文章编号:1001 - 2486(2003)06 - 0083 - 04

等离子体粒子模拟中的改进型 Borris 旋动粒子方法*

银 燕,常文蔚
(国防科技大学理学院,湖南 长沙 410073)

摘 要:将等离子体粒子模拟中得到广泛应用的 Borris 旋动粒子方法进行了改进,用于精确求解相对论 Lorentz 运动方程。这种改进型 Borris 旋动方法在模拟粒子在强磁场中的动力学行为时仍具有相当高的计算精度,且耗费计算量较小。将改进型 Borris 旋动方法应用于等离子体粒子模拟中,尤其适用于模拟超强激光与等离子体的相互作用。

关键词:激光等离子体相互作用;粒子模拟;Borris 旋动方法
中图分类号:O53 **文献标识码**:A

Advanced Borris Rotation Method in Particle Simulation of Plasma

YIN Yan, CHANG Wen-wei
(College of Science, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract:An advanced Borris rotation method is proposed to solve the relativistic Lorentz equation. The method can describe the dynamic behavior of particles in intense magnetic field accurately. It is especially adaptive to simulate the interaction of ultra-intense laser and plasmas by using the advanced Borris rotation method in particle simulation.

Key words:interaction of laser and plasmas;particle simulation;Borris rotation method

等离子体粒子模拟方法是通过跟踪大量带电粒子在外加及自洽电磁场中的运动并统计平均而得到宏观等离子体的特性及运动规律的一种方法。经过几十年的发展,粒子模拟方法已经成为研究等离子体集体动力学行为的一种强有力的数值手段,广泛应用于等离子体物理所涉及的许多领域,如空间等离子体、自由电子激光、激光等离子体相互作用等[1,2]。

粒子模拟方法的基本思路是:将所要研究物理问题的空间区域划分为许多网格,各物理量按网格离散分布。由空间电磁场分布,求解被推动粒子的 Lorentz 运动方程;由粒子位置、速度求出空间电荷、电流密度的分布,求解 Maxwell 方程推动电磁场,这样形成一个不断迭代的过程。显然,推动粒子是粒子模拟方法中的关键一环,采用高精度的算法,能够使得粒子模拟方法精确地描述等离子体的动力学行为。

近年来,随着放大技术的发展,使得产生聚焦功率密度 $I = 10^{18} \sim 10^{21}\mathrm{W/cm^2}$ 的激光脉冲成为可能[3],这使激光等离子体相互作用发展到一个新的领域[4,5]。当激光聚焦功率密度 $I > 10^{18}\mathrm{W/cm^2}$ 时,不仅激光的磁场达到兆高斯量级,而且,激光脉冲能在等离子体内激发兆高斯量级的准静态磁场[5]。在强激光作用下,电子运动呈现出强相对论特征。可见,要自然研究这种强激光与等离子体的相互作用,就必须精确地描述粒子在强电磁场中的相对论动力学行为。

粒子的运动由相对论 Lorentz 方程控制:

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}}{\mathrm{d}t} = \frac{q}{m_0}\left(\boldsymbol{E} + \frac{\boldsymbol{u} \times \boldsymbol{B}}{\gamma c}\right) \tag{1}$$

其中,u 为相对论速度,相对论因子 $\gamma = \sqrt{1 + u^2/c^2}$。(1) 式是一个关于 u 的非线性方程,如果用一般差分格式会遇到除法运算。为了减少计算量,在粒子模拟程序的编制中广泛采用 Borris 旋动粒子方法[2]。

* 收稿日期:2003 - 06 - 30
基金项目:国家自然科学基金项目资助(10085002);国家 863 高技术惯性约束聚变主题资助项目
作者简介:银燕(1977—),女,讲师,博士。

1 Borris 旋动方法简介

方程(1) 的差分格式为：

$$\frac{\boldsymbol{u}^{n+1/2}-\boldsymbol{u}^{n-1/2}}{\Delta t}=\frac{q}{m}\left(\boldsymbol{E}^n+\frac{1}{c}\frac{\boldsymbol{u}^{n+1/2}+\boldsymbol{u}^{n-1/2}}{2\gamma^n}\times\boldsymbol{B}^n\right)\tag{2}$$

Borris 旋动方法的基本思想为:将粒子在电磁场中的一步运动分解为三个步骤,即在电场中的半步推动;在磁场中的一步推动;在电场中的半步推动。

Step 1 在电场中的半步推动

令 $\tilde{\boldsymbol{u}}^n=\boldsymbol{u}^n+\frac{q\cdot\Delta t}{m_0}\cdot\boldsymbol{E}^n\cdot\left(n-\frac{1}{\Delta t}\right)$,则

$$\begin{aligned}\tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2}&=\boldsymbol{u}^{n+1/2}+\frac{q\cdot\mathrm{d}t}{m_0}\cdot\boldsymbol{E}^n\cdot\left(-\frac{1}{2}\right)\\ \tilde{\boldsymbol{u}}^{n-1/2}&=\boldsymbol{u}^{n-1/2}+\frac{q\cdot\mathrm{d}t}{m_0}\cdot\boldsymbol{E}^n\cdot\left(\frac{1}{2}\right)\end{aligned}\tag{3}$$

且(2) 式可写为：

$$\frac{\tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2}-\tilde{\boldsymbol{u}}^{n-1/2}}{\mathrm{d}t}=\frac{q}{m_0c\gamma^n}(\tilde{\boldsymbol{u}}^n\times\boldsymbol{B}^n)\tag{4}$$

Step 2 在磁场中的旋转运动

引入中间变量 $\boldsymbol{u}'$,

$$\begin{aligned}\boldsymbol{u}'&=\tilde{\boldsymbol{u}}^{n-1/2}+\tilde{\boldsymbol{u}}^{n-1/2}\times\boldsymbol{t}\\ \tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2}&=\tilde{\boldsymbol{u}}^{n-1/2}+\boldsymbol{u}'\times\boldsymbol{s}\end{aligned}\tag{5}$$

记 $\theta=\frac{qB^n\Delta t}{\gamma^n mc}$,其中,$\boldsymbol{t}=\frac{\theta}{2}\frac{\boldsymbol{B}^n}{B^n}$,$\boldsymbol{s}=\frac{2}{1+t^2}\frac{\boldsymbol{t}}{t}$。上式引入的误差为 $\delta=\frac{t^3}{3}$[2]。

Step 3 在电场中的半步推动

$$\boldsymbol{u}^{n+1/2}=\tilde{\boldsymbol{u}}^{n+1/2}+\frac{q\cdot\mathrm{d}t}{2m_0}\boldsymbol{E}^n\tag{6}$$

以上(3)、(5)、(6) 三式,就是求解 Lorentz 方程(1) 的 Borris 旋动格式。

2 改进型 Borris 旋动方法

在 Borris 旋动方法中,第一、三步骤是精确的,而在第二步骤,即在磁场中推动粒子时引入了近似。刘大庆等推导了粒子在固定方向磁场 $\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_z$ 中的二维运动(u_x,u_y)的准解析解[6]。我们推导了粒子在任意方向的磁场中的三维运动的准解析解,如下所示。

在(1) 式中,令 $E=0$,仅考虑粒子在任意方向的恒定磁场 $\boldsymbol{B}=(B_x,B_y,B_z)$ 中的运动,方程可写为分量形式：

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}u_x}{\mathrm{d}t}=u_y\omega_{cz}-u_z\omega_{cy}\\ \dfrac{\mathrm{d}u_y}{\mathrm{d}t}=u_z\omega_{cx}-u_x\omega_{cz}\\ \dfrac{\mathrm{d}u_z}{\mathrm{d}t}=u_x\omega_{cy}-u_y\omega_{cx}\end{cases}\tag{7}$$

其中,$\omega_{ci}=\frac{qB_i}{\gamma m_0c}(i=x,y,z)$。记 $\omega_c=\sqrt{\omega_{cx}^2+\omega_{cy}^2+\omega_{cz}^2}=\frac{q|\boldsymbol{B}|}{\gamma m_0c}$。注意到磁场力不做功,则作用过程中 γ 不变。

(7) 式是一个一阶常系数线性齐次微分方程组。易求得其特征方程为 $\lambda(\lambda^2+\omega_c^2)=0$,解得:$\lambda_1=0$,$\lambda_2=\pm\mathrm{i}\omega_c$。$\lambda_1=0$ 对应常数解,舍去。$\lambda_2=\pm\mathrm{i}\omega_c$,相应的线性无关解为：

$$\begin{cases} u_x = A_1\cos(\omega_c t) + B_1\sin(\omega_c t) \\ u_y = A_2\cos(\omega_c t) + B_2\sin(\omega_c t) \\ u_z = A_3\cos(\omega_c t) + B_3\sin(\omega_c t) \end{cases} \tag{8}$$

其中,A_i,B_i 为待定系数。代入(7) 式可知,有两个系数需要由初始条件来确定。

粒子推动时只求速度的‘ 增量 ”,初始条件可以不考虑。考虑粒子在$\left[\left(n-\frac{1}{2}\right)\Delta t,\left(n+\frac{1}{2}\right)\Delta t\right]$时间段上的速度变化。假设该时间段上的磁场恒等于中心时刻的磁场,即假设 $\omega_c^{n-1/2} = \omega_c^{n+1/2} = \omega_c^n = \frac{qB^n}{\gamma^n m_0 c}$,则可以应用(8) 式得到粒子速度的变化。

将(8) 式离散化,得:

$$\begin{aligned} u_x^{n+1/2} &= A_1\cos[\omega_c^n\cdot(n-1/2)\cdot\Delta t + \omega_c^n\cdot\Delta t] + B_1[\sin\omega_c^n\cdot(n-1/2)\cdot\Delta t + \omega_c^n\cdot\Delta t] \\ &= A_1\cos[\omega_c^n\cdot(n-1/2)\cdot\Delta t]\cdot\cos[\omega_c^n\cdot\Delta t] - A_1\sin[\omega_c^n\cdot(n-1/2)\cdot\Delta t]\cdot\sin[\omega_c^n\cdot\Delta t] \\ &\quad + B_1\sin[\omega_c^n\cdot(n-1/2)\cdot\Delta t]\cdot\cos[\omega_c^n\cdot\Delta t] + B_1\cos[\omega_c^n\cdot(n-1/2)\cdot\Delta t]\cdot\sin[\omega_c^n\cdot\Delta t] \end{aligned}$$

对(8) 式微分得到:$\frac{\mathrm{d}u_x}{\mathrm{d}t} = \omega_c[-A_1\sin(\omega_c t) + B_1\cos(\omega_c t)]$,则有:

$$u_x^{n+1/2} = u_x^{n-1/2}\cos(\omega_c^n\cdot\Delta t) + \frac{1}{\omega_c^n}\left.\frac{\mathrm{d}u_x}{\mathrm{d}t}\right|_{t=(n-1/2)\cdot\Delta t}\cdot\sin(\omega_c^n\cdot\Delta t)$$

将(7) 式代入,则有:

$$u_x^{n+1/2} = u_x^{n-1/2}\cos(\omega_c^n\cdot\Delta t) + \frac{1}{\omega_c^n}(u_y^{n-1/2}\omega_{cz}^n - u_z^{n-1/2}\omega_{cy}^n)\sin(\omega_c^n\cdot\Delta t)$$

同理,得到 $u_y^{n+1/2}$,$u_z^{n+1/2}$ 的递推关系式。

综上所述,得到(7) 式的数值求解格式:

$$\begin{cases} u_x^{n+1/2} = C\cdot u_x^{n-1/2} + S\cdot(u_y^{n-1/2}\omega_{cz}^n - u_z^{n-1/2}\omega_{cy}^n) \\ u_y^{n+1/2} = C\cdot u_y^{n-1/2} + S\cdot(u_z^{n-1/2}\omega_{cx}^n - u_x^{n-1/2}\omega_{cz}^n) \\ u_z^{n+1/2} = C\cdot u_z^{n-1/2} + S\cdot(u_x^{n-1/2}\omega_{cy}^n - u_y^{n-1/2}\omega_{cx}^n) \end{cases} \tag{9}$$

其中,$C = \cos(\omega_c^n\cdot\Delta t)$,$S = \frac{\sin(\omega_c^n\cdot\Delta t)}{\omega_c^n}$。

将(9) 式取代(5) 式。在粒子推动过程中应用(3)、(9)、(6) 三式,就是我们得到的求解 Lorentz 方程的改进型 Borris 旋动粒子格式。

3 与 Borris 旋动方法的比较

选择一组强激光与等离子体相互作用粒子模拟中常用的参数:设入射激光为线极化,波长为 $\lambda_{\text{laser}} = 1.06\mu\text{m}$,强度为 I,则激光磁场为 $B = \sqrt{\frac{8\pi I}{c}}$。设电子动能为 $E_k = 10^5\text{eV}$,则电子相对论因子为 $\gamma = 1 + \frac{E_k}{m_e c^2} \approx 1.2$。根据推动电磁场的有限时域差分法对空间、时间步长的要求,取 $\mathrm{d}x = \frac{\lambda_{\text{laser}}}{10}$,$\mathrm{d}t = \frac{dx}{\sqrt{2}c} \approx 2.5\times10^{-16}\text{s}$(以二维为例)。电子静电量为 $e = 4.8\times10^{-10}\text{C}$,质量为 $m_e = 9.11\times10^{-28}\text{g}$,光速 $c = 3.0\times10^8\text{cm/s}$,则 $t = \frac{eB\mathrm{d}t}{2\gamma m_e c} \approx 1.8\times10^{-9}B$。考虑最低要求 $\delta_c = t_c^3/3 = 1$,得到对应于 B_c 的 $I_c = 7.64\times10^{19}\text{W/cm}^2$。这表明,当入射激光强度 $I \leqslant I_c$ 时,Borris 旋动方法推动粒子引入的误差 $\delta \leqslant 1$,仍然适用。当入射激光强度 $I > I_c$ 时,必须用改进型 Borris 旋动方法,才能精确地描述粒子的运动。

从另一方面来看,当入射激光强度 $I > I_c$ 时,如果采用改进前的 Borris 旋动方法来推动粒子,则要求选取更小的时间步长,才能满足 $\delta \leqslant 1$。这比有限时域差分法对时间步长的要求要苛刻得多。缩小时间步长,意味着模拟同样时间尺度的物理过程需要增加循环次数,这样会消耗更多计算量。

4 与直接求解 Lorentz 差分方程方法的比较

在粒子模拟程序编制中,还可以根据直接求解 Lorentz 差分方程得到粒子推动格式。粒子模拟程序 PPICC[7] 和 PLASIM[8] 均采用这种格式,如下式(文献[7] 中的(6) 式) 所示(不包含电场推动部分):

$$\begin{cases} u_x^+ = [(1+\delta_x^2-\delta_y^2-\delta_z^2)u_x^- + 2(\delta_z+\delta_x\delta_y)u_y^- + 2(-\delta_y+\delta_x\delta_z)u_z^-]/A \\ u_y^+ = [2(-\delta_z+\delta_x\delta_y)u_x^- + (1-\delta_x^2+\delta_y^2-\delta_z^2)u_y^- + 2(\delta_x+\delta_y\delta_z)u_z^-]/A \\ u_z^+ = [2(\delta_y+\delta_x\delta_z)u_x^- + 2(-\delta_x+\delta_y\delta_z)u_y^- + (1-\delta_x^2-\delta_y^2+\delta_z^2)u_z^-]/A \end{cases} \tag{11}$$

其中,$\delta_i = \frac{q\mathrm{d}t}{2\gamma^n mc}\cdot B_i^n(i = x,y,z)$,$A = 1+\delta_x^2+\delta_y^2+\delta_y^2$。

(11) 式中的 δ_i 等于本文中的$\frac{\omega_{ci}^n\mathrm{d}t}{2}$。设 $\omega_{ci}^n(i = x,y,z)$ 已知,下面比较(10) 式和(11) 式的计算量。(10) 式包括 13 次乘法、1 次除法、2 次三角函数;(11) 式包括 24 次乘法、3 次除法。显然,(10) 式的计算量小于(11) 式的计算量。在一次粒子模拟中,往往要追踪几十万个甚至几百万个粒子的运动,则总的计算量的减少是相当可观的。

5 结 语

我们改进了 Borris 旋转方法,用于精确求解粒子相对论 Lorentz 运动方程。与改进前的 Borris 旋动方法相比,本方法具有精度高、对时间步长要求低的优点;与直接求解 Lorentz 差分方程的方法相比,该方法具有计算量小的优点。推动粒子是粒子模拟过程中最耗时的环节,减少这个环节的计算量,对于提高粒子模拟程序的计算效率具有重要的意义。总之,在粒子模拟程序中采用本改进型 Borris 旋动粒子的方法,可以精确高效地描述粒子的相对论动力学行为,尤其适合于模拟有强磁场的情况,如超强激光与等离子体的相互作用过程。

参 考 文 献:

[1] Dawson J M. Particle Simulation of Plasmas[J]. Rev. Mod. Phys, 1983, 55 (2): 403.

[2] Birdsall C K. Plasma Physics via Computer Simulation[M]. New York: McGraw-Hill Book Company, 1985.

[3] Maine P, et al. Generation of Ultra-high Peak Power Pulse by Chirped-pulse Amplification[J]. IEEE. J. Quantum. Electron., 1988, QE - 24: 398.

[4] Umstadter D. Review of Physics and Applications of Relativistic Plasmas Driven by Ultra-intense Lasers[J]. Phys. Plasmas, 2001, 8(5): 1774.

[5] Kruer W L. Interaction of Plasmas with Intense Lasers[J]. Phys. Plasmas, 2000, 7: 2270.

[6] 刘大庆,等. 二维等离子体粒子模拟程序介绍[J]. 计算物理,1998, 15: 641.

[7] 徐涵,等. 2 - 1/2 维等离子体粒子模拟分布式并行程序设计[J]. 计算物理,2002, 19: 305.

[8] 马燕云,等. 激光等离子体相互作用的 2 - 1/2 维粒子模拟程序[J]. 计算物理,2002, 19: 311.