

文章编号: 1001-2486 (2001) 02-0103-04

面向对象柱坐标粒子模拟程序*

卓红斌, 常文蔚, 卓红春

(国防科技大学理学院, 湖南长沙 410073)

摘要: 对自行开发的二维全电磁粒子模拟程序 (ABLE2D) 作了剖析, 详细介绍了柱坐标下粒子模拟的物理模型和相关算法, 采用面向对象技术分析粒子模拟系统中的物理实体及相应的物理特性, 合理地建立对象模型, 成功地实现了粒子模拟系统的计算功能。

关键词: 粒子模拟; 面向对象技术

中图分类号 O53; O433.54 文献标识码: A

The Object-orient Plasma Simulation Code in Cylindrical Coordinates

ZHUO Hong-bin, CHANG Wen-wei, ZHUO Hong-chun

(College of Science, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: A 2-1/2D full electromagnetic particle-in-cell code ABLE2D is presented. The physical model and computational technology in cylindrical mesh, with r-and z-coordinate dependence, has been introduced in detail. Applying object-oriented technology to analyses the physical objects and their physical property, we have reasonably build up object models of solution space and successfully realized the computational function of Plasma simulation system.

Key words: plasma simulation; object-oriented technology

粒子模拟技术是通过跟踪大量在自洽和外加电磁场作用下的带电粒子的运动, 研究等离子体集体运动性质的动力学模拟方法。到目前为止, 许多专家已先后采用结构化程序语言 Fortran 和 C 语言编制了大量的应用程序, 解决电磁场理论、微波器件研究以及激光与等离子体相互作用等领域的一些问题^[1]。但是, 这些计算程序都是针对某些特殊问题, 系统地采用功能分解的方法, 把粒子模拟系统分解成一系列功能模块, 由此会带来问题空间与解决问题空间在结构上不一致的问题, 同时, 结构化程序语言没有提供软件扩展的机制, 这使得已有系统的修改和扩充较难, 资源重用性较差。

1 粒子模拟程序的物理模型和相关算法

二维柱坐标全电磁粒子模拟中, 电磁场步进采用跳蛙格式^[2], 为使其满足中心差分格式, 电场分量 E_r 、磁场分量 B_z 和电流密度分量 J_r 定义在以 Δr 划分的空间网格的半整点上, 电场分量 E_z 、磁场分量 B_r 和电流密度分量 J_z 定义在以 Δz 划分的空间网格的半整点上, 磁场分量 B_θ 定义在空间网格的半整点上, 电荷密度 ρ 、电场分量 E_θ 和电流密度分量 J_θ 定义在空间网格的整点上。时间尺度上, 电场分量和电荷密度均定义在以时间步长 Δt 划分的时间网格的整点上, 磁场分量、电流密度和粒子运动速度均定义在以时间步长 Δt 划分的时间网格半整点上。在一个时间步长内, Maxwell 方程组差分形式为:

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

$$\frac{E_{z, j+1/2, k}^{n+1} - E_{z, j+1/2, k}^n}{\Delta t} = c^2 \frac{B_{\theta, j+1/2, k+1/2}^{n+1/2} - B_{\theta, j+1/2, k-1/2}^{n+1/2}}{r_k \Delta r} - c^2 \mu_0 J_{z, j+1/2, k}^{n+1/2}$$

* 收稿日期: 2000-09-06

基金项目: 国家自然科学基金 (10085002) 资助项目

作者简介: 卓红斌 (1973-), 男, 博士生。

$$\frac{E_{r,j,k+1/2}^{n+1} - E_{r,j,k+1/2}^n}{\Delta t} = -c^2 \frac{B_{\theta,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} - B_{\theta,j-1/2,k+1/2}^{n+1/2}}{\Delta z} - c^2 \mu_0 J_{r,j,k+1/2}^{n+1/2}$$

$$\frac{E_{\theta,j,k}^{n+1} - E_{\theta,j,k}^{n-1}}{\Delta t} = c^2 - \left[\frac{B_{r,j+1/2,k}^{n+1/2} - B_{r,j-1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta z} - \frac{B_{r,j,k+1/2}^{n+1/2} - B_{z,j,k-1/2}^{n+1/2}}{\Delta r} \right] - c^2 \mu_0 J_{\theta,j,k}^{n+1/2}$$

$$\frac{B_{z,j,k+1/2}^{n+1/2} - B_{z,j,k+1/2}^{n-1/2}}{\Delta t} = \frac{r_{k+1} E_{\theta,j,k+1}^n - r_k E_{\theta,j,k}^n}{r_{k+1/2} \Delta r}$$

$$\frac{B_{r,j+1/2,k}^{n+1/2} - B_{r,j+1/2,k}^{n-1/2}}{\Delta t} = - \frac{E_{\theta,j+1,k}^n - E_{\theta,j,k}^n}{\Delta z}$$

带电粒子的运动满足牛顿运动方程。本文采用动量守恒的 Boris^[1]方法推动粒子步进。为了避免复杂的泊淞修正,电流密度的计算采用满足电荷守恒定律的电流分配方法。首先考虑带电粒子单个步长时间内的运动没有穿越网格的情况。设粒子 p 第 n 时刻的位置为 $x_p^n = (r_p^n, z_p^n)$, 假定粒子位于网格点 (j, k) 内, 定义

$$w_{pr}^{n+} = \frac{r_p^n - r_k}{\Delta r}, w_{pz}^{n+} = \frac{(z_p^n - z_j)}{\Delta z}$$

$$w_{pr}^{n-} = (1 - w_{pr}^{n+}), w_{pz}^{n-} = 1 - w_{pz}^{n+}$$

式中 $\Delta r, \Delta z$ 为空间网格的长度和宽度, Δt 代表单步时间步长, r_k, z_j 为网格点 (j, k) 的坐标值。带电粒子对网格四个顶点的电荷密度的贡献可以表示为

$$\Delta \rho_{p,j,k}^n = \frac{q_p w_{pz}^{n-} w_{pr}^{n-}}{2\pi r_k \Delta r \Delta z}, \Delta \rho_{p,j+1,k}^n = \frac{q_p w_{pz}^{n+} w_{pr}^{n-}}{2\pi r_k \Delta r \Delta z}$$

$$\Delta \rho_{p,j,k+1}^n = \frac{q_p w_{pz}^{n-} w_{pr}^{n+}}{2\pi r_{k+1} \Delta r \Delta z}, \Delta \rho_{p,j+1,k+1}^n = \frac{q_p w_{pz}^{n+} w_{pr}^{n+}}{2\pi r_{k+1} \Delta r \Delta z}$$

带电粒子由 x^n 运动到 x^{n+1} 对网格四边电流密度的贡献可以表示为

$$J_{r,j,k+1/2}^{n+1/2} = \frac{q_p w_{pz}^{n-} (w_{pr}^{n+1,r+} - w_{pr}^{n+})}{2\pi r_{k+1/2} \Delta r \Delta z}, J_{r,j+1,k+1/2}^{n+1/2} = \frac{q_p w_{pz}^{n+} (w_{pr}^{n+1,r+} - w_{pr}^{n+})}{2\pi r_{k+1/2} \Delta t \Delta z},$$

$$J_{z,j+1/2,k}^{n+1/2} = \frac{q_p w_{pr}^{n+1,r-} (w_{pz}^{n+1,r+} - w_{pz}^{n+})}{2\pi r_k \Delta r \Delta t}, J_{z,j+1/2,k+1}^{n+1/2} = \frac{q_p w_{pr}^{n+1,r+} (w_{pz}^{n+1,r+} - w_{pz}^{n+})}{2\pi r_{k+1} \Delta r \Delta t},$$

对于带电粒子运动穿越网格的情况, 可以认为粒子的运动路径被网格线分割成两部分, 依次求解单段路径对网格点电流的贡献即可。可以证明, 采用上述电流分配方法可以自洽地满足电荷守恒定律。

2 粒子模拟程序的面向对象特点

2.1 面向对象系统分析与建模

通过面向对象分析^[4], 建立粒子模拟系统的对象模型如图 1 所示。受计算机存储量和计算时间的限制, 粒子模拟系统只能模拟有限空间的物理现象。定义 ComputerRegion 类代表计算空间。ComputeRegion 类包含 Fields 类和 Grid 类, 同时包含一系列不同性质的边界和大量的带电粒子, 分别用 BoundaryList 类和 ParticleGroup 类来表示。BoundaryList 类采用链表的形式将边界串连起来, 对于不同的物理问题, 只需将不同的边界连接到 BoundaryList 链表上即可。ComputeRegion 类包含有表现时间的变量, 并提供 advance() 函数, 发送消息推动内部 ParticleGroup 和 Field 步进。

Field 类代表 ComputeRegion 类描述空间各个网格点电磁场量、电流密度和电荷密度等。内部封装 advance() 函数, 响应 ComputeRegion 发送的 advance 消息并推动电磁场步进。网格类 Grid 描述 ComputeRegion 类空间网格的所有属性, 如网格点的位置、网格大小等。同时, 封装网格划分方法以及与网格位置有关的运算。Grid 类提供 interpolate() 函数用于将空间任意点的标量和矢量离散化, 权重分配到空间网格的各个点上。利用面向对象的多态性, 可以很容易地增加新的离散化方法, 函数名称不变, 算法却有所不同。

ParticleGroup 类代表一组相同质量且带相同电量的带电粒子。我们采用三个变量表示带电粒子相同的质量、电量及荷质比，定义简单的结构 PARTICLE，仅包含粒子的位置和速度，用 PARTICLE 数组来存储所有粒子位置和速度的信息，提供 advance () 函数、响应 ComputerRegion 发送的 advance 消息，推动粒子步进，提供 addparticle () 函数用于加入边界入射新粒子。

实际物理问题涉及的边界种类繁多，其中包括良导体边界 (conductor) 微波输入和输出端口 (port) 阴极发射电子边界 (electrode) 束流入射边界 (beamemitter) 以及对称周期边界等一

系列边界。这些边界存在相同的性质，同时又有差异。定义基类 Boundary，包含所有边界共有的最基本的属性，利用面向对象的继承性，在基类的基础上派生出许多新的子类来表示性质各异的边界，子类不但拥有基类所有的性质，同时还可以拥有自己独特的物理性质。图 2 给出了基类 boundary 与其子类的层次图。Boundary 类定义变量存储边界所在空间网格上的位置，提供 applyfield () 函数、collect () 函数和 emit () 函数分别用于响应修正边界上的场量、收集打在边界上的带电粒子和边界发射带电粒子这三个消息。值得注意的是这三个函数均定义为虚拟函数，不同边界函数程序的实现可以是不一样的。这表示不同的边界对于相同的物理消息 (修正场量、收集粒子和发射电子)，可以有不同的反应。由于边界与内部等离子体存在粒子的交换问题，如阴极发射电子进入内部等离子体，以及等离子体中的带电粒子打在边界上被边界吸收，因此，边界类必须包含一个类来处理这些交换的带电粒子。由于这些粒子的数目是不确定的，该类应该具有快捷方便的增加和删除功能。定义 ParticleList 类来表示边界与等离子体之间交换的所有粒子。ParticleList 类以链表的形式存储交换的粒子，便于增加和删除粒子。链表上的交换粒子定义为 Particle 类，类定义包含粒子的速度、位置、电量和质量等所有信息。

2.2 粒子模拟系统功能的实现

粒子模拟系统计算功能的实现可以通过系统内对象之间消息传递以及对象自身所提供的功能来实现。粒子模拟的工作流程图与传统的流程图相似，见图 3。

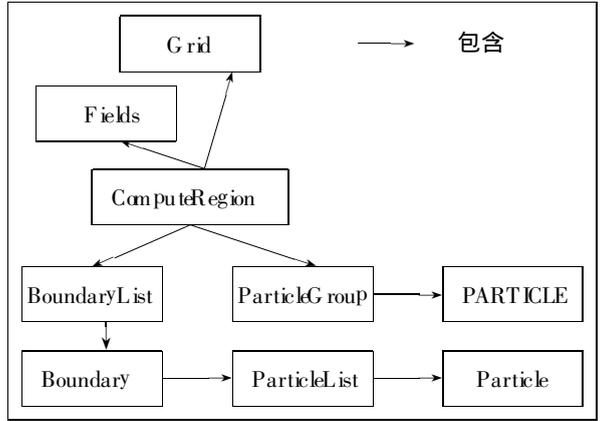


图 1 粒子模拟系统的对象模型

Fig.1 Class diagram for PIC code

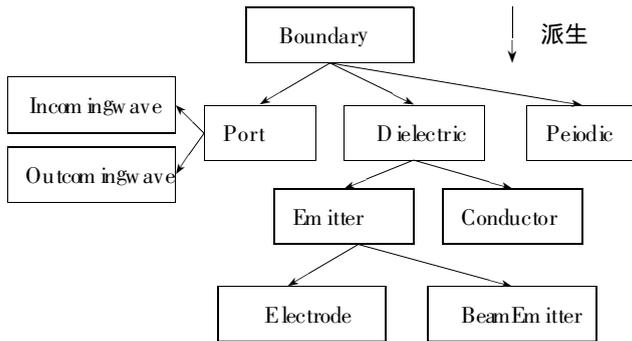


图 2 边界基类及其派生类

Fig.2 Class hierarchy for boundary

首先是初始化模拟系统中的各个参量，实例化各个对象。一旦初始化完毕，系统就可以以离散时间步长推动带电粒子和场量步进。

最初是电磁场场量步进，在已知前一时刻的电荷密度和电流密度，加上完整的边界条件，可以求解 Maxwell 方程组。电磁场量步进采用蛙跃式方法：先推动磁场半步步进，然后是电场一步步进，电磁场量边界修正后，再一次推动磁场半步步进。将磁场步进分为两次进行，可以使电磁场量在推动一个步长后均位于整点时刻位置，既充分利用中心差分的精确度，又便于下一步带电粒子步进的计算。

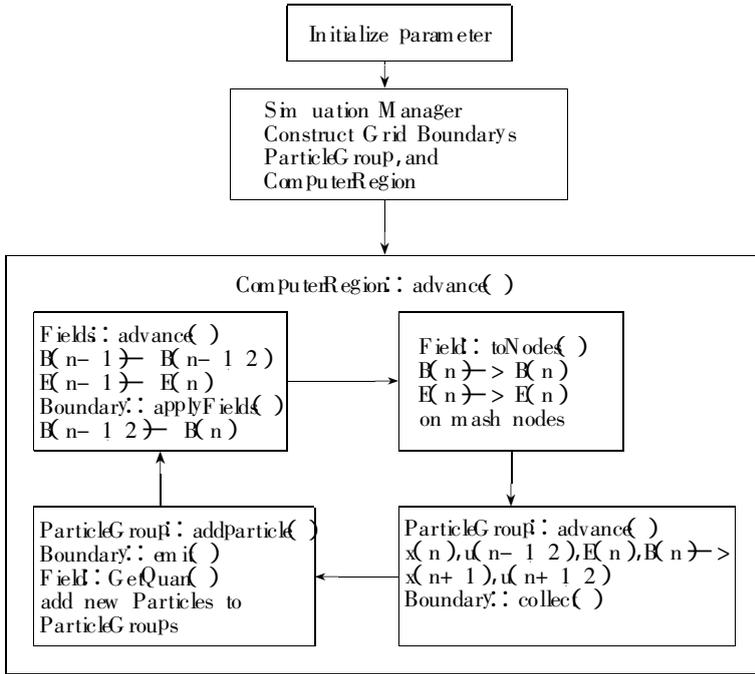


图3 粒子模拟的工作流程图

Fig.3 PIC flow control diagram

接下来是推动带电粒子步进。在推动粒子之前，首先需要将定义在网格半点上的场量平均到网格整点上去，采用面积权重分配法求得粒子所在空间位置上的电磁场量，求解相对论运动方程获得粒子新的速度和位置。粒子位置的运动与网格点上电流密度的求解需要同时进行，这里包含两种情况，一是带电粒子的运动没有穿过网格，二是带电粒子运动穿越网格。电流密度的求解方法前面已经讨论，这里需要注意的是第二种情况下，除了求解粒子新的位置和电流密度外，还应该判断粒子是否穿越边界；如果是，则必须考虑边界吸收问题。柱坐标系下，粒子位置步进后还需对速度加以修正^[2]。

下一步考虑的是边界发射带电粒子的问题，它包含阴极电子发射、粒子束源入射等一系列问题。程序中，我们采用边界类包含的粒子链表类 *ParticleList* 收集每一个时间步长内发射的所有带电粒子，在下一时刻推动电磁场步进之前，将链表上的粒子加入到 *ParticleGroup* 中去，同时清除链表上的所有粒子。

重复上述电磁场和粒子步进的计算过程，直至完成所有计算次数。

3 结论

根据以上论述，我们采用 C++ 程序语言成功地编写了具有面向对象特点的二维全电磁柱坐标粒子模拟程序，并且应用到等离子体融断开关的粒子模拟中，得到了较佳的模拟结果^[5]。该程序的面向对象特点大大改善了传统的结构化程序设计的不足，有效地提高了软件系统的扩展性、重用性和灵活性，为进一步的开发提供了便利。

参考文献：

- [1] Birdsall C K. Plasma Physics via Computer Simulation. New York: McGraw-Hill Book Company, 1985.
- [2] 舒挺. 多波切仑柯夫振荡器的研究 [D]. 博士论文. 国防科技大学研究生院, 1998.
- [3] 曹莉华等. 二维粒子模拟的多时标法 [J]. 国防科技大学学报, 1996, 18(3): 44-46.
- [4] 张海藩. 软件工程导论. 清华大学出版社 [M], 1992.
- [5] 卓红斌等. 融断开关等离子体中磁场的异常渗透 [J]. 强激光与粒子数, 2000, 12(5): 605-609.

