} - B_{z,j+1/2,k+1/2}^n}{\Delta t} = -c \left[\frac{E_{y,j+1,k+1/2}^n - E_{y,j,k+1/2}^n}{\Delta x} - \frac{E_{x,j+1/2,k+1}^n - E_{x,j+1/2,k}^n}{\Delta y} \right],$$

$$\frac{E_{x,j+1/2,k}^{n+1} - E_{x,j+1/2,k}^n}{\Delta t} = c \frac{B_{z,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} - B_{z,j+1/2,k-1/2}^{n+1/2}}{\Delta y} - 4\pi J_{x,j+1/2,k}^{n+1/2}$$

$$\frac{E_{y,j,k+1/2}^{n+1} - E_{y,j,k+1/2}^n}{\Delta t} = -c \frac{B_{z,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} - B_{z,j-1/2,k+1/2}^{n+1/2}}{\Delta x} - 4\pi J_{y,j,k+1/2}^{n+1/2}$$

位于时间网格半整点上的电流密度 $J_a^{n+1/2}$ 从下式得到:

$$\mathbf{J}_a^{n+1/2} = \sum_i \mathbf{V}_i^{n+1/2} \frac{S(\mathbf{X}_j - \mathbf{x}_i^{n+1/2})}{2}$$

场方程中, 磁场由时间网格的半点给出, 但求解粒子运动方程时需要的粒子速度是位于时间网格的整点, 求解 Maxwell 方程按 $\mathbf{B}^n \rightarrow \mathbf{B}^{n+1/4} \rightarrow \mathbf{E}^{n+1/2} \rightarrow \mathbf{B}^{n+3/4} \rightarrow \mathbf{E}^{n+1} \rightarrow \mathbf{B}^{n+1}$ 方式进行, 最后用 Poisson 方程对电场进行修正, 求出 $\delta\Phi$, 这样可大大减少计算机内存的占据。

对电子推进一个时间步长 Δt_e 中, 推进磁场三次, 时间步长分别是 $0.25\Delta t_e$ 、 $0.5\Delta t_e$ 、 $0.25\Delta t_e$ 。推进电场两次, 时间步长分别是 $0.5\Delta t_e$ 、 $0.5\Delta t_e$ 。若在推动粒子时采用双时标法, 则推进电子、离子、电场、磁场的步长各不相同, 这就是多时标法。由于推动粒子的工作量最大, 即使按三步推进磁场, 两步推进电场, 仍然可以缩短很多计算时间, 这便是多时标法具有的优点。

2 模拟结果比较

假设一束 P 极化的激光斜入射到具有线性分布的不均匀等离子体平板上, 入射角 θ

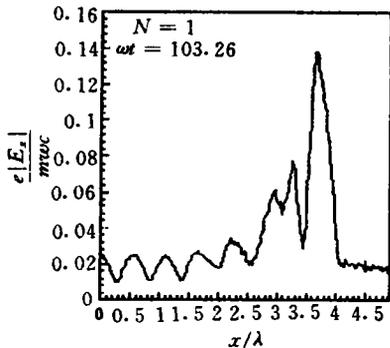


图 1(a) 自洽电场分量 E_x 在 x 方向的分布
 $E_x \sim x (\Delta t_i = \Delta t_r)$

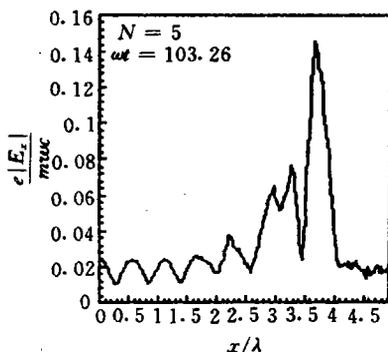


图 1(b) 同图 1(a), 但 $\Delta t_i = \Delta t_r$

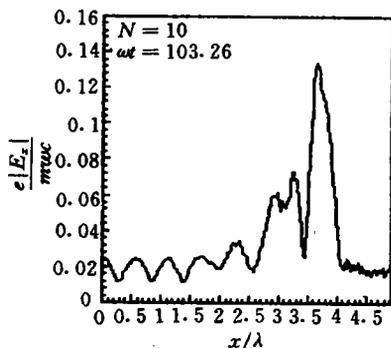


图 1(c) 同图 1(a), 但 $\Delta t_i = 10\Delta t_r$

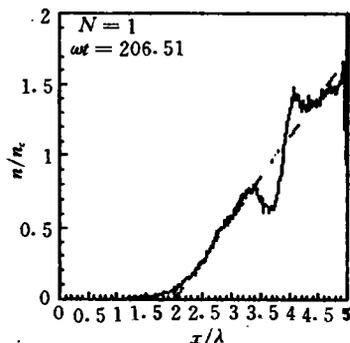


图 2(a) $\omega t = 206.51$ 时离子密度轮廓分布 ($\Delta t_i = \Delta t_r$),
虚线代表初始时刻离子密度分布

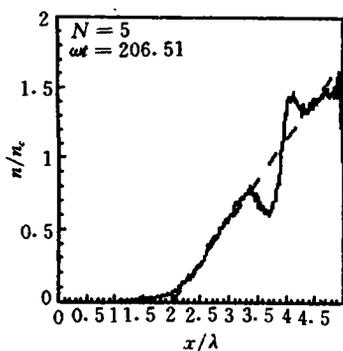


图 2(b) 同图 2(a), 但 $\Delta t_i = 5\Delta t_r$

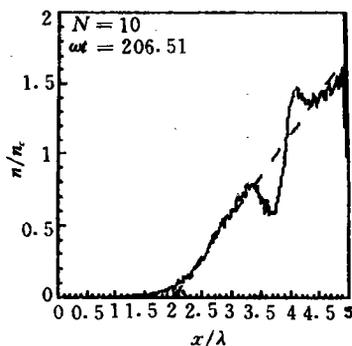


图 2(c) 同图 2(a), 但 $\Delta t_i = 10\Delta t_r$

$= 24^\circ$, 激光强度 $I_0 = 10^{16} \text{ W/cm}^2$, 激光波长 $\lambda = 1.06 \mu\text{m}$, 相应的激光频率 $\omega = 1.78 \times 10^{15}$

s^{-1} , 临界密度 $n_c = 0.9968 \times 10^{21} \text{cm}^{-3}$, 系统大小选为 $5\lambda \times 2.46\lambda$, 分成 $256\Delta x \times 128\Delta y$ 个网格, y 方向等离子体均匀分布, x 方向等离子体密度从 0 线性增长到 $1.7n_c$ 的距离是 3λ , 左边真空长度为 2λ , 电子和离子质量比 $m_e/m_i = 1/100$, 电子初始平均温度 4keV , 电子和离子温度比 $T_e/T_i = 3$, 为了便于比较, 选取不同的 N , 分别对 80000 个有限大小电子和 80000 个有限大小离子进行跟踪模拟, 得到的部分结果如表 1 所示。

表 1 是取不同 N 时相对计算时间比较, 采用多时标法可节省约 2/5 的计算时间。在能量守恒中发现, 应用多时标算后计算速度大大提高, 精度虽略有所降低(当

表 1 不同 N 时计算时间的比较

N	1	5	10
计算时间(相对值)	1	0.69	0.65

当 $N=1, 5$ 和 10 时, 最大相对误差分别是 0.35% , 0.44% 和 0.45% , 但仍能较好地符合能量守恒定律。图 1 和图 2 是同样计算条件下选取不同 N 时电场结构及等离子体密度轮廓分布, 计算结果符合得较好, 说明多时标法可成功地应用在二维粒子模拟中, 既大大减少了计算工作量, 又比较真实地描述了等离子体行为, 正确地反映了物理现象和物理本质, 因而多时标算法是正确、稳定和实用的。

参 考 文 献

- 1 Dawson J M. Particle Simulation of Plasmas. Rev. Mod. Phys. 1983, 55: 403
- 2 Adam J C. Electron Sub-cycling in Particle Simulation of Plasmas. J. Comp. Phys. 1982, 47: 229
- 3 Frieman A, Ray S L, Parker S E, Birdsall C K. Prospects for Multi-scale Particle-in-Cell Simulation of Plasma. Annual Meeting of the American Physical Society Division of Plasma Physics. San Diego, California. November 2-6, 1987
- 4 聂小波, 张家泰, 许林宝. 等离子体粒子模拟双时标算法. 计算物理, 1991, 8: 230
- 5 常铁强等. 激光等离子体相互作用与激光聚变. 长沙: 湖南科学技术出版社, 1991
- 6 Birdsall C K, Langdon A B, Plasma Physics Via Computer Simulation. McGraw-Hill Book Company, 1985

(责任编辑 卢天凯)