一种用于相对论粒子模拟的电荷守恒指数预测校正 FEMPIC 公式

Omkar H. Ramachandran，*IEEE* 学生会员，Leo C. Kempel，*IEEE* 会士，John Luginsland，*IEEE* 会士，B. Shanker，*IEEE* 会士

arXiv:2303.08037v1 [math.NA] 14 Mar 2023

摘要——**近年来，电荷守恒电磁有限元粒子网格法取得了长足进展。这些进展主要体现在麦克斯韦求解器的蛙跳时间步进格式上，这在很大程度上得益于该方法严格遵循了表示场、电荷和测量电流的恰当空间。不幸的是，基于蛙跳法的求解器（及其其他变体）仅具条件稳定性。近期研究表明，采用无条件稳定时间步进格式构建的电磁有限元粒子网格法（EM-FEMPIC）能够实现电荷守恒。结合准亥姆霍兹分解，这些方法既无条件稳定，又能以机器精度满足高斯定律。然而，这种架构是为采用显式粒子积分器的系统设计的，其中场和速度相差一个时间步。尽管文献中已有完全自洽的方法，但它们遵循经典范式：将一组一阶微分方程（麦克斯韦方程和牛顿方程）组合起来，并使用积分器求解该系统。这些方法也存在与早期方法相同的副作用——它们具有条件稳定性。本文提出一种不同的方法：将无条件稳定的麦克斯韦求解器与用于求解牛顿方程的指数预测校正法相结合。数值实验将表明，所提方法能够在粒子网格法方案中守恒能量，实现无条件稳定的电磁场求解；其求解牛顿方程的精度远高于传统 Boris 求解器，并能以机器精度守恒电荷。我们还进一步展示了该方法相较于其他用于求解牛顿方程的多项式方法的优势，例如广为人知的 Boris 推进。**

索引词—**有限元法、粒子网格、粒子演化方案、辛更新、Boris 推进、预测校正。**

I. 引言

在电磁场中对运动带电粒子进行协同仿真，对于加速器设计、脉冲功率器件、器件灭菌、高精度刻蚀等众多应用都至关重要 [1]–[3]。这一需求推动了多种计算方法的发展，其中最重要的是粒子网格（PIC）技术。尽管 PIC 方法传统上以时域有限差分法（FD-TD）电磁求解器为基础，但近期的进展使有限元法（FEM）成为可能[4]–[8]，同时也能更好地解析复杂几何结构，并更深入地认识到必须严格遵循场、通量、电荷和电流的 de-Rham [9], [10]关系。这些关系严格定义了用于表示各种场和电流量的基函数应属于哪些函数空间，并提供适当的变换，使不同物理量能够相互关联。文献中也将这一特点称为保结构方法 [11]–[13]。电磁有限元粒子网格（EM-FEMPIC）方法的进展主要采用基于蛙跳的麦克斯韦求解器；这类求解器可证明不存在零空间且满足高斯定律，从而无需采用散度清理 [4]等代价高昂的后处理手段即可守恒电荷。文献 [14]对这些性质进行了深入研究，并提出了一系列通用规则；遵循这些规则即可构建能够自然守恒电荷的方法。

正如可以想象的那样，主要缺点在于，基于麦克斯韦方程组蛙跳法求解的数值方法只有条件稳定性，且时间步长取决于网格中的最精细特征。粒子网格法也可以采用无条件稳定的隐式麦克斯韦求解器和波动方程求解器，同时保持电荷守恒 [15]；然而，对于麦克斯韦求解器，需要处理直流零空间；对于波动方程，则需要处理随时间增长的零空间。不过，采用准亥姆霍兹分解来表示场和通量，可以彻底解决这两类问题 [16]。事实上，这种方法通过对合方程显式强制满足两条高斯定律。更重要的是，两个旋度方程的解散度为零 [16]，因此不会破坏高斯定律的满足条件。此方法还进一步结合了包络跟踪技术，以更好地分析窄带系统 [17]。

尽管取得了这些进展，仍有一些尚未解决的问题。其中一个主要挑战是确保每个时间步都满足自洽性；也就是说，场、位置和速度都需要保持自洽。通常的做法是将麦克斯韦方程组和牛顿方程都化为一组耦合一阶偏微分方程，再使用适当的积分器对其进行整体演化。另一种做法是将麦克斯韦方程组的演化相对于牛顿方程的演化错开一个时间步，也就是说，采用显式演化。

Omkar H. Ramachandran 和 Leo C. Kempel 任职于密歇根州立大学电气与计算机工程系，地址：密歇根州东兰辛，邮编 48824。John Luginsland 曾任职于密歇根州立大学电气与计算机工程系，目前任职于美国空军研究实验室/空军科学研究办公室，地址：弗吉尼亚州阿灵顿，邮编 22201。B. Shanker 任职于俄亥俄州立大学电气与计算机工程系，地址：俄亥俄州，邮编 43210。电子邮箱：ramach21@msu.edu

前者具有自洽性，而后者则不具备。为便于说明，下面深入探讨后者，并指出以下几点：(a) 使用 Boris 推进演化牛顿定律，并使用蛙跳法求解麦克斯韦系统，是构建粒子网格法方案 [4] 时最常用的方法之一；(b) Boris 时间推进要么守恒动量，要么守恒能量，且无论哪种情况都会保持相空间体积，并且计算开销较低 [18], [19]；(c) 随着时间步长增大，会出现相位误差 [20]；(d) 麦克斯韦系统的蛙跳法演化具有条件稳定性，其时间步长取决于最小特征尺度。人们对构建自洽方法有着浓厚兴趣 [21]。此类方法的现有实现通常采用所谓的“动力学奴役”方法，将麦克斯韦系统和粒子系统组合成一个大型耦合求解器，再通过适当的非线性求解器对其求解[22]。这种方法显然有一个缺点：计算开销非常大，因为系统规模与粒子数量同阶。因此，许多动力学奴役方法的实现往往依赖无矩阵的无雅可比非线性求解器，以避免存储组合系统矩阵所需的巨大空间[23]。显然，依赖特定的非线性求解器也有其弊端。此外，动力学奴役所采用的时间步长也受到稳定性约束；与 Boris 推进类似，位置和速度更新基于多项式，其收敛速率取决于近似阶数。

本研究的主要目标是探索另一种粒子与 Maxwell 方程自洽演化的方法，并满足以下要求：(a) Maxwell 系统的演化应无条件稳定，也就是说，时间步长应仅由物理因素决定，而不受用于描述几何结构的特征尺寸限制；(b) 应能自然地满足高斯定律，从而实现电荷守恒；(c) 应具有更优的误差收敛性。

因此，本研究的目标有两个方面：(a) 首先，我们通过一系列仅涉及粒子的数值实验，分析一种基于指数基组 [24] 的新型预测校正积分器的精度和误差收敛性。(b) 利用该积分器，我们构建了一种在预测校正更新下运行的电荷守恒 EM-FEMPIC 方案。我们通过一系列解析和数值结果，验证了所提出的积分器和整体 PIC 方案。

本文结构如下：第 II-B 节和第 II-C 节将概述基于准 Helmholtz 的电磁求解器的构建。第 II-D 节及后续章节将详细说明并分析多种不同粒子演化方案的能量守恒。随后，第 III 节将通过多项解析和数值测试，验证所提出的粒子演化方案及整体 PIC 方法，最后在第 IV 节给出总结。

II. 公式化

A. 问题陈述

考虑一个区域 $\Omega \in \mathbb{R}^3$，其边界为曲面 $\partial\Omega$，且其中包含一种带电粒子。该区域受到外部场的作用，使带电粒子加速，并进而产生随空间和时间变化的电场和磁场，分别记为$\mathbf{E}(\mathbf{r}\ t)$ 和$\mathbf{B}(\mathbf{r}\ t)$，其中$\mathbf{r} \in \Omega$ 且 $t \in [0,\infty)$。粒子在相空间中的动力学可由分布函数（粒子相空间分布函数） $f(t,\mathbf{r},\mathbf{v})$ 表示，该函数满足 Vlasov方程：

$$\begin{aligned}\partial_t f(t,\mathbf{r},\mathbf{v}) + \mathbf{v}\cdot\nabla f(t,\mathbf{r},\mathbf{v}) + \\ \frac{q}{m}\left[\mathbf{E}(\mathbf{r},t) + \mathbf{v}\times\mathbf{B}(\mathbf{r},t)\right]\cdot\nabla_v f(t,\mathbf{r},\mathbf{v}) = 0.\end{aligned} \tag{1}$$

q 和 m 分别表示粒子电荷和质量。下文假设 Ω 中的背景介质为自由空间。因此，我们分别用 ϵ_0 和 μ_0表示自由空间的介电常数和磁导率，并用 c表示光速。

B. 离散解

式 (1) 的解通过粒子网格形式求得，其中区域内的电荷和电流分布以粒子相空间分布函数的有限个矩表示 $f(t,\mathbf{v},\mathbf{r})$

$$\rho(\mathbf{r},t) = \sum_{p=1}^{N_p} q_p S(\mathbf{r}-\mathbf{r}_p(t)), \tag{2a}$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r},t) = \sum_{p=1}^{N_p} q_p \mathbf{v}_p(t) S(\mathbf{r}-\mathbf{r}_p(t)). \tag{2b}$$

这里， N_p 表示仿真中的此类样本或宏粒子的总数。同样， q_p 和 m_p 分别表示第 p个粒子的电荷和质量。仿真区域 Ω 内场的动力学遵循麦克斯韦方程组，可写为

$$\nabla\times\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = -\partial_t\mathbf{B}(\mathbf{r},t), \tag{3a}$$

$$\nabla\times\mu_0^{-1}\mathbf{B}(\mathbf{r},t) = \partial_t\mathbf{G}(\mathbf{r},t) + \partial_t\epsilon_0\mathbf{E}(\mathbf{r},t), \tag{3b}$$

其中 $\mathbf{G}(\mathbf{r}\ t) = \int_0^t \mathbf{J}(\mathbf{r}\ \tau)d\tau$。此外，场还受高斯电定律和磁定律的约束

$$\nabla\cdot\epsilon_0\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \rho(\mathbf{r},t), \tag{4a}$$

$$\nabla\cdot\mathbf{B}(\mathbf{r},t) = 0. \tag{4b}$$

式 (3) 中的旋度方程采用有限元公式在由 N_e 条边和 N_f个面组成的四面体网格上进行空间离散，其中场在空间中用 Whitney基形式表示：$\mathbf{E}$ $(\ t) = \sum_{i=1}^{N_e} e_i(t)\ \overset{(1)}{i}(\ )\ (\ t) = \sum_{i=1}^{N_f} b_i(t)\ \overset{(2)}{i}(\ )$ $e_i(t)$ $\mathbf{rWr}$、$\mathbf{BrWr}$，分别对应随时间变化的系数和 $b_i(t)$，随后进行 Galerkin 测试。时间上，该系统采用 Newmark-β [25]¯公式离散，其中 $\gamma = 0.5$ 和 $\beta = 0.25$。下文中， $E = [e_1(t),\ e_2(t),\ \cdots,\ e_{N_e}(t)]$， $\bar{B} = \left[b_1(t),\ b_2(t),\ \cdots,\ b_{N_f}(t)\right]$。我们用上标 n 表示量在 $t^n = n\Delta_t$ 处的取值，其中 Δ_t 是时间步长，例如 $E^n = E(t^n)$。混合有限元离散的完整细节见 [26]–[30] 及其中的参考文献。

C. 准亥姆霍兹

众所周知，采用第 II-B 节所述公式并结合隐式时间推进方案时，由于麦克斯韦求解器或波动方程公式均存在零空间，无法满足高斯定律 [31], [32], ；两者都采用隐式、无条件稳定的时间步进。缓解这一问题最全面的方法是采用所谓的准亥姆霍兹分解，将场分量划分为无散分量和有散分量。随后可显式求解有散分量，从而确保精确满足库仑规范。以下简要概述 [16] 中详尽介绍的准亥姆霍兹设置。

下文中，下标为‘ns’的变量表示有散量，而下标为‘s’的变量则表示无散量。

1) 相关矩阵定义：首先，将集合 $\mathcal{N}$、$\mathcal{E}$、$\mathcal{F}$ 和 $\mathcal{T}$ 分别定义为仿真区域网格中的节点、边、面和四面体集合，其元素数量分别为 N_n、N_f、N_e 和 N_t。用于描述准亥姆霍兹框架的各子矩阵如下：

$$[\star_\epsilon]_{i,j} = \langle \mathbf{W}_i^{(1)}(\mathbf{r}), \varepsilon \cdot \mathbf{W}_j^{(1)}(\mathbf{r})\rangle; i,j \in \mathcal{E} \tag{5a}$$

$$[\star_{\mu^{-1}}]_{i,j} = \langle \mathbf{W}_i^{(2)}(\mathbf{r}), \mu^{-1} \cdot \mathbf{W}_j^{(2)}(\mathbf{r})\rangle; i,j \in \mathcal{F} \tag{5b}$$

$$[\star_\rho]_{i,j} = \langle W_i^{(3)}(\mathbf{r}), W_j^{(3)}(\mathbf{r})\rangle; i,j \in \mathcal{T} \tag{5c}$$

其中，$\mathbf{W}_i^{(1)}$、$\mathbf{W}_i^{(2)}$ 和 $W_i^{(3)}$ 分别是 Whitney 边、面和体积基函数。此外，我们定义以下矩阵：

$$[\mathbf{M}_g]_{i,j} = \langle \mathbf{W}_i^{(1)}(\mathbf{r}), \nabla W_j^{(0)}(\mathbf{r})\rangle; i \in \mathcal{E}, j \in \mathcal{N} \tag{6a}$$

$$[\mathbf{M}_c]_{i,j} = \langle \mathbf{W}_i^{(2)}(\mathbf{r}), [\nabla\times]\mathbf{W}_j^{(1)}(\mathbf{r})\rangle; i \in \mathcal{F}, j \in \mathcal{E} \tag{6b}$$

$$[\mathbf{M}_d]_{i,j} = \langle W_i^{(3)}(\mathbf{r}), [\nabla\cdot]\mathbf{W}_j^{(2)}(\mathbf{r})\rangle; i \in \mathcal{T}, j \in \mathcal{F} \tag{6c}$$

$$[\nabla] = \varepsilon[\star_\epsilon]^{-1}[\mathbf{M}_g] \tag{6d}$$

$$[\nabla\times] = \mu^{-1}[\star_{\mu^{-1}}]^{-1}[\mathbf{M}_c] \tag{6e}$$

$$[\nabla\cdot] = [\star_\rho]^{-1}[\mathbf{M}_d] \tag{6f}$$

2) 投影算子定义：为了将有散分量与用于表示电场的基形式分离，我们定义投影算子 $[\bar{P}]_e^\Sigma$ 和 $[\bar{P}]_e^\Lambda$，将电场分解如下（其中 † 表示 Moore-Penrose 伪逆）：

$$[\bar{P}]_e^\Sigma = \Sigma(\Sigma^T\Sigma)^\dagger\Sigma^T \tag{7a}$$

$$[\bar{P}]_e^\Lambda = \mathcal{I} - [\bar{P}]_e^\Sigma \tag{7b}$$

$$\left[\bar{P}\right]_b^\Lambda = \mathcal{I} - \Sigma_m\left(\Sigma_m^T\Sigma_m\right)^\dagger\Sigma_m^T \tag{7c}$$

其中 $[\Sigma] = \epsilon_0[\mathbf{M}_g]$ 且 $[\Sigma]_m = [\nabla\cdot]^T$。利用这些投影算子，我们现在可以将电通量密度分解定义为

$$\bar{D}(t) = \Sigma\bar{E}_{ns}(t) + \left[\bar{P}\right]_e^\Lambda \bar{D}(t) \tag{8}$$

并将磁通量密度分解定义为

$$\bar{B}_s(t) = \left[\bar{P}\right]_b^\Lambda \bar{B}(t) \tag{9}$$

简单来说，这些投影算子使我们能够将 $B(t)$ 和 $D(t)$ 分解为散度严格为零的项（即“无散分量” $\bar{B}_s(t)$ 和 $\left[\bar{P}\right]_e^\Lambda \bar{D}(t)$）以及散度非零的项（$\Sigma E_{ns}(t)$）。由于对任一投影算子应用离散散度算子，结果均为 0（如 [16]所示），因此可知，该公式化强制使 $B_s(t)$的散度为零。

3) 离散系统：如前所述，我们的最终目标是求解麦克斯韦方程组的所有方程。首先，给定该分解后，对 (9) 和 (8) 应用离散散度，得到一个恒为零的矩阵，并且

$$\left[C_z^e\right]^T\left[\nabla\right]^T\left[\star_e\right]\left[\nabla\right]\left[C_z^e\right]\bar{E}_{ns}(t) = -\left[C_z^e\right]^T\left[\nabla\right]^T\bar{G}(t). \tag{10}$$

将麦克斯韦方程组改写为利用 (8) 和 (9) 中的分解形式，并显式求解 (10) 中的 $E_{ns}(t)$ 后，可得

$$\begin{aligned}\left[\bar{Z}\right]_{11}\partial_t\bar{B}_s(t) + \left[\bar{Z}\right]_{12}\bar{E}_s(t) &= -\left[\bar{Z}\right]_{13}\bar{E}_{ns}(t)\\ \left[\bar{Z}\right]_{21}\partial_t\bar{E}_s(t) - \left[\bar{Z}\right]_{22}\bar{B}_s(t) &= -\partial_t\bar{G}(t) - \left[\bar{Z}\right]_{23}\partial_t\bar{E}_{ns}(t)\end{aligned} \tag{11}$$

其中 E_s 和 B_s 是通过树余树映射 $[C_c^e]$ 和 $\left[C_c^b\right]$从单连通网格中提取的。对于单连通结构，构造此映射很简单；但对于多连通几何体，则较为复杂。(11) 中涉及的各个子矩阵定义如下：

$$[\mathbf{Z}]_{11} = [\mathbf{C}_c^b]^T[\mathbf{P}]_b^\Lambda[\mathbf{C}_c^b] \tag{12a}$$

$$[\mathbf{Z}]_{12} = [\mathbf{C}_c^b]^T[\nabla\times][\star_\varepsilon]^{-1}[\mathbf{P}]_e^\Lambda[\star_\varepsilon][\mathbf{C}_c^e] \tag{12b}$$

$$[\mathbf{Z}]_{13} = [\mathbf{C}_c^b]^T[\nabla\times][\star_\varepsilon]^{-1}\Sigma[\mathbf{C}_z^e] \tag{12c}$$

$$[\mathbf{Z}]_{21} = [\mathbf{C}_c^e]^T[\mathbf{P}]_e^\Lambda[\star_\varepsilon][\mathbf{C}_c^e] \tag{12d}$$

$$[\mathbf{Z}]_{22} = [\mathbf{C}_c^e]^T[\nabla\times]^T[\star_{\mu^{-1}}][\mathbf{P}]_b^\Lambda[\mathbf{C}_c^b] \tag{12e}$$

$$[\mathbf{Z}]_{23} = [\mathbf{C}_c^e]^T\Sigma[\mathbf{C}_z^e] \tag{12f}$$

如前所述，使用 a Newmark-β 时间步进方案求解 (11)。$E_s(t)$ 和 $B_s(t)$ 的解仍存在 DC 零空间，但其散度严格为零。因此，高斯定律仍得到严格满足。

D. 粒子演化

粒子演化方案主要用于求解粒子在给定电磁场作用下的位置和速度随空间和时间的变化。具体而言，粒子运动可通过以下方式求得：

$$\frac{\partial\gamma[\mathbf{v}_p]\mathbf{v}_p(t)}{\partial t} = \mathbf{a}_p(t) = \frac{q}{m}\left(\mathbf{E}(\mathbf{r}_p,t) + \mathbf{v}_p\times\mathbf{B}(\mathbf{r}_p,t)\right) \tag{13a}$$

$$\frac{\partial\mathbf{r}_p(t)}{\partial t} = \mathbf{v}_p(t) \tag{13b}$$

其中，$\mathbf{v}_p(t)$ 和$\mathbf{r}_p(t)$ 分别是 $\mathbb{R}^3$ 中的向量，表示给定粒子在时间t的速度和位置；而 $\gamma[\mathbf{v}] = \left(1 - |\mathbf{v}|^2/c^2\right)$ 是相对论时间膨胀函数。下文将分析求解这些方程的不同方法及其稳定性性质。

E. Boris 推进

Boris 方法本质上是一种针对式 (13a) 和式 (13b) 的改进蛙跳求解器，它将相对论速度$\mathbf{u}^p$ 的更新分为三个基本步骤。定义$\mathbf{u}_p^n$ 和$\mathbf{u}_p^{n+1}$为时间步 n处的粒子三维速度，

1) 首先，将一半的电力加到一个虚拟变量$\mathbf{u}^{-}_p$上。

$$\mathbf{u}_p^- = \mathbf{u}_p^n + \epsilon\Delta_t \tag{14}$$

其中，$\epsilon = (q_p/2m_p)\mathbf{E}(\mathbf{r}_p^{n+1/2}, t^{n+1/2})$，$\Delta_t$ 为时间步长。

2) 接下来，加入磁场贡献，

$$\mathbf{u}_p^+ = \mathbf{u}_p^- + \Delta_t \frac{q_p}{m_p}\left(\mathbf{v}_p^{n+1/2} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_p^{n+1/2}, t^{n+1/2})\right) \tag{15}$$

3) 最后，加入另一半电力，得到$\mathbf{u}_p^{n+1}$。

$$\mathbf{u}_p^{n+1} = \mathbf{u}_p^+ + \epsilon\Delta_t \tag{16}$$

多年来，人们提出了多种计算式 (15) 的方法，其中一些方法会引入相位误差 [20], 但它们都具有一个基本性质：都会使$\mathbf{u}^{-}_p$ 完成一次精确旋转。因此，施加的磁力永远不会对粒子做功。由此可知，整个方法在任意磁场作用下都满足能量守恒。虽然证明能量守恒的方法有很多，我们考虑了在强迫项于半步处计算时，隐式蛙跳表示单步更新的 z- 变换。证明该模板满足能量守恒，足以说明将式 (14)–(16) 分解为多个子步后仍能满足能量守恒。对于在一般磁场作用下运动的粒子，其速度更新模板可写为：

$$(\mathbf{I} - \mathbf{\Omega})\,\mathbf{v}_p^{n+1} = (\mathbf{I} + \mathbf{\Omega})\,\mathbf{v}_p^n. \tag{17}$$

这里 $\mathbf{\Omega}$可以写成

$$\mathbf{\Omega} = \begin{pmatrix} 0 & \omega_z & -\omega_y \\ -\omega_z & 0 & \omega_x \\ \omega_y & -\omega_x & 0 \end{pmatrix}, \tag{18}$$

其中 $\omega_k = \Delta_t(q/m\gamma_p^{n+1/2})\mathbf{B}_k(\mathbf{r}_p^{n+1/2}, t^{n+1/2})$ 对于 $k \in x, y, z$ 以及 $\mathbf{I}$是 $\mathbb{R}^{3\times3}$ 中常规的单位矩阵。定义 $\mathbf{M} = (\mathbf{I} + \mathbf{\Omega})^{-1}(\mathbf{I} - \mathbf{\Omega})$，则式（17）的 z 变换为

$$\mathbf{M}z = \lambda z = 1 \tag{19}$$

其中 λ 表示$\mathbf{M}$的特征值。根据谱定理，若要使系统稳定，$|z| <= 1$ 必须对任意选取的特征值组合成立。不过，我们还可以定义一个更强的条件：$|z| = 1$ 在磁场作用下，更新模板在复平面上严格定义一个完美旋转。过去曾采用这种方法评估能量守恒数值方法；参见 [25], [27] 及其中的参考文献。因此，$\left|\left(\mathbf{v}_p^{n+1}\right)^2\right| = \left|\left(\mathbf{v}_p^{n}\right)^2\right|$ 这意味着粒子的动能无论磁场的形式如何，能量都能精确守恒。对于 Boris 更新，特征值 λ 为

$$\lambda = \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ \frac{1-\left(\omega_x^2+\omega_x^2+\omega_x^2\right)-2j\sqrt{\omega_x^2+\omega_x^2+\omega_x^2}}{1+\omega_x^2+\omega_y^2+\omega_z^2} \\ \frac{1-\left(\omega_x^2+\omega_x^2+\omega_x^2\right)+2j\sqrt{\omega_x^2+\omega_x^2+\omega_x^2}}{1+\omega_x^2+\omega_y^2+\omega_z^2} \end{array} \right\} \tag{20}$$

通过简单的代数运算可以证明，对于任意 $\omega_x, \omega_y, \omega_z \in \mathbb{R}$，式（20）中的三个特征值的大小恰好都为单位值。因此，结合式（19）可知，z 变换的根必定恰好位于单位圆上，从而守恒能量。

F. 多项式预测校正法

接下来，我们介绍亚当斯预测校正更新。这些方法通常通过将强迫项 $\mathbf{a}_p(t) = q_p/m_p\,(\mathbf{E}(\mathbf{r}p, t) + \mathbf{v}_p(t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}p, t))$以及 $\mathbf{v}_p(t)$ 表示为给定阶数的多项式函数，并使用定义在一个时间步长度内的脉冲函数对其进行测试来推导。具体而言，该过程的显式预测步骤（通常称为亚当斯－巴什福思更新）涉及将加速度 $\mathbf{a}p$ 和相对论速度$\mathbf{u}p$ 表示为

$$\mathbf{a}_p(t) = \sum_{i=1}^{N_t} \mathbf{a}_p^i L_k(t - t^i) \tag{21a}$$

$$\mathbf{v}_p(t) = \sum_{i=1}^{N_t} \mathbf{v}_p^i L_k(t - t^i) \tag{21b}$$

其中，$L_k(t - t_i)$ 指的是一个 k阶拉格朗日多项式，它包含 t_i 处的样本以及时间上位于其之前的 $k-1$ 个样本。接下来，通过对微分方程与脉冲函数取内积，可得到一个模板

$$P^n(t) = \begin{cases} 1 & \text{if } t \in \left[t^n, t^{n+1}\right] \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \tag{22}$$

对 $k = 4$所需的积分进行求值后，可得到以下更新模板：

$$\mathbf{u}_p^{n+1} = \mathbf{u}_p^n + \frac{\Delta_t}{24}(55\mathbf{a}_p^n - 59\mathbf{a}_p^{n-1} + 37\mathbf{a}_p^{n-2} - 9\mathbf{a}_p^{n-3}), \tag{23a}$$

$$\mathbf{r}_p^{n+1} = \mathbf{r}_p^n + \frac{\Delta_t}{24}(55\mathbf{v}_p^n - 59\mathbf{v}_p^{n-1} + 37\mathbf{v}_p^{n-2} - 9\mathbf{v}_p^{n-3}). \tag{23b}$$

类似地，可以通过修改式（21）构造一个隐式格式，使拉格朗日多项式以 $n+1$ 为中心，并向前回溯 $k-1$ 步。使用相同的检验函数后，我们得到所谓的亚当斯－莫尔顿更新，对于 $k = 4$，其形式如下：

$$\mathbf{u}_p^{n+1} = \mathbf{u}_p^n + \frac{\Delta_t}{24}(9\mathbf{a}_p^{n+1} + 19\mathbf{a}_p^n - 5\mathbf{a}_p^{n-1} + \mathbf{a}_p^{n-2}) \tag{24a}$$

$$\mathbf{r}_p^{n+1} = \mathbf{r}_p^n + \frac{\Delta_t}{24}(9\mathbf{v}_p^{n+1} + 19\mathbf{v}_p^n - 9\mathbf{v}_p^{n-1} + \mathbf{v}_p^{n-2}). \tag{24b}$$

为使用这些模板构建预测校正格式，在每个时间步，按照（23）计算猜测的速度 $\tilde{}\mathbf{v}p$ 和位置 $\tilde{}\mathbf{r}p$ 。然后将它们代入（24），替换其中的$\mathbf{v}_p^{n+1}$和$\mathbf{r}_p^{n+1}$。下文将把

这种采用四阶多项式的预测校正方案称为“Adams4”，并将采用三阶多项式的类似方法称为“Adams3”。

1) 能量守恒分析：这里采用与分析 Boris 更新相同的方法来分析能量守恒。考虑一个简单系统，其中磁场为常量，且仅沿 $\hat{z}$ 方向。为了尽可能让该方法有机会守恒能量，我们假设 $\mathbf{u}_p^n$、$\mathbf{u}_p^{n-1}$和 $\mathbf{u}_p^{n-2}$的大小相同。因此，$\gamma_p^n = \gamma_p^{n-1} = \gamma_p^{n-2}$。如果该方法在这些极为有利的条件下仍无法守恒能量，那么就足以认定它在一般磁场下也无法做到这一点。根据我们的设定，Adams4 速度更新的校正步可写为

$$(\mathbf{I} + 9\mathbf{\Omega})\,\mathbf{u}_p^{n+1} - (\mathbf{I} - 19\mathbf{\Omega})\,\mathbf{u}_p^{n} + 5\mathbf{\Omega}\mathbf{u}_p^{n-1} - \mathbf{\Omega}\mathbf{u}_p^{n-2} = 0 \tag{25}$$

其中 $\mathbf{\Omega}$ 的形式与式 (18) 相同，但其中 $\omega_x = \omega_y = 0$和 $\omega_z = (\Delta_t q_p/24m_p)\gamma_p^n \mathbf{B}(\mathbf{r}_p^n, t^n)$。将每个矩阵乘积替换为其特征值，并进行 z 变换，可得

$$\left(\lambda_1 z^3 - \lambda_2 z^2 + 5\lambda_3 z + \lambda_4\right)\mathbf{u}_p(z) = 0 \tag{26}$$

对于我们选定的系统，特征值可以取以下值：

$$\lambda_1 = \{1, 1 - j9\omega_z, 1 + j9\omega_z\} \tag{27a}$$

$$\lambda_2 = \{1, 1 + j19\omega_z, 1 - j19\omega_z\} \tag{27b}$$

$$\lambda_3 = \lambda_4 = \{0, j\omega_z, -j\omega_z\} \tag{27c}$$

显而易见，只有一种特征值组合能使 z 的根位于单位圆上，即当 $\lambda_1 = \lambda_2 = 1$ 和 $\lambda_3 = \lambda_4 = 0$时，从而得到：

$$z^3 - z^2 = z^2(z - 1) = 0 \tag{28}$$

它有一个 $z = 1$的根。一般而言，其他所有特征值组合都会产生大小大于或小于 1 的根。虽然或许可以找到一些特定的 ω_z 值，使多个特征值组合产生位于单位球上的根，但这会使整个方法对步长极其敏感，因此通常不适合作为一种能量守恒方法来推进粒子。

G. 指数预测校正

到目前为止，我们考虑了使用多项式对粒子参数样本进行插值的更新方案。不过，也可以使用指数函数来实现这一目的。 [24], 中提出了一种构造 ODEs 的 $PE(CE)^m$ 方法，其中相对论速度和位置表达式的更新可以写为

$$\mathbf{u}_p^{n+1} = \sum_{i=1}^{k}\left[p_i \mathbf{v}_p^{n+1-i} + p_{k+i}\mathbf{a}_p^{n+1-i}\right] \tag{29a}$$

$$\mathbf{r}_p^{n+1} = \sum_{i=1}^{k}\left[p_i \mathbf{r}_p^{n+1-i} + p_{k+i}\mathbf{v}_p^{n+1-i}\right] \tag{29b}$$

对于一组合适的系数 p_i，其具体构造方法见 [24]。这组系数对区间 $[t^n, t^{n+k}]$ 内的未知量$\mathbf{v}_p(t)$ 和 $\mathbf{r}_p(t)$ 进行指数插值，可写为

$$\mathbf{u}_p(t) = \sum_{i=n}^{n+k} \alpha_i^u \mathbf{u}_p^i e^{\lambda_i t} \tag{30a}$$

$$\mathbf{r}_p(t) = \sum_{i=n}^{n+k} \alpha_i^r \mathbf{r}_p^i e^{\lambda_i t} \tag{30b}$$

其中 α_k，$\lambda_k \in \mathbb{C}$ 表示针对该设置中的参数在复平面中恰当选取的系数。鉴于每次更新涉及的先前时间步数量，无法证明该方法在任意外加场下的稳定性或能量守恒性。然而，与多项式预测校正方法不同，我们通过数值示例表明，该方法对单粒子系统以及应用于完整 EM-FEMPIC 仿真时都能守恒能量。

1) 计算复杂度：由于指数型 PC 方法的系数无法通过解析方式求得，因此计算这些系数会带来额外开销。不过，求解 p_i 只需进行一次，之后即可将其制成表格，用于求解采用相同数量基函数组离散化的不同常微分方程。因此，在 PIC 方法中使用该格式的成本与任何 m步预测校正方法相同。假设使用迭代求解器求解场，则在任意给定时间步演化麦克斯韦方程组的复杂度可写为 $\mathcal{O}(N_{\text{iter}}N_{\text{dof}})$，其中 N_{iter} 表示求解器收敛所需的迭代次数，N_{dof} 表示系统中未知数的总数。实际上，这一成本远高于粒子演化的成本。此外，场求解无条件稳定的特性使得时间步可以远大于采用显式格式时所允许的时间步。因此，尽管 Boris 和 Adams 粒子更新所需的乘法次数少于本文使用的 PC1 格式，但相较于求解场所需的成本，增加的复杂度微不足道。

III. 结果

本节的数值示例分为三个部分。(1) 首先，考虑受均匀电场和磁场作用的系统；(2) 然后，考虑具有非均匀场的系统；(3) 最后，通过扩展粒子束仿真验证整个 EM-FEMPIC格式。

A. 均匀场

本节将考察粒子在电场与磁场组合的作用下的运动，并假设这些场在空间和时间上均为常量。此外，为简化起见，我们考虑一个坐标系，其中 $q_p = m_p = c = 1$。由于我们所有的实验都有解析解，因此多步多项式方法和指数方法的初始条件均已适当设置。最后，在每个数值示例中，

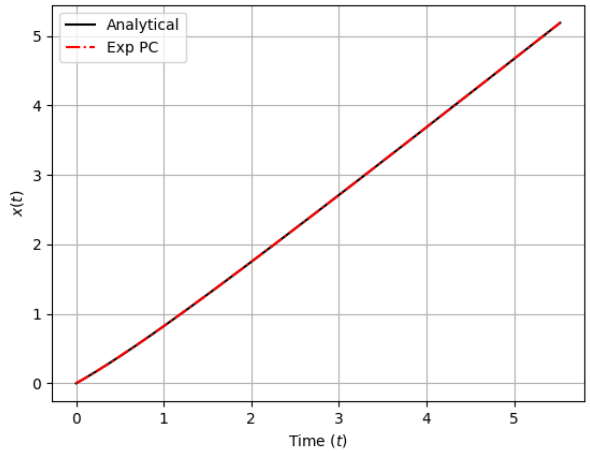

图 1：指数型 PC 与解析解的粒子轨迹对比。

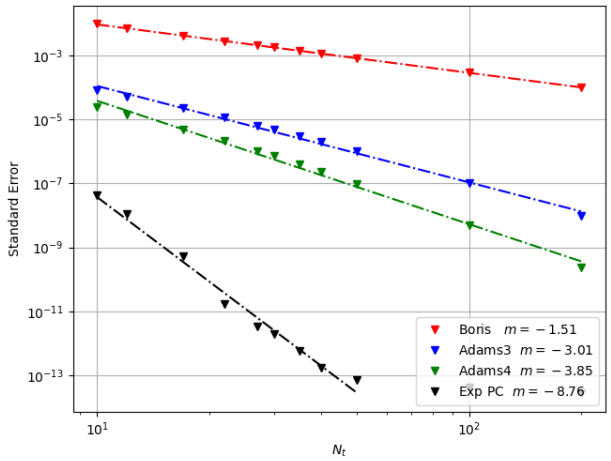

图 2：线性加速示例中的误差收敛（误差定义为计算得到的粒子轨迹与解析粒子轨迹之间的相对范数）。请注意，由于达到该方法的容差下限，指数型 PC 的曲线被截断。

所用的指数型 PC 方法采用了 [24] 中所述的“PC1”模板。具体而言，我们执行了所需的奇异值分解，以在容差 10^{-12} 下获得系数（这作为误差的下界），并选择了半圆盘半径 $\rho = 3.15$，构建了一种方法，该方法使用 22 步先前时间步信息，并通过 18 组指数基组进行插值。

1) 线性加速 $\mathbf{E}(\mathbf{r}\ t) = (1,0,0), \mathbf{B}(\mathbf{r}\ t) = \bar{0}$：首先，我们考虑一个简单示例：一个粒子受电场加速，电场峰值振幅为 1，方向沿 $\hat{}x$ 轴。自然单位到 MKS 单位的映射见 I。粒子的初始相对论动量设定为 $\mathbf{p}^0 = \gamma_p^0 \mathbf{v}_p^0 = (1,0,0)$。图 1 展示了粒子的轨迹图：指数方法预测的轨迹叠加在解析结果之上。

物理量	自然单位	MKS
q_p	1	1.6×10^{-19} 库仑
m_p	1	9.1×10^{-31} 千克
c	1	3×10^{8} 米/秒
$\mathbf{E}_p(\mathbf{r}\ t)$	1	5.6×10^{-12} 伏/米
v_0	$1/\sqrt{2}$	$c/\sqrt{2}$ 米/秒

表 I：直接$\mathbf{E}$ 加速度示例中自然单位制和米-千克-秒制单位之间的换算

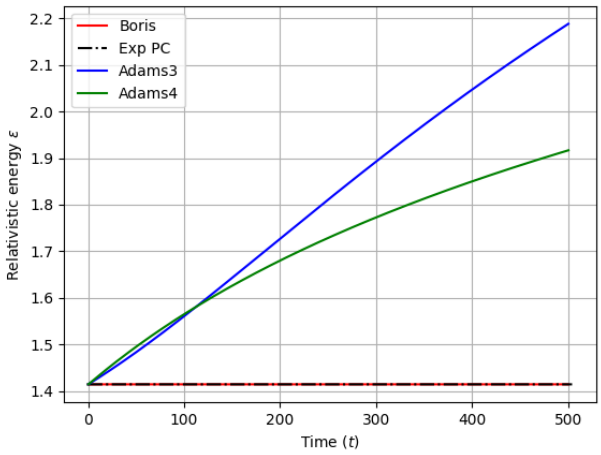

图 3：多个回旋周期内粒子能量的比较。值得注意的是，对于所选时间步长，多项式预测校正格式会产生虚假的能量增长。

所有方法都与预测曲线高度吻合，不过指数方法的位置误差显著更低。图 2 展示了这一点：可以看到，Boris 和 Adams预测校正方法大致遵循多项式阶数所预期的趋势。所使用的最粗和最细时间步长分别为 $\Delta_t = 0.1$ 和 $\Delta_t = 0.005$。另一方面，指数方法的表现要好得多，在因达到该方法的容差而趋于平缓之前，收敛阶数超过 8 阶。所用解析表达式如下，完整推导见 [33]:

$$\mathbf{r}(t) = \frac{m}{q|E|}\left(\sqrt{1+\left(1+\frac{q|E|t}{m}\right)^2} - \gamma(0)\right). \tag{31}$$

因子 $|E|$ 表示所用电场的大小，$\gamma(0)$表示初始相对论因子。

2) 回旋运动 $\mathbf{E}(\mathbf{r}\ t) = \bar{0}$, $\mathbf{B}(\mathbf{r}\ t) = (0,\ 0,\ 1)$: 接下来，我们考察了一个粒子在恒定的沿$\hat{}$方向的磁场中运动时的动力学。

物理量	自然单位	MKS
q_p	1	1.6×10^{-19} 库仑
m_p	1	9.1×10^{-31} 千克
c	1	3×10^{8} 米/秒
$\mathbf{B}_p(\mathbf{r}\ t)$	1	1.2×10^{-3} 特斯拉
r_c	1	1 m
v_0	$1/\sqrt{2}$	$c/\sqrt{2}$ 米/秒

表 II：回旋运动示例中自然单位制和米-千克-秒制单位之间的换算

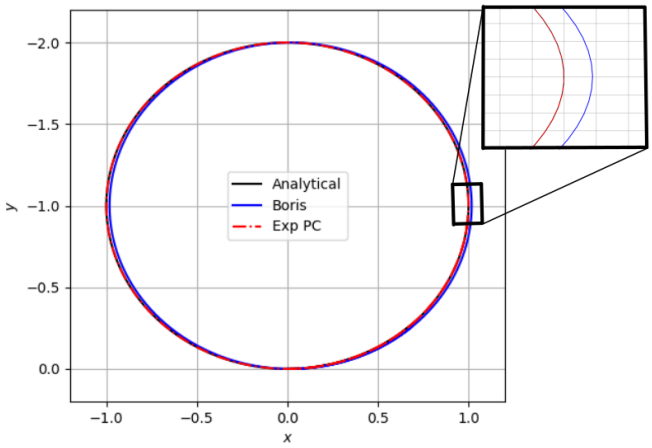

图 4：指数方法得到的粒子轨迹与 Boris 方法以及解析解的比较。请注意，指数方法精度更高，因此轨迹恰好落在解析曲线上；而在相同时间步长下，Boris 解略有偏移。

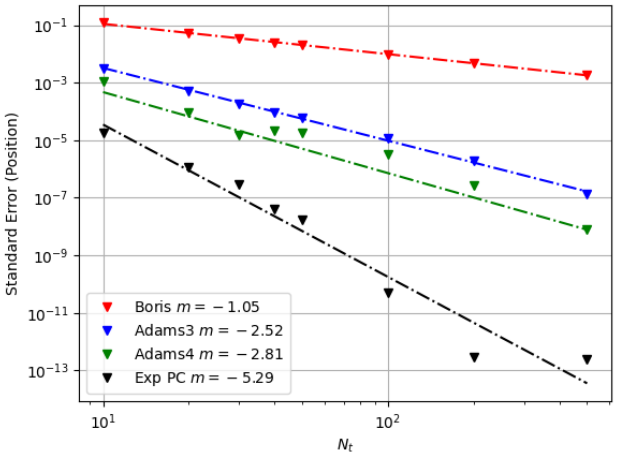

图 6： $|\mathbf{E}| = |\mathbf{B}|$ 设置下误差（定义为计算得到的粒子轨迹与解析粒子轨迹之间的相对范数）的收敛情况。指数方法仍优于 Boris 方法和多项式预测校正方法，但优势较小。

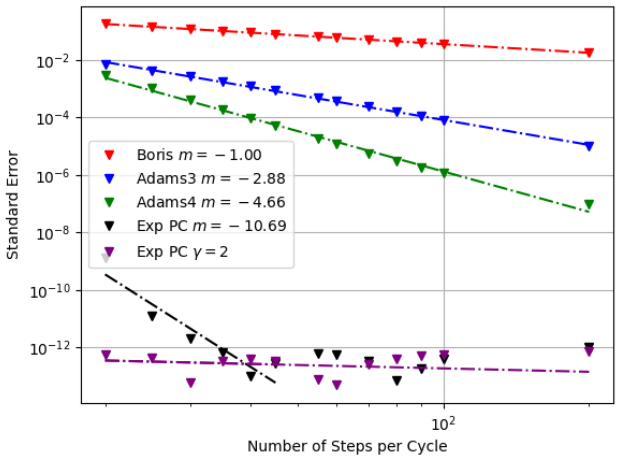

图 5：不同演化方案在单个周期内的位置误差（定义为计算得到的粒子轨迹与解析粒子轨迹之间的相对范数）的收敛情况。再次可以看到，多项式方法的收敛阶大致与所用多项式的阶数相符，而指数方法的收敛速度快得多（达到 11 阶），直至达到设定的容差。

与之前一样，粒子的初始动量设为$\mathbf{p}^0 = \gamma_p^0 \mathbf{v}_p^0 = (1,\ \mathbf{0},\ 0)$。II中提供了自然单位到MKS单位的换算关系。该问题的解析解预测，非相对论回旋频率会降低，而环路半径则恰好增大 γ倍。回旋测试对牛顿求解器的多个不同方面提出了考验。首先，由于粒子仅在磁场作用下运动，因此这是验证我们关于能量守恒的预测的理想设置。我们从图3中注意到

Boris 方法和指数方法能够将相对论能量守恒到 $m_p\gamma_p c$ 机器精度，而多项式方法则会出现虚假加热。其次，由于回旋中心的位置对早期时间偏移极其敏感，因此可以考察不同方法对其位置的预测效果。从图 4 可以明显看出，尽管 Boris 方法严格守恒能量，其轨道仍略有偏移，而精度更高的指数方法则没有这种偏移。我们还可以考察单圈内位置误差的收敛情况，如图 5 所示。图中最粗和最细的步长分别对应 $\Delta_t = 0.5$ 和 $\Delta_t = 0.05$ 。这里可以看到，Boris 推进和多项式预测校正格式的收敛斜率大致与表示阶数相符。相比之下，指数方法的收敛性好得多。为进一步考验系统，我们通过设置初始粒子速度使 $\gamma = 2$，从而令轨道更具相对论性。再次查看图 5，可以看到该方法的收敛性进一步提升，仅需每周期 10 步便达到容差。与前一种情况一样，解析解由 [33],推导，形式如下：

$$\mathbf{r}(t) = \frac{v_0\gamma_0}{|B|}\left[\sin\left(\frac{\gamma_0 q|B|t}{m}\right)\hat{x} + \left(-1+\cos\left(\frac{\gamma_0 q|B|t}{m}\right)\right)\hat{y}\right]. \tag{32}$$

术语 $|B|$ 指的是沿 $\hat{z}$ 方向施加的磁场的大小。

3） $|\mathbf{E}| = |\mathbf{B}|$：最后，我们考虑了一个更复杂的情形：相互垂直且大小相同的电场和磁场共同驱动相对论运动。与之前一样，文中给出了从自然单位到 MKS 单位的换算关系。在此情形下，我们选择$\mathbf{E}(\mathbf{r}\ t) = (0,\ \mathbf{1},\ 0)$和$\mathbf{B}(\mathbf{r}\ t) = (0,\ \mathbf{0},\ 1)$，粒子从原点静止出发。随着粒子达到相对论速度，其动力学会变得更加复杂，但仍可以推导出

物理量	自然单位	MKS
q_p	1	1.6×10^{-19} 库仑
m_p	1	9.1×10^{-31} 千克
c	1	3×10^{8} 米/秒
$\mathbf{B}_p(\mathbf{r}\ t)$	1	1.2×10^{-3} 特斯拉
$\mathbf{E}_p(\mathbf{r}\ t)$	1	5.6×10^{-12} 伏/米
v_0	$1/\sqrt{2}$	$c/\sqrt{2}$ 米/秒

表 III: $|\mathbf{E}| = |\mathbf{B}|$ 情况下自然单位制和米-千克-秒制单位之间的换算。该换算确保作用于 $t = 0$ 处正电子的电力和磁力相等。

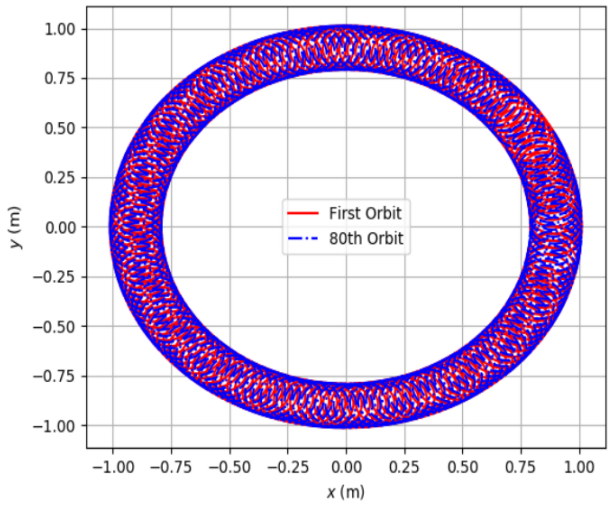

图 7: 粒子第一圈和第 80 圈轨道的轨迹图，显示相空间体积得到了良好保持

一个解析解，如文献 [33] 所示。对于我们选择的参数，最终表达式可简化为

$$\mathbf{r}(t) = \frac{U^3}{6}\hat{x} + \frac{U^2}{2}\hat{y}, \tag{33}$$

其中

$$U = \frac{\left(\left(\sqrt{9t^2+8}+3t\right)^{2/3} - 2\right)}{\left(\sqrt{9t^2+8}+3t\right)^{1/3}}. \tag{34}$$

使用我们的每种求解器运行此设置后，我们再次从图 6 中观察到，指数方法的表现显著优于基于多项式的方法，不过优势幅度比迄今展示的其他示例小。图 6 中最粗和最细的步长分别对应 $\Delta_t = 1.0$ 和 $\Delta_t = 0.02$ 。

B. 空间变化场

接下来，我们考虑一个标量势和磁场按如下方式变化的系统，以检验指数型方法的长时间稳定性，$\phi(\mathbf{r}\ t) = 0.01\sqrt{x^2+y^2}$，$\mathbf{B}(\mathbf{r}\ t) = \hat{z}\sqrt{x^2+y^2}$。再次采用 $m_p = q_p = c = 1$单位，将粒子的初始位置设为$\mathbf{r}_p^0 = (0.9,\ 0,\ 0)$，初始$\mathbf{u}_p^0 = (0.1,\ 0,\ 0)$。此外，我们选择步长 $\Delta_t = 1.5 \times 10^{-5}$，并让系统运行 50000 个时间步。从图 7 可以看出，指数型 PC 方法能够准确追踪快速回旋运动和缓慢旋转运动，且不会损失或增加能量。

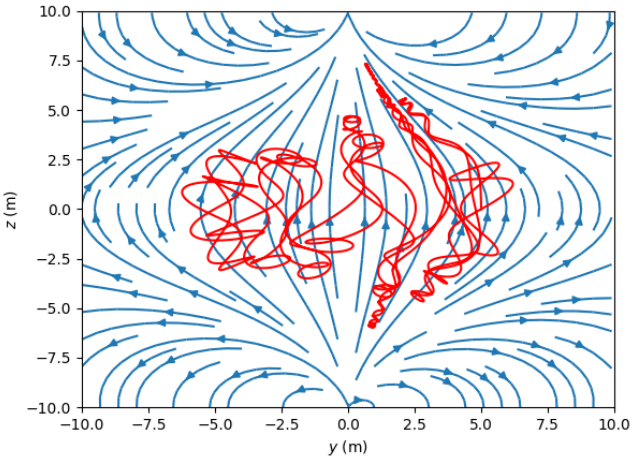

图 8: 粒子轨迹图，叠加显示在沿 y-z 平面的磁场折线图上。

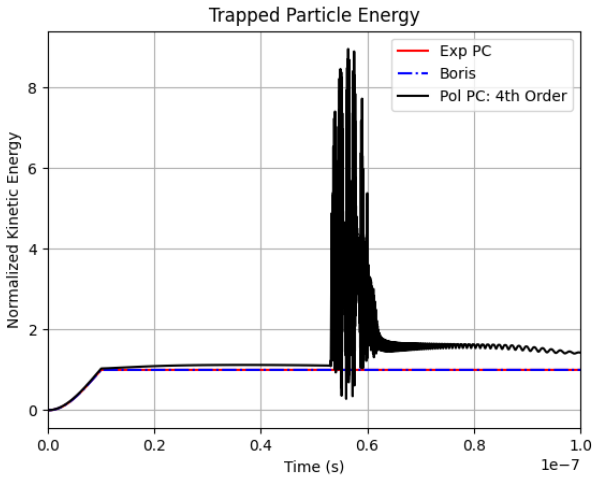

图 9: 不同粒子更新方案下的粒子能量对比。动能以电场关闭时的能量为基准进行归一化。

C. 磁瓶中受困的粒子

为了进一步检验能量守恒，我们考虑了这样一种设置：将一个电子初始化在一个磁瓶中，该磁瓶由两个沿 z- 方向排列的磁偶极子定义，其场强为

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi}\left(\frac{3\mathbf{r}(\mathbf{m}\cdot\mathbf{r})}{|\mathbf{r}|^5} - \frac{\mathbf{m}}{|\mathbf{r}|^3}\right). \tag{35}$$

两个偶极子相距 20 m，磁矩设为 $m = 10^5\hat{z}$。质量、电荷和光速均以 MKS 单位表示。粒子最初静止在位置 $(0,\ 5,\ 0)$，并在 y 方向的电场作用下加速 10 ns，随后电场关闭，此后粒子仅在磁场中运动。图 8 展示了偶极子的磁力线，以及指数方法预测的受困轨迹。从图中可以看出，

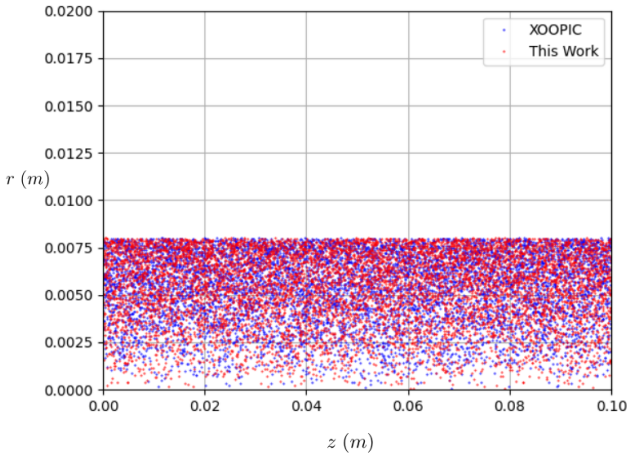

图 10： $t = 10$ ns 时粒子扩散的快照。我们注意到，粒子扩散总体上符合物理学预期的膨胀情况，并且与 XOOPIC 的等效结果吻合良好。

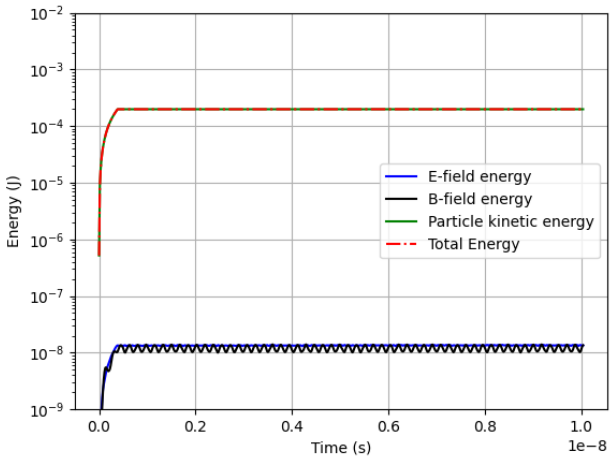

图 12：膨胀粒子束的粒子能量和场能量随时间的变化。由于粒子初始动量较大，能量主要由粒子的动能构成。然而，从数据中可以看出，在整个运行过程中，场能量和粒子能量均得以守恒。

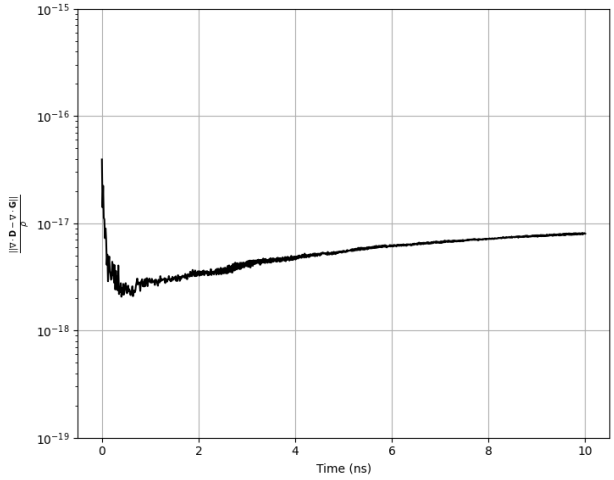

图 11：膨胀粒子束运行过程中高斯定律的满足情况。图中显示的是 $\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}\ t)$ 与 $\nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r}\ t)$ 之间的相对范数。

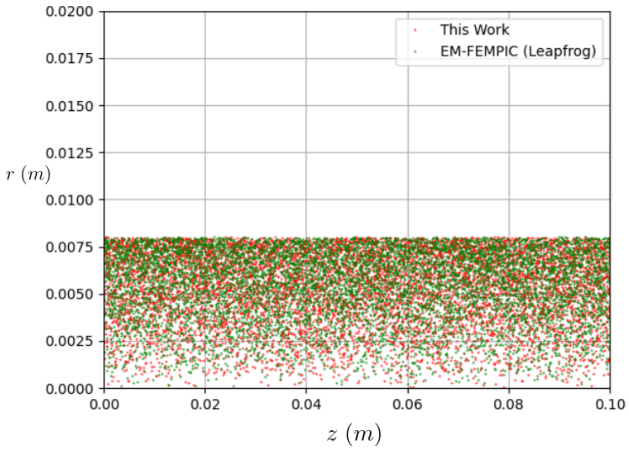

图 13：所提方法预测的 $t = 10$ 纳秒时粒子分布快照，与采用蛙跳积分器运行的电磁 FEMPIC 公式化所得结果的对比。再次可以看到，两种方法的结果非常吻合。

图 9 显示，电场关闭后，指数方法和 Boris 再次保持能量守恒。另一方面，多项式方法在电场关闭后会虚假地增加能量。当粒子接近轨迹中的偏转点时，该方法还会导致能量出现剧烈尖峰，这是因为它无法以保持动能的方式解析 $\mathbf{v}(t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}\ t)$ 中的大幅变化。

D. 膨胀粒子束

为了检验指数预测校正格式在完整 EM-FEMPIC 格式中的有效性，我们分析了一个膨胀粒子束的物理特性。该粒子束位于一个长 10 cm、半径 2 cm 的导电圆柱腔内，腔体的方向设置为旋转轴与 $\hat{z}$ 对齐。壁

假设腔体壁为理想导体，并在$z = 0$处初始化了一束由电子组成的粒子束。该粒子束的驱动电压为500 kV，驱动电流为 $1\ A$，发射体半径为 0.8 cm。由此得到的初始设置中，电子的加速度约为 $\gamma = 2$，或速度约为 $\mathbf{v}_p^0 \sim 2.6 \times 10^8$ 米/秒。采用指数预测校正法，时间步长为 $\Delta_t = 15$ ps；而使用 XOOPIC [34] 和显式 EM-FEMPIC代码进行的对比仿真，时间步长为 $\Delta_t = 1$ ps。用于离散该系统的四面体网格平均单元尺寸为 8.2 mm，系统中任一时刻的粒子数最多约为 8000 个，即每个网格单元约有 3.5 个粒子。每个时间步先进行一次预测步

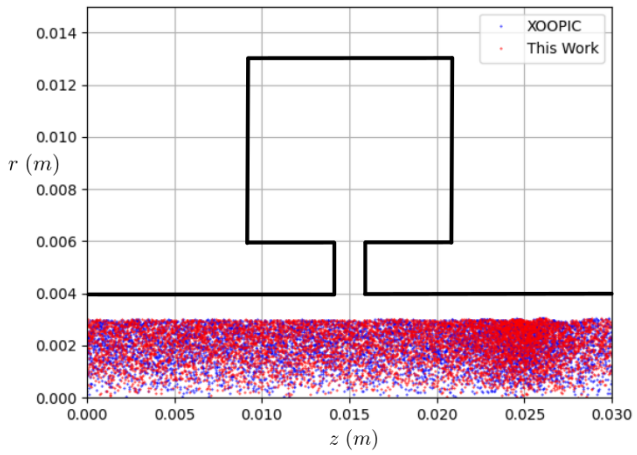

图14： $t = 4$ 纳秒时位置分布的快照。所提出的方法与 XOOPIC 吻合良好，并预测出粒子在与 XOOPIC 相同区域（约 $z = 2.5$ 厘米处）聚束的预期行为。

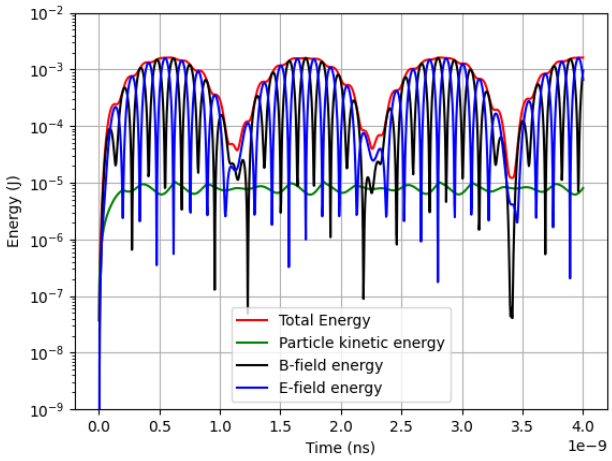

图15：速调管中粒子能量和场能量随时间的变化。与上一次运行不同，大部分能量都在场中——值得注意的是，再一次，场和粒子的平均能量都随时间守恒。

随后根据需要进行若干校正步，直至达到所需的 10^{-9}容差。在这次特定仿真中，达到该阈值很少需要超过一个校正步。粒子束的开启时间也设为 1 ns，以使场强平滑上升。图 10 展示了 10 ns 时粒子束的快照，并与 XOOPIC [34] 上的等效仿真设置进行了比较；图 11 则展示了整个仿真过程中高斯定律的满足情况。显然，所提出的方法既符合预期的物理规律，也能以机器精度满足高斯定律。同样，从图 12 可以看出，粒子能量和场能在仿真过程中守恒。最后，从图 13 可以看出，所提出的方法与基于显式蛙跳格式的电磁有限元粒子网格求解器吻合良好，尽管其步长大了 15 倍。

E. 速调管中的粒子束

为了在存在激发腔体模式的系统中检验所提出的求解器，我们分析了一个简单圆柱形速调管的行为，其尺寸如图 14 所示。再次采用四面体网格对该系统进行离散化，平均边长为 2.93 mm。求解器的步长设为 10 ps，并与以 1 ps 步长运行的 XOOPIC 进行比较。在速调管颈部中间的圆柱形曲面上定义了一个正弦电流源，其幅值为 100 A，频率为 4.1 GHz。这些尺寸对应于每个网格单元平均约 2 个粒子，不过区域内某些位置的密度更高，如图 14 所示的聚束现象所示。再次观察到与 XOOPIC 的结果吻合良好；从图 15 可以看出，在模拟的多个周期内，场能量和粒子能量平均而言均得以守恒。

IV. 总结

在本研究中，我们提出并验证了一种完全相对论、电荷守恒的 EM-FEMPIC格式，该格式采用了一种新颖的指数预测校正框架。我们通过单粒子全粒子网格模拟对所提出的框架进行了数值基准测试，结果表明，该框架在前者中精度更高，在后者中与现有的经过验证的方法吻合良好。目前，我们正在分析如何提高该格式的可扩展性，使其更适用于高功率设计中关注的复杂器件，并将在不久后报告相关结果。

致谢

作者谨向美国密歇根州东兰辛的密歇根州立大学 HPCC设施致谢。作者还感谢与 Zane D. Crawford博士就电荷守恒 EM-FEMPIC 进行的多次讨论。

V. 附录

参考文献

[1] R. Marchand，《PTETRA：一种用于模拟低轨卫星-等离子体相互作用的工具》，IEEE等离子体科学汇刊，第40卷第2期，第217–229页，2011年。[2] R. Lemke、T. Genoni和T. Spencer，《相对论磁控管的三维粒子网格模拟研究》，《等离子体物理》，第6卷第2期，第603–613页，1999年。[3] E. Fourkal、B. Shahine、M. Ding、J. Li、T. Tajima和C.-M. Ma，《用于放射治疗的激光加速质子束粒子网格模拟》，《医学物理》，第29卷第12期，第2788–2798页，2002年。[4] M. C. Pinto、S. Jund、S. Salmon和E. Sonnendr¨ucker，《一般网格上的电荷守恒有限元-粒子网格方案》，《力学论丛》，第342卷第10-11期，第570–582页，2014年。[5] H. Moon、F. L. Teixeira和Y. A. Omelchenko，《非结构网格上粒子网格模拟的精确电荷守恒散射-收集算法：几何视角》，《计算机物理通讯》，第194卷，第43–53页，2015年。[6] J. Squire、H. Qin和W. M. Tang，《采用变分粒子网格方案对Vlasov-Maxwell系统进行几何积分》，《等离子体物理》，第19卷第8期，第084501页，2012年。

[7] H. Moon、F. L. Teixeira和Y. A. Omelchenko，《非结构网格上粒子网格模拟的精确电荷守恒散射-收集算法：几何视角》，《计算机物理通讯》，第194卷，第43–53页，2015年。[8] S. O'Connor、Z. Crawford、J. Verboncoeur、J. Lugisland和B. Shanker，《一组用于验证三维粒子网格方法的基准测试》，arXiv预印本 arXiv:2101.09299，2021年。[9] E. Tonti，《电磁场的有限公式化》，《IEEE磁学汇刊》，第38卷第2期，第333–336页，2002年。[10] G. Deschamps，《电磁学与微分形式》，《IEEE会刊》，第69卷第6期，第676–696页，1981年。[11] K. Kormann和E. Sonnendr¨ucker，《保结构粒子网格Vlasov–Maxwell求解器的能量守恒时间传播》，《计算物理学杂志》，第425卷，第109890页，2021年。[12] J. XIAO、H. QIN和J. LIU，《Vlasov-Maxwell系统的保结构几何粒子网格方法》，《等离子体科学与技术》，第20卷第11期，第110501页，2018年9月。 [在线]。可访问：https://doi.org/10 1088 2058 6272 3 1 。 / - / /aac d M.

[13] Campos Pinto、K. Kormann和E. Sonnendr¨ucker，《保结构电磁粒子网格方法的变分框架》，《科学计算杂志》，第91卷第2期，第46页，2022 [ ] 10 1007 10915 022 01781 3 年3月。

[14] 在线。可访问：https://doi.org/ 。 /s - - - Z. D. Crawford、S. O'Connor、J. Luginsland和B. Shanker，《有限元粒子网格方法中电荷守恒电流映射的评估标准》，arXiv预印本 arXiv:2101.12128，2021年。[15] S. O'Connor、Z. D. Crawford、O. H. Ramachandran、J. Luginsland和B. Shanker，《与时间积分器无关的电荷守恒有限元粒子网格方法》，《等离子体物理》，第28卷第9期，第092111页，2021年。[16] S. O'Connor、Z. D. Crawford、O. H. Ramachandran、J. Luginsland和B. Shanker，《准亥姆霍兹分解、高斯定律与有限元粒子网格方法的电荷守恒》，《计算机物理通讯》，第276卷，第108345页，2022年。[17] O. H. Ramachandran、Z. D. Crawford、S. O'Connor、J. Luginsland和B. Shanker，《粒子网格模拟的包络跟踪方法》，2022 [ ] 2208 12795 。在线。

[18] 可访问：https://arxiv.org/abs/ 。J. P. Boris，《相对论等离子体模拟——混合代码的优化》，《第四届等离子体数值模拟会议论文集》，1970年11月。[19] H. Qin、S. Zhang、J. Xiao、J. Liu、Y. Sun和W. M. Tang，《Boris算法为何如此出色？》，《等离子体物理》，第20卷第8期，第084503, 2013 [ ] 10 1063 1 4818428 页。在线。

[20] 可访问：https://doi.org/ 。 / 。S. Zenitani和T. Umeda，《关于粒子网格模拟中的Boris 求解器》，《等离子体物理》，第25卷第11期，第112110页，2018年。[ ] 10 1063 1 5051077 在线。可访问：

[21] https://doi.org/ 。 / 。F. Bacchini、J. Amaya和G. Lapenta，《相对论隐式粒子网格方法》，《物理学杂志：会议系列》，第1225卷第1期，第012011页，2019年5月。 [在线]。可访问：https://doi.org/10 1088 1742 6596 1225 1 012011 。 / - / / / S. Markidis和G.

[22] Lapenta，《能量守恒粒子网格方法》，《计算物理学杂志》，第230卷第18期，第7037–7052页，2011年。 [在线]。可访问：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999911003445

[23] S. Markidis，《隐式动力学模拟方法的开发及其在当前和未来中和漂移压缩实验中的离子束传播应用》。伊利诺伊大学厄巴纳-香槟分校，ProQuest学位论文出版，2010年。[24] A. Glaser和V. Rokhlin，《一类高精度常微分方程新型求解器》，《科学计算杂志》，第38卷第3期，第368–399页，2009年3月。 [在线]。可访问：https://doi.org/10 1007 10915 008 9245 1 。 /s - - - O. C. Zienkiewicz，《重

[25] 新审视Newmark、Houbolt及其他时间步进公式：一种加权残量法》，《地震工程与结构动力学》，第5卷第4期，第413–418页，1977年。[26] A. Bossavit，《Whitney形式：一类用于电磁学三维计算的有限元》，《IEE会刊A辑》，第135卷第8期，第493–500页，1988年11月。[27] Z. Crawford、J. Li、A. Christlieb和B. Shanker，《混合有限元Maxwell求解器的无条件稳定时间步进方法》，《电磁学研究进展》，第103卷，第17–30页，2020年。[28] M.-F. Wong、O. Picon和V. F. Hanna，《一种基于Whitney形式的时域Maxwell方程有限元方法》，《IEEE磁学汇刊》，第31卷第3期，第1618–1621页，1995年5月。[29] B. He和F. Teixeira，《原空间与对偶空间中Maxwell方程的几何有限元离散》，《物理学快报A辑》，第349卷第1–4期，第1–14页，2006年。

[30] A. Bossavit 和 L. Kettunen，"四面体网格上的 Yee 类格式及对角集总"，《国际数值建模杂志：电子网络、器件与场》，第 12 卷，142，1999 1 2，129 期，第 – 页。[31] R. Wang、D. J. Riley 和 J.-M. Jin，"树-余树分解在电磁问题时域有限元分析中的应用"，IEEE天线与传播汇刊，第 58 卷，第 5 期，第 1590–1600 页，2010年。[32] N. V. Venkatarayalu 和 J.-F. Lee，"消除用于三维谐振器建模的边元解中的伪直流模态"，IEEE《微波理论与技术汇刊》，第 54 卷，第 7 期，第 3019–3025 页，2006年。[33] L. D. Landau 和 E. M. Lifshitz，《经典场论》。Butterworth-Heinemann，1980 年 1 月。[34] J. Verboncoeur、A. Langdon 和 N. Gladd，"面向对象的电磁粒子网格法代码"，《计算机物理通讯》，第 87 卷，第 1 期，第 199–211 页，1995，粒子模拟方法。 [在线]。网址：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/001046559400173Y



OmkarH. Ramachandran (S'20)于2018年获得科罗拉多大学博尔德分校物理学文学学士学位，目前正在密歇根州立大学电气与计算机工程系攻读哲学博士学位，学校位于密歇根州东兰辛。他的研究兴趣涵盖计算电磁学的多个领域，包括粒子网格方法、电磁-器件耦合系统分析和非线性优化。



Leo Kempel (S'89–M'94–SM'99–F'09)于1965年出生于美国俄亥俄州阿克伦。他于1989年获得辛辛那提大学电气工程理学学士学位；1990年和1994年分别获得密歇根大学电气工程理学硕士学位和哲学博士学位。结束在密歇根大学的短暂博士后任职后，他于1994年加入位于美国加利福尼亚州戈莱塔的Mission Research Corporation，担任高级研究工程师。他领导了多个项目，涉及共形天线的设计、计算计算电磁学、散射分析以及高功率／超宽带微波。他于1998年加入美国密歇根州东兰辛的密歇根州立大学。2004年至2005年以及2006年至2008年，他跨机构派任至美国俄亥俄州里弗赛德的美国空军研究实验室传感器局。他曾担任密歇根州立大学高性能计算中心的首任主任。2006年至2008年，他担任密歇根州立大学工程学院首任特别项目副院长，随后于2008年至2013年担任科研副院长。2013年，他出任代理工程学院院长。自2014年以来，他一直担任密歇根州立大学工程学院院长。他与人合著了《电磁学有限元法》（IEEE出版社）。他目前的研究兴趣包括计算电磁学、共形天线、微波／毫米波材料以及测量技术。Kempel教授是应用计算电磁学会（ACES）会士。他曾是天线与传播学会行政委员会和ACES董事会成员。他是Tau Beta Pi、Eta Kappa Nu以及国际无线电科学联盟B委员会的成员。2001年，他担任2001年ACES会议技术主席，并于2002年担任在希腊希俄斯举办的有限元研讨会技术共同主席。他曾任IEEE天线与传播学会会士评审委员会主席，并于2013年至2015年担任IEEE会士委员会成员。他曾获美国国家科学基金会颁发的CAREER奖、密歇根州立大学于2002年颁发的教师学者奖，以及2001年密歇根州立大学工程学院Withrow杰出学者（初级教员）奖。2011年至2015年，他曾任美国空军科学咨询委员会成员。他曾担任IEEE天线与传播汇刊副编辑。他积极为多种IEEE出版物以及《电磁波与应用杂志》和《无线电科学》审稿。



John Luginsland （IEEE会士）于1992年、1994年和1996年分别获得美国密歇根州安娜堡密歇根大学核工程学士、硕士和哲学博士学位。他曾在密歇根州立大学数学、科学与工程计算系以及电气与计算机工程系担任教授，并曾在美国弗吉尼亚州阿灵顿的空军科学研究办公室担任多个职务，包括代理部门主管、部门技术顾问、代理等离子体物理分部主任、项目经理，以及激光科学项目经理。他目前是空军科学研究办公室的项目官员，曾在空军部负责采办事务的助理部长办公室担任空军基础研究项目要素监测员。他曾在 NumerEx LLC（美国纽约州伊萨卡）、科学应用国际公司（美国新墨西哥州阿尔伯克基）以及空军研究实验室（新墨西哥州柯特兰空军基地）任职，并曾在该实验室担任美国国家研究委员会博士后研究员。他曾任 Confluent Sciences, LLC（阿尔伯克基）的高级科学家和首席研究员。他还曾任密歇根州立大学电气与计算机工程兼职教授，并曾是美国国家科学院情报科学与技术专家组（ISTEG）成员（美国华盛顿特区），目前在美国国家科学院陆军研究与发展委员会任职。他的研究兴趣包括加速器设计、相干辐射源、高密度动力学等离子体、激光物理、严肃游戏（包括基于智能体的模型和兵棋推演），以及运用高性能计算和机器学习技术进行计算建模。Luginsland 博士是空军研究实验室会士。他获得了 IEEE 核与等离子体科学学会早期成就奖。目前，他担任 IEEE 等离子体科学与应用委员会副主席、IEEE PSAC 主席，并担任《IEEE 等离子体科学汇刊》“高功率微波源”特刊客座编辑。



B. Shanker （IEEE会士）于1989年在印度理工学院马德拉斯分校获得技术学士学位，随后于1992年和1993年分别在宾夕法尼亚州立大学获得理学硕士和哲学博士学位。1993年至1996年，他在爱荷华州立大学生物化学与生物物理学系担任研究助理，研究光学活性的分子理论。1996年至1999年，他在伊利诺伊大学厄巴纳-香槟分校计算电磁学中心担任访问助理教授；1999年至2002年，他在爱荷华州立大学电气与计算机工程系担任助理教授。自2017年起，他担任密歇根州立大学电气与计算机工程系及物理与天文学系的大学杰出教授（这一荣誉授予密歇根州立大学终身教职体系中约2%的教职人员）。目前，他是俄亥俄州立大学电气与计算机工程系教授兼系主任。在密歇根州立大学任职期间，他获任计算数学、科学与工程系副主任；该系是密歇根州立大学新设立的院系，他在其建设过程中发挥了重要作用。此前，他于2012年至2015年担任电气与计算机工程系研究生教育副主任，并于2019年至2022年担任电气与计算机工程系科研副主任。他独立或合作撰写了约450篇期刊及会议论文，并作过多场特邀报告。他的研究兴趣涵盖计算电磁学的各个方面（频域和时域积分方程方法、多尺度快速多极子方法、快速瞬态方法、高阶有限元和积分方程方法）、复杂介质中的传播、介观电磁学，以及应用于多物理场和多尺度问题的粒子与分子动力学。他曾担任IEEE天线与无线传播快报（AWPL）、IEEE天线与传播汇刊的副编辑，以及《美国光学学会杂志：A辑》的专题编辑。他是美国国家无线电科学委员会—国际无线电科学联盟B委员会正式成员。他是IEEE会士（2010届），当选是因为其在时域和频域计算电磁学方面的贡献。他还曾获Withrow杰出青年学者奖（2003年）、Withrow杰出资深学者奖（2010年）、Withrow教学奖（2007年）和Beal杰出教职奖（2014年）。