

УДК 532.593

О САМОДЕЙСТВИИ В МЕТОДЕ ЧАСТИЦ В ЯЧЕЙКАХ

В. А. Вшивков¹, А. В. Терехов¹

Рассмотрено влияние расчетной сетки на решение в методе частиц в ячейках. Показано, что решение существенно зависит от формы модельной частицы (ядра). Аналитически и численно проанализированы несколько ядер в одномерном случае, в том числе ядра с тремя и четырьмя узлами. Приведены результаты тестовых расчетов на примере одномерной задачи распада разрыва в дисперсионной среде. Предложена новая модификация ядра преобразования с пониженным самодействием. Работа выполнена при финансовой поддержке Новосибирского государственного университета (грант РНП.2.2.1.1.3653).

1. Введение. Полностью ионизованная бесстолкновительная плазма описывается системой уравнений, состоящей из кинетических уравнений Власова для функций распределения ионов и электронов

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_\alpha}{\partial \mathbf{r}} + \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathbf{H}] \right) \frac{\partial f_\alpha}{\partial \mathbf{v}} = 0$$

и уравнений Максвелла. Здесь индексом α обозначается тип частиц (ионы или электроны), $f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ — функция распределения частиц типа α , c — скорость света, \mathbf{r} — координата частицы, \mathbf{v} — скорость частицы, t — время, q_α и m_α — заряд и масса частиц, \mathbf{E} и \mathbf{H} — напряженности электрического и магнитного полей. Плотность заряда $\rho(\mathbf{r}, t)$ и плотность тока $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$, используемые в уравнениях Максвелла, определяются по формулам $\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_\alpha q_\alpha \int f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}$ и $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \sum_\alpha q_\alpha \int \mathbf{v} f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}$.

Метод частиц в ячейках был предложен в 50-х годах прошлого века и в настоящее время широко используется при решении задач физики плазмы [1–4]. В методе частиц плазма представляется набором достаточно большого числа модельных частиц, траектории которых являются характеристиками уравнения Власова. Частицы движутся в соответствии с законами классической механики в самосогласованном электромагнитном поле, определяемом из уравнений Максвелла. Необходимые для решения этих уравнений плотности зарядов и токов определяются в узлах пространственной сетки. Использование точечных модельных частиц, ввиду их малочисленности, приводит к большим флуктуациям сеточных плотностей, поэтому в методе применяются частицы, имеющие пространственный размер.

Размер и распределение плотности заряда внутри частицы описываются в одномерном случае с помощью некоторой симметричной положительной кусочно-гладкой функции $R(x) \geq 0$ с конечным носителем (здесь x — расстояние от узла до частицы). Требование сохранения заряда каждой частицы накладывает на функцию $R(x)$ условие

$$\int R(x) dx = 1. \quad (1)$$

Для вычисления плотности заряда в узлах сетки вводится сеточное ядро [1], связанное с функцией $R(x)$

формулой $\bar{R}(x) = \frac{1}{h} \int_{-h/2}^{h/2} R(x-x') dx'$, где h — шаг сетки. Функция $\bar{R}(x) \geq 0$ также является симметричной

кусочно-гладкой функцией, удовлетворяющей условию (1) и условию

$$\sum_k \bar{R}(x_k - x) = \frac{1}{h} \quad (2)$$

для любого x . Здесь $x_k = kh$ ($k = 0, 1, \dots, K$) — координаты узлов сетки, а суммирование ведется по всем узлам.

¹ Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, просп. акад. М. А. Лаврентьева, 6, 630090, Новосибирск; e-mail: vsh@ssd.sccc.ru, Tomcat_andrew@mail.ru

В этих обозначениях плотность заряда в узлах сетки определяется по формуле

$$\rho_k = \sum_{j=1}^J q_j \bar{R}(x_k - x_j), \tag{3}$$

где x_j, q_j — координата и заряд модельной частицы с номером j и J — количество частиц.

В методе частиц ядро преобразования характеризует геометрическую форму и размер частицы, а также распределение плотности заряда в пространстве. В качестве ядра можно выбрать любую нормированную непрерывную функцию с конечным носителем, которая проводит сглаживание сил и устраняет близкие взаимодействия (соударения), не играющие существенной роли в разреженной плазме. Первой и простейшей моделью частиц была модель NGP (nearest-grid-point model, модель ближайшего узла), предложенная в [5, 6]. Позднее появились модификации, известные в литературе под названием PIC (particle-in-cell, частицы в ячейках [7]) и CIC (cloud-in-cell, облака в ячейках [8]).

Ядро PIC получило наибольшее распространение вследствие недостаточной вычислительной мощности компьютеров, на которых проводились расчеты 10–15 лет назад. По этой причине невозможно было использовать ядра, которые размывали бы заряд на три узла и более. Однако развитие параллельных суперкомпьютеров, обладающих значительными вычислительными ресурсами, дало возможность решать сложные трехмерные задачи и исследовать процессы с разными временными и пространственными масштабами. Выбор оптимального ядра при этом является одной из важнейших задач, возникающих при реализации метода частиц. В работе [9] показано, что саморазогрев в ансамбле крупных частиц модельной плазмы связан с особой погрешностью аппроксимации силы, действующей на каждую частицу, и предложен новый вид ядер, существенно уменьшающий эту погрешность. Большие пространственные сетки позволяют в настоящее время использовать ядра, имеющие больший пространственный размер и требующие большее количество арифметических операций при работе с каждой частицей. Это приводит к необходимости исследования свойств новых ядер при моделировании процессов в плазме. На сегодняшний день актуальна проблема выбора ядра преобразования для метода частиц, когда количество узлов сетки измеряется сотнями тысяч, а число частиц составляет сотни миллионов. В настоящей статье аналитически и численно проанализированы несколько ядер в одномерном случае.

2. Ядра. Рассмотрим следующие ядра: PIC [2], параболическое [14], кубическое, VSP [11] и D-параболическое.

2.1. PIC-ядро. В модели PIC заряд каждой частицы распределяется с помощью обратной линейной интерполяции между двумя ближайшими узлами сетки в одномерном случае и обратной билинейной интерполяции между четырьмя ближайшими узлами сетки в двумерном случае. Одномерное PIC-ядро

может быть задано в виде функции $R(x) = \begin{cases} 0, & |x| > \frac{h}{2}, \\ \frac{1}{h}, & |x| \leq \frac{h}{2}. \end{cases}$ Сеточное ядро имеет вид

$$\tilde{R}(x) = \begin{cases} 0, & |x| \geq h, \\ \frac{1}{h} \left(1 - \frac{|x|}{h}\right), & |x| < h. \end{cases} \tag{4}$$

2.2. VSP-ядро. Специфической погрешностью метода частиц, связанной с сеткой, является существование самодействия, т.е. “силы”, с которой частицы воздействуют на себя через сетку. В [4] показано, что даже если точно решать уравнение Пуассона и затем точно определять величину электрического поля, то возникает сила, обусловленная интерполяцией заряда между лагранжевой частицей и эйлеровой сеткой, которая на лагранжевом этапе отталкивает частицу от узлов сетки. Эта сила и называется самосилой. В [11] предлагается новая модель частиц, которая существенно уменьшает самосилу.

Одномерное VSP-ядро с пониженным самодействием задается формулой $R(x) = \begin{cases} 0, & |x| < \frac{h}{2}, \\ \frac{1}{2h}, & \frac{h}{2} \leq |x| \leq \frac{3}{2}h, \\ 0, & |x| > \frac{3}{2}h. \end{cases}$

Формула для сеточного ядра имеет вид $\tilde{R}(x) = \begin{cases} \frac{|x|}{2h^2}, & |x| < h, \\ \frac{1}{h} - \frac{|x|}{2h^2}, & h \leq |x| \leq 2h, \\ 0, & |x| > 2h. \end{cases}$

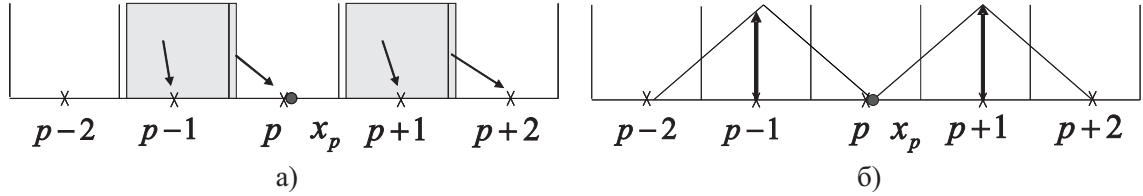


Рис. 1. VSP-ядро (а), сеточное VSP-ядро (б)

Несмотря на сложность этого ядра (рис. 1), количество операций при вычислении плотности заряда увеличивается незначительно, так как вычисления проводятся в два этапа. Сначала вычисляется промежуточная плотность заряда $\tilde{\rho}_\alpha$ по обычной PIC-модели с сеточным ядром (4), а затем находится окончательное значение $\rho_\alpha = \frac{1}{2}(\tilde{\rho}_{\alpha+1} + \tilde{\rho}_{\alpha-1})$.

2.3. Кубическое и параболическое ядра. Уравнения, налагающие условия на вид функции распределения заряда, порождают иерархию схем, обладающих тем свойством, что чем больше узлов сетки участвуют в распределении заряда, тем быстрее уменьшаются погрешности с увеличением расстояний от исходного заряда [2]. Однако, несмотря на то, что у схем высших порядков локализация ошибок выражена сильнее, эти схемы могут оказаться не лучше схем более низкого порядка, если флуктуации силы на малых расстояниях между частицами велики. Применительно к распределению заряда критерий гладкости требует, чтобы в каждом узле величина приписанного ему заряда и ее производная при движении частицы изменялась непрерывно. Достижимая степень гладкости определяется количеством используемых узлов.

Здесь мы рассмотрим ядра с тремя и четырьмя узлами, которые описываются полиномами второй (параболическое ядро) и третьей степени (кубическое ядро) соответственно. Параболическое ядро имеет непрерывную первую производную, а кубическое ядро — вторую. Сеточное параболическое ядро имеет вид

$$\tilde{R}(x) = \begin{cases} \frac{1}{2h^3} \left(x + \frac{3}{2}h\right)^2, & -\frac{3}{2}h \leq x \leq -\frac{h}{2}, \\ \frac{1}{h} - \frac{1}{h^3} \left(x^2 + \frac{h^2}{4}\right), & -\frac{h}{2} < x < \frac{h}{2}, \\ \frac{1}{2h^3} \left(x - \frac{3}{2}h\right)^2, & \frac{h}{2} \leq x \leq \frac{3}{2}h, \\ 0, & |x| > \frac{3}{2}h. \end{cases} \quad (5)$$

Сеточное кубическое ядро представляется в форме $\tilde{R}(x) = \begin{cases} \frac{(x+2h)^3}{6h^4}, & -2h \leq x \leq -h, \\ -\frac{3x^3 + 6x^2h - 4h^3}{6h^4}, & -h \leq x \leq 0, \\ \frac{3x^3 - 6x^2h + 4h^3}{6h^4}, & 0 \leq x \leq h, \\ -\frac{(x-2h)^3}{6h^4}, & h \leq x \leq 2h, \\ 0, & |x| > 2h. \end{cases}$

2.4. D-параболическое ядро. Это ядро (рис. 2) обладает пониженным самодействием и имеет непрерывную первую производную, что должно приводить к меньшим флуктуациям плотности по сравнению с VSP-ядром.

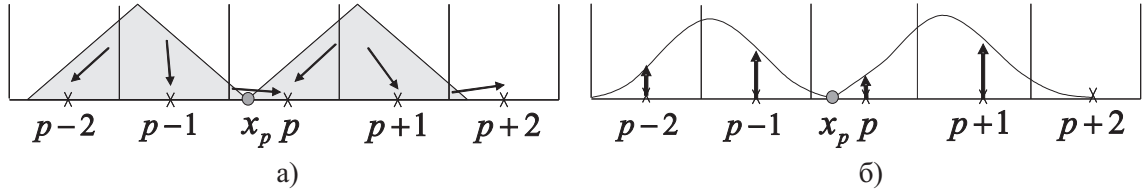


Рис. 2. D-параболическое ядро (а), сеточное D-параболическое ядро (б)

Сеточное D-параболическое ядро имеет вид $\tilde{R}(x) = \begin{cases} \frac{1}{2h^3} \left(x^2 + \frac{h^2}{4} \right), & |x| < \frac{h}{2}, \\ \frac{3}{8h} - \frac{1}{2h^3} (h - |x|)^2, & \frac{h}{2} \leq |x| \leq \frac{3h}{2}, \\ \frac{1}{4h^3} \left(\frac{5}{2}h - |x| \right)^2, & \frac{3h}{2} < |x| < \frac{5h}{2}, \\ 0, & |x| \geq \frac{5}{2}h. \end{cases}$

Вычисление плотности в узлах сетки выполняется в два этапа. Сначала вычисляется промежуточная плотность заряда $\tilde{\rho}_\alpha$ по модели параболического ядра с сеточным ядром (5). Затем находится окончательное значение $\rho_\alpha = \frac{1}{2}(\tilde{\rho}_{\alpha+1} + \tilde{\rho}_{\alpha-1})$.

3. Вычисление самодействия частиц. Вычислим величину электрического поля, действующую на частицу, расположенную между узлами сетки, при отсутствии других частиц. В одномерном случае электрический потенциал φ определяется из уравнения $\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -4\pi\rho$, где ρ — плотность заряда, а напряженность электрического поля E вычисляется по формуле $E = -\frac{\partial \varphi}{\partial x}$. На сетке с равномерным шагом h эти соотношения аппроксимируются со вторым порядком конечно-разностными выражениями

$$\frac{\varphi_{i+1} - 2\varphi_i + \varphi_{i-1}}{h^2} = -4\pi\rho_i, \tag{6}$$

$$E_{i-1/2} = -\frac{\varphi_i - \varphi_{i-1}}{h}, \tag{7}$$

где ρ_i определяется из формулы (3). Поскольку потенциал φ_i определяется в узлах сетки, то будем считать, что на отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ значение электрического поля постоянно и определяется формулой (7). Выражение (6) можно записать в виде

$$E_{i+1/2} - E_{i-1/2} = 4\pi h \rho_i, \tag{8}$$

откуда следует, что в соседних ячейках поле одинаково, если в узле между ними плотность заряда равна нулю.

Рассмотрим частицу, находящуюся в ячейке $[x_{i-1}, x_i]$ и имеющую координату $x_j = x_{i-1} + \delta h$, где $0 \leq \delta \leq 1$. По любой из моделей ее заряд q распределяется между несколькими соседними узлами, но сумма плотностей будет всегда иметь вид $\sum_i \rho_i = \sum_i q\bar{R}(x_i - x_j) = q \sum_i \bar{R}(x_i - x_j) = q/h$, что следует из формулы (2). Просуммируем формулы (8) по тем ячейкам, в которых плотность заряда не равна нулю, и обозначим $\gamma = 2\pi q$. Получим

$$\sum_i (E_{i+1/2} - E_{i-1/2}) = E_{\max} - E_{\min} = 4\pi q h \sum_i \bar{R}(x_i - x_j) = 4\pi q = 2\gamma.$$

Очевидно, что слева от узлов, где плотность от заряда не равна нулю, значение напряженности электрического поля можно положить равным $E_{i-1/2} = E_{\min} = -\gamma$, а справа — $E_{i-1/2} = E_{\max} = \gamma$. После этого значения электрического поля во всех ячейках легко определяются по формуле (8).

Теперь определим значение электрического поля $E_{i-1/2}$ в ячейке, в которой находится частица. В методе с ядром PIC частица дает вклад в плотности только двух соседних узлов:

$$\rho_{i-1} = q\bar{R}(x_{i-1} - x_j) = \frac{q}{h} (1 - \delta), \quad \rho_i = q\bar{R}(x_i - x_j) = \frac{q}{h} \delta,$$

а электрическое поле выражается в форме

$$E_{i-1/2} = E_{i-3/2} + 4\pi h \rho_{i-1} = -\gamma + 4\pi q(1 - \delta) = \gamma(1 - 2\delta),$$

т.е. в зависимости от положения частицы в ячейке поле линейно уменьшается от γ до $-\gamma$; только когда частица находится в середине ячейки ($\delta = 1/2$), на нее не действует никакая сила.

Если в ячейке находятся другие частицы, то рассматриваемая частица испытывает аналогичные искаженные силы, связанные с положением других частиц. Это означает, что увеличение числа частиц в ячейке с одновременным уменьшением заряда каждой частицы не приведет к уменьшению описанного самодействия частиц.

Вычислим интеграл $I = \int_0^1 |E| d\delta$ по ячейке от сил самодействия для ядра PIC и составим табл. 1

для сил самодействия, максимальных значений этих сил и интегралов модулей для всех рассматриваемых ядер.

Таблица 1

Ядро	Количество узлов	$E_{i-1/2}$	$\max(E)$	I
PIC	2	$\gamma(1 - 2\delta)$	γ	$\frac{1}{2} \gamma$
Параболическое	3	$\gamma \left[1 - \left(\delta + \frac{1}{2} \right)^2 \right]$	$\frac{3}{4} \gamma$	$\frac{5}{12} \gamma$
Кубическое	4	$\frac{1}{3} \gamma(2 - 3\delta - 3\delta^2 + 2\delta^3)$	$\frac{2}{3} \gamma$	$\frac{17}{48} \gamma$
VSP	4	0	0	0
D-параболическое	5	$\frac{1}{2} \gamma \left(\delta - \frac{1}{2} \right)$	$\frac{1}{8} \gamma$	$\frac{1}{24} \gamma$

Из табл. 1 следует, что величина самодействия частиц уменьшается с увеличением сложности формы частиц и их размера. Наилучшие показатели имеют двойные ядра (VSP и D-параболическое), однако первое из них имеет размер, равный четырем ячейкам, а второе — пяти, что затрудняет их использование на практике, особенно вблизи границы.

4. Модельная задача. В силу существенной нелинейности уравнения Власова для него не существует аналитических решений для содержательных постановок задач. Поэтому естественным представляется подбор тестов для исследования ядер с помощью численных методов.

Рассмотрим в качестве модельной одномерную задачу о распаде разрыва в дисперсионной среде неизотермической разреженной плазмы с бoльцмановским распределением для электронов [10]. Кинетическая постановка задачи имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial x} + v \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{e}{m_i} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial v} = 0, \quad (9)$$

$$\beta \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \exp(\varphi) - \rho, \quad E = -\frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad F = qE, \quad \rho(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, v, t) dv,$$

где $\beta = (D/L)^2$, $D = (T/(4\pi e^2 n_0))^{1/2}$, L — длина области интегрирования, потенциал φ выражен в единицах T/e , скорость ионов v — в единицах $C_s = (T/m_i)^{1/2}$, T — температура электронов, n — плотность ионов.

Уравнение Власова в форме (9) решается методом частиц. Решение нелинейного уравнения Пуассона определяется как предел последовательности φ^s решений линейного уравнения $\beta \frac{\partial^2 \varphi^{(s+1)}}{\partial x^2} = \exp(\varphi^s) (1 + \varphi^{s+1} - \varphi^s - n)$. Это уравнение решается методом прогонки, и итерационный процесс продолжается до выполнения условия $\max_x |\varphi^{s+1} - \varphi^s| < 10^{-6}$.

Известно [10], что для описания распада разрыва в плазме при малых амплитудах ($\varphi \leq 1.26$) можно использовать гидродинамическую модель

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(nu)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2} u^2 + \varphi \right) = 0, \quad (10)$$

которая замыкается уравнением Пуассона

$$\beta \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \exp(\varphi) - n. \quad (11)$$

Поставим следующие начальные и краевые условия:

$$n(x, 0) = 1 + \frac{C - 1}{1 + \exp[l(x - x_0)]}, \quad u(x, 0) = 0, \quad (12)$$

$$\varphi(x, 0) = \varphi_0 = \ln C, \quad \varphi(L, t) = 0, \quad u(0, t) = u(L, t) = 0. \quad (13)$$

Здесь C — верхняя граница для амплитуды плотности, l — показатель сглаживания разрыва и x_0 — положение разрыва.

Система уравнений (10), (11) с учетом граничных условий (13) допускает закон сохранения энергии

$$W = \int_0^L \left[\frac{1}{2} nu^2 + \frac{1}{2} \beta \varphi_x^2 + \exp(\varphi)(\varphi - 1) \right] dx = \text{const}, \quad (14)$$

где постоянная интегрирования определяется начальными условиями (12). Следует отметить, что этот закон сохранения энергии с учетом других обозначений справедлив и для кинетической модели (9).

Применимость гидродинамического подхода (10) для ионов объясняется тем, что фазовая скорость волны ω/k с частотой ω и волновым числом k значительно больше тепловой скорости ионов $(T_i/M)^{1/2}$, но меньше тепловой скорости электронов $(T_e/M)^{1/2}$. В этом случае ионы можно описать уравнением движения. В эйлеровой системе координат это не что иное как гидродинамика с нулевой температурой. Так как электроны двигаются гораздо быстрее волны, то ее электрическое поле по отношению к электронам будет квазистатическим. Тогда если в области электронов потенциал φ максимален и распределение электронов по скоростям является максвелловским: $f \sim \exp\left(-\frac{mv^2}{2T}\right)$, то плотность электронов в любом месте описывается распределением Больцмана $n = n_0 \exp\left(\frac{e\varphi}{T}\right)$. Мы ограничимся рассмотрением волн, значительно превышающих дебаевский радиус a , а значит электрическое поле можно не включать в систему уравнений. Отметим, что ионные волны не существуют при амплитуде потенциала выше критического значения $\varphi \leq 1.26$ [10]. При увеличении амплитуды потенциала наступает момент, когда движение становится многопоточковым и гидродинамический подход перестает быть справедливым.

Для получения численного решения систем уравнений (10) используется схема типа предиктор-корректор с порядком аппроксимации $O(h^2 + \tau^2)$ [12, 13]. Схема имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{2(u^{m+1/2} - u^m)}{\tau} + \Lambda \left(\frac{1}{2} u^2 + \varphi \right)^m &= 0, & \frac{2(n^{m+1/2} - n^m)}{\tau} + \Lambda(nu)^m &= 0, \\ \frac{2(u^{m+1} - u^m)}{\tau} + \Lambda \left(\frac{1}{2} u^2 + \varphi \right)^{m+1/2} &= 0, & \frac{2(n^{m+1} - n^m)}{\tau} + \Lambda(nu)^{m+1/2} &= 0, \end{aligned}$$

где $\Lambda f \equiv \frac{f_{k+1} - f_{k-1}}{2h}$. Для оценки точности метода частиц использовано решение, полученное из гидродинамической модели с применением более подробной сетки.

5. Вычислительные эксперименты.

5.1. Одномерная задача в отсутствие шума.

5.1.1. Тест 1. Сравним решения, полученные с использованием гидродинамической и кинетической моделей. Уравнения (10), (11) с начальными и краевыми условиями (12), (13) решены с помощью схемы предиктор-корректор с шагами по пространству $h = 10^{-3}$ и по времени $\tau = 10^{-5}$ при $C = 3$, $t = [0, 0.5]$ (рис. 3).

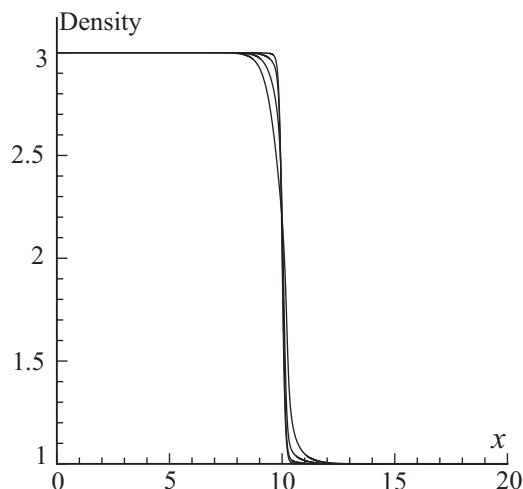


Рис. 3. Гидродинамическая модель, $t = 0, \dots, 0.5$

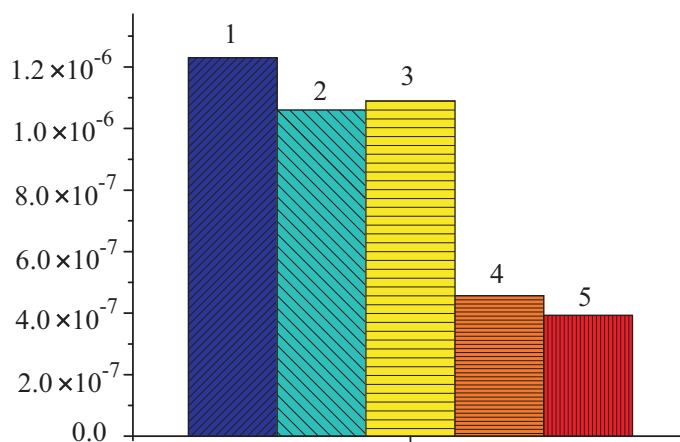


Рис. 4. Метод частиц. Несохранный энергия ($t = 0.5$). Исследуемые ядра: 1 — PIC, 2 — параболическое, 3 — кубическое, 4 — VSP, 5 — D-параболическое

Таблица 2

Зависимость точности от выбора ядра (тест 1)

Ядро	C	L_2
PIC	3.68×10^{-2}	2.33×10^{-1}
Параболическое	4.10×10^{-3}	2.14×10^{-2}
Кубическое	5.65×10^{-4}	2.38×10^{-3}
VSP	1.37×10^{-2}	1.19×10^{-1}
D-параболическое	1.45×10^{-3}	8.87×10^{-3}

Таблица 3

Зависимость точности от выбора ядра (тест 2)

Ядро	C	L_2
PIC	3.56×10^{-3}	4.33×10^{-2}
Параболическое	1.05×10^{-4}	1.60×10^{-3}
Кубическое	2.95×10^{-5}	2.61×10^{-4}
VSP	1.19×10^{-3}	1.32×10^{-2}
D-параболическое	2.22×10^{-4}	1.42×10^{-3}

Уравнение Власова (9) с начальными и краевыми условиями (12), (13) решается методом частиц со следующими параметрами расчета: количество частиц $N = 25\,000$, $h = 10^{-3}/3$, $\tau = 10^{-4}/3$, $C = 3$ и $t = 0.5$. В табл. 2 приведены значения относительной погрешности плотности в норме C и абсолютной погрешности в норме L_2 . Погрешность сохранения полной энергии, задаваемой формулой (14), приведена на рис. 4.

Из полученных результатов следует, что наиболее точное решение вычисляется при использовании кубического ядра преобразования. Полная энергия лучше всего сохраняется в случае VSP-ядра и D-параболического ядра.

5.1.2. Тест 2. Увеличим количество частиц в четыре раза по сравнению с тестом 1 и проанализируем точность решения и степень выполнения закона сохранения энергии в методе частиц, оставив остальные параметры без изменения. В табл. 3 приведены значения относительной погрешности в норме C и абсолютной погрешности в норме L_2 . Погрешность сохранения полной энергии приведена на рис. 5.

Увеличение количества частиц до $N = 100\,000$ привело к увеличению точности приблизительно в 10 раз для всех ядер. При этом решение, получаемое с помощью кубического ядра преобразования, наиболее точное. Однако при этом полная энергия лучше сохраняется при использовании VSP-ядра и D-параболического ядра.

5.1.3. Тест 3. Сравним решения, получен-

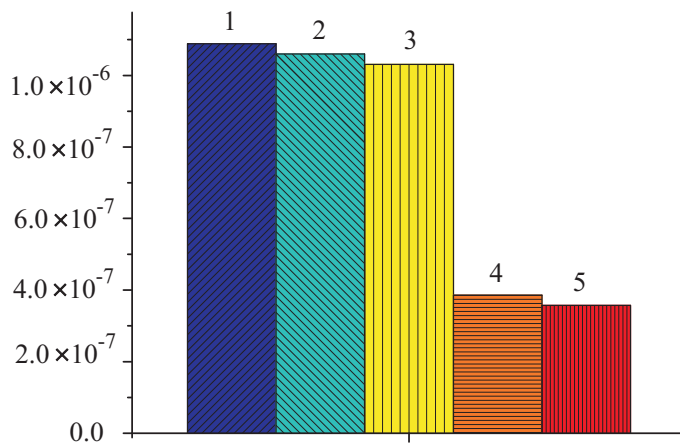


Рис. 5. Метод частиц. Несохранный энергия ($t = 0.5$). Исследуемые ядра: 1 — PIC, 2 — параболическое, 3 — кубическое, 4 — VSP, 5 — D-параболическое

ные с использованием гидродинамической и кинетической моделей при параметрах $\tau = 10^{-5}$, $h = 10^{-3}$, $C = 3$ и $t = [0, 1.75]$ для гидродинамической модели и $\tau = 10^{-4}/3$, $h = 10^{-2}/3$, $C = 3$, $t = 1.75$ и $N = 25\,000$ для метода частиц. Решение для гидродинамической модели приведено на рис. 6. Цель данного теста — выяснить, какова степень размазывания решения у каждого ядра. В табл. 4 приведены значения относительной погрешности в норме C и абсолютной погрешности в норме L_2 . Погрешность сохранения полной энергии приведена на рис. 7.

В соответствии с полученными результатами можно сделать вывод о том, что наиболее точное решение получается при использовании кубического ядра преобразования.

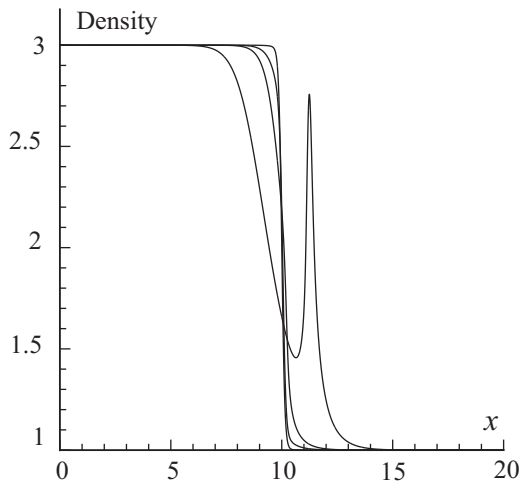


Рис. 6. Гидродинамическая модель, $t = 0, \dots, 1.75$

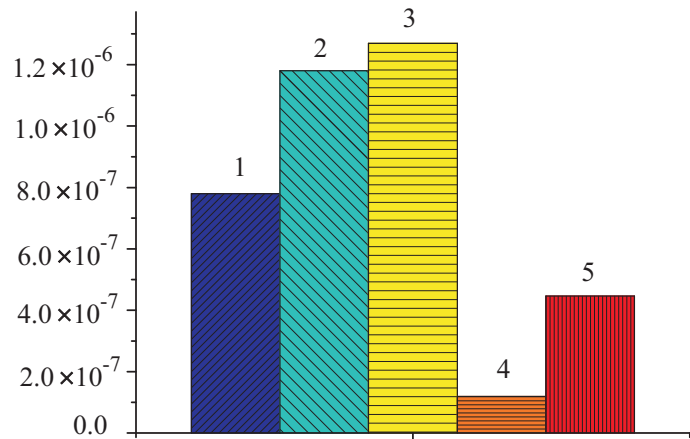


Рис. 7. Метод частиц. Несохранившаяся энергия ($t = 1.75$). Исследуемые ядра: 1 — PIC, 2 — параболическое, 3 — кубическое, 4 — VSP, 5 — D-параболическое

Таблица 4

Зависимость точности от выбора ядра (тест 3)

Ядро	C	L_2
PIC	3.76×10^{-2}	3.38×10^{-1}
Параболическое	4.11×10^{-3}	2.81×10^{-2}
Кубическое	5.45×10^{-4}	4.00×10^{-3}
VSP	1.44×10^{-2}	2.70×10^{-1}
D-параболическое	3.94×10^{-3}	2.52×10^{-2}

Таблица 5

Зависимость точности от выбора ядра (тест 4)

Ядро	C	L_2
PIC	6.02×10^{-3}	5.91×10^{-2}
Параболическое	2.82×10^{-4}	2.58×10^{-3}
Кубическое	4.22×10^{-4}	2.35×10^{-3}
VSP	3.81×10^{-3}	3.41×10^{-2}
D-параболическое	3.84×10^{-3}	2.06×10^{-2}

5.1.4. Тест 4. Проведем аналогичный расчет методом частиц при $N = 100\,000$, остальные параметры оставим без изменения. В табл. 5 приведены значения относительной погрешности в норме C и абсолютной погрешности в норме L_2 . Погрешность сохранения полной энергии приведена на рис. 8.

В соответствии с полученными результатами наиболее точное решение получается при использовании параболического ядра преобразования. В случае когда имеются большие градиенты плотности, использование ядер, раздающих заряд на небольшое количество узлов (не более трех), дает более точное решение.

5.2. Одномерная задача с максвелловским распределением по скоростям для ионов. До сих пор мы рассматривали модельную задачу с нулевым начальным распределением по скоростям для ионов.

Возьмем в качестве модельной задачу о распаде разрыва в дисперсионной среде с максвелловским распределением по скоростям для ионов и электронов. Пространственное распределение электронов является бoльцмановским. Кинетическая постановка задачи описывается уравнением (9).

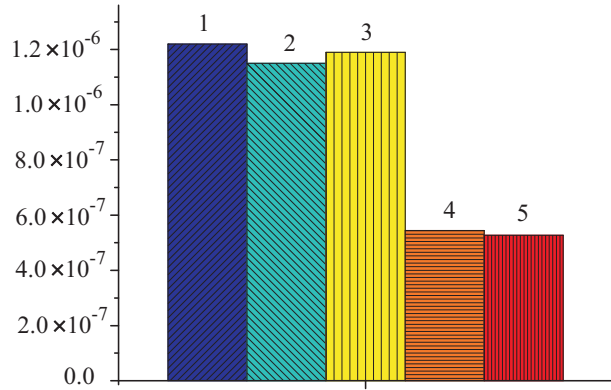


Рис. 8. Метод частиц. Несохраненная энергия ($t = 1.75$). Исследуемые ядра: 1 — PIC, 2 — параболическое, 3 — кубическое, 4 — VSP, 5 — D-параболическое

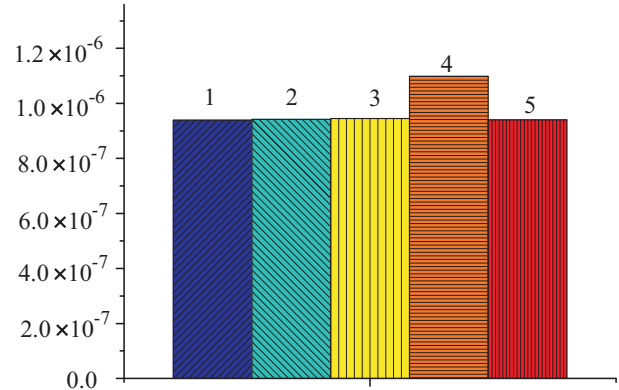


Рис. 9. Метод частиц. Несохраненная энергия ($t = 1.0$). Исследуемые ядра: 1 — PIC, 2 — параболическое, 3 — кубическое, 4 — VSP, 5 — D-параболическое

Поставим следующие начальные и краевые условия:

$$\rho_0(x) = 1 + \frac{C-1}{1 + \exp[l(x-x_0)]}, \quad f(x, v, 0) = \rho_0(x) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-(v-v_0)^2/(2\sigma^2)} \right),$$

$$\varphi(x, 0) = \varphi_0 = \ln C, \quad \varphi(L, t) = 0,$$

$$f(0, v, t) = \rho_0(0) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-(v-v_0)^2/(2\sigma^2)} \right), \quad f(L, v, t) = \rho_0(L) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-(v-v_0)^2/(2\sigma^2)} \right),$$

$$f(x, -4, t) = f(x, 4, t) = 0,$$

где v_0 и σ — математическое ожидание и дисперсия скорости соответственно. Для получения численного решения уравнения Власова (9) с указанными начальными и краевыми условиями воспользуемся явной конечно-разностной схемой

$$\frac{f_{i,k}^{n+1} - f_{i,k}^n}{\tau} + v_{i,k}^n \Delta f_x + E_i^n \Delta f_v = 0,$$

где

$$\Delta f_x = \begin{cases} \frac{f_{i,k}^n - f_{i-1,k}^n}{h_x}, & v_{i,k}^n > 0, \\ \frac{f_{i+1,k}^n - f_{i,k}^n}{h_x}, & v_{i,k}^n < 0, \end{cases} \quad \Delta f_v = \begin{cases} \frac{f_{i,k}^n - f_{i,k-1}^n}{h_v}, & E_i^n > 0, \\ \frac{f_{i,k+1}^n - f_{i,k}^n}{h_v}, & E_i^n < 0, \end{cases} \quad E_i^n = \frac{\varphi_{i-1}^n - \varphi_i^n}{h_x}, \quad \rho_i^n = h_v \sum_k f_{i,k}^n.$$

Схема имеет первый порядок аппроксимации по времени и пространству и является устойчивой при выполнении условия Куранта $v\tau/h < 1$. Сравним решения, полученные с использованием этой схемы с шагами по пространству $h_x = 10^{-2}/8$, $h_v = 10^{-2}/8$ и по времени $\tau = 10^{-4}/8$ и метода частиц при $h = 10^{-2}$, $\tau = 10^{-4}$, $N = 800\,000$.

В табл. 6 приведены значения относительной погрешности значения плотности в норме C и абсолютной погрешности в норме L_2 . Погрешность сохранения полной энергии приведена на рис. 9.

В соответствии с полученными решениями для тестовой задачи с максвелловским распределением по скоростям для ионов следует, что наиболее точное решение получается при использовании VSP и D-параболического ядер преобразования. Полная энергия при всех ядрах сохраняется практически с одинаковой точностью.

6. Выводы. На примере задачи распада разрыва в дисперсионной среде аналитически и численно исследованы свойства следующих ядер преобразования:

Таблица 6
Зависимость точности от выбора ядра

Ядро	C	L_2
PIC	1.62×10^{-1}	3.30
Параболическое	1.55×10^{-1}	2.94
Кубическое	1.44×10^{-1}	2.69
VSP	9.38×10^{-2}	1.92
D-параболическое	9.05×10^{-2}	1.81

PIC, VSP, кубическое и параболическое. Предложено D-параболическое ядро как новая модификация VSP-ядра. Получены оценки величины самосилы для всех ядер в одномерном случае. Показано, что нулевой самосилой обладает VSP-ядро. Наибольшая самосила присуща, как и ожидалось, PIC-ядру.

В рамках численных экспериментов было проведено сравнение решений, получаемых с помощью гидродинамического описания (в той области параметров, при которых гидродинамика является справедливой) и кинетического. Решения, соответствующие гидродинамической модели, были рассчитаны с помощью конечно-разностных методов. Это позволило исключить из гидродинамического решения численный шум и обеспечить лучшую точность по сравнению с методом частиц при одних и тех же параметрах. Повышенная точность гидродинамического решения была достигнута путем существенного увеличения числа узлов сетки. Все эти факторы позволили принять гидродинамические решения как “точные” и сравнить их с решениями, полученными PIC-методом.

Подводя общий итог проделанной работы по выбору ядер преобразования для метода частиц можно сделать следующие выводы:

— при отсутствии физического шума в задаче распада разрыва наиболее точное решение получается при использовании кубического и параболического ядер;

— точность полученного решения и степень сохранения полной энергии системы слабо коррелируют; следовательно, нельзя судить о точности решения по степени выполнения закона сохранения энергии;

— если распределение по скоростям является максвелловским, то наиболее точное решение вычисляется с использованием VSP-ядра и D-параболического ядра.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Березин Ю.А., Вишков В.А.* Метод частиц в динамике разреженной плазмы. Новосибирск: Наука, 1980.
2. *Хокни Р., Иствуд Дж.* Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987.
3. *Бэдсел Ч., Ленгдон А.* Физика плазмы и численное моделирование. М.: Энергоатомиздат, 1989.
4. *Григорьев Ю.Н., Вишков В.А., Федорук М.П.* Численное моделирование методами частицы-в-ячейках. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2004.
5. *Hockney R.W.* A computer experiment of anomalous diffusion // *Phys. Fluids.* 1966. **9**, N 9. 1826–1835.
6. *Burger P., Dunn D.A., Halstead A.S.* Computer experiments on the randomization of electrons in a collisionless plasma // *Phys. Fluids.* 1965. **8**, N 12. 2263–2272.
7. *Morse R.L., Neilson C.W.* Numerical simulation of warm two-beam plasma // *Phys. Fluids.* 1969. **12**, N 11. 2418–2425.
8. *Birdsall C.K., Fuss D.* Clouds in clouds, clouds-in-cell physics for many-body plasma simulation // *J. Comp. Phys.* 1969. **3**, N 4. 494–511.
9. *Вишков В.А., Снытников В.Н.* О методе частиц для решения кинетического уравнения Власова // *Журн. вычислит. матем. и матем. физики.* 1998. **38**, № 11. 1877–1883.
10. *Сагдеев Р.З.* Коллективные процессы и ударные волны в разреженной плазме // *Вопросы теории плазмы.* Вып. 4. М.: Атомиздат, 1964. 20–80.
11. *Вишков В.А., Романов Д.В., Снытников В.Н.* Проблема саморазогрева модельной плазмы в методе частиц // *Вычислительные технологии.* 1999. **4**, № 3. 62–72.
12. *Березин Ю.А., Вишков В.А.* О волновых процессах в неизотермической плазме // *Прикладная механ. и технич. физика.* 1973. № 1. 152–155.
13. *Рихтмайер Р., Мортон К.* Разностные методы решения краевых задач. М.: Мир, 1972.
14. *Esirkepov T.Zh.* Exact charge conservation for particle-in-cell simulation with an arbitrary form-factor // *Computer Physics Communications.* 2001. **135**. 144–153.

Поступила в редакцию
09.02.2008