arXiv:2304.01891v1 [math.NA] 4 Apr 2023

具有动理学离子和无质量流体电子的等离子体混合模型的几何粒子网格（PIC）离散化格式

Yingzhe Li *[1]、Martin Campos Pinto[1], 、Florian Holderied[1,2], 、Stefan Possanner[1], 和 Eric Sonnendrücker[1,3]

[1]德国加兴市博尔兹曼街 2 号，邮编 85748，马克斯·普朗克等离子体物理研究所[2]德国加兴市詹姆斯-弗兰克街 1 号，邮编 85748，慕尼黑工业大学物理系[3]德国加兴市博尔兹曼街 3 号，邮编 85748，慕尼黑工业大学数学系

摘要

我们探讨了将保结构数值方法应用于一种等离子体混合模型的可能性，该模型包含动理学离子和满足准中性关系的无质量流体电子。针对场变量，数值格式是在有限元外微积分（FEEC）框架下通过有限元方法推导的；针对Vlasov方程，则采用粒子网格（PIC）方法；时间推进采用基于一种反对称括号的分裂方法。无论采用何种分辨率和度量，这些方法都具有能量守恒、准中性关系保持、密度正性以及磁场无散度等性质。为提高所提方法的效率，采用局部准插值处理电流项。该方法已在 Python 软件包 STRUPHY 的框架下实现 [1], ，并通过大量数值实验进行了验证。

1 引言

动理学模型和流体模型广泛应用于计算等离子体物理学。对于动理学模型，经典方法包括粒子网格方法 [3, 4], 欧拉方法 [5],和半拉格朗日方法 [6]。具有高维相空间的动理学模型能够纳入远离热平衡态的物理过程，但计算成本较高。另一方面，磁流体力学（MHD）等流体模型维度较低，对于速度分布近似高斯分布的等离子体而言效率更高。混合模型结合了动理学方法和流体方法的优势，适用于等离子体的部分区域已热化（流体，多次碰撞），而其他部分仍远离热平衡态（动理学组分，少次碰撞）的情形。本文考虑一种等离子体混合模型，其中离子采用动理学方法处理，而无质量电子则使用流体方程描述，并具有一个

*通讯作者：yingzhe.li@ipp.mpg.de

广义欧姆定律 [8] （包括电子压力梯度和霍尔项）：

$$\begin{aligned}
\text{kinetic ions:} \qquad & \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \frac{q}{m}(\mathbf{E}+\mathbf{v}\times\mathbf{B})\cdot\frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = 0\,, \\
\text{Faraday's law:} \qquad & \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla\times\mathbf{E}\,, \qquad \nabla\cdot\mathbf{B} = 0\,, \\
\text{mass-less fluid electrons:} \qquad & \frac{\partial n_\mathrm{e}}{\partial t} + \nabla\cdot(n_\mathrm{e}\mathbf{u}) = 0\,, \\
\text{Ohm's law:} \qquad & \mathbf{E} = -\frac{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}{e}\frac{\nabla n_\mathrm{e}^\gamma}{n_\mathrm{e}} - \left(\mathbf{u} - \frac{\mathbf{J}}{n_\mathrm{e}e}\right)\times\mathbf{B}\,.
\end{aligned} \tag{1}$$

这里，$\mathbf{J} = \frac{1}{\mu_0}\nabla\times\mathbf{B}$ 表示等离子体电流， f 表示离子分布函数，准中性数密度为 $n_\mathrm{e} = n$，其中 $n = \frac{q}{e}\int f\,\mathrm{d}\mathbf{v}$， $\mathbf{u} = q\int \mathbf{v} f\mathrm{d}\mathbf{v}/en$ 是携带离子电流的漂移速度， $-e$ 是电子电荷， q/m 是离子荷质比，$\mathbf{E}$ 和$\mathbf{B}$表示电磁场， $T_\mathrm{e} = const$ 是固定的电子温度， k_B 表示玻尔兹曼常数。取 $\gamma = 1$ 或 $\gamma = 5/3$ 分别得到等温电子模型或绝热电子模型。在本文中，我们重点研究 $\gamma = 1$ 情形下的数值方法，该方法可直接应用于 $\gamma = 5/3$ 情形。

通过直接计算可验证，当$\gamma = 1$时，系统（1）满足能量守恒。

$$\mathcal{H} = \underbrace{\frac{m}{2}\int |\mathbf{v}|^2 f\,\mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{v}}_{\text{ion energy}} + \underbrace{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}\int n_\mathrm{e}\ln n_\mathrm{e}\,\mathrm{d}\mathbf{x}}_{\text{electron energy}} + \underbrace{\frac{1}{2\mu_0}\int |\mathbf{B}|^2\,\mathrm{d}\mathbf{x}}_{\text{magnetic energy}}. \tag{2}$$

我们注意到，准中性 $n = n_\mathrm{e}$ 使（1）中的电子连续性方程成为冗余方程，因为对Vlasov方程取速度矩即可自动保证该方程成立。保留此方程则需要在数值上保持准中性关系以及 n_e 的正性。

针对这类模型，已有多种数值方法和代码被提出，例如基于电流推进方法 [8], 开发了粒子网格（Particle-In-Cell）代码 CAMELIA [10]和欧拉代码 [9]；Pegasus [11], 采用约束输运方法来满足磁场的无散约束；以及 CHIEF [13], ，它采用了未经近似处理的电子惯性流体方程。此外， [12], 通过修改模型以纳入有限电子惯性效应，解决了低密度问题。关于混合模型模拟的更全面综述，读者可参阅 [42]。由于能量（2）是非二次型的，这些方法无法保证能量守恒，而能量守恒对于长时间模拟十分重要，例如对于理解湍流产生中的参数不稳定性作用以及质子加热现象 [27]。相关研究还包括 [30, 31], ，其中针对能量为二次型的修正动力学离子-流体电子混合模型，构造了（曲线网格上的）能量守恒和动量守恒格式。然而，文中未讨论电子密度与压力之间关系 $p_e = T_e n_e^\gamma$ 的保持。文献 [41], 研究了以矢量势表示的该混合模型的保结构离散化，其中分布函数依赖于正则动量（而非速度）。

我们的离散化格式遵循结构保持方法的最新进展 [15, 16],。这类方法旨在保持给定系统的几何性质（如辛结构），并具有良好的长时间演化行为。在等离子体物理学中，已有一些结构保持方法 [17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 1, 24] 被提出

用于动力学方程和混合模型。具体而言，在本工作中，我们遵循 [1, 21], 将磁场视为 1-形式，并特别选取相应的有限元空间（以 B 样条作为基函数），使得 [7] 中提出的交换图成立。我们的工作与 [21, 1]存在几项重大差异。主要区别在于，我们的模型具有更高阶的非线性项。例如，在下文引入的反对称括号中，包含三个到六个函数乘积的积分，因此必须使用数值求积。此外，密度表示为有限个粒子之和，因此有必要使用平滑δ函数。

当 n_e 被视为混合模型中的独立未知量时， [14]提出了一种泊松括号。在本文中，我们为未知量为 $(f,\ \mathbf{B})$ 的混合模型提出一种反对称括号和数值方法，即 n_e 不是独立未知量（而是由 $q/e\int f\mathbf{dv}$ 替代），并且数值求解中不求解 $\frac{\partial n_e}{\partial t}+\nabla\cdot(n_e\mathbf{u})=0$。通过泊松分裂推导时间离散格式，也就是将反对称括号分解为若干反对称子括号，并得到相应的子步。对于与哈密顿量中非二次项（电子热能）相关的子步，我们采用哈密顿分裂方法（适用于笛卡尔坐标情形）和离散梯度方法（适用于曲线坐标情形），以高精度或精确地守恒能量。本文针对等温电子情形构造并详细介绍了数值方法，这些方法也可应用于绝热电子情形。需要注意的是，由于该反对称括号不是泊松括号，离散化格式并不保持泊松结构。不过，基于此括号构造的离散化格式能够守恒总能量、磁场的无散性质和密度正性。

本文结构安排如下。在第2节中，我们为未知量$(f,\ \mathbf{B})$的表述引入一个反对称括号，并基于该反对称括号通过泊松分裂进行时间离散化。在第3节中，我们介绍曲线坐标、以微分形式未知量表示的括号、有限元方法和粒子网格方法，并据此通过离散泛函导数得到离散泊松括号。在第4节中，我们讨论各子步的计算细节，并详细讨论能量守恒以及磁场的无散性质。在第5和6节中，我们对所构建数值格式的性能和有效性进行检验。在第7节中，我们总结全文并展望未来工作。

2 泊松括号

首先，通过引入以下单位来消去物理常数:

$$
\begin{aligned}
&t=\frac{t'}{\Omega}\,,\qquad \mathbf{v}=\mathbf{v}'v_{\mathrm{A}}\,,\qquad \mathbf{x}=\mathbf{x}'\frac{v_{\mathrm{A}}}{\Omega}\,,\qquad \mathbf{B}=\mathbf{B}'B_0\,,\qquad \mathbf{E}=\mathbf{E}'v_AB_0\,,\\
&n_e=n_e'n_0\,,\qquad \mathbf{u}=\mathbf{u}'v_{\mathrm{A}}\,,\qquad \kappa:=\frac{k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}}}{mv_{\mathrm{A}}^2}\,,\qquad \mathbf{J}=\mathbf{J}'en_0v_{\mathrm{A}}\,,\qquad \mathcal{H}=\mathcal{H}'mn_0v_{\mathrm{A}}^2\,.
\end{aligned}
\tag{3}
$$

此处，带撇号的量均为无量纲量，$\Omega=qB_0/m$ 表示离子回旋频率， B_0是特征磁场强度，$v_{\mathrm{A}}=B_0/\sqrt{\mu_0mn_0}$ 表示阿尔芬速度， n_0 则是特征粒子密度。参数 κ 是电子能量与阿尔芬动能之比。归一化后，我们得到以下适用于

情形 $q=e$ 的无量纲方程，

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial f}{\partial t}+\mathbf{v}\cdot\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}+(\mathbf{E}+\mathbf{v}\times\mathbf{B})\cdot\frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}}=0\,,\\
&\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}=-\nabla\times\mathbf{E}\,,\quad \nabla\cdot\mathbf{B}=0\,,\\
&\frac{\partial n_{\mathrm{e}}}{\partial t}+\nabla\cdot(n_{\mathrm{e}}\mathbf{u})=0,\quad \mathbf{u}=\int\mathbf{v}f\mathrm{d}\mathbf{v}\Big/\int f\mathrm{d}\mathbf{v},\\
&\mathbf{E}=-\kappa\frac{\nabla n_{\mathrm{e}}}{n_{\mathrm{e}}}-\left(\mathbf{u}-\frac{\mathbf{J}}{n_{\mathrm{e}}}\right)\times\mathbf{B},\quad \mathbf{J}=\nabla\times\mathbf{B}.
\end{aligned}
\tag{4}
$$

值得注意的是，模型（1）—（2）由众所周知的等离子体方程组合而成，是一个非正则哈密顿系统，即它可以写成 [14], 中提出的泊松括号形式，其中 n_e 被视为独立未知量。我们的目标是直接处理仅含两个未知量 $(f,\ \mathbf{B})$ 的方程，而不对$\frac{\partial n_{\mathrm{e}}}{\partial t}+\nabla\cdot(n_{\mathrm{e}}\mathbf{u})=0$进行数值求解。为此，我们提出一个反对称括号 $\{\cdot,\cdot\}:\ V\times V\to V$，其中 V表示未知量空间上泛函构成的向量空间 $\mathcal{P}:\ (f,\ \mathbf{B})\mapsto$取值于实数域，其形式为

$$
\{\mathcal{P},\mathcal{Q}\}=\{\mathcal{P},\mathcal{Q}\}_{vv}+\{\mathcal{P},\mathcal{Q}\}_{Bv}+\{\mathcal{P},\mathcal{Q}\}_{BB}+\{\mathcal{P},\mathcal{Q}\}_{xv}\,,
\tag{5}
$$

其中*

$$
\{\mathcal{P},\mathcal{Q}\}_{vv}=-\int\frac{1}{n}f(\mathbf{v})f(\mathbf{v}')\mathbf{B}\cdot\left(\nabla_v\frac{\delta\mathcal{P}}{\delta f}\times\nabla_{v'}\frac{\delta\mathcal{Q}}{\delta f}\right)\mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{v}\mathrm{d}\mathbf{v}'+\int f\mathbf{B}\cdot\nabla_v\frac{\delta\mathcal{P}}{\delta f}\times\nabla_v\frac{\delta\mathcal{Q}}{\delta f}\,\mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{v}\,,
\tag{6a}
$$

$$
\{\mathcal{P},\mathcal{Q}\}_{Bv}=\int\frac{f}{n}\mathbf{B}\cdot\left[\nabla_v\frac{\delta\mathcal{P}}{\delta f}\times\left(\nabla\times\frac{\delta\mathcal{Q}}{\delta\mathbf{B}}\right)-\nabla_v\frac{\delta\mathcal{Q}}{\delta f}\times\left(\nabla\times\frac{\delta\mathcal{P}}{\delta\mathbf{B}}\right)\right]\mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{v}\,,
\tag{6b}
$$

$$
\{\mathcal{P},\mathcal{Q}\}_{BB}=-\int\frac{1}{n}\mathbf{B}\cdot\left(\nabla\times\frac{\delta\mathcal{P}}{\delta\mathbf{B}}\right)\times\left(\nabla\times\frac{\delta\mathcal{Q}}{\delta\mathbf{B}}\right)\mathrm{d}\mathbf{x}\,,
\tag{6c}
$$

$$
\{\mathcal{P},\mathcal{Q}\}_{xv}=\int f\left(\nabla_x\frac{\delta\mathcal{P}}{\delta f}\cdot\nabla_v\frac{\delta\mathcal{Q}}{\delta f}-\nabla_v\frac{\delta\mathcal{P}}{\delta f}\cdot\nabla_x\frac{\delta\mathcal{Q}}{\delta f}\right)\mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{v}\,.
\tag{6d}
$$

注意，在这个括号中没有 $n=\int f\mathrm{d}\mathbf{v}$ 和 n_e。哈密顿量（总能量）可以写为

$$
\mathcal{H}=\frac{1}{2}\int|\mathbf{v}|^2f\,\mathrm{d}\mathbf{x}\mathrm{d}\mathbf{v}+\frac{1}{2}\int|\mathbf{B}|^2\,\mathrm{d}\mathbf{x}\,+\kappa\int\left(\int f\,\mathrm{d}\mathbf{v}\right)\ln\left(\int f\,\mathrm{d}\mathbf{v}\right)\mathrm{d}\mathbf{x},
\tag{7}
$$

它是离子动能、磁场哈密顿量和电子热能之和。关于 f 和$\mathbf{B}$ 的泛函导数为

$$
\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta f}=\frac{|\mathbf{v}|^2}{2}+\kappa\left(1+\ln\left(\int f\,\mathrm{d}\mathbf{v}\right)\right)\,,\qquad\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\mathbf{B}}=\mathbf{B}\,.
$$

基于上述反对称括号和哈密顿量（7），我们可以将混合模型重新表述为

$$
\dot{\mathcal{Z}}=\{\mathcal{Z},\mathcal{H}\},\quad \mathcal{Z}=(f,\mathbf{B}).
\tag{8}
$$

这种公式和括号（6）的优点包括：1）离子和电子的准中性关系内置其中，因为 n_e 并非独立未知量；2）

*我们将省　略去下文中归一化量上的撇号，并统一采用（3）中的单位。

n 在数值上得到保证，因为经过粒子网格法离散化后，它被写成有限个粒子之和；3）反对称括号（6）和公式（8为采用离散梯度方法奠定了基础， [38, 40]从而在数值上保持能量守恒，尽管反对称括号（6）不满足雅可比恒等式。

在数值离散化格式中，我们将使用泊松分裂方法 [32, 19, 25]，其基于将完整括号（5）分解为以下四个部分（6），由此得到以下 4 个守恒能量、质量 $\int f\mathrm{d}\mathbf{v}\mathrm{d}\mathbf{x}$以及动量 $\int \mathbf{v}f\mathrm{d}\mathbf{v}\mathrm{d}\mathbf{x}$的子步：

$$\text{sub-step } vv: \quad \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = \{\mathcal{P}, \mathcal{H}\}_{vv} \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial f}{\partial t} = -(\mathbf{v} \times \mathbf{B} + \mathbf{B} \times \frac{\int \mathbf{v} f \, \mathrm{d}\mathbf{v}}{n}) \cdot \nabla_v f \,, \tag{9}$$

$$\text{sub-step } bv: \quad \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = \{\mathcal{P}, \mathcal{H}\}_{Bv} \quad \Longrightarrow \quad \begin{cases} \dfrac{\partial f}{\partial t} = -\dfrac{1}{n}(\nabla \times \mathbf{B}) \times \mathbf{B} \cdot \nabla_v f \,, \\ \dfrac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \left(\mathbf{B} \times \dfrac{1}{n} \displaystyle\int \mathbf{v} f \, \mathrm{d}\mathbf{v} \right) \,, \end{cases} \tag{10}$$

$$\text{sub-step } bb: \quad \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = \{\mathcal{P}, \mathcal{H}\}_{BB} \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \left(\frac{1}{n} \nabla \times \mathbf{B} \times \mathbf{B} \right) \,, \tag{11}$$

$$\text{sub-step } xv: \quad \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = \{\mathcal{P}, \mathcal{H}\}_{xv} \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial f}{\partial t} = -\mathbf{v} \cdot \nabla_x f + \kappa \frac{\nabla n}{n} \cdot \nabla_v f \,, \tag{12}$$

其中 $n = \int f\mathrm{d}\mathbf{v}$。

3 括号的离散化

本节将通过三个步骤对混合模型的反对称括号（6）进行离散化。首先，借助微分形式，用曲线坐标表示该括号；然后使用有限元方法 [7, 21, 29] 和粒子网格方法进行离散化；最后，对泛函导数进行离散化，从而得到离散括号。

3.1 曲线坐标与微分形式

这里，我们用微分形式 [33]在弯曲空间中表示所研究的模型。我们使用与 [1, 34] 中相同的记号。光滑、可逆的坐标变换（或“映射”）为 $\mathbf{F}: \hat{\Omega} \to \Omega \ \boldsymbol{\eta} \to \mathbf{F}(\boldsymbol{\eta}) = \mathbf{x}$，将逻辑长方体 $\hat{\Omega} = [0,1]^3$ 映射到物理域 $\Omega \subset \mathrm{R}^3$。此外， $\boldsymbol{\eta} = (\eta_1, \eta_2, \eta_3) \in \hat{\Omega}$ 和 $\mathbf{x} = (x, y, z) \in \Omega$ 分别是逻辑坐标和笛卡尔坐标。该坐标变换的雅可比矩阵为

$$DF: \hat{\Omega} \to \mathbb{R}^{3\times 3}, \quad (DF)_{i,j} = \frac{\partial F_i}{\partial \eta_j}.$$

为方便起见，我们还引入以下记号，

$$\hat{\nabla} = (\partial_{\eta_1}, \partial_{\eta_2}, \partial_{\eta_3})^\top, \quad \nabla = (\partial_x, \partial_y, \partial_z)^\top, \quad G = DF^\top DF, \quad g = \det G = \det(DF)^2.$$

我们将经常使用恒等式 $M\mathbf{a} \times M\mathbf{b} = \det(M) M^{-\top}(\mathbf{a} \times \mathbf{b})$，用于将大小为 M 的矩阵 3×3 的叉积进行变换。标量场的变换方式为 $a(\mathbf{F}(\boldsymbol{\eta})) = \hat{a}(\boldsymbol{\eta})$；曲线（逻辑）坐标下向量场 $\mathbf{a} \in T_{\mathbf{x}}\Omega$ 的分量记为 $\hat{\boldsymbol{a}}$，由关系式 $\boldsymbol{a}(\mathbf{F}(\boldsymbol{\eta})) = DF(\boldsymbol{\eta})\hat{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{\eta})$ 定义。逻辑坐标与物理坐标下梯度、旋度和散度之间的关系如下：

$$\nabla a = DF^{-\top} \hat{\nabla} \hat{a}, \quad \nabla \times \boldsymbol{a} = \frac{1}{\sqrt{g}} DF \hat{\nabla} \times (G\hat{\boldsymbol{a}}), \quad \nabla \cdot \boldsymbol{a} = \frac{1}{\sqrt{g}} \hat{\nabla} \cdot (\sqrt{g}\hat{\boldsymbol{a}}). \tag{13}$$

标量场 $\hat{a} = \hat{a}(\boldsymbol{\eta})$ 和分量为 $\hat{\boldsymbol{a}} = \hat{\boldsymbol{a}}(\boldsymbol{\eta})$ 的向量场 $a \in T\Omega$，可与微分 p-形式 $a^p \in \Lambda^p(\Omega)$ 联系起来：$T\Omega \times \cdots \times T\Omega \to$ 实数域 $p \in \{0,1,2,3\}$，其分量为 $\hat{a}^p = \hat{a}^p(\boldsymbol{\eta})$，具体关系如下：

$$
\begin{aligned}
&a^0 = \hat{a}^0 \leftrightarrow \hat{a}^0 = \hat{a},\\
&a^1 = \hat{a}^1_1 \mathrm{d}\eta^1 + \hat{a}^1_2 \mathrm{d}\eta^2 + \hat{a}^1_3 \mathrm{d}\eta^3 \leftrightarrow \hat{\boldsymbol{a}}^1 = \begin{pmatrix} \hat{a}^1_1 \\ \hat{a}^1_2 \\ \hat{a}^1_3 \end{pmatrix} = G\hat{\boldsymbol{a}},\\
&a^2 = \hat{a}^2_1 (\mathrm{d}\eta^2 \wedge \mathrm{d}\eta^3) + \hat{a}^2_2 (\mathrm{d}\eta^3 \wedge \mathrm{d}\eta^1) + \hat{a}^2_3 \mathrm{d}\eta^1 \wedge \mathrm{d}\eta^2 \leftrightarrow \hat{\boldsymbol{a}}^2 = \begin{pmatrix} \hat{a}^2_1 \\ \hat{a}^2_2 \\ \hat{a}^2_3 \end{pmatrix} = \sqrt{g}\hat{\boldsymbol{a}},\\
&a^3 = \hat{a}^3 (\mathrm{d}\eta^1 \wedge \mathrm{d}\eta^2 \wedge \mathrm{d}\eta^3) \leftrightarrow \hat{a}^3 = \sqrt{g}\hat{a}.
\end{aligned}
\tag{14}
$$

$\hat{}$ 函数 $\hat{a}^p : \Omega \to$ 实数域可视为微分形式 a^p 的代理量。对于作用于代理量空间的泛函，我们使用 p-形式的推前来定义

$$
\begin{aligned}
\mathcal{P}(a(\mathbf{x})) &= \mathcal{P}(\hat{a}^0(\boldsymbol{\eta})) &&=: \hat{\mathcal{P}}(\hat{a}^0(\boldsymbol{\eta}))\,,\\
\mathcal{P}(\mathbf{a}(\mathbf{x})) &= \mathcal{P}(DF^{-\top}\hat{\mathbf{a}}^1(\boldsymbol{\eta})) &&=: \hat{\mathcal{P}}(\hat{\mathbf{a}}^1(\boldsymbol{\eta}))\,,\\
\mathcal{P}(\mathbf{a}(\mathbf{x})) &= \mathcal{P}(DF/\sqrt{g}\,\hat{\mathbf{a}}^2(\boldsymbol{\eta})) &&=: \hat{\mathcal{P}}(\hat{\mathbf{a}}^2(\boldsymbol{\eta}))\,,\\
\mathcal{P}(a(\mathbf{x})) &= \mathcal{P}(\hat{a}^3(\boldsymbol{\eta})/\sqrt{g}) &&=: \hat{\mathcal{P}}(\hat{a}^3(\boldsymbol{\eta}))\,.
\end{aligned}
$$

相应的泛函导数可再次利用对偶性，通过推前计算（此处针对 1-形式）

$$
\delta\mathcal{P}(\mathbf{a}(\mathbf{x})) = \int_\Omega \frac{\delta\mathcal{P}}{\delta\mathbf{a}} \cdot \delta\mathbf{a}\,\mathrm{d}\mathbf{x} = \int_{\hat{\Omega}} \frac{\delta\mathcal{P}}{\delta\mathbf{a}}(\mathbf{F}(\boldsymbol{\eta})) \cdot DF^{-\top}\delta\hat{\mathbf{a}}^1\sqrt{g}\,\mathrm{d}\boldsymbol{\eta} = \int_{\hat{\Omega}} \frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{\mathbf{a}}^1} \cdot \delta\hat{\mathbf{a}}^1 \mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\,, \tag{15}
$$

其他 p-形式也类似，由此得到

$$
\frac{\delta\mathcal{P}}{\delta a} = \frac{1}{\sqrt{g}}\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{a}^0}\,, \qquad \frac{\delta\mathcal{P}}{\delta\mathbf{a}} = \frac{1}{\sqrt{g}}DF\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{\mathbf{a}}^1}\,, \qquad \frac{\delta\mathcal{P}}{\delta\mathbf{a}} = DF^{-\top}\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{\mathbf{a}}^2}\,, \qquad \frac{\delta\mathcal{P}}{\delta a} = \frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{a}^3}\,. \tag{16}
$$

因此，对于 p-形式（代理量），其泛函导数按 3-p-形式（代理量）变换。这样才能使式（15）中的积分定义良好，这源于泛函导数属于对偶空间。

括号（6）可以通过应用变换（13）、（14）和（16）用微分形式表示。因此，有必要选择 p-形式表示来表示未知量 $(f,\ \mathbf{B})$。原则上，这一选择是自由的，但可以根据边界条件或随后数值格式的某些性质来确定。有两种不同的选择，分别得到场方程的弱形式和强形式。这相应于弱守恒律或强守恒律。“弱格式”将磁场$\mathbf{B}$ 表示为1-形式；“强格式”将磁场 $\mathbf{B}$ 表示为2-形式。分布函数 f 在两种情况下都是3-形式。在本文中，我们选择弱形式来构造数值方法，强形式也可以采用类似方式处理。具体而言，用微分

形式是

$$\{\hat{\mathcal{P}},\hat{\mathcal{Q}}\}_{vv}=\int \hat{f}^3 DF^{-\top}\hat{\mathbf{B}}^1\cdot\nabla_v\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{f}^3}\times\nabla_v\frac{\delta\hat{\mathcal{Q}}}{\delta\hat{f}^3}\,\mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\mathrm{d}\mathbf{v}$$
$$-\int\frac{1}{\hat{n}^3}\hat{f}^3(\mathbf{v})\hat{f}^3(\mathbf{v}')DF^{-\top}\hat{\mathbf{B}}^1\cdot\left(\nabla_v\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{f}^3}\times\nabla_{v'}\frac{\delta\hat{\mathcal{Q}}}{\delta\hat{f}^3}\right)\mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\mathrm{d}\mathbf{v}\mathrm{d}\mathbf{v}',$$

$$\{\hat{\mathcal{P}},\hat{\mathcal{Q}}\}_{Bv}=\int\frac{\hat{f}^3}{\hat{n}^3}DF^{-\top}\hat{\mathbf{B}}^1\cdot\left[\nabla_v\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{f}^3}\times\left(DF\hat{\nabla}\times\frac{G}{\sqrt{g}}\frac{\delta\hat{\mathcal{Q}}}{\delta\hat{\mathbf{B}}^1}\right)-\nabla_v\frac{\delta\hat{\mathcal{Q}}}{\delta\hat{f}^3}\times\left(DF\hat{\nabla}\times\frac{G}{\sqrt{g}}\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{\mathbf{B}}^1}\right)\right]\mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\mathrm{d}\mathbf{v},$$

$$\{\hat{\mathcal{P}},\hat{\mathcal{Q}}\}_{BB}=-\int\frac{1}{\hat{n}^3}DF^{-\top}\hat{\mathbf{B}}^1\cdot\left(DF\hat{\nabla}\times\frac{G}{\sqrt{g}}\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{\mathbf{B}}^1}\right)\times\left(DF\hat{\nabla}\times\frac{G}{\sqrt{g}}\frac{\delta\hat{\mathcal{Q}}}{\delta\hat{\mathbf{B}}^1}\right)\mathrm{d}\boldsymbol{\eta},$$

$$\{\hat{\mathcal{P}},\hat{\mathcal{Q}}\}_{xv}=\int\hat{f}^3\left(DF^{-\top}\hat{\nabla}_\eta\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{f}^3}\cdot\nabla_v\frac{\delta\hat{\mathcal{Q}}}{\delta\hat{f}^3}-\nabla_v\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{f}^3}\cdot DF^{-\top}\hat{\nabla}_\eta\frac{\delta\hat{\mathcal{Q}}}{\delta\hat{f}^3}\right)\mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\mathrm{d}\mathbf{v},$$

其中 $\hat{n}^3=\int\hat{f}^3\mathbf{dv}$。

3.2 相空间离散化

对于空间（相空间）中的离散化，我们对场的未知量采用有限元方法，对分布函数采用粒子-网格（PIC）方法。

使用 B样条的交换图。我们在有限元外微积分（FEEC）框架下进行空间离散化 [7, 21, 29]。有限元（FE）空间及其相应的投影算子选择为使下图交换,

$$\begin{array}{ccccccc} H^1(\hat{\Omega}) & \xrightarrow{\hat{\nabla}} & H(\mathrm{curl},\hat{\Omega}) & \xrightarrow{\hat{\nabla}\times} & H(\mathrm{div},\hat{\Omega}) & \xrightarrow{\hat{\nabla}\cdot} & L^2(\hat{\Omega}) \\ \downarrow{\scriptstyle \Pi_0} & & \downarrow{\scriptstyle \Pi_1} & & \downarrow{\scriptstyle \Pi_2} & & \downarrow{\scriptstyle \Pi_3} \\ V_0 & \xrightarrow{\hat{\nabla}} & V_1 & \xrightarrow{\hat{\nabla}\times} & V_2 & \xrightarrow{\hat{\nabla}\cdot} & V_3 \end{array} \tag{18}$$

其中， V_0, V_1, V_2 和 V_3 是有限元空间，场（ p-形式的代理量， $p\leq 3$）在这些空间中离散化。投影算子 $\Pi_n, n=0$,1,2,3 基于有限元空间张成的 B 样条的 Greville 点处及点间的互插值/历史插值。更多详情请参见 [1]，其中使用了完全相同的基函数和投影算子。有限元空间写作

$$V_0:=\mathrm{span}\{\Lambda_i^0|0\leq i<N_0\},\qquad \ni\hat{a}_h^0(t,\boldsymbol{\eta})=\sum_{i=0}^{N_0-1}a_i(t)\Lambda_i^0(\boldsymbol{\eta})$$

$$V_1:=\mathrm{span}\left\{\begin{pmatrix}\Lambda_{1,i}^1\\0\\0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}0\\\Lambda_{2,i}^1\\0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}0\\0\\\Lambda_{3,i}^1\end{pmatrix}\middle|\begin{array}{l}0\leq i<N_1^1\\0\leq i<N_2^1\\0\leq i<N_3^1\end{array}\right\}\ni\hat{\mathbf{a}}_h^1(t,\boldsymbol{\eta})=\sum_{\mu=1}^{3}\sum_{i=0}^{N_\mu^1-1}a_{\mu,i}(t)\Lambda_{\mu,i}^1(\boldsymbol{\eta})\mathbf{e}_\mu,$$

$$V_2:=\mathrm{span}\left\{\begin{pmatrix}\Lambda_{1,i}^2\\0\\0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}0\\\Lambda_{2,i}^2\\0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}0\\0\\\Lambda_{3,i}^2\end{pmatrix}\middle|\begin{array}{l}0\leq i<N_1^2\\0\leq i<N_2^2\\0\leq i<N_3^2\end{array}\right\}\ni\hat{\mathbf{a}}_h^2(t,\boldsymbol{\eta})=\sum_{\mu=1}^{3}\sum_{i=0}^{N_\mu^1-1}a_{\mu,i}(t)\Lambda_{\mu,i}^2(\boldsymbol{\eta})\mathbf{e}_\mu,$$

$$V_3:=\mathrm{span}\{\Lambda_i^3|0\leq i<N_3\},\qquad \ni\hat{a}_h^3(t,\boldsymbol{\eta})=\sum_{i=0}^{N_3-1}a_i(t)\Lambda_i^3(\boldsymbol{\eta}).$$

ˆ这里，函数 $\Lambda_i^n\colon \Omega \to$实数域 是不同次数单变量 B 样条的张量积，如 [1, 29, 21], 和 $\mathbf{e}_1 = (1,0,0)^\top, \mathbf{e}_2 = (0,1,0)^\top, \mathbf{e}_3 = (0,0,1)^\top$中所述。其维数为

$$\dim V_0 = N_0\,, \quad \dim V_1 = N_1 = \sum_{d=1}^{3} N_d^1\,, \quad \dim V_2 = N_2 = \sum_{d=1}^{3} N_d^2\,, \quad \dim V_3 = N_3\,.$$

为简化记号，将有限元系数 a_i 和基函数排列成列向量，例如 $\mathbf{a} := (a_i)_{0\le i<N_0} \in$ 实数域^{N_0}，以及 $\mathbf{\Lambda}^0 := (\Lambda_i^0)_{0\le i<N_0} \in$ 实数域^{N_0}。这样，样条函数可以简洁地写成

$$\hat{a}_h^0 = \mathbf{a}^\top \mathbf{\Lambda}^0,$$

$$(\hat{\mathbf{a}}_h^1)^\top = (\underbrace{a_{1,0},\cdots,a_{1,N_1^1-1}}_{=:\mathbf{a}_1^\top}, \underbrace{a_{2,0},\cdots,a_{2,N_2^1-1}}_{=:\mathbf{a}_2^\top}, \underbrace{a_{3,0},\cdots,a_{3,N_3^1-1}}_{=:\mathbf{a}_3^\top}) \begin{pmatrix} \mathbf{\Lambda}_1^1 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{\Lambda}_2^1 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{\Lambda}_3^1 \end{pmatrix} =: \mathbf{a}^\top \mathbb{\Lambda}^1,$$

$$(\hat{\mathbf{a}}_h^2)^\top = (\underbrace{a_{1,0},\cdots,a_{1,N_1^2-1}}_{=:\mathbf{a}_1^\top}, \underbrace{a_{2,0},\cdots,a_{2,N_2^2-1}}_{=:\mathbf{a}_2^\top}, \underbrace{a_{3,0},\cdots,a_{3,N_3^2-1}}_{=:\mathbf{a}_3^\top}) \begin{pmatrix} \mathbf{\Lambda}_1^1 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{\Lambda}_2^1 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{\Lambda}_3^1 \end{pmatrix} =: \mathbf{a}^\top \mathbb{\Lambda}^2,$$

$$\hat{a}_h^3 = \mathbf{a}^\top \mathbf{\Lambda}^3,$$

其中 $\mathbb{\Lambda}^1 \in$ 实数域$^{N_1\times 3}$ 和 $\mathbb{\Lambda}^2 \in$实数域$^{N_2\times 3}$。在此设置下，外微分的离散表示可以写成作用于有限元系数的矩阵，

$$V_1 \ni \hat{\nabla}\hat{a}_h^0 = (\mathbb{C}\mathbf{a})^\top \mathbb{\Lambda}^1, \quad V_2 \ni \hat{\nabla}\times\hat{\mathbf{a}}_h^1 = (\mathbb{C}\mathbf{a})^\top \mathbb{\Lambda}^2\,, \quad V_3 \ni \hat{\nabla}\cdot\hat{\mathbf{a}}_h^2 = (\mathbb{D}\mathbf{a})^\top \mathbb{\Lambda}^3\,.$$

其中 $\mathbb{G} \in$ 实数域$^{N_1\times N_0}$、$\mathbb{C} \in$ 实数域$^{N_2\times N_1}$ 和 $\mathbb{D} \in$ 实数域$^{N_3\times N_2}$ 均为稀疏矩阵，仅包含 0 和 1。最后，与离散空间 V_n、n =0、1、2、3 对应的（对称）质量矩阵由 L^2-内积导出，并根据（14）中代理量的变换规则（推前）包含度量系数:

$$\begin{aligned}
\mathbb{M}_0 &:= \int \mathbf{\Lambda}^0 (\mathbf{\Lambda}^0)^\top \sqrt{g}\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{\eta} && \in \mathbb{R}^{N_0\times N_0}\,,\\
\mathbb{M}_1 &:= \int \mathbb{\Lambda}^1 G^{-1} (\mathbb{\Lambda}^1)^\top \sqrt{g}\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{\eta} && \in \mathbb{R}^{N_1\times N_1}\,,\\
\mathbb{M}_2 &:= \int \mathbb{\Lambda}^2 G (\mathbb{\Lambda}^2)^\top \frac{1}{\sqrt{g}}\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{\eta} && \in \mathbb{R}^{N_2\times N_2}\,,\\
\mathbb{M}_3 &:= \int \mathbf{\Lambda}^3 (\mathbf{\Lambda}^3)^\top \frac{1}{\sqrt{g}}\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{\eta} && \in \mathbb{R}^{N_3\times N_3}\,.
\end{aligned}$$

由于 B样条具有紧支集，这些质量矩阵是稀疏的。

在本文中，我们选择场方程的一种“弱”形式，由此得到以下离散化格式:

$$\hat{\mathbf{B}}^1 \approx \hat{\mathbf{B}}_h^1 = \mathbf{b}^\top \mathbb{\Lambda}^1,$$

也就是说，磁场是一个 1-形式。泛函导数表示为未知量空间上的霍奇星算子的值域中的元素。例如，关于ˆ磁场（在 V_1 中）的泛函导数 $\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta \hat{\mathbf{B}}^1}$ 在 $*V_1 := \{\sqrt{g}G^{-1}\mathbf{a}^1 | \mathbf{a}^1 \in V_1\}$中离散化。于是我们有

$$\delta\mathbf{B}_h^1 = \delta\mathbf{b}\cdot\mathbb{\Lambda}^1 \in V_1\,, \quad \frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{\mathbf{B}}^1} = \partial\mathbf{b}^\top \sqrt{g}G^{-1}\mathbb{\Lambda}^1 \in *V_1,$$

$$\delta\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{B}_h^1) = \int_{\hat{\Omega}} \frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{\mathbf{B}}^1} \cdot \delta\hat{\mathbf{B}}_h^1 \mathrm{d}\boldsymbol{\eta} = \partial\mathbf{b}^\top \mathbb{M}_1 \delta\mathbf{b}.$$

将 $\hat{\mathcal{P}}(\hat{\mathbf{B}}_h^1) =: P(\mathbf{b})$ 视为离散空间实数域^{N_1}上的泛函，我们有

$$\delta\hat{\mathcal{P}}(\mathbf{B}_h^1) = \delta P(\mathbf{b}) = \frac{\partial P}{\partial \mathbf{b}} \cdot \delta\mathbf{b},$$

由此可得 $\partial\mathbf{b} = \mathbb{M}_1^{-1} \frac{\partial P}{\partial} \mathbf{b}$，并且

$$\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{\mathbf{B}}^1} = (\sqrt{g}G^{-1}\mathbb{\Lambda}^1)^\top \mathbb{M}_1^{-1} \frac{\partial P}{\partial \mathbf{b}}. \tag{19}$$

粒子网格法 动力学分布函数在逻辑坐标中是一个 3-形式，并由有限个 K “标记粒子”表示（离散化），

$$\hat{f}_h^3(t, \boldsymbol{\eta}, \mathbf{v}) = \sum_{k=1}^{K} w_k \, S(\boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\eta}_k(t)) \, \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_k(t)), \tag{20}$$

这里，$\boldsymbol{\eta}_k(t)$ 和 $\mathbf{v}_k(t)$ 分别是第 k 个标记粒子的位置（在逻辑空间 Ω 中）和速度，它们也是Vlasov方程特征方程的解。实数域中的数值 $w_k \in \mathbb{R}$ 是第 k 个标记粒子的权重。我们将 n^3 离散化为

$$\hat{n}_h^3 = \sum_k w_k S(\boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\eta}_k(t)).$$

形函数 $S : \Omega \to$ 实数域 可选为 δ-函数 [21]，也可选为紧支撑函数 [28]。形函数经过归一化，即 $\int S(\boldsymbol{\eta})\mathrm{d}\boldsymbol{\eta} = 1$。本文采用的紧支撑平滑形函数为

$$S(\boldsymbol{\eta}) = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} S_{k_1}\left(\frac{\eta_1}{h_1}\right) S_{k_2}\left(\frac{\eta_2}{h_2}\right) S_{k_3}\left(\frac{\eta_3}{h_3}\right), \tag{21}$$

其中 S_k 定义为

$$S_0(\eta) := \mathbb{1}_{[-\frac{1}{2},\frac{1}{2}]}, \quad S_k(\eta) = S_0 \star S_{k-1} = \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} S_{k-1}(\eta - y)\mathrm{d}y.$$

那么我们知道，$S(\boldsymbol{\eta})$ 的局部支撑集为 $\mathrm{supp}(S) = [-h_1 k_1, h_1 k_1] \times [-h_2 k_2, h_2 k_2] \times [-h_3 k_3, h_3 k_3]$。请注意，此处的 h_1，h_2，h_3 可以选择为不同于场离散化单元尺寸的值。

我们可以将标记粒子分布函数（20）视为轨迹的参数化泛函 $(\mathbf{H}(t), \mathbf{V}(t))$（参见（26）中的记号）；其变分形式上写为

$$\delta\hat{f}_h^3(\mathbf{H}(t), \mathbf{V}(t)) = -\sum_{k=1}^{K} w_k \left[\delta\boldsymbol{\eta}_k \cdot \hat{\nabla} S(\boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\eta}_k) \, \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_k) + \delta\mathbf{v}_k \cdot S(\boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\eta}_k) \nabla_v \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_k)\right]. \tag{22}$$

此外，我们也可以将任意泛函 $\hat{\mathcal{P}}$ 视为 $\hat{f}_h^3$(20)上的函数 $P(\mathbf{H}(t), \mathbf{V}(t))$。于是我们有

$$\begin{aligned} \delta\hat{\mathcal{P}}(\hat{f}_h^3) &= \int \frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{f}_h^3} \delta\hat{f}_h^3 \, \mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\mathrm{d}\mathbf{v} \\ &= \sum_{k=1}^{K} w_k \left(\int S(\boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\eta}_k) \hat{\nabla} \frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{f}_h^3}\bigg|_{\mathbf{v}_k} \cdot \delta\boldsymbol{\eta}_k \mathrm{d}\boldsymbol{\eta} + \int S(\boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\eta}_k) \nabla_v \frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{f}_h^3}\bigg|_{\mathbf{v}_k} \cdot \delta\mathbf{v}_k \mathrm{d}\boldsymbol{\eta} \right). \end{aligned} \tag{23}$$

另一方面，对于 $P(\mathbf{H}(t),\ \mathbf{V}(t))$，我们有

$$\delta P(\mathbf{H}(t), \mathbf{V}(t)) = \sum_{k=1}^{K} \left[\frac{\partial P}{\partial \boldsymbol{\eta}_k} \cdot \delta \boldsymbol{\eta}_k + \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}_k} \cdot \delta \mathbf{v}_k \right].$$

因此，

$$\frac{\partial P}{\partial \boldsymbol{\eta}_k} = w_k \int S(\boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\eta}_k) \hat{\nabla} \frac{\delta \hat{\mathcal{P}}}{\delta \hat{f}_h^3}\bigg|_{\mathbf{v}_k} \mathrm{d}\boldsymbol{\eta} \ \approx w_k \hat{\nabla} \frac{\delta \hat{\mathcal{P}}}{\delta \hat{f}_h^3}\bigg|_{\boldsymbol{\eta}_k, \mathbf{v}_k}, \tag{24}$$

$$\frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}_k} = w_k \int S(\boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{\eta}_k) \nabla_v \frac{\delta \hat{\mathcal{P}}}{\delta \hat{f}_h^3}\bigg|_{\mathbf{v}_k} \mathrm{d}\boldsymbol{\eta} \approx w_k \nabla_v \frac{\delta \hat{\mathcal{P}}}{\delta \hat{f}_h^3}\bigg|_{\boldsymbol{\eta}_k, \mathbf{v}_k}. \tag{25}$$

上文中的 '≈' 会变为 '='，当 S 是一个狄拉克 δ 函数时，如 [21]。

符号 为了以更紧凑的矩阵-向量形式表示以下各节中的离散方程，我们引入以下向量和矩阵：

$$\begin{aligned}
&\mathbf{H} := (\eta_{1,1}, \cdots, \eta_{K,1}, \eta_{1,2}, \cdots, \eta_{K,2}, \eta_{1,3}, \cdots, \eta_{K,3})^\top && \in \mathbb{R}^{3K}, \\
&\mathbf{V} := (v_{1,1}, \cdots, v_{K,1}, v_{1,2}, \cdots, v_{K,2}, v_{1,3}, \cdots, v_{K,3})^\top && \in \mathbb{R}^{3K}, \\
&\mathbb{P}_\mu^n(\mathbf{H}) := (\Lambda_{\mu,i}^n(\boldsymbol{\eta}_k))_{0 \le i < N_\mu^n, 1 \le k \le K} \quad (n \in \{1,2\}, \mu \in \{1,2,3\}) && \in \mathbb{R}^{N_\mu^n \times K}, \\
&\mathbb{P}^n(\mathbf{H}) := \mathrm{diag}(\mathbb{P}_1^n, \mathbb{P}_2^n, \mathbb{P}_3^n), n \in \{1,2\} && \in \mathbb{R}^{N^n \times 3K}, \\
&\bar{G}_{ab}^{-1}(\mathbf{H}) := \mathrm{diag}(G_{ab}^{-1}(\boldsymbol{\eta}_1), \cdots, G_{ab}^{-1}(\boldsymbol{\eta}_K)) \quad (a,b \in \{1,2,3\}) && \in \mathbb{R}^{K \times K}, \\
&\bar{G}^{-1} := (\bar{G}_{ab}^{-1})_{1 \le a,b \le 3} && \in \mathbb{R}^{3K \times 3K}, \\
&\bar{DF}_{ab}^{-1}(\mathbf{H}) := \mathrm{diag}(DF_{ab}^{-1}(\boldsymbol{\eta}_1), \cdots, DF_{ab}^{-1}(\boldsymbol{\eta}_K)) \quad (a,b \in \{1,2,3\}) && \in \mathbb{R}^{K \times K} \\
&\bar{DF}^{-1} := (\bar{DF}_{ab}^{-1})_{1 \le a,b \le 3} && \in \mathbb{R}^{3K \times 3K}, \\
&\mathbb{W} := \mathbb{I}_3 \otimes \mathrm{diag}(w_1, \cdots, w_K) && \in \mathbb{R}^{3K \times 3K}.
\end{aligned} \tag{26}$$

准插值 这里我们介绍 [1], 中详述的局部准插值投影算子，它们通过组合以下一维局部插值和直方图积分算子构造而成：

$$\begin{aligned}
&\text{interpolation} \quad I^p f = \sum_{i=0} \lambda_i(f) \hat{N}_i^p, \quad \lambda_i(f) = \sum_{j=0}^{2p-2} \omega_j^i f(x_j^i), \\
&\text{histopolation} \quad H^{p-1} f = \sum_i \tilde{\lambda}_i(f) \hat{D}_i^{p-1}, \quad \tilde{\lambda}_i(f) = \sum_{j=0}^{2p-1} \tilde{\omega}_j^i \int_{\tilde{x}_j^i}^{\tilde{x}_{j+1}^i} f(t) \mathrm{d}t,
\end{aligned}$$

其中 p，$p-1$ 是单变量 B 样条基的次数，I^p 和 H^{p-1} 投影到，x_j^i 和 $\tilde{x}_{j+1}^i$ 分别是与自由度 $\lambda_i(f)\tilde{}$ 和 $\lambda_i(f)$ 相关的插值点和直方化点；更多细节及权重 ω_j 和 $\tilde{\omega}_j$ 请参见 [1] 。三维

投影算子 Π_0, $\mathbf{\Pi}_1$, $\mathbf{\Pi}_2$, Π_3 现在可以在交换图（18）中构造 a s:

$$
\begin{aligned}
\Pi_0 &= I^{p_1} \odot I^{p_2} \odot I^{p_3} \\
\mathbf{\Pi}_1 &= \begin{pmatrix} H^{p_1-1} \odot I^{p_2} \odot I^{p_3} \\ I^{p_1} \odot H^{p_2-1} \odot I^{p_3} \\ I^{p_1} \odot I^{p_2} \odot H^{p_3-1} \end{pmatrix} \\
\mathbf{\Pi}_2 &= \begin{pmatrix} I^{p_1} \odot H^{p_2-1} \odot H^{p_3-1} \\ H^{p_1-1} \odot I^{p_2} \odot H^{p_3-1} \\ H^{p_1-1} \odot H^{p_2-1} \odot I^{p_3} \end{pmatrix} \\
\Pi_3 &= H^{p_1-1} \odot H^{p_2-1} \odot H^{p_3-1},
\end{aligned}
$$

其中 $\odot$ 表示“逐坐标地”。上述局部投影算子的主要特点是它们具有局部性，即 $\boldsymbol{\eta}$ 处的 $I^p f$ 和 $H^{p-1} f$ 的值仅取决于 $\boldsymbol{\eta}$附近的 f 的值。这使得与局部投影算子相关的组装矩阵呈稀疏结构，有助于我们为第 4 节中的子步 bv 构造高效求解器。此外，对于每个投影算子 Π_i，我们引入记号 $\hat{}\ \Pi_i$ ： $V_i \to$ 实数域^{N_i}，它给出有限元系数 λ_i 或λ_i， $i = 0$，1，2，3。

3.3 括号离散化

考察分裂格式（9）-（12），相空间离散化有两种显而易见的方法。第一种方法是直接离散化右端的方程，旨在获得反对称矩阵，从而保证每个子步的能量守恒，如 [1]。第二种更系统的方法是离散化括号和哈密顿量，并推导出离散方程，如 [21]。第一种方法适用于没有适当括号的模型（例如线性化方程），但当哈密顿函数不是二次函数时可能会遇到困难，例如我们的情形中，哈密顿函数包含对数函数。第二种方法的优点是可以直接得到反对称离散括号，因此无论哈密顿函数多么复杂，都能始终保证能量守恒。此外，还可以直接在括号的离散化中应用滤波器，而不破坏能量守恒性质。离散哈密顿量 H 定义如下

$$
H = \frac{1}{2}\mathbf{b}^\top \mathbb{M}_1 \mathbf{b} + \frac{1}{2}\mathbf{V}^\top \mathbb{W} \mathbf{V} + \kappa \sum_j q_j \, \hat{n}_h^3(\boldsymbol{\eta}_j) \ln\left(\hat{n}_h^3(\boldsymbol{\eta}_j)/\sqrt{g(\boldsymbol{\eta}_j)}\right), \tag{27}
$$

其中，电子热能通过采用权重的数值求积进行近似q_j。现在，通过代入$\hat{}\ f^3 \to \hat{}\ f_h^3$、$\hat{}\mathbf{B}^1 \to \hat{}\ \mathbf{B}_h^1$，并插入离散泛函导数（19）和（24）-（25），即可对模型的括号进行离散化。对于分裂格式（9）-（12）的相应步骤，我们得到以下离散子括号：

ˆ ˆ子括号 $\{\mathcal{P},\mathcal{Q}\}_{vv}$

这里，我们通过直接代入离散泛函导数，并假设 S 为平滑狄拉克函数，对子步（9）中的子括号（6a）进行离散化。

$$
\begin{aligned}
&\{\hat{\mathcal{P}},\hat{\mathcal{Q}}\}_{vv}\\
&= \int \hat{f}^3 DF^{-\top}\hat{\mathbf{B}}^1\cdot\nabla_v\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{f}^3}\times\nabla_v\frac{\delta\hat{\mathcal{Q}}}{\delta\hat{f}^3}\mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\mathrm{d}\mathbf{v} - \int\frac{1}{\hat{n}^3}\hat{f}^3(\mathbf{v})\hat{f}^3(\mathbf{v}')DF^{-\top}\hat{\mathbf{B}}^1\cdot\left(\nabla_v\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{f}^3}\times\nabla_{v'}\frac{\delta\hat{\mathcal{Q}}}{\delta\hat{f}^3}\right)\mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\mathrm{d}\mathbf{v}\mathrm{d}\mathbf{v}',\\
&\approx \int\sum_k w_k S(\boldsymbol{\eta}-\boldsymbol{\eta}_k)DF^{-\top}\hat{\mathbf{B}}^1_h\cdot\left(\frac{1}{w_k}\frac{\partial P}{\partial\mathbf{v}_k}\right)\times\left(\frac{1}{w_k}\frac{\partial Q}{\partial\mathbf{v}_k}\right)\mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\\
&-\int\frac{1}{\hat{n}^3_h}DF^{-\top}\hat{\mathbf{B}}^1_h\cdot\left(\sum_k S(\boldsymbol{\eta}-\boldsymbol{\eta}_k)\frac{\partial P}{\partial\mathbf{v}_k}\times\sum_k S(\boldsymbol{\eta}-\boldsymbol{\eta}_k)\frac{\partial Q}{\partial\mathbf{v}_k}\right)\mathrm{d}\boldsymbol{\eta},\\
&\approx\sum_j q_j\sum_k w_k S(\boldsymbol{\eta}_j-\boldsymbol{\eta}_k)DF^{-\top}(\boldsymbol{\eta}_j)\hat{\mathbf{B}}^1_h(\boldsymbol{\eta}_j)\cdot\left(\frac{1}{w_k}\frac{\partial P}{\partial\mathbf{v}_k}\right)\times\left(\frac{1}{w_k}\frac{\partial Q}{\partial\mathbf{v}_k}\right)\\
&-\sum_j q_j\frac{1}{\hat{n}^3_h(\boldsymbol{\eta}_j)}DF^{-\top}(\boldsymbol{\eta}_j)\hat{\mathbf{B}}^1_h(\boldsymbol{\eta}_j)\cdot\left(\sum_k S(\boldsymbol{\eta}_j-\boldsymbol{\eta}_k)\frac{\partial P}{\partial\mathbf{v}_k}\times\sum_k S(\boldsymbol{\eta}_j-\boldsymbol{\eta}_k)\frac{\partial Q}{\partial\mathbf{v}_k}\right)\\
&=:\nabla_{\mathbf{V}}P^\top\mathbb{Q}^{vv}\nabla_{\mathbf{V}}Q
\end{aligned}
\tag{28}
$$

其中，$\boldsymbol{\eta}_j$ 和 q_j 是求积点和权重，Q^{vv}（反对称）的大小为 $3K\times 3K$。在数值计算中，不组装矩阵 Q^{vv}，而是通过直接计算式（28）倒数第三行和倒数第二行来实现 $\nabla_{\mathbf{V}}P^\top\mathsf{Q}^{vv}\nabla_{\mathbf{V}}H$ 与 $P=\mathsf{e}_i\cdot\mathsf{v}_k$，其中 e_i 是第 i个单位向量，$i=1,2,3$。在式（28）的计算中，积分通过数值求积（散射-聚集方法 [26]）近似，计算 $\mathsf{Q}^{vv}\mathsf{WV}$ 的代价为 $\mathcal{O}(K)$。

ˆ ˆ子括号 $\{\mathcal{P},\mathcal{Q}\}_{Bv}$

我们在此对用于子步（6b）的子括号（10）进行离散化。该括号中与粒子相关的部分采用具有局部性质的准插值处理，这使得数值格式中产生了稀疏矩阵，下一节将对此详述。

具体而言，通过使用局部投影算子将粒子部分投影到有限元空间 V_1 中，直接代入离散泛函导数，并假设 S 为平滑狄拉克函数，

我们得到

$$
\begin{aligned}
&\{\hat{\mathcal{P}},\hat{\mathcal{Q}}\}_{Bv}\\
&=\int\frac{\hat{f}^3}{n^3}DF^{-\top}\hat{\mathbf{B}}^1\cdot\left[\nabla_v\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{f}^3}\times\left(DF\hat{\nabla}\times\frac{G}{\sqrt{g}}\frac{\delta\hat{\mathcal{Q}}}{\delta\hat{\mathbf{B}}^1}\right)-\nabla_v\frac{\delta\hat{\mathcal{Q}}}{\delta\hat{f}^3}\times\left(DF\hat{\nabla}\times\frac{G}{\sqrt{g}}\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{\mathbf{B}}^1}\right)\right]\mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\mathrm{d}\mathbf{v}\\
&=\int\frac{\hat{f}^3}{n^3}DF^{\top}\nabla_v\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{f}^3}G^{-1}\left(\hat{\nabla}\times\frac{G}{\sqrt{g}}\frac{\delta\hat{\mathcal{Q}}}{\delta\hat{\mathbf{B}}^1}\times G^{-1}\hat{\mathbf{B}}^1\right)\sqrt{g}\mathrm{d}\mathbf{v}\mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\\
&-\int\frac{\hat{f}^3}{n^3}DF^{\top}\nabla_v\frac{\delta\hat{\mathcal{Q}}}{\delta\hat{f}^3}G^{-1}\left(\hat{\nabla}\times\frac{G}{\sqrt{g}}\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{\mathbf{B}}^1}\times G^{-1}\hat{\mathbf{B}}^1\right)\sqrt{g}\mathrm{d}\mathbf{v}\mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\\
&\approx\int\Pi_1\left(DF^{\top}\sum_k w_k\frac{S(\boldsymbol{\eta}-\boldsymbol{\eta}_k)}{\hat{n}_h^3}\nabla_v\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{f}^3}(\boldsymbol{\eta},\mathbf{v}_k)\right)\cdot G^{-1}\left[\left(\mathbb{CM}_1^{-1}\frac{\partial Q}{\partial\mathbf{b}}\right)^{\top}\mathbb{\Lambda}^2\times G^{-1}\hat{\mathbf{B}}_h^1\right]\sqrt{g}\,\mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\\
&-\int\Pi_1\left(DF^{\top}\sum_k w_k\frac{S(\boldsymbol{\eta}-\boldsymbol{\eta}_k)}{\hat{n}_h^3}\nabla_v\frac{\delta\hat{\mathcal{Q}}}{\delta\hat{f}^3}(\boldsymbol{\eta},\mathbf{v}_k)\right)\cdot G^{-1}\left[\left(\mathbb{CM}_1^{-1}\frac{\partial P}{\partial\mathbf{b}}\right)^{\top}\mathbb{\Lambda}^2\times G^{-1}\hat{\mathbf{B}}_h^1\right]\sqrt{g}\,\mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\mathrm{d}\mathbf{v}\\
&\approx\nabla_{\mathbf{V}}P^{\top}\mathbb{L}\mathbb{Q}^{bv}\mathbb{CM}_1^{-1}\nabla_{\mathbf{b}}Q-\nabla_{\mathbf{V}}Q^{\top}\mathbb{L}\mathbb{Q}^{bv}\mathbb{CM}_1^{-1}\nabla_{\mathbf{b}}P,\\
&\approx\nabla_{\mathbf{V}}P^{\top}\mathbb{L}\mathbb{T}^{\top}\mathbb{Q}^{bv}\mathbb{CM}_1^{-1}\nabla_{\mathbf{b}}Q-\nabla_{\mathbf{V}}Q^{\top}\mathbb{L}\mathbb{T}^{\top}\mathbb{Q}^{bv}\mathbb{CM}_1^{-1}\nabla_{\mathbf{b}}P.
\end{aligned}
\tag{29}
$$

其中，我们选择 Π_1 作为准插值局部投影算子，并令 $\mathbb{L}\in$ 实数域$^{3K\times N_1}$，其分量为

$$
\begin{aligned}
\mathbb{L}_{k,i}&=\left(\Pi_1\left(\frac{S(\boldsymbol{\eta}-\boldsymbol{\eta}_k)}{\hat{n}_h^3(\boldsymbol{\eta})}DF^{\top}(\boldsymbol{\eta})\mathbf{e}_1\right)\right)_i,\\
\mathbb{L}_{k+K,i}&=\left(\Pi_1\left(\frac{S(\boldsymbol{\eta}-\boldsymbol{\eta}_k)}{\hat{n}_h^3(\boldsymbol{\eta})}DF^{\top}(\boldsymbol{\eta})\mathbf{e}_2\right)\right)_i,\\
\mathbb{L}_{k+2K,i}&=\left(\Pi_1\left(\frac{S(\boldsymbol{\eta}-\boldsymbol{\eta}_k)}{\hat{n}_h^3(\boldsymbol{\eta})}DF^{\top}(\boldsymbol{\eta})\mathbf{e}_3\right)\right)_i.
\end{aligned}
\tag{30}
$$

其中 $1\le k\le K$，$1\le i\le N_1$，$\mathbf{e}s$ 是 s阶单位向量，属于实数域^3，$s=1,2,3$。我们还在离散括号中加入了用于降噪的滤波器。将使用双线性滤波器或其变体 [37]。$\mathbb{T}$ 表示滤波器矩阵，我们引入了矩阵 $\mathbb{Q}^{bv}\in$实数域$^{N_1\times N_2}$，其元素为

$$
\mathbb{Q}_{ij}^{bv}:=\sum_l q_l\Lambda_i^1(\boldsymbol{\eta}_l)\cdot G^{-1}(\boldsymbol{\eta}_l)\left(\Lambda_j^2(\boldsymbol{\eta}_l)\times G^{-1}(\boldsymbol{\eta}_l)\hat{\mathbf{B}}_h^1(\boldsymbol{\eta}_l)\right)\sqrt{g(\boldsymbol{\eta}_l)},
$$

其中 q_l 和 $\boldsymbol{\eta}_l$ 是求积权重和节点。

ˆ ˆ**子括号** $\{\mathcal{P},\mathcal{Q}\}_{BB}$

For 对应于 (6c) 的子括号 (11)，我们有以下离散化 n.

$$
\begin{aligned}
\{\hat{\mathcal{P}},\hat{\mathcal{Q}}\}_{BB} &= -\int \frac{1}{\hat{n}^3} DF^{-\top}\hat{\mathbf{B}}^1 \cdot \left(DF\hat{\nabla}\times\frac{G}{\sqrt{g}}\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{\mathbf{B}}^1}\right)\times\left(DF\hat{\nabla}\times\frac{G}{\sqrt{g}}\frac{\delta\hat{\mathcal{Q}}}{\delta\hat{\mathbf{B}}^1}\right)\mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\,,\\
&\approx -\int \frac{1}{\hat{n}^3} DF^{-\top}\hat{\mathbf{B}}^1_h \cdot \left(DF(\mathbb{\Lambda}^2)^\top\mathbb{C}\mathbb{M}_1^{-1}\frac{\partial P}{\partial \mathbf{b}}\right)\times\left(DF(\mathbb{\Lambda}^2)^\top\mathbb{C}\mathbb{M}_1^{-1}\frac{\partial Q}{\partial \mathbf{b}}\right)\mathrm{d}\boldsymbol{\eta},\\
&= -\int \frac{1}{\hat{n}^3} G^{-\top}\hat{\mathbf{B}}^1_h \cdot \left((\mathbb{\Lambda}^2)^\top\mathbb{C}\mathbb{M}_1^{-1}\frac{\partial P}{\partial \mathbf{b}}\right)\times\left((\mathbb{\Lambda}^2)^\top\mathbb{C}\mathbb{M}_1^{-1}\frac{\partial Q}{\partial \mathbf{b}}\right)\sqrt{g}\,\mathrm{d}\boldsymbol{\eta},\\
&\approx \left(\frac{\partial P}{\partial \mathbf{b}}\right)^\top \mathbb{M}_1^{-1}\mathbb{C}^\top\mathbb{Q}^{bb}(\mathbf{b})\mathbb{C}\mathbb{M}_1^{-1}\frac{\partial Q}{\partial \mathbf{b}},
\end{aligned}
\tag{31}
$$

其中 $\mathbb{Q}^{bb}_{ij}(\mathbf{b}) = -\sum_l q_l \sqrt{g(\boldsymbol{\eta}_l)}\hat{n}^3_h(\boldsymbol{\eta}_l)G^{-\top}(\boldsymbol{\eta}_l)\,\hat{}\mathbf{B}^1_h(\boldsymbol{\eta}_l)\cdot\left(\Lambda^2_i(\boldsymbol{\eta}_l)\times\Lambda^2_j(\boldsymbol{\eta}_l)\right)$，$\boldsymbol{\eta}_l$ 其中 q_l 是求积点和权重。

注 1. 由 (31) 得到的离散化 $\dot{\mathbf{b}} = \mathbb{M}_1^{-1}\mathbb{C}^\top\mathbb{Q}^{bb}\mathbb{C}\mathbf{b}$，这与通过对方程 (11) 采用弱形式离散化并假设 ˆ $B^1_h \in V_1$ 所得到的格式相同。

ˆ ˆ**子括号** $\{\mathcal{P},\mathcal{Q}\}_{xv}$

ˆ ˆ对于子括号 $\{\mathcal{P},\mathcal{Q}\}_{xv}$ (6d)，假设 S 是狄拉克 δ 函数，可得到以下离散化。

$$
\begin{aligned}
&\{\hat{\mathcal{P}},\hat{\mathcal{Q}}\}_{xv}\\
&= \int \hat{f}^3\left(DF^{-\top}\hat{\nabla}_\eta\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{f}^3}\cdot\nabla_v\frac{\delta\hat{\mathcal{Q}}}{\delta\hat{f}^3} - \nabla_v\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{f}^3}\cdot DF^{-\top}\hat{\nabla}_\eta\frac{\delta\hat{\mathcal{Q}}}{\delta\hat{f}^3}\right)\mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\mathrm{d}\mathbf{v}\,,\\
&= \int\sum_{k=1}^K w_k\delta(\boldsymbol{\eta}-\boldsymbol{\eta}_k)\delta(\mathbf{v}-\mathbf{v}_k)\left(DF^{-\top}\hat{\nabla}_\eta\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{f}^3}\cdot\nabla_v\frac{\delta\hat{\mathcal{Q}}}{\delta\hat{f}^3} - \nabla_v\frac{\delta\hat{\mathcal{P}}}{\delta\hat{f}^3}\cdot DF^{-\top}\hat{\nabla}_\eta\frac{\delta\hat{\mathcal{Q}}}{\delta\hat{f}^3}\right)\mathrm{d}\boldsymbol{\eta}\mathrm{d}\mathbf{v},\\
&= \sum_{k=1}^K\left(\frac{1}{w_k}DF^{-\top}(\boldsymbol{\eta}_k)\frac{\partial P}{\partial\boldsymbol{\eta}_k}\cdot\frac{\partial Q}{\partial\mathbf{v}_k} - \frac{1}{w_k}DF^{-\top}(\boldsymbol{\eta}_k)\frac{\partial Q}{\partial\boldsymbol{\eta}_k}\cdot\frac{\partial P}{\partial\mathbf{v}_k}\right).
\end{aligned}
\tag{32}
$$

4 时间离散化

时间离散化采用第 2 节中引入的泊松分裂，即将括号拆分为若干部分。本节将详细介绍所有子步。δf 方法的推导与 [1] 中的方法类似，即将分布函数分解为平衡态部分与非平衡态部分之和。对于子步 vv，bv，bb，时间上采用中点法则；对于子步 xv，则采用哈密顿量分裂方法和离散梯度方法。对于未知的 a，a^n 和 a^{n+1} 分别表示 a 在第 n 个和第 $n+1$ 个时间步的数值近似。此外，$a^{n+\frac{1}{2}} = \frac{a^n+a^{n+1}}{2}$。

4.1 子步 vv

根据子括号（28），并令 $P=\mathbf{v}_k$，$1\le k\le K$ 和 $Q=H$，可得粒子的以下方程：

$$\dot{\mathbf{V}}=\mathbb{Q}^{vv}\mathbb{W}\mathbf{V}. \tag{33}$$

由（9）可知，每个粒子都通过电流项与所有粒子相关联，因此常用方法的计算成本为 $\mathcal{O}(K^2)$。散射-聚集方法 [26]用于（28），将上述方程（33）右端的求值成本降至 $\mathcal{O}(K)$。时间离散采用中点法则，

$$\frac{\mathbf{V}^{n+1}-\mathbf{V}^n}{\Delta t}=\mathbb{Q}^{vv}\mathbb{W}\frac{\mathbf{V}^n+\mathbf{V}^n}{2}.$$

该方法守恒能量。注意，动量 $\sum_k w_k\mathbf{v}_k$ 也由此子步守恒。事实上，对于 $i=1,\ 2,\ 3$

$$\begin{aligned}
&\left(\sum_k w_k\mathbf{v}_k^{n+1}\right)_i-\left(\sum_k w_k\mathbf{v}_k^{n}\right)_i\\
&=\Delta t\sum_j q_j\sum_k DF^{-\top}(\boldsymbol{\eta}_j)\hat{\mathbf{B}}_h^1(\boldsymbol{\eta}_j)\cdot\mathbf{e}_i\times S(\boldsymbol{\eta}_j-\boldsymbol{\eta}_k)w_k\mathbf{v}_k^{n+\frac12}\\
&-\Delta t\sum_j q_j DF^{-\top}(\boldsymbol{\eta}_j)\hat{\mathbf{B}}_h^1(\boldsymbol{\eta}_j)\cdot\left(\underbrace{\frac{\sum_k w_k S(\boldsymbol{\eta}_j-\boldsymbol{\eta}_k)}{\hat{n}_h^3(\boldsymbol{\eta}_j)}}_{=1}\mathbf{e}_i\times\sum_k S(\boldsymbol{\eta}_j-\boldsymbol{\eta}_k)w_k\mathbf{v}_k^{n+\frac12}\right)=0,
\end{aligned}$$

其中$\mathbf{e}_i$ 是第 i 个单位向量。

4.2 子步 bv

由子括号（29），并令 $P=\mathbf{v}_k$，$\mathbf{b}$ $1\le k\le K$和 $Q=H$，可得

$$\dot{\mathbf{V}}=\mathbb{L}\mathbb{T}^\top\mathbb{Q}^{bv}\mathbb{C}\mathbf{b},\quad \dot{\mathbf{b}}=-\mathbb{M}_1^{-1}\mathbb{C}^\top(\mathbb{Q}^{bv})^\top\mathbb{T}\mathbb{L}^\top\mathbb{W}\mathbf{V}, \tag{34}$$

其中采用中点法则来守恒能量，即，

$$\begin{aligned}
\frac{\mathbf{V}^{n+1}-\mathbf{V}^n}{\Delta t}&=\mathbb{L}\mathbb{T}^\top\mathbb{Q}^{bv}\mathbb{C}\frac{\mathbf{b}^{n+1}+\mathbf{b}^n}{2},\\
\frac{\mathbf{b}^{n+1}-\mathbf{b}^n}{\Delta t}&=-\mathbb{M}_1^{-1}\mathbb{C}^\top(\mathbb{Q}^{bv})^\top\mathbb{T}\mathbb{L}^\top\mathbb{W}\frac{\mathbf{V}^{n+1}+\mathbf{V}^n}{2}.
\end{aligned}$$

将关于 $\mathbf{V}$ 的方程代入关于$\mathbf{b}$的方程后，得到以下格式

$$\begin{aligned}
&\left(\mathbb{M}_1+\frac{\Delta t^2}{4}\mathbb{C}^\top(\mathbb{Q}^{bv})^\top\mathbb{T}\mathbb{L}^\top\mathbb{W}\mathbb{L}\mathbb{T}^\top\mathbb{Q}^{bv}\mathbb{C}\right)\mathbf{b}^{n+1}\\
&=\left(\mathbb{M}_1-\frac{\Delta t^2}{4}\mathbb{C}^\top(\mathbb{Q}^{bv})^\top\mathbb{T}\mathbb{L}^\top\mathbb{W}\mathbb{L}\mathbb{T}^\top\mathbb{Q}^{bv}\mathbb{C}\right)\mathbf{b}^{n}-\Delta t\mathbb{C}^\top(\mathbb{Q}^{bv})^\top\mathbb{T}\mathbb{L}^\top\mathbb{W}\mathbf{V}^n,
\end{aligned}$$

该方程采用不动点迭代法和共轭梯度法求解，并以 $\mathbf{M}_1$ 为预条件子（通过快速傅里叶变换实现）。

注 2. 磁场的无散性质，即 $\nabla\cdot\mathbf{B}=0$，在弱意义下成立。事实上，我们有

$$\mathbb{G}^\top\mathbb{M}_1\mathbf{b}^{n+1}=\mathbb{G}^\top\mathbb{M}_1\mathbf{b}^n-\Delta t\mathbb{G}^\top\mathbb{C}^\top(\mathbb{Q}^{bv})^\top\mathbb{T}\mathbb{L}^\top\mathbb{W}\frac{\mathbf{V}^{n+1}+\mathbf{V}^n}{2}=0,$$

利用了$\mathbb{G}^\top\mathbb{C}^\top=0$这一性质。动量 $\sum_k w_k\mathbf{v}_k$ 在此子步中不守恒。事实上，当 $\nabla\cdot\mathbf{B}=0$在强意义下成立时，动量守恒。

注 3. $\mathbb{L}$ 的稀疏性源于使用了局部准插值投影算子，这使得矩阵$\mathbb{L}^\top\mathbb{W}\mathbb{L}$ 也具有稀疏性。由于粒子的位置在此子步中保持不变，因此只需在不动点迭代开始前组装矩阵 $\mathbb{L}^\top\mathbb{W}\mathbb{L}$ 。

4.3 子步 bb

由子括号 (31)，令 $P=\mathbf{b}$ 和 $Q=H$，可得

$$\dot{\mathbf{b}}=\mathbb{M}_1^{-1}\mathbb{C}^\top\mathbb{Q}^{bb}(\mathbf{b})\mathbb{C}\mathbf{b},\tag{35}$$

由于哈密顿量关于 $\mathbf{b}$是二次的，因此对 (35) 使用中点法则以守恒能量，即

$$\frac{\mathbf{b}^{n+1}-\mathbf{b}^n}{\Delta t}=\mathbb{M}_1^{-1}\mathbb{C}^\top\mathbb{Q}^{bb}(\mathbf{b}^{n+\frac{1}{2}})\mathbb{C}\mathbf{b}^{n+\frac{1}{2}}.$$

在两边乘以 $\mathbf{M}_1$ 后，可得以下等价形式

$$\left(\mathbb{M}_1-\frac{\Delta t}{2}\mathbb{C}^\top\mathbb{Q}^{bb}(\mathbf{b}^{n+\frac{1}{2}})\mathbb{C}\right)\mathbf{b}^{n+1}=\mathbb{M}_1\mathbf{b}^n+\frac{\Delta t}{2}\mathbb{C}^\top\mathbb{Q}^{bb}(\mathbf{b}^{n+\frac{1}{2}})\mathbb{C}\mathbf{b}^n.$$

固定点迭代格式为（从第 i 次迭代到第（$i+1$）次迭代）：

$$\left(\mathbb{M}_1-\frac{\Delta t}{2}\mathbb{C}^\top\mathbb{Q}^{bb}(\mathbf{b}_i^{n+\frac{1}{2}})\mathbb{C}\right)\mathbf{b}_{i+1}^{n+1}=\mathbb{M}_1\mathbf{b}^n+\frac{\Delta t}{2}\mathbb{C}^\top\mathbb{Q}^{bb}(\mathbf{b}_i^{n+\frac{1}{2}})\mathbb{C}\mathbf{b}^n,\ \mathbf{b}_i^{n+\frac{1}{2}}=\frac{\mathbf{b}^n+\mathbf{b}_i^n}{2}.$$

在每次迭代中，使用 GMRES 方法求解上述线性系统，并以质量矩阵（周期性边界条件和笛卡尔坐标）的不完全 LU 分解或逆快速傅里叶变换作为预条件子。由于$\mathbf{b}$ 在每次固定点迭代中都会变化，因此组装矩阵（每次迭代）$\mathbb{Q}^{bb}$ 的代价很高；相反，可以通过进行矩阵无关的矩阵-向量乘积来避免这一过程。类似于注释2，我们可以证明 $\nabla\cdot\mathbf{B}=0$弱成立，即$\mathbb{G}^\top\mathbb{M}_1\mathbf{b}^{n+1}=\mathbb{G}^\top\mathbb{M}_1\mathbf{b}^n$。

4.4 子步 xv

根据子括号（32），通过设定 $P=\boldsymbol{\eta}_k$，$\mathbf{v}_k$，$1\le k\le K$ 以及 $Q=H$，可得

$$\begin{pmatrix}\dot{\mathbf{H}}\\ \dot{\mathbf{V}}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mathbf{0} & \bar{DF}^{-1}(\mathbf{H})\mathbb{W}^{-1}\\ -\mathbb{W}^{-1}\bar{DF}^{-\top}(\mathbf{H}) & \mathbf{0}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\nabla_{\mathbf{H}}H\\ \nabla_{\mathbf{V}}H=\mathbb{W}\mathbf{V}\end{pmatrix}.\tag{36}$$

对应的哈密顿量为

$$H=\frac{1}{2}\mathbf{V}^\top\mathbb{W}\mathbf{V}+\frac{1}{2}\mathbf{b}^\top\mathbb{M}_1\mathbf{b}+\kappa\sum_j\sum_{k=1}^K q_jw_kS(\boldsymbol{\eta}_j-\boldsymbol{\eta}_k)\ln\left(\sum_{k=1}^K\frac{w_k}{\sqrt{g(\boldsymbol{\eta}_j)}}S(\boldsymbol{\eta}_j-\boldsymbol{\eta}_k)\right).$$

笛卡尔坐标情形 系统（36）是一个哈密顿系统，我们采用哈密顿量分裂方法，得到以下两个子步

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{V}} &= -\mathbb{W}^{-1}\bar{DF}^{-\top}\nabla_{\mathbf{H}}H,\\ \dot{\mathbf{H}} &= \bar{DF}^{-1}\mathbf{V},\end{aligned} \tag{37}$$

这两者都可以显式求解。尽管哈密顿分裂会使整个格式无法精确守恒能量，但我们将在数值实验一节看到，能量和动量在长时间范围内仍能以很高的精度保持守恒。此外，由于该方法是显式的，因此它是笛卡尔坐标下大规模模拟的重要选择。

曲线坐标情形 对于这种情形，子步 $\dot{\mathbf{H}} = \bar{DF}^{-1}(\mathbf{H})\mathbf{V}$ 所对应的哈密顿分裂方法无法显式求解。可以使用以下中点离散梯度方法 [38]来精确守恒能量。

$$\begin{aligned}\frac{\mathbf{H}^{n+1}-\mathbf{H}^{n}}{\Delta t} &= \mathbb{W}^{-1}\bar{DF}^{-1}(\mathbf{H}^{n+\frac{1}{2}})\bar{\nabla}_{\mathbf{V}}H,\\ \frac{\mathbf{V}^{n+1}-\mathbf{V}^{n}}{\Delta t} &= -\mathbb{W}^{-1}\bar{DF}^{-\top}(\mathbf{H}^{n+\frac{1}{2}})\bar{\nabla}_{\mathbf{H}}H,\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}\bar{\nabla}_{\mathbf{H}}H &= \nabla_{\mathbf{H}}H\left(\frac{\mathbf{H}^{n}+\mathbf{H}^{n+1}}{2}\right)+f_{disg}\left(\mathbf{H}^{n+1}-\mathbf{H}^{n}\right),\\ \bar{\nabla}_{\mathbf{V}}H &= \nabla_{\mathbf{V}}H\left(\frac{\mathbf{V}^{n}+\mathbf{V}^{n+1}}{2}\right)+f_{disg}\left(\mathbf{V}^{n+1}-\mathbf{V}^{n}\right).\end{aligned}$$

其中

$$f_{disg}=\frac{H(\mathbf{H}^{n+1},\mathbf{V}^{n+1})-H(\mathbf{H}^{n},\mathbf{V}^{n})-\nabla H(\frac{\mathbf{H}^{n}+\mathbf{H}^{n+1}}{2},\frac{\mathbf{V}^{n}+\mathbf{V}^{n+1}}{2})\cdot((\mathbf{H}^{n+1}-\mathbf{H}^{n})^{\top},(\mathbf{V}^{n+1}-\mathbf{V}^{n})^{\top})^{\top}}{|\mathbf{H}^{n+1}-\mathbf{H}^{n}|^{2}+|\mathbf{V}^{n+1}-\mathbf{V}^{n}|^{2}}.$$

注 4. 在上述离散梯度方法中，各方向上的形函数次数至少应为 *2*，这可保证 $\nabla_{\mathbf{H}}H$ 是关于 $\mathbf{H}$的连续函数，对于保证离散梯度方法中迭代的收敛性至关重要。

总之，为得到完整的数值格式，我们依次运行上述四种积分器，即:

$$\Phi_{\Delta t} := \Phi^{xv,ha}_{\Delta t}\circ\Phi^{vv}_{\Delta t}\circ\Phi^{bb}_{\Delta t}\circ\Phi^{bv}_{\Delta t},, \tag{38}$$

$$\Phi_{\Delta t} := \Phi^{xv,dis}_{\Delta t}\circ\Phi^{vv}_{\Delta t}\circ\Phi^{bb}_{\Delta t}\circ\Phi^{bv}_{\Delta t}, \tag{39}$$

它们是一阶 Lie-Trotter分裂方法 [36],，其中 $\Phi^{vv}_{\Delta t}$，$\Phi^{bv}_{\Delta t}$，$\Phi^{bb}_{\Delta t}$ 分别是子步 vv，bv，bb的解映射；$\Phi^{xv,ha}_{\Delta t}$和 $\Phi^{xv,dis}_{\Delta t}$ 分别是使用哈密顿分裂方法和离散梯度方法求得的子步 xv 的解映射。更高阶的格式可以通过复合方法 [16]获得。

5 比较

5.1 守恒性质

这里总结上述数值方法所守恒的所有性质（38）-（39）。两种格式都能保持电子密度的正性，它可表示为有限粒子数之和。

关于能量守恒，对于子步-（36）采用离散梯度方法时，可由（39）得到；在笛卡尔坐标情形下，对于子步-（36）采用显式哈密顿分裂方法时，我们将在数值结果中看到，（38）也能以极高精度保持能量守恒。两种格式（38）和（39）都守恒 $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$（弱守恒）。准中性关系已内置于模型方程中。虽然只有子步（35）和（33）守恒动量 $\sum_k w_k \mathbf{v}_k$，但数值结果始终显示动量守恒具有很高的精度。

5.2 性能

上述两种表述形式的方法均在 Python 软件包 STRUPHY 中实现 [1]，并采用 OpenMP/MPI 混合并行化。粒子相关部分使用 MPI 和 OpenMP 并行化，而子步中的线性系统目前在单个节点上通过迭代方法求解（最多使用 72 个线程）。

这里主要考察粒子相关部分的性能，如 [1]所示。通过在笛卡尔坐标下使用相同参数运行，对上述构造的两种方法进行性能比较。粒子相关子步 xv、 vv、 bv 所用时间随线程数增加而表现出良好的扩展性。对于子步 xv，离散梯度方法 $\Phi^{xv,\ dis}_{\Delta t}$ 在子步 xv 中通常比显式哈密顿分裂 $\Phi^{xv,\ ha}_{\Delta t}$ 计算开销更大。此外，使用 MPI 在多个节点上求解子步 bb 和 bv 中的线性系统，已在推进中，以进一步提高效率。

线程	子步 xv (39) 迭代次数	子步 xv (38)	子步 vv 迭代次数	子步 bv
9	4.93	2.46	2.94	9.60
18	2.43	1.23	1.46	4.95
36	1.29	0.61	1.01	3.04
72	0.62	0.31	0.38	1.70

表 1：一个时间步，粒子数为 60000，网格单元数为 $[200, 3, 3]$。

6 数值实验

本节通过一些数值测试验证实现：有限网格不稳定性、朗道阻尼、R波、伯恩斯坦波、镜像不稳定性和参量不稳定性。数值模拟中使用了以下两种从逻辑域到物理域的映射（笛卡尔、Colella）$\mathbf{F}$

$$
\begin{aligned}
&\text{Cartesian}: \quad \mathbf{F}: \hat{\Omega} \to \Omega, \quad \boldsymbol{\eta} \to \begin{pmatrix} L_x \eta_1 \\ L_y \eta_2 \\ L_z \eta_3 \end{pmatrix} = \mathbf{x}, \\
&\text{Colella}: \quad \mathbf{F}: \hat{\Omega} \to \Omega, \quad \boldsymbol{\eta} \to \begin{pmatrix} L_x(\eta_1 + \alpha \sin(2\pi\eta_1)\sin(2\pi\eta_2)) \\ L_y(\eta_2 + \alpha \sin(2\pi\eta_2)\sin(2\pi\eta_3)) \\ L_z \eta_3 \end{pmatrix} = \mathbf{x}.
\end{aligned} \tag{40}
$$

我们检验上述守恒性质。此外，还对一些数值测试的色散关系进行数值检验。迭代容差设为 10^{-12}。由于该模型的一些项中密度出现在分母上，因此密度很低时会出现数值不稳定性。我们按照 [8]中的策略，将相关项设为

当密度为 0 或低于最小阈值时取零；在以下模拟中，该阈值设为 10^{-3}。如果没有特别说明，形函数 (21) 的支撑参数 h_1、h_2、h_3 均取各空间方向上的网格单元尺寸。下文分别将格式 (38)-(39) 称为哈密顿分裂方法和离散梯度方法。采用周期性边界条件。

6.1 有限网格不稳定性

当 [30], 我们检查离散化格式（38）-（39）在有限网格不稳定性方面的数值行为时，初始条件（系统的平衡态）为

$$\mathbf{B}=\mathbf{0},\ f=\frac{1}{\pi^{\frac{3}{2}}v_T^{\frac{3}{2}}}e^{-\frac{|v_x|^2}{v_T^2}-\frac{|v_y|^2}{v_T^2}-\frac{|v_z-0.1|^2}{v_T^2}},\ \kappa=1,\ v_T=0.1.$$

本数值实验采用笛卡尔映射。计算参数为：网格数 $[4,4,32]$, 区域参数 $[L_x,L_y,L_z]=[1,1,5\pi]$, B样条次数 $[1,1,3]$, 时间步长 $\Delta t=0.005$，形函数次数 $[2,2,2]$, 每个单元中的求积点数 $[2,2,4]$,以及粒子总数 2×10^5。正如 [39], 所指出的，通常的 PIC方法存在有限网格不稳定性，即离子温度增长，这是由沉积与插值过程所引入的误差导致的。我们使用上述初始条件以及数值方法（38）-（39）进行模拟，结果如图1所示。可以看到，两种格式都能在数值上捕捉到平衡态。由于在数值模拟过程中我们实际上只求解子步 xv，因此 B $=0$。由于（38）中子步 xv 所采用的哈密顿分裂方法（斯特朗分裂）是一种辛方法，所以它具有优良的长期数值行为，尽管能量并未严格守恒（相对误差约为 10^{-8}），而且即使经过100万次时间步，离子温度几乎没有变化（未显示）。离散梯度方法（39）严格保持能量守恒，并且在 $t\in[0,100]$期间，离子温度的时间演化与哈密顿分裂方法给出的结果几乎相同。需要注意的是，（38）-（39）并不能严格保持动量守恒，但其误差处于 10^{-4}的水平，并且不会随时间出现明显且快速的增长。从图1的其他图中还可以看到，在 $t=100$ 时由这两种格式得到的分布函数 x_3-v_3 等高线图中，粒子仍然接近一个非常薄的麦克斯韦分布，这得益于能量的良好守恒。

6.2 离子朗道阻尼

接下来，我们通过无背景磁场的准一维模拟来模拟离子朗道阻尼。初始条件如下：

$$\mathbf{B}=\mathbf{0},\ f=\frac{1}{\pi^{\frac{3}{2}}v_T^{\frac{3}{2}}}(1+0.5\cos(0.4z))e^{-\frac{|v_x|^2}{v_T^2}-\frac{|v_y|^2}{v_T^2}-\frac{|v_z|^2}{v_T^2}},\ \kappa=6.25.$$

本次数值实验采用笛卡尔映射。计算参数为：网格数 $[3,3,50]$, 区域参数 $[L_x,L_y,L_z]=[1,1,5\pi]$, 时间步长 $\Delta t=0.005$，最终计算时间 5×10^3, $v_T=1.4142$，粒子总数 5×10^4，形函数次数$[2,2,2]$, 每个单元中的求积点 $[2,2,2]$, 以及式（21）中的支撑参数 $h_i=\Delta\eta_i, i=$1, 2, 3。数值结果见图 2。两种格式（38）-（39）的结果相似，且$\int|\delta n|^2\sqrt{g}\mathrm{d}\boldsymbol{\eta}$ 起初呈指数衰减，随后随时间呈指数增长，并在 $t=$200后饱和于一个较小值（10^{-2}）。格式（38）的相对能量误差约为 10^{-6}，且随时间没有明显增长；格式（39）则将能量守恒在 10^{-15} 的水平。

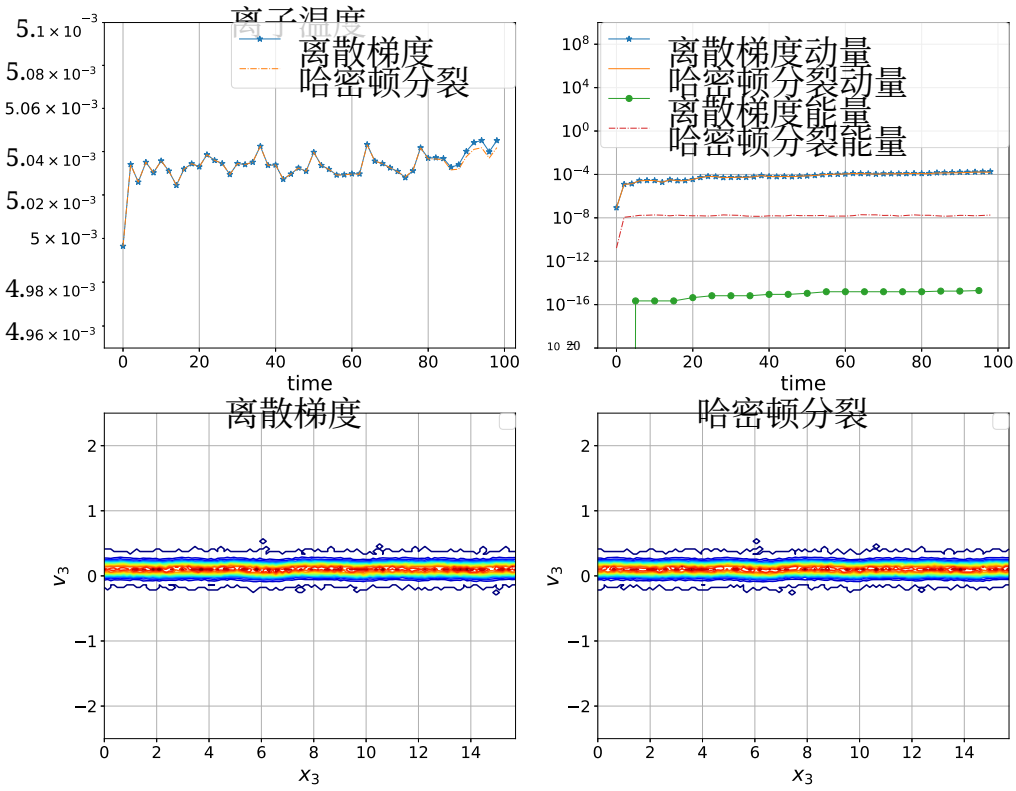


图 1：**有限网格不稳定性**。离子温度、动量误差（第三个分量）以及 $x_3 - v_3$ 格式的等高线图（38）–（39）在 $t = 100$。

两种格式均能以较高精度守恒动量，误差约为10^{-3}。

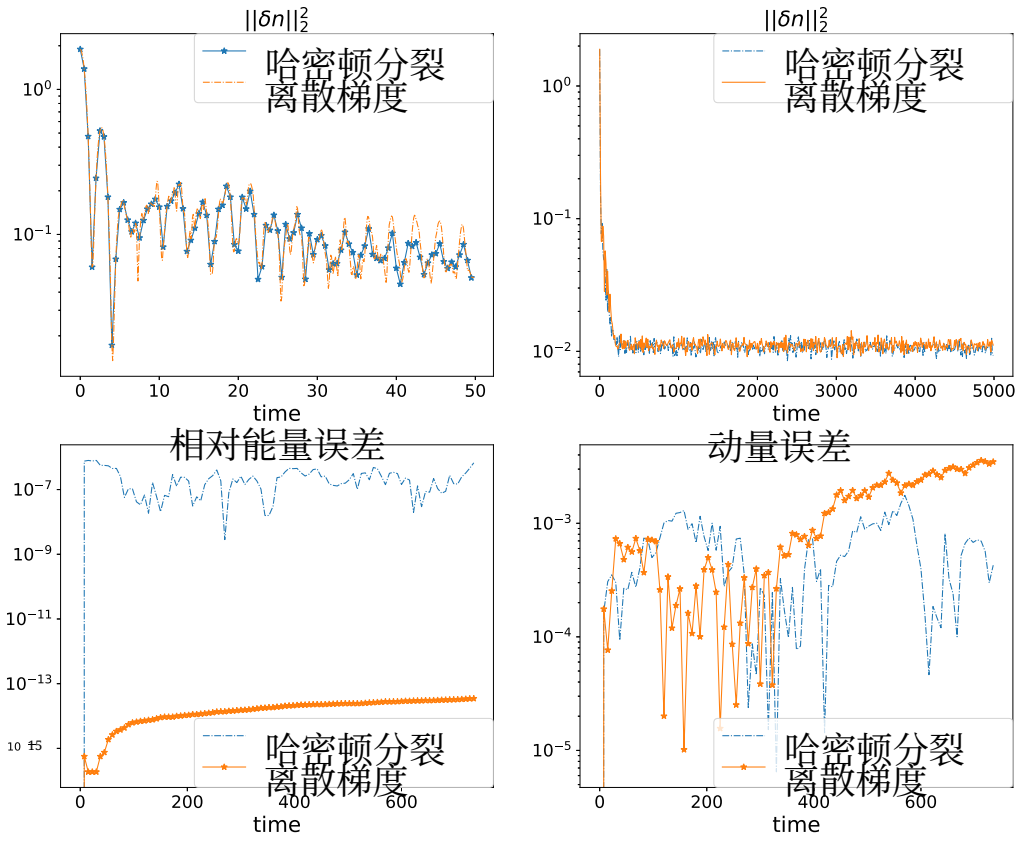


图2：**朗道阻尼** $\int |\delta n|^2 \sqrt{g} \mathrm{d}\boldsymbol{\eta}$、 $\delta n = n - 1$的时间演化、相对能量误差以及动量误差（第三个分量）。

6.3 平行电磁波：R模

本部分通过准一维模拟（主要沿一个方向，横向上对2个单元取平均）检验平行传播的波——R波。背景磁场沿 z 方向。除宏粒子数量减少所导致的PIC方法噪声外，我们不对系统施加任何扰动。具体而言，我们使用的初始条件如下：

$$\mathbf{B} = (0, 0, 1),\ \kappa = 1,\ f = \frac{1}{\pi^{\frac{3}{2}}} e^{-|v_x|^2 - |v_y|^2 - |v_z|^2}.$$

本次数值实验采用笛卡尔映射。计算参数为：网格数 $[3, 3, 128]$, 区域参数 $[L_x, L_y, L_z] = [1, 1, 64]$, 时间步长 $\Delta t = 0.005$，最终计算时间为 **40**，粒子总数 5×10^5，形函数次数 $[2, 2, 2]$, 以及

每个单元中的求积点数 $[2,2,4]$。本次模拟采用全f方法。R波色散关系的数值结果见图3。黑色虚线表示由 Python 软件包 HYDRO 给出的解析色散关系，该软件包由[2], 提出；当 $k \ll 1$、$\omega \propto k$时，以及当 $k \gg 1$、 $\omega \propto k^2$时。可以看到，当基函数次数为 $[1,1,4]$,时，即使波数 k 大于奈奎斯特频率 $\frac{\pi}{2\Delta z}$，数值结果仍与解析结果吻合良好。然而，当 B 样条次数较低时，例如 $p=[1,1,1]$，当 k 大于奈奎斯特频率时，数值色散关系中的误差会更加明显。格式 (38)–(39) 的守恒性质结果见图4。可以看到，格式 (38)–(39) 的相对能量误差分别处于 10^{-8} 和 10^{-12} 的量级。图中还展示了动量的第三分量误差；可以看到，误差没有线性增长或快速增长，两个格式 (38)–(39) 的动量误差均约为 10^{-5}。正如我们所证明的， $\nabla \cdot \mathrm{B} = 0$ 在弱意义下成立，数值误差处于 10^{-14} 的量级。

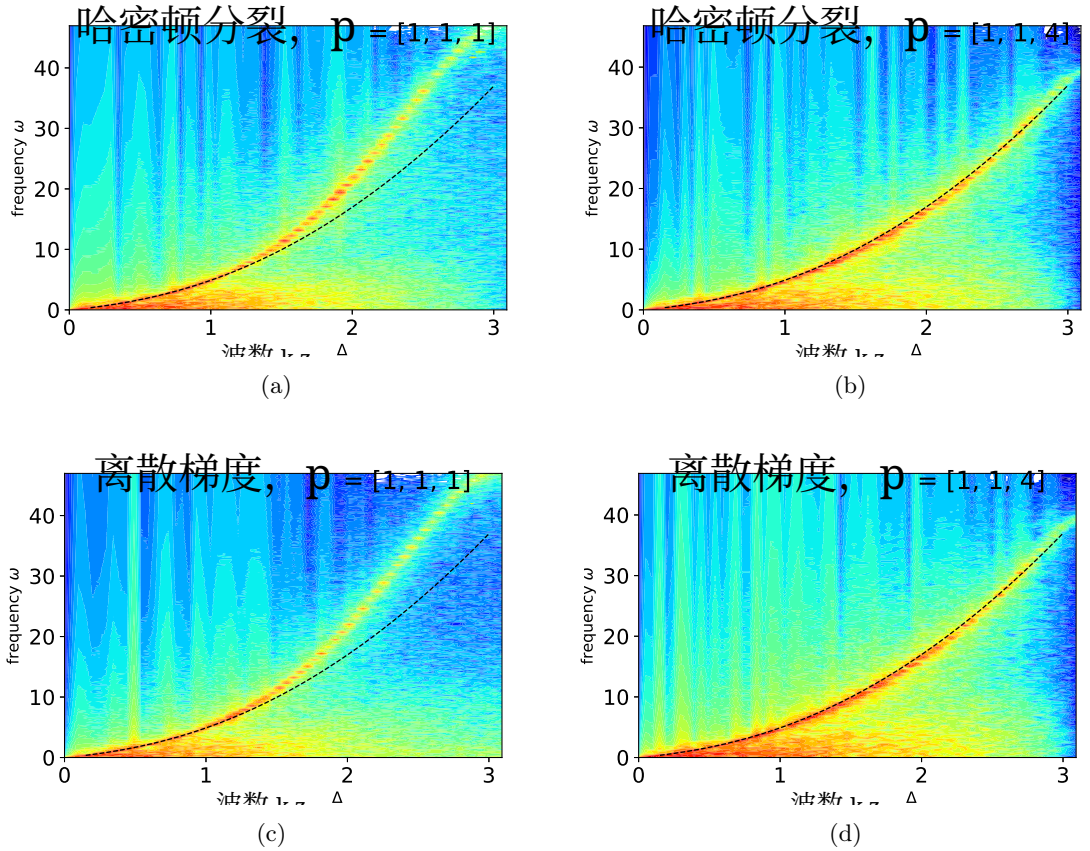


图3： **R模** （a）格式（38）的数值色散，其中 $p=[1,1,1]$； （b）格式（38）的数值色散，其中 $p=[1,1,4]$； （c）格式（39）的数值色散，其中 $p=[1,1,1]$； （d）格式（39）的数值色散，其中 $p=[1,1,4]$。

6.4 垂直波：离子伯恩斯坦波

接下来，我们通过一维模拟来检验一种几乎垂直于磁场的波——伯恩斯坦波；这种波只存在于有限温度等离子体中。为了激发这些

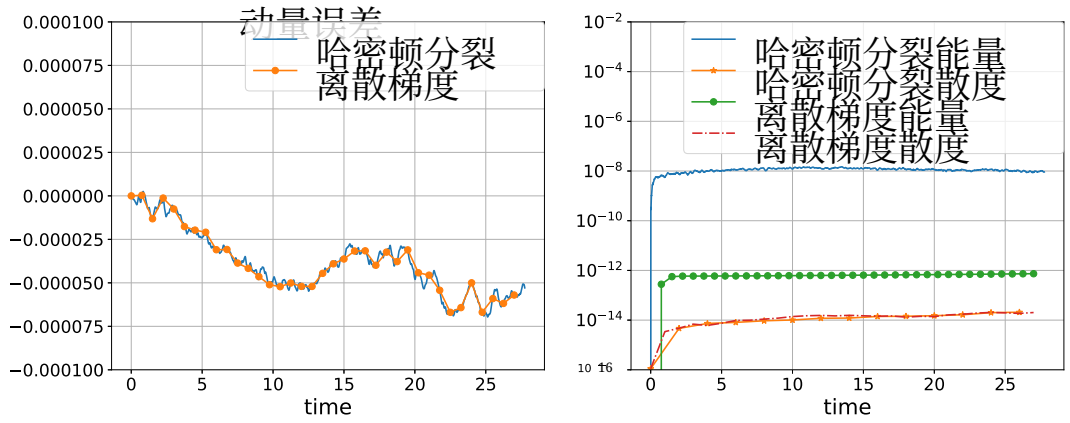


图 4：**R模**：动量误差（第三分量）、相对能量误差以及**B** 的弱散度随时间的演化，采用的格式为（38）-（39），其中 $p = [1, 1, 4]$。

波，我们沿 x 方向初始化一个准一维热等离子体。除 PIC方法带来的噪声外，不添加任何初始扰动。具体的初始条件如下：

$$\mathbf{B} = (0, 0, 1),\ f = \frac{1}{\pi^{\frac{3}{2}} v_T^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{|v_x|^2}{v_T^2} - \frac{|v_y|^2}{v_T^2} - \frac{|v_z|^2}{v_T^2}},\ \kappa = 0.09.$$

本次数值实验采用笛卡尔映射。计算参数如下：网格数 $[200, 3, 3]$, 区域参数 $[L_x, L_y, L_z] = [50, 1, 1]$，时间步长 $\Delta t = 0.01$, v_T =0.2121，最终计算时间为 80。粒子数 6×10^4，多项式次数 $[4, 1, 1]$,形函数次数 $[2, 2, 2]$。这两次模拟均采用全f方法。相对能量误差、动量误差以及伯恩斯坦波的色散关系随时间的演化见图 5，其中红色虚线是通过HYDRO代码 [2]获得的伯恩斯坦波解析色散关系。可以看出，两种方法（38）-（39）在数值上都能给出相当好的色散关系，且两种格式的动量误差几乎相同。（38）的相对能量误差处于 10^{-8} 的水平，（39）的相对能量误差处于 10^{-13} 的水平。注意，图 5 中频率约为 5 时，色散关系存在一些误差，这是由于形函数的平滑效应，尤其是在形函数次数较高时所致。但正如 [28]，所指出的，可以通过增加网格点（提高空间分辨率）来改善这一现象。$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ （弱误差）的数值误差处于 10^{-14} 的水平。

6.5 镜像不稳定性

此前的数值测试均为准一维测试，接下来我们通过准二维测试——镜像不稳定性来验证代码。初始条件为

$$\mathbf{B} = (1, 0, 0),\ f = \frac{1}{\pi^{\frac{3}{2}} (v_{T_x} v_{T_y} v_{T_z})^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{|v_x|^2}{v_{Tx}^2} - \frac{|v_y|^2}{v_{Ty}^2} - \frac{|v_z|^2}{v_{Tz}^2}},\ \kappa = 1.$$

笛卡尔映射和 Colella 映射（采用 $\alpha = 0.05$ （40））进行本次数值实验。采用格式（38），并使用显式哈密顿分裂（37）（斯特朗分裂）

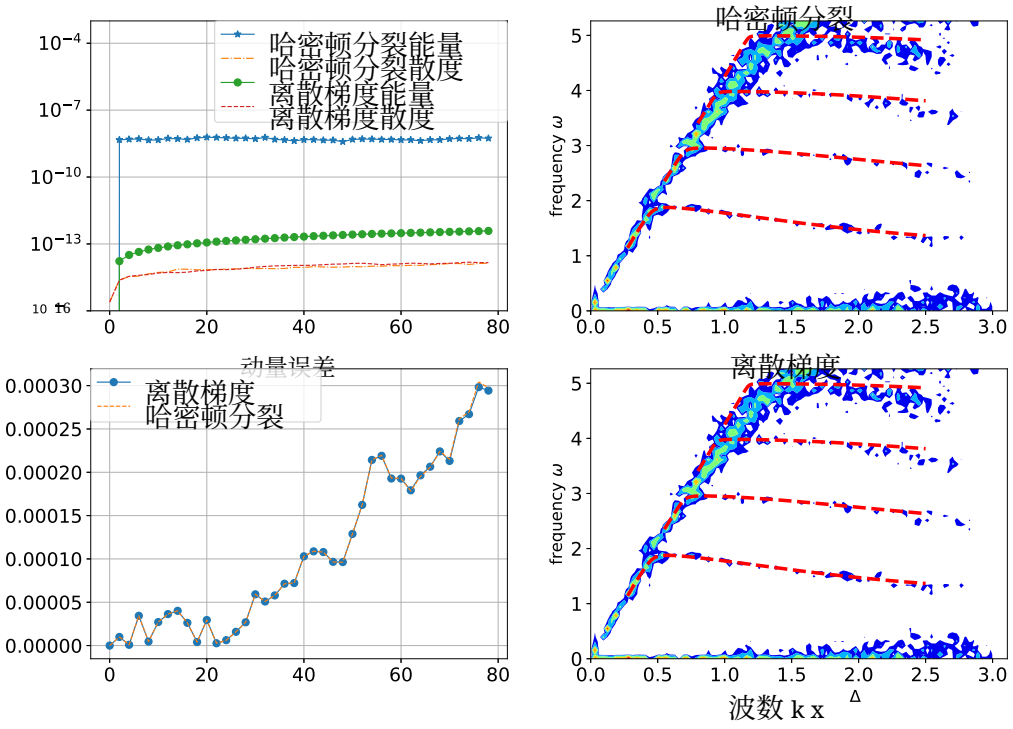


图 5: **伯恩斯坦波一维**。 伯恩斯坦波格式的相对能量误差、磁场弱散度、动量误差和色散关系的时间演化（38）–（39）。

笛卡尔映射情形，以及用于 Colella 映射情形的格式（39）和离散梯度方法。计算参数如下：网格数 $[20, 20, 2]$, 区域参数$[L_x, L_y, L_z] = [20, 20, 2]$, $k_x = \frac{2\pi}{L_x}$, $k_y = \frac{2\pi}{L_y}$, 时间步长 $\Delta t = 0.01$, $v_{Ty} = v_{Tz} = \sqrt{15}$,$v_{Tx} = \sqrt{6}$,粒子总数 2.5×10^5。我们分别对笛卡尔映射情形和 Colella 映射情形进行模拟。图 6 展示了两种格式的数值结果。可以看到，对于笛卡尔坐标情形，傅里叶模 $\sqrt{|\hat{B}_x(k_x, k_y)|^2 + \hat{B}_y(k_x, k_y)|^2}$, $k_x = \frac{2\pi}{L_x}, k_y = \frac{2\pi}{L_y}$ 给出了准确的数值不稳定增长率（$\gamma = 0.14$ 由 HYDRO [2]获得）；而在 Colella 映射情形中，增长率也没有太大变化。笛卡尔映射情形下的相对能量误差为 10^{-7}，而 Colella 映射情形下的能量守恒误差处于迭代容差水平。格式（39）的动量误差在 $t = 25$之后有所增长。$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$（弱误差）的数值误差处于 10^{-14}的水平。

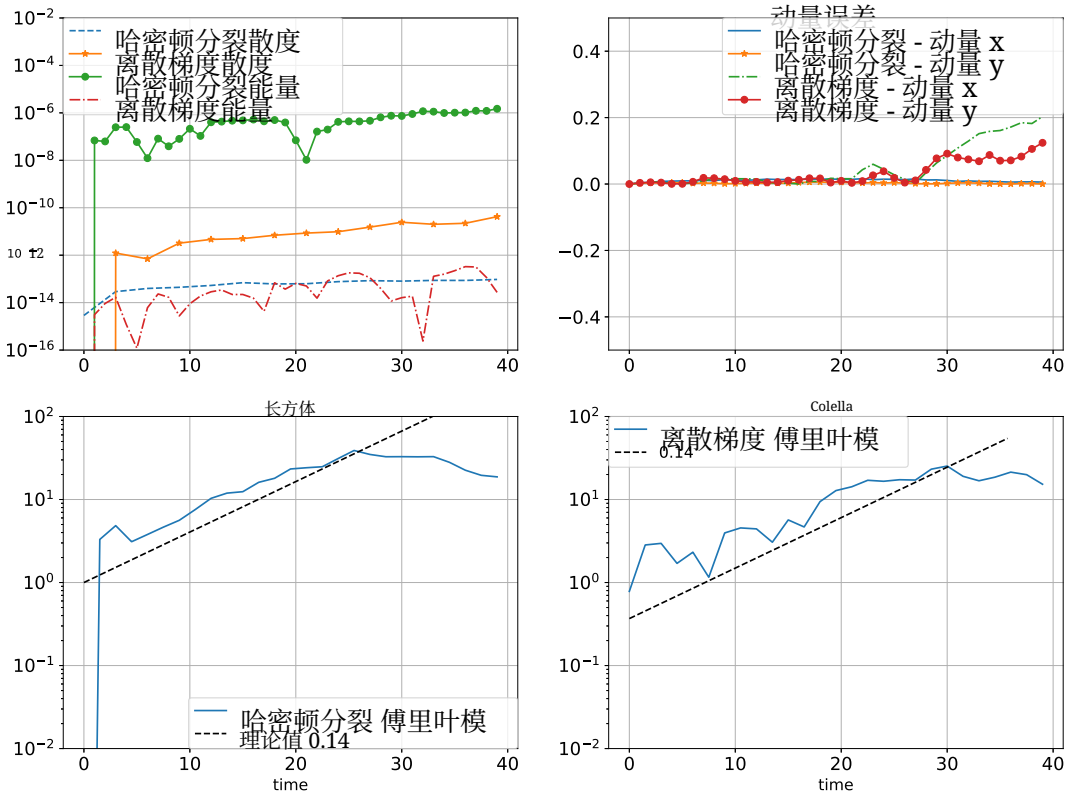


图 6：**二维镜像不稳定性**。相对能量误差、磁场散度、动量误差（第一和第二分量）以及傅里叶模的时间演化
$\sqrt{|\hat{B}_x(k_x, k_y)|^2 + \hat{B}_y(k_x, k_y)|^2}$, $k_x = \frac{2\pi}{L_x}, k_y = \frac{2\pi}{L_y}$.

6.6 参量不稳定性

最后，我们对参量不稳定性进行模拟， [27] 以比较并验证格式（38）-（39）。这种不稳定性会产生一个向前传播的声波和一个向后传播的阿尔芬波，其波数小于泵浦波的波数。我们采用以下初始条件和数值参数进行模拟：

$$\mathbf{B} = (1,0,0) + \delta\mathbf{b},\ \delta\mathbf{b} = (0, -\sin(0.196x), \cos(0.196x)),\ f = \frac{1}{\pi^{\frac{3}{2}} v_T^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{|\mathbf{v}-\delta\mathbf{u}|^2}{v_T^2}},\ \kappa = 1,$$

其中 $v_T = 0.5$。区域参数为 $[L_x, L_y, L_z] = [128, 1, 1]$，时间步长为 $\Delta t = 0.01$，粒子总数为 10^6，每个单元中的求积点数为 $[4, 2, 2]$，基多项式的次数为 $[3, 1, 1]$，网格和形函数次数分别为 $[500, 3, 3]$, $[2, 2, 2]$,，考虑笛卡尔映射情形，并采用全 f 方法。如 [27]所示， $\delta\mathbf{u}$ 按以下方式确定：

$$\delta\mathbf{u} = -(\omega_0/k_0)\delta\mathbf{b}, \quad k_0^2 = \omega_0^2/(1-\omega_0), \quad k_0 = 0.196.$$

通过求解 ω_0 由 $k_0^2 = \omega_0^2/(1-\omega_0)$，我们得到 $\omega_0 = 0.17773094298487538$（左旋圆偏振波）。图 7展示了离子（平行、垂直）温度随时间的演化。可以看到，模拟过程中发生了不稳定性，两种格式的温度变化与 [27]中的结果接近。图8展示了动量误差和相对能量误差。格式（39）的相对能量误差约为 10^{-10}，格式（38）的相对能量误差约为 10^{-8}。两种格式（38）-（39）的动量误差约为 10^{-4}。注意，对于格式（39），形函数次数至少为$[2, 2, 2]$，以保证子步 xv 的离散梯度方法收敛。与之前的数值测试一样， $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ 的弱误差处于迭代容差水平。

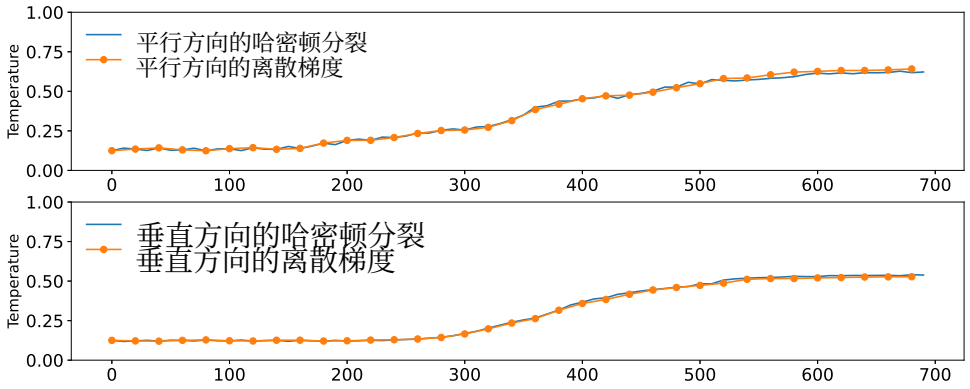


图 7：格式（38）-（39）给出的离子平行和垂直温度的时间演化。

7 结论

本文提出了两种基于括号结构、适用于含动理学离子和无质量电子的混合模型的几何方法。本文研究并比较了能量守恒性质、磁场无散条件、密度正性以及准中性关系

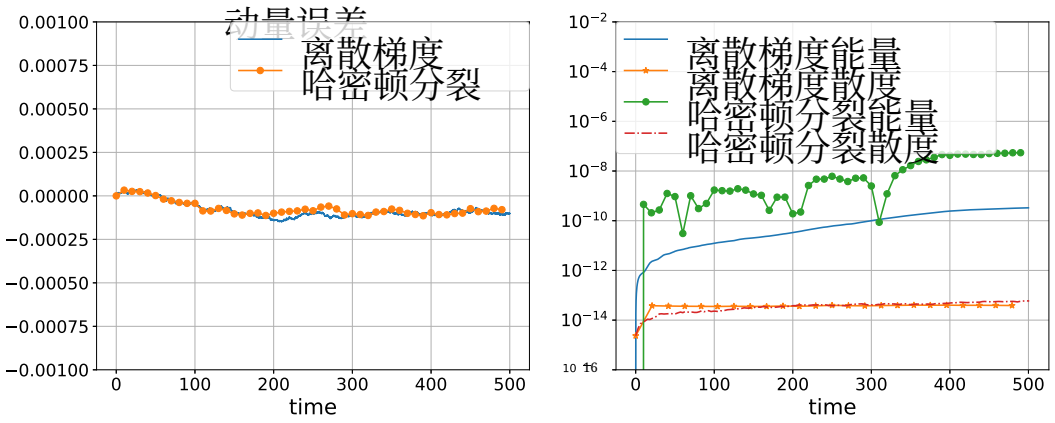


图8：格式（38）至（39）给出的动量误差（第一分量）和相对能量误差的时间演化。

，并对这两种方法（38）—（39）进行了研究与比较。通过大量数值测试验证并比较了这些格式。考虑更符合实际的边界条件以及 [35], 构建动量守恒格式，并将我们的数值方法应用于更复杂的物理模拟，是未来的研究方向。

致谢

本工作的模拟在马克斯·普朗克计算与数据设施（MPCDF）上完成。感谢与 Carlos Gonzalez、Dimitrios Kaltsas、Omar Maj、Philip Morrison 和 Anna Tenerani 的讨论及他们提供的意见。

参考文献

[1] Holderied F、Possanner S、Wang X. 基于保结构有限元和粒子网格的磁流体-动力学混合代码. 计算物理学杂志, 2021, 433: 110143.[2] Told D、Cookmeyer J、Astfalk P、Jenko F. 等离子体物理学中离子动理学-电子流体混合模型的线性色散关系. 新物理学杂志, 2016, 18(7): 075001.[3] Birdsall C K、Langdon A B. 通过计算机模拟研究等离子体物理学. CRC出版社, 2018.[4] Hockney R W、Eastwood J W. 使用粒子[M]进行计算机模拟. CRC出版社, 2021.[5] Mangeney A、Califano F、Cavazzoni C、Trávníček P. 一种用于积分 Vlasov–Maxwell 方程组的数值格式. 计算物理学杂志, 2002, 179(2): 495-538.[6] Sonnendrücker, E、Roche, J、Bertrand, P、Ghizzo, A. 用于 Vlasov 方程数值求解的半拉格朗日方法. 计算物理学杂志, 1999, 149(2): 201-220.

[7] Arnold, D.、Falk, R.、Winther, R. 有限元外微积分：从霍奇理论到数值稳定性. 美国数学学会通报, 2010, 47(2): 281-354.[8] Matthews, Alan P. 用于二维多组分等离子体模拟的电流推进方法与循环蛙跳法. 计算物理学杂志, 1994, 112(1): 102-116.[9] Valentini F、Trávníček P、Califano F、Hellinger P、Mangeney A. 一种基于电流推进方法的混合 Vlasov 模型，用于模拟无碰撞磁化等离子体. 计算物理学杂志, 2007, 225(1): 753-770.[10] Franci L、Hellinger P、Guarrasi M 等. 使用混合代码 CAMELIA 进行的太阳风湍流三维模拟. 《物理学杂志：会议系列》. IOP出版社, 2018, 1031(1): 012002.[11] Kunz M W、Stone J M、Bai X N. Pegasus：一种用于天体物理等离子体动力学的新型混合动理学粒子网格代码. 计算物理学杂志, 2014, 259: 154-174.[12] Amano T、Higashimori K、Shirakawa K. 一种用于处理无碰撞等离子体混合模拟中低密度区域的稳健方法. 计算物理学杂志, 2014, 275: 197-212.[13] Muñoz P A、Jain N、Kilian P、Büchner J. 一种新型混合代码（CHIEF），实现了未经近似的惯性电子流体方程. 计算物理学通讯, 2018, 224: 245-264.[14] Tronci C. 混合等离子体模型的哈密顿方法.《物理学杂志 A》, 2010, 43(37).[15] Feng K、Qin M. 哈密顿系统的辛几何算法. 柏林：Springer, 2010.[16] Hairer E、Lubich C、Wanner G. 几何数值积分：常微分方程的保结构算法，第31卷，Springer Science & Business Media, 2006.[17] Xiao J、Qin H、Liu J、He Y、Zhang R、Sun Y. 用于 Vlasov–Maxwell 系统的显式高阶非正则辛粒子网格算法.《等离子体物理学》, 2015, 22(11): 112504.[18] He Y、Sun Y、Qin H、Liu J. 用于 Vlasov–Maxwell 方程的哈密顿粒子网格方法.《等离子体物理学》, 2016, 23(9): 092108.[19] He Y、Qin H、Sun Y、Xiao J、Zhang R、Liu J. 用于 Vlasov–Maxwell 方程的哈密顿时间积分器.《等离子体物理学》, 2015, 22(12): 124503.[20] Xiao J、Liu J、Qin H、Yu Z. 一种用于 Vlasov-Maxwell 系统、带平滑函数的变分多辛粒子网格算法.《等离子体物理学》, 2013, 20(10): 102517.[21] Kraus M、Kormann K、Morrison P J、Sonnendrücker E. GEMPIC：几何电磁粒子网格方法.《等离子体物理学杂志》, 2017, 83(4).

[22] Perse B、Kormann K 和 Sonnendrücker E. 曲线坐标下 Vlasov–Maxwell 系统的几何粒子网格模拟. SIAM 科学计算杂志, 2021, 43(1): B194-B218.[23] Morrison P J. 等离子体物理学中的结构及保结构算法. 等离子体物理学, 2017, 24(5): 055502.[24] Crouseilles N、Hervieux P A、Li Y、Manfredi G、Sun Y. 含自旋效应的 Vlasov–Maxwell 方程几何粒子网格方法. 等离子体物理学杂志, 2021, 87(3).[25]Kormann K、Sonnendrücker E. 用于保结构粒子网格 Vlasov–Maxwell 求解器的能量守恒时间推进. 计算物理学杂志, 2020, 425: 109890.[26] Pinto M C、Jund S、Salmon S、Sonnendrücker E. 一般网格上的电荷守恒 FEM-PIC 格式. 力学报告, 2014, 342(10-11): 570-582.[27] González C A、Tenerani A、Velli M、Hellinger P. 参数不稳定性在湍流生成与质子加热中的作用：平行传播阿尔芬波的混合模拟. 天体物理学杂志, 2020, 904(1): 81.[28] Pinto M C、Kormann K 和 Sonnendrücker E. 保结构电磁粒子网格方法的变分框架. 科学计算杂志, 2022, 91(2): 1-39.[29] Buffa A、Sangalli G、Vázquez R. 电磁学中的等几何分析：B样条近似. 计算力学与工程中的数值方法, 2010, 199(17-20): 1143-1152.[30] Stanier A、Chacón L、Chen G. 全隐式、守恒、非线性电磁混合粒子离子/流体电子算法. 计算物理学杂志, 2019, 376: 597-616.[31] Stanier A、Chacón L. 曲线网格上混合动理学离子-流体电子等离子体模型的守恒隐式粒子网格格式. 计算物理学杂志, 2022, 459: 111144.[32] Crouseilles N、Einkemmer L、Faou E. Vlasov–Maxwell 方程的哈密顿分裂. 计算物理学杂志, 2015, 283: 224-240.[33] Frankel T. 物理学的几何：导论. 剑桥大学出版社, 2011.[34] Holderied F、Possanner S. 基于光滑极坐标样条的轴对称平衡磁流体动力学特征值求解器. 计算物理学杂志, 2022: 111329.[35] Perse B、Kormann K、Sonnendrücker E. 曲线坐标下 Vlasov–Maxwell 系统几何粒子网格模拟的理想导体边界条件. arXiv 预印本 arXiv:2111.08342, 2021.[36] Trotter H F. 关于算子半群的乘积 . 美国数学会会刊, 1959, 10(4): 545-551.

[37] Vay J L、Geddes C G R、Cormier–Michel E、Grote D P. 洛伦兹增益参考系中激光尾场加速器建模的数值不稳定性缓解方法. 计算物理学杂志, 2011, 230(15): 5908-5929.[38] Gonzalez O. 时间积分与离散哈密顿系统. 非线性科学杂志, 1996, 6(5), 449-467.[39] Rambo P W. 准中性混合模拟中的有限网格不稳定性. 计算物理学杂志, 1995, 118(1): 152-158.[40] McLachlan R I、Quispel G R W、Robidoux N. 使用离散梯度的几何积分. 伦敦皇家学会哲学汇刊。A辑：数学、物理与工程科学, 1999, 357(1754): 1021-1045.[41] Li Y、Holderied F、Possanner S、Sonnendrücker E. 正则形式下动理学离子与无质量流体电子混合模型的数值模拟，已投稿.[42] Winske D、Yin L、Omidi N 等. 混合模拟代码：过去、现在与未来——教程. 空间等离子体模拟, 2003: 136-165.