

Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М. В. Келдыша
Российской академии наук

Иньков Л.В.

**Методы расчета самосогласованного
электрического поля в задачах
кинетического моделирования пылевой
плазмы**

Москва
2002

Методы расчета самосогласованного электрического поля в задачах кинетического моделирования пылевой плазмы

При численном моделировании кинетических эффектов в пылевой плазме большое значение имеет точность описания поведения электронов и ионов вблизи пылевой частицы. Это нужно как для получения правильного распределения частиц, так и для вычисления силы действующей на пылинку.

Корректность описания движения электронов и ионов зависит, прежде всего, от точности вычисления силы, действующей на плазменную частицу или, что то же самое, от точности вычисления поля в точке нахождения частицы. В данной работе рассматриваются трудности с применением классических методов численного расчета самосогласованного поля (MD , PIC , P^3M) в чистом виде. Разработан модифицированный метод $PDPM$, решающий проблему точного и экономичного вычисления силы вблизи пылинки за счет использования разных шагов по времени и по пространству вблизи пылинки и на большом расстоянии от неё.

Inkov L.V.

Calculation of selfconsistent electrostatic field in kinetic simulation of dusty plasma

The correct account of electrons and ions behavior near the dust grain is extremely important in kinetic simulation of dusty plasma. It is crucial both for distribution function calculation and for computation of the force experienced by the grain.

The accuracy of description of particle motion depends on the precision of field calculation. Classical methods (MD , PIC , P^3M) of field calculation face difficulties if applied to dusty plasma. The modified $PDPM$ method which is both accurate and economical is developed. The main idea is to use different spatial and time steps near the grain and far from it.

1 Введение

Пылевая плазма — одна из наиболее бурно развивающихся областей физики. За последнее десятилетие было обнаружено большое количество интересных явлений в пылевой плазме, таких как пылевой звук, плазменно-пылевые кристаллы, пылевые вихри и воиды, когерентные солитон-подобные структуры. Многие из этих явлений еще ждут своего объяснения. Но даже те, по которым есть аналитические модели, могут быть описаны лишь качественно. Наличие в пылевой плазме большого числа взаимовлияющих и конкурирующих процессов делает ее чрезвычайно трудной для аналитического изучения.

Поэтому следует ожидать, что большую роль в изучении пылевой плазмы сыграет именно численное моделирование. Большое количество работ по математическому моделированию пылевой плазмы можно условно разбить на три группы:

- модели, в которых заряд пылинки считается заранее известным и неизменным;
- модели, в которых пылинка рассматривается как пробная частица, т.е. не влияет на параметры окружающей плазмы;
- самосогласованные модели, в которых параметры пылинки определяются параметрами окружающей плазмы, и в свою очередь сильно влияют на распределение электронов и ионов плазмы.

Для краткости не будем останавливаться на первых двух группах моделей, как не обладающих предсказательной способностью. Однако, существующие самосогласованные модели [1, 2, 3] также не могут рассматриваться как удовлетворительные, поскольку ни одна из них не соответствует одновременно следующим чрезвычайно важным для адекватного описания процессов в пылевой плазме моментам:

- **Трехмерность по пространству и по скоростям.** Принципиальным недостатком использования двумерных, а тем более, одномерных моделей, является не то, что геометрический фактор искажает важные для понимания процессов в пылевой плазме механизмы, а то, что конкурирующие механизмы искажаются в разной степени.

- **Сильные столкновения.** Важнейшую роль в передаче энергии, импульса и заряда в пылевой плазме играют сильные неупругие и кулоновские столкновения между частицами плазмы и пылинками. Поэтому любые упрощения, влияющие на описание столкновений, должны проводиться с особой осторожностью.
- **Учет кинетических эффектов.** Функции распределения электронов и ионов вблизи частиц пыли сильно неравновесны. Кроме того, большинство интересных эффектов в пылевой плазме существуют лишь благодаря существенной открытости системы. Поэтому использование таких приближений, как гидродинамическое описание ионов или бoльцмановское распределение электронов заведомо на порядок сужает круг явлений, которые может описать модель.

Суть проблемы лежит в попытке применить к пылевой плазме стандартные для физики плазмы численные подходы в чистом виде. Понятно, что используя метод в несвойственных для него условиях, мы либо жертвуем описательной способностью модели, либо приходим к чрезвычайно вычислительно-дорогостоящим моделям, реализация которых в трехмерной геометрии просто невозможна.

Поэтому единственный выход состоит в осознании многомасштабности задачи как по пространству, так и по времени. И хотя “многомасштабная” модель будет на порядок сложнее в алгоритмическом плане, можно ожидать гораздо большего выигрыша в вычислительной эффективности и описательной способности модели.

Данная работа посвящена методам расчета силы, действующей на частицу плазмы. Конечной целью является получение метода расчета силы, достаточно точного, чтобы сохранять динамику кинетических процессов вблизи пылинки, и достаточно экономичного, чтобы проводить $3D$ расчеты в достаточно большой области.

Работа состоит из введения и трех основных частей. В первой части описывается математическая модель в рамках которой изучается пылевая плазма. Во второй части обсуждаются классические методы расчета самосогласованного электрического поля и описывается разработанный автором метод. В третьей главе обсуждаются вопросы оптимизации алгоритма.

2 Описание электрон-ионной плазмы

Рассматривается система, состоящая из электрон-ионной плазмы и сравнительно небольшого количества пылевых частиц. Плазма полагается бесстолкновительной, т.е. столкновения частиц плазмы друг с другом не учитываются. Однако, имеют место столкновения частиц плазмы с частицами пыли, как упругие (кулоновское рассеяние), так и неупругие.

На языке функций распределения такая система описывается системой уравнений Власова–Пуассона для электронов и ионов:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \vec{v}_\alpha \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{r}} + (\vec{F}_{ext}(\vec{r}) + e_\alpha \vec{E}(\vec{r})) \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{v}} &= I_\alpha + Q_\alpha \\ \vec{E}(\vec{r}) &= -\nabla \varphi \\ \Delta \varphi &= -4\pi \left(\sum_\alpha \rho_\alpha + \rho_d \right) \\ \rho_\alpha &= e_\alpha \int f_\alpha d\vec{v}, \end{aligned}$$

где индекс $\alpha = e, i$ относится к сорту частиц плазмы, а индекс d к частицам пыли. Соответственно $f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t)$ — функция распределения частиц сорта α , I_α — источники частиц, отражающие процесс ионизации, Q_α — источники/стоки, отражающие процессы на поверхности пылинки (поглощение, фотоэмиссия, термоэмиссия, ударная ионизация и т.д.), $\vec{F}_{ext}(\vec{r})$ — внешняя сила, действующая на частицу сорта α в точке \vec{r} (например, сила со стороны внешнего магнитного поля), $\vec{E}(\vec{r})$ — напряженность самосогласованного электрического поля, e_α — заряд одной частицы, а ρ_α — их вклад в плотность заряда.

На языке уравнений движения частиц эта система описывается следующими уравнениями:

$$\frac{d\vec{r}_\alpha^j}{dt} = \vec{v}_\alpha^j, \quad \frac{d\vec{v}_\alpha^j}{dt} = \frac{1}{m_\alpha} \left(\vec{F}_{ext}(\vec{r}) + e_\alpha \vec{E}(\vec{r}_\alpha^j) \right), \quad \alpha = i, e. \quad (1)$$

Выпишем сначала точное выражение для напряженности самосогласованного электрического поля в точке \vec{r}_α^j (пылинки полагаются сферическими):

$$\vec{E}(\vec{r}_\alpha^j) = \sum_k Q_d^k \frac{(\vec{r}_\alpha^j - \vec{r}_d^k)}{r_{jk}^3} + \sum_{\beta=e,i} e_\beta \sum_{i \neq j} \frac{(\vec{r}_\alpha^j - \vec{r}_\beta^i)}{r_{ji}^3}, \quad (2)$$

где Q_d^k — заряд k -той пылинки, а \vec{r}_{ji} — радиус вектор из точки r^j в точку r^i .

Для приближенного решения системы уравнений (1)–(2) воспользуемся методом крупных частиц [4, 5]. При этом частицы плазмы агрегируются в крупные (модельные) частицы с тем же отношением $\frac{e_\alpha}{m_\alpha}$, что и у реальных частиц. Благодаря этому факту, уравнения движения модельных частиц формально совпадают с уравнениями движения реальных частиц.

Следует отметить, что мы получили систему с совершенно другими столкновительными свойствами. Оставляя пока открытым вопрос о корректности такого перехода для системы с сильными столкновениями частица — пылинка, обсудим методы вычисления электрического поля $\vec{E}(\vec{r})$.

Описание столкновений Столкновения частиц плазмы с пылинками описываются следующим образом: если в какой-то момент времени расстояние между частицей и центром пылинки меньше некоторого критического (проще говоря радиуса пылинки), происходит взаимодействие (поглощение, отражение, рассеяние и т.д.). При этом пылинке может передаваться заряд, масса, энергия и импульс.

Импульс может передаваться и в том случае, если столкновения не произошло, но частица прошла достаточно близко от пылинки (кулоновское рассеяние). Поэтому, если мы хотим посчитать силу притяжения между пылинками, обусловленную, например, кулоновским рассеянием потоков ионов, мы должны достаточно детально описать движение частицы вблизи пылинки с учетом сильно меняющегося вдоль траектории потенциала взаимодействия. С другой стороны движение на больших расстояниях от пылевых частиц определяется коллективными явлениями с характерным временем порядка обратной электронной плазменной частоты $\omega_{p,e}^{-1}$. Поэтому в модели используется два шага по времени: один для движения частиц вдали от пылинок (он как обычно ограничен сверху условием устойчивости схемы), другой — для частиц вблизи пылинки (в модели большой шаг разбивается на несколько частей так, чтобы частица за малый шаг проходила расстояние порядка долей радиуса пылинки). Это позволяет существенно снизить время счета в случае малого числа пылинок (т.е. когда расстояние между пылинками много больше дебаевского радиуса, как, например, в задаче о пылевых кристаллах).

3 Методы расчета силы

Частица-частица (PP). Самое точное значения даст конечно же молекулярно-динамический подход, в котором выражение (2) вычисляется явно. Цена такой точности, также вполне понятна: количество операция пропорционально квадрату числа частиц, что делает невозможным такие вычисления для сколь-нибудь значительных размеров расчетной области, количестве частиц и времени счета.

Частицы-сетка (PM). Другой способ — каким-нибудь образом определить потенциал в моделируемой области, и найти силу как:

$$\vec{F}_\alpha^j = e_\alpha \nabla \varphi(\vec{r}^j)$$

Потенциал в моделируемой области находят, решая уравнение Пуассона

$$\Delta \varphi = -4\pi \left(\sum_{\alpha} \rho_{\alpha} + \rho_d \right)$$

Для этого вводится пространственная сетка. По положению частиц определяется плотность заряда на сетке и находится потенциал в узлах сетки. Зная потенциал, находим напряженность поля на сетке и интерполируем ее в интересующие нас точки. Если сетка достаточно крупная (количество узлов сетки, много меньше количества модельных частиц), такой подход даст значительный выигрыш по количеству операций.

Я позволил себе кратко описать основные шаги широко-известного метода частиц-в-ячейке (PIC), чтобы понять, на каких этапах нас подстерегают неприятности в случае моделирования пылевой плазмы. Поскольку заряд пылинки обычно составляет тысячи зарядов электрона, то говорить об усредненных величинах, таких как плотность заряда на масштабах больше размера пылинки несколько нефизично. Если мы все же введем сетку с шагом много большим размера пылинки, то гарантированно потеряем все тонкие кинетические эффекты, связанные со сложным поведением частиц вблизи пылинки.

Из вышесказанного следует, что в случае применения PIC-метода, шаг сетки должен составлять доли радиуса пылинки. Ситуация еще более ухудшается, если учесть, что из теории PIC-метода следует, что уменьшение шага сетки влечет за собой уменьшение шага по времени и увеличение минимально-необходимого количества крупных частиц.

Учитывая все это, легко понять, почему среди работ по численному моделированию пылевой плазмы методом PIC нет ни одной 3D модели, хотя авторы сознают, что геометрический фактор особенно важен в случае пылевой плазмы.

Частица-пылинка частица-сетка (PDPM). Посмотрим, как можно исправить ситуацию. Если вся проблема, только в вычислении силы взаимодействия частицы с пылинками (первое слагаемое в выражении (2)), то напрашивается решение: силу взаимодействия частиц плазмы с пылинками вычислять точно, а силу со стороны остальных частиц плазмы (второе слагаемое (2)) находить приближенно решением уравнения Пуассона на сетке с обычным для PIC-метода шагом порядка дебаевского радиуса λ_D . Приняв во внимание, что количество пылинок обычно на много порядков меньше количества частиц плазмы (даже модельных), мы должны получить вычислительную трудоемкость сравнимую с обычным PIC-методом.

Однако, не все так хорошо, как кажется на первый взгляд. До сих пор мы пренебрегали ошибкой, связанной с плохим приближением плотности заряда плазмы, считая ее малой в сравнении с ошибкой, связанной с зарядом пылинки. По прошествии некоторого времени, порядка ω_{pi}^{-1} , вокруг пылинки образуется экранирующее облако с размерами порядка дебаевского радиуса λ_D . Мы получаем вокруг пылинки “ионную шубу”¹ с сильно меняющейся плотностью заряда. Даже если на предыдущем шаге мы совершенно точно определили положение всех частиц, то при переходе к сеточной функции плотности заряда мы получим сильно сглаженную функцию.

Таким образом, если в чистом PIC-методе следовало ожидать заниженной силы, действующей на частицу вблизи пылинки, то в таком модифицированном PIC-методе, сила будет наоборот завышенной. Либо, опять мы приходим к мелкой сетке с шагом порядка долей λ_D . Не исключено, что в случае достаточно большой плотности частиц пыли в моделируемом объеме (среднее расстояние между пылинками меньше λ_D) это единственно возможный вариант решения проблемы. Однако, что-то подсказывает, что в случае малой плотности пыли можно сыграть на различии в характерных пространственных и временных масштабах вблизи пылинок и на большом удалении от них.

¹Здесь и далее под “ионной шубой” будет подразумеваться область плазмы вокруг пылинки, экранирующая ее заряд. В большинстве плазменно-пылевых задач это облако с повышенной плотностью ионов и пониженной плотностью электронов.

Модифицированный PDPM. Для простоты, рассмотрим предельный случай: одна пылинка посреди объема сравнительно однородной плазмы. Выражение (2) примет вид

$$\vec{E}(\vec{r}_\alpha^j) = Q_d \frac{(\vec{r}_\alpha^j - \vec{r}_d)}{r_{jd}^3} + \sum_{\beta=e,i} e_\beta \sum_i \frac{(\vec{r}_\alpha^j - \vec{r}_\beta^i)}{r_{ji}^3}, \quad (3)$$

В правой части (3) прибавим и вычтем некоторую величину, зависящую от заряда пылинки и взаимного расположения частицы и пылинки:

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}_\alpha^j) = & \left(Q_d \frac{(\vec{r}_\alpha^j - \vec{r}_d)}{r_{jd}^3} - \vec{R}(Q_d, \vec{r}_{jd}) \right) + \\ & \left(\vec{R}(Q_d, \vec{r}_{jd}) + \sum_{\beta=e,i} e_\beta \sum_i \frac{(\vec{r}_\alpha^j - \vec{r}_\beta^i)}{r_{ji}^3} \right), \end{aligned} \quad (4)$$

Основная идея, заимствованная из метода P^3M , состоит в том, чтобы представить поле в виде суммы резко-меняющейся, но легко вычисляемой силы и гладко меняющейся силы, спектр которой приближенно имеет конечную ширину (существенно отличен от нуля в ограниченной области значений \vec{k}), и которую следовательно можно с хорошей точностью вычислять на сетке.

В частности, для выражения (4) это означает, что нужно так подобрать функцию $\vec{R}(Q_d, \vec{r}_{jd})$, чтобы выражение в первых скобках была легко-вычисляемой функцией, а вторая скобка — функцией, хорошо приближаемой на сетке.

Гладкая (сеточная) сила. Разберемся сначала с гладкой составляющей (4)

$$\vec{E}_{smooth} = \vec{R}(Q_d, \vec{r}_{jd}) + \sum_{\beta=e,i} e_\beta \sum_i \frac{(\vec{r}_\alpha^j - \vec{r}_\beta^i)}{r_{ji}^3}, \quad (5)$$

которая будет вычисляться с помощью решения уравнения Пуассона.

Из того, что сила \vec{E}_{smooth} должна находиться решением уравнения Пуассона, следует, что $\vec{R}(Q_d, \vec{r}_{jd})$ должна соответствовать некоторому распределению заряда $\rho_d(Q_d, \vec{r})$. Далее, суммарная плотность заряда $(\rho_d + \rho_e + \rho_i)$ должна быть гладкой функцией, хорошо приближаемой на сетке. Но $\rho_e + \rho_i$ — вовсе не гладкая функция на масштабах порядка λ_{Di} . Точнее сказать, на теле достаточно

гладкой функции имеется неровность, соответствующая “ионной шубе” вокруг пылинки. Поэтому, чтобы $\rho_d + \rho_e + \rho_i$ была гладкой, мы должны выбрать ρ_d так, чтобы компенсировать “ионную шубу”.

Подведем промежуточные итоги. Основная идея метода состоит в расщеплении силы, действующей на частицу на две компоненты. Первая компонента будет вычисляться точно, а вторая с помощью решения уравнения Пуассона. Таким образом, свобода в разбиении силы на две компоненты, сводится к свободе выбора плотности заряда, которая будет подставляться вместо плотности заряда пылинки в уравнение Пуассона. Эта плотность заряда должна выбираться так, чтобы компенсировать негладкость плотности заряда частиц плазмы в районе вокруг пылинки, а общий ее заряд должен равняться заряду пылинки.

Здесь хотелось бы отметить, что рассуждения велись для одной пылинки в однородной плазме лишь для облегчения понимания сути метода. В случае большого количества пылинок, чьи “ионные шубы” не перекрываются достаточно добавить суммирование по частицам пыли в выражения (3)-(5).

Короткодействующая сила. Теперь следует вспомнить о первом слагаемом (4):

$$\vec{E}_{rough} = Q_d \frac{(\vec{r}_\alpha^j - \vec{r}_d)}{r_{jd}^3} - \vec{R}(Q_d, \vec{r}_{jd}), \quad (6)$$

а точнее об эффективности его вычисления. Такое впечатление, что вся трудоемкость алгоритма переключалась из второго слагаемого (2) в первое слагаемое (4). Следует избегать ситуации, когда в погоне за лишним процентом точности при вычислении второго слагаемого (2) мы в несколько раз замедлим весь алгоритм.

Итак, возникает вопрос, как по заданному распределению плотности заряда облака $\rho_d(Q_d, \vec{r})$ определить создаваемое им в точке \vec{r}_α^j поле $\vec{R}(Q_d, \vec{r}_{jd})$?

Здесь уже не обойтись без какого-нибудь упрощающего предположения. Какое именно упрощение будет использоваться зависит от конкретной задачи. Перечислим некоторые возможные упрощения:

1. “Ионную шубу” с достаточной точностью можно считать сферической. В этом случае в качестве распределения заряда $\rho_d(Q_d, r)$ можно взять функцию, зависящую только от расстояния до центра пылинки. Тогда поле \vec{R} вычисляется аналитически.

2. Сила \vec{F}^{rough} является короткодействующей, т.е. плазма достаточно хорошо экранирует пылинку и на больших расстояниях $\vec{F}^{rough} = 0$. В этом случае, если частиц пыли мало, то можно позволить себе вычислять \vec{F}^{rough} точно даже для очень анизотропного распределения ионов вблизи пылинок.
3. Сила \vec{F}^{rough} зависит от времени только через заряд пылинки и линейно зависит от заряда пылинки. Тогда, рассчитав силу один раз с большой точностью, можно в дальнейшем просто изменять ее в соответствии с изменением заряда.

Для большинства задач (исключение составляет, наверное, только задачи, где пылинки находятся в сверхзвуковом потоке ионов) учет изменения динамики поведения частиц плазмы вследствие взаимодействия с областями фокусировки ионов, является превышением точности модели. Поэтому в модели, изложенной в данной работе, используется сферически-симметричное распределение $\rho_d(Q_d, \vec{r})$.

Как отмечалось выше, если $\rho_d(Q_d, \vec{r})$ сферически-симметрично, то поле $\vec{R}(Q_d, \vec{r}_{jd})$ вычисляется аналитически

$$\vec{R}(Q_d, \vec{r}_{jd}) = \frac{(\vec{r}_\alpha^j - \vec{r}_d)}{r_{jd}^3} \int_0^{r_{jd}} \rho_d(Q_d, r) 4\pi r^2 dr$$

Если к тому же, $\rho_d(Q_d, \vec{r})$ отлична от нуля только внутри некоторой сферы радиуса r_u (будем называть его радиусом усечения), то мы получаем, что вне этой сферы

$$\vec{R}(Q_d, \vec{r}_{jd}) = \frac{(\vec{r}_\alpha^j - \vec{r}_d)}{r_{jd}^3} \int_0^{r_u} \rho_d(Q_d, r) 4\pi r^2 dr = Q_d \frac{(\vec{r}_\alpha^j - \vec{r}_d)}{r_{jd}^3}$$

тогда сила \vec{F}^{rough} равна нулю за пределами сферы усечения:

$$\begin{aligned}
\vec{E}_{rough} &= \begin{cases} Q_d \frac{\vec{r}_{jd}}{r_{jd}^3} - \frac{\vec{r}_{jd}}{r_{jd}^3} \int_0^{r_{jd}} \rho_d(Q_d, r) 4\pi r^2 dr, & r < r_u \\ 0, & r \geq r_u \end{cases} \\
&= \begin{cases} \frac{\vec{r}_{jd}}{r_{jd}^3} \int_0^{r_u} \rho_d(Q_d, r) 4\pi r^2 dr, & r < r_u \\ 0, & r \geq r_u \end{cases} \quad (7)
\end{aligned}$$

Отсюда видно, что для нахождения \vec{E}_{rough} даже не нужно было бы знать распределение $\rho_d(Q_d, r)$, а достаточно посчитать зависимость суммы зарядов частиц плазмы внутри сферы радиуса r от r . А вот для нахождения \vec{E}_{smooth} с помощью решения уравнения Пуассона все-таки придется вычислять $\rho_d(Q_d, r)$. Нам нужно “размазать” отрицательный заряд пылинки внутри сферы радиуса r_u пропорционально величине плотности “ионной шубы”, усредненной по направлениям.

Если быстроедействие на данном участке алгоритма не критично (малое количество пылинок), то можно считать $\rho_d(Q_d, r)$ на каждом шаге. Для этого находим расстояние всех частиц внутри некоторой сферы радиуса r_{coat} до центра сферы и с помощью несложной процедуры усреднения (заряд каждой частицы размазывается по отрезку, соответствующему геометрическим размерам фактора частицы) находим зависимость плотности заряда от радиуса. Поскольку заряд частиц плазмы, попавших в сферу усечения, в общем случае, не будет равен заряду пылинки, то избыток/недостаток заряда можно распределить равномерно по объему сферы.

Если же быстроедействие критично, то вычисление профиля плотности заряда в зависимости от радиуса, можно проводить один раз в несколько десятков шагов, или же вообще, с разумной точностью можно воспользоваться формой плотности заряда дебаевского облака. Ее можно рассчитать заранее, до начала основного расчета. Это можно сделать либо проведя точный расчет для одной пылинки, либо воспользовавшись для вычисления функции плотности формулой для потенциала экранировки частицы конечного размера (Derjaguin–

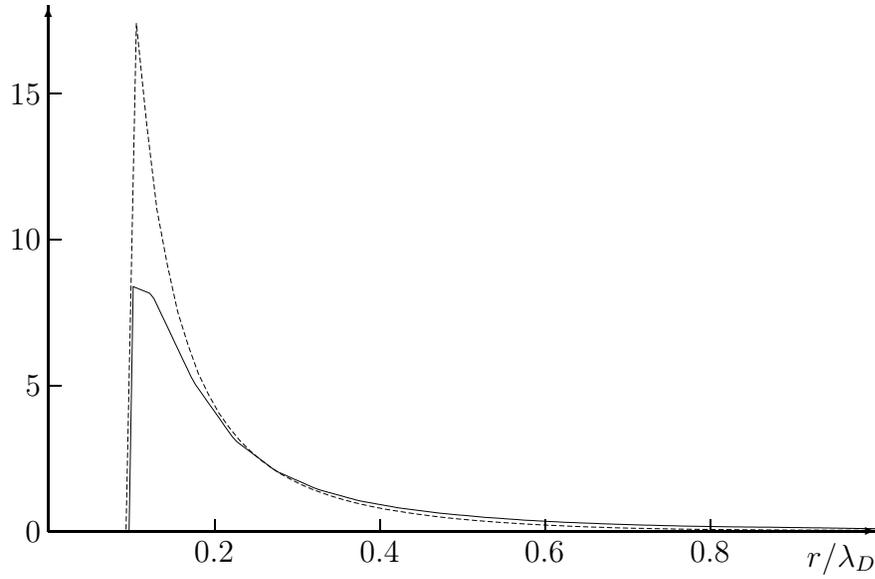


Рис. 1: Зависимость поля от расстояния до центра пылинки, вычисленная *PIC*-методом на сетке с шагом $0.05\lambda_D$ (сплошная линия), и *PDPM* методом на сетке с шагом λ_D (штрихованная линия).

Landau–Verway–Overbeck potential):

$$\phi(r) = \frac{Q}{r} \left(1 + \frac{a}{\lambda_D}\right)^{-1} e^{-\frac{r-a}{\lambda_D}}.$$

В любом случае, если профиль плотности $\rho_d(Q_d, r)$ известен до начала расчета, мы можем провести до начала расчета также взвешивание заряда на сетке (для различных положений пылинки в ячейке) и вычисление зависимости \vec{E}_{rough} от взаимного положения пылинки и частицы. Вычислив с необходимой точностью эти величины и отнормировав их на заряд пылинки, можно в дальнейшем использовать их на протяжении всего расчета. Таким образом, быстроедействие такого модифицированного *PDPM* метода в части вычисления сил практически не будет отличаться от быстрогодействия стандартного *PIC*-метода на крупной сетке.

Однако, чтобы получить с помощью *PIC*-метода точность сравнимую с точностью *PDPM* метода нужно использовать шаг в десятки раз меньший обычного для *PIC*-метода шага (рис. 1). Следует отметить, что уменьшение шага сетки влечет за собой уменьшение шага по времени и увеличение минимально необходимого числа крупных частиц. Поэтому в трехмерной геометрии цена такой точности огромна.

4 Оптимизация параметров модели

В зависимости от выбора набора параметров модели мы, с одной стороны, будем улучшать или ухудшать качество моделирования тех или иных процессов, а с другой стороны — увеличивать или уменьшать время счета. Поэтому встает вопрос об оптимальных параметрах модели (минимальное время счета при заданном качестве описания различных процессов или наилучшее качество при заданном времени счета).

Кроме того, в зависимости от параметров моделируемой системы становится возможным применять те или иные упрощающие предположения. Так например, если среднее расстояние между пылинками много больше дебаевского радиуса, то для большинства частиц можно использовать большой шаг по времени (порядка обратной плазменной частоты, что определяется из условия устойчивости). Если же частица за шаг по времени приближается к какой-нибудь пылинке на расстояние меньшее некоторого критического r_t (как правило $r_t \geq r_e$), то ее шаг по времени разбивается на несколько мелких шагов. Величина мелкого шага по времени зависит от того, какие процессы мы хотим адекватно отразить в нашей модели.

Качество моделирования многих процессов в пылевой плазме определяется точностью расчета силы действующей на частицу. При этом особое значение имеет точность вычисления силы там, где эта сила максимальна и сильно меняется — вблизи пылинки.

Вопрос о качестве аппроксимации гладко меняющейся силы с помощью сетки подробно изложен в [6]. За меру качества аппроксимации взят усредненный по смещениям относительно узлов сетки полный квадрат отклонения сеточной силы $F(r, r_1)$ от $R(r)$.

$$Q = \frac{1}{V_c} \int_{V_c} dx_1 \int_{V_b} dx |F(x, x_1) - R(x)|^2,$$

где V_c — объем ячейки, а V_b — объем области. Величину Q можно представить в виде суммы двух слагаемых

$$Q = Z + P,$$

где Z — полное квадратичное отклонение от эталонной силы сеточной силы, усредненной по смещениям, что дает меру отклонения нефлуктуирующей части

$F(x, x_1)$ от $R(x)$; P — полное квадратичное отклонение сеточной силы от ее среднего по смещениям и оценивает вклад в Q сеточных гармоник. Для выбранной эталонной силы, радиуса усечения и шага сетки H_p слагаемые P и Z можно оценить аналитически или посчитать численно. Если одно из слагаемых много больше другого, то можно сделать вывод о том какой тип погрешности преобладает, и что нужно сделать, чтобы улучшить положение.

Так, если для какого-то набора параметров преобладает слагаемое P , то основной причиной погрешности является недостаточная частота дискретизации заряда и ситуацию можно существенно улучшить, например, уменьшив шаг сетки для решения уравнения Пуассона H_p . Если же наоборот, преобладает Z , это означает, что определяющим фактором выступают угловые погрешности в градиенте или слишком большая энергия части спектра эталонной силы, лежащая за пределами основной зоны, и положение можно существенно улучшить, выбрав оператор градиента более высокого порядка, воспользовавшись другой эталонной силой или увеличив радиус усечения.

В более сложных случаях (большой или сильно-неизотропный поток плазмы на пылинку, плазма сильно обеднена электронами и ионами) полностью компенсировать ошибку не удастся. Тем не менее, описанный подход остается в силе — форм-фактора пылинки должен удовлетворять следующим требованиям:

- Используемая в уравнении Пуассона на сетке плотность заряда должна быть гладкой функцией с ограниченным спектром (хорошо приближаемая на сетке). Поэтому профиль форм-фактора скорее всего будет близким по форме профилю плотности экранирующего облака, но с обратным знаком.
- Форм-фактор должен равняться нулю за пределами радиуса усечения.
- Заряд размазанной (с помощью форм-фактора) пылинки должен быть равен действительному заряду пылинки.

5 Заключение

В работе рассмотрен вопрос вычисления силы, действующей на электрон/ион в пылевой плазме. Показано, что для точного и экономичного вычисления силы необходимо строить алгоритм с учетом разномасштабности задачи как по пространству так и по времени. Описанный в работе метод является модификацией

метода P^3M . Разбиение общей силы на быстро-меняющуюся короткодействующую и гладкую далекодействующую компоненты позволило создать алгоритм, достаточно экономичный, чтобы вести трехмерные расчеты в достаточно большой области, и достаточно точный, чтобы давать результаты, согласующиеся с теоретическими оценками и с результатами гораздо более ресурсоемких расчетов на мелкой сетке.

Список литературы

- [1] Otani N., Bhattacharjee A. Debye shielding and particle correlations in strongly coupled dusty plasmas, *Physical Review Letters*, 1997 v.78, 1468
- [2] Choi S., Kushner M. Mutual shielding of closely spaced dust particles in low pressure plasmas, *J.Appl.Phys.* 1994 v.75, 3351
- [3] Ходатаев Я., Бингхем Р., Тараканов В., Цытович В. Механизмы взаимодействия пылевых частиц в плазме, *Физика плазмы* 1996, т. 22, 1028
- [4] Бэдсел Ч., Ленгдон А., *Физика плазмы и численное моделирование*, Москва, Энергоатомиздат, 1989.
- [5] Сигов Ю.С., "Численные методы кинетической теории плазмы", Москва, МФТИ, 1984.
- [6] Хокни Р, Иствуд Дж, "Численное моделирование методом частиц", Москва, Мир, 1987.