arXiv:2303.12620v1 [physics.plasm-ph] 22 Mar 2023

# 使用 PETSc-PIC 进行朗道阻尼的数值研究

Daniel S . Finn[1],Matthew G. Knepley[2],Joseph V. Pusztay[3],和 Mark F. Adams [4]

[1,2,3]纽约州立大学布法罗分校[4]劳伦斯伯克利国家实验室

2023年3月23日

**摘要**

我们使用粒子网格法（PIC）算法研究等离子体物理学中的标准测试问题——朗道阻尼。朗道阻尼现象是无碰撞等离子体中微小振荡的阻尼。在粒子网格方法中，采用有限支撑基函数构成网格，以表示电场、磁场和/或引力场；同时用狄拉克δ函数的分布表示粒子场。研究发现，当等离子体频率或热速度等物理系统参数发生变化时，色散关系的近似解不足以准确计算电场频率和阻尼率。我们给出了色散关系的完整推导及数值解，并验证了 PETSc-PIC 对 Vlasov-Poisson 方程的数值解在广泛的波数和电荷密度范围内的准确性。

关键词——模拟，粒子网格法，PETSc，等离子体，朗道阻尼

## 1 引言

1936 年，列夫·朗道首次提出了一种简单的动力学模型，用于描述等离子体中发生库仑碰撞的带电粒子；如今，该模型被称为朗道形式的福克-普朗克方程，或简称朗道方程 [24]。十年后，朗道进一步推进了这项研究，首次预测了非相对论无碰撞等离子体振荡（即朗缪尔波）的阻尼 [25]。那篇论文提出的基本观点——守恒现象会表现出不可逆行为——此后影响了数百篇论文，并成为等离子体物理学中的基础问题之一。因此，这一现象如今被称为朗道阻尼。在其开创性论文中，朗道求解了空间均匀麦克斯韦平衡态附近线性化 Vlasov-Poisson 方程的柯西问题。他使用傅里叶变换和拉普拉斯变换解析求解该方程，并得出结论：电场呈指数衰减，且衰减取决于扰动的波数 $k$。在 [5], Bohm 和 Gross 对等离子体中的阻尼给出了简单解释。实质上，等离子体倾向于保持近似无场状态。因此，如果外部扰动或空间电荷中和不完全引入了电场，自由电荷的反作用就会将新引入的电场排斥出去。

多年来，许多研究者在文献中对朗道阻尼进行了深入研究 [12, 19, 35]。2009 年，Villani 和 Mouhot 在 [30] 中给出了 Vlasov-Poisson 方程的一个严格解。在他们的论文中，阻尼现象被重新诠释为动力学变量与空间变量之间的正则性转移，而非能量交换，其中相位混合是驱动机制。

与朗道阻尼背后的理论并行发展的是，用于近似求解动力学等离子体系统的数值方法，这些方法由 Vlasov [36]率先提出。自粒子网格法（PIC）问世以来，它一直是数值模拟等离子体的常用方法 [17, 18], , 因为与直接的 $N$体方法相比，它可以大幅降低系统的复杂度。粒子网格方法是一种混合离散算法，包含两组独立的基，分别用于求解问题的不同方面。这两组基是粒子基（其中粒子由某种形状函数表示，通常具有径向

对称性），以及网格基；对于网格基，可以采用平均场方法，根据外力和自洽力计算不同的场量。通常，连续场求解通过有限元方法完成，不过其他表述也采用过样条函数 [10], 、有限差分法 [4],等方法。

本文介绍一种使用可移植、可扩展科学计算工具包（PETSc） [2, 3]求解Vlasov-Poisson系统的粒子网格法（PIC）。PETSc-PIC使用辛积分格式 [1] 推进粒子，同时采用有限元方法 [21, 26]进行场求解。PETSc旨在提供可组合的构件，以便据此构建最优模拟。PETSc面向用户的API允许应用程序通过动态配置 [6]将求解器细节等实现选项的确定推迟到运行时。PETSc-PIC求解器在每个时间步都能完全守恒各阶矩、质量、动量和能量，同时保持熵单调性。PETSc-PIC代码 [32]近期的进展还包括有限元基与粒子基之间的守恒投影，这是迈向混合有限元-粒子算法的关键一步。

# 2 问题表述

考虑Vlasov-Poisson系统。这是在非相对论情形下对更一般的Vlasov-Maxwell-Landau方程组的一种常见简化，其中忽略了磁效应和碰撞效应。它可作为非麦克斯韦等离子体的有效模型。Vlasov方程为：

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} - \frac{q_e}{m}\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = 0, \tag{1}$$

描述相空间分布 $f(\mathbf{x},\ \mathbf{v}\ t)$ 的演化，该分布定义在区域 $(\mathbf{x},\ \mathbf{v}) \in \mathbb{R}^D \times \mathbb{R}^D$上，其中 $D$ 为空间维数。电场由泊松方程求得，

$$\Delta\phi(\mathbf{x}, t) = -\frac{\rho}{\epsilon_0}, \tag{2}$$

其中 $\phi$ 为电势， $\rho$ 为电荷密度，且 $\mathbf{E} = -\nabla\phi$。电荷密度包含一个中和背景项 $\sigma$，因此，

$$\rho(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \sigma - q_e \int_{\mathbb{R}^D} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}. \tag{3}$$

该中和背景模拟了离子对区域内电子的作用。采用静止均匀背景电荷，是基于这样的假设：离子的质量远大于电子，因此受电子的影响很小。

为了研究线性朗道阻尼现象，我们考虑如下初始粒子分布：

$$\begin{aligned} f(x, v, t=0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi v_{th}^2}} e^{-v^2/2v_{th}^2}(1 + \alpha\cos(kx)) \\ (x, v) = [0, 2\pi/k] \times [-v_{max}, v_{max}] \end{aligned} \tag{4}$$

其中 $v_{th} = \sqrt{KT_e/m}$、 $\alpha = 0.01$、 $k = 0.5$、 $v_{max} = 10$ ，边界条件为周期性。Vlasov-Poisson系统的粒子网格方法中，一个重要环节是噪声抑制。粒子网格方法中的一个主要噪声来源，是相空间中的初始离散分布。本文通过将粒子放置在空间和速度网格单元的中心，并根据初始分布函数 $f(x,\ v,\ t=0)$ 为其赋权，以模拟“安静启动” [7, 13, 14]连续体初始化。在 [31], 中也采用了这种方法，其中粒子每隔若干步会进一步重映射回单元中心。重映射步骤能够充分抑制噪声，从而准确观测阻尼中的非线性效应。不过，目前我们只关注朗道阻尼的线性情形，因此将忽略重映射阶段。

## 2.1 线性 Landau 阻尼

我们首先希望推导出一组方程，以理解系统中等离子体振荡的阻尼，并计算阻尼率和电场振荡频率的预期值。这些

表达式通过首先推导等离子体的色散关系得出。以下推导基于 [9]。考虑一种均匀等离子体，其初始分布为 $f_0(v)$，初始电场和磁场均为零，即 $\mathbf{E}_0 = \mathbf{B}_0 = 0$。在一阶近似下， $f(x,\ v,\ t)$ 中的扰动记为 $f_1(x,\ v,\ t)$，因此，

$$f(x, v, t) = f_0(v) + f_1(x, v, t). \tag{5}$$

将（5）代入（1）得:

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{x}} - \frac{q_e}{m_e}\mathbf{E}_1 \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}} = 0. \tag{6}$$

假设离子质量很大且固定，波为一维平面波$f_1 \propto e^{i(kx-\omega t)}$，则（6）变为:

$$f_1 = \frac{iq_eE_x}{m_e}\frac{\partial f_0/\partial v_x}{\omega - kv_x}. \tag{7}$$

回顾泊松方程（2），其中电势 $\phi$ 由电场的散度替代:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{E} = \nabla \cdot \mathbf{E}_1 &= -\frac{\rho}{\epsilon_0} \\ &= -\frac{1}{\epsilon_0}\left(\sigma - q_e \int \left(f_0(v) + f_1(x, v, t)\right) dv\right). \end{aligned} \tag{8}$$

初始电场为零时，电场矢量由电场扰动替代，$\mathbf{E}_1$, 其形式为 $\mathbf{E_1} = E_x e^{i(kx-\omega t)\hat{}}\mathbf{x}$。此外，在平衡态下，中和背景等于电子分布的总权重 $\sigma = q_e \int f_0 dv$，因此泊松方程中只剩下扰动项 $f_1$。由此可得:

$$ik\epsilon_0 E_x = -q_e \int f_1 dv. \tag{9}$$

将（7）代入（9）并除以 $ik\epsilon_0 E_x$，得:

$$1 = \frac{q_e^2}{km_e\epsilon_0}\int \frac{\partial f_0/\partial v}{\omega - kv} dv. \tag{10}$$

（10）中的积分是三维积分，不过对于麦克斯韦分布或其他可因式分解的分布，对第 2 和第 3 维积分很简单。计算（10）中第 2 和第 3 维的积分，并代入等离子体频率 $\omega_p = \left(n_e q_e^2/m\epsilon_0\right)^{1/2}$，可得色散关系:

$$1 = \frac{\omega_p^2}{k^2}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial f_0/\partial v_x}{v_x - (\omega/k)} dv_x. \tag{11}$$

Landau 表明，可以通过拉普拉斯变换法严格求解这一问题。重要的是，必须在复平面上绕过式（11）被积函数中的奇点。式（11）的解形式如下:

$$\omega = \omega_r + i\gamma, \tag{12}$$

其中， $\omega_r$ 表示等离子体的实振荡， $\gamma$ 表示虚部；Landau 表明，虚部是驱动振荡阻尼的解的部分。按照 Landau 的方法， [9], 可以推导出振荡项和阻尼项的近似表达式，如下:

$$\begin{aligned} \omega_r &= 1 + \frac{3}{2}\hat{k}^2, \\ \gamma &= -\sqrt{\frac{\pi}{8}}\frac{1}{\hat{k}^3}\exp\left[-\frac{1}{2\hat{k}^2}\right]. \end{aligned} \tag{13}$$

为简化后续方程，我们引入了波数 $k$ 的一种归一化形式。归一化波数 $k$ 定义为:

$$\hat{k} = \frac{kv_{th}}{\omega_p} \tag{14}$$

其中 $v_{th} = \sqrt{KT/m}$ 为热速度。对于所有示例，我们均进行无量纲化，使得 $v_{th} = 1$。方程 (11) 的解的实部同样由 Vlasov 在 [36], 中推导得出，但 Vlasov 未考虑虚阻尼项。

这些近似适用于以下情况: $\hat{k} \ll 1$ 但当.....时，其精度会显著降低 ˆ
$k$当.....趋近于 1 及更高值时，即使 $k = 0.5$， $\omega_r$ 和 $\gamma$ 的计算值与数值结果至少相差 5%。在 [29], McKinstrie 得出了类似结论，并选择通过按 $k$的幂展开 $\omega_r$ ，推导出式 (13) 更精确的形式，

$$\omega_r = 1 + \frac{3}{2}\hat{k}^2 + \frac{15}{8}\hat{k}^4 + \frac{147}{16}\hat{k}^6, \tag{15}$$

$$\gamma = -\sqrt{\frac{\pi}{8}}\left(\frac{1}{\hat{k}^3} - 6\hat{k}\right)\exp\left[-\frac{1}{2\hat{k}^2} - \frac{3}{2} - 3\hat{k}^2 - 12\hat{k}^4\right]. \tag{16}$$

ˆ ˆ 这些新表达式在 $k$ 不超过 0.4 时更加精确，但随着 $k$ 进一步增大，仍会偏离正确值。Shalaby 等人在 [33], 中利用数值拟合公式对这些方程作了进一步改进，得到如下形式:

$$\begin{aligned}\omega =& 1 + \frac{3}{2}\hat{k}^2 + \frac{15}{8}\hat{k}^4 + \frac{147}{16}\hat{k}^6 + 736.437\hat{k}^8 - 14729.3\hat{k}^{10} \\ &+ 105429\hat{k}^{12} - 370151\hat{k}^{14} + 645538\hat{k}^{16} - 448190\hat{k}^{18}, \\ \gamma =& -\sqrt{\frac{\pi}{8}}\left(\frac{1}{\hat{k}^3} - 6\hat{k} - 40.7173\hat{k}^3 + 3900.23\hat{k}^5 - 2462.25\hat{k}^7 - 274.99\hat{k}^9\right) \\ &\exp\left[-\frac{1}{2\hat{k}^2} - \frac{3}{2} - 3\hat{k}^2 - 12\hat{k}^4 - 575.516\hat{k}^6 + 3790.16\hat{k}^8\right. \\ &\left.-8827.54\hat{k}^{10} + 7266.87\hat{k}^{12}\right].\end{aligned} \tag{17}$$

ˆ 对于 $k = 0.5$的情况，这些方程能够较好地估算 $\omega_r$ 和 $\gamma$ ，这在本文中特别值得关注。事实上，当 $k = 0.5$ 且所有其他参数（$\omega_p$、$v_{th}$、$q_e$等）均假定为 1.0 时，由式 (17) 得到的值与文献中通常列出的“解析解” [9, 31, 38]相符。尽管如此，对于 $k > 0.6$，数值拟合的精度仍会显著降低。

另一种计算给定 $\omega_r$ 和 $\gamma$ 的方法是通过求解方程 (11) 的零点来求得我们将 Canosa 方法更为普遍的是，我们采用了这种方法，计算了 $k$ 从 0.25 到 2.0、步长为 0.05 时的值（部分结果见表1）。第 4 节将比较 Landau、McKinstrie 和 Shalaby 的近似结果与 Canosa 的求零结果。

| $\hat{k}$ | $\omega_r$ | $\gamma$ |
|---|---|---|
| 0.25 | 1.1056 | -0.0021693 |
| 0.5 | 1.4156 | -0.15336 |
| 0.75 | 1.7371 | -0.46192 |
| 1.0 | 2.0459 | -0.85134 |
| 1.5 | 2.6323 | -1.7757 |
| 2.0 | 3.1891 | -2.8272 |

ˆ**图 1:** 根据 [8], 给定 $k$ 时 $\omega_r$ 和 $\gamma$ 的值。

# 3 PETSc-PIC

PETSc，即便携式、可扩展科学计算工具包，是一个知名的数值方法库。它提供并行数据管理、结构化和非结构化网格、线性与非线性代数求解器及预条件器、优化算法、时间积分器以及许多其他功能。
PETSc-PIC算法依靠两个模块同时处理粒子和网格求解。

首先，DMPlex [22, 23, 26], 是 PETSc 中用于通用非结构化网格创建、操作和输入/输出的模块 [16]。它使用户应用程序无需关注常见网格和离散化任务的实现细节。本文工作的另一个重要模块 DMSwarm [28], 为纯粒子方法（例如离散元法、光滑粒子流体动力学、无网格伽辽金法）以及粒子网格方法（例如粒子网格法、流体隐式粒子法、物质点法、广义插值物质点法）提供了完全并行的解决方案。

我们先讨论 PETSc-PIC算法中的粒子方法。首先必须选择一种方法来表示粒子空间，并在网格表示与粒子表示之间进行插值。为此，形函数有多种选择；不过，在我们的情形中，选择用简单的狄拉克δ函数表示粒子。因此，分布函数的近似在粒子空间中定义为：

$$f_p = \sum_p \overrightarrow{\omega_p} \delta \left( \mathbf{x} - \mathbf{x_p} \right), \tag{18}$$

其中，$\overrightarrow{\omega_p}$ 是权重向量，$\mathbf{x}$ 是构形空间变量，而$\mathbf{x_P}$ 分别表示粒子位置和速度。采用函数空间 $\mathcal{V}$的有限元表示为基函数的加权和：

$$f_{FE} = \sum_i f_i \psi_i(\mathbf{x}), \tag{19}$$

其中，$\psi_i \in \mathcal{V}$ 表示基函数，$f_i$ 表示相应的有限元系数。 t.

The Vlasov方程是一个线性双曲方程，可写成更简单的形式： ,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{z} \cdot \nabla_{\mathbf{q}} f = 0, \tag{20}$$

其中，$\mathbf{q}$ =(**x**,**v**)是相空间变量，$\mathbf{z}$ =(**v** $-q_e\mathbf{E}/m$)是合力。力项$-q_e\mathbf{E}/m$ 与速度无关，因此式（20）可写成守恒形式：

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{q}} \cdot (\mathbf{z} f) = 0. \tag{21}$$

给定 Vlasov方程这一新的对流形式，我们可以改写特征线方程$\mathbf{Q}$ = (**X**,**V**),

$$\frac{d\mathbf{Q}}{dt} = \mathbf{z}, \tag{22}$$

用原始相空间变量重新表示后，得到：

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{X}}{dt} &= \mathbf{V}, \\ \frac{d\mathbf{V}}{dt} &= -\frac{q_e}{m}\mathbf{E}. \end{aligned} \tag{23}$$

由于粒子沿特征线运动，粒子基下的 Vlasov方程变为

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}_p}{dt} &= \mathbf{v}_p, \\ \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} &= -\frac{q_e}{m}\mathbf{E}. \end{aligned} \tag{24}$$

运动方程使用经过充分研究的保结构辛积分器向前推进时间 [15]。每一步同时使用有限元求解器求解电场，相关内容将在下一节讨论。

## 3.1 PETSc-FEM

在模拟的每一步中，使用有限元方法求解泊松方程。随后，在粒子位置处对每个单元内的电势梯度（即电场）进行插值。然后将插值得到的电场以库仑力的形式作用于粒子。

PETSc-FEM 方法通过 *Ciarlet* 三元组 [11, 20], 进行抽象形式化，其中有限元是一个三元组 $(\mathcal{T}, \mathcal{V}, \mathcal{V}')$，其中，

- 区域 $\mathcal{T}$ 是 $\mathbb{R}^d$ 的一个有界闭子集（对于 $d = 1,2,3,...$），其内部非空且边界分段光滑；

- 空间 $\mathcal{V} = \mathcal{V}(\Omega)$ 是定义在 $\mathcal{T}$ 上的有限维函数空间，其维数为 $n$；
- 自由度（节点）集合 $\mathcal{V}' = \{l_1, l_2, ..., l_n\}$ 是对偶空间的基，也就是说，它是定义在 $\mathcal{V}$ 上的有界线性泛函空间。

单元 $\mathcal{T}$、局部函数空间 $\mathcal{V}$ 以及描述 $\mathcal{V}$ 中函数的一组规则，共同构成有限元。PETSc 中的离散化由 PETScFE 对象处理，该对象包含 PetscSpace（$\mathcal{V}$）、PetscDualSpace（$\mathcal{V}'$）和 DMPlex（$\mathcal{T}$）。PETScFE 支持单纯形单元、张量单元，以及棱锥等一些特殊单元。

一般而言，泊松方程的有限元求解可以使用标准的 $H^1$函数空间来完成。在 $H^1$ 空间中，泊松方程的弱形式为：

$$\int_\Omega \nabla\psi_i \cdot \nabla\phi = \int_\Omega \psi_i, \tag{25}$$

其中 $\psi \in V$ 和 $V$ 是单元上的基函数集合。随后构造单元，使基函数在单元边界处连续。

### 3.2 守恒投影

为了在 PIC模拟 中保持守恒定律，必须构造一种方法，在粒子表示与网格表示之间进行守恒投影。表示之间的弱相等关系

$$\int_\Omega \psi_i f_{FE} = \int_\Omega \psi_i f_P \tag{26}$$

通过在这些表示上施加约束来实现这一点 [27, 32]。将这种等价关系限定到有限维对应形式后，可得矩阵—向量形式：

$$M f_{FE} = M_p f_p, \tag{27}$$

其中 M 为有限元质量矩阵，

$$M = \int_\Omega \psi_i \psi_j, \tag{28}$$

$M_p$ 为粒子质量矩阵，

$$M_p = \int_\omega \psi_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x_p}), \tag{29}$$

$f_{FE}$ 是包含有限元系数的向量， $f_p$ 是粒子权重向量。 $M_p$ 的各项包含有限元基函数在粒子位置处的取值，其中行由基函数索引确定，列由粒子索引确定。从粒子基转换到网格时，必须对有限元质量矩阵求逆，这可通过 CG/Jacobi [37] 轻松实现。反向转换时，则必须对矩形粒子质量矩阵求逆，通常使用 LSQR [32]。

## 4 数值结果

本节展示本次数值研究的结果。我们考虑 Vlasov-Poisson系统的一维（1X-1V）情形。根据第2.1节推导的公式 (15) 以及 Canosa 的零点求解数据 [8], , 阻尼率应为 $\gamma = -0.153$ , 振荡频率应为$\omega_r = 1.416$。所有运行均在配备 $64\ [GB]$ 内存的单颗 2.4 $[GHz]$ 8 核英特尔酷睿i9处理器上完成。运行所需的示例代码以及软件包/选项见附录 A。

首先，我们展示 PETSc-PIC模拟中空间单元数为 160、每单元粒子数为 8,000、PIC 时间步长为 $dt = 0.3$ 的最密集运行结果。图 2 展示了电场最大值 $E_{max} = \max_{\Omega} |E|$ 随时间的变化。通过拟合给定数据的峰值，测得了 $\gamma$ 和 $\omega_r$ 的数值。振荡频率表示电场完成一次完整振荡的频率。由于每次 $E_{max}$ 振荡相当于电场周期的一半，因此每次等离子体振荡对应两次 $E_{max}$ 振荡。PETSc-PIC算法得到的数值 $\gamma = -0.1531$ 和$\omega_r = 1.4124$ 与 Canosa 和 Shalaby 等人给出的解析值相差在 1% 以内；这些解析值被认为对于情形 $k = 0.5$ 最为准确。

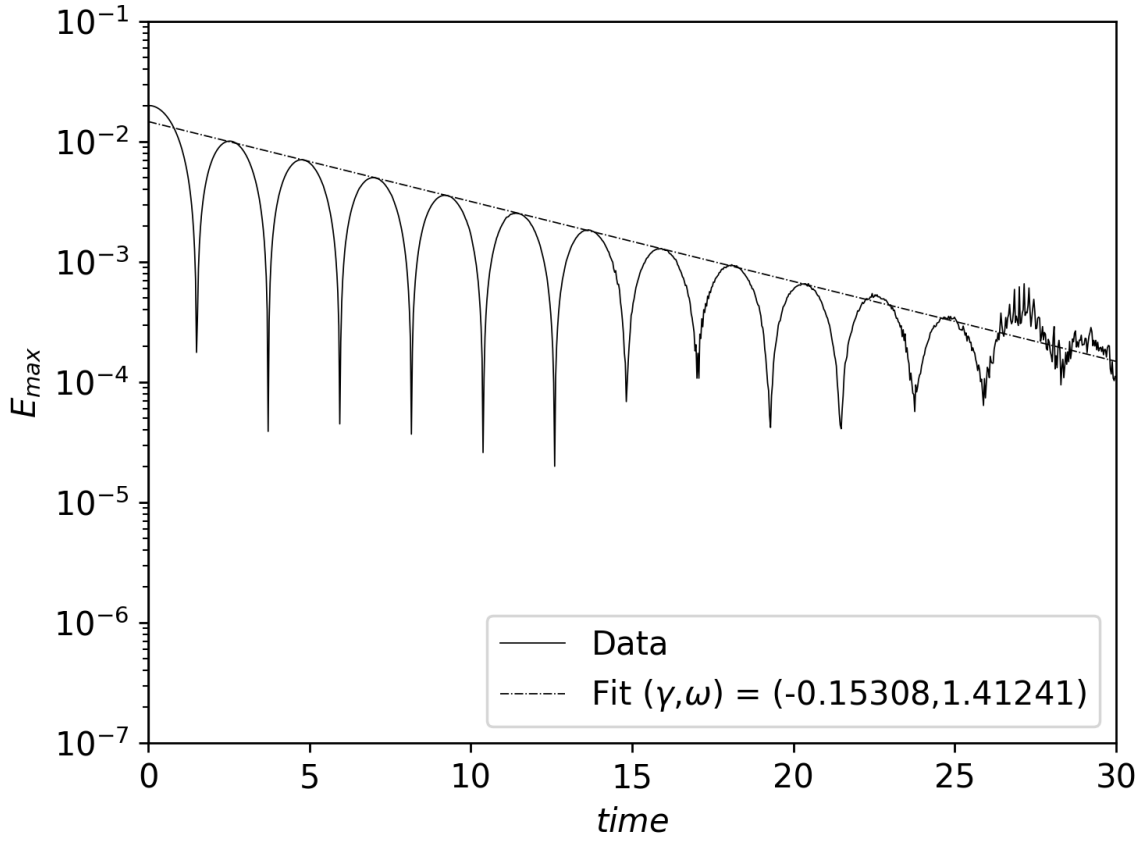



**图 2：** 一维线性 Landau 阻尼问题中，电场最大值随时间的变化。

图 3 所示的矩总误差在整个运行期间保持稳定。在早期时刻，动量和能量的误差会波动，但到 $t = 20$ 时均趋于收敛。这种收敛得益于 PETSc-PIC 中采用的基本辛积分器，该积分器可保证误差不会随时间增长。我们还注意到，粒子求解与有限元求解的误差完全相等，只是粒子求解中的噪声水平更高。这证实了 PETSc-PIC 中所用守恒投影算子的有效性。有关守恒投影算子的更多详细测试，请参见 [32]。

我们进行了收敛性研究：每次增加网格或每单元粒子数，同时保持另一个量不变。在网格收敛测试中，每单元粒子数保持为 $N_v = 8,000$；而在粒子数收敛测试中，网格单元数为$N_x = 100$。我们直观地预期粒子数会呈现蒙特卡罗收敛，即 $\mathcal{O}\left(1/\sqrt{N}\right)$，对于 $\omega_r$，我们确实在图4左上方观察到了这一点。由于初始粒子分布非常规则，

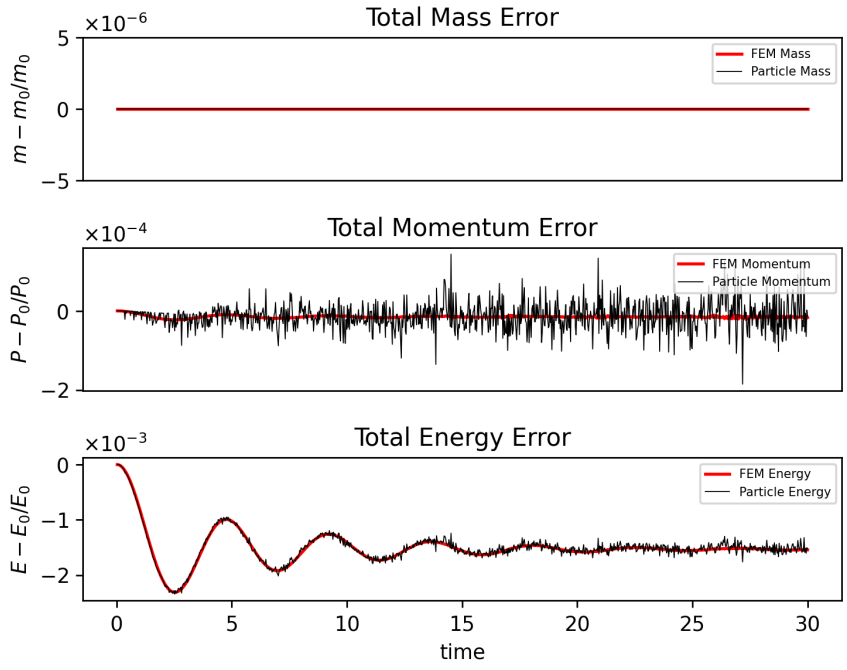



**图3：** 粒子和有限元求解的总质量、动量和能量误差。只要时间足够长，所有矩误差最终都会收敛至零。

我们或许可以期待准蒙特卡罗收敛，即 $\mathcal{O}(1/N)$，而我们确实在图4右上方的 $\gamma$ 中观察到了这种超收敛。我们预计网格分辨率 $h$ 会呈现 $\mathcal{O}\left(h^2\right)$ 收敛，因为它决定了电场误差；我们在图4右下方的 $gamma$ 中观察到了这一点。然而，随着粒子误差开始占主导地位，这种收敛应该很快趋于饱和；我们在图4左下方的 $\omega_r$ 中观察到了这一点。

## 4.1 波数和电荷密度的变化

迄今为止，我们已表明，PETSc-PIC算法是一种用于模拟等离子体系统的精确且保结构的方法。接下来，我们将展示一系列测试结果，其中改变了波数 $k$，以及由此决定的区域大小和电荷密度。改变这些参数中的任意一个，都会影响无量纲波数 $k$ 的取值。对于波数 $k$，我们将计算得到的 $\omega_r$ 和 $\gamma$ 与通过近似方程（13）和（15）、数值拟合（17）以及表1中的求零结果得到的值进行了比较。图5所示的 PETSc-PIC 结果清楚地表明，对于 $k > 0.5$，近似方程和数值拟合的结果出现了明显偏差，而求零数据则与之高度吻合。这说明，当参数超出朗道阻尼数值研究中通常采用的小范围时，这些近似方法很快就会失效。对于真实的等离子体系统，其中 $k$、$\omega_p$ 等参数变化更为复杂，使用求零方法计算 $\omega_r$ 和 $\gamma$ 的预期值要有效得多。

人们可能会想当然地认为，电荷密度变化时数值测试得到的数据会与近似方程（13）、（15）和（17），甚至 Canosa 的零点求解数据相吻合；然而，这些解析结果建立在电荷密度不变的假设之上。更具体地说，这些结果假设电荷密度满足等离子体频率 $\omega_p$ 始终为 1。因此，为了将解析结果与我们的数据准确比较，我们必须针对不同的电荷密度求解色散关系。我们采用牛顿法 [34], 求零算法，计算电荷密度范围为 0。1 至 2。0 时 $\omega_r$和 $\gamma$ 的新解析值。该求零算法会计算出多个$\omega_r$ 和 $\gamma$ 值；不过，我们选择包含最大 $\gamma$、对应于最小 $\omega_r$ 的解。其他

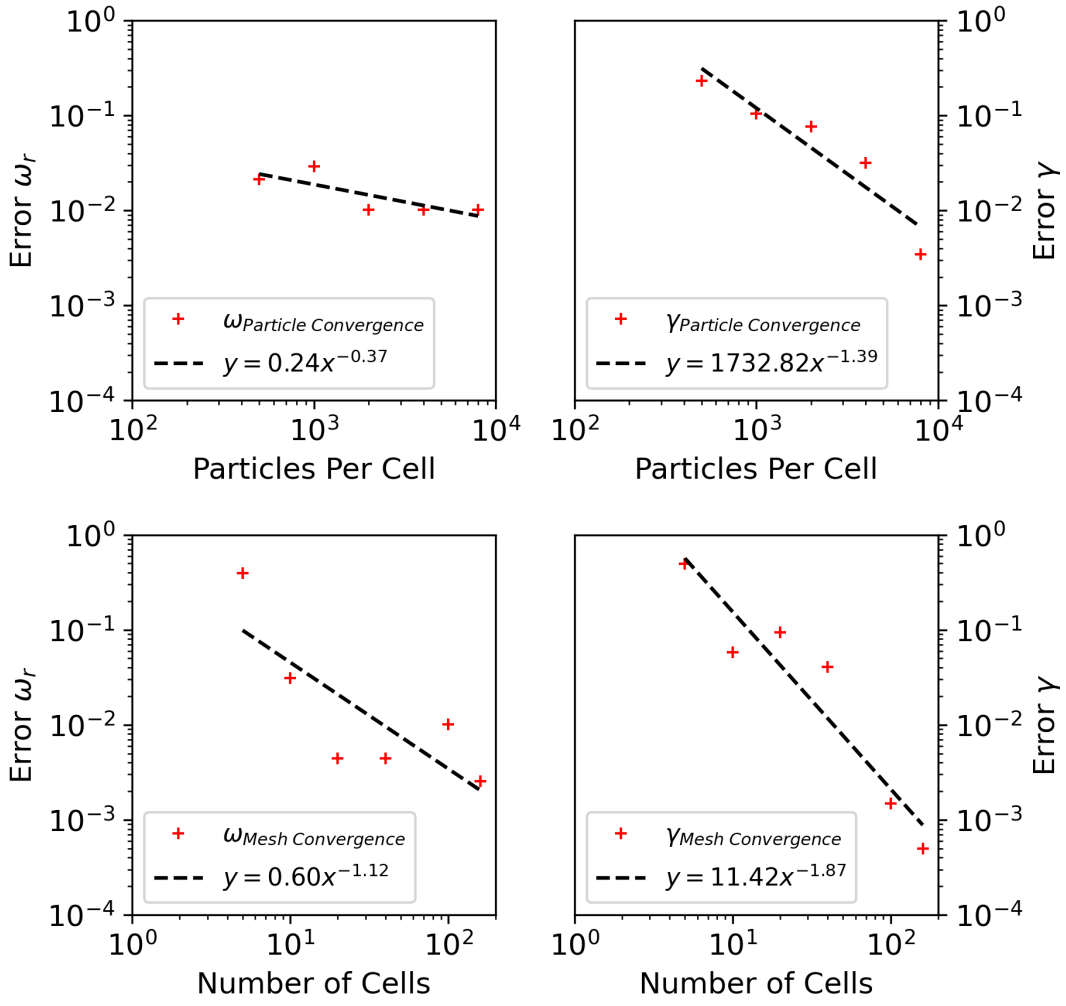



**图4：** （上） $N_x = 100$ 的每单元粒子数收敛图；（下） $N_v = 8$的网格收敛图，000。

算法找到的解代表较不占主导地位的模，在本研究中可以忽略。图6展示了新求零算法的结果以及数值测试数据，两者完全吻合。我们观察到，电荷密度增加时，振荡频率也随之增加。这与带电等离子体预期的物理行为相符。

我们将求零算法扩展到电荷密度趋近于零 ˆ($k \to \infty$) 的情形，以记录一种有趣的现象。当电荷密度为零时，色散关系无解。图6展示了这一点：我们观察到 $\omega_r$ 和 $\gamma$ 在$\int f_0/V = 0$处均为渐近行为。我们的PETSc-PIC算法数值结果也呈现出类似现象。随着电荷密度降低，电场振荡的频率会变得过高，无法进行数值解析。在图7所示的 $\int f_0/V = 0.25$ 情形中，模拟变得过于嘈杂，导致我们只能观察到电场完整振荡两次。理论上，我们可以在模拟中逐渐降低电荷密度，以观察阻尼率和频率的变化趋势；但在实际操作中，噪声过大，无法解析等离子体中的任何真实过程。

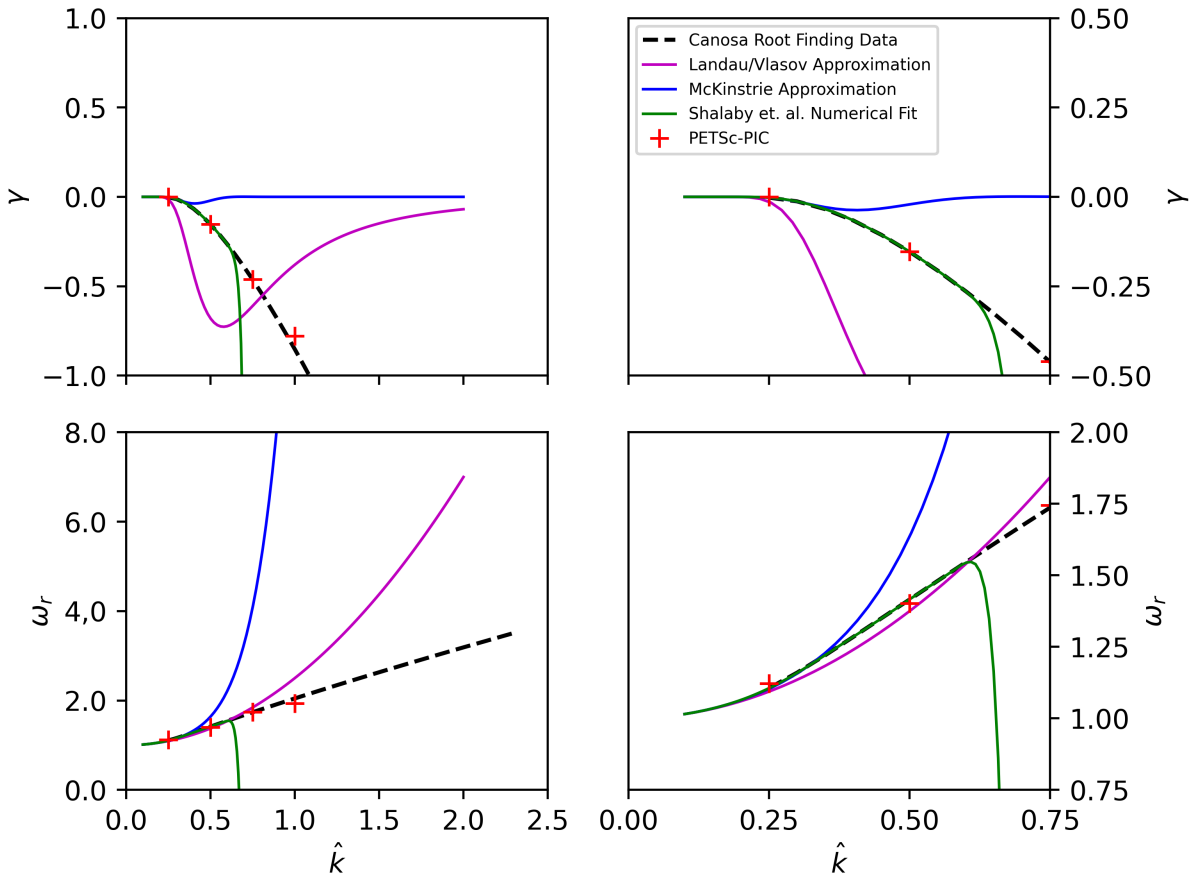



**图5：** 将针对 $\omega_r$ 和 $\gamma$ 的各种近似与求根结果及 PETSc-PIC 的数值结果 ˆ 进行比较。右侧的图放大了 $0.0 \leq k \leq 0.75$ 区域，以展示各近似在偏离数据之前的精度。

## 5 结论与未来工作

我们介绍了 PETSc-PIC，这是一种用于求解静电 Vlasov-Poisson 系统的保结构粒子网格算法。通过将电场振荡的频率和振荡的阻尼率与解析值进行比较，我们验证了算法的准确性。我们还表明，对于波数和电荷密度，频率与阻尼率的近似仅在狭窄范围内成立，超出这些范围便会失效。在数值朗道阻尼研究中，人们常常引用这些近似，却不进一步说明其背景，也不提及用于计算这些参数的方程，这可能会给结果复现带来困难。我们力求全面阐述朗道阻尼，以及用于模拟这一现象的数值方法。

未来使用 PETSc-PIC算法的工作将分为两大类：改进算法，以及将朗道阻尼测试扩展到多维和非线性情形。算法改进将着重于采用泊松方程的混合形式和$H(div)$有限元进行重新表述。我们预计，$C^0$ 电场会随着时间推移降低粒子表示中的噪声。虽然在本文所选的测试问题——朗道阻尼中，我们尚未观察到使用 $H^1$ 有限元会带来任何显著的负面影响，但在双流不稳定性问题中，采用混合形式会产生显著差异。PETSc目前支持在单纯形网格上使用协调有限元 Brezzi- Douglas-Marini（BDM）和 Raviart-Thomas（RT），但在张量单元上目前仅支持 RT 单元类型

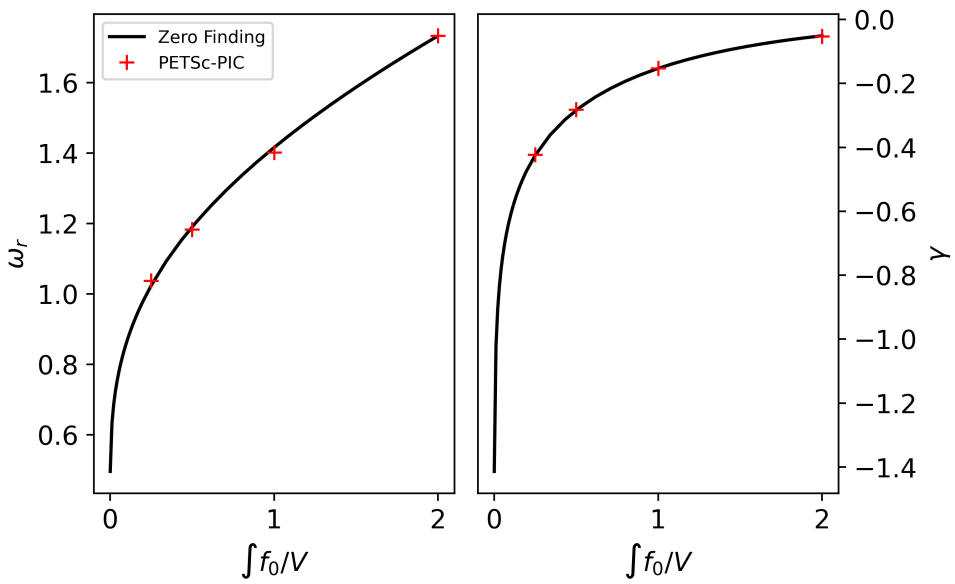



**图6：**不同电荷密度下的数值结果与零点求解数据的比较。电荷密度在 x 轴上表示为初始分布在区域体积上的积分。

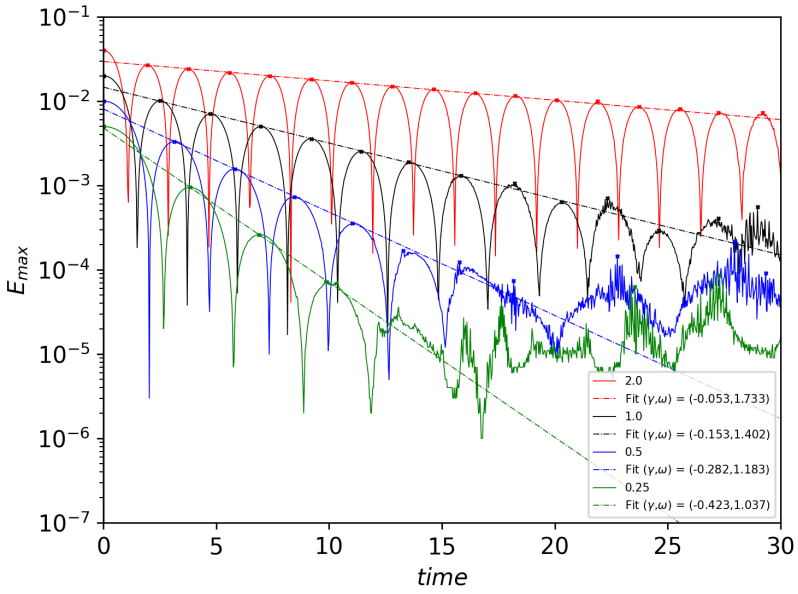



**图7：**不同电荷密度下电场振荡的比较。

。我们还将在并行环境中重复这些测试，从而将每单元粒子数提高几个数量级，减少代码中最大的误差来源。

非线性朗道阻尼更为复杂，因为其中存在等离子体回波等不发生阻尼的现象。至关重要的是，在研究线性朗道阻尼时作为基本近似所采用的 Vlasov 方程线性化，

并不能保证线性薛定谔方程的渐近行为能够近似非线性薛定谔方程的渐近行为 [30]。有理由怀疑，对线性化方程的研究无法为非线性方程的长期行为提供任何线索。因此，若要设计一种能够准确捕捉等离子体长期行为的算法，也必须考虑非线性情况下的朗道阻尼。

# A 附录 A

本文所展示的数据可使用 PETSc，通过 DMSwarm 示例$ex9$(\$$PETSC\ DIR/src/dm/impls/swarm/tests/ex9.c$)重现。具体运行时间可能因架构和编译器而异。可使用以下选项运行 DMSwarm 示例：

```
./ex9 -dm_plex_dim 2 -dm_plex_simplex 0 -dm_plex_box_bd
periodic,none -dm_plex_box_faces 10,1 -dm_view -dm_plex_box_lower
0,-0.5 -dm_plex_box_upper 12.5664,0.5 -dm_swarm_num_species 1 -dm_
swarm_num_particles 50 -vdm_plex_dim 1 -vdm_plex_simplex0 -vdm_plex_
box_faces 7500 -vdm_plex_box_lower -10 -vdm_plex_box_upper 10 -
petscspace_degree 1 -em_type primal -em_pc_typesvd -em_snes_atol 1.e-12 -
ts_type basicsymplectic -ts_basicsymplectic_type 1 -ts_max_time 500 -ts_
max_steps 1000 -ts_dt 0.03 -fake_1D -cosine_coefficients 0.01,0.5 -charges -
1.0,1.0 -perturbed_weights -periodic
```

此示例在域 $(x,\ v) \in [0, 4\pi] \times [-10, 10]$ 上使用 100×100 单元网格，每单元包含 8000 个粒子。选择一阶基本辛积分器作为时间积分方法，并选择 $H^1$ 有限元进行场求解。

# 参考文献


[1] Shrirang Abhyankar 等。《PETSc/TS：现代可扩展微分代数方程/常微分方程求解器库》。预印本 ANL/MCS-P5061-0114。ANL，2014年1月。[2] Satish Balay 等。《PETSc/TAO用户手册》。英文。版本修订版 3.18。阿贡国家实验室。2022年。310页。[3] Satish Balay 等。《PETSc网页》。https://petsc.org/。2022年。URL：https://petsc.org/。[4] Jeffrey W. Banks 等。“二维薛定谔方程的高阶精度守恒有限差分方法+2V”。载于：《SIAM科学计算杂志》41.5（2019），B953–B982。DOI：10.1137/19M1238551。电子版：https://doi.org/10.1137/19M1238551。URL：https://doi.org/10.1137/19M1238551。[5] D. Bohm 和 E. P. Gross。“等离子体振荡理论：A. 类介质行为的起源”。载于：《物理评论》75（12 1949），第1851–1864页。DOI：10.1103/PhysRev.75.1851。URL：https://link.aps. org/doi/10.1103/PhysRev.75.1851。[6] Jed Brown、Matthew G. Knepley 和 Barry Smith。“模拟软件的运行时可扩展性与库化”。载于：《IEEE科学与工程计算》17.1（2015年1月），第38–45页。DOI：10.1109/MCSE.2014.95。[7] J.A. Byers。“无碰撞等离子体宏粒子模型中的噪声抑制技术”。载于：《第四届等离子体数值模拟会议论文集》。NTIS 编。NRL，华盛顿特区，1970年。[8] Jos´e Canosa。“朗道色散方程的数值解”。载于：《计算物理学杂志》13.1（1973），第158–160页。ISSN：0021-9991。DOI：https://doi.org/10.1016/0021-9991(73) 90131-9。URL：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999173901319。

[9] F.F. Chen。《等离子体物理与受控聚变导论》。第2版。第1卷。全会出版社，纽约，1984年。[10] C.Z Cheng 和 Georg Knorr。“构形空间中 Vlasov 方程的积分”。载于：计算物理学杂志 22.3（1976），第330–351页。 ISSN：0021-9991。 DOI：https://doi.org/ 10.1016/0021-9991(76)90053-X。 URL：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/ 002199917690053X。[11] Philippe G. Ciarlet。《有限元方法数值分析》。蒙特利尔大学出版社，1976年。[12] John Dawson。“论朗道阻尼”。载于：流体物理学 4.7（1961），第869–874页。 DOI：10. 1063/1 .1706419。电子版：https:/ /aip. scitation. org/doi/ pdf/10.1063 /1.1706419。 URL：https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.1706419。[13] J. Denavit 和 J.M. Walsh。《等离子体物理与受控聚变评论》。英文。纽约，1988年。[14] J.P. Friedberg、R.L. Morse 和 C.W. Nielson。载于：《第三届等离子体数值模拟会议论文集》。加州斯坦福大学，1969年。[15] Ernst Hairer、Gerhard Wanner 和 Christian Lubich。“哈密顿系统的辛积分”。载于：《几何数值积分：常微分方程的保结构算法》。柏林、海德堡：施普林格柏林海德堡，2006年，第179–236页。 ISBN：978-3-540-30666-5。DOI：10.1007/3-540-30666-8_6。 URL：https://doi.org/10.1007/3-540-30666-8_6。[16] Vaclav Hapla 等。“使用 PETSc DMPlex 实现完全并行的网格输入/输出及其在波形建模中的应用”。载于：SIAM科学计算杂志 43.2（2021），第C127–C153页。 ISSN：1095-7197。DOI：10.1137/20m1332748。 URL：http://dx.doi.org/10.1137/20M1332748。[17] F.H. Harlow、M. Evans 和 R.D. Richtmyer。《流体动力学问题的机器计算方法》。LAMS （洛斯阿拉莫斯科学实验室）。加利福尼亚大学洛斯阿拉莫斯科学实验室，1955年。 URL：https://books.google.com/books?id=r vM5zQEACAAJ。[18] Francis H Harlow。《流体动力学问题数值求解的粒子网格法》。LAMS（洛斯阿拉莫斯科学实验室）。加利福尼亚大学洛斯阿拉莫斯科学实验室，1962年。 DOI：10.2172/4769185。 URL：https://www.osti.gov/biblio/4769185。[19] J D Jackson。“纵向等离子体振荡”。载于：核能杂志。C辑，等离子体物理学、加速器与热核研究 1.4（1960），第171页。 DOI：10.1088/0368-3281/1/4/301。URL：https://dx.doi.org/10.1088/0368-3281/1/4/301。[20] Robert C. Kirby。“算法839：FIAT，一种计算有限元基函数的新范式”。载于：ACM数学软件汇刊 30.4（2004），第502–516页。 ISSN：0098-3500。 DOI：10.1145/1039813.1039820。[21] M. G. Knepley 等。“通过统一残差计算实现高性能”。载于：arXiv 预印本（2013年9月）。arXiv：1309。1204 [cs.MS]。[22] Matthew G. Knepley 和 Dmitry A. Karpeev。“基于 Sieve 的偏微分方程网格算法 I：网格分布”。载于：科学编程 17.3（2009）。http://arxiv.org/abs/0908.4427，第215–230页。 DOI：10.3233/SPR-2009-0249。 URL：http://arxiv.org/abs/0908.4427。[23] Matthew G. Knepley、Michael Lange 和 Gerard J. Gorman。《并行非结构重叠网格分布》。2017年。电子版：1506.06194。[24] L.D. Landau。“库仑相互作用情况下的动力学方程”。载于：苏联物理学杂志 10（1936），第154–164页。[25] L.D. Landau。“电子等离子体的振荡”。载于：苏联物理学杂志 10（1946），第25–34页。[26] Michael Lange 等。“使用 PETSc-DMPlex 高效管理 Firedrake 中的网格”。载于：SIAM科学计算杂志 38.5（2016），S143–S155。 DOI：10.1137/15M1026092。电子版：http: //arxiv.org/abs/1506.07749。

[27] James R Maddison 和 Patrick E Farrell. “通过超网格构造在非结构化网格上进行方向积分”。载于：计算物理学杂志 231.12（2012年），第 4422–4432 页。[28] Dave A May 和 Matthew G Knepley. “DMSwarm：PETSc 中的粒子”。载于：欧洲地球科学联盟大会摘要。第 19 卷。2017年，第 10133 页。[29] C. J. McKinstrie、R. E. Giacone 和 E. A. Startsev. “静电波朗道阻尼率的精确公式”。载于：等离子体物理学 6.2（1999年），第 463–466 页。 DOI：10.1063/1.873212。电子预印本：https://doi.org/10.1063/1.873212。 URL：https://doi.org/10.1063/1.873212。[30] Clement Mouhot 和 Cedric Villani. “论朗道阻尼”。载于：数学学报 207.1（2011年），第 29–201 页。 DOI：10.1007/s11511- 011- 0068- 9。 URL：https://doi.org/10.1007/s11511- 011- 0068-9。[31] Andrew Myers、Phillip Colella 和 Brian Van Straalen. “用于 Vlasov-Poisson方程的四阶粒子网格法与相空间重映射”。载于：（2016年）。 DOI：10.48550/ARXIV.1602. 00747。 URL：https://arxiv.org/abs/1602.00747。[32] Joseph V. Pusztay、Matthew G. Knepley 和 Mark F. Adams. “有限元基与粒子基之间的守恒投影”。载于：SIAM科学计算杂志 44.4（2022年），第 C310–C319 页。 DOI：10.1137/21M1454079。电子预印本：https://doi.org/10.1137/21M1454079。 URL：https: // doi.org/10.1137/21M1454079。[33] Mohamad Shalaby 等人。“SHARP：一种空间高阶相对论粒子网格代码”。载于：天体物理学杂志 841.1（2017年），第 52 页。 DOI：10 . 3847 / 1538 - 4357 / aa6d13。 URL：https : //dx.doi.org/10.3847/1538-4357/aa6d13。[34] E. Sonnendr¨ucker. Vlasov–Maxwell方程的数值方法（准备中的书籍）。[35] N.G. Van Kampen. “论等离子体中的驻波理论”。载于：物理学 21.6（1955年），第 949–963 页。 ISSN：0031-8914。 DOI：https : / / doi . org / 10 . 1016 / S0031 - 8914(55 ) 93068 - 8。 URL：https : // www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0031891455930688。[36] A. Vlasov. “¨关于电子气体的振荡特性”。俄文。载于：Zh. `Eksper. Teor. Fiz. 8（1938年），第 291–318 页。 ISSN：0044-4510。[37] Andrew J Wathen. “Galerkin质量矩阵的实际特征值界”。载于：IMA数值分析杂志 7.4（1987年），第 449–457 页。[38] Tie Zhou、Yan Guo 和 Chi Wang Shu. “朗道阻尼的数值研究”。载于：物理学D：非线性现象 157.4（2001年），第 322–333 页。 ISSN：01672789。 DOI：10 .1016 /S0167 - 2789(01 ) 00289-5。