arXiv:2305.01487v2 [physics.comp-ph] 4 Dec 2023

The *muphy*II 代码：大型高性能计算系统上的多物理等离子体模拟

F. Allmann-Rahn[a], S. Lautenbach[b], M. Deisenhofer[a], R. Grauer[a]

[a] *Institute for Theoretical Physics I, Ruhr University Bochum, Universitätsstraße 150, 44801 Bochum, Germany*[b] *College of Natural Sciences, The University of Texas at Austin, 120 Inner Campus DrStop G2500, Austin, TX 78712, United States of America*

摘要

无碰撞天体物理等离子体和空间等离子体所覆盖的区域通常具有超出任何代码能力范围的尺度分离特征。为应对这一问题，*muphyII* 代码采用具有不同固有尺度的模型层级，并通过自适应框架将其统一起来；该框架既支持模型独立运行，也支持基于模型的动态自适应区域分解。这要求确保出色的守恒性质，谨慎处理用于界面耦合的内部区域模型边界，并采用稳健的时间推进算法，尤其是在使用电子子循环时。该多物理场方法已在*muphyII* 代码中实现，并在不同的空间等离子体磁重联场景下进行了测试，同时与空间探测器数据及文献中的高保真模拟结果进行了比较评估。文中特别强调了自适应模型细化，并评估了一种混合模型，该模型包含动力学离子、压力张量流体电子和麦克斯韦场。

关键词：等离子体模拟，磁重联，数值方法，高性能计算，无碰撞等离子体

1. 引言

在无碰撞的天体物理和空间等离子体中，小尺度动理学效应会对整体动力学产生重大影响。一个广为人知的例子是磁重联：重联时间、能量释放和流出速度等整体量，取决于与高度非高斯的速度分布函数相关的动理学效应。另一方面，由此改变的大尺度结构会影响电流片的几何形态，进而影响重联过程。对动理学尺度与整体尺度之间这种耦合进行数值建模，是天体物理和空间等离子体整体模拟面临的一项重大挑战。由于尺度差异极大，基于 Vlasov 方程（例如 [1]）或采用混合电子流体/离子 Vlasov 方法（例如 [2]）的数值格式、能够模拟整个等离子体区域的整体动理学模拟极少。尺度范围例如可以从

电子惯性长度一直延伸到大尺度，例如磁尾重联区域到地球弓形激波的距离。

因此，动态多物理场方法可能是理想的策略。本文介绍了这样一种方法（已在 $muphyII$ 代码中实现）：通过模型自适应的方式耦合模型层级，涵盖从完整的动理学 Vlasov 模拟到五矩/十矩双流体模型。这使我们能够开展从电子尺度到数百个离子惯性长度范围的“中间尺度”模拟。我们还设想将其渐近保持地耦合 [3] 到磁流体力学方程（MHD），从而实现真正的整体模拟。

多物理场技术以及耦合不同物理模型的理念并不新颖，且已应用于不同的物理领域。Schulze 等人 [4] 在外延生长领域耦合了动理学蒙特卡洛模型与连续介质模型。人们已付出大量努力，将动理学玻尔兹曼描述与流体模型耦合（例如参见 [5, 6, 7, 8, 9, 10, 11]）。Kolobov 和 Arslanbekov [12] 描述了从中性气体模型向弱电离等离子体模型的转变。

在空间等离子体物理学领域，Sugiyama 和 Kusano [13] 已开始耦合磁流体力学（MHD）和粒子网格法（PIC）物理模型，并在一维 Alfv´én 波测试问题上验证了这种方法，其中 MHD 区域和 PIC 区域预先固定。Markidis 等人 [14] 引入了四矩两流体/麦克斯韦求解器与嵌入式 PIC 代码的整体耦合。PIC 代码用于计算应力张量和压力张量的闭合关系。为实现与 MHD 描述相兼容的大时间步长，采用了隐式麦克斯韦求解器。Daldorff 等人 [15]引入了界面耦合，将动理学 PIC 模拟（使用半隐式 iPIC3D 代码）与霍尔磁流体力学流体代码（使用 BATS-R-US 框架）结合起来。[16] 中介绍了一种密切相关的方法，该方法使用 MPI-AMRVAC 作为磁流体力学求解器。

该策略被应用于磁尾的整体模拟 [17], ，其中进行了关键性修改，即磁流体力学与 PIC 求解器之间仅进行单向耦合。PIC 模拟对磁流体力学流体量的反馈效应被忽略。

文献 [18, 19, 20]介绍了应用于磁层模拟的双向自适应耦合策略。关于磁层动理学建模/磁流体力学建模的最新总结，可参见 [21]。此外，值得一提的是用于粒子网格模拟的多层级、多计算域方法 [22], ，该方法避免了在自适应粒子网格法模拟中重新构造权重函数。隐式时间积分在这些处理中十分重要，因为这样可以阻尼快速波，例如光波、朗缪尔波、哨声波和电子漂移波。遵循这一方法，可以实现针对准中性的渐近保持方案，具体描述见 [3]。

关于与大尺度磁流体力学方程的耦合，Ho、Datta 和 Shumlak [23] 对五矩流体/麦克斯韦模型与磁流体力学模型的耦合进行了详细研究和数值测试。他们讨论了从磁流体力学模型过渡到双流体模型时的界面通量问题。困难在于缺少电子物理量信息。已有两种方

法可以获取这些缺失的信息。第一种方法可得到守恒通量，第二种方法则符合磁流体力学的物理假设。值得注意的是，守恒耦合会导致振荡，而符合物理规律但不守恒的耦合则会得到稳定的方案。

另一种旨在实现全局模拟的策略，是将 PIC 或混合模拟与自适应网格加密相结合（例如参见 [24], [25]）。

多物理场等离子体代码*muphy* 的开发始于半拉格朗日 Vlasov 代码的实现 [26]。对于拉格朗日处理，我们按照 Darwin 的方法开发了回代法 [27] ，以求解麦克斯韦方程，从而避免光波的传播[28]。

muphy 框架的首个版本发表于 [29]。它实现了动理学 Vlasov 代码与双流体/五矩模型之间的静态耦合。该版本采用分布式 MPI/CUDA 编程，在我们的本地集群上使用 64 个 Tesla S1070 GPU 运行。

在下一阶段的开发中 [30], ，我们的目标是实现不同物理模型（例如五矩、十矩、动理学 Vlasov 描述）之间的动态自适应耦合，其中模型的选择取决于基于物理原理的模型细化准则。该实现作为原型，未针对生产运行进行优化。

本文介绍的当前版本 *muphy muphyII* 是面向德国于利希研究中心 JUWELS Booster GPU 集群高性能运行、对原型实现进行的完整重写。此外，该版本还包含一种在 Vlasov 模拟中守恒能量的新策略，以及用于快速电子动力学和麦克斯韦方程组的子循环方法。

muphyII 已广泛用于三维重联的双流体模拟研究，以了解下混合漂移不稳定性的作用 [32]。在 [33] 中，我们介绍了一种能量守恒 Vlasov 求解器。与十矩/双流体方程的整体耦合使得可以选择较粗的速度分辨率。由此得到的方案被用于研究 MMS 重联事件。在 [34], 中，我们实现了一种拉格朗日 Vlasov 求解器，其中速度空间采用低秩层次 Tucker 分解进行近似。低秩方案能够将自由度数量减少近两个数量级。

2. 物理模型

在 *muphyII* 中，实现了具有不同物理精度和计算成本的无碰撞模型。针对无碰撞等离子体的精确动理学模型考虑了完整的速度空间信息，并使用分布函数 $f_s(\mathbf{x},\mathbf{v}\ t)$ 描述每种粒子 s。分布函数在位置空间 $\mathbf{x}$、速度

空间 $\mathbf{v}$ 和时间 t 的演化由 Vlasov 方程描述

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\nabla_x f_s + \frac{q_s}{m_s}(\mathbf{E}+\mathbf{v}\times\mathbf{B})\cdot\nabla_v f_s = 0, \tag{1}$$

它取决于电场**电场**、磁场**磁场**以及粒子种类的电荷和质量，q_s 和 m_s。我们将把 (1) 称为*Vlasov*模型。

对速度空间进行积分，并在压力方程之后截断层级结构，可得到一组关于粒子密度 $n_s = \int f_S(\mathbf{x},\mathbf{v}\ t)\mathrm{d}\mathbf{v}$、平均速度 $\mathbf{u}_s = {}^1\!/_{n_s}\int \mathbf{v} f_s(\mathbf{x},\mathbf{v}\ t)\mathrm{d}\mathbf{v}$以及动量通量密度 $\mathcal{P}_s = m_s\int \mathbf{v}\mathbf{v} f_s(\mathbf{x},\mathbf{v}\ t)\mathrm{d}\mathbf{v}$的约化方程组。这些方程构成了十矩多流体方程，

$$\frac{\partial n_s}{\partial t} + \nabla\cdot(n_s\mathbf{u}_s) = 0, \tag{2}$$

$$m_s\frac{\partial(n_s\mathbf{u}_s)}{\partial t} - n_s q_s(\mathbf{E}+\mathbf{u}_s\times\mathbf{B}) + \nabla\cdot\mathcal{P}_s = 0, \tag{3}$$

$$\frac{\partial\mathcal{P}_s}{\partial t} - q_s(n_s\mathrm{sym}(\mathbf{u}_s\mathbf{E}) + \frac{1}{m_s}\mathrm{sym}(\mathcal{P}_s\times\mathbf{B})) + \nabla\cdot\mathcal{Q}_s = 0. \tag{4}$$

这里，标准乘积是外积（张量积），$(\mathbf{ab})_{ij} = a_i b_j$；向量积已推广到张量，$(\mathcal{A}\times$**磁场**$)^{ijk} = \epsilon_{klm}A^{ijl}b^m$；对称算子对未缩并指标的所有循环置换求和，$\mathrm{sym}(\mathcal{A})_{ijk} = A_{ijk} + A_{jki} + A_{kij}$。

我们用基于Landau的模型来封闭这组方程，该模型描述热通量 $\mathrm{Q}_s = \int \mathbf{v}\mathbf{v}\mathbf{v} f_s(\mathbf{x},\mathbf{v}\ t)\mathrm{d}\mathbf{v} = \mathcal{Q}_s - \mathrm{sym}(\mathbf{u}_s\mathcal{P}_s) + 2m_s n_s\mathbf{u}_s\mathbf{u}_s\mathbf{u}_s$，并利用温度 T 的梯度信息$_s = (\mathcal{P}_s - mn\mathbf{u}_s\mathbf{u}_s)/(n_s k_\mathrm{B})$,[33, 35, 32]

$$\nabla\cdot\mathrm{Q}_s = -\frac{\chi}{k_{s,0}}\, n_s\, v_{\mathrm{th},s}\, \nabla^2\,\mathrm{T}_s\,, \tag{5}$$

其中热速度为 $v_{\mathrm{th},s} = \sqrt{2T_s/m_s}$，自由参数为 $\chi/k_{s,0}$。我们将这组方程 (2,3,4,5) 称为十矩流体物理模型。

假设压力各向同性且热通量为零，张量压力可简化为能量密度标量 $\mathcal{E}_s = {}^{m_s}\!/_2\int v^2 f_s(\mathbf{x},\mathbf{v}\ t)\mathrm{d}\mathbf{v}$，从而得到总共五个流体方程，

$$\frac{\partial n_s}{\partial t} + \nabla\cdot(n_s\mathbf{u}_s) = 0, \tag{6}$$

$$m_s\frac{\partial(n_s\mathbf{u}_s)}{\partial t} - n_s q_s(\mathbf{E}+\mathbf{u}_s\times\mathbf{B}) + \frac{1}{N}\nabla(2\mathcal{E}_s - m_s n_s\mathbf{u}_s^2) + \nabla\cdot(m_s n_s\mathbf{u}_s\mathbf{u}_s) = 0, \tag{7}$$

$$\frac{\partial\mathcal{E}_s}{\partial t} - q_s n_s\mathbf{u}_s\cdot\mathbf{E} + \frac{1}{N}\nabla\cdot\Big(\mathbf{u}_s((N+2)\mathcal{E}_s - m_s n_s u_s^2)\Big) = 0. \tag{8}$$

其中 N 表示速度空间的维数。我们将这组方程 (6,7,8) 称为五矩流体物理模型。

电场和磁场$\mathbf{E}$ 与$\mathbf{B}$ 的演化由麦克斯韦方程组决定

$$\nabla\cdot\mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}\,,\quad \nabla\cdot\mathbf{B} = 0\,,\quad \nabla\times\mathbf{E} = -\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t},\quad \nabla\times\mathbf{B} = \mu_0\mathbf{j} + \mu_0\varepsilon_0\frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t} \tag{9}$$

其中使用电荷密度 $\rho = \sum_s q_s n_s$、电流密度$\mathbf{j} = \sum_s q_s n_s \mathbf{u}_s$、真空介电常数 ε_0 和真空磁导率 μ_0。在静电情况下，电场$\mathbf{E}$ 由泊松方程给出

$$\nabla^2 \Phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \tag{10}$$

其中，电场与电势 Φ 之间通过 **电场** $= -\nabla\Phi$相关联。

目前，$muphyII$ 的所有物理模型都使用相同的网格间距。五矩模型与我们的自适应网格代码 ***Racoon*** [36] 的耦合仍在进行中。

3. 代码设计与性能

第二代多物理等离子体框架 $muphyII$采用 C++和 Fortran 编写，并利用 MPI 标准实现分布式内存并行计算。所有求解器均为全三维，并通过 OpenACC API 使用图形处理器加速。该代码旨在优先考虑性能、可维护性和灵活性，本节将详细介绍这些设计选择。

选择 C++ 用于代码的框架和逻辑部分，是因为它具有灵活性。对于纯数值计算，则选择 Fortran，因为它内置的多维数组操作简单。这既能实现出色的编译器优化和开箱即用的性能，也让数值实现易于编写和阅读。良好的可读性和可维护性对科学计算代码非常重要，因为：(i) 必须能够轻松检查数值方法是否实现正确；(ii) 参与代码开发的人员经常变动，尤其是在大学研究中。特别是对于刚接触代码开发的学生而言，简洁的代码设计至关重要；他们不仅使用代码开展物理研究，也会研究新的数值方法。值得一提的是，这通常也有助于获得良好的性能。不过，新的物理模型（例如相对论流体或动理学描述）可以用 C++ 或 Julia 等任何语言添加，只需符合 C++接口函数的要求。

分布式内存并行化采用消息传递接口（MPI）和经典的区域分解方法。物理域被划分为多个子域（我们称之为“块”），每个子域由独立的计算进程处理，并可采用不同类型的底层物理模型（例如，离子采用 Vlasov 模型，电子采用十矩流体模型，两者通过麦克斯韦方程组耦合）。相邻子域之间通过 MPI 交换信息，并利用边界网格单元。在每个子域内部，可使用 OpenACC 实现共享内存并行化，从而利用图形处理器。支持 CUDA 感知型 MPI，以实现快速的节点间通信。

选择 OpenACC 而非 CUDA 等底层实现有多方面原因。使用 OpenACC 可显著减少

开发时间，并提高代码的可读性和可维护性。经过优化的 OpenACC 代码无需针对特定设备架构进行严格适配，也能表现良好。此外，它既可在不同制造商生产的加速器上运行，也可在多核 CPU 系统上运行，使 $muphyII$框架具有很高的灵活性。最后，同一代码库可用于基于图形处理器和中央处理器的超级计算机，进一步提高灵活性和可维护性。要在图形处理器上获得良好性能，必须显式管理图形处理器数据传输。对于计算内核，即在图形处理器上执行的操作，OpenACC 提供了两种选项：kernel 构造将优化的全部自由交给编译器，而 parallel 构造则为开发者提供了一些手动优化的可能性。$muphyII$ 中常用的一种高效优化策略，是将跨不同数组维度的嵌套循环折叠为两个循环：一个利用 gang 并行化，另一个利用 vector 并行化；其中，OpenACC 的 gang 可与 CUDA 线程块相类比，而 vector 则可与线程块内的 CUDA 线程相类比。

$muphyII$ 程序布局中的核心对象是一个与 MPI 进程相关联的块。每个块都包含一个“方案”对象，用于实现数值求解器函数调用和边界交换调用的顺序。方案对象包含多个“物理模型”对象，这些对象既包含物理模型数据（例如 Vlasov 方程模型中的分布函数，或麦克斯韦方程组模型中的电磁场），也包含数值求解器的具体实现。方案的一个示例是 {Vlasov 电子、Vlasov 离子、Maxwell} 方案，其中每种粒子组分都对应一个 Vlasov 物理模型对象，此外还包含一个 Maxwell 物理模型对象。这种设计理念允许区域分解中的每个块/子域采用不同的物理方案，与 $muphyII$ 的多物理场方法十分契合。根据实际物理需求，可以采用不同的物理模型处理各个子域。图 1 和图 2 展示了概括这些特性的简化统一建模语言（UML）图。在此类空间耦合模拟中，具有 ki-

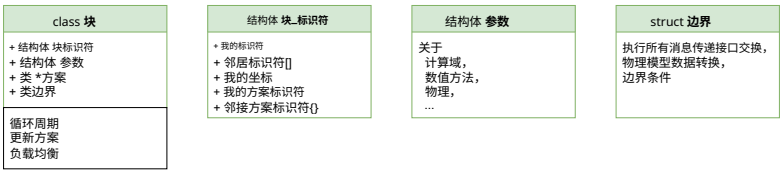


图 1： $muphyII$ 的框架主要对用户隐藏，负责并行化、边界交换和转换、数据输出以及方案/模型适配。

动理学模型的计算时间显著长于流体模型。CUDA 多进程服务（MPS）用于解决计算成本上的差异。在该服务中，多个消息传递接口（MPI）进程可以共享一个图形处理器。其思路是在每个图形处理器上安排少量或一个动理学块，以及大量流体块。理想情况下，少量动理学块会在数值格式的第一部分充分利用

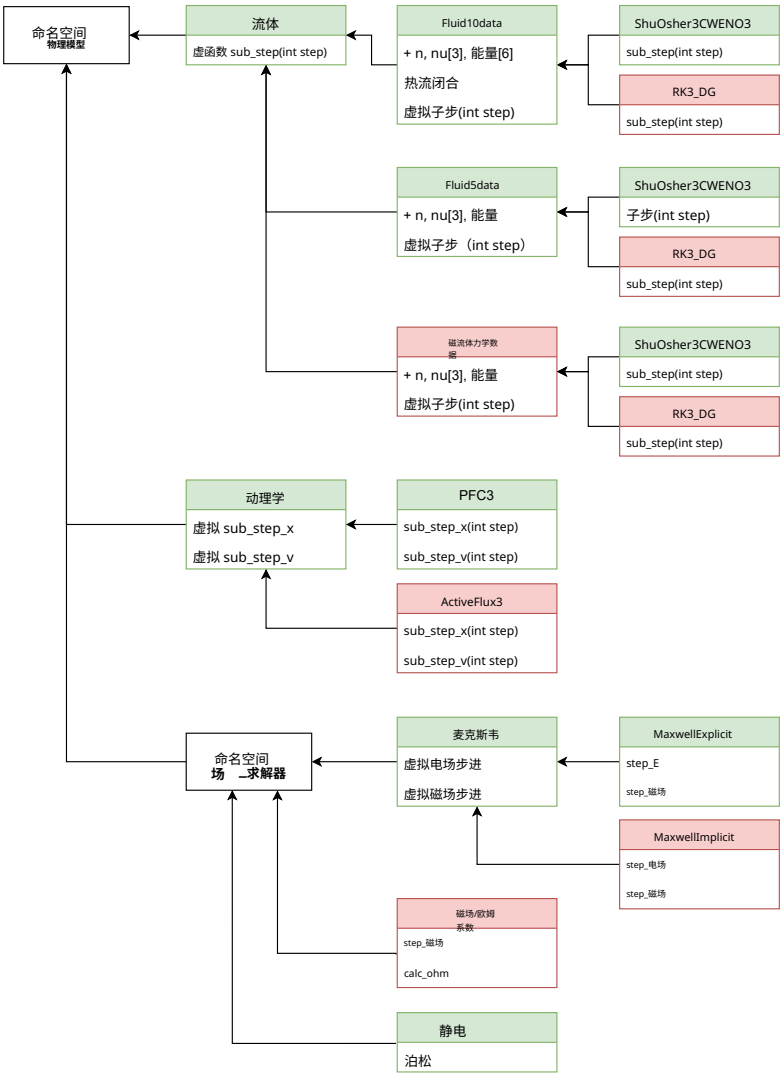


图 2：Scheme 类包含 model 类的所有可能组合。用户应能够轻松调整和添加方案及物理模型。绿色标记的物理模型表示稳定版本，而红色标记的物理模型表示仍在开发中。

图形处理器，而大量流体块则会在数值格式的第二部分共同充分利用图形处理器。通过实施负载均衡，使每个图形处理器计算数量相等的高成本和低成本物理模型。

muphyII 在 JUWELS-booster 超级计算机上的弱扩展情况如图 3 所示。它在扩展至 1024 个 A100 图形处理器（超过 700 万个图形处理器核心）时表现出色，并且预计随着规模继续增大，扩展情况仍将保持相同趋势，直至

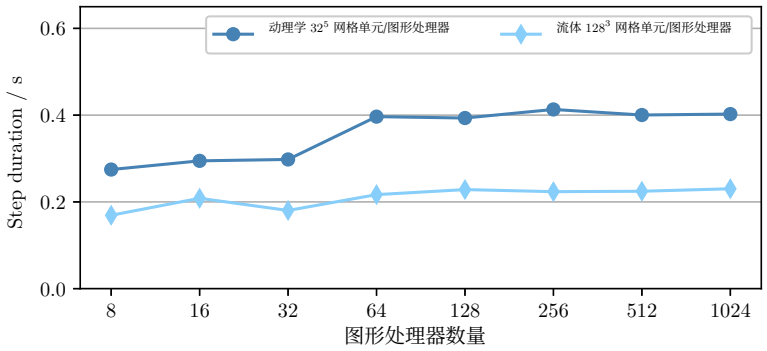


图 3： *muphyII* 在 JUWELS-booster 超级计算机上的计算时间扩展。图中展示的是弱扩展，即网格单元数量和图形处理器数量同时增加。

更大规模。64 个图形处理器时步长持续时间增加，是由 JUWELS-booster 的网络布局造成的。在 JUWELS-booster 中，由 48 个节点组成的网络单元以极高带宽互连，而多个网络单元之间则以略低的带宽互连。步长持续时间增加是由跨多个网络单元的通信造成的，与实现方式无关。这项扩展性研究采用双精度计算：动理学求解器使用匹配矩 Vlasov 方法（见第 4.1 节），流体求解器则使用带温度梯度热流闭合（5）的十矩多流体模型（见第 4.1 节）；此外，FDTD 麦克斯韦求解器（见第 4.1 节）使用了 15 个子循环（见第 4.4 节）。物理设置方面，我们为 2D3V 动理学求解器选择了 Orszag-Tang 涡旋 [38]，为 3D 流体求解器选择了 Orszag-Tang 涡旋[39]。在经过 50 个时间步的预热阶段后，对 100 个时间步的步长持续时间取平均值。

4. 数值方法

4.1. 求解器

为求解第2节给出的物理方程，我们在*muphyII*中实现了不同的数值求解器。Vlasov 方程（1）采用半拉格朗日格式在相空间网格上求解 [40]，并使用正性通量守恒（PFC）方法 [41]。我们实现了空间三阶版本，并仅在相空间分布函数的取值较小时使用限制器，以保证正性。位置空间和速度空间的更新采用类蛙跳 Strang 分裂。严格来说，Strang 方法在时间上仅为二阶方法。然而，由于 Vlasov 方程中平流项的特殊性质，该方法在实际中表现出高于二阶的精度。因此，通常可达到2.4阶时间精度。我们分别对三个空间方向和三个速度空间方向上的平流算子进一步进行分裂。沿三个

空间方向的分裂不会引入额外误差，因为各平流算子彼此对易。速度空间分裂通过回代 [27]实现。为守恒总能量并降低对速度空间分辨率的数值要求，采用矩匹配 Vlasov 求解器 [33] （详见算法1）。

十矩和五矩方程通过 CWENO 有限体积法 [42]求解。时间积分采用具有良好稳定性的三步 Runge–Kutta 方法 [43]。针对十矩方程，实现了多种热流闭合：压力梯度闭合[35, 32], 温度梯度闭合 [33], Ng 等人（2020）提出的温度梯度闭合 [44]以及 Wang 等人（2015）提出的各向同性化闭合[45]。梯度闭合采用子循环，因为为了保证稳定性，它们通常需要比流体方程本身更小的时间步。为确保数值稳定性，对压力设置了显式下限。

麦克斯韦方程组通过时域有限差分（FDTD）方法求解。对包含时间导数的两个麦克斯韦方程进行演化，并且根据该方法的构造，确保 $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$。此外，高斯定律 $\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho/\epsilon_0$ 在真空中能够满足，或者当提供电流密度的数值方法满足某些要求时也能够满足。为更好地保持高斯定律，匹配矩 Vlasov 和流体格式中的电流密度根据 CWENO 单元通量计算。对于静电模拟，实现了一种简单的迭代泊松求解器，并通过加性 Schwarz 迭代实现并行化。

4.2. 时间推进方案

为了利用麦克斯韦方程组和两种粒子种类方程各自不同的时间分辨率要求，物理模型可以选择采用子循环，让每个求解器使用不同的步长。与离子相比，电子的质量小得多，通常运动速度也快得多，因此需要采用更小的步长，以保证计算精度和稳定性。对于非相对论粒子，即使采用缩减后的光速，其数值通常也要大得多。为此，子循环分为两部分：每个电子步中，麦克斯韦更新被划分为 N_m 个麦克斯韦子步；每个离子步对应 N_e 个电子子步。电子和麦克斯韦状态采用 Strang 分裂进行积分，使后者相对于电子时间步偏移半个时间步。

十矩和五矩求解器中使用的 Runge-Kutta 积分器，以及因此也包括矩匹配算法中的十矩求解器，使用在 $t + \Delta t_s/2$ 处提供的麦克斯韦场数据。在不进行电子子循环的情况下，Strang 分裂所产生的偏移可确保这些数据是在正确的时刻计算的。当电子循环次数超过一次时，离子步不再必然满足这一条件。选择奇数个电子子步，可以在第 $\lfloor N_e/2 \rfloor$ 个麦克斯韦步之后重新安排离子步，无需额外插值，如图 4 所示。麦克斯韦求解器本身在**电场** 和**磁场** 之间采用 Strang 分裂，而所使用的线性插值

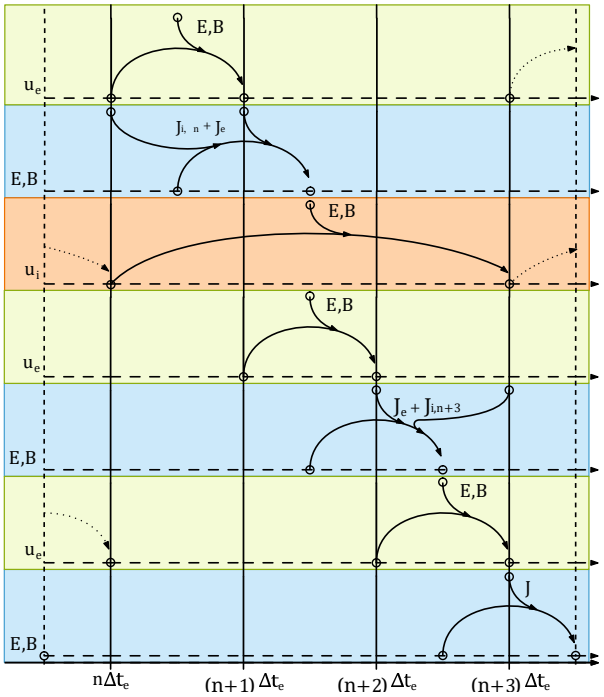


图 4： $N_e = 3$ 的电子子循环时间推进示意图。操作按从上到下的顺序执行，数值时间从左向右推进。为便于辨识，推进操作根据其所属上下文以不同颜色标示（蓝色：场求解器，绿色：电子等离子体求解器，橙色：离子等离子体

求解器）。

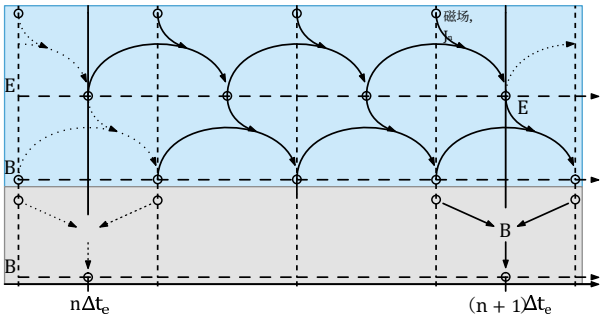


图 5： $N_m = 3$ 的蛙跳式麦克斯韦子循环示意图。操作按从上到下的顺序执行；数值时间从左向右推进。为便于辨识，操作根据其算法上下文以不同颜色标示（蓝色：推进，灰色：插值）。

要获得仅需在完整电子步的时刻计算的**磁场**（见图5）。

虽然 N_m 被手动设置为模拟的一个参数，但 N_e 和各个求解器的步长则根据当前的最大稳定步长 Δt_e^*， Δt_i^* 进行选择，以尽量减少离子步的数量： $N_e = \lceil \Delta t_i^* / \Delta t_e^* \rceil$，$\Delta t_i = \Delta t_i^*$。

矩匹配 Vlasov 求解器的步骤与 [33] 中描述的原始步骤基本相同。不过，为了更好地满足高斯定律，密度修正被应用于分布函数的非麦克斯韦部分，而不是流体矩。请比较下面的算法1与原始出版物中的算法。

算法1： Vlasov-麦克斯韦矩匹配的时间推进
按其实现的求解器

使用麦克斯韦求解器进行半步初始化
时间步
  计算 $\mathcal{Q}^t$ 的三阶矩 f^t
  全 Vlasov 蛙跳步，推进至 f^{t+1}
  从 f^{t+1} 计算 $\mathcal{Q}^{t+1}$
  插值得到 $\mathcal{Q}^{t+1/2}$
  完整 Runge-Kutta 流体步（在适当时间输入 $\mathcal{Q}$ ）
  矩拟合
    计算来自 f 的矩 n_{V}、$\mathbf{u}_{\mathrm{V}}$, $\mathcal{P}_{\mathrm{V}}$
    计算十矩麦克斯韦分布 $f_{\mathrm{M,V}}$， 基于 n_{V}, $\mathbf{u}_{\mathrm{V}}$, $\mathcal{P}_{\mathrm{V}}$
    从流体求解器计算十矩麦克斯韦分布 $f_{\mathrm{M,\ F}}$ 的矩
    交换带密度修正的十矩麦克斯韦分布：
    $f = (f - f_{\mathrm{M,\ V}})\,(n_{\mathrm{F}}/n_{\mathrm{V}}) + f_{\mathrm{M,\ F}}$
    限制 f
  麦克斯韦求解器的完整步骤

4.3. 空间耦合

不同等离子体模型的空间耦合能够显著缩短模拟所需的计算时间，因为只在假定动理学效应至关重要的区域应用计算开销较大的动理学物理模型。在许多情况下，物理域的大片区域都可以采用成本低得多的流体模型进行恰当处理。

在 *muphyII* 中，整个计算域被划分为多个可以独立计算的子域（参见第 3 节中的并行化信息）。这与空间耦合多物理场方法完美契合。每个子域可以包含不同的等离子体模型，子域边界处的模型耦合被纳入边界信息交换过程。

特定物理模型的适用区域可以是静态的，也可以是动态的，即在模拟过程中根据问题进行调整。对于后一种情况，我们会定义判据，根据

局部等离子体量来决定采用哪些物理模型。我们定义了可用于耦合的模型层级。这些物理模型按物理完整性从高到低依次为：全 Vlasov $\rightarrow$ 混合 Vlasov 离子，十矩流体电子 $\rightarrow$完整十矩流体 $\rightarrow$ 十矩流体离子、五矩流体电子 $\rightarrow$完整五矩流体（见图 6）。我们只允许相邻模型之间进行耦合

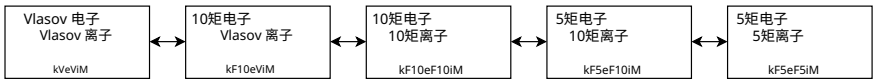


图6：可用物理模型的层次结构（包括在 $muphyII$中使用的 enums。

该层次结构中的物理模型旨在使物理模型边界处的物理变化尽可能小。这一限制旨在提高物理精度，并形成平滑的耦合边界。在不同物理模型之间进行边界交换时，会发送经过更多约化的数据，以尽量减少通信量。通过MPI发送边界数据之前或之后，会将其转换为相应的物理模型。

该层次结构中有两种可能的物理模型转换：五矩流体模型与十矩流体模型之间的转换，或十矩流体模型与Vlasov模型之间的转换。我们将讨论这两种情况，先从前者开始。根据更完整物理模型的信息计算约化物理模型通常较为直接。由十矩数据生成五矩数据，只需对十矩模型的压力张量求迹tr(P)，即可得到五矩模型的标量压力。反向转换则更困难，因为存在自由度：无穷多种不同的压力张量都可能对应相同的标量压力。由于在耦合模拟中，我们通常只在各向同性（标量）压力假设适用的区域使用五矩模型，因此选择最简单的方案。通过规定各向同性来根据五矩数据生成十矩边界数据，即令P $= p/d$I，其中P为压力张量， p 为标量压力，I为单位矩阵。$muphyII$ 中还提供了另一种实现方式：将耦合边界处十矩解的压力张量延拓至边界网格单元，并乘以一个标量因子，使其与五矩模型给出的标量压力相匹配。

另一个物理模型转换发生在 Vlasov 模型与十矩模型之间。同样，根据 Vlasov 模型提供的分布函数边界数据，可以直接计算出十矩数据；而且，能够构造出与十矩边界数据相匹配的分布函数有无穷多种。首先尝试使用十矩麦克斯韦分布，它会考虑温度张量（多元正态分布），因为这是最大熵解。这种方法已经能带来良好的结果。为了实现更平滑的转换，我们将耦合边界处的 Vlasov 数据扩展到边界网格单元中，并对其进行调整，使之与流体边界数据相匹配。该方法由 Rieke 等人[29]和 Trost 等人 [46], 提出，不过，现在调整分布函数的方式

改为交换麦克斯韦分布 [33]。我们从扩展的 Vlasov 数据中去除十矩麦克斯韦分布部分，再将所得结果乘以一个系数 σ_i后，加到根据流体边界数据计算出的麦克斯韦分布上。该系数随与耦合边界的距离增加而线性递减。在我们的案例中有两个边界网格单元，第一和第二个边界网格单元中的系数分别为 $\sigma_1 = 2/3$ 和 $\sigma_2 = 1/3$ 。

4.4. 采用电子子循环的混合十矩-*Vlasov*模型

muphyII$muphyII$ 包含一系列模型，包括全动理学 Vlasov 模型、流体模型和混合模型。前两者已在早期论文中讨论过（例如 [33, 32]），后者曾以简化版本用于 Laut- enbach 和 Grauer（2018） [30], ，但未作详细描述。近期，该模型有了显著扩展，例如引入了电子子循环。本节将介绍我们采用的新型混合方法：使用十矩流体电子、Vlasov 离子和完整的麦克斯韦方程组。

离子按动理学方法处理、电子按流体处理的混合动理学等离子体模型已取得显著成效。这类模型源于这样的观察：在许多现象中，离子对等离子体动力学更为重要，而与此同时，电子的建模成本要高得多。因此，在许多情况下，将电子近似为流体是一个不错的策略，这样只需在离子的时间和空间尺度上求解动理学方程。传统上，电子动力学和电磁场方程通过广义欧姆定律进行近似处理。通常，电子被视为无质量流体，并采用描述压力的状态方程，典型情况为等温极限。

混合 Vlasov 代码在相空间网格上求解离子 Vlasov 方程，例如 HVM [47, 48]和 Vlasiator [2, 49]。另一方面，混合 PIC 代码采用粒子网格法处理离子，例如 H3D[50] 和 CAMELIA [51]。最近，研究人员开始尝试将压力各向异性引入 H3D [52] 和 HVM（后更名为 HVLF） [53]的流体电子近似模型中。

在这里，我们更进一步，采用完整的电子十矩流体模型，并使用未经近似的完整麦克斯韦方程组。借助第 4.2 节讨论的电子子循环和麦克斯韦子循环，仍然可以只在离子时间尺度上求解离子 Vlasov 方程。从物理角度看，较大的离子时间步是合理的。从数值角度看，离子的加速程度较低，因此更容易处理其时间步长，数值时间步长限制也较宽松。与全 Vlasov 模拟相比，计算时间的大幅节省并非仅仅来自更大的时间步。由于电子的加速程度远高于离子，尤其是在质量比接近真实值时，必须用大量网格单元对广阔的电子速度空间进行高分辨率刻画（这主要是出于数值方法的需要）。相比之下，较慢的离子只需低得多的分辨率，尤其是在采用矩匹配法时 [33]。这两个因素共同使混合十矩-Vlasov 模型具有极高的计算性能，同时仍保留了完整的离子动理学，

能够自洽地描述电子惯性和光波，并包含完整的电子压力张量以及朗道阻尼热流近似。过去，由于 Vlasov 相空间网格需要很高的速度空间分辨率，混合PIC方法通常被认为比混合Vlasov方法计算性能更高。然而，采用匹配矩Vlasov方法后，我们能够在不损失保真度的情况下降低离子速度分辨率，并使自由度数量接近PIC动力学求解器所用的水平。与此同时，我们仍能避免混合PIC方法的数值问题 [54], 和离散粒子噪声。

5. 基准模拟

本节旨在展示$muphyII$ 中尚未在早期出版物中讨论过的特性，也就是超越纯动理学和纯流体情形的特性。一方面，这涉及不同等离子体模型的耦合。与早期的$muphy$ 代码相比，这一耦合得益于能量守恒 Vlasov 求解器、改进的热流闭合以及技术进步。另一方面，我们测试混合十矩-Vlasov模型在物理表现力方面的能力；它同样受益于求解器改进，也受益于新开发的电子子循环方法。

5.1. 静态耦合

MMS于2017年7月11日22:34 UT测得的磁尾重联事件，以及Nakamura等人（2018） [56] 和Genestreti等人（2018） [57]推导出的初始条件，为测试空间耦合提供了理想案例 [55] 。首先，这是一个很好的基准案例，因为磁重联是一种重要但极其复杂的现象，需要准确描述动理学效应。其次，针对这一特定案例，已有航天器测量数据以及精度很高的全动理学PIC [56] 和 Vlasov [33] 模拟可供比较。

初始条件类似于哈里斯平衡。初始粒子密度为 $n_s = n_0\mathrm{sech}^2(y/\lambda) + n_b$，磁场为 $B_x = \tanh(y/\lambda)B_0 + \delta B_x$，$B_y = \delta B_y$ 和 $B_z = -B_g$。背景密度为 $n_b = n_0/3$，电流片的半厚度为 $\lambda = 0.6\,d_i$，导引场为 $B_g = 0.03\,B_0$。背景粒子（与密度 n_b相关的粒子）初始静止，温度为$T_{bg,s} = T_{0,s}/3$；而电流片粒子的温度则为$n_0 k_B(T_{0,e} + T_{0,i}) = B_0^2/(2\mu_0), T_{0,i}/T_{0,e} = 3$，并携带电流。计算域在 x 方向上从 $-L_x/2$ 延伸至 $L_x/2$，在 y 方向上从 $-L_y/2$ 延伸至 $L_y/2$，其中$L_x = 120\,d_i$ 和 $L_y = 40\,d_i$。此处通过一个小的高斯扰动触发重联：$\delta B_x = -\xi(2y/\lambda^2)\exp\left(-(x/(a\lambda))^2\right)\exp\left(-(y/\lambda)^2\right)B_0$，以及$\delta B_y = \xi(2x/(a\lambda)^2)\exp\left(-(x/(a\lambda))^2\right)\exp\left(-(y/\lambda)^2\right)B_0$，扰动幅值选为 $\xi = 0.025$ 和 $a = L_x/L_y$。电子速度空间范围从 $-20\,v_A$ 到 $20\,v_A$，离子速度空间范围从 $-5\,v_A$ 到 $5\,v_A$。

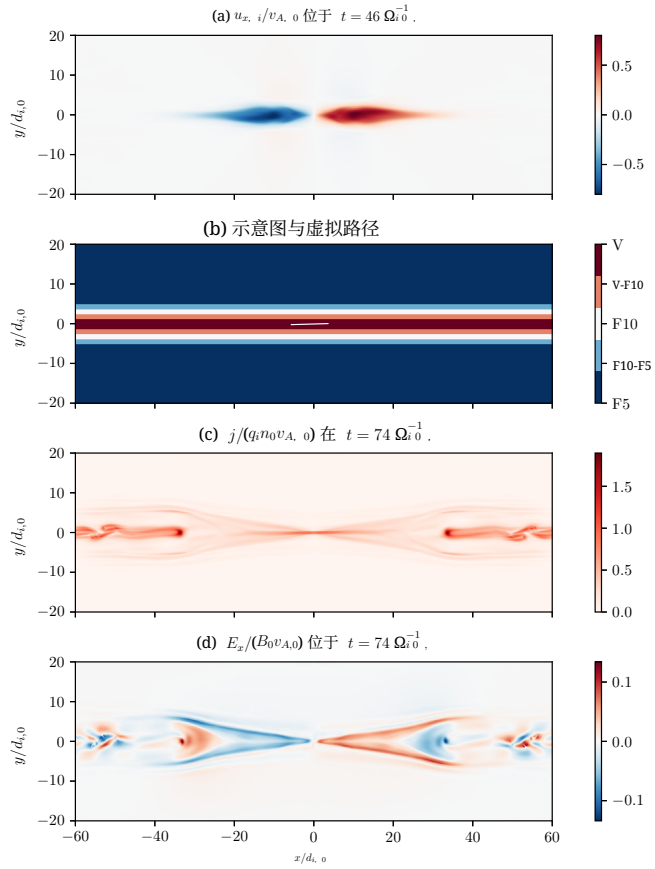


图 7：磁尾重联的静态耦合模拟。（a）离子外流速度；（b）使用不同数值格式的位置，以及以白线表示的虚拟路径；（c）电流密度的绝对值；（d）电场的 x 分量。

离子-电子质量比设为 $m_i/m_e = 100$，光速设为$c = 20\,v_{A,0}$。对于 Vlasov 模型，位置空间分辨率为 1536×512 个网格单元，速度空间分辨率为 36^3 个网格单元。十矩流体方程采用温度梯度热流闭合 [33]，并进行 16 次子循环。

模拟概况见图7。离子外流速度的结构（图7a）与全动理学情形中观测到的结构完全一致（例如，参见 [57] 和 [56]中所示的快照）。如图7b所示，只有计算域中很小一部分采用全动理学模型进行计算，即1/16；其余大部分区域则采用计算成本较低的五矩流体模型处理。尽管如此，仍捕捉到了重要的动理学特征。图7c展示了稍后时刻电流密度的绝对值。小到中等导引磁场 [58] 下动理学重联所特有的细长电流片清晰可见，外流区域中还出现了一种不稳定性（可能是

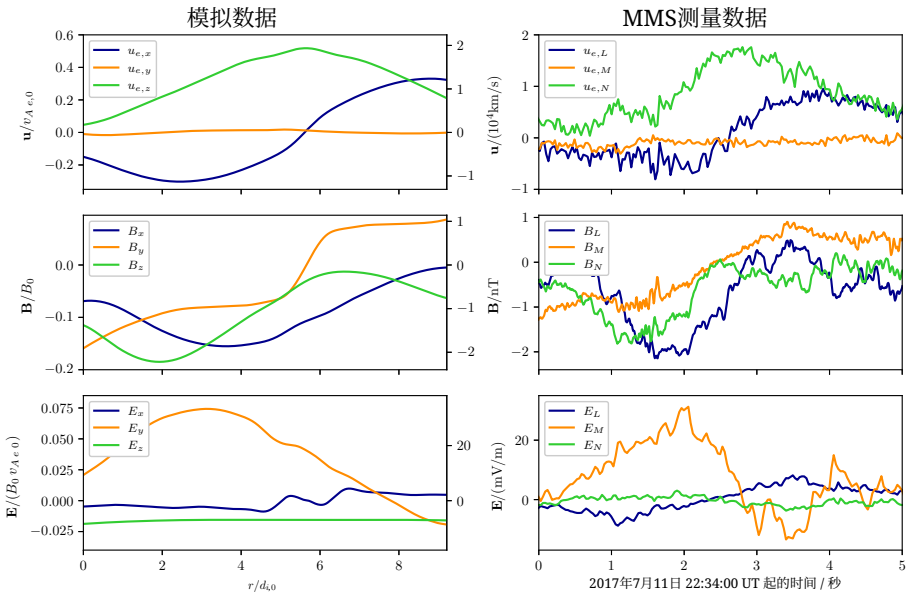


图8：MMS测量数据（右）与静态耦合模拟（左）的比较。模拟数据沿图7所示的虚拟路径提取，路径位于 $t = 46\,\Omega_{i\,0}^{-1}$，。

火焰不稳定性）。为展示耦合的平滑性，图7d给出了电场的x分量。这是最敏感的量之一，但在耦合边界处仍未见任何不规则迹象，尽管不同物理模型的界面之外也演化出了复杂结构。

如图8所示，耦合模拟与MMS航天器对该磁重联事件的测量结果吻合良好。模拟数据沿图7b中白线所示的虚拟路径提取。虽然模拟结果与测量数据的一致程度尚不及全动理学模拟 [56, 33] （这是预期之中的），但已经相当接近。显然，仅在计算域中心使用Vlasov模型，无法精确呈现所有动理学效应。 [33], 中显示，电子热流在分界线边界处最强，而那里使用的五矩模型完全无法捕捉这一特征。未来，若能更合理地在计算域内分布各物理模型，或许可以进一步改善结果。尽管如此，考虑到动理学区域如此之小，这一结果仍然十分令人鼓舞。

对耦合模拟与来自 [33] 的全动理学 Vlasov 模拟的归一化重联率进行比较，也可以得出类似结论。重联率在约 0.1 [59] 的典型值附近达到峰值，且耦合模拟与全动理学模拟的结果总体上非常相似。耦合模拟的结果也与所获得的重联率相当

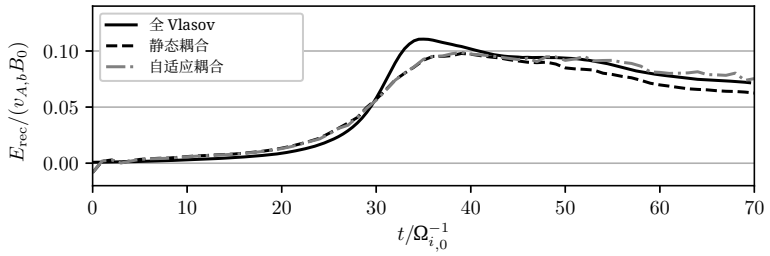


图 9：静态耦合和动态耦合模拟中的归一化磁重联率与全 Vlasov 模拟的对比，后者相对于 [33] 平移了 $-30\Omega_{i\,0}^{-1}$，以补偿其中采用的较低初始扰动。

方案	描述	判据
V	Vlasov 离子，Vlasov 电子	$j > 1.00\ n_0 v_{A,\,0}$ $\vee$ $u_e > 4.0\ v_{A,\,0}$
V-F10	Vlasov 离子，10矩电子	$j > 0.50\ n_0 v_{A,\,0}$ $\vee$ $u_e > 2.0\ v_{A,\,0}$
F10	10矩离子，10矩电子	$j > 0.20\ n_0 v_{A,\,0}$ $\vee$ $u_e > 1.0\ v_{A,0}$
F10-F5	10矩离子，5矩电子	$j > 0.05\ n_0 v_{A,0}$ $\vee$ $u_e > 0.5\ v_{A,0}$
F5	5矩离子，5矩电子	否则。

表1：动态耦合模拟中用于选择等离子体模型的判据。

在 [56], 中的重联率相符，该结果与全 Vlasov 情况一致。

5.2. 动态耦合

在大多数情况下，选择采用不同等离子体模型的静态区域并非最佳方案，因为某些物理模型所需的区域会随时间变化。例如，在模拟后期，分离面边界处会出现电子热流。因此，我们进行了动态耦合模拟，根据局部等离子体参数判定应采用哪种物理模型。这里，我们选择了一种针对磁重联调整的启发式判据，同时考虑电流密度的绝对值和面外电子速度。 [30]中采用了类似的方法。不同等离子体模型的阈值汇总于表1。模型区域每隔 5 $\Omega_{i\,0}^{-1}$，更新一次，计算域在 $x-y$ 平面上划分为 48×32 个区块。

动态耦合带来了挑战。首先，所选判据当然并非最优，未来需要找到更合适的判据。其次，也是更重要的一点，替换数值格式可能会导致相邻格式界面处出现较大的非均匀性。原因在于，迄今尚未针对格式替换实现类似于空间Vlasov/十矩耦合（见第4.3节）的过程。例如，如果将Vlasov模型与十矩模型耦合，则会将Vlasov区域外推至麦克斯韦十矩区域，以提高耦合平滑性。然而，如果十矩

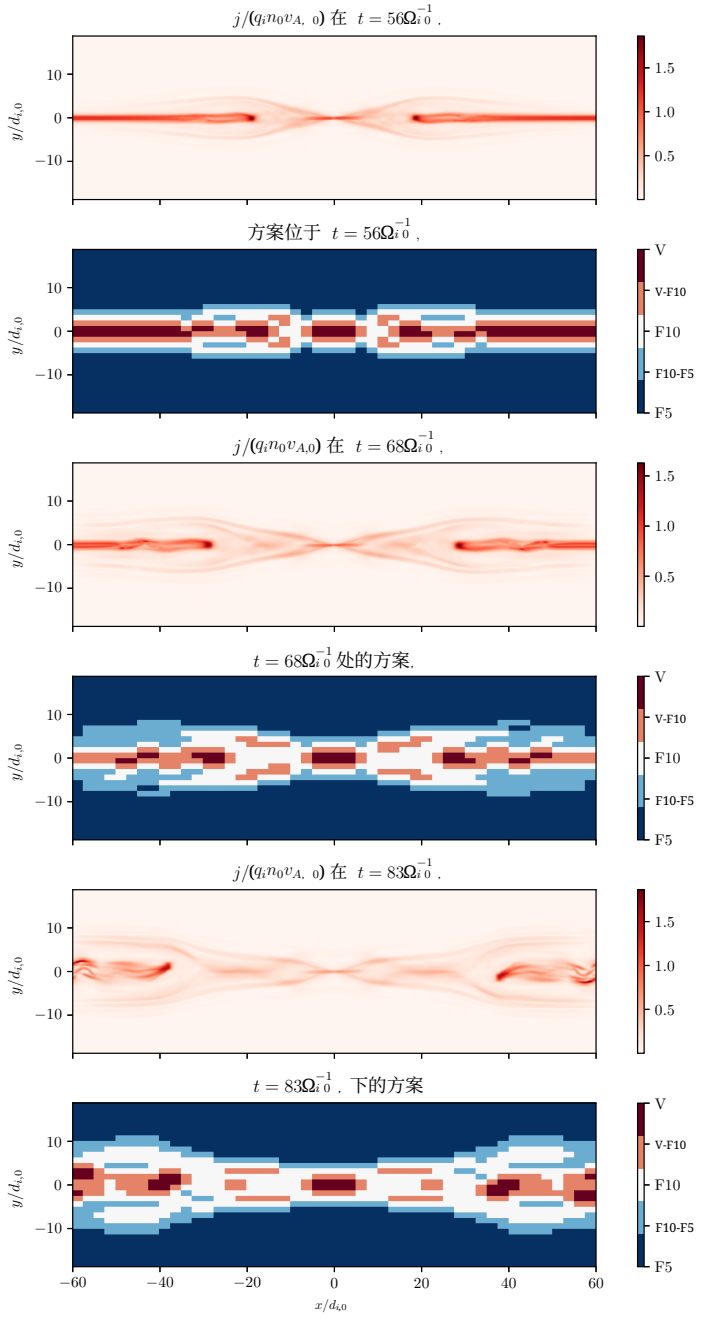


图 10：磁尾重联动态耦合模拟概览：三个不同时刻的电流密度绝对值及不同物理方案的分布。

该物理模型区域由 Vlasov 模型替代，从麦克斯韦分布函数开始，且没有改善界面平滑度的机制。因此，本节中的模拟应视为概念验证和对$muphyII$功能的展示，而这一问题的解决方案留待未来工作。

图 10 展示了不同时刻的模拟状态和方案分布。重联过程得到了良好呈现，各方案也能适应重联电流片的几何形状。尽管计算域内的方案分布不断变化，且空间特征复杂，耦合边界处并无明显伪影，整体图像十分平滑。分离面边界处的重要区域，以及总体上的整个分离面，都按预期采用了更先进的物理模型处理。图 9 展示了重联率的演化，其结果接近全动理学情形。

我们选择该判据时，特意将全动理学区域设得比物理上适宜的范围更小，以展示该方法的数值稳健性。因此，X线周围的动理学区域不足以捕捉电流片延伸。当然，未来该判据仍有很大的改进空间。理想情况下，通过改进物理方案的分布，可以在相同计算成本下捕捉更多动理学物理。

5.3. 混合十矩-*Vlasov*

在第 4.4 节中，我们讨论了在混合流体电子、Vlasov离子方法中，使用电子十矩模型和完整麦克斯韦方程组所能实现的高度物理表达能力。作为一项基准模拟，我们选取 Finelli等（2021） [53] 中的初始条件；该文介绍了一种 Landau 流体电子、Vlasov 离子物理模型。就基本思想而言，它与我们的混合模型颇为相似。不过，在数值方法和物理方面都存在重要差异，我们将在下文讨论。

物理构型与之前相同，是 Harris 片中的磁重联。因此，初始粒子分布和磁场的空间分布与第 5.1 节所述相同，但等离子体参数大不相同：导引磁场 $B_g = 0.25\,B_0$ 更强，背景密度 $n_b = n_0$ 也更高。电流片半厚度设为 $\lambda = 0.85\,d_i$,0，离子-电子质量比设为 $m_i/m_e = 100$ ，温度比设为 $T_{0,i}/T_{0,e} = 4$ ，其中 $T_{bg,s} = T_{0,s}$。光速为 $c = 20\,v_A$,0。我们采用与前几节相同的初始扰动，此处 $\xi = 0.02$。空间区域在 x方向上从 $-L_x/2$ 延伸至 $L_x/2$ ，在y方向上从 $-L_y/2$ 延伸至 $L_y/2$ ，其中 $L_x = 24\pi\,d_i$,0 且 $L_y = 12\pi\,d_i$,0。该区域由 1024×512个网格单元划分。离子速度空间从 $-4\,v_A$,0 延伸至 $4\,v_A$,0；我们有意采用较粗的分辨率，仅使用 16^3 个网格单元。与 [53] 中的设置相比，首先，我们采用了不同的初始扰动，因为该文献未说明扰动的确切形式。其次，我们选择单 Harris 片构型，而不是 [53], 中的双 Harris 片设置；后者可能是为了简化所用半隐式PIC代码的边界条件。

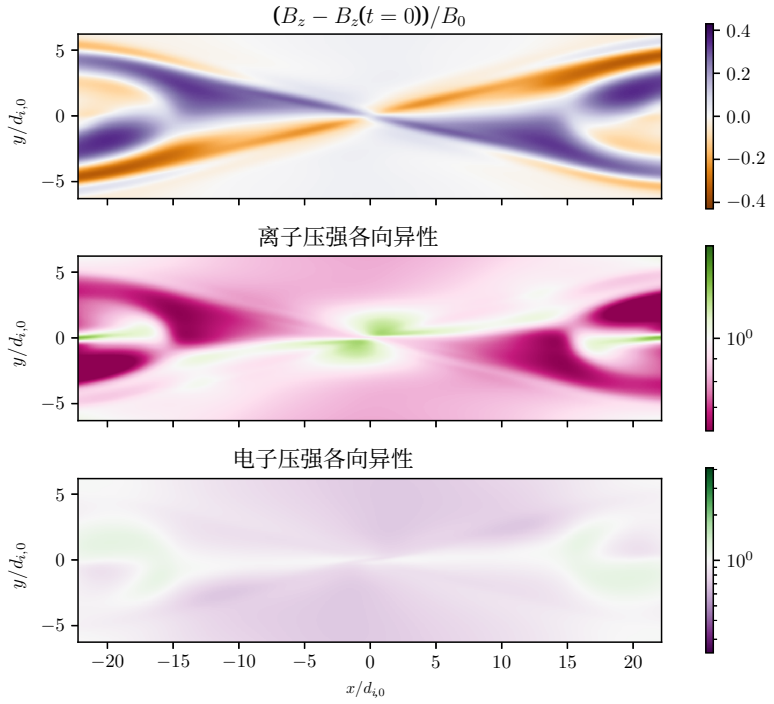


图 11：在 [53], state 下、$t = 180\,\Omega_{i\,0}^{-1}$ 进行的磁重联设置的混合十矩-Vlasov 模拟。图中展示了导引磁场相对于其初始值的偏差（上图），以及各物种的压力各向异性（中图和下图）。

由于*muphyII* 没有这类限制，我们倾向于采用标准的单电流片。

当然，所选质量比并未让混合模型充分发挥其潜力，而且空间分辨率也可以高得多。不过，为了能够直接与 [53] 中的结果及相应物理模型进行比较，我们希望采用相同的参数。这些物理模型包括标准混合模拟（代码 HVM）、前文提到的混合朗道流体模拟（代码 HVLF，是 HVM 的扩展），以及使用半隐式粒子模拟模型进行的全动理学模拟（代码 iPIC3D）。与这些模拟相比，我们在本节介绍的*muphyII*模拟计算成本极低，后文将对此进行说明。我们想简要阐述这些物理模型之间的差异。HVM 代码采用最常见的混合模型，其中电子流体为准中性，电子压强完全各向同性，并采用广义欧姆定律。HVLF 模型同样采用准中性和广义欧姆定律近似（包括电子惯性），但会演化回旋对称压强（即平行于和垂直于磁场的分量），并通过朗道流体闭合处理回旋对称热通量。相比之下，*muphyII* 混合模型采用十矩流体方程来描述

电子；这些方程演化完整的压力张量，并采用温度梯度热通量闭合来模拟朗道阻尼，同时使用完整的麦克斯韦方程组。因此，除了许多其他物理效应外，该模型还能自洽地捕捉电子惯性、电荷分离等离子体波和光波。所采用的热通量闭合是一种适用于无碰撞波阻尼的通用闭合，而 HVLF 中的闭合也考虑了磁场所规定的方向。因此，预计 HVLF 的流体闭合更适用于导向磁场重联（本节采用的设置），但无法用于导引场为零或接近零的重联（如前几节所示）。
iPIC3D 代码对电子和离子均采用全动理学模型，并使用完整的麦克斯韦方程组，因此能够描述所有物理过程，无需对热通量作出近似。在给定分辨率下，
iPIC3D 的隐式方法会消除电荷分离波，并使系统趋向准中性 [53]。

在图 11 中展示了三个量，可用于评估物理模型捕捉各向异性的能力：沿导引场˜方向的磁场（与初始值之差） $B_z = B_z(t) - B_z(t=0)$，以及离子和电子的压力各向异性 $P_\perp/P_\parallel$ 给出如下。

$$\frac{P_\perp}{P_\parallel} = \frac{\sum_{i,j\in\{x,y,z\}} P_{ij}(\delta_{ij} - b_i b_j)/2}{\sum_{i,j\in\{x,y,z\}} P_{ij} b_i b_j} \quad \text{where } b_i = B_i/|\mathbf{B}|, P_{ji} = P_{ij}$$

我们将 $mu\text{-}phyII$ 的混合十矩电子、Vlasov离子结果与 [53], 的图 3 和图 4 进行比较，这些图展示了由 HVM、HVLF 和 iPIC3D 代码生成的模拟数据。图 11 顶部面板中所示的 $B_z = B_z(t) - B_z(t=0)$空间结构的不对称性在很大程度上是由电子各向异性引起的，并且与 iPIC3D 的全动理学结果高度吻合，尤其是在流出区域的 Alfv´enic 前沿附近；在该区域，iPIC3D 与 HVLF物理模型之间存在一些差异。正如预期的那样，在 X 点附近，这种不对称性在 HVLF 模拟中表现得更为明显，因为该模拟采用了适用于导向磁场重联的热流闭合。另一方面，HVM模型产生的结果几乎是对称的，这与动理学研究结果形成了鲜明对比。

所有物理模型均显示出相似的离子压强各向异性。有趣的是，混合十矩电子$muphyII$模拟（图 11 中图）和 HVLF 模拟在阿尔芬外流中的离子压强各向异性值$P_{\perp,\ i}/P_{\parallel,\ i}$ 均高于 iPIC3D 模拟。究竟这是由 Vlasov 与隐式PIC方法之间的数值差异、混合模型与全动理学模型所包含的不同物理过程，还是仅仅由模拟状态不同所致，本文无法确定。

最后，我们来讨论电子压强各向异性。其图像与此前对导引场方向上磁场的分析所得出的结论十分吻合。混合十矩电子模拟中的电子压强各向异性整体结构（图 11 下图）与 iPIC3D 的结果不同。HVLF 在 X 点附近显然表现更好，预测的 $P_{\perp,e}/P_{\parallel,e}$ 值更低，这与全动理学模型的预测一致，并且

再现了导向磁场重联中通常观测到的电流片拉长现象。在阿尔芬前沿附近，情况则恰好相反：混合十阶矩电子模型（来自 $muphyII$ ）和动理学 iPIC3D 的结果中，$P_{\perp,e}/P_{\parallel,e} > 1$，但 HVLF 中并非如此。两项观察结果都在预料之中，因为 HVLM 电子闭合的回旋各向同性表述在磁场方向性很强的区域表现出色，而$muphyII$ 电子闭合则是基于非磁化极限发展而来，优势在于相应的低磁化度区域。

总而言之，结果表明，在这种导向磁场重联设置下，混合十矩电子、Vlasov离子物理模型的表现符合预期，尽管它完全没有针对该物理配置进行调优。更重要的是，$muphyII$ 混合模拟（仅使用八张 GPU 卡运行）的计算成本远低于 [53]中的模拟。主要原因是，矩匹配 Vlasov 求解器能够处理 16^3 网格单元的低速度空间分辨率。作为比较， [53] 中 HVM 和 HVLF 运行所采用的分辨率为 51^3 个速度空间网格单元，这会使自由度增加 32 倍，从而使求解 Vlasov 方程的计算量增加 32 倍；不过，如果物理模型的数值格式和时间步长要求不同，实际运行时间就不那么容易直接比较。尽管速度分辨率低得多，但高分辨率 HVM 和 HVLF 运行与低分辨率$muphyII$ 运行的离子结果在定性上并无重大差异，而这些差异无法归因于电子物理模型的不同。这也不足为奇，因为在经典 Vlasov 方法中，较高分辨率主要是出于数值方面的需要；自早期以来，PIC 代码便已成功采用低速度空间分辨率。由于矩匹配方法不依赖于$muphyII$的数值格式，并且可以移植到 HVM 和 HVLF 等其他实现中（前提是对二阶矩进行适当处理），我们预计这些物理模型也能从其较低的计算开销中受益。另一个影响性能的方面是，HVLF 物理模型中的热流闭合需要在傅里叶空间中进行计算；随着问题规模增大，这种计算的成本远高于$muphyII$所采用的局部闭合。

通过采用电子和麦克斯韦子循环以及矩匹配 Vlasov 求解器，在 $muphyII$ 中实现的新型混合模型，能够以极低的计算成本，描述无碰撞等离子体中细致的电子和电磁物理。

6. 结论

本文介绍了多物理场框架 $muphyII$ ，用于模拟空间与天体物理环境中的无碰撞等离子体。我们将成本相对较低的流体求解器与动理学 Vlasov 求解器进行接口耦合，并采用矩匹配方法、麦克斯韦方程组子循环以及电子子循环。因此，实现了对仅使用 Vlasov 求解器无法处理的空间区域进行模拟。此外，我们还

展示了矩匹配方法尤其有利于混合 Vlasov-流体物理模型。总之，该框架是实现从动理学尺度到磁流体力学（MHD）尺度整体模拟这一目标的重要一步。

在三维模拟中采用不同等离子体模型的耦合，其价值会更加突出。在三维情况下，根据具体物理问题的不同，能够由流体模型覆盖的空间区域可能远大于二维情况。$muphyII$ 已经用于三维十矩流体模拟 [32], ，并且代码完全支持三维耦合模拟，这是我们计划在未来加以利用的功能。在此过程中，矩匹配 Vlasov 求解器将发挥重要作用，因为它能够降低 Vlasov 方法在三维空间中固有的巨大内存需求。

扩展这一框架的未来路径相当明确。为了实现真正的多尺度/多物理场模拟，我们框架中最粗粒度的模型，即五矩/Maxwell 模型，需要与配备欧姆定律的 MHD 方程耦合，并结合自适应网格加密（AMR）进行扩展。目前，我们正在开展相关工作，将多物理场框架 $muphyII$ 与我们的多尺度框架 $racoon$ [36]结合起来。

此外，框架$muphyII$ 不仅允许实现更进一步、更复杂的细化判据，而且还需要这样做。设计这些判据（例如基于某种适当定义的残差）是此类模拟中的一项重大数学挑战，这不仅适用于等离子体物理。

代码可用性

$muphyII$ 代码可在 GitHub（https://github.com/muphy2-framework/muphy2）和 Zenodo（https://zenodo.org/doi/10.5281/zenodo.8061586）上获取。

致谢

我们衷心感谢 Gauss 超级计算中心协会（www.gauss-centre.eu）为本项目提供经费支持，并通过 John von Neumann 计算研究所（NIC）在 GCS 超级计算机 JUWELS [37] （位于 J¨ulich 超级计算中心，JSC）提供计算时间。本项目的计算工作在 JUWELS/JUWELS-booster 以及 TP1 等离子体研究部的 DaVinci 集群上完成。F.A. 得到了亥姆霍兹联合会（VH-NG-1239）的支持。M.D. 感谢德国科学基金会（DFG）通过研究团队“SNu-BIC”（DFG-FOR5409）提供的资助。R.G. 感谢德国科学基金会（DFG）在合作研究中心 SFB1491“宇宙相互作用物质——从源头到信号”框架内提供的支持。感谢 MMS 团队提供 MMS 科学数据中心（https://lasp.colorado.edu/mms/sdc/）中的测量数据，也感谢 pySPEDAS 软件（https://github.com/spedas/pyspedas）和 SpacePy 软件（https://spacepy.github.io/）的开发者。

参考文献

[1]I. B. Peng, S. Markidis, A. Vaivads, J. Vencels, J. Amaya, A. Divin, E. Laure, G. Lapenta, 《采用隐式粒子网格模拟形成磁层》, 《Procedia 计算机科学》51 (2015) 1178–1187, 国际计算科学会议 ICCS 2015。[2]S. von Alfthan, D. Pokhotelov, Y. Kempf, S. Hoilijoki, I. Honkonen, A. Sandroos, M. Palmroth, 《Vlasiator：首次全球混合 Vlasov 模拟地球弓激波前区和磁鞘》, 《大气与太阳-地球物理学杂志》120 (2014) 24–35。doi:https://doi.org/10.1016/j.jastp.2014.08.012。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/ S1364682614001916 [3] P. Degond, F. Deluzet, D. Doyen, 《准中性极限下 Vlasov–麦克斯韦系统的渐近保持型粒子网格法》, 《计算物理学杂志》330 (2017) 467–492。[4] T. P. Schulze, P. Smereka, W. E, 《耦合动力学蒙特卡罗与连续介质模型及其在外延生长中的应用》, 《计算物理学杂志》189 (1) (2003) 197–211。[5] P. Le Tallec, F. Mallinger, 《通过半通量耦合玻尔兹曼方程和 Navier–Stokes 方程》, J. Comput. Phys. 136 (1997) 51–67。[6] S. Tiwari, A. Klar, 《一种用于玻尔兹曼方程和欧拉方程的自适应区域分解程序》, J. Comput. Appl. Math. 90 (1998) 223–237。[7] A. Klar, H. Neunzert, J. Struckmeier, 《从动理学理论到宏观流体方程的转变：区域分解面临的问题及新算法的源泉》, Transport Theor. Stat. 29 (2000) 93–106。[8] P. Degond, G. Dimarce, L. Mieussens, 《一种可动态定位动理学效应的多尺度动理学-流体求解器》, J. Comput. Phys. 229 (2010) 4907–4933。[9] S. Dellacherie, 《原子蒸气同位素分离领域的动理学-流体耦合：单组分理想气体情形下的数值结果》, AIP Conf. Proc. 663 (2003) 947–956。[10] T. Goudon, S. Jin, J.-G. Liu, B. Yan, 《用于分散型两相流动理学-流体建模的渐近保持格式》, J. Comput. Phys. 246 (2013) 145–164。[11] S. Tiwari, A. Klar, S. Hardt, A. Donkov, 《气液两相流中玻尔兹曼方程与 Navier–Stokes 方程的耦合求解》, Comput. Fluids 71 (2013) 283–296。

[12] V. Kolobov, R. Arslanbekov, 《弱电离等离子体的自适应动理学-流体模拟》, 《计算物理学杂志》231 (3) (2012) 839–869。[13] T. Sugiyama, K. Kusano, 《通过磁流体力学模型与粒子网格动理学模型的交错耦合进行多尺度等离子体模拟》, J. Comput. Phys. 227 (2) (2007) 1340–1352。[14] S. Markidis, P. Henri, G. Lapenta, K. R¨onnmark, M. Hamrin, Z. Meliani, E. Laure, 《用于等离子体模拟的流体-动理学粒子网格方法》, 《计算物理学杂志》。[15]L. K. S. Daldorff, G. T´oth, T. I. Gombosi, G. Lapenta, J. Amaya, S. Markidis, J. U. Brackbill, 《全局霍尔磁流体力学模型与局部隐式粒子网格模型的双向耦合》, J. Comput. Phys. 268 (2014) 236–254。[16] K. Makwana, R. Keppens, G. Lapenta, 《磁流体力学模拟与嵌入式粒子网格模拟的双向耦合》, Computer Physics Communications 221 (2017) 81–94。[17] R. J. Walker, G. Lapenta, J. Berchem, M. El-Alaoui, D. Schriver, 《在磁层全局磁流体力学模拟中嵌入粒子网格模拟》, 等离子体物理学杂志 85 (2019) 905850109。[18] X. Wang, Y. Chen, G. T´oth, 《利用自适应嵌入式粒子网格模型进行全局磁流体力学磁层模拟》, 《地球物理研究杂志：空间物理学》127 (8) (2022) e2021JA030091。doi: https://doi.org/10.1029/2021JA030091。[19]X. Wang, Y. Chen, G. T´oth, 《磁层锯齿振荡模拟：磁尾动理学重联的作用》, Geophysical Research Letters 49 (15) (2022) e2022GL099638。doi:https: // doi.org/10.1029/2022GL099638。[20] Y. Shou, V. Tenishev, Y. Chen, G. Toth, N. Ganushkina, 《采用自适应嵌入式粒子网格模型的磁流体力学：Mhd-aepic》, 《计算物理学杂志》446 (2021) 110656。doi:https://doi.org/10.1016/j.jcp.2021.110656。[21] S. Markidis, V. Olshevsky, G. T´oth, Y. Chen, I. B. Peng, G. Lapenta, T. Gombosi, 《磁层中的动理学建模》, 美国地球物理联合会 (AGU), 2021, 第38章, 第607–615页。[22] M. Innocenti, G. Lapenta, S. Markidis, A. Beck, A. Vapirev, 《一种用于粒子网格等离子体模拟的多层多计算域方法》, 《计算物理学杂志》238 (2013) 115–140。[23] A. Ho, I. A. M. Datta, U. Shumlak, 《基于物理的自适应等离子体模型，用于高保真数值模拟》, 《物理学前沿》6 (2018) 105。

[24] K. Fujimoto, 《采用动态自适应网格的磁重联多尺度动理学模拟》, 《物理学前沿》6。[25]K. Papadakis, Y. Pfau-Kempf, U. Ganse, M. Battarbee, M. Alho, M. Grandin, M. Dubart, L. Turc, H. Zhou, K. Horaites, I. Zaitsev, G. Coz- zani, M. Bussov, E. Gordeev, F. Tesema, H. George, J. Suni, V. Tarvus, M. Palmroth, 《6D 混合 Vlasov 方案中的空间滤波：缓解自适应网格加密伪影——以 Vlasiator（版本 5.0、5.1 和 5.2.1）为例》, Geoscientific Model Development 15 (20) (2022) 7903– 7912。[26] H. Schmitz, R. Grauer, 《无碰撞磁重联的动理学 Vlasov 模拟》, 《等离子体物理》13 (9) (2006) 092309。doi:10.1063/1. 2347101。[27] H. Schmitz, R. Grauer, 《比较求解含磁场的 Vlasov 方程时的时间分裂法与回代法》, Comp. Phys. Comm. 175 (2006) 86。[28] H. Schmitz, R. Grauer, 《磁化等离子体的 Darwin-Vlasov 模拟》, J. Comput. Phys. 214 (2006) 738–756。[29] M. Rieke, T. Trost, R. Grauer, 《图形处理器上的耦合 Vlasov 和双流体代码》, 《计算物理学杂志》283 (2015) 436 – 452。doi:10.1016/j.jcp.2014.12.016。[30] S. Lautenbach, R. Grauer, 《无碰撞等离子体的多物理场模拟》, 《物理学前沿》6 (2018) 113。doi:10.3389/fphy.2018.00113。[31] J¨ülich 超级计算中心, 《JUWELS：J¨ülich 超级计算中心的模块化 Tier-0/1 超级计算机》, Journal of l arge-scale research facilities 5 (A135)。doi:10.17815/jlsrf-5-171。[32] F. Allmann-Rahn, S. Lautenbach, R. Grauer, R. D. Sydora, 《能够捕捉下混杂漂移不稳定性的三维重联流体模拟》, 等离子体物理学杂志 87 (1) (2021) 905870115。doi:10.1017/S0022377820001683。[33] F. Allmann-Rahn, S. Lautenbach, R. Grauer, 《可适应粗糙速度空间分辨率的能量守恒 Vlasov 求解器：MMS 重联事件模拟》, 《地球物理研究杂志：空间物理学》127 (2) (2022) e2021JA029976, e2021JA029976 2021JA029976。doi:https: // doi.org/10.1029/2021JA029976。[34]F. Allmann-Rahn, R. Grauer, K. Kormann, 《六维 Vlasov-麦克斯韦方程组的并行低秩求解器》, arXiv 预印本 (2022) arXiv:2201.03471。

[35]F. Allmann-Rahn、T. Trost、R. Grauer，流体模拟中无碰撞重联的温度梯度驱动的热通量闭合，《等离子体物理学杂志》84 (3) (2018) 905840307。doi:10.1017/ S002237781800048X。[36] J. Dreher、R. Grauer，Racoon：用于双曲守恒律的并行网格自适应框架，《并行计算》31 (2005) 913。[37] D. Alvarez，JUWELS集群与加速器：于于利希超级计算中心采用模块化超级计算架构的百亿亿次级先导系统 7 A183– A183。doi:10.17815/jlsrf-7-183。URL https://jlsrf.org/index.php/lsf/article/view/183[38] D. Groˇselj、S. S. Cerri、A. B. Navarro、C. Willmott、D. Told、N. F. Loureiro、F. Califano、F. Jenko，无碰撞等离子体湍流的全动理学与约化动理学建模，《天体物理学杂志》847 (1) (2017) 28。doi:10.3847/1538-4357/aa894d。[39] D. Groˇselj、A. Mallet、N. F. Loureiro、F. Jenko，三维动理学Alfv´en湍流的全动理学模拟，《物理评论快报》120 (2018) 105101。doi:10.1103/PhysRevLett.120.105101。URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.120.105101[40] C. Cheng、G. Knorr，构形空间中Vlasov方程的积分，《计算物理学杂志》22 (3) (1976) 330–351。doi:10. 1016/0021-9991(76)90053-X。[41] F. Filbet、E. Sonnendr¨ucker、P. Bertrand，Vlasov方程的守恒数值格式，《计算物理学杂志》172 (1) (2001) 166 – 187。doi:10.1006/jcph.2001.6818。[42] A. Kurganov、D. Levy，用于守恒律和对流扩散方程的三阶半离散中心格式，《SIAM科学计算杂志》22 (4) (2000) 1461–1488。doi:10.1137/S1064827599360236。[43] C.-W. Shu、S. Osher，本质无振荡激波捕捉格式的高效实现，《计算物理学杂志》77 (2) (1988) 439 – 471。doi:10.1016/0021-9991(88)90177-5。[44] J. Ng、A. Hakim、L. Wang、A. Bhattacharjee，一种用于重联和不稳定性的改进十矩闭合，《等离子体物理》27 (8) (2020) 082106。doi:10.1063/5.0012067。[45] L. Wang、A. H. Hakim、A. Bhattacharjee、K. Germaschewski，多流体矩模型与无碰撞磁重联的粒子网格模拟之比较，《等离子体物理》22 (1) (2015) 012108。doi:10.1063/1.4906063。

[46] T. Trost、S. Lautenbach、R. Grauer，通过与守恒流体模型耦合提升Vlasov代码的守恒性质，arXiv预印本 (2017) arXiv:1702.00367。[47]F. Valentini、P. Tr´avn´ıˇcek、F. Califano、P. Hellinger、A. Man- geney，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》225 (1) (2007) 753–770。doi:https: // doi.org/10.1016/j.jcp.2007.01.001。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/ S0021999107000022 [48]F. Valentini、S. Servidio、D. Perrone、F. Califano、W. H. Matthaeus、P. Veltri，等离子体二维湍流的混合Vlasov–Maxwell模拟，《等离子体物理》21 (8) (2014) 082307。arXiv:https: // doi.org/10.1063/1.4893301，doi:10.1063/1.4893301。URL https://doi.org/10.1063/1.4893301[49] M. Palmroth、U. Ganse、Y. Pfau-Kempf、M. Battarbee、L. Turc、T. Brito、M. Grandin、S. Hoilijoki、A. Sandroos、S. von Alfthan，空间物理学和天体物理学中的Vlasov方法，《计算天体物理学生活评论》4 (1) (2018) 1。doi:10.1007/s41115-018-0003-2。URL https://doi.org/10.1007/s41115-018-0003-2[50] H. Karimabadi、V. Roytershteyn、H. X. Vu、Y. A. Omelchenko、J. Scudder、W. Daughton、A. Dimmock、K. Nykyri、M. Wan、D. Sibeck、M. Tati- neni、A. Majumdar、B. Loring、B. Geveci，无碰撞等离子体中激波、湍流与磁重联之间的联系，《等离子体物理》21 (6) (2014) 062308。arXiv:https://doi.org/10.1063/1.4882875，doi:10.1063/1.4882875。URL https://doi.org/10.1063/1.4882875[51] L. Franci、P. Hellinger、M. Guarrasi、C. H. K. Chen、E. Papini、A. Verdini、L. Matteini、S. Landi，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》1031 (2018) 012002。doi:10.1088/1742-6596/1031/1/012002。URL https://doi.org/10.1088/1742-6596/1031/1/012002[52] A. Le、W. Daughton、H. Karimabadi、J. Egedal，采用动力学离子和流体电子压强各向异性的磁重联混合模拟，《等离子体物理》23 (3) (2016) 032114。doi:10.1063/1.4943893。[53] Finelli, F., Cerri, S. S., Califano, F., Pucci, F., Laveder, D., Lapenta, G., Passot, T.，通过Landau流体电子连接混合与全动力学模型——I. 二维磁重联，《天文学与天体物理学》653 (2021) A156。doi:10. 1051/0004-6361/202140279。URL https://doi.org/10.1051/0004-6361/202140279

[54] A. Stanier、L. Chac´on、A. Le, 《混合粒子-网格方案中由有限粒子尺寸导致的抵消问题》, 《计算物理学杂志》420 (2020) 109705。doi:https://doi.org/10.1016/j.jcp.2020.109705。URL https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/ S0021999120304794

[55] R. B. Torbert、J. L. Burch、T. D. Phan、M. Hesse、M. R. Argall、J. S hus- ter、R. E. Ergun、L. Alm、R. Nakamura、K. J. Genestreti、D. J. Gersh- man、W. R. Paterson、D. L. Turner、I. Cohen、B. L. Giles、C. J. Pol- lock、S. Wang、L.-J. Chen、J. E. Stawarz、J. P. Eastwood、K. J. Hwang、C. Farrugia、I. Dors、H. Vaith、C. Mouikis、A. Ardakani、B. H. Mauk、S. A. Fuselier、C. T. Russell、R. J. Strangeway、T. E. Moore、J. F. Drake、M. A. Shay、Y. V. Khotyaintsev、P.-A. Lindqvist、W. Baumjo- hann、F. D. Wilder、N. Ahmadi、J. C. Dorelli、L. A. Avanov、M. Oka、D. N. Baker、J. F. Fennell、J. B. Blake、A. N. Jaynes、O. Le Contel、S. M. Petrinec、B. Lavraud、Y. Saito, 《空间中对称磁重联期间扩散区的电子尺度动力学》, 《科学》362 (6421) (2018) 1391–1395。arXiv:https://science.sciencemag.org/content/ 362/6421/1391.full.pdf, doi:10.1126/science.aat2998。[56] T. K. M. Nakamura、K. J. Genestreti、Y.-H. Liu、R. Nakamura、W.-L. Teh、H. Hasegawa、W. Daughton、M. Hesse、R. B. Torbert、J. L. Burch、B. L. Giles, 《地球磁尾磁重联率的测量》, 《地球物理研究杂志：空间物理学》123 (11) (2018) 9150–9168。doi:10.1029/2018JA025713。[57]K. J. Genestreti、T. K. M. Nakamura、R. Nakamura、R. E. Denton、R. B. Torbert、J. L. Burch、F. Plaschke、S. A. Fuselier、R. E. Er- gun、B. L. Giles、C. T. Russell, 《MMS 2017年7月11日扩散区事件中重联率 EM 的测量准确度有多高？》, 《地球物理研究杂志：空间物理学》123 (11) (2018) 9130–9149。arXiv:https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/ pdf/10.1029/2018JA025711，doi:10.1029/2018JA025711。[58] A. Le、J. Egedal、O. Ohia、W. Daughton、H. Karimabadi、V. S. Lukin, 《磁重联中电子扩散区的状态》, 《物理评论快报》110 (2013) 135004。doi:10.1103/PhysRevLett.110.135004。URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.110.135004[59] P. A. Cassak、Y.-H. Liu、M. A. Shay, 《0.1重联率问题综述》, 等离子体物理学杂志83 (5) (2017) 715830501。doi: 10.1017/S0022377817000666。