文章编号：1001-2486（2001）04-0028-04

等离子体粒子模拟中的电磁场边界条件※

霍启峰，邵福球

（国防科技大学理学院，湖南 长沙 410073）

摘 要：针对等离子体粒子模拟中电磁场边界条件的选取问题，对简单吸收边界条件、Lindman 边界条件、超吸收边界条件等进行了详细的讨论。结果表明，简单吸收边界条件计算量最小、误差最大，超吸收边界条件计算量最大、误差最小，Lindman 边界条件误差较小且其反射系数对入射角的依赖性不大。

关键词：粒子模拟；电磁场；边界条件

中图分类号：O441 文献标识码：A

Electromagnetic Field Boundary Conditions in Particle Simulation of Plasma

HUO Qi-feng，SHAO Fu-qiu

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

Abstract：For the choice of electromagnetic field boundary conditions in particle simulation of plasma，the simple absorbing boundary conditions，Lindman boundary conditions and super absorbing boundary conditions are discussed in detail. The results show that the computing quantity is the least and the error is the most for the simple absorbing boundary conditions，the computing quantity is the most and the error is the least for the super absorbing boundary conditions，and the error is less and the reflectance is little affected by the angle of incidence for Lindman boundary conditions.

Key words：particle simulation；electromagnetic field；boundary condition

等离子体是一个呈现集体运动特性的带电粒子的复杂系统。对这样一个复杂系统的研究，Buneman[1]，Dawson[2]和 Eldridge[3]等人在 1960 年左右创立了一种能在计算机上实现的等离子体数值模拟方法，这就是等离子体的粒子模拟方法。即用计算机模拟计算跟踪大量单个微观粒子的运动，再对组成物体（包括气态、液态、固态和等离子体态）的大量微观粒子进行统计平均，由此得到宏观物体的物质特性和运动规律。现在，人们已经成功地将这种粒子模拟方法应用于等离子体物理所涉及的许多领域，例如等离子体统计理论的检验、热核聚变、同位素分离、电子辐射装置的运行、空间物理的研究、激光等离子体相互作用、惯性约束聚变等。目前，世界上有许多著名的大学和研究所在开展这方面的研究工作[4]，等离子体粒子模拟方法本身的理论、适用范围和技巧等也日趋成熟。

等离子体粒子模拟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，需联立求解 Maxwell 方程和粒子运动方程，其中，电磁场边界条件的选取是一个十分重要的问题。由时域有限差分原理可以知道，在计算电磁场时需要无限大的网格数，显然这是不可能的，所以在实际的计算中，总是在某处把网格截断，使之成为有限的，这样一来，在网格空间的截断处就会出现非物理的电磁波的反射，这将严重影响计算的精度，另一方面，中心差商形式的时域有限差分方程由于需要截断边界处外场的信息用于边界网格点上场的计算，故也需要适合于边界网格点计算的算法。

在以往的文献中，曾对等离子体粒子模拟中电磁场边界条件的选取进行了一些讨论[5,6]，但一直没有这方面的系统论述。为进一步开展等离子体粒子模拟应用研究，加深对相应物理问题的理解，这里，结合我们的工作实践体会，对等离子体粒子模拟中电磁场边界条件的选取方法进行详细的讨论，并对各种不同的边界条件在等离子体粒子模拟中的应用进行比较。

※ 收稿日期：2001-04-01
作者简介：霍启峰（1975-），男，硕士生。

1 单向波与吸收边界

形如

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}-\frac{1}{V}\frac{\partial}{\partial t}\right]\Phi(x,t)=0 \tag{1}$$

方程的解可以写为：

$$\Phi(x,t)=f(x+Vt) \tag{2}$$

方程（1）称为单向波方程，表示一个沿负 x 方向传播的波。可以证明，垂直投射到一个平面边界上的平面波如果满足方程（1），则它在边界上就不会产生反射。

假设截断边界面在 $x=0$ 处，则 Φ（x，t）满足条件（1）就是要求

$$\frac{\partial}{\partial x}\Phi(x,t)\mid_{x=0}=\frac{1}{V}\frac{\partial}{\partial t}\Phi(x,t)\mid_{x=0} \tag{3}$$

如果采用向前差商近似，x 方向空间步长为 Δx，时间步长为 Δt，并令 $x=0$ 时 $i=0$，则式（3）的差分形式为：

$$\Phi^n(1)-\Phi^n(0)=\frac{\Delta x}{V\Delta t}[\Phi^{n+1}(0)-\Phi^n(0)]$$

上式可以改写为：

$$\Phi^{n+1}(0)=\Phi^n(0)\left(1-\frac{V\Delta t}{\Delta x}\right)+\frac{V\Delta t}{\Delta x}\Phi^n(1) \tag{4}$$

该式说明，如果 $\Delta x=V\Delta t$，则：

$$\Phi^{n+1}(0)=\Phi^n(1) \tag{5}$$

这说明，$i=0$ 处，时间步为 $n+1$ 时的波正好是 $i=1$ 处时间步 n 时的波。也就是说该波的运动只是一个时间步，向左移动一个网格步长，好像不存在边界一样，不发生任何反射，故条件（1）称为吸收边界条件。同理，方程

$$\left(\frac{\partial}{\partial x}+\frac{1}{V}\frac{\partial}{\partial t}\right)\Phi(x,t)=0 \tag{6}$$

为右行波的吸收边界条件。

2 简单吸收边界条件

由于向右传播的斜入射波在频域满足[5]：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\tilde{\Phi}(\boldsymbol{r},\omega)+\mathrm{i}k_x(\omega)\tilde{\Phi}(\boldsymbol{r},\omega)=0 \tag{7}$$

又因为 $k_x=\frac{\omega}{V}\cos\theta$，其中 θ 为入射光波与 x 轴的夹角，故上式可以改写为：

$$\left[\frac{1}{\cos\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+\mathrm{i}\frac{\omega}{V}\right]\tilde{\Phi}(\boldsymbol{r},\omega)=0 \tag{8}$$

转换到时空域后有：

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}-\frac{\cos\theta}{V}\frac{\partial}{\partial t}\right]\Phi(\boldsymbol{r},t)=0 \tag{9}$$

可以看出斜入射的波动方程（9）不再满足吸收边界条件（1），这就使得在数值差分时引入反射项 Φ_R。我们在这里用一种简单的方法修正边界处的场，使其满足吸收边界条件。

设入射场满足：$\Phi_{in}=A\cos$（$\omega t+k\cos\theta\cdot x+k\sin\theta\cdot y$），令反射场为：$\Phi_R=AR\cos$（$\omega t-k\cos\theta\cdot x-k\sin\theta\cdot y$），那么，边界处的总场为：

$$\Phi=\Phi_{in}+\Phi_R \tag{10}$$

把该式代入（9）中，并使 Φ_{in}满足（1）式，那么有反射系数

$$R=\frac{1-\cos\theta}{2\cos\theta} \tag{11}$$

对于这一简单的吸收边界条件，思想非常简单，计算也比较容易。

3 Lindman 边界条件

式（8）描述了斜入射波在频域满足的波动方程，对该方程，Lindman[6]给出了一种近似方法，即将$\frac{1}{\cos\theta}$作近似展开：

$$\frac{1}{\cos\theta} \cong 1 + \sum_{m=1}^{M} \frac{\alpha_m \sin^2\theta}{1 - \beta_m \sin^2\theta} \tag{12}$$

其中 α_m、β_m 为待定常数，由于 $\sin^2\theta = \left(\frac{Vk_y}{\omega}\right)^2$，则式（8）可以写为：

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \frac{\mathrm{i}\omega}{V}\right]\tilde{\Phi}(\boldsymbol{r},\omega) = -\sum_{m=-1}^{M} \tilde{h}_m \tag{13}$$

其中：

$$\tilde{h}_m = \frac{\alpha_m V^2 k_y^2}{\omega^2 - \beta_m V^2 k_y^2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\tilde{\Phi}(\boldsymbol{r},\omega) \tag{14}$$

将式（13）转换为时空域的表示后有：

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} - \frac{1}{V}\frac{\partial}{\partial t}\right]\Phi(\boldsymbol{r},t) = -\sum_{m=1}^{M} h_m(\boldsymbol{r},t) \tag{15}$$

用 $\omega^2 - \beta_m V^2 k_y^2$ 乘以式（14）并转换到时空域后可得：

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} h_m(\boldsymbol{r},t) - \beta_m V^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} h_m(\boldsymbol{r},t) = \alpha_m V^2 \frac{\partial^3}{\partial y^2 \partial x}\Phi(\boldsymbol{r},t) \tag{16}$$

这时，h_m（$\boldsymbol{r}$，t）与 θ 无关，而且已经证明，当 $M = 3$ 时，这一吸收边界条件的反射系数当入射角小于 89°时小于 1%，此时 α_m、β_m 的选择是使入射角小于 89°时反射波达到最小。

表 1 系数 α_m 和 β_m 的值

Tab.1 The values of coefficient α_m and β_m

	$m = 1$	$m = 2$	$m = 3$
α_m	0.3264	0.1272	0.0309
β_m	0.7375	0.98384	0.9996472

4 超吸收边界条件

传统的吸收边界条件只在边界上对电场或磁场进行特殊处理，而不同时计算两者，这是因为只要在边界上知道了电场或磁场，则内部区域的场就能唯一地确定。例如，在二维情况下，对 TE 波只计算 E_z，对 TM 波只计算 B_z 的边界值。

在超吸收边界条件中[5]，对 TM 波，让 E_y 也参与边界处的计算，并用它来减少计算电场时所产生的非物理因素引起的反射，从而提高吸收边界条件的性能，其具体的方法如下：

（1）选择一个合适的边界条件并应用于 B_z^n（-1，j）；

（2）把这一吸收边界条件同时应用于 $E_y^{n+1/2}$（0，j）即可得到 $E_y^{n+1/2(2)}$（0，j）；

（3）利用正常的 TM 波差分方程得到 $E_y^{n+1/2(1)}$（0，j）；

（4）按下式计算 $E_y^{n+1/2}$（0，j）

$$E_y^{n+1/2}(0,j) = \frac{E_y^{n+1/2(1)}(0,j) + \rho E_y^{n+1/2(2)}(0,j)}{1 + \rho}, \qquad \rho = \frac{c \cdot \Delta t}{\Delta x}$$

（5）再按边界处电磁场满足的方程计算出：

$$B_z^n(0,j) = B_z^n(-1,j) - \frac{\mathrm{d}x}{c \cdot \mathrm{d}t}\left[E_y^{n+1/2}(0,j) - E_y^{n-1/2}(0,j)\right]$$

5 结论

在以上提到的各种边界条件中，简单吸收边界条件的思想最简单，计算量也最小，但是其误差相对也较大，并且在入射角接近 90°时反射波会超过入射波，更将加大计算的误差；Lindman 边界条件在入射角度不大于 89°时的反射系数不大于 1%，误差较小，但其计算量远大于简单吸收边界条件；超吸收边界条件由于是在吸收边界条件下的改进，其误差最小，计算量也最大。从粒子模拟的实际出发，所观察的宏观物理量主要由波场与粒子的相互作用决定，在反射系数不大的情况下，就能量守恒的相对误差检验所做的大量机上实验表明，简单吸收边界条件不大于 1%，超吸收边界条件和 Lindman 边界条件不大于 0.35%（入射角 0 ~ 45°范围计算结果），而当 θ 不接近 90°时，简单吸收边界条件与 Lindman 边界条件的计算结果无明显差异。因为 Lindman 边界条件的反射系数对入射角的依赖性不大，所以大部分的计算程序中采用 Lindman 边界条件。

参考文献：

[1] Buneman O. Dissipation of currents in ionized media [J]. Phys. Rev., 1959, 115: 503 – 517.

[2] Dawson J M. One – dimensional plasma model [J]. Phys. Fluids, 1962, 5: 445 – 459.

[3] Eldridge O C, Feix M. One – dimensional plasma model at the thermodynamic equilibriumJ [J]. Phys. Fluids., 1962, 5: 1076 – 1080.

[4] LiHua Cao, Wenwei Chang, Zongwu Yue. Partical simulation and electron heating effects in plasmas produced by laser pulse [J]. Phys. Plasmas, 1998, 5 (20): 499 – 502.

[5] 王长清，祝西里，电磁场计算中的时域有限插分法 [M]. 北京大学出版社，1994.

[6] Lindman E L. Free – space boundary conditions for the time dependent wave equation [J]. J. Comput. Phys., 1975, 18: 66 – 78.