НОВЫЙ МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ ВЛАСОВА–МАКСВЕЛЛА

Разработан новый численный метод решения уравнения Власова, который имеет важное свойство "локальности в оперативной памяти", когда в ходе вычислений каждая нить работает только с ограниченным и заранее известным объемом данных в оперативной памяти. Это свойство позволяет разрабатывать алгоритмы с выполнением основной части вычислений на графических процессорах (GPU). В методе используется функция распределения, и для её аппроксимации на сетке рассматривается движение модельных частиц в фазовом пространстве. На основе нового метода для нерелятивистской системы уравнений Власова-Максвелла разработана неявная схема 2-го порядка точности по времени. В схеме используется форма уравнений Максвелла для плазмы с разложением электрического поля на потенциальную и соленоидальную части, для которых получаются отдельные уравнения. Также используется алгоритм расчета траектории заряда, основанный на точном решении в случае нерелятивистского движения заряда в постоянных (по пространству и времени) электрическом и магнитном полях. Этот алгоритм имеет нулевую фазовую ошибку, и в случае плавно изменяющихся полей и достаточно сильного магнитного поля допускает шаг по времени в десятки или более периодов циклотронного вращения. В результате новая схема допускает достаточно большие шаги по времени и пространству.

1. Смешанная задача для системы Власова-Максвелла

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \left(\boldsymbol{v}\,;\frac{\partial f_\alpha}{\partial \boldsymbol{x}}\right) + \frac{e_\alpha}{m_\alpha}\left(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},t) + [\,\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x},t)\,]\,;\frac{\partial f_\alpha}{\partial \boldsymbol{v}}\right) = 0\,, \quad \alpha = 1,\dots,K\,, \tag{1.1}$$

$$n_\alpha(\boldsymbol{x},t) = \int\limits_{\mathbb{R}^3} f_\alpha(t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{v})\,d^3\boldsymbol{v}\,, \quad \boldsymbol{j}_\alpha(\boldsymbol{x},t) = e_\alpha \int\limits_{\mathbb{R}^3} \boldsymbol{v}\, f_\alpha(t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{v})\,d^3\boldsymbol{v}\,, \tag{1.2}$$

$$\widehat{\boldsymbol{\Pi}}_\alpha(\boldsymbol{x},t) = m_\alpha \int\limits_{\mathbb{R}^3} \boldsymbol{v}\otimes\boldsymbol{v}\, f_\alpha(t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{v})\,d^3\boldsymbol{v}\,, \quad \rho(\boldsymbol{x},t) = \sum_{\alpha=1}^{K} e_\alpha n_\alpha\,, \quad \boldsymbol{j}(\boldsymbol{x},t) = \sum_{\alpha=1}^{K} \boldsymbol{j}_\alpha\,, \tag{1.3}$$

$$\frac{\partial n_\alpha}{\partial t} = -\mathrm{div}\boldsymbol{j}_\alpha\,, \tag{1.4}$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{j}_\alpha}{\partial t} = \frac{e_\alpha}{m_\alpha}\left(e_\alpha n_\alpha \boldsymbol{E} - [\,\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{j}_\alpha\,] - \mathrm{div}\,\widehat{\boldsymbol{\Pi}}_\alpha\right)\,, \tag{1.5}$$

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},t) = \boldsymbol{E}_p(\boldsymbol{x},t) + \boldsymbol{E}_v(\boldsymbol{x},t)\,, \quad \boldsymbol{x}\in\Omega\,, \tag{1.6}$$

$$\boldsymbol{E}_p(\boldsymbol{x},t) = -\nabla\varphi(\boldsymbol{x},t)\,, \quad \Delta\varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}\,, \quad \boldsymbol{x}\in\Omega\,, \quad \left.\frac{\partial\varphi}{\partial\boldsymbol{n}}\right|_{\partial\Omega} = -\left.E_n(\boldsymbol{x},t)\right|_{\partial\Omega}\,, \tag{1.7}$$

$$\varepsilon_0\frac{\partial \boldsymbol{E}_p(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} = -\nabla\Phi(\boldsymbol{x},t)\,, \quad \Delta\Phi = \mathrm{div}\boldsymbol{j}\,, \quad \boldsymbol{x}\in\Omega\,, \quad \left.\frac{\partial\Phi}{\partial\boldsymbol{n}}\right|_{\partial\Omega} = -\varepsilon_0\left.\frac{\partial E_n}{\partial t}\right|_{\partial\Omega}\,, \tag{1.8}$$

$$\mathrm{div}\boldsymbol{E}_v(\boldsymbol{x},t) = 0\,, \quad \frac{\partial\boldsymbol{E}_v}{\partial t} = c^2\,\mathrm{rot}\boldsymbol{B} + \frac{1}{\varepsilon_0}\left(\nabla\Phi - \boldsymbol{j}\right)\,, \quad \boldsymbol{x}\in\Omega\,, \tag{1.9}$$

$$\mathrm{div}\boldsymbol{B} = 0\,, \quad \frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t} = -\mathrm{rot}\boldsymbol{E}_v\,, \quad \boldsymbol{x}\in\Omega\,. \tag{1.10}$$

$\boldsymbol{n}(\boldsymbol{x})$ — единичная внешняя нормаль к границе $\partial\Omega$, $\boldsymbol{E}_n(\boldsymbol{x},t) = (\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},t);\boldsymbol{n}(\boldsymbol{x}))$ — заданная на $\partial\Omega$ нормальная компонента.

Начальные условия для полей и функций распределения имеют вид

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},t)\Big|_{t=0} = \boldsymbol{E}_0(\boldsymbol{x})\,,\ \ \boldsymbol{B}(\boldsymbol{x},t)\Big|_{t=0} = \boldsymbol{B}_0(\boldsymbol{x})\,,\ \ f_\alpha(t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{v})\Big|_{t=0} = f_{\alpha 0}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{v})\,,\ \boldsymbol{x}\in\Omega\,,\ \ \boldsymbol{v}\in\mathbb{R}^3,$$

где $\boldsymbol{E}_0(\boldsymbol{x})$, $\boldsymbol{B}_0(\boldsymbol{x})$, $f_{a0}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{v})$ — заданные функции.

Граничные условия для полей могут иметь различную форму, одним из вариантов являются условия Дирихле

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},t) = \boldsymbol{E}_b(\boldsymbol{x},t)\,,\ \ \boldsymbol{B}(\boldsymbol{x},t) = \boldsymbol{B}_b(\boldsymbol{x},t)\,,\ \ \boldsymbol{x}\in\partial\Omega\,,\ \ t\geq 0\,. \tag{1.11}$$

Отметим, что заданные функции должны удовлетворять определенным условиям согласованности.

Граничные условия для функций распределения формально можно представить в виде

$$f_\alpha^+(t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{v}) = \widehat{G}_\alpha\, f_\alpha^-(t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{v})\,, \tag{1.12}$$

где функция распределения влетающих в область Ω частиц $f_\alpha^+(t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{v})$ задана на множестве $\Gamma^+ = \big\{\,(t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{v})\,:\ \ \boldsymbol{x}\in\partial\Omega\,,\ \ \boldsymbol{v}\in\mathbb{R}^3,\ (\boldsymbol{v};\boldsymbol{n}(\boldsymbol{x}))<0\,,\ t\geq 0\big\}$, функция распределения вылетающих из области Ω частиц $f_\alpha^-(t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{v})$ задана на множестве $\Gamma^- = \big\{\,(t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{v})\,:\ \ \boldsymbol{x}\in\partial\Omega\,,\ \ \boldsymbol{v}\in\mathbb{R}^3\,,\ (\boldsymbol{v};\boldsymbol{n}(\boldsymbol{x}))>0\,,\ t\geq 0\big\}$, а через $\widehat{G}_\alpha$ обозначен граничный оператор, определяющий функцию влета f_α^+ по известной функции вылета f_α^-. Простейший вариант условий состоит в том, что задана функция влета, не зависящая от функции вылета.

2. Схема дискретизации в координатном и в фазовом пространствах

Пусть область моделирования Ω является прямоугольником с центром $\boldsymbol{r}_0$: $\Omega = \{ \boldsymbol{x} : \; |x_i - r_{0i}| < K_i \cdot \Delta x = L_i \, , \; i = 1, 2, 3 \}$, где $K_i \in \mathbb{N}$ и Δx — шаг сетки в координатном пространстве. В численной модели поля и функции влета $f_\alpha^+(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{v})$ задаются по $\boldsymbol{x}$ на некоторой $\delta-$ окрестности области Ω, которую обозначим как $\Omega_\delta = \{ \boldsymbol{x} : \; |x_i - r_{0i}| < L_i + \delta \, , \; i = 1, 2, 3 \}$, где $\delta = k_\delta \cdot \Delta x$ и $k_\delta \in \mathbb{N}$. Будем использовать в координатном пространстве регулярную сетку с шагом Δx и с узлами $\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}) = \boldsymbol{r}_0 + \boldsymbol{k} \cdot \Delta x \, , \; \boldsymbol{k} \in \mathbb{Z}^3$. В пространстве скоростей для данного сорта частиц α будем использовать регулярную сетку с шагом Δv_α и с узлами $\boldsymbol{w}_\alpha(\boldsymbol{q}) = \boldsymbol{q} \cdot \Delta v_\alpha$, $\boldsymbol{q} \in \mathbb{Z}^3$. Тогда узлы $\{ \boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}) \, , \, \boldsymbol{w}_\alpha(\boldsymbol{q}) \}$ образует регулярную сетку в фазовом пространстве одной частицы сорта α .

Сетку на $\overline{\Omega}$ (замыкании Ω) обозначим как $\overline{\boldsymbol{\Omega}}_h = \{ \boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}) : \; |k_i| \le K_i \}$, а на $\overline{\Omega}_\delta$ (замыкании Ω_δ) обозначим как $\overline{\boldsymbol{\Omega}}_{\delta h} = \{ \boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}) : \; |k_i| \le K_i + k_\delta \}$.

Для каждой компоненты функцию распределения $f_\alpha(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{v})$ в любой момент времени t в каждом узле координатной сетки $\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k})$ будем считать финитной по скоростям. Для её аппроксимации будем использовать в пространстве скоростей прямоугольную часть введенной выше сетки фиксированного размера $(2Q_{\alpha i} + 1)$ по каждому измерению, но с "плавающим" центром в узле $\boldsymbol{p}_\alpha(\boldsymbol{k}, t) \cdot \Delta v_\alpha$, ближайшем к местной гидродинамической скорости

$$\boldsymbol{u}_\alpha(\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}), t) = \boldsymbol{j}_\alpha(\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}), t) \Big/ \big(e_\alpha n_\alpha(\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}), t) \big) \, . \tag{2.1}$$

Эта сетка, которую обозначим как

$$\boldsymbol{W}_\alpha(\boldsymbol{k}, t) = \{ \boldsymbol{w}_\alpha(\boldsymbol{p}_\alpha(\boldsymbol{k}, t) + \boldsymbol{q}) = (\boldsymbol{p}_\alpha(\boldsymbol{k}, t) + \boldsymbol{q}) \, \Delta v_\alpha \, , \; |q_i| \le Q_{\alpha i} \, , \; i = 1, 2, 3 \} \tag{2.2}$$

должна "с запасом" содержать носитель $f_\alpha(t,\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}),\boldsymbol{v})$ по скоростям, то есть на граничных и приграничных слоях этой сетки $f_\alpha(t,\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}),\boldsymbol{w}_\alpha(\boldsymbol{p}_\alpha(\boldsymbol{k},t)+\boldsymbol{q}))=0$.

Таким образом, дискретизация в фазовом пространстве одной частицы состоит в том, что каждая функция распределения $f_\alpha(t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{v})$ заменяется конечным набором своих значений в узлах сетки $\{\,\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k})\,,\,\boldsymbol{w}_\alpha(\boldsymbol{p}_\alpha(\boldsymbol{k},t)+\boldsymbol{q})\,\}$:

$$f_\alpha(t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{v})\mapsto\left\{f_{\alpha,h}(t,\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}),\boldsymbol{w}_\alpha(\boldsymbol{p}_\alpha(\boldsymbol{k},t)+\boldsymbol{q}\,)\,)\right\}. \tag{2.3}$$

Дискретизация в координатном пространстве состоит в замене полей и моментов функции функций распределения конечным набором их значений в узлах $\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k})$ координатной сетки $\overline{\boldsymbol{\Omega}}_h$:

$$F(\boldsymbol{x},t)\mapsto F_h(\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}),t)\,,\quad F=\boldsymbol{B},\,\boldsymbol{E},\,\boldsymbol{E}_p\,,\,\boldsymbol{E}_v\,,\,n_\alpha\,,\,\boldsymbol{j}_\alpha\,,\,\boldsymbol{u}_\alpha\,,\,\widehat{\boldsymbol{\Pi}}_\alpha\,,\,\rho\,,\,\boldsymbol{j}\,. \tag{2.4}$$

При этом интегралы в формулах (1.2) и (1.3) заменяются аппроксимирующими их со 2-м порядком точности суммами по узлам сетки (2.2) в пространстве скоростей:

$$n_{\alpha,h}(\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}),t)=(\Delta v_\alpha)^3\sum_{\boldsymbol{W}_\alpha(\boldsymbol{k},t)}f_{\alpha,h}(t,\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k})\,,\boldsymbol{w}_\alpha(\boldsymbol{p}_\alpha(\boldsymbol{k},t)+\boldsymbol{q}\,)\,)\,, \tag{2.5}$$

$$\boldsymbol{j}_{\alpha,h}(\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}),t)=e_\alpha(\Delta v_\alpha)^3\sum_{\boldsymbol{W}_\alpha(\boldsymbol{k},t)}\boldsymbol{w}_\alpha(\boldsymbol{p}_\alpha(\boldsymbol{k},t)+\boldsymbol{q}\,)\cdot f_{\alpha,h}(t,\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k})\,,\boldsymbol{w}_\alpha(\boldsymbol{p}_\alpha(\boldsymbol{k},t)+\boldsymbol{q}\,)\,)\,. \tag{2.6}$$

$$\left.\begin{aligned}&\widehat{\boldsymbol{\Pi}}_{\alpha,h}(\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}),t)=m_\alpha(\Delta v_\alpha)^3\cdot\\&\quad\cdot\sum_{\boldsymbol{W}_\alpha(\boldsymbol{k},t)}\boldsymbol{w}_\alpha(\boldsymbol{p}_\alpha(\boldsymbol{k},t)+\boldsymbol{q}\,)\otimes\boldsymbol{w}_\alpha(\boldsymbol{p}_\alpha(\boldsymbol{k},t)+\boldsymbol{q}\,)\cdot f_{\alpha,h}(t,\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k})\,,\boldsymbol{w}_\alpha(\boldsymbol{p}_\alpha(\boldsymbol{k},t)+\boldsymbol{q}\,)\,)\,.\end{aligned}\right\} \tag{2.7}$$

Значение полей в произвольной точке $\boldsymbol{x} \in \overline{\Omega}$, как и в методе частиц, вычисляются по значениям в ближайших к точке $\boldsymbol{x}$ узлах сетки $\overline{\boldsymbol{\Omega}}_{\delta h}$ в координатном пространстве при помощи линейного взвешивания:

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x},t) = \sum_{\boldsymbol{k}} S_3\left(\frac{\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k})}{\Delta x}\right)\boldsymbol{F}_h(\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}),t)\,, \tag{2.8}$$

где сумма берется по соседним с точкой $\boldsymbol{x}$ узлам пространственной сетки, и безразмерная линейная передаточная функция взвешивания 1-го порядка (по 2-м точкам на измерение) в пространстве $\mathbb{R}^3$ определяется формулами

$$S_3(R_1,R_2,R_3) = W_1(R_1)\cdot W_1(R_2)\cdot W_1(R_3)\,,\ \text{где}\ W_1(R) = \max\{\,1-|R|\,;0\,\}\,. \tag{2.9}$$

Значение функции распределения $f_\alpha(t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{v})$ в произвольной точке $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{v}) \in \overline{\Omega}\times\mathbb{R}^3$ фазового пространства по аналогии с методом частиц вычисляются по значениям (2.3) в ближайших узлах сетки в фазовом пространстве также при помощи линейного взвешивания:

$$f_\alpha(t,\boldsymbol{x},\boldsymbol{v}) = \sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\boldsymbol{q}} S_3\left(\frac{\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k})}{\Delta x}\right)\cdot S_3\left(\frac{\boldsymbol{v}-\boldsymbol{w}_\alpha(\boldsymbol{q})}{\Delta v_\alpha}\right)\cdot f_{\alpha,h}(t,\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}),\boldsymbol{w}_\alpha(\boldsymbol{q})\,)\,. \tag{2.10}$$

Отметим, что шаг сетки Δv_α в пространстве скоростей для частиц сорта α следует определять через характерную температуру этих частиц $T_{\alpha 0}$ (в электрон–вольтах) по формуле $\Delta v_\alpha = \gamma_\alpha \cdot V_{T\alpha 0}$, где $\gamma_\alpha \sim 0.1$ и $V_{T\alpha 0} = \sqrt{e_\alpha T_{\alpha 0}/m_\alpha}$ — характерная тепловая скорость.

3. Траектории частиц и метод их расчета

Движение частиц сорта α описывается системой уравнений Ньютона-Лоренца, которая в системе единиц СИ в нерелятивистском случае вместе с начальными условиями имеет вид:

$$\left.\begin{aligned} &\frac{d\boldsymbol{x}(t)}{dt} = \boldsymbol{v}(t)\,, \quad \frac{d\boldsymbol{v}(t)}{dt} = \frac{e_\alpha}{m_\alpha}\Big(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}(t),t) + [\,\boldsymbol{v}(t)\times\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x}(t),t\,)\,]\Big)\,,\\ &\boldsymbol{x}(\theta) = \boldsymbol{X}\,, \quad \boldsymbol{v}(\theta) = \boldsymbol{V}\,. \end{aligned}\right\} \tag{3.1}$$

Решение задачи Коши (3.1) для последующего изложения удобно обозначить как

$$\boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{R}_\alpha(t,\theta,\boldsymbol{X},\boldsymbol{V}\,)\,, \quad \boldsymbol{v}(t) = \boldsymbol{U}_\alpha(t,\theta,\boldsymbol{X},\boldsymbol{V}\,)\,, \tag{3.2}$$

то есть эти векторные функции удовлетворяют следующим уравнениям и начальным условиям:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \boldsymbol{R}_\alpha(t,\theta,\boldsymbol{X},\boldsymbol{V}\,)}{\partial t} = \boldsymbol{U}_\alpha(t,\theta,\boldsymbol{X},\boldsymbol{V}\,),\\ &\frac{\partial \boldsymbol{U}_\alpha(t,\theta,\boldsymbol{X},\boldsymbol{V}\,)}{\partial t} = \frac{e_\alpha}{m_\alpha}\Big(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{R}_\alpha(t,\theta,\boldsymbol{X},\boldsymbol{V}\,),t) + [\,\boldsymbol{U}_\alpha(t,\theta,\boldsymbol{X},\boldsymbol{V}\,)\times\boldsymbol{B}(\boldsymbol{R}_\alpha(t,\theta,\boldsymbol{X},\boldsymbol{V}\,),t\,)\,]\Big)\,,\\ &\boldsymbol{R}_\alpha(\theta,\theta,\boldsymbol{X},\boldsymbol{V}\,) = \boldsymbol{X}\,, \quad \boldsymbol{U}_\alpha(\theta,\theta,\boldsymbol{X},\boldsymbol{V}\,) = \boldsymbol{V}\,. \end{aligned}$$

Разработанный нами алгоритм численного решения задачи Коши (3.1) имеет 2-й порядок точности, допускает переменный шаг по времени, а также явный и неявный варианты, и основан на точном решении задачи (3.1) в случае постоянных полей $\boldsymbol{B} \equiv Const\,,$ $\boldsymbol{E} \equiv Const\,.$ Это решение, используя стандартные обозначения: $\tau = t - \theta\,, \quad \omega_{c\alpha} = |e_\alpha \boldsymbol{B}|/\,m_\alpha\,,$

$$\boldsymbol{b} = \frac{\boldsymbol{B}}{|\boldsymbol{B}|}\,,\ \ \boldsymbol{a}_\parallel = \big(\boldsymbol{b}\,;\boldsymbol{a}\big)\boldsymbol{b},\ \ \boldsymbol{a}_\perp = \boldsymbol{a} - \boldsymbol{a}_\parallel\,,\ \ \boldsymbol{v}_E = \frac{[\,\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{b}\,]}{|\boldsymbol{B}|}\,,\ \ \boldsymbol{V}_L = \boldsymbol{V} - \boldsymbol{V}_\parallel - \boldsymbol{v}_E\,, \qquad (3.3)$$

можно представить в виде

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{R}_\alpha(t,\theta,\boldsymbol{X},\boldsymbol{V}) &= \boldsymbol{X} + \Big(\boldsymbol{V}_\parallel + \boldsymbol{v}_E\Big)\tau + \frac{\tau^2}{2}\frac{e_\alpha}{m_\alpha}\boldsymbol{E}_\parallel + \\ &\quad + \frac{\boldsymbol{V}_L}{\omega_{c\alpha}}\,\sin\big(\omega_{c\alpha}\tau\big) - \frac{e_\alpha\,[\,\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{V}_L]}{|e_\alpha|\,\omega_{c\alpha}}\Big(1-\cos\big(\omega_{c\alpha}\tau\big)\Big)\,, \\ \boldsymbol{U}_\alpha(t,\theta,\boldsymbol{X},\boldsymbol{V}) &= \boldsymbol{V}_\parallel + \boldsymbol{v}_E + \tau\frac{e_\alpha}{m_\alpha}\boldsymbol{E}_\parallel + \boldsymbol{V}_L\cos\big(\omega_{c\alpha}\tau\big) - \frac{e_\alpha}{|e_\alpha|}[\,\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{V}_L]\sin\big(\omega_{c\alpha}\tau\big). \end{aligned}\right\} \qquad (3.4)$$

Рассмотрим алгоритм в терминах послойного перехода $\theta \mapsto t = \theta + \tau$ в заданных полях. Будем считать, что сеточные массивы полей $F_h(\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}),t)\,, \quad F = \boldsymbol{B},\,\boldsymbol{E}\,,$ известны в моменты времени $\theta,\ \theta^{\frac{1}{2}} = \theta + \dfrac{\tau}{2}\,,\ t\,.$ Отметим, что знак τ произволен, и возможен случай $\tau < 0\,,\ t < \theta\,.$

1. Стартовая итерация.

1.1) Взвешиванием по формуле (2.8) находим поля $\boldsymbol{F}^0 = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{X},\theta)\,, \quad F = \boldsymbol{B},\,\boldsymbol{E}\,.$ По ним находим все фигурирующие в (3.4) величины.

1.2) По первой формуле в (3.4) находим $\boldsymbol{x}_\alpha^{\frac12(0)} = \boldsymbol{R}_\alpha\big(\theta^{\frac12}, \theta, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{V}\big)$ в постоянных полях $\boldsymbol{B}^0$, $\boldsymbol{E}^0$:

$$\boldsymbol{x}_\alpha^{\frac12(0)} = \boldsymbol{X} + \Big(\boldsymbol{V}_\parallel^0 + \boldsymbol{v}_E^0\Big)\frac{\tau}{2} + \frac{\tau^2}{8}\frac{e_\alpha}{m_\alpha}\boldsymbol{E}_\parallel^0 + \frac{\boldsymbol{V}_L^0}{\omega_{c\alpha}^0}\sin\left(\frac{\omega_{c\alpha}^0\tau}{2}\right) - \frac{e_\alpha\big[\boldsymbol{b}^0\times\boldsymbol{V}_L^0\big]}{|e_\alpha|\,\omega_{c\alpha}^0}\left(1-\cos\left(\frac{\omega_{c\alpha}^0\tau}{2}\right)\right).$$

Взвешиванием по формуле (2.8) находим поля $\boldsymbol{F}^{\frac12(0)} = \boldsymbol{F}\Big(\boldsymbol{x}_\alpha^{\frac12(0)}, \theta^{\frac12}\Big)$, $F = \boldsymbol{B}, \boldsymbol{E}$. По ним находим все фигурирующие в (3.4) величины.

1.3) По первой формуле в (3.4) находим $\boldsymbol{x}_\alpha^{1(0)} = \boldsymbol{R}_\alpha(t, \theta, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{V})$ в постоянных полях $\boldsymbol{B}^{\frac12(0)}$, $\boldsymbol{E}^{\frac12(0)}$:

$$\boldsymbol{x}_\alpha^1 = \boldsymbol{X} + \Big(\boldsymbol{V}_\parallel^{\frac12} + \boldsymbol{v}_E^{\frac12}\Big)\tau + \frac{\tau^2}{2}\frac{e_\alpha}{m_\alpha}\boldsymbol{E}_\parallel^{\frac12} + \frac{\boldsymbol{V}_L^{\frac12}\sin\big(\omega_{c\alpha}^{\frac12}\tau\big)}{\omega_{c\alpha}^{\frac12}} - \frac{e_\alpha\Big[\boldsymbol{b}^{\frac12}\times\boldsymbol{V}_L^{\frac12}\Big]}{|e_\alpha|\,\omega_{c\alpha}^{\frac12}}\Big(1-\cos\big(\omega_{c\alpha}^{\frac12}\tau\big)\Big),$$

и взвешиванием по формуле (2.8) находим поля $\boldsymbol{F}^{1(0)} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_\alpha^{1(0)}, t)$, $F = \boldsymbol{B}, \boldsymbol{E}$.

1.4) Находим при $\kappa = 0$ поля $\boldsymbol{F}^{\frac12(\kappa+1)} = \dfrac12\Big(\boldsymbol{F}^0 + \boldsymbol{F}^{1(0)}\Big)$, $F = \boldsymbol{B}, \boldsymbol{E}$. По ним находим все фигурирующие в (3.4) величины. Затем по последней формуле находим $\boldsymbol{x}_\alpha^{1(\kappa+1)}$ в постоянных полях $\boldsymbol{F}^{\frac12(\kappa+1)}$ при $\kappa = 0$. Далее взвешиванием по формуле (2.8) находим поля $\boldsymbol{F}^{1(\kappa+1)} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_\alpha^{1(\kappa+1)}, t)$, а также параметр относительной точности

$$\delta_{\kappa+1} = \frac{1}{\Delta x}\left\|\boldsymbol{x}_\alpha^{1(\kappa+1)} - \boldsymbol{x}_\alpha^{1(\kappa)}\right\|_h.$$

Если достигнута заданная точность δ : $\delta_{\kappa+1} < \delta$, то процесс закончен. В противном случае выполняется обычная итерация.

2. Обычная итерация $\boldsymbol{\kappa \mapsto \kappa + 1}$.

Состоит в выполнении действий, описанных в пункте 1.4) выше. При этом, если условие сходимости итерационного процесса $\gamma_{\kappa+1} = \delta_{\kappa+1} - \delta_\kappa < 0$ на некоторой итерации нарушается, или количество итераций превышает заданное максимально допустимое число κ_0, то текущий шаг по времени τ уменьшается в два раза: $\tau \mapsto \dfrac{\tau}{2}$, и описанный процесс начинается сначала.

3. Блок завершения шага.

Выполняем присваивание $\boldsymbol{x}_\alpha^1 = \boldsymbol{x}_\alpha^{1(\kappa+1)}$, $\boldsymbol{F}^1 = \boldsymbol{F}^{1(\kappa+1)}$, $F = \boldsymbol{B}, \boldsymbol{E}$. Затем находим поля $\boldsymbol{F}^{\frac{1}{2}} = \dfrac{1}{2}\big(\boldsymbol{F}^0 + \boldsymbol{F}^1\big)$. Далее по ним находим фигурирующие в (3.4) величины. Затем по второй формуле в (3.4) находим $\boldsymbol{v}_\alpha^1 = \boldsymbol{U}_\alpha(t, \theta, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{V})$ в постоянных полях $\boldsymbol{B}^{\frac{1}{2}}, \boldsymbol{E}^{\frac{1}{2}}$:

$$\boldsymbol{v}_\alpha^1 = \boldsymbol{V}_\parallel^{\frac{1}{2}} + \boldsymbol{v}_E^{\frac{1}{2}} + \tau \frac{e_\alpha}{m_\alpha} \boldsymbol{E}_\parallel^{\frac{1}{2}} + \boldsymbol{V}_L^{\frac{1}{2}} \cos\big(\omega_{c\alpha}^{\frac{1}{2}} \tau\big) - \frac{e_\alpha}{|e_\alpha|} \Big[\boldsymbol{b}^{\frac{1}{2}} \times \boldsymbol{V}_L^{\frac{1}{2}}\Big] \sin\big(\omega_{c\alpha}^{\frac{1}{2}} \tau\big) .$$

На этом шаг по времени нового метода расчета траектории частицы закончен.

4. Схема нового метода численного решения системы Власова-Максвелла

Рассмотрим послойный переход $t^0 \mapsto t^1 = t^0 + \tau$. Обозначим для всех перечисленных в (2.4) функций, а также для функций распределения, их массивы значений на сетке в моменты времени t^0, $t^{\frac{1}{2}} = t + \dfrac{\tau}{2}$, t^1 через

$$F_h^\beta\big(\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k})\big) = F_h\big(\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}), t^\beta\big), \quad f_{\alpha h}^\beta(\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}), \boldsymbol{w}_\alpha(\boldsymbol{q})) = f_{\alpha h}(t^\beta, \boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}), \boldsymbol{w}_\alpha(\boldsymbol{q}))\,, \quad \beta = 0, \frac{1}{2}, 1\,.$$

Для аппроксимации эволюционных уравнений (1.4), (1.9) и (1.10) используем следующие разностные соотношения неявной 2-слойной схемы 2-го порядка точности по времени:

$$\frac{n_{\alpha h}^\beta - n_{\alpha h}^0}{\beta\tau} = -\mathrm{div}_h\left(\frac{\boldsymbol{j}_{\alpha h}^0 + \boldsymbol{j}_{\alpha h}^\beta}{2}\right) + O\big(\tau^2\big)\,, \quad \frac{n_{\alpha h}^1 - n_{\alpha h}^0}{\tau} = -\mathrm{div}_h \boldsymbol{j}_{\alpha h}^{\frac{1}{2}} + O\big(\tau^2\big)\,, \tag{4.1}$$

$$\frac{\boldsymbol{E}_{vh}^\beta - \boldsymbol{E}_{vh}^0}{\beta\tau} = \frac{c^2}{2}\Big(\mathrm{rot}_h\Big(\boldsymbol{B}_h^0 + \boldsymbol{B}_h^\beta\Big) - \mu_0\Big(\boldsymbol{j}_h^0 + \boldsymbol{j}_h^\beta - \nabla_h \varPhi_h^0 - \nabla_h \varPhi_h^\beta\Big)\Big) + O\big(\tau^2\big)\,, \tag{4.2}$$

$$\frac{1}{\tau}\left(\boldsymbol{E}_{vh}^1 - \boldsymbol{E}_{vh}^0\right) = c^2\left(\mathrm{rot}_h \boldsymbol{B}_h^{\frac{1}{2}} - \mu_0\left(\boldsymbol{j}_h^{\frac{1}{2}} - \nabla_h \varPhi_h^{\frac{1}{2}}\right)\right) + O\big(\tau^2\big)\,, \tag{4.3}$$

$$\frac{\boldsymbol{B}_h^\beta - \boldsymbol{B}_h^0}{\beta\tau} = -\mathrm{rot}_h\left(\frac{\boldsymbol{E}_{vh}^0 + \boldsymbol{E}_{vh}^\beta}{2}\right) + O\big(\tau^2\big)\,, \quad \frac{\boldsymbol{B}_h^1 - \boldsymbol{B}_h^0}{\tau} = -\mathrm{rot}_h \boldsymbol{E}_{vh}^{\frac{1}{2}} + O\big(\tau^2\big)\,, \tag{4.4}$$

где $\beta = \dfrac{1}{2}, 1$, и нижний индекс h у пространственных дифференциальных операторов означает разностное дифференцирование на сетке.

Входные параметры: в момент времени t^0 для каждого сорта частиц α известны сеточные массивы функций распределения $f_{\alpha h}^{\,0}\big(\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}), \boldsymbol{w}_\alpha(\boldsymbol{q})\big)$ и сеточные массивы $F_h^0\big(\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k})\big)$ на координатной сетке $F = \boldsymbol{B}, \boldsymbol{E}, \boldsymbol{E}_p\,, \boldsymbol{E}_v\,, n_\alpha\,, \boldsymbol{j}_\alpha\,, \boldsymbol{u}_\alpha\,, \widehat{\boldsymbol{\Pi}}_\alpha\,, \rho\,, \boldsymbol{j}\,.$

1. Стартовая итерация. Состоит из следующих 3-х блоков.

1.1) Блок нахождения полей $\boldsymbol{E}_{ph}^{\beta}$, $\boldsymbol{E}_{vh}^{\beta}$, $\boldsymbol{B}_h^{\beta}$, $\beta = \dfrac{1}{2}, 1$ в моменты времени $t^{\frac{1}{2}}$ и t^1 со 2-м порядком точности $O\big(\tau^3\big)$ при помощи уравнений (1.4)–(1.10), то есть без движения частиц.

1.2) Блок нахождения функций распределения $f_{\alpha h}^{1(0)}\big(\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}), \boldsymbol{w}_\alpha(\boldsymbol{q})\big)$ и их моментов, фигурирующих в (1.2), (1.3), в момент $t = t^1$ со 2-м порядком точности $O\big(\tau^3\big)$.

1.3) Блок вычисления полей $\boldsymbol{E}_{ph}^{1(1)}$, $\boldsymbol{E}_{vh}^{1(1)}$, $\boldsymbol{B}_h^{1(1)}$ в момент времени $t = t^1$.

Блок 1.1). 1.1.1) Из уравнения (1.10) находим $\boldsymbol{B}_h^{\frac{1}{2}(-)}$ с 1-м порядком точности $O\big(\tau^2\big)$:

$$\boldsymbol{B}_h^{\frac{1}{2}(-)} = \boldsymbol{B}_h^0 - \frac{\tau}{2}\,\mathrm{rot}_h \boldsymbol{E}_{vh}^0 + O\big(\tau^2\big)\,. \tag{4.5}$$

1.1.2) Находим из уравнения (1.5) с 1-м порядком точности $O\big(\tau^2\big)$ для каждого сорта α ток $\boldsymbol{j}_{\alpha h}^{\frac{1}{2}(0)}$, и полный ток $\boldsymbol{j}_h^{\frac{1}{2}(0)}$.

1.1.3) Находим $\nabla_h \varPhi_h^{\frac{1}{2}(0)}$ с 1-м порядком точности $O\big(\tau^2\big)$ в результате численного решения задачи Неймана (1.8) с правой частью $\mathrm{div}_h \boldsymbol{j}_{\alpha h}^{\frac{1}{2}(0)}$.

1.1.4) Находим $n_{\alpha h}^{\frac{1}{2}(0)}$ и $n_{\alpha h}^{1(0)}$ из уравнений (4.1) со 2-м порядком точности $O(\tau^3)$:

$$n_{\alpha h}^{\frac{1}{2}(0)} = n_{\alpha h}^{0} - \frac{\tau}{4}\,\mathrm{div}_h\!\left(\boldsymbol{j}_{\alpha h}^{\,0} + \boldsymbol{j}_{\alpha h}^{\frac{1}{2}(0)}\right) + O(\tau^3)\,, \quad n_{\alpha h}^{1(0)} = n_{\alpha h}^{0} - \tau\,\mathrm{div}_h \boldsymbol{j}_{\alpha h}^{\frac{1}{2}(0)} + O(\tau^3)\,.$$

По ним с той же точностью находим $\rho_h^{\frac{1}{2}(0)}$ и $\rho_h^{1(0)}$.

1.1.5) Находим $\boldsymbol{E}_{ph}^{\frac{1}{2}(0)}$ и $\boldsymbol{E}_{ph}^{1(0)}$ со 2-м порядком точности $O(\tau^3)$ в результате численного решения задачи Неймана (1.7) с правой частью $\rho_h^{\frac{1}{2}(0)}$ и $\rho_h^{1(0)}$ соответственно.

1.1.6) Находим $\boldsymbol{E}_{vh}^{\frac{1}{2}(0)}$ и $\boldsymbol{E}_{vh}^{1(0)}$ со 2-м порядком точности $O(\tau^3)$ из уравнений (4.2) и (4.3). Затем с той же точностью находим полное электрическое поле $\boldsymbol{E}_{h}^{\frac{1}{2}(0)} = \boldsymbol{E}_{ph}^{\frac{1}{2}(0)} + \boldsymbol{E}_{vh}^{\frac{1}{2}(0)}$ и $\boldsymbol{E}_{h}^{1(0)} = \boldsymbol{E}_{ph}^{1(0)} + \boldsymbol{E}_{vh}^{1(0)}$.

1.1.7) Находим из уравнений (4.4) магнитное поле $\boldsymbol{B}_{h}^{\frac{1}{2}(0)}$ и $\boldsymbol{B}_{h}^{1(0)}$ со 2-м порядком точности $O(\tau^3)$.

1.1.8) Находим из уравнения (1.5) с 1-м порядком точности $O(\tau^2)$ для каждого сорта α ток $\boldsymbol{j}_{\alpha h}^{1(0)}$. Далее в момент $t = t^1$ для каждого узла $\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k})$ сетки в координатном пространстве находим центральный узел $\boldsymbol{p}_{\alpha}^{1(0)}(\boldsymbol{k}) \sim \boldsymbol{p}_{\alpha}(\boldsymbol{k}, t^1)$ сетки (2.2) в пространстве скоростей в соответствии с формулой в (2.1):

$$\boldsymbol{p}_{\alpha}^{1(0)}(\boldsymbol{k}) = \left[\boldsymbol{j}_{\alpha h}^{1(0)}(\boldsymbol{r}) \Big/ \left(e_\alpha n_\alpha(\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}), t)\,\Delta v_\alpha\right)\right]\,, \ \text{ где } [r] \text{— целая часть числа } r\,.$$

По этому узлу находим сетку (2.2) $\boldsymbol{W}_\alpha^{1(0)}(\boldsymbol{k}) = \boldsymbol{W}_\alpha(\boldsymbol{k}, t^1)$.

Блок 1.2). Каждый узел $(\boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}), \boldsymbol{w}_\alpha(\boldsymbol{p}_\alpha^{1(0)}(\boldsymbol{k})+\boldsymbol{q}))$ сетки $\overline{\boldsymbol{\Omega}}_h \times \boldsymbol{W}_\alpha^{1(0)}(\boldsymbol{k})$ в фазовом пространстве в момент $t = t^1$ сдвигаем вдоль траекторий (3.2) системы (3.1) на предыдущий временной слой $t = t^0$, то есть численно решаем "в прошлое" в известных полях задачу Коши (3.1) с начальными данными

$$\theta = t^1\,, \quad \boldsymbol{x}_\alpha(t^1) = \boldsymbol{X} = \boldsymbol{r}(\boldsymbol{k})\,, \quad \boldsymbol{v}_\alpha(t^1) = \boldsymbol{V} = \boldsymbol{w}_\alpha(\boldsymbol{p}_\alpha^{1(0)}(\boldsymbol{k}) + \boldsymbol{q})$$

при помощи описанного в разделе 3 алгоритма. В результате находим "прообраз" узла сетки

$$\boldsymbol{x}_\alpha^{0(0)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{q}) = \boldsymbol{R}_\alpha(t^0, t^1, \boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}), \boldsymbol{w}_\alpha(\boldsymbol{p}_\alpha^{1(0)}(\boldsymbol{k}) + \boldsymbol{q}))\,,$$

$$\boldsymbol{v}_\alpha^{0(0)}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{q}) = \boldsymbol{U}_\alpha(t^0, t^1, \boldsymbol{r}(\boldsymbol{k}), \boldsymbol{w}_\alpha(\boldsymbol{p}_\alpha^{1(0)}(\boldsymbol{k}) + \boldsymbol{q}))\,.$$