



中国科学院大学
University of Chinese Academy of Sciences

博士学位论文

等离子体物理中保结构算法的设计与分析

作者姓名: 史言言

指导教师: 孙雅娟 研究员

中国科学院数学与系统科学研究院

学位类别: 理学博士

学科专业: 计算数学

培养单位: 中国科学院数学与系统科学研究院

2021 年 5 月

Construction and Analysis of Geometric Integrators
for Plasma Physics

A dissertation submitted to the
University of Chinese Academy of Sciences
in partial fulfillment of the requirement
for the degree of
Doctor of Philosophy
in Computational Mathematics

By

Shi Yanyan

Supervisor: Professor Sun Yajuan

Academy of Mathematics and Systems Science
Chinese Academy of Sciences

May, 2021

中国科学院大学 学位论文原创性声明

本人郑重声明：所提交的学位论文是本人在导师的指导下独立进行研究工作所取得的成果。尽我所知，除文中已经注明引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的研究成果。对论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明或致谢。本人完全意识到本声明的法律结果由本人承担。

作者签名：

日 期：

中国科学院大学 学位论文授权使用声明

本人完全了解并同意遵守中国科学院大学有关保存和使用学位论文的规定，即中国科学院大学有权保留送交学位论文的副本，允许该论文被查阅，可以按照学术研究公开原则和保护知识产权的原则公布该论文的全部或部分内容，可以采用影印、缩印或其他复制手段保存、汇编本学位论文。

涉密及延迟公开的学位论文在解密或延迟期后适用本声明。

作者签名：

日 期：

导师签名：

日 期：

摘要

在等离子体物理中,有很多重要的数学模型,对其进行算法构造和数值分析是当今的一个研究热点,近年来吸引了越来越多学者的关注.由于等离子体物理模型的多尺度效应,为了长时间准确地模拟等离子体的运动,需构造高效且具有长时间稳定性的数值方法.本论文主要研究了等离子体物理中的单粒子模型、强磁场模型和 Vlasov–Poisson–Fokker–Planck (VPFP) 方程的几何结构,构造了相应的保结构算法,并分析了算法的收敛性和长时间动力学行为.

对于单粒子模型,基于系统的典则辛结构,通过构造步长函数设计了变步长辛算法,并模拟了 Penning 阱中的单粒子以及托卡马克装置中逃逸电子的动力学行为.在模拟带电粒子运动时,步长函数的引入可以实现在每个回旋周期内均匀选取离散点,这既保证了算法的精确性又大大地提高了计算效率.数值实验展示了在各种形式的电磁场下,所构造的算法均具有长时间的稳定性以及高效性.

强磁场下的单粒子模型本质上是一个高振荡哈密顿系统,但高振荡问题对数值算法步长的限制导致了辛算法的优越性对该类问题已经失效.本论文利用系统的拉格朗日结构构造了带滤子的变分格式.基于 Modulated Fourier 展开方法,证明了新构造的算法在各个时间尺度下均具有令人满意的动力学行为.同时对经典的 Boris 算法和变分算法进行了理论分析,提出了可以通过修正初始速度来克服数值解的高振荡现象的方案.

研究了一类切触动力系统,它可以被看做是哈密顿系统的推广.通过研究切触生成函数理论,构造了相应的保持系统切触结构的数值算法,并应用于对 VPFP 方程时间离散方法的构造.对 VPFP 方程,采用粒子离散方法,则对应的粒子运动方程为一个具有切触结构的随机微分方程.基于分裂方法,构造了具有一阶和二阶弱收敛精度的两种随机切触算法,并模拟了等离子物理中一些常见的不稳定性现象,数值实验结果验证了算法的准确性和长时间稳定性.

关键词: 单粒子模型, 强磁场, VPFP 方程, 变步长辛算法, Modulated Fourier 展开, 滤子变分格式, 切触动力系统, 生成函数, 切触算法

Abstract

Developing algorithms for solving mathematical models in plasma physics has become a crucial way to investigate physical phenomena. Due to the multi-scale nature of these systems, it is significant to construct numerical methods with long-term stability and high computational efficiency. In this thesis, our major contributions are to construct and analyze the geometric numerical integrators for solving the plasma physics problems.

For the single charged particle dynamics, symplectic methods with adaptive time steps are constructed. With specifically designed step size functions, the motion of charged particles confined in a Penning trap under three different magnetic fields is studied, and also the dynamics of runaway electrons in tokamaks is investigated. As the step size function is adjusted according to particle's gyro-period, the numerical solutions can be computed uniformly for each gyro-period. The numerical experiments are performed to show the efficiency of the newly derived adaptive symplectic methods.

It is also important to consider the plasma problems under strong magnetic field. In this case, the charged particles usually exhibit very fast rotations with cyclotron period. Classical numerical integrators such as splitting or finite-difference schemes applied to these problems thus require time steps smaller than the cyclotron period in order to capture accurately the dynamics. In this thesis, a new filtered variational integrator is proposed and applied to solve the motion equations of charged particles in a non-uniform strong magnetic field with step sizes much larger than the period of the Larmor rotations. Using modulated Fourier expansions, it is investigated that the new filtered variational integrator with non-resonant large step sizes reproduces the characteristic features well over all time scales. In comparison, the Boris algorithm and the standard variational integrator in literature can obtain the satisfactory behaviour only when the component of the initial velocity orthogonal to the magnetic field is filtered out.

It is known that the contact Hamiltonian dynamics has been used already in the study of dissipative systems and in the thermodynamics. In this thesis, two contact in-

tegrators based on generating functions are proposed and analyzed. Furthermore, for the Vlasov–Poisson–Fokker–Planck system the stochastic particle-in-cell (PIC) contact discretizations are presented. In this case, the motion of charged particles satisfies the Langevin equation whose deterministic part possesses a contact structure. Two stochastic contact schemes of weak order 1 and 2 for Langevin equation are obtained via splitting methods. Some numerical examples are given to verify the efficiency and long-term stability of the proposed algorithms.

Keywords: Charged particle dynamics, strong magnetic field, VPF system, adaptive symplectic method, modulated Fourier expansion, filtered variational integrator, contact Hamiltonian dynamics, generating functions, contact integrator

目 录

第 1 章 引言	1
1.1 研究背景	1
1.2 研究现状	2
1.3 论文创新点与结构	4
第 2 章 预备知识	7
2.1 等离子体中的单粒子模型	7
2.2 Modulated Fourier 展开方法	10
2.3 切触哈密顿系统	14
第 3 章 单粒子模型的变步长辛算法	19
3.1 单粒子系统的性质	19
3.2 变步长辛算法	22
3.3 数值实验	25
3.4 本章小结	35
第 4 章 强磁场下单粒子模型的保结构算法	37
4.1 强磁场单粒子模型的多尺度行为	37
4.2 数值方法	39
4.3 精确解和数值解的 Modulated Fourier 展开	42
4.3.1 精确解的 Modulated Fourier 展开	42
4.3.2 Boris 算法及标准变分算法的 Modulated Fourier 展开	44
4.3.3 滤子变分格式的 Modulated Fourier 展开	46
4.4 数值解在不同时间尺度下的分析	49
4.4.1 时间尺度 ϵ^0 : 位置和平行速度的误差	49
4.4.2 时间尺度 ϵ^{-1} : 垂直方向漂移	50
4.4.3 长时间能量和磁矩的近似保持	55
4.5 本章小节	64
第 5 章 切触算法及其在 Fokker–Planck 方程中的应用	65
5.1 基于生成函数的切触算法	65
5.2 Vlasov–Poisson–Fokker–Planck 系统	71
5.3 随机切触粒子方法	75
5.4 数值实验	85
5.5 本章小节	95

第 6 章 总结与展望	97
附录 A	99
A.1 无量纲化方式	99
A.2 第三类切触系统的生成函数	99
A.3 插值函数	100
A.4 随机切触算法	101
参考文献	103
作者简历及攻读学位期间发表的学术论文与研究成果	111
致谢	113

图形列表

2.1 托卡马克几何位形截面图	9
3.1 时间坐标 t 和 τ 下的步长对应.	23
3.2 变步长辛算法的向后误差估计示意图.	24
3.3 均匀磁场下带电粒子在 Penning 阱中的运动轨迹. (a) 定步长隐中点. (b) 变步长隐中点.	26
3.4 非均匀磁场下带电粒子在 Penning 阱中的运动轨迹. (a) 定步长隐中点. (b) 变步长隐中点.	26
3.5 非均匀磁场下系统哈密顿量的相对误差 ($\Delta t = \Delta\tau/B = 0.05/B$).	27
3.6 非均匀磁场下系统磁矩的绝对误差 ($\Delta t = \Delta\tau/B = 0.05/B$).	27
3.7 非均匀磁场下变步长和定步长的计算效率比较 ($T = 100$).	28
3.8 非对称磁场下带电粒子在 Penning 阱中的运动轨迹. (a) 定步长隐中点. (b) 变步长隐中点.	28
3.9 非对称磁场下哈密顿量相对误差. 红色代表定步长算法, 其中步长为 $\Delta t = 0.012$, 蓝色代表变步长算法, 其中 $\Delta t = \Delta\tau/B = 0.012/B$	29
3.10 非对称磁场下的磁矩绝对误差. 红色代表定步长算法, 其中步长为 $\Delta t = 0.012$, 蓝色代表变步长算法, 其中 $\Delta t = \Delta\tau/B = 0.012/B$	29
3.11 非对称磁场下定步长与变步长的计算效率比较 ($T = 100$).	30
3.12 非对称磁场下实际步长 Δt 的变化 ($\Delta\tau = 1.98$).	31
3.13 非对称磁场下相对能量误差 ($\Delta t = \Delta\tau/B = 1.98/B$).	31
3.14 非对称磁场下绝对磁矩误差 ($\Delta t = \Delta\tau/B = 1.98/B$).	32
3.15 逃逸电子在均匀磁场下第一个和最后一个回旋周期内的运动 ($T =$ 1000). (a) 和 (b): 定步长 Gauss 算法. (c) 和 (d): 变步长 Gauss 算法. .	32
3.16 变步长中点格式和变步长 Gauss 算法的相对能量误差 ($\Delta t = \Delta\tau\gamma/B =$ $0.06\gamma/B$).	33
3.17 托卡马克中单个逃逸电子的相对能量误差 ($\Delta t = \Delta\tau\gamma/B = 0.8\gamma/B,$ $E_0 = -2, B_0 = -5.3$).	34
3.18 逃逸电子运动的能量误差 vs. 迭代步数. 终止时间 $T = 2 \cdot 10^6,$ $B_0 = 5.3, E_0 = 200$, 初始位置 $\mathbf{x}_0 = [23296.7, 0, 0]^T$, 初始动量 $\mathbf{p}_0 = [3.3875, 165.0318, -1831.295]^T$	34
3.19 托卡马克中逃逸电子极向截面密度随时间演化. (a) (d) $T = 0$, (b) (e) $T = 2 \cdot 10^{10}$, (c) (f) $T = 5 \cdot 10^{10}$	35
4.1 (a) $t \leq \pi/2$ 内粒子的运动轨迹. (b) $t \leq 5/\epsilon$ 内粒子的运动轨迹. (c) $t \leq \epsilon^{-4}$ 内能量和磁矩随时间的演化.	38

4.2 全局误差 vs. ε ($\varepsilon = 1/2^j, j = 6, \dots, 17$). (a) Boris 算法采用初值 $x(0), v(0)$. (b) Boris 算法采用修正初始速度 (4.9). (c) 加滤子变分格式采用初值 $x(0), v(0)$. 步长均取为 $h = 10^{-2}$	51
4.3 在时间段 $t \leq 5/\varepsilon$ 内投影在垂直于磁场平面的粒子轨迹. (a) Boris 算法采用初值 $x(0), v(0)$. (b) Boris 算法采用修正初始速度 (4.9). (c) 加滤子变分格式采用初值 $x(0), v(0)$. 步长均取为 $h = 10^{-2}$	55
4.4 能量误差 $H(x_n, v_n) - H(x_0, v_0)$ 随时间的演化. 上: Boris 算法. 中: 变分格式. 下: 滤子变分格式. ($\varepsilon = 10^{-4}, h = 10^{-2}$).	62
4.5 磁矩误差 $I(x_n, v_n) - I(x_0, v_0)$ 随时间的演化. 上: Boris 算法. 中: 变分格式. 下: 滤子变分格式. ($\varepsilon = 10^{-4}, h = 10^{-2}$).	63
4.6 磁矩 $I(x_n, v_n)$ 随时间的演化. 上: Boris 算法取修正初值 (4.9). 下: 变分格式取修正初值 (4.9) ($\varepsilon = 10^{-4}, h = 10^{-2}$).	63
4.7 能量误差 $H(x_n, v_n) - H(x_0, v_0)$ 随时间的演化. 上: Boris 算法取修正初值 (4.9). 下: 变分格式取修正初值 (4.9) ($\varepsilon = 10^{-4}, h = 10^{-2}$).	64
5.1 左: 切触算法. 右: Euler 格式. ($h = 0.01, T = 100$).	71
5.2 Ψ_h^1 和 Ψ_h^2 的弱收敛阶 ($\beta = \sigma = 0.01$). 左: x 的数值误差; 右: v 的数值误差.	86
5.3 三种不同初值所得的时间平均 $\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbb{E}[H(\mathbf{X}_n, \mathbf{V}_n)]$ 函数.	86
5.4 电场振幅随时间的变化.	87
5.5 线性朗道阻尼: 相对能量误差 $ \mathcal{E} - \mathcal{E}_0 /\mathcal{E}_0$ 和动量 \mathcal{M} 随时间的变化.	88
5.6 双流不稳定性: 分布函数在不同时刻的等高线图 ($\sigma = \beta = 1.25 \cdot 10^{-5}$). (a) $t = 0$. (b) $t = 10$. (c) $t = 20$. (d) $t = 30$	88
5.7 双流不稳定: 能量随时间的变化. (实线: $\Delta x = L/64, \Delta v = 2v_{\max}/64, \Delta t = 0.01$; 虚线: $\Delta x = L/128, \Delta v = 2v_{\max}/128, \Delta t = 0.005$).	89
5.8 双流不稳定: 动量随时间的变化.	89
5.9 双流不稳定性: 分布函数在 $t = 20$ 的等高线图. (a) $\beta = \sigma = 0$; (b) $\beta = \sigma = 1.25 \cdot 10^{-5}$	90
5.10 双流不稳定: 不考虑碰撞时能量相对误差随时间的变化.	90
5.11 双流不稳定: 不考虑碰撞时动量绝对误差随时间的变化.	91
5.12 尾隆不稳定性: 分布函数在不同时刻的等高线图 ($\sigma = \beta = 2.5 \cdot 10^{-4}$). (a) $t = 0$; (b) $t = 40$	91
5.13 尾隆不稳定性: 分布函数在 $t = 40$ 时无碰撞和有碰撞的等高线图. (a) $\sigma = \beta = 0$; (b) $\sigma = \beta = 2.5 \cdot 10^{-3}$	92
5.14 尾隆不稳定性: 能量误差随时间的变化.	92
5.15 尾隆不稳定性: 动量误差随时间的变化.	93
5.16 尾隆不稳定性: 能量随时间的变化. 实线: $\Delta x = L/160, \Delta v = 2v_{\max}/128, \Delta t = 0.05$; 虚线: $\Delta x = L/320, \Delta v = 2v_{\max}/256, \Delta t = 0.025$	93

5.17 尾隆不稳定性: 动量随时间变化.	93
5.18 Diocotron 不稳定性: 密度函数 ρ 在 $t = 15$ 时刻的等高线图 ($\sigma = \beta = 0$), 其中四幅图分别为 $l = 3, 4, 5, 6$	94
5.19 Diocotron 不稳定性: 密度函数 ρ 的等高线图. (a): $t = 10, \beta = \sigma = 0$. (b): $t = 10, \beta = \sigma = 10^{-3}$. (c) $t = 20, \beta = \sigma = 0$. (d): $t = 20, \beta = \sigma = 10^{-3}$	95
A.1 插值核函数.	100

表格列表

3.1 4 阶 Gauss 方法的系数.	30
3.2 不同回旋周期内定步长和变步长 Gauss 算法的迭代步数.	33
A.1 物理量的无量纲化方式. m_0 为粒子静止质量, e 为元电荷, c 为真空中的光速 B_0 为给定参考磁场强度 ($m_0 = 9.1 \times 10^{-31}$, $e = 1.6 \times 10^{-19}$, $c = 3.0 \times 10^8$).	99

第 1 章 引言

1.1 研究背景

动力系统可以用来描述物理现象随时间演变的动力学行为，是非线性科学研究的重要组成部分。不同于线性系统，除特殊情形外，对于给定初值很难求出动力系统的精确解 [1]。因此通过近似方法得到满足一定精度的近似解是研究动力系统的重要手段。常用的近似方法有两类：一类被称为近似解析方法，如级数解法，逐次逼近法等；另一类被称为数值解法。由于计算机的发展和普及，后一种方法在动力系统的研究中应用更为广泛。

对动力系统通过数值格式进行近似，其数值解可理解为满足一个离散的动力系统。从这个意义上看，很自然地要求动力系统的离散可以和连续系统在同一框架中进行。因此，在进行数值模拟时，数值算法的构造应遵循的基本原则是数值算法应尽可能多地保持原系统的本质特征 [2-4]。而传统的数值方法，例如，Euler 方法、Runge-Kutta 方法等，由于算法没有考虑动力系统本身的结构特点，进行长时间计算后会产生较大的误差。保结构算法 (Structure-preserving algorithms) 也称几何数值积分 (Geometric numerical integrators) [5]，是指能够保持系统内在几何结构特征的数值方法。与传统算法相比，保结构算法具有长时间稳定性。根据动力系统本身的几何特性，相应的保结构算法有辛算法、保体积算法、泊松算法、保首次积分算法、保切触结构算法、保酉结构算法等 [6-8]。其中，辛算法是基于哈密顿系统的辛结构而构造的保结构算法，它对于哈密顿系统长时间演化行为的数值模拟具有重要作用。

迄今为止，保结构算法已经被广泛应用于许多自然学科的研究中，例如天体力学、分子动力学、结构生物学等，其中一个重要的应用就是在等离子体物理中的应用。等离子体是由大量带电粒子组成的非束缚状态宏观体系，它和气体、液体、固体一起构成了自然界物质在同一层次上的四大基本形态 [9]。对等离子体的研究始于气体放电现象的探索，从 20 世纪 30 年代起，由于磁流体力学以及等离子体动理学理论逐步完成，人们对等离子体有了更进一步的认识。能源问题是当前人类面临的重要问题之一，而磁约束核聚变为解决这一问题提供了可能。

在等离子体物理的研究中，一类重要的问题就是考虑带电粒子在电磁场作

用下的动力学行为. 描述带电粒子运动常见的数学模型包括单粒子模型, 动理学模型, 和磁流体模型等.

1. 粒子描述

当带电粒子的运动对原系统的电磁场产生的影响可以忽略不计时, 我们可以假设电磁场是给定的. 在这种情形下, 带电粒子的运动满足 Newton–Lorentz 方程

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}),$$

其中 m , e , \mathbf{x} 和 $\dot{\mathbf{x}}$ 分别表示粒子质量、电荷、位置和速度, \mathbf{E} 和 \mathbf{B} 分别表示电场和磁场.

2. 动理学描述

为了研究等离子体的宏观效应, 需要考虑带电粒子运动产生的自洽场, 因此通常采用 Vlasov 方程和 Maxwell 方程耦合的动理学系统来描述大量带电粒子的运动, 其中 Vlasov 方程为

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f + \frac{e}{m}(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla f = C(f),$$

f 表示粒子的分布函数, $C(f)$ 代表碰撞项. 针对不同的研究对象, 可以对碰撞项作不同的假设, 从而得到各种简化模型.

3. 磁流体力学描述

当带电粒子运动的特征长度远大于粒子的平均自由程, 特征时间远大于带电粒子的平均碰撞时间时, 等离子体可以看成磁流体. 此时可以用密度、速度和温度来描述等离子体的运动, 而这些宏观量可以从动理学方程的各阶矩方程来求得 [10].

1.2 研究现状

由于等离子体物理问题具有多尺度的特点, 为了研究带电粒子的动力学行为通常需要长时间的数值模拟. 例如为了准确模拟逃逸电子的动力学行为, 通常需要至少 10^{11} 的迭代步数. 而传统的数值方法, 例如 Runge–Kutta 方法, 由于误差的积累会导致长时间计算后的数值结果面目全非. 不同于传统的数值方法, 几何数值算法由于能够保持系统的结构从而保证了系统的守恒量, 如能量、动量、

电荷等的误差在长时间内保持有界, 因此保证了数值模拟长时间的稳定性. 在对磁化等离子体的研究中, 带电粒子在电磁场作用下的运动是最为基本的物理过程, 许多重要的物理现象均可以通过分析满足 Lorentz 力下的单粒子方程来理解. 近年来, 针对单粒子模型的保结构算法主要包括 (变分) 辛算法 [11–15], 保体积算法 [16–18], 保 Poisson 结构的算法 [19, 20] 等. 这些算法由于保持了系统的结构特征, 具有长时间计算的优越性. 传统的辛算法在应用于单粒子模型时, 由于系统的哈密顿函数不可分, 所以一般而言是隐式的. 文献 [13, 14, 20] 中提出了一些显式辛格式或保体积格式, 但这些算法通常需要分裂或者坐标变换等技巧进行特殊构造. 上述保结构算法只能使用固定的步长进行计算, 然而在具体的数值模拟时, 对于某些物理过程必须采用比较小的步长才能准确刻画, 这就带来了庞大的计算量. 因此, 在保持系统结构的前提下, 构造能够自适应调节步长的算法具有重要意义.

在实际的磁约束装置中, 外加磁场非常强, 这对单粒子系统带来了一个新的时间尺度 (Larmor 回旋). 在这种情形下, 由于强磁场效应带电粒子会被约束在磁感线附近, 在垂直于磁场方向做快速的回旋运动, 因而方程的解在时间上表现出高振荡行为. 当采用经典的数值方法例如分裂算法、差分方法等模拟该问题时, 只有当步长小于回旋周期时才能准确地刻画带电粒子的动力学行为. 而如何突破对步长的限制是高振荡系统算法构造的重要问题. 近期, 有一系列工作致力于构造和分析针对强磁场模型的数值格式, 如文献 [21, 22] 构造了求解高振荡 Vlasov 方程的指数方法; 文献 [23–28] 在不同的磁场假设下构造了一系列渐近保持格式; 文献 [29–33] 构造了一致精确格式, 其计算量与振荡频率无关. 这些算法均可以采用大于回旋周期的步长进行计算, 保证准确性的同时显著提高了计算效率. 但目前对于这些算法的长时间行为, 例如能量保持、磁矩保持的分析方面仍为空白. 另外, 借助 Modulated Fourier 展开 [5], 文献 [34, 35] 分析了强磁场下单粒子模型的连续解以及数值解的长时间行为, 但证明过程中要求步长小于回旋周期. 因此, 对于强磁场单粒子模型, 构造既能采用大步长又保持系统结构的数值方法具有重要意义.

描述等离子体的集体行为时需要考虑动理学模型, 关于该模型的数值方法主要有两大类: 粒子方法 (PIC) [36–39] 和基于网格的方法. 其中粒子方法计算量小, 适用于高维问题的大规模数值模拟, 但是该方法会产生数值噪音. 与粒子

方法相比基于网格的方法不会产生数值噪音, 但基于网格的方法的计算量非常大, 特别是对于高维问题. 常见的基于网格的算法包括有限体积方法 [40]、有限元方法 [41, 42]、谱方法 [43]、半拉格朗日方法 [44]、矩方法 [45, 46] 等. 对于 **Vlasov–Maxwell** 方程, 文献 [38, 47–49] 构造了全离散保结构的粒子方法. 当考虑带电粒子的碰撞效应时, 需要在模型中引入碰撞项, 根据物理问题的需要常见的碰撞项包括 **Fokker–Planck** 碰撞、**Lorentz** 碰撞、**Lenard–Bernstein** 碰撞、**Coulomb** 碰撞、**Landau** 碰撞等 [50–54]. 对于带碰撞项的动理学方程的计算也可以采用粒子方法 [52, 54–56] 或者基于网格的方法 [57–59]. 对于强磁场下带碰撞的动理学方程, 文献 [60–62] 构造了渐近保持格式. 由于带碰撞的动理学系统结构更为复杂, 目前只有极少数工作针对具体的碰撞算子构造了保结构算法, 例如文献 [52] 针对 **Landau** 碰撞, 构造了保持 **metriplectic** 结构的数值算法. 因此, 针对带碰撞的动理学方程, 如何寻找系统的几何结构并构造相应的保结构算法是现在的一个研究难点.

1.3 论文创新点与结构

本论文的创新点主要有: (1) 对于单粒子模型, 结合系统的几何结构以及带电粒子的运动特点, 通过提出特殊的步长函数构造了一类变步长辛算法. 该类算法不但可以应用于非相对论情形, 同样可以应用于相对论情形. 特别对于磁约束核聚变中非常重要的逃逸电子的模拟问题具有显著的优越性. 由于所提出的步长函数可以保证在带电粒子的每个回旋周期内采用一致数目的离散点进行刻画, 从而克服了由于逃逸电子回旋周期随时间变大而带来的计算时间过长的问題, 这极大地提高了计算效率. 并且由于算法的长时间稳定性, 有助于人们了解逃逸电子的长时间运动行为; (2) 在强磁场下带电粒子的运动由于具有高振荡行为, 从而导致了在应用传统数值算法时对步长有很强的限制. 结合方程的结构特点, 我们通过引进滤子函数并利用 **Lagrange** 变分理论构造了滤子变分格式, 在应用该算法时, 可以采用远大于回旋周期的步长. 基于 **Modulated Fourier** 展开方法, 在不同时间尺度下对连续解和数值解进行了分析, 给出了数值格式的误差估计并分析了对能量和磁矩长时间的保持. 此外, 对于经典的 **Boris** 算法和变分算法, 我们发现只需要对初始速度进行修正便可大大改进算法在强磁场下的数值表现; (3) 切触哈密顿系统与齐次哈密顿系统具有理论上的联系, 冯

康通过齐次辛算法构造了切触算法并给出了相应的生成函数理论. 我们这里直接从切触哈密顿系统出发, 基于切触映射的定义, 发展了针对切触系统的生成函数理论, 建立了切触哈密顿系统与推广的 **Hamilton–Jacobi** 方程之间的联系. 基于我们给出的生成函数理论, 构造了保切触结构的算法, 并将该算法应用于 **Vlasov–Poisson–Fokker–Planck** 方程的求解中.

本论文的组织结构如下:

第二章介绍了本论文所需的预备知识, 主要包括对单粒子模型几种等价形式的描述和相应的几何结构, 用于分析高振荡问题的 **Modulated Fourier** 展开技巧, 以及切触动力系统和切触算法的相关基本概念.

在第三章中, 基于单粒子系统的哈密顿结构, 我们构造了变步长辛算法. 其中步长函数的构造与带电粒子的回旋周期有关, 可应用于非相对论和相对论两种情形. 具体地, 对于非相对论情形, 我们模拟了 **Penning** 阱中带电粒子的运动. 对于三种不同类型的磁场, 数值结果显示了算法均能够在长时间内保持系统能量和磁矩的误差有界. 通过计算定步长和变步长方法在达到同等误差时所需的迭代步数, 比较了两种策略的计算效率. 结果显示, 应用变步长算法进行计算所需的迭代步数更少, 从而消耗时间更少. 在磁约束核聚变问题中, 托卡马克装置里会有一类带电粒子持续被加速, 从而接近于光速并且具有极高的能量, 这类带电粒子被称为逃逸电子. 对逃逸电子的模拟需要考虑相对论效应, 在该情形下, 我们通过模拟大量粒子的分布随时间的演化展示了逃逸电子的长时间集体行为. 数值结果显示, 变步长辛算法具有长时间稳定性且明显高效于定步长算法.

在第四章中, 我们考虑了强磁场下的单粒子模型, 此时系统的解具有高振荡行为. 基于系统的 **Lagrangian** 结构, 通过引进滤子函数, 我们为此类问题构造了一种滤子变分格式, 并模拟了带电粒子在不同时间尺度下的运动, 分析了带电粒子的 **Larmor** 回旋、导心运动及其在磁场作用下的缓慢漂移等动力学行为. 利用 **Modulated Fourier** 展开技巧, 对经典的 **Boris** 算法, 变分格式以及新提出的滤子变分格式进行了分析, 并给出了当步长远大于回旋周期时的数值解的误差阶以及能量和磁矩长时间的误差估计. 分析结果显示, 对于大步长情形, 为了得到令人满意的数值结果, 在应用 **Boris** 算法和变分格式时需要对初始速度进行修正. 而与之相比, 新提出的滤子变分格式直接采用给定的初值, 便可以比较准确的刻画带电粒子在不同时间尺度下的运动.

在第五章中, 我们研究了切触哈密顿系统, 由于它与锥形哈密顿系统的联系, 它可以被理解为哈密顿系统的推广. 通过建立切触生成函数理论, 我们构造了相应的保持系统切触结构的数值算法. 并应用于 **Vlasov–Poisson–Fokker–Planck (VPFP)** 方程时间离散方法的构造中, 该方程在 **Vlasov–Poisson** 方程的基础上引入 **Fokker–Planck** 算子, 可以用来描述带电粒子之间的碰撞行为. 在本章中, 我们采用粒子方法 (**PIC**) 对 **VPFP** 方程进行离散. 与无碰撞模型相比, 带电粒子随时间的演化满足一个随机微分方程, 其中方程的确定部分具有切触结构. 通过分裂方法我们构造了两种随机切触算法, 并证明了该类算法分别具有弱一阶和弱二阶精度. 结合求解 **Poisson** 方程的谱方法, 我们模拟了等离子体物理中几种常见的不稳定性现象, 并验证了数值算法的优越性.

第六章是本文的总结与展望.

第 2 章 预备知识

本章主要介绍本论文所需的基础知识. 单粒子模型是等离子物理中的基本模型, 在 2.1 节中, 我们介绍了它的几种等价形式; 在 2.2 节中, 我们介绍了用于分析高振荡问题的一类重要工具——Modulated Fourier 展开方法, 该方法可以用来分析连续系统的性质以及数值解的长时间行为. 在 2.3 节中, 我们介绍了切触动力系统的相关概念以及性质, 并且介绍了保切触结构算法的相关知识.

2.1 等离子体中的单粒子模型

描述等离子体的动力学行为有三种常用的模型, 分别是单粒子轨道模型、流体模型以及动理学模型. 在本节中, 我们介绍最简单、最基本的模型——单粒子轨道模型. 假设带电粒子的运动对原系统电磁场产生的影响可以忽略不计, 这时可以认为带电粒子是在给定电磁场中进行运动.

考虑一个带电粒子, 电荷为 e , 粒子质量可表示为 $m = m_0\gamma$, m_0 为静止质量, 其中 $\gamma = 1/\sqrt{1 - \|\dot{\mathbf{x}}\|^2/c^2}$ 为洛伦兹因子, c 为真空中的光速. 记 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ 为带电粒子的位置, \mathbf{E} 和 \mathbf{B} 分别为电场和磁场. 在给定电磁场的作用下, 该粒子的运动可以由 Newton–Lorentz 方程

$$\frac{d}{dt}(m\dot{\mathbf{x}}) = \mathbf{F}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = e(\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) + \dot{\mathbf{x}} \times \mathbf{B}(\mathbf{x}, t)) \quad (2.1)$$

来描述, 其中 \mathbf{F} 表示粒子所受的洛伦兹力. 引入电势 $\varphi(\mathbf{x}, t)$ 和磁势 $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$, 电场和磁场可以表示为 $\mathbf{E} = -\nabla\varphi(\mathbf{x}, t) - \frac{\partial\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)}{\partial t}$, $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ [63].¹ 当粒子的速度远小于真空中的光速时, 即 $\|\dot{\mathbf{x}}\|/c \rightarrow 0$ 时, 则方程 (2.1) 可以模拟非相对论情形下的带电粒子运动. 在本文中, 我们假定电磁场为静电磁场, 即 $\mathbf{E} = -\nabla\varphi(\mathbf{x})$, $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{x})$.

定义拉格朗日量为

$$L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = -\frac{m_0c^2}{\gamma} + e\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}) - e\varphi(\mathbf{x}), \quad (2.2)$$

¹对于给定的电磁场, 它所对应的电势和磁势是不唯一的. 我们可以选取规范来确定电磁势. 常见的三种规范包括 Coulomb 规范, 它要求 $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, Lorenz 规范要求 $\nabla \cdot \mathbf{A} + \partial\varphi/\partial t = 0$, Weyl 规范要求 $\varphi = 0$.

方程 (2.1) 可以通过变分原理

$$\delta \int_{t_0}^{t_1} L(x(t), \dot{x}(t)) dt = 0$$

等价地表达为 Euler–Lagrange 方程.

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{x}} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{x}}} \right) = 0, \quad (2.3)$$

记 (2.3) 的解流为 ϕ_t^L , 定义拉格朗日二形式 $\omega_L = \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}_i \partial x_j} dx_i \wedge dx_j + \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}_i \partial \dot{x}_j} dx_i \wedge d\dot{x}_j$, 可以证明解流 ϕ_t^L 保持该二形式, 即

$$(\phi_t^L)^* \omega_L = \omega_L,$$

其中 $*$ 表示拉回映射.

通过引入动量 \mathbf{p} , 方程 (2.1) 可以等价表示为如下的一阶微分方程组,

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}}{dt} &= \frac{\mathbf{p}}{m_0 \gamma}, \\ \frac{d\mathbf{p}}{dt} &= e \left(\mathbf{E}(\mathbf{x}) + \frac{\mathbf{p}}{m_0 \gamma} \times \mathbf{B}(\mathbf{x}) \right), \end{aligned} \quad (2.4)$$

其中洛伦兹因子在该坐标下可以表达为 $\gamma = \sqrt{1 + \mathbf{p}^2 / (m_0^2 c^2)}$. 记 $\mathbf{z} = [\mathbf{x}^\top, \mathbf{p}^\top]^\top$, 系统 (2.4) 可表达为更紧凑的形式

$$\dot{\mathbf{z}} = K^{-1}(\mathbf{z}) \nabla H(\mathbf{z}), \quad (2.5)$$

其中 $K(\mathbf{z}) = \begin{pmatrix} -e\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{x}) & -I \\ I & 0 \end{pmatrix}$, $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = m_0 c^2 \gamma + e\varphi(\mathbf{x})$. 在反对称矩阵 $K(\mathbf{z})$ 中的

$\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} 0 & -B_3(\mathbf{x}) & B_2(\mathbf{x}) \\ B_3(\mathbf{x}) & 0 & -B_1(\mathbf{x}) \\ -B_2(\mathbf{x}) & B_1(\mathbf{x}) & 0 \end{pmatrix}$ 是由磁场 \mathbf{B} 所定义. 利用矩阵 K , 定义二形式

$\omega_K = d\mathbf{z} \wedge K d\mathbf{z}$. 当 $\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}) = 0$, 可以验证 $d\omega_K = 0$. 进一步, 可以证明系统 (2.5) 的解流 ϕ_t^K 满足

$$(\phi_t^K)^* \omega_K = \omega_K,$$

其中 ω_K 被称为 K -辛结构.

通过 Euler-Lagrange 方程 (2.3) 定义共轭动量 $\mathbf{P} = \partial L / \partial \dot{\mathbf{x}}$, 单粒子模型 (2.1) 在坐标 (\mathbf{x}, \mathbf{P}) 下可以表示为

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}}{dt} &= \frac{\mathbf{P} - e\mathbf{A}(\mathbf{x})}{m_0\gamma}, \\ \frac{d\mathbf{P}}{dt} &= \frac{e}{m_0\gamma} \left(\frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \right)^\top (\mathbf{P} - e\mathbf{A}(\mathbf{x})) - e\nabla\varphi(\mathbf{x}), \end{aligned}$$

其中洛伦兹因子可表达为 $\gamma = \sqrt{1 + (\mathbf{P} - e\mathbf{A}(\mathbf{x}))^2 / (m_0^2 c^2)}$. 记 $\mathbf{z} = [\mathbf{x}^\top, \mathbf{P}^\top]^\top$, 上述系统可以表达为哈密顿正则方程

$$\dot{\mathbf{z}} = J^{-1} \nabla H(\mathbf{z}), \quad (2.6)$$

其中 $H(\mathbf{x}, \mathbf{P}) = m_0 c^2 \gamma + e\varphi(\mathbf{x})$ 为系统的哈密顿量, $J = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{pmatrix}$. 可以证明系统 (2.6) 的解流 ϕ_t 满足

$$(\phi_t)^* \omega_J = \omega_J,$$

其中 $\omega_J = dz \wedge J^{-1} dz$ 被称为典则辛结构.

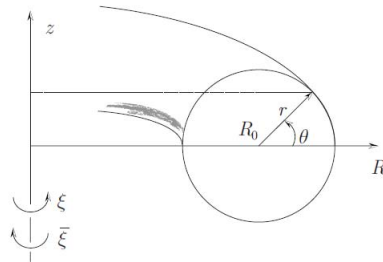


图 2.1 托卡马克几何位形截面图

在等离子体物理的研究中, 除了笛卡尔坐标外, 还有两类比较常见的坐标: 柱坐标 (R, ξ, z) 和环坐标 (r, θ, ξ) . 图 2.1 展示了两种坐标系下的托卡马克位形 [64]. 其中柱坐标 (R, ξ, z) 可以表达为

$$R = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \xi = \arctan\left(\frac{y}{x}\right), \quad z = z \quad (2.7)$$

环坐标 $(r, \theta, \bar{\xi})$ 可以表达为

$$r = \sqrt{(R - R_0)^2 + z^2}, \quad \theta = \arctan\left(\frac{z}{R - R_0}\right), \quad \bar{\xi} = -\xi$$

其中 R_0 是一个常数, 取决于装置的尺寸.

2.2 Modulated Fourier 展开方法

本节介绍一种可以对二阶高振荡问题进行分析的方法: **Modulated Fourier** 展开方法 [5]. 该方法于 2000 年首次在文献 [65] 中被提出并用于高振荡问题的长时间分析, 在文献 [65] 中, 这种方法也称为频率展开方法. **Modulated Fourier** 展开方法的思路是把精确解和数值解按照系统的频率展开成级数形式, 其中每一项的系数是不依赖于高振荡频率的缓慢变化函数. 通过比较数值解和精确解对应的 **Modulated Fourier** 展开系数, 可以分析数值方法的精度. 此外, 由于系数函数满足的系统不再是一个高振荡问题, 我们可以利用 **Noether** 定理分析系统的守恒量, 从而理解精确解以及数值解的长时间行为.

考虑如下的非线性二阶高振荡微分方程

$$\ddot{x} + \Omega^2 x = g(x), \quad (2.8)$$

其中 $\Omega = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \omega I \end{pmatrix}$, $\omega \gg 1$, $g(x) = -\nabla U(x)$. 方程 (2.8) 可以用来描述很多实际问题, 例如 **Fermi–Pasta–Ulam** 问题 [66], 半线性波动方程 [67] 等. 在本节中假设初值满足如下条件

$$\frac{1}{2} \|\dot{x}(0)\|^2 + \frac{1}{2} \|\Omega x(0)\|^2 \leq E \quad (2.9)$$

其中 E 与 ω 无关, 我们可以得到如下精确解的 **Modulated Fourier** 展开.

定理 2.1. [5] 假设方程 (2.8) 的解 $x(t)$ 满足初值条件 (2.9), 且该解在 $0 \leq t \leq T$ 内一直保持在紧集 \mathbb{K} 上, 那么该数值解具有如下的展开

$$x(t) = y(t) + \sum_{0 \leq |k| \leq N} e^{ik\omega t} z^k(t) + R_N(t), \quad \forall N \geq 2 \quad (2.10)$$

其中余项 R_N 和其导数 \dot{R}_N 对于 $0 \leq t \leq T$ 满足

$$R_N(t) = O(\omega^{-N-2}) \quad \text{和} \quad \dot{R}_N(t) = O(\omega^{-N-1}).$$

实值函数 $y = (y_0, y_1)$ 和复值函数 $z^k = (z_0^k, z_1^k)$ 以及它们直到 M 阶导数满足

$$\begin{aligned} y_0 &= O(1), \quad z_0^1 = O(\omega^{-3}), \quad z^k = O(\omega^{-k-2}) \\ y_1 &= O(\omega^{-2}), \quad z_1^1 = O(\omega^{-1}), \end{aligned} \quad (2.11)$$

其中 $k = 2, \dots, N-1$, $z^{-k} = \bar{z}^k$. 上述关系式中的所有高阶项系数与 ω 和 t ($0 \leq t \leq T$) 无关, 但是依赖于 M, N, T 和 (2.9) 中的 E , 以及非线性项 $g(x)$ 在 \mathbb{K} 上导数的界.

下面我们介绍一类常见的数值方法

$$x_{n+1} - 2 \cos(h\Omega)x_n + x_{n-1} = h^2 \Psi g(\Phi x_n), \quad (2.12)$$

其中 h 为步长, $\Psi = \psi(h\Omega)$, $\Phi = \phi(h\Omega)$, ψ 和 ϕ 被称为滤子函数, 它们均为偶的实值函数且满足 $\psi(0) = \phi(0) = 1$. 根据问题需要, 滤子函数可以有多种不同的选择方式. 例如,

- $\psi(\xi) = \text{sinc}^2(\xi/2)$, $\phi(\xi) = 1$, 参见 [68].
- $\psi(\xi) = \text{sinc}(\xi)$, $\phi(\xi) = 1$, 参见 [69].
- $\psi(\xi) = \text{sinc}(\xi)\phi(\xi)$, $\phi(\xi) = \text{sinc}(\xi)$, 参见 [70].
- $\psi(\xi) = \text{sinc}^2(\xi/2)$, $\phi(\xi) = \text{sinc}(\xi)(1 + \frac{1}{3} \sin^2 \frac{1}{2}\xi)$, 参见 [67].
- $\psi(\xi) = \text{sinc}^2(\xi)$, $\phi(\xi) = 1$, 参见 [65].

假设滤子函数 ψ 和 ϕ 满足下面的条件

$$\begin{aligned} |\psi(h\omega)| &\leq C \text{sinc}^2\left(\frac{1}{2}h\omega\right), \\ |\phi(h\omega)| &\leq C \left| \text{sinc}\left(\frac{1}{2}h\omega\right) \right|, \\ |\psi(h\omega)\phi(h\omega)| &\leq C |\text{sinc}(h\omega)|, \end{aligned} \quad (2.13)$$

我们可以得到下述关于数值解的 Modulated Fourier 展开.

定理 2.2. [5] 考虑数值方法 (2.12) 在 (2.13) 的条件下, 假设 $h\omega \geq c_0 > 0$ 满足如下的非共振性条件

$$|\sin\left(\frac{1}{2}kh\omega\right)| \geq c\sqrt{h} \quad k = 1, \dots, N, \quad N \geq 2,$$

则数值解在 $0 \leq t = nh \leq T$ 内有如下展开

$$x_n = y_h(t) + \sum_{0 < |k| < N} e^{ik\omega t} z_h^k(t) + R_{h,N}(t). \quad (2.14)$$

对任意 $m \geq 0$, 余项 $R_{h,N}$ 具有如下形式

$$R_{h,N}(t) = t^2 h^N \Psi r(t), \quad \text{其中} \quad r(t) = O(\phi(h\omega)^N + h^m).$$

进一步, 系数函数 y_h , z_h 以及它们直到 M 阶导数满足

$$\begin{aligned} y_{h,0} &= O(1), \quad z_{h,0}^1 = O(\omega^{-2}), \quad z_{h,0}^k = O(\omega^{-k}) \\ y_{h,1} &= O(\omega^{-2}), \quad z_{h,1}^1 = O(\omega^{-1}), \quad z_{h,1}^k = O(\omega^{-k}), \end{aligned} \quad (2.15)$$

其中 $k = 2, \dots, N-1$. 上述关系式中的高阶项系数与 ω 和 h 无关, 但是依赖于 E, M, N, m, c 和 T .

上述定理表明高振荡问题 (2.8) 的精确解以及数值格式 (2.12) 对应的数值解均可以表示为慢变部分与快变部分乘积的形式. 下面我们分别对精确解以及数值解对应的系数函数满足的系统进行分析.

从方程 (2.8) 可知, 对应的哈密顿量为

$$H(x, \dot{x}) = \frac{1}{2} \dot{x}^\top \dot{x} + \frac{1}{2} x^\top \Omega^2 x + U(x).$$

应用定理 2.1 知, 方程 (2.8) 的解 x 可以表示为 (2.10) 的形式. 记 $y^0(t) = y(t)$, $y^k(t) = e^{ik\omega t} z^k(t)$ ($0 < |k| < N$) 以及 $\mathbf{y} = (y^{-N+1}, \dots, y^{-1}, y^0, y^1, \dots, y^{N-1})$, 定义

$$U(\mathbf{y}) = U(y^0) + \sum_{s(\alpha)=0} \frac{1}{m!} U^{(m)}(y^0) \mathbf{y}^\alpha.$$

根据定理 2.1 可知, $\mathbf{y}(t)$ 满足如下的系统

$$\ddot{\mathbf{y}}^k + \Omega^2 \mathbf{y}^k = -\nabla_{\mathbf{y}^{-k}} U(\mathbf{y}) + O(\omega^{-N}),$$

如果忽略 $O(\omega^{-N})$ 项, 上式可以表示为如下的哈密顿形式

$$\dot{\mathbf{y}}^k = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \dot{\mathbf{y}}^{-k}}(\mathbf{y}, \dot{\mathbf{y}}), \quad \dot{\mathbf{y}}^k = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{y}^{-k}}(\mathbf{y}, \dot{\mathbf{y}}),$$

其中

$$\mathcal{H}(\mathbf{y}, \dot{\mathbf{y}}) = \frac{1}{2} \sum_k ((\dot{\mathbf{y}}^{-k})^\top \dot{\mathbf{y}}^k + (\dot{\mathbf{y}}^{-k})^\top \Omega^2 \dot{\mathbf{y}}^k) + \mathcal{U}(\mathbf{y}). \quad (2.16)$$

定理 2.3. [5] 记 $\mathcal{I}(\mathbf{y}, \dot{\mathbf{y}}) = -i\omega \sum_k k(\mathbf{y}^{-k})^\top \dot{\mathbf{y}}^k$, 系统谐振子能量为 $I(x, \dot{x}) = \frac{1}{2} \|\dot{x}_1\|^2 + \frac{1}{2} \omega^2 \|x_1\|^2$. 在定理 2.1 的假设下, 我们有如下估计

$$\mathcal{H}(\mathbf{y}(t), \dot{\mathbf{y}}(t)) = \mathcal{H}(\mathbf{y}(0), \dot{\mathbf{y}}(0)) + O(\omega^{-N}),$$

$$\mathcal{I}(\mathbf{y}(t), \dot{\mathbf{y}}(t)) = \mathcal{I}(\mathbf{y}(0), \dot{\mathbf{y}}(0)) + O(\omega^{-N}),$$

进一步

$$H(x(t), \dot{x}(t)) = \mathcal{H}(\mathbf{y}(t), \dot{\mathbf{y}}(t)) + O(\omega^{-1}),$$

$$I(x(t), \dot{x}(t)) = \mathcal{I}(\mathbf{y}(t), \dot{\mathbf{y}}(t)) + O(\omega^{-1}).$$

上述表达式的高阶项系数与 ω , t ($0 < t < T$) 无关, 但依赖于 E , N 和 T .

类似地, 考虑数值解对应的 Modulated Fourier 展开 (2.14), 我们有下述定理.

定理 2.4. [5] 记

$$\mathbf{y}_h = (y_h^{-N+1}, \dots, y_h^{-1}, y_h^0, y_h^1, \dots, y_h^{N-1}),$$

$$\mathbf{z}_h = (z_h^{-N+1}, \dots, z_h^{-1}, z_h^0, z_h^1, \dots, z_h^{N-1}),$$

其中 $y_h^0(t) = z_h^0(t) = y_h(t)$, $y_h^k(t) = e^{ik\omega t} z_h^k(t)$. 定义

$$\mathcal{H}_h[\mathbf{z}_h](t) = \frac{1}{2} \|\dot{y}_{h,0}(t)\|^2 + 2\omega^2 \|z_{h,1}^1(t)\|^2 + U(\Phi \mathbf{y}_h(t)) + O(h^2),$$

以及

$$\mathcal{I}_h[\mathbf{z}_h](t) = 2\omega^2 \|z_{h,1}^1(t)\|^2 + O(h^2).$$

在定理 2.2 的假设下, \mathcal{H}_h 满足

$$\mathcal{H}_h[\mathbf{Z}_h](t) = \mathcal{H}_h[\mathbf{Z}_h](0) + O(th^N),$$

$$\mathcal{H}_h[\mathbf{Z}_h](t) = H(x_n, \dot{x}_n) + O(h),$$

\mathcal{I}_h 满足

$$\mathcal{I}_h[\mathbf{Z}_h](t) = \mathcal{I}_h[\mathbf{Z}_h](0) + O(th^N),$$

$$\mathcal{I}_h[\mathbf{Z}_h](t) = I(x_n, \dot{x}_n) + O(h).$$

上述表达式的高阶项系数与 ω , $t(0 < t < T)$ 无关, 但依赖于 E , N 和 T .

利用定理 2.3 和定理 2.4, 易得到系统 (2.8) 的能量 H 和振动能量 I 满足如下的估计, 表明了数值方法在 $C_N h^{-N+1}$ 长时间内保持 H 和 I .

定理 2.5. [5] 在上述假设条件下, 数值格式 (2.12) 对应的数值解满足

$$\begin{aligned} H(x_n, \dot{x}_n) &= H(x_0, \dot{x}(0)) + O(h), \\ I(x_n, \dot{x}_n) &= I(x_0, \dot{x}(0)) + O(h), \end{aligned} \quad 0 \leq nh \leq h^{-N+1}.$$

2.3 切触哈密顿系统

在本节中, 我们介绍一种新的微分几何结构, 它被称为切触结构, 与辛几何结构相比, 它是定义在奇数维流形上的, 是于 1987 年被 Sophus Lie 提出, 作为研究微分方程的一种几何工具 [71]. 切触几何和许多纯数学中的其它一些领域具有密切联系, 并且在应用数学以及物理科学中也有着重要的应用, 例如非完整约束系统 [72], 热力学 [73, 74], 流体动力学 [75, 76] 等.

首先我们给出切触流形和切触结构的定义.

定义 2.1. [77] 记 M 为 $2n+1$ 维流形, α 为定义在 M 上的 1-形式. 如果 α 满足 $\alpha \wedge (d\alpha)^n \neq 0$ 处处成立, 则 α 被称为切触形式. 我们称 (M, α) 为一个 $2n+1$ 维的切触流形. 由切触形式 α 可以定义相应的切触结构 D

$$D = \text{Ker } \alpha.$$

注. 切触结构可进一步表示为 $D = \cup_{x \in M} D_x$, 其中 $D_x = \{X \in T_x M : \alpha_x(X) = 0\}$.

由切触结构的定义可知切触流形 (M, α) 均为奇数维.

定理 2.6. [78] 记 α 为切触 1-形式, f 为定义在 (M, α) 上的非零函数. 那么 1-形式 $\alpha' = f\alpha$ 也是一个切触形式且 $\text{Ker } \alpha' = \text{Ker } \alpha$.

根据该定理我们可以看出, 两个不同的 1-形式 α 和 $\alpha' = f\alpha$ 定义了相同的切触结构, 即切触形式是不唯一的.

如下定理是对辛结构的 Darboux 定理的一个推广.

定理 2.7. [78][Darboux 定理] 记 (M, α) 为 $2n+1$ 维切触流形. 则 (M, α) 局域微分同胚于 $(\mathbb{R}^{2n+1}, \alpha_0)$, 其中

$$\alpha_0 = xdy + dz = \sum_{i=1}^n x_i dy_i + dz,$$

$(x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_n, z)$ 为 \mathbb{R}^{2n+1} 上的坐标.

例 2.1. 对于 \mathbb{R}^3 , 其上坐标记为 (x, y, z) , 考虑如下的 1-形式

$$\alpha = xdy + dz.$$

由于 $\alpha \wedge (d\alpha) = (xdy + dz) \wedge (dx \wedge dy) = dx \wedge dy \wedge dz \neq 0$, 所以 α 是 \mathbb{R}^3 上的一个切触形式, 被称为典则切触形式. 切触结构可以由 $\{\frac{\partial}{\partial x}, (\frac{\partial}{\partial y} - x\frac{\partial}{\partial z})\}$ 张成, 即

$$D = \text{Ker } \alpha = c_1 \frac{\partial}{\partial x} + c_2 \left(\frac{\partial}{\partial y} - x \frac{\partial}{\partial z} \right).$$

定义 2.2. [77] 记 (M, α) 和 (M', α') 为 $2n+1$ 维切触流形. 如果一个微分同胚映射 $f: M \rightarrow M'$ 满足, 存在非零函数 $\mu: M \rightarrow \mathbb{R}$, 使得

$$f^* \alpha' = \mu \alpha,$$

则称 f 是切触微分同胚映射

我们可以记 (M, α) 上的切触微分同胚映射群为

$$\text{Diff}(M, \alpha) = \{f \in \text{Diff}(M) | f^* \alpha = \mu \alpha, \mu(x) \neq 0 \forall x \in M\}.$$

如果 $\alpha' = \rho\alpha$, $\rho \neq 0$, 那么我们有

$$\text{Diff}(M, \alpha') = \text{Diff}(M, \alpha).$$

(M, α) 上的切触动力系统可以由一个切触向量场所定义. 如果切触流形上的一个向量场保持切触结构 $D = \text{Ker } \alpha$, 则称该向量场为切触向量场. 下述命题给出了一个等价条件.

命题 2.8. [79] 一个向量场 X 是切触的, 当且仅当存在一个光滑函数 $\lambda : M \rightarrow \mathbb{R}$ 使得

$$L_X \alpha = \lambda \alpha, \quad (2.17)$$

其中 $L_X \alpha$ 表示 1-形式 α 关于向量场 X 的李导数.

定义 2.3. [77] 如果 X 是一个切触向量场, 那么函数

$$K = i_X \alpha \equiv \alpha(X)$$

称为由 X 定义的切触哈密顿函数.

定理 2.9. [77] 对任意给定的函数 $K : M \rightarrow \mathbb{R}$, 存在唯一的切触向量场 X , 使得 K 是其对应的哈密顿函数.

在本论文中我们考虑 $M = \mathbb{R}^{2n+1}$ 欧氏空间作为基流形. 它的标准切触结构为

$$\alpha = xdy + dz = (0, x^\top, 1) \begin{bmatrix} dx \\ dy \\ dz \end{bmatrix},$$

\mathbb{R}^{2n+1} 中切触动力系统是由切触向量场 $X = (a^\top, b^\top, c) : \mathbb{R}^{2n+1} \rightarrow \mathbb{R}^{2n+1}$ 通过下列方程给出

$$\dot{x} = a(x, y, z), \quad \dot{y} = b(x, y, z), \quad \dot{z} = c(x, y, z),$$

根据切触向量场条件为 (2.17) 有

$$L_X \alpha = i_X d\alpha + di_X \alpha = \lambda \alpha. \quad (2.18)$$

从 (2.18) 容易看到, 在 \mathbb{R}^{2n+1} 中任一个切触向量场 X , 存在一个切触哈密顿函数 $K(x, y, z)$, 使得

$$a = -K_y + K_z x, \quad b = K_x, \quad c = K - x^\top K_x =: K_e, \quad (2.19)$$

其中 $\lambda = K_z$. 事实上, (2.19) 是切触向量场的一般表示.

定义 2.4. [4] \mathbb{R}^{2n+1} 中的一个变换 g

$$g : \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{v} \\ s \end{bmatrix} \mapsto \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{x}}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, s) \\ \hat{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, s) \\ \hat{s}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, s) \end{bmatrix}$$

是切触变换, 即 $g^* \alpha = \mu_g \alpha$, 意味着

$$\sum_{i=1}^n \hat{x}_i d\hat{y}_i + d\hat{z} = \mu_g \left(\sum_{i=1}^n x_i dy_i + dz \right), \quad (2.20)$$

其中 $\mu_g : \mathbb{R}^{2n+1} \rightarrow \mathbb{R}$ 为处处不等于零的函数, 称为 g 的因子.

可以将 (2.20) 显式表达为

$$(0, \hat{x}^\top, 1) \begin{bmatrix} \hat{x}_x & \hat{x}_y & \hat{x}_z \\ \hat{y}_x & \hat{y}_y & \hat{y}_z \\ \hat{z}_x & \hat{z}_y & \hat{z}_z \end{bmatrix} = \mu_g(0, x^\top, 1).$$

切触哈密顿函数 K 的切触系统的相流 $g_K^t : \mathbb{R}^{2n+1} \rightarrow \mathbb{R}$ 是 \mathbb{R}^{2n+1} 中的一单参数切触变换群, 满足

$$\begin{aligned} g_K^0 &= I \quad \text{为 } \mathbb{R}^{2n+1} \text{ 中恒等映射,} \\ g_K^{t+s} &= g_K^t \circ g_K^s, \quad \forall t, s \in \mathbb{R}, \\ (g_K^t)^* \alpha &= \mu_{g_K^t} \alpha, \end{aligned} \quad (2.21)$$

其中函数 $\mu_{g_K}^t : \mathbb{R}^{2n+1} \rightarrow \mathbb{R}$ 处处不为零, 与哈密顿函数 K 有如下关系式

$$\mu_{g_K}^t = \exp \int_0^t (K_z \circ g_K^s) ds.$$

为了构造切触系统的差分格式, 我们要使离散后切触相流同样满足条件 (2.21), 当然可以是一个不同的非零因子.

文献 [3, 7] 中最早提出并构造了切触算法. 下面给出切触算法的定义.

定义 2.5. [3] 一个数值方法 $\Phi_h : (\mathbf{x}_n, \mathbf{y}_n, z_n) \mapsto (\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{y}_{n+1}, z_{n+1})$ 称为是切触的, 如果它满足

$$dz_{n+1} + \mathbf{x}_{n+1} d\mathbf{y}_{n+1} = \mu_h (dz_n + \mathbf{x}_n d\mathbf{y}_n),$$

其中 μ_h 为一个依赖 h 的函数.

第3章 单粒子模型的变步长辛算法

在实际计算中,数值方法的步长不一定是一致的,可以通过数值解的误差调整步长以实现高效的目标.但对于哈密顿系统,文献[80, 81]中的结果表明直接对辛算法采用变步长策略会破坏数值解的长时间稳定行为.因此文献[82, 83]通过引入时间变换函数,构造了新的变步长方法,该方法是辛的并且保证了数值解的长时间稳定性.该策略也被推广到变步长变分方法的构造中[84].在本章中,我们主要对等离子体中的单粒子模型构造了相应的变步长辛方法.由于带电粒子在电磁场中的运动具有时空多尺度效应,例如逃逸电子运动的时间尺度范围是从回旋周期($t \sim 10^{-11}$ s)到观测时间($t \sim 10^{-2} \rightarrow 1$ s).为了模拟逃逸电子的运动,如果采用经典数值方法,通常需要大约 10^{11} 量级的迭代步数.我们在本章中提出了一类新的时间变换函数,可以实现在每一个回旋周期内均匀采样,提高了计算效率并且保证了数值解具有长时间的准确性.

3.1 单粒子系统的性质

考虑单粒子模型(2.6),我们知道能量 $H = m_0 c^2 \gamma + e\varphi(\mathbf{x})$ 是系统的一个守恒量.此外,下述定理给出了系统(2.6)的另外两个物理量的守恒情况,它们分别是角动量和磁矩.

定理 3.1. 假设系统(2.6)在柱坐标下的表达形式具有方位角对称性,则典则角动量

$$P_\xi = m_0 \gamma R^2 \dot{\xi} + e R A_\xi,$$

是系统的一个不变量,其中 A_ξ 是磁势 \mathbf{A} 在柱坐标下的环向分量.

证明. 考虑拉格朗日函数(2.2),在柱坐标 (R, ξ, z) 下,它可以表达为

$$L(R, \xi, z, \dot{R}, \dot{\xi}, \dot{z}) = -m_0 c^2 \sqrt{1 - \frac{\dot{R}^2 + R^2 \dot{\xi}^2 + \dot{z}^2}{c^2}} + e(\dot{R} A_R + R \dot{\xi} A_\xi + \dot{z} A_z) - e\varphi. \quad (3.1)$$

定义典则角动量为

$$P_\xi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\xi}} = m_0 \gamma R^2 \dot{\xi} + e R A_\xi.$$

由于该系统是关于方位角 ξ 对称的, 所以在柱坐标 (R, ξ, z) 下, \mathbf{A} 和 φ 的分量均不依赖方位角 ξ , 因此拉格朗日函数 (3.1) 不依赖方位角 ξ , 即 $\partial L/\partial \xi = 0$. 在柱坐标下, Euler-Lagrange 方程可以表达为

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\xi}} = \frac{\partial L}{\partial \xi} = 0,$$

所以我们有

$$\frac{dP_\xi}{dt} = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\xi}} = 0,$$

这表明了 P_ξ 是系统的一个守恒量. □

若不考虑相对论效应, 磁矩定义为

$$\mu = \frac{|\dot{\mathbf{x}}_\perp|^2}{2B(\mathbf{x})}, \quad (3.2)$$

其中 $\dot{\mathbf{x}}_\perp$ 表示粒子垂直于磁场方向的速度, $B(\mathbf{x}) = |\mathbf{B}(\mathbf{x})|$ 表示磁场强度. Kruskal 等人证明了在磁场缓慢变换的假设下, 即 $|\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \frac{1}{\omega_c}| \ll B$ 和 $|\rho \nabla \mathbf{B}| \ll B$ 时, 磁矩 (3.2) 是一个绝热不变量 [85, 86]. 对于强磁场情形, 文献 [87] 中基于哈密顿摄动理论证明了磁矩在指数长时间内几乎不变, 但该方法很难用于分析数值格式的长时间行为. 而文献 [34] 中采用了 Modulated Fourier 展开的方法, 不仅证明了连续系统的绝热不变量, 对数值格式的长时间行为也进行了分析.

考虑带相对论效应的单粒子模型, 磁矩可以表达为

$$\mu = p_\perp^2 / 2mB, \quad (3.3)$$

我们证明了如下定理.

定理 3.2. 假设电磁场满足 $\mathbf{E}(\mathbf{x}) \equiv 0$ 以及 $\rho |\nabla B| \ll B$, 那么磁矩 (3.3) 是相对论单粒子系统 (2.1) 的一个绝热不变量. 其中 $m = m_0 \gamma$, γ 为相对论因子, B 表示磁场强度, $\rho = p_\perp / |e|B$ 表示回旋半径, p_\perp 为动量垂直于磁场方向的分量.

证明. 由假设知 $\mathbf{E}(\mathbf{x}) \equiv 0$, 即电势 $\varphi(\mathbf{x})$ 为常数, 定义系统 (2.1) 的哈密顿量为

$$H = m_0 c^2 \gamma + e\varphi(\mathbf{x}),$$

由于 H 沿着解流保持不变, 所以 γ 和 m 沿着解流保持不变. 对方程 (3.3) 中定义的磁矩 μ 关于 t 求导有

$$\frac{d\mu}{dt} = \frac{1}{2mB} \frac{dp_{\perp}^2}{dt} - \frac{p_{\perp}^2}{2m} \frac{d}{dt} \frac{1}{B}. \quad (3.4)$$

我们把动量 \mathbf{p} 分解如下

$$\mathbf{p} = p_{\parallel} \mathbf{b} + p_{\perp} \mathbf{n} \quad (3.5)$$

其中 $\mathbf{b} = \mathbf{B}/B$, $\mathbf{n} = (\mathbf{p} - p_{\parallel} \mathbf{b})/p_{\perp}$. 类似地, 速度 \mathbf{v} 也可以相应的表达为 $\mathbf{v} = v_{\parallel} \mathbf{b} + v_{\perp} \mathbf{n}$. 将 (3.5) 代入到 (2.4) 的第二个方程中, 并在两端分别与 \mathbf{n} 做内积, 我们有

$$p_{\parallel} \mathbf{n} \cdot \frac{d\mathbf{b}}{dt} + \frac{dp_{\perp}}{dt} = 0.$$

上式两端乘以 p_{\perp} 得

$$\frac{1}{2} \frac{dp_{\perp}^2}{dt} + p_{\parallel} p_{\perp} \mathbf{n} \cdot \frac{d\mathbf{b}}{dt} = 0. \quad (3.6)$$

由于

$$\frac{d\mathbf{b}}{dt} = v_{\parallel} \mathbf{b} \cdot \nabla \mathbf{b} + v_{\perp} \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{b},$$

我们可以将 (3.6) 等价表达为

$$\frac{1}{2} \frac{dp_{\perp}^2}{dt} = -p_{\parallel} p_{\perp} v_{\parallel} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{b} \cdot \nabla \mathbf{b}) - p_{\parallel} p_{\perp} v_{\perp} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{b}). \quad (3.7)$$

因为 $\mathbf{b} \cdot \nabla \mathbf{b}$ 垂直于 \mathbf{n} , 所以上式右端第一项为 0. 方程 (3.7) 两端在一个回旋周期内取平均有,

$$\left\langle \frac{1}{2} \frac{dp_{\perp}^2}{dt} \right\rangle = - \left\langle p_{\parallel} p_{\perp} v_{\perp} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{b}) \right\rangle = -\frac{1}{2} \left\langle p_{\parallel} p_{\perp} v_{\perp} \nabla \cdot \mathbf{b} \right\rangle. \quad (3.8)$$

下面我们考虑方程 (3.4) 右端的第二项,

$$\frac{d}{dt} \frac{1}{B} = -\frac{1}{B^2} (v_{\parallel} \mathbf{b} \cdot \nabla B + v_{\perp} \mathbf{n} \cdot \nabla B).$$

上式两端同时在一个回旋周期内取平均得

$$\left\langle \frac{d}{dt} \frac{1}{B} \right\rangle = - \left\langle \frac{1}{B^2} v_{\parallel} \mathbf{b} \cdot \nabla B \right\rangle + O(\epsilon). \quad (3.9)$$

最后，我们对 (3.4) 两端取平均，并借助 (3.8) 和 (3.9) 可以给出

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d\mu}{dt} \right\rangle &= -\frac{1}{2m} \left\langle \frac{1}{B} p_{\parallel} p_{\perp} v_{\perp} \nabla \cdot \mathbf{b} \right\rangle - \frac{1}{2m} \left\langle \frac{p_{\perp}^2}{B^2} v_{\parallel} \mathbf{b} \cdot \nabla B \right\rangle + O(\epsilon) \\ &= -\frac{1}{2m} \left\langle \frac{p_{\perp}^2}{B^2} v_{\parallel} \nabla \cdot \mathbf{B} \right\rangle + O(\epsilon) = O(\epsilon). \end{aligned}$$

通过上式我们可以看出磁矩 μ 是一个绝热不变量. \square

上述定理考虑模型中 $E = 0$ ，假设有电场作用，文献 [88, 89] 中观察到磁矩可能会增长到初始磁矩的 100 倍，所以 (3.3) 中的磁矩 μ 不再是系统 (2.1) 的绝热不变量. 文献 [90] 给出了一个修正的磁矩表达式，并通过哈密顿摄动理论证明了该量为绝热不变量.

3.2 变步长辛算法

这里，我们首先介绍变步长算法的基本思想 [5]. 考虑一个微分方程

$$\frac{d\mathbf{z}}{dt} = f(\mathbf{z}), \quad (3.10)$$

定义时间变换 $t \mapsto \tau$ ，满足 $dt/d\tau = \sigma(\mathbf{z})$ ，其中 $\sigma(\mathbf{z}) = \sigma(\mathbf{z}(t))$ 也称为步长函数. 记 $\tilde{\mathbf{z}}(\tau) = \mathbf{z}(t(\tau))$ ，有

$$\frac{d\tilde{\mathbf{z}}}{d\tau} = \frac{d\mathbf{z}}{dt} \frac{dt}{d\tau} = \sigma(\mathbf{z}(t(\tau))) f(\mathbf{z}(t(\tau))) = \sigma(\tilde{\mathbf{z}}(\tau)) f(\tilde{\mathbf{z}}(\tau)).$$

为了简便，下述表达中我们记 $\mathbf{z}(\tau) = \tilde{\mathbf{z}}(\tau)$. 因此经过时间变换后的系统可表达为

$$\frac{d\mathbf{z}}{d\tau} = \sigma(\mathbf{z}) f(\mathbf{z}). \quad (3.11)$$

对系统 (3.11) 采用固定步长为 $\Delta\tau$ 的数值方法进行求解，这样得到的数值离散被称为是原系统 (3.10) 的一个变步长数值格式，其中步长 $\Delta t_n = \int_{t_n}^{(n+1)\Delta\tau} \sigma(\mathbf{z}(\lambda)) d\lambda \approx$

$\sigma(\mathbf{z}_n)\Delta\tau$, 在每一个迭代步是不等的, 如图 3.1 所示.

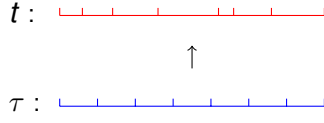


图 3.1 时间坐标 t 和 τ 下的步长对应.

进一步, 若 f 为哈密顿向量场, 我们定义变换后的系统为

$$\dot{\mathbf{z}} = J\nabla E(\mathbf{z}), \quad (3.12)$$

其中 $E(\mathbf{z}) = \sigma(\mathbf{z})(H(\mathbf{z}) - H(\mathbf{z}_0))$, \mathbf{z}_0 为一给定的初值. 方程 (3.12) 可以等价表达为

$$\dot{\mathbf{z}} = \sigma(\mathbf{z})J\nabla H(\mathbf{z}) + (H(\mathbf{z}) - H(\mathbf{z}_0))J\nabla\sigma(\mathbf{z}).$$

由于哈密顿系统的能量守恒, 所以上式右端第二项等于 0, 这一项的引入保证了变换后的系统也具有典则辛结构. 分别记 $\mathbf{z}(t)$ 和 $\bar{\mathbf{z}}(t)$ 为系统 (2.6) 和系统 (3.12) 的解, 对于给定初值 \mathbf{z}_0 , 有 $\bar{\mathbf{z}}(\tau) = \mathbf{z}(t)$ 其中 $t = \int_0^\tau \sigma(\bar{\mathbf{z}}(\lambda))d\lambda$. 对方程 (3.12) 应用步长为 $\Delta\tau$ 的辛算法

$$\mathbf{z}_{n+1} = \Phi_{\Delta\tau}(\mathbf{z}_n), \quad (3.13)$$

则知 (3.13) 就是方程 (2.6) 的一个变步长数值方法. 我们发现, 上述分析可以推广到 K -辛系统. 在实际计算中, σ 的选择是非常重要的. 通常取步长函数为 $\sigma(\mathbf{z}) = \|f(\mathbf{z})\|^{-1}$ [91]. 但对于更多的问题, 这种选择并不适合. 比如当右端向量场特别复杂时, 那么计算 σ 的导数可能会带来比较大的计算量, 所以在应用变步长辛算法时的一个关键问题便是对于具体问题如何选取合适的步长函数.

在给定的电磁场中, 带电粒子的运动可以理解为由沿着磁场方向的漂移以及围绕导心的 Larmor 回旋组成, 其中 Larmor 回旋的频率为 $f_c = eB/(2\pi m_0\gamma)$, 对应的回旋周期为 $T_c = 1/f_c$. 在实际模拟中, 为了准确刻画粒子的运动, 需要采用小于回旋周期的步长来计算, 但这样会增加计算量. 我们这里基于回旋周期来调整步长, 具体的, 对于非相对论情形, 选择步长函数为 $\sigma(\mathbf{z}) = 1/B$; 对于相对论情形, 取步长函数为 $\sigma(\mathbf{z}) = \gamma/B$. 这种步长函数可以实现在每个回旋周期内的迭代步数是一致的. 数值结果表明, 这样构造的算法不仅具有长时间稳定性, 而且

是高效的.

由于哈密顿量是该系统的一个守恒量, 在实际计算中, 洛伦兹因子 $\gamma = (H - e\varphi)/m_0c^2$ 可以被替换为 $\gamma = (H_0 - e\varphi)/m_0c^2$. 所以步长函数 σ 可以被表示为不依赖 \mathbf{P} 的函数 $\sigma = (H_0 - e\varphi)/Bm_0c^2$, 从而简化了方程 (3.12) 的表达. 使用上述步长函数 σ , 变换之后的哈密顿系统可以表达为

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{x}}{dt} &= \frac{H_0 - \varphi}{B\gamma}(\mathbf{P} - \mathbf{A}(\mathbf{x})), \\ \frac{d\mathbf{P}}{dt} &= \frac{H_0 - \varphi}{B\gamma} \left(\frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \right)^\top (\mathbf{P} - \mathbf{A}(\mathbf{x})) - \frac{H_0 - \varphi}{B} \nabla \varphi(\mathbf{x}) - (H - H_0) \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left(\frac{H_0 - \varphi}{B} \right). \end{aligned} \quad (3.14)$$

对该系统采用定步长的辛算法, 例如辛欧拉算法, Störmer–Verlet 格式, 辛 Runge–Kutta 方法, 就能得到原系统 (2.6) 的变步长辛算法, 这样构造的变步长辛算法具有长时间稳定性.

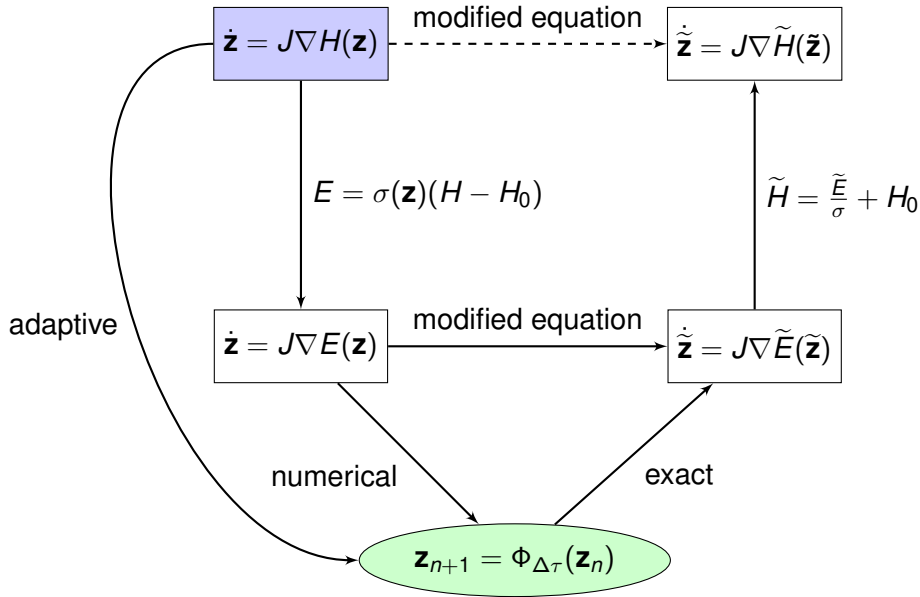


图 3.2 变步长辛算法的向后误差估计示意图.

对于哈密顿系统 (2.6), 记 r 阶变步长辛算法为 $\mathbf{z}_{n+1} = \Psi(\Delta t_n, \mathbf{z}_n)$. 可以证明数值解 \mathbf{z}_n 是如下修正哈密顿方程

$$\dot{\tilde{\mathbf{z}}} = J\nabla \tilde{H}(\Delta\tau, \tilde{\mathbf{z}})$$

的精确解 [82], 其中修正哈密顿量为

$$\tilde{H}(\Delta\tau, \mathbf{z}) = H(\mathbf{z}) + \Delta\tau^r H_1(\mathbf{z}) + \Delta\tau^{r+1} H_2(\mathbf{z}) + \dots,$$

见图 3.2.

考虑单粒子模型 (2.6), 我们可以定义如下的协变哈密顿量

$$H = \frac{g^{\alpha\beta}(P_\alpha - A_\alpha)(P_\beta - A_\beta)}{2}, \quad (3.15)$$

其中 $X^\alpha = (t, \mathbf{x})$ 表示 4 维时空中的位置向量, $P_\alpha = (\gamma + \phi, -\mathbf{P})$ 为动量, $A_\alpha = (\phi, -\mathbf{A})$ 代表势能, $g_{\alpha\beta} = g^{\alpha\beta} = \text{diag}(1, -1, -1, 1)$ 为 Minkowski 度规. 记本征时间为 τ , 根据哈密顿量 (3.15), 我们可以得到如下协变哈密顿方程 (3.16)

$$\begin{aligned} \frac{dP_\alpha}{d\tau} &= -\frac{\partial H}{\partial X^\alpha} = (P^\beta - A^\beta)\partial_\alpha A_\beta, \\ \frac{dX^\alpha}{d\tau} &= \frac{\partial H}{\partial P_\alpha} = P^\alpha - A^\alpha, \end{aligned} \quad (3.16)$$

其中 $\partial_\alpha = \partial/\partial X^\alpha = (\partial/\partial X^0, \nabla)$, $P^\alpha = g^{\alpha\beta} P_\beta$, $A^\alpha = g^{\alpha\beta} A_\beta$. 研究表明, 对 (3.16) 采用定步长 $\Delta\tau$ 的数值算法计算时, 对应 $\Delta t_n = t^{n+1} - t^n = \Delta\tau(\gamma^{k+1} + \phi^{k+1} - \phi^k) \approx \Delta\tau\gamma^{k+1}$, 这与我们的变步长策略是一致的.

3.3 数值实验

在本节中应用上面介绍的变步长辛算法进行数值实验. 首先我们不考虑模型的相对论效应, 模拟了 Penning 阱中三种不同的磁场下的带电粒子运动. 其次, 对于相对论情形, 模拟了托卡马克位形中逃逸电子的运动.

Penning 阱中的带电粒子. Penning 阱是一个可以储存带电粒子的装置. 在该装置中, 一般选择均匀的轴向磁场和不均匀的四极电场对离子进行束缚, 也可考虑非均匀的磁场 [92]. 该装置可以用来精确测量离子和稳定的亚原子粒子的特性, 已经被各大实验室广泛采用, 比如在欧洲核子研究中心 (CERN) 反质子的储存就是使用的这种装置.

在如下的数值实验中, 我们取电场为 $\mathbf{E}(\mathbf{x}) = 10[x, y, -2z]^\top$. 对应的电势可

以表达为 $\varphi(\mathbf{x}) = -5(x^2 + y^2 - 2z^2)$. 粒子的初始位置和速度选为 $\mathbf{x}_0 = [1/3, 0, 1/2]^\top$, $\mathbf{v}_0 = [0, 1, 0]^\top$. 数值算法我们选择隐中点格式.

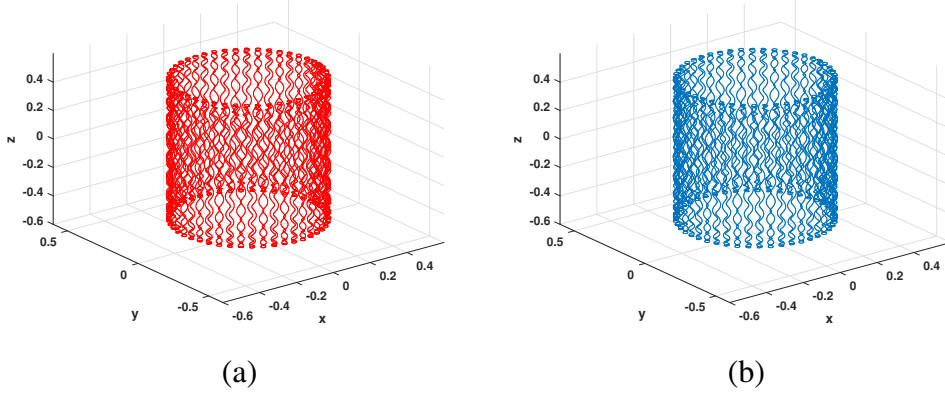


图 3.3 均匀磁场下带电粒子在 Penning 阱中的运动轨迹. (a) 定步长隐中点. (b) 变步长隐中点.

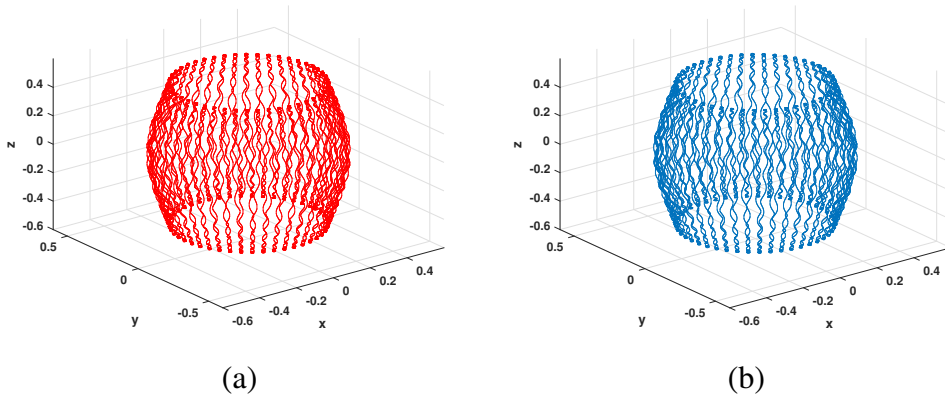


图 3.4 非均匀磁场下带电粒子在 Penning 阱中的运动轨迹. (a) 定步长隐中点. (b) 变步长隐中点.

首先考虑均匀磁场的情形. 取 $\mathbf{B}(\mathbf{x}) = [0, 0, 100]^\top$, 其对应的磁势可以选为 $\mathbf{A}(\mathbf{x}) = [0, 100x, 0]^\top$, 由于磁场是均匀的, 所以步长函数 σ 是一个常数, 此时, 变步长辛算法退化为定步长辛算法. 带电粒子在该电磁场下的运动见图 3.3.

下面我们考虑一个非均匀磁场 [93]. 具体表达式为

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}) = 100 [0, 0, 1]^\top + 200 \left[-xz, -yz, z^2 - \frac{x^2 + y^2}{2} \right]^\top,$$

其对应的磁势为

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}) = 50 \left[-4yz^2 + \frac{2}{3}y^3 - y, -\frac{2}{3}x^3 + x, -4xyz \right]^\top.$$

图 3.4 分别展示了定步长隐中点和变步长隐中点格式所模拟的粒子轨迹. 进一步, 我们展示了变步长辛算法对守恒量的保持情况, 在图 3.5 中展示了哈密顿量的相对误差, 可以看出能量误差在长时间内保持有界. 类似地, 图 3.6 展示了磁矩误差随时间的变化, 可以看出长时间内磁矩也被保持地很好. 为了进一步阐述变步长辛算法的高效性, 我们分别采用定步长和变步长算法进行模拟, 比较了计算到相同时刻 $T = 100$ 时, 它们分别所需的步数. 通过图 3.7 可以看出, 为了得到同样的数值解误差, 变步长算法所需的迭代步数更少, 计算效率提高了 180%.

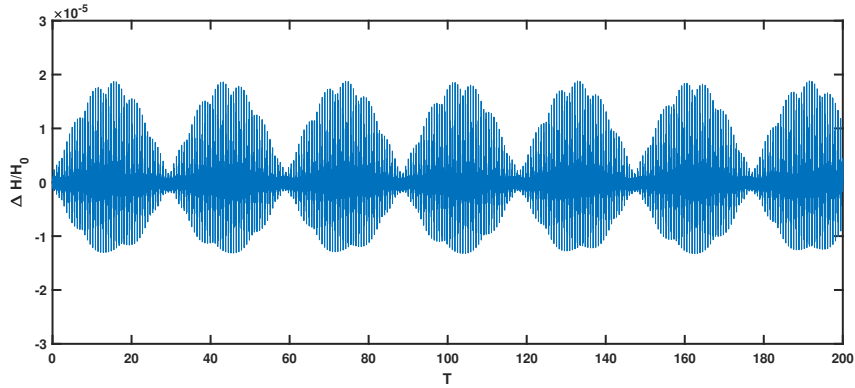


图 3.5 非均匀磁场下系统哈密顿量的相对误差 ($\Delta t = \Delta \tau / B = 0.05 / B$).

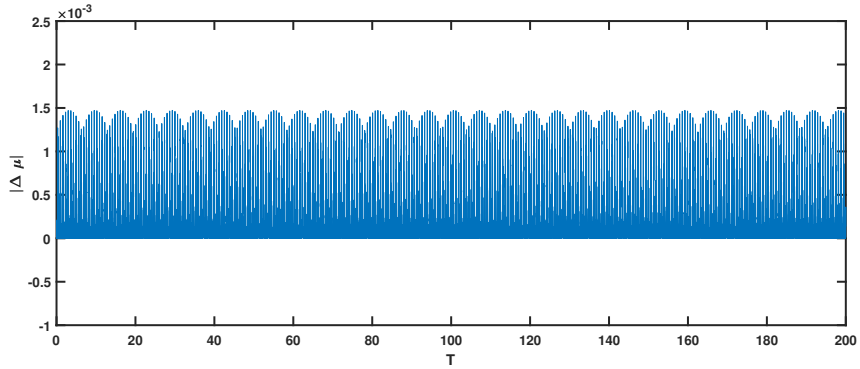


图 3.6 非均匀磁场下系统磁矩的绝对误差 ($\Delta t = \Delta \tau / B = 0.05 / B$).

最后我们考虑的是一个非对称的磁场

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}) = 100 \left[\frac{1}{3}, 0, 1 \right]^T + 50 [y - z, x + z, y - x]^T,$$

对应的磁势为

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}) = 25 \left[z^2 - y^2 - 2y, 2x - x^2 + z^2 - \frac{2}{3}z, y^2 - x^2 + \frac{2}{3}y \right]^T.$$

图 3.8 展示了在该磁场下粒子的运动轨迹. 图 3.9 和 3.10 分别展示了定步长以及变步长中点格式的哈密顿量误差和磁矩误差, 可以看出在长时间内能量误差和磁矩误差均保持有界, 并且变步长策略所得的误差更小. 我们也对比了计算到相同时刻 $T = 100$ 时定步长和变步长的效率, 如图 3.11 所示, 可以看出达到相同误差时, 变步长所需步数明显少于定步长算法. 对于该算例, 计算效率提高了约 400%.

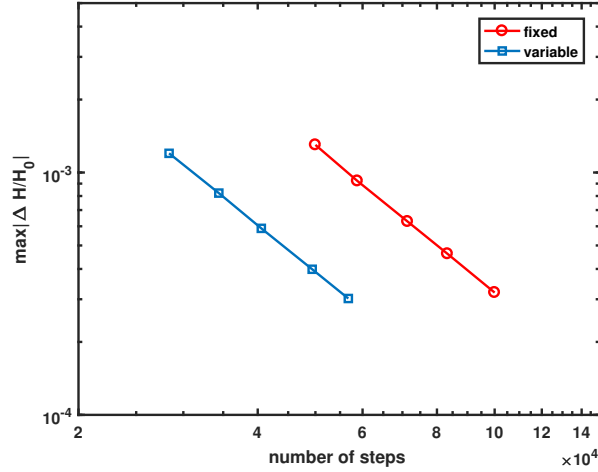


图 3.7 非均匀磁场下变步长和定步长的计算效率比较 ($T = 100$).

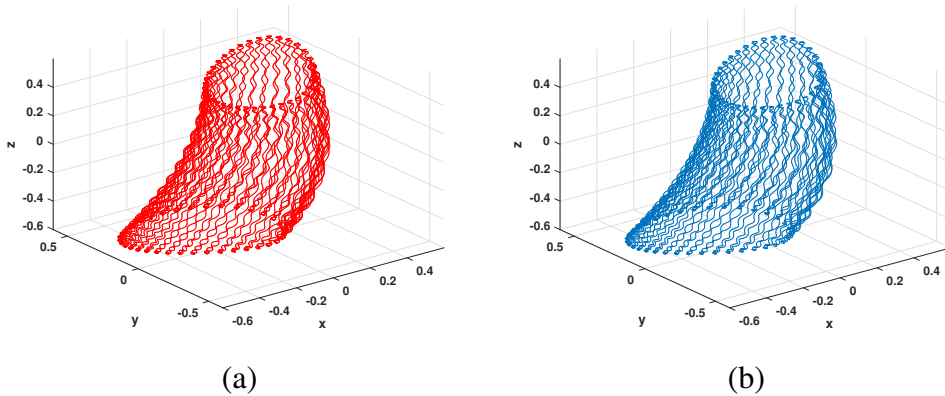


图 3.8 非对称磁场下带电粒子在 Penning 阱中的运动轨迹. (a) 定步长隐中点. (b) 变步长隐中点.

在数值实现中, 我们发现变步长算法可以采用比定步长算法更大的步长. 以非对称磁场为例, 磁场强度变化范围大致为 77.86 到 167.36, 所以相应的回旋周期变化范围为 $T_{cl} = 0.0375$ 到 $T_{ch} = 0.0807$. 若采用定步长隐中点格式, 最大步长可以取到 $\Delta t = 0.32 T_{cl} \approx 0.012$, 如果选取稍大步长 $\Delta t = 0.33 T_{cl}$, 在误差容

限 $ep = 10^{-10}$ 时, 迭代已经不收敛. 但是对于变步长隐中点格式, 我们在步长取 $\Delta\tau = 1.98$ 时依然可以得到满意的结果. 在图 3.12 中我们展示了对应 $\Delta\tau = 1.98$ 时步长的变化 $\Delta t_n \approx \Delta\tau\sigma_n$, 可以看出步长变化范围为 0.0118 到 0.0254, 步长 $\Delta\tau = 1.98$ 时的能量相对误差和磁矩绝对误差如图 3.13 和 3.14 所示, 可以看出, 在大步长的情况下, 我们的算法依然可以保持能量误差和磁矩误差长时间有界.

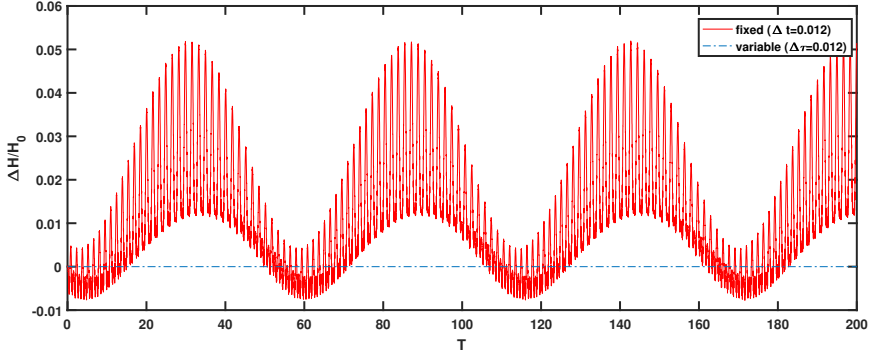


图 3.9 非对称磁场下哈密顿量相对误差. 红色代表定步长算法, 其中步长为 $\Delta t = 0.012$, 蓝色代表变步长算法, 其中 $\Delta t = \Delta\tau/B = 0.012/B$.

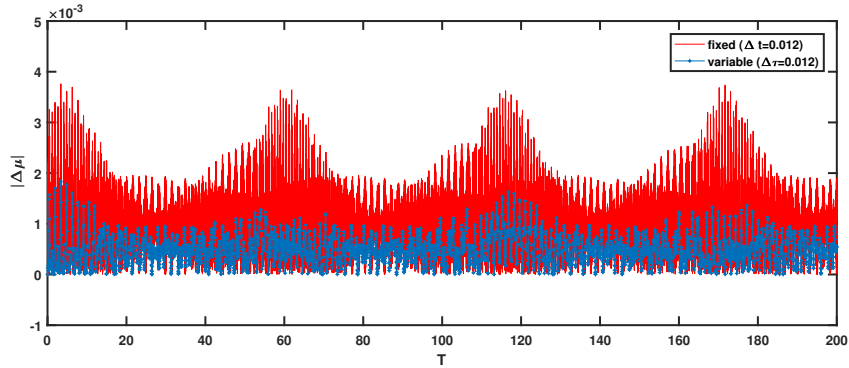


图 3.10 非对称磁场下的磁矩绝对误差. 红色代表定步长算法, 其中步长为 $\Delta t = 0.012$, 蓝色代表变步长算法, 其中 $\Delta t = \Delta\tau/B = 0.012/B$.

相对论单粒子模型. 下面我们考虑对于相对论带电粒子系统的数值模拟, 我们取步长函数为 $\sigma = \gamma/B$, 其中 γ 为洛伦兹因子. 在该算例中, 我们选取了两种类型的电磁场, 分别为均匀电磁场以及托卡马克位形下的非均匀电磁场.

首先我们考虑均匀电磁场下逃逸电子的运动. 在该算例中, 我们选择的电磁场为

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = E_0[0, 0, 1]^\top, \quad \mathbf{B}(\mathbf{x}) = B_0[0, 0, 1]^\top,$$

其中 $B_0 = 1$, $E_0 = 0.005$. 对应的电磁势可以表达为

$$\varphi(\mathbf{x}) = -E_0 z, \quad \mathbf{A}(\mathbf{x}) = B_0[0, x, 0]^\top.$$

粒子的初始速度选为 $v_x = 10^{-2}$, $v_y = v_z = 0$, 初始位置为 $y = 0.01$, $x = z = 0$. 这里我们选择了两种辛算法, 分别为隐中点格式以及 4 阶 Gauss 算法, 其中 4 阶 Gauss 算法的系数如表 3.1.

表 3.1 4 阶 Gauss 方法的系数.

$\frac{6-2\sqrt{3}}{12}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{3-2\sqrt{3}}{12}$
$\frac{6+2\sqrt{3}}{12}$	$\frac{3+2\sqrt{3}}{12}$	$\frac{1}{4}$
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$

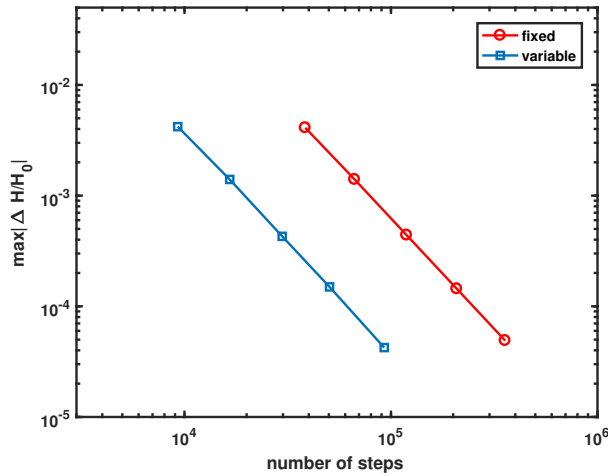


图 3.11 非对称磁场下定步长与变步长的计算效率比较 ($T = 100$).

我们首先采用 Gauss 算法分别结合定步长和变步长策略, 步长选为 $\Delta t = 2\pi/(100B_0)$. 图 3.15 展示了当 $T = 1000$ 时, 带电粒子在第一个回旋周期内以及最后一个回旋周期内的运动. 由于回旋周期随着时间增大, 采用定步长算法模拟一个回旋周期内的运动所需步数会变多, 所以定步长的计算低效. 相反的, 我们采用的变步长策略可以实现每个周期内均匀采样, 所以完成一个回旋周期的模拟对应的计算量是不变的. 表 3.2 中, 我们具体给出了模拟不同回旋周期所需的步数, 可以看出, 当模拟第 150 个回旋周期时, 定步长需要的步数增加到了 5740 步, 而变步长算法依然只需 100 步. 另一方面, 对于守恒量的保持, 变步长算法

也表现出了令人满意的结果，在图 3.16 中，我们展示了采用变步长隐中点格式和变步长 Gauss 算法所得的相对能量误差，可以看出两个算法均能在很长时间内保持误差有界，其中变步长 Gauss 算法的误差更小。

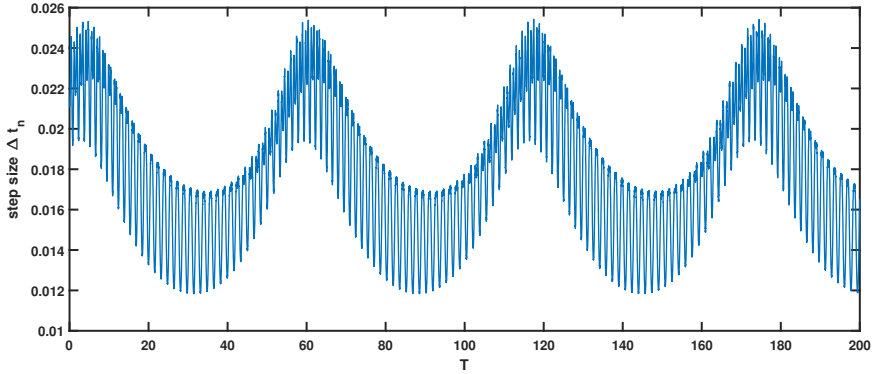


图 3.12 非对称磁场下实际步长 Δt 的变化 ($\Delta\tau = 1.98$).

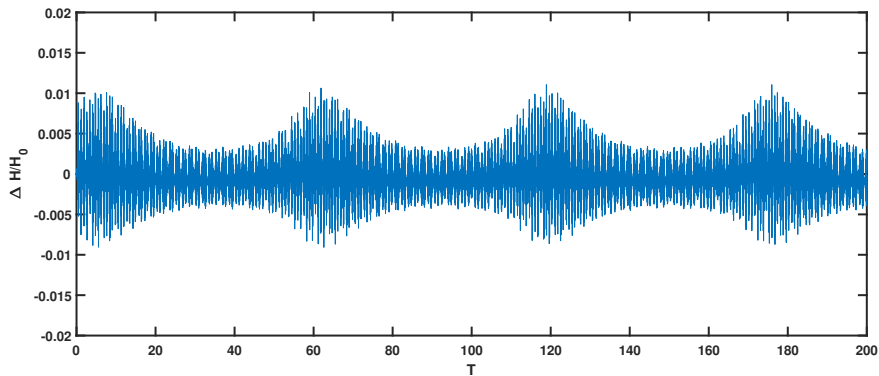
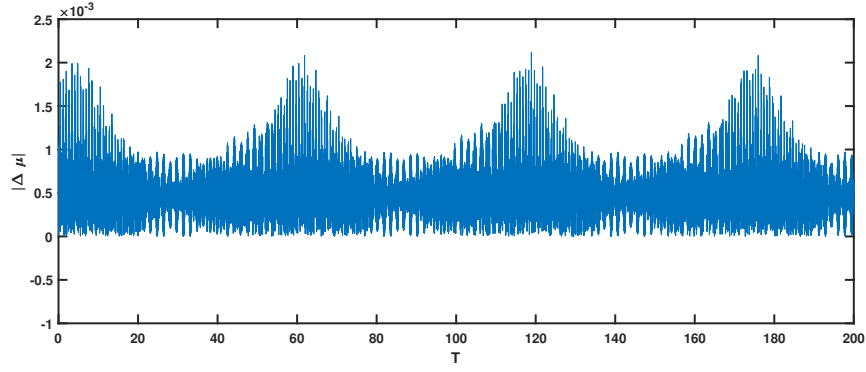
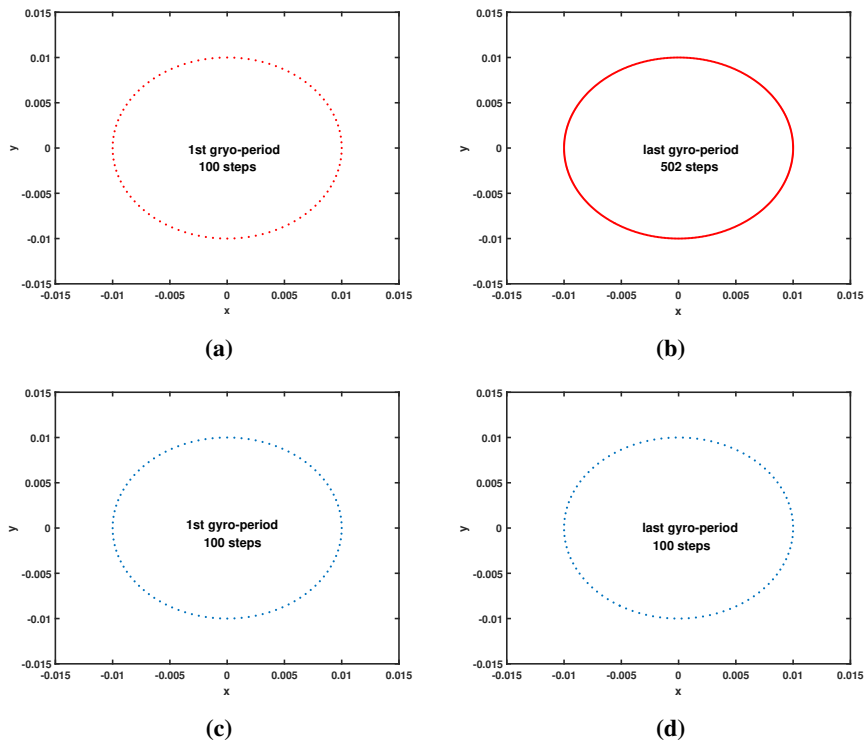


图 3.13 非对称磁场下相对能量误差 ($\Delta t = \Delta\tau/B = 1.98/B$).

托卡马克 (Tokamak) 是约束带电粒子的另一种重要装置。在托卡马克装置中，等离子体被加热到一亿度以上的高温，并被环形磁场约束足够长的时间，以达到核聚变的目的。在托卡马克等离子体中，随着电子速度的增加，电子受到的阻尼力在某一时刻将小于其受到的电场力，于是电子将在环向电场的作用下持续的被加速，从而获得很高的能量。我们把这种电子称之为“逃逸电子” [94]。由于大量的逃逸电子具有极高的速度和能量，会与器壁撞击而造成装置损坏，所以对于逃逸电子的研究也是等离子体物理中的一个重要课题。逃逸电子的运动时空尺度差异巨大，例如粒子的回旋频率与加热频率相差达 10^{11} 倍，电子德拜长度与粒子平均自由程相差 10^7 倍，为了研究逃逸电子的动力学现象，发展高效且长时间稳定的数值算法具有重要意义。


 图 3.14 非对称磁场下绝对磁矩误差 ($\Delta t = \Delta\tau/B = 1.98/B$).

 图 3.15 逃逸电子在均匀磁场下第一个和最后一个回旋周期内的运动 ($T = 1000$). (a) 和 (b): 定步长 Gauss 算法. (c) 和 (d): 变步长 Gauss 算法.

在该算例中, 我们通过计算 N 个 Newton–Lorentz 方程组成的系统来模拟逃逸电子的集体行为. 对该系统的求解是在 LSSC-IV¹ 上完成的, 其中终止时间为 $T = 5 \cdot 10^{10}$.

托卡马克位形中的电磁场可以在环坐标 (r, θ, ξ) 下表达为

$$\mathbf{B} = \frac{B_0 \sqrt{(R - R_0)^2 + z^2}}{qR} \mathbf{e}_\theta + \frac{B_0 R_0}{R} \mathbf{e}_\xi, \quad \mathbf{E} = -E_0 \frac{R_0}{R} \mathbf{e}_\xi, \quad (3.17)$$

¹LSSC-IV 是中国科学院科学与工程计算国家重点实验室高性能计算机系统.

其中 $R = \sqrt{x^2 + y^2}$, ξ 和 z 分别表示径向半径, 方位角, 以及对应柱坐标的 z 轴. R_0 为主半径, q 为安全因子, \mathbf{e}_ξ , \mathbf{e}_θ , \mathbf{e}_R 和 \mathbf{e}_z 分别表示环向, 极向, 径向和 z 轴方向的单位向量. 常数 B_0 和 E_0 表示环向磁场和电场在磁轴处的值. 这里, 我们取磁势 \mathbf{A} 和电势 φ 为

$$\mathbf{A} = \frac{B_0((R - R_0)^2 + z^2)}{2qR} \mathbf{e}_\xi - \ln\left(\frac{R}{R_0}\right) \frac{B_0 R_0}{2} \mathbf{e}_z + \frac{B_0 R_0 z}{2R} \mathbf{e}_R, \quad (3.18)$$

$$\varphi = E_0 R_0 \xi.$$

我们这里选择的磁势 \mathbf{A} 满足 $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, 所以是 Coulomb 规范. 但是文献 [95] 对上面托卡马克位形中的电磁场也给出了另一种电磁势: 电势 $\varphi = 0$, 磁势 $\tilde{\mathbf{A}}$ 取为 $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} - \mathbf{E}t$, 其中 \mathbf{A} 和 \mathbf{E} 如 (3.18) 和 (3.17) 所示. 可以验证, 这种电磁势满足 Weyl 规范条件. 对于这种选择, 我们有 $\mathbf{E} = -\frac{\partial \tilde{\mathbf{A}}}{\partial t}$, 可以理解为电场是由环电压产生的感应电场.

表 3.2 不同回旋周期内定步长和变步长 Gauss 算法的迭代步数.

周期	1st	70th	120th	150th
定步长	100	451	2134	5470
变步长	100	100	100	100

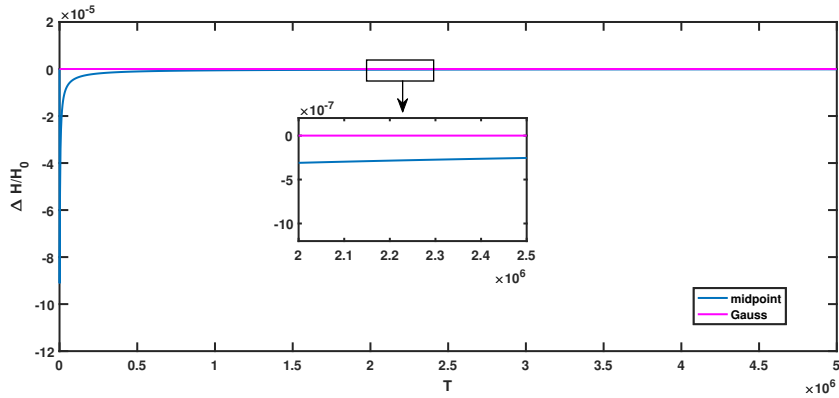


图 3.16 变步长中点格式和变步长 Gauss 算法的相对能量误差 ($\Delta t = \Delta\tau\gamma/B = 0.06\gamma/B$).

为了模拟逃逸电子的集体行为, 我们选择文献 [96] 中的初值. 在极坐标下, 初始的分布函数为

$$f(R, z) = f_0 \left(1 - \frac{(R - R_0)^2 + z^2}{r_b^2} \right),$$

其中 $r_b = 2m$ 表示初始分布的外边界. 初始动能按期望为 47.5 Mev , 标准差为 0.25 Mev 的正态分布采样. 初始的环向角 θ_0 服从 0 到 2π 的均匀分布, 初始的 pitch 角满足从 0 到 0.3 均匀分布, 初始的回旋相位满足从 0 到 2π 均匀分布.

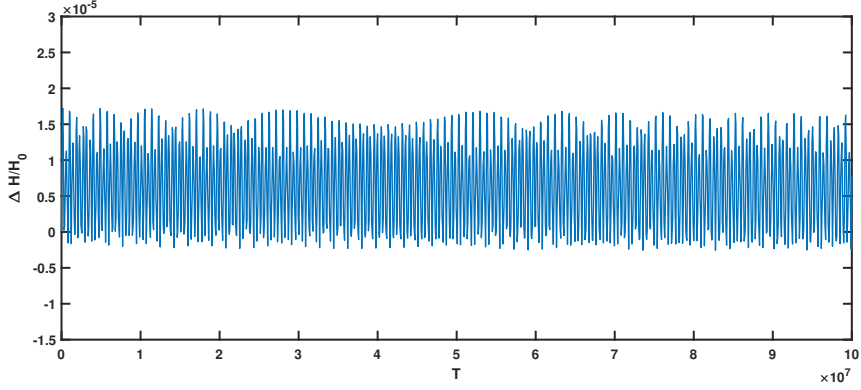


图 3.17 托卡马克中单个逃逸电子的相对能量误差 ($\Delta t = \Delta\tau\gamma/B = 0.8\gamma/B$, $E_0 = -2$, $B_0 = -5.3$).

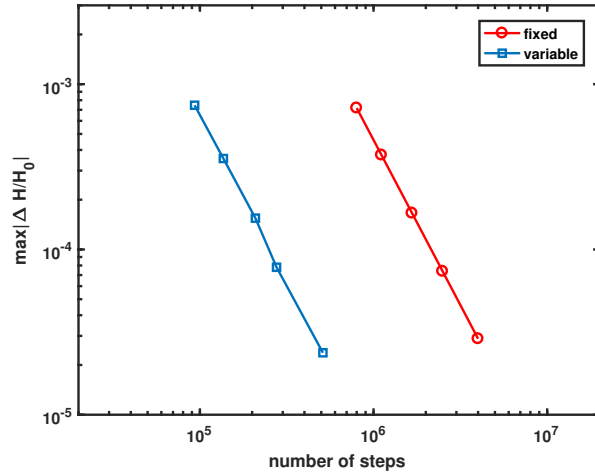


图 3.18 逃逸电子运动的能量误差 vs. 迭代步数. 终止时间 $T = 2 \cdot 10^6$, $B_0 = 5.3$, $E_0 = 200$, 初始位置 $\mathbf{x}_0 = [23296.7, 0, 0]^T$, 初始动量 $\mathbf{P}_0 = [3.3875, 165.0318, -1831.295]^T$.

我们首先采用变步长辛算法模拟了单个逃逸电子的运动. 在图 3.17 中, 我们展示了能量误差, 可以看出能量误差在很长时间内一直保持有界, 且误差很小. 在图 3.18 中, 我们计算了变步长和定步长算法的效率, 其中红线为定步长所得结果, 蓝线为变步长所得结果, 可以看出, 对比定步长算法, 变步长算法效率提高了约 10 倍. 为了研究逃逸电子的集体行为, 在图 3.19 中, 我们展示了逃逸电子的密度函数随时间的演化, 其中下面三幅图和上面三幅图的电磁场方向相反. 可以观察到随时间演化逃逸电子一直向外漂移, 这一结果和实验观察是一致的.

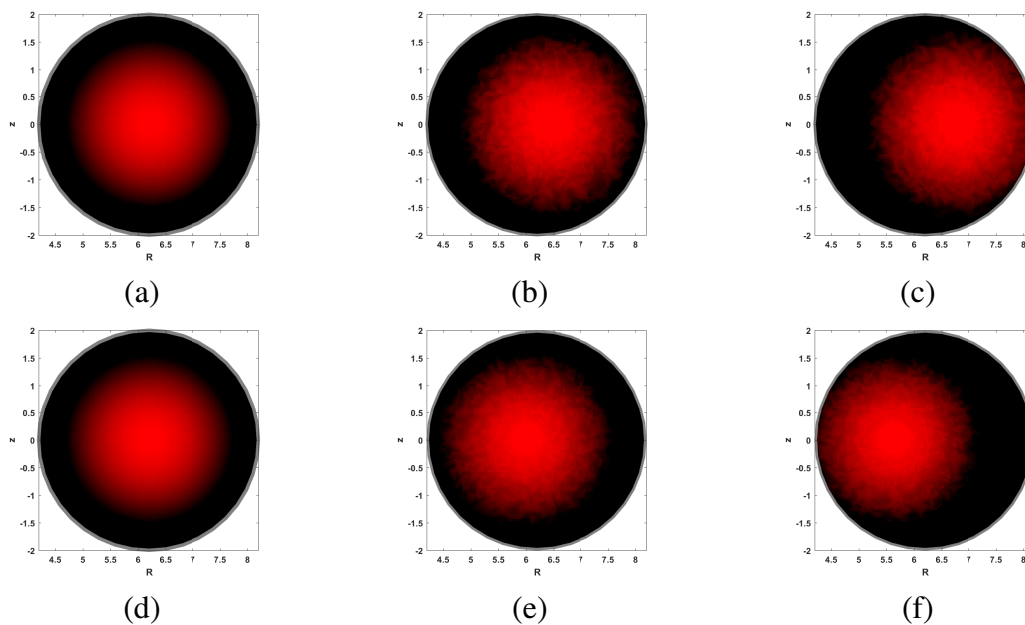


图 3.19 托卡马克中逃逸电子极向截面密度随时间演化. (a) (d) $T = 0$, (b) (e) $T = 2 \cdot 10^{10}$, (c) (f) $T = 5 \cdot 10^{10}$.

3.4 本章小结

在本章中，我们首先介绍了哈密顿系统的变步长辛算法，通过选取合适的步长函数，我们对等离子体物理中的单粒子模型构造了相应的变步长方法. 利用新得到的变步长辛算法，我们分别模拟了带电粒子在 Penning 阱中的三种不同电磁场以及托卡马克位形下的电磁场中的运动，可以看出，变步长辛算法既能长时间保持系统的守恒量，又可以极大的提高计算效率. 此外，我们对逃逸电子的集体行为进行了长时间模拟，可以看出算法能高效且准确地刻画逃逸电子的运动.

第4章 强磁场下单粒子模型的保结构算法

近年来,针对强磁场下的单粒子模型,已经构造了一系列数值算法来模拟带电粒子的动力学行为 [24, 25, 28, 30, 32–35, 97, 98]. 本章主要考虑一类带小参数 $\varepsilon (\varepsilon \ll 1)$ 的非均匀强磁场 [99, 100], 它的磁场强度与 $1/\varepsilon$ 成正比. 我们主要研究了三种数值方法: *Boris* 算法 [101–104], 变分格式 [34, 105] 以及新提出的滤子变分格式. 通过 *Modulated Fourier* 展开, 给出了数值解在不同时间尺度 ε^0 , ε^{-1} , 以及 ε^{-N} ($N > 1$) 下的误差估计, 并分析了守恒量的长时间保持情况.

4.1 强磁场单粒子模型的多尺度行为

考虑如下二阶微分方程

$$\ddot{x} = \dot{x} \times B(x) + E(x), \quad (4.1)$$

其中 $x \in \mathbb{R}^3$ 为粒子位置, $B(x) = B_0/\varepsilon + B_1(x)$ ($0 < \varepsilon \ll 1$), $B_0 \in \mathbb{R}^3$ 为常向量且 $|B_0| = 1$. 记 $A_1(x)$ 为 $B_1(x)$ 对应的磁势, 则 $B(x)$ 对应的磁势 $A(x) = -\frac{1}{2}x \times B_0/\varepsilon + A_1(x)$.

在本章中, 假设 $B_1: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ 和 $E: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ 是光滑的且各阶导数在 \mathbb{R}^3 的紧集上关于 ε 是一致有界且初始位置和速度满足

$$|x(0)| \leq C_0, \quad |\dot{x}(0)| \leq C_1, \quad (4.2)$$

其中 C_0, C_1 与 ε 无关. 记 $v = \dot{x}$, 可以验证在满足条件 (4.2) 时系统的总能量

$$H(x, v) = \frac{1}{2}|v|^2 + \varphi(x) \quad (4.3)$$

是守恒的且与 ε 无关, 其中 $-\nabla\varphi(x) = E(x)$. 记系统的磁矩为

$$I(x, v) = \frac{1}{2\varepsilon} \frac{|v \times B(x)|^2}{|B(x)|^3}. \quad (4.4)$$

可知, 在 $t \leq \varepsilon^{-N}$ ($N > 1$) 时, 磁矩满足

$$|I(x(t), v(t)) - I(x(0), v(0))| \leq C\varepsilon,$$

这表明磁矩是一个绝热不变量, 参见 [34, 106–108].

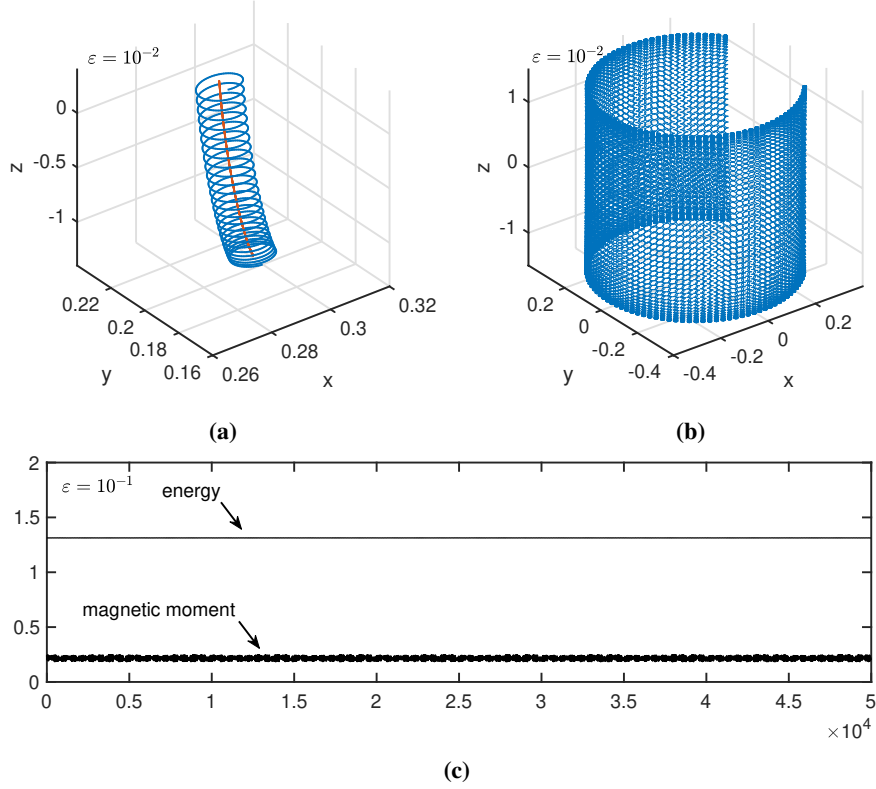


图 4.1 (a) $t \leq \pi/2$ 内粒子的运动轨迹. (b) $t \leq 5/\varepsilon$ 内粒子的运动轨迹. (c) $t \leq \varepsilon^{-4}$ 内能量和磁矩随时间的演化.

在图 4.1 中, 我们采用如下的电磁场

$$E(x) = -x, \quad B(x) = \frac{1}{\varepsilon} [0, 0, 1]^\top + [x_1(x_3 - x_2), x_2(x_1 - x_3), x_3(x_2 - x_1)]^\top,$$

对应的电磁势为

$$\varphi(x) = \frac{1}{2}|x|^2 \text{ 和 } A(x) = -\frac{1}{2} [x_2, -x_1, 0]^\top + x_1 x_2 x_3 [1, 1, 1]^\top,$$

选取初值为 $x(0) = (0.3, 0.2, -1.4)^\top$ 和 $v(0) = (-0.7, 0.08, 0.2)^\top$, 我们展示了在不同时间尺度下带电粒子的运动. 在图 4.1 (a) 中, 我们观察到在时间尺度为 ε 时带电粒子的 Larmor 回旋运动, 其角频率为 ε^{-1} , 振幅为 $O(\varepsilon)$, 以及在时间尺度为 ε^0

时的导心运动. 在图 4.1 (b) 中, 我们展示了在时间尺度为 ϵ^{-1} 下在垂直于磁场方向上带电粒子的缓慢漂移运动. 图 4.1 (c) 展示了系统的磁矩以及能量在 $t \leq \epsilon^{-4}$ 内随时间的变化, 可以看出能量一直保持守恒, 磁矩在长时间内也近似守恒.

4.2 数值方法

本节我们首先介绍了两种常用的数值格式: *Boris* 算法 [101–104] 和变分格式 [34, 105], 并针对 (4.1), 构造了新的滤子变分格式.

Boris 算法是求解单粒子模型的一个经典格式, 参见 [36, 101, 109]. 可以表达为

$$\begin{aligned} v_+^{n-\frac{1}{2}} &= v^{n-\frac{1}{2}} + \frac{h}{2} E^n \\ v_-^{n+\frac{1}{2}} - v_+^{n-\frac{1}{2}} &= \frac{h}{2} (v_-^{n+\frac{1}{2}} + v_+^{n-\frac{1}{2}}) \times B^n \\ v^{n+\frac{1}{2}} &= v_-^{n+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2} E^n \\ x^{n+1} &= x^n + h v^{n+\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (4.5)$$

其中 $B^n = B(x^n)$, $E^n = E(x^n)$. $v^{1/2} = v^0 + \frac{h}{2} v^0 \times B^0 + \frac{h}{2} E^0$.

该算法可以写成等价的两步格式

$$\frac{x^{n+1} - 2x^n + x^{n-1}}{h^2} = \frac{x^{n+1} - x^{n-1}}{2h} \times B^n + E^n, \quad (4.6)$$

速度近似为

$$v^n = \frac{x^{n+1} - x^{n-1}}{2h}. \quad (4.7)$$

我们知道当 B 是均匀磁场时, *Boris* 算法是辛的 [103]. 当步长满足 $h|B| \ll 1$ 时, 即 $h \ll \epsilon$ 时, 文献 [104] 证明了当 B 是均匀磁场或者电势 φ 为二次多项式的时候, *Boris* 算法可以长时间保持能量.

本文中, 我们主要考虑数值算法采用大步长

$$0 < \epsilon \leq h^2 \ll 1 \quad (4.8)$$

求解 (4.1) 时的数值表现. 当步长满足条件 (4.8) 时, 如果直接取 $v^0 = v(0)$, 那么 Boris 格式会产生高振荡行为并且振幅正比于 $(h^2/\epsilon)|v_{\perp}^0|$, 参见 [97]. 这里我们对初始速度进行修正使得 v^0 垂直于磁场方向的分量 v_{\perp}^0 为 $O(\epsilon)$. 具体的, 我们取 $v^0 = v_{\parallel}^0 + v_{\perp}^0$ 满足

$$v_{\parallel}^0 = P_0 v(0), \quad v_{\perp}^0 = \epsilon(v_{\parallel}^0 \times B_1(x^0) + E(x^0)) \times B_0, \quad (4.9)$$

其中 $P_0 = B_0 B_0^T$ 是在 B_0 方向的正交投影. 采用该修正初始速度其实是对于导心运动的近似, 所以在实际计算中, 对于初始位置我们也采用导心近似 $x^0 = x(0) + \epsilon v(0) \times B_0$. 我们注意到单步映射 $(x^n, v^{n-1/2}) \mapsto (x^{n+1}, v^{n+1/2})$ 是保体积的 [102].

下面我们研究一个标准变分格式 [5, 105]

$$\begin{aligned} \frac{x^{n+1} - 2x^n + x^{n-1}}{h^2} = & \quad (4.10) \\ A'(x^n)^T \frac{x^{n+1} - x^{n-1}}{2h} - \frac{A(x^{n+1}) - A(x^{n-1})}{2h} + E^n, \end{aligned}$$

注意到 $v \times B(x) = A'(x)^T v - A'(x)v$, (4.10) 可以等价的表达为

$$\begin{aligned} \frac{x^{n+1} - 2x^n + x^{n-1}}{h^2} = & \frac{x^{n+1} - x^{n-1}}{2h} \times B^n + E^n \\ & + A'(x^n) \frac{x^{n+1} - x^{n-1}}{2h} - \frac{A(x^{n+1}) - A(x^{n-1})}{2h}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

对于均匀磁场的情形, 变分格式和 Boris 算法是一致的. 我们采用 (4.7) 对速度的近似, 可以得到相应的单步格式.

考虑强磁场单粒子模型 (4.1), 当变分格式的步长满足 $h|B| \leq C$ 时, 文献 [34] 中证明了算法在长时间内可以保持能量和磁矩误差有界. 对于大步长情形 (4.8), 由于数值解会出现高振荡行为, 所以我们应用时需要修正初始速度 (4.9).

如下我们构造一个新的格式, 它是对标准变分格式的一个修正, 该格式可以直接采用大步长 (4.8) 计算. 首先引入两个滤子函数

$$\psi(\zeta) = \text{tanch}(\zeta/2) = \frac{\tanh(\zeta/2)}{\zeta/2}, \quad \varphi(\zeta) = \frac{1}{\text{sinh}(\zeta)} = \frac{\zeta}{\sinh(\zeta)}.$$

它们均为偶函数且在 $\zeta = 0$ 处取值为 1. 记 $\text{tanc}(\xi) = \tan(\xi)/\xi$, $\text{sinc}(\xi) = \sin(\xi)/\xi$, 定义如下的滤子矩阵

$$\begin{aligned}\Psi &= \psi\left(-\frac{h}{\varepsilon}\hat{B}_0\right) = I + \left(1 - \text{tanc}\left(\frac{h}{2\varepsilon}\right)\right)\hat{B}_0^2, \\ \Phi &= \varphi\left(-\frac{h}{\varepsilon}\hat{B}_0\right) = I + \left(1 - \text{sinc}\left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{-1}\right)\hat{B}_0^2,\end{aligned}$$

其中 \hat{B}_0 是反对称矩阵且满足: 对任意的 $v \in \mathbb{R}^3$, 有 $-\hat{B}_0 v = v \times B_0$. 可以看出, 滤子矩阵 Ψ 和 Φ 均为对称矩阵.

在方程 (4.10) 等号右边左乘滤子矩阵 Ψ 有:

$$\begin{aligned}\frac{x^{n+1} - 2x^n + x^{n-1}}{h^2} &= \\ \Psi\left(A'(x^n)^\top \frac{(x^{n+1} - x^{n-1})}{2h} - \frac{A(x^{n+1}) - A(x^{n-1})}{2h} + E^n\right).\end{aligned}\tag{4.12}$$

离散速度可以如下计算

$$v^n = \Phi \frac{x^{n+1} - x^{n-1}}{2h} + \varepsilon \left(1 - \text{sinc}\left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{-1}\right) E^n \times B_0.\tag{4.13}$$

通常, 在实际计算中, 我们可以用如下等价的单步格式来求解 (4.1):

$$\begin{aligned}v_+^{n-\frac{1}{2}} &= v^{n-\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\Psi E^n \\ v_-^{n+\frac{1}{2}} - v_+^{n-\frac{1}{2}} &= h\Psi\left(\frac{1}{2}(v_-^{n+\frac{1}{2}} + v_+^{n-\frac{1}{2}}) \times B^n\right. \\ &\quad \left.+ A_1'(x^n) \frac{1}{2}(v_-^{n+\frac{1}{2}} + v_+^{n-\frac{1}{2}}) - \frac{A_1(x^{n+1}) - A_1(x^{n-1})}{2h}\right) \\ v_-^{n+\frac{1}{2}} &= v_-^{n-\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\Psi E^n \\ x^{n+1} &= x^n + hv^{n+\frac{1}{2}}.\end{aligned}$$

为了保证算法的精度, 初始速度选为 $v^{1/2} = \bar{v} + \frac{1}{2}\delta v$, 其中

$$\bar{v} = \Phi^{-1}\left(v^0 - \varepsilon\left(1 - \text{sinc}\left(\frac{h}{\varepsilon}\right)^{-1}\right)E^n \times B_0\right),$$

$$\delta v = h\Psi\left(\bar{v} \times B(x^0) + A_1'(x^0)\bar{v} - \frac{A_1(x^1) - A_1(x^{-1})}{2h} + E(x^0)\right),$$

这里 $x^{\pm 1} = x^0 \pm h\bar{v} + \frac{1}{2}h\delta v$.

若 $B(x) = B_0/\varepsilon$, 滤子变分格式等价于文献 [35] 中的滤子 Boris 算法. 进一步, 如果电场 E 是均匀的, 若初值 $(x(0), v(0))$ 给定, 则 $x^n = x(t_n)$ 且 $v^n = v(t_n)$, 具体证明可参见文献 [35].

定义离散拉格朗日函数为

$$L_h(x^n, x^{n+1}) = \frac{h}{2}(v^{n+1/2})^\top \Psi^{-1} v^{n+1/2} + h \frac{A(x^n)^\top + A(x^{n+1})^\top}{2} v^{n+1/2} - h \frac{\varphi(x^n) + \varphi(x^{n+1})}{2},$$

其中 $v^{n+1/2} = (x^{n+1} - x^n)/h$. 通过离散 Euler-Lagrangian 方程, 可以推导出滤子变分格式 (4.12). 矩阵 Ψ^{-1} 的垂直于 B_0 的特征向量的特征值为 $1/\text{tanc}(h/(2\varepsilon)) \propto h/\varepsilon$. 当步长 h 满足 $\tan(h/(2\varepsilon)) \geq c > 0$ 时, 滤子矩阵 Ψ 是正定的,

4.3 精确解和数值解的 Modulated Fourier 展开

当数值格式中的步长满足 $h \leq C\varepsilon$ 时, 文献 [5, 34, 35, 110] 中给出了 Modulated Fourier 展开结果. 这里我们考虑采用大步长 $h^2 \geq c\varepsilon$ 的情形, 为了简单起见, 我们下面均取常数 c 为 1.

4.3.1 精确解的 Modulated Fourier 展开

我们将方程 (4.1) 的解表达为

$$x(t) \approx \sum_k z^k(t) e^{ikt/\varepsilon} \quad (4.14)$$

其中系数 $z^k(t)$ 的任意阶导数都是有界的, 界与 ε 无关.

考虑线性映射 $v \mapsto v \times B_0$, 假定 $|B_0| = 1$, 则该线性映射的特征值为 $\lambda_1 = i$, $\lambda_0 = 0$ 和 $\lambda_{-1} = -i$. 归一化后的特征向量记作 $v_1, v_0 = B_0, v_{-1} = \bar{v}_1$. 记 $P_j = v_j v_j^*$ 表示正交投影, 则 (4.14) 中的系数可表示为

$$z^k = z_1^k + z_0^k + z_{-1}^k, \quad z_j^k(t) = P_j z^k(t).$$

根据文献 [34, 35] 中定理 4.1, 当频率是常数 $1/\varepsilon$, 投影矩阵 P_j 是常矩阵的情形, 我们可以得到如下的定理.

定理 4.1. 记 $x(t)$ 为方程 (4.1) 的精确解, 其中初始速度关于 ε 一致有界 ($|\dot{x}(0)| \leq C_1$), 假定 $x(t)$ 在时间 $0 \leq t \leq T$ 内均保持在紧集 \mathbb{K} 上 (其中 \mathbb{K} 和 T 与 ε 无关). 则对任意的 $N \geq 1$, $x(t)$ 可以表示为

$$x(t) = \sum_{|k| \leq N} z^k(t) e^{ikt/\varepsilon} + R_N(t)$$

其中

(a) 系数 z^k 及其直到 N 阶导数均有界: 对 $j \in \{-1, 0, 1\}$, $z_j^0 = O(1)$, $z_1^1 = O(\varepsilon)$, $z_{-1}^{-1} = O(\varepsilon)$, 对其余满足 $|k| \leq N$ 的 (k, j) 有

$$z_j^k = O(\varepsilon^{|k|+1}).$$

这些系数直到 $O(\varepsilon^{N+2})$ 唯一确定, 并且满足 $z_{-j}^{-k} = \overline{z_j^k}$. 特别的, 有 $\dot{z}_{\pm 1}^0 = O(\varepsilon)$.

(b) 余项 R_N 及其导数满足

$$R_N(t) = O(t^2 \varepsilon^N), \quad \dot{R}_N(t) = O(t \varepsilon^N).$$

(c) 系数 z_0^0 , $z_{\pm 1}^0$, z_1^1 , z_{-1}^{-1} 满足如下的微分方程

$$\dot{z}_0^0 = P_0(\dot{z}_0^0 \times B_1(z_0^0) + E(z_0^0)) + 2P_0 \operatorname{Re}\left(\frac{i}{\varepsilon} z_1^1 \times B_1'(z_0^0) z_1^{-1}\right) + O(\varepsilon^2),$$

$$\dot{z}_{\pm 1}^0 = \pm i \varepsilon P_{\pm 1}(\dot{z}_{\pm 1}^0 \times B_1(z_0^0) + E(z_0^0)) + O(\varepsilon^2),$$

$$\dot{z}_{\pm 1}^{\pm 1} = P_{\pm 1}(z_{\pm 1}^{\pm 1} \times B_1(z_0^0)) + O(\varepsilon^2).$$

其余系数 z_j^k 可以由 z_0^0 , \dot{z}_0^0 , z_1^1 , z_{-1}^{-1} 确定.

(d) 对于 (c) 中微分方程的初值可以如下确定

$$z_0^0(0) = x(0) + \varepsilon \dot{x}(0) \times B_0 + O(\varepsilon^2),$$

$$\dot{z}_0^0(0) = P_0 \dot{x}(0) - \varepsilon P_0((\dot{x}(0) \times B_0) \times B_1(x(0))) + O(\varepsilon^2),$$

$$z_{\pm 1}^{\pm 1}(0) = \mp i \varepsilon P_{\pm 1} \dot{x}(0) + O(\varepsilon^2).$$

以上展开中所有高阶项的系数与 ε , t 无关, 但依赖 N , M , B_1 和 E 导数的界, 紧集 \mathbb{K} 以及 T .

4.3.2 Boris 算法及标准变分算法的 Modulated Fourier 展开

考虑线性微分方程 $\ddot{x} = \dot{x} \times B_0/\varepsilon$, $|B_0| = 1$. 对它应用 Boris 算法, 可知相应的数值解 x^n 是 1, nh 和 $e^{\pm inh\omega}$ 的一个线性组合, 且系数与 n 无关, 其中

$$h\omega = 2 \arctan\left(\frac{h}{2\varepsilon}\right).$$

如果 $h/\varepsilon \gg 1$, 则 $h\omega$ 接近 π . 特别的, 如果 $h^2 \geq \varepsilon$, 那么 $h\omega = \pi - \gamma h$, 其中 $\gamma > 0$ 的界与 h 和 ε 无关, 因此 $e^{\pm inh\omega} = (-1)^n e^{\mp inh\gamma}$, 且 $e^{\mp it\gamma}$ 是一个关于 t 的光滑函数且各阶导数的界与 ε 和 h 无关.

进一步, 对方程 (4.1) 应用 Boris 算法, 可得类似的 Modulated Fourier 展开.

定理 4.2. 对 (4.1) 使用 Boris 算法或者标准变分格式, 记数值解为 x^n , 其中步长 h 满足

$$h^2 \geq \varepsilon. \quad (4.15)$$

假设初始速度 v^0 有界, 且界与 ε 和 h 无关. 记初始速度垂直于 B_0 的分量为 $v_{\perp}^0 = (I - P_0)v^0$ 且满足

$$|v_{\perp}^0| \leq c_1 \varepsilon. \quad (4.16)$$

如果数值解 x^n 在 $0 \leq nh \leq T$ 内保持在紧集 \mathbb{K} 上 (\mathbb{K} 和 T 与 ε 和 h 无关), 那么, 对任意的 $N \geq 2$, 我们有如下的分解

$$x^n = y(t) + (-1)^n z(t) + R_N(t), \quad t = nh, \quad (4.17)$$

其中

(a) 函数 $y(t)$ 和 $z(t)$ 满足 $y = O(1)$, $z = O(h^2)$, 且 $\dot{y} \times B_0 = O(\varepsilon)$, $z \cdot B_0 = O(h^4)$.

(b) 余项满足 $R_N(t) = O(t^2 h^N)$, $0 \leq t \leq T$.

(c) 函数 $y_j = P_j y$ ($j = 0, \pm 1$) 满足如下的初值问题

$$\ddot{y}_0 = P_0(\dot{y} \times B_1(y) + E(y)) + O(h^2), \quad (4.18)$$

$$\dot{y}_{\pm 1} = \pm i\epsilon P_{\pm 1} (\dot{y} \times B_1(y) + E(y)) + O(\epsilon h^2), \quad (4.19)$$

$$y(0) = x^0 + O(h^2), \quad \dot{y}_0(0) = P_0 v^0 + O(h^2). \quad (4.20)$$

(d) $z_{\pm 1}(t) = P_{\pm 1} z(t)$ 满足如下的初值问题

$$\begin{aligned} \dot{z}_{\pm 1} &= \mp 4i \frac{\epsilon}{h^2} z_{\pm 1} + O(\epsilon h^2), \\ z_{\pm 1}(0) &= \mp \frac{i h^2}{4\epsilon} P_{\pm 1} \left(v^0 \mp i\epsilon (P_0 v^0 \times B_1(x^0) + E(x^0)) \right) + O(h^4). \end{aligned}$$

函数 $z_0(t) = P_0 z$ 可由 y , \dot{y}_0 和 $z_{\pm 1}$ 确定.

以上所有展开中高阶项的系数与 ϵ , h 和 n ($0 \leq nh \leq T$) 无关, 但是依赖速度的界, B_1 和 E 导数的界, 紧集 \mathbb{K} 以及 T .

证明. 参见文献 [34] 和 [5], 易给出 (a) 和 (b) 的结论.

把 (4.17) 代入到 (4.6) 中, 将 $y(t \pm h)$ 和 $z(t \pm h)$ 在 t 处泰勒展开, 比较系数得

$$\ddot{y} + O(h^2) = \dot{y} \times \frac{B_0}{\epsilon} + \dot{y} \times B_1(y) + E(y) + O(h^2) \quad (4.21)$$

$$-\frac{4}{h^2} z - \ddot{z} + O(h^2) = -\dot{z} \times \frac{B_0}{\epsilon} + \dot{z} \times B_1(y) + \dot{y} \times B_1'(y)z + E'(y)z + O(h^2). \quad (4.22)$$

注意到 z 和它的导数为 $O(h^2)$, 因此在 (4.21) 中 \ddot{z} 及右端二, 三, 四项均为 $O(h^2)$.

对方程 (4.22) 两端作用投影 P_0 , 利用 $P_0(\dot{y} \times B_0) = 0$, 可得 (4.18). 进一步, 由于 $P_{\pm 1}(\dot{y} \times B_0) = \pm i\dot{y}_{\pm 1}$, 我们有

$$\mp \frac{i}{\epsilon} \dot{y}_{\pm 1} = -\ddot{y}_{\pm 1} + P_{\pm 1} (\dot{y} \times B_1(y) + E(y)) + O(h^2).$$

对如上方程两端求导并乘以 $i\epsilon$ 可知 $\ddot{y}_{\pm 1} = O(\epsilon)$, 进一步在条件 (4.15) 下该项为 $O(h^2)$, 从而得到关于 $y_{\pm 1}$ 的一阶微分方程.

对方程 (4.22) 两端作用投影 P_0 有 $-\frac{4}{h^2} z_0 = O(h^2)$, 所以 $z_0 = O(h^4)$. 两端作用 $P_{\pm 1}$ 有

$$-\frac{4}{h^2} z_{\pm 1} = \mp \frac{i}{\epsilon} \dot{z}_{\pm 1} + O(h^2),$$

整理便可得到关于 $z_{\pm 1}$ 的方程.

考虑方程 (4.17), 当 $n = 0$ 和 $z(0) = O(h^2)$, 我们有 $y(0) = x^0 + O(h^2)$. 在 (4.17) 中取 $n = -1, 1$, 有

$$v^0 = \frac{x^1 - x^{-1}}{2h} = \dot{y}(0) - \dot{z}(0) + O(h^2).$$

对上式作用 P_0 后, 可得 $\dot{y}_0(0)$ 的表达. 对上式两端作用 $P_{\pm 1}$ 并且利用 $y_{\pm 1}$ 和 $z_{\pm 1}$ 满足的方程, 可得 $z_{\pm 1}(0)$ 的表达. \square

通过比较精确解和数值解的展开, 可知主项系数 y 和 z^0 满足的微分方程直到 $O(h^2)$ 阶是一致的. 更高阶系数 $z_{\pm 1}$ 和 $z_{\pm 1}^{\pm 1}$ 分别满足

$$\frac{d}{dt} |z_{\pm 1}|^2 = 2 \operatorname{Re} z_{\pm 1}^* \dot{z}_{\pm 1} = O(\varepsilon |z_{\pm 1}|^2) + O(\varepsilon h^N) = O(\varepsilon h^4),$$

和

$$\frac{d}{dt} |z_{\pm 1}^{\pm 1}|^2 = 2 \operatorname{Re}(z_{\pm 1}^{\pm 1})^* \dot{z}_{\pm 1}^{\pm 1} = O(\varepsilon^3).$$

通过对比系数函数的初值所满足的方程, 可以看出, 为了获得在 $0 \leq t \leq T$ 内对导心 $z^0(t)$ 的 $O(h^2)$ 近似, 在应用 Boris 算法时, 需修正初始速度为 $v^0 = P_0 \dot{x}(0)$. 进一步, 如果取初始速度为 (4.9) 中的修正速度, 可得 $z_{\pm 1}(0) = O(h^4)$.

4.3.3 滤子变分格式的 Modulated Fourier 展开

对方程 (4.1) 应用滤子变分格式, 可以证明, 其数值解的 Modulated Fourier 展开与精确解的展开非常类似.

定理 4.3. 记 x^n 为采用滤子变分格式的数值解, 步长 h 满足

$$h^2 \geq \varepsilon \tag{4.23}$$

以及非共振条件

$$\begin{aligned} \left| \sin\left(\frac{kh}{2\varepsilon}\right) \right| \geq c > 0, \quad \left| \cos\left(\frac{kh}{2\varepsilon}\right) \right| \geq c > 0 \quad (k = 1, \dots, N), \\ \left| \tan\left(\frac{kh}{2\varepsilon}\right) - \tan\left(\frac{h}{2\varepsilon}\right) \right| \geq c > 0 \quad (k = 2, \dots, N), \end{aligned} \tag{4.24}$$

其中 c 为一个正常数. 假设初始速度 $v^0 = \dot{x}(0)$ 有界, 并且界与 ε 和 h 无关. 进一

步假设数值解 x^n 在 $0 \leq nh \leq T$ 内始终保持在紧集 \mathbb{K} 上 (\mathbb{K} 和 T 与 ε 和 h 无关). 那么, 在 $t = nh$ 时, 我们有如下分解,

$$x^n = \sum_{|k| \leq N} z^k(t) e^{ikt/\varepsilon} + R_N(t), \quad (4.25)$$

其中

(a) 对 $|k| \geq 1$, 有 $z_0^k = O(h\varepsilon^{|k|})$, 其余系数的界与定理 4.1 (a) 中的界一致.

(b) 对任意的 $M > 1$, 有

$$P_0 R_N(t) = \mathcal{O}(t^2 h^M) + \mathcal{O}(t^2 \varepsilon^N), \quad P_{\pm 1} R_N(t) = \mathcal{O}(t^2 \varepsilon h^{M-1}) + \mathcal{O}(t^2 \varepsilon^N).$$

(c) 函数 $z_0^0, z_{\pm 1}^0$ 满足如下的初值问题

$$\begin{aligned} \dot{z}_0^0 &= P_0(\dot{z}^0 \times B_1(z^0) + E(z^0)) + O(h^2), \\ \dot{z}_{\pm 1}^0 &= \pm i\varepsilon P_{\pm 1}(\dot{z}^0 \times B_1(z^0) + E(z^0)) + O(\varepsilon h), \\ z^0(0) &= x^0 + O(h^2), \quad \dot{z}_0^0(0) = P_0 v^0 + O(h^2). \end{aligned}$$

(d) 函数 z_1^1, z_{-1}^{-1} 满足如下的初值问题

$$\begin{aligned} \dot{z}_{\pm 1}^{\pm 1} &= \frac{\varepsilon}{h} \sin\left(\frac{h}{\varepsilon}\right) P_{\pm 1}(z_{\pm 1}^{\pm 1} \times B_1(z^0)) + O(\varepsilon^2), \\ z_{\pm 1}^{\pm 1}(0) &= \mp i\varepsilon P_{\pm 1} v^0 + O(\varepsilon h). \end{aligned}$$

其他系数函数 z_j^k 可由 $z^0, \dot{z}_0^0, z_1^1, z_{-1}^{-1}$ 确定.

以上所有展开中高阶项的系数与 ε, t ($0 \leq t \leq T$) 无关, 但是依赖于 N , 速度的界 (4.2), B_1 和 E 导数的界, 紧集 \mathbb{K} 和 T .

证明. 参见 [34] 和 [5], 易给出 (a) 和 (b) 的结论.

把 (4.25) 代入到滤子变分格式 (4.12) 中, 将 $z^k(t \pm h)$ 在 t 处泰勒展开. 应用文献 [35] 中的引理 5.1, 可得 $z^k(t) e^{ikt/\varepsilon}$ ($0 < |k| \leq N$) 的一阶和二阶微商展开. 考虑分量 $z_j^k = P_j z^k$ ($j = 0, \pm 1$) 满足的方程.

当 $k = 0, j = 0$ 时,

$$\ddot{z}_0^0 + O(h^2) = P_0 \left((\dot{z}^0 + O(h^2)) \times B_1(z^0) + E(z^0) + O(\varepsilon^2/h) \right),$$

这样便得到 (c) 中第一个方程.

当 $k = 0, j = 1$ 时,

$$\begin{aligned} \dot{z}_1^0 + O(\varepsilon h^2) &= \frac{2\varepsilon}{h} \tan\left(\frac{h}{2\varepsilon}\right) \left(\frac{i}{\varepsilon} (\dot{z}_1^0 + O(h^2)) \right. \\ &\quad \left. + P_1 \left((\dot{z}^0 + O(h^2)) \times B_1(z^0) + E(z^0) + O(\varepsilon^2/h) \right) \right). \end{aligned}$$

通过该方程我们可以解出 \dot{z}_1^0 , 它出现在主项并且系数为 h^{-1} . 根据非共振条件 (4.24) 有 $|\tan(h/(2\varepsilon))| \geq c > 0$, 由 (a) 知 \dot{z}_1^0 以及它的高阶导数均为 $O(\varepsilon)$, 因此得到 \dot{z}_1^0 满足的方程

$$\dot{z}_1^0 = i\varepsilon P_1 \left(\dot{z}^0 \times B_1(z^0) + E(z^0) \right) + O(\varepsilon h),$$

\dot{z}_{-1}^0 的方程可以通过对上式取共轭得到.

对 $k = 1, j = 1$, 记 $y_1^1(t) = z_1^1(t)e^{it/\varepsilon}$, 利用文献 [35] 中引理 5.1 以及 (a) 我们有

$$\begin{aligned} &\frac{y_1^1(t+h) - 2y_1^1(t) + y_1^1(t-h)}{h^2} \\ &= e^{it/\varepsilon} \left(-\frac{4}{h^2} \sin^2\left(\frac{h}{2\varepsilon}\right) z_1^1(t) + \frac{2i}{h} \sin\left(\frac{h}{\varepsilon}\right) \dot{z}_1^1(t) + O(\varepsilon) \right) \end{aligned}$$

和

$$\frac{y_1^1(t+h) - y_1^1(t-h)}{2h} = e^{it/\varepsilon} \left(\frac{i}{h} \sin\left(\frac{h}{\varepsilon}\right) z_1^1(t) + \cos\left(\frac{h}{\varepsilon}\right) \dot{z}_1^1(t) + O(\varepsilon h) \right),$$

因此

$$\begin{aligned} &P_1 \operatorname{tanch}\left(\frac{h}{2\varepsilon} \hat{B}_0\right) \left(\frac{y_1^1(t+h) - y_1^1(t-h)}{2h} \times \frac{B_0}{\varepsilon} \right) \\ &= \frac{2\varepsilon}{h} \tan\left(\frac{h}{2\varepsilon}\right) \frac{i}{\varepsilon} e^{it/\varepsilon} \left(\frac{i}{h} \sin\left(\frac{h}{\varepsilon}\right) z_1^1(t) + \cos\left(\frac{h}{\varepsilon}\right) \dot{z}_1^1(t) + O(\varepsilon h) \right) \end{aligned}$$

$$= e^{it/\varepsilon} \left(-\frac{4}{h^2} \sin^2\left(\frac{h}{2\varepsilon}\right) z_1^1(t) + \frac{2i}{h} \tan\left(\frac{h}{2\varepsilon}\right) \cos\left(\frac{h}{\varepsilon}\right) \dot{z}_1^1(t) + O(\varepsilon) \right).$$

将 (4.25) 代入到加滤子变分的两步格式中, 得到

$$\begin{aligned} & -\frac{4}{h^2} \sin^2\left(\frac{h}{2\varepsilon}\right) z_1^1(t) + \frac{2i}{h} \sin\left(\frac{h}{\varepsilon}\right) \dot{z}_1^1(t) + O(\varepsilon) \\ &= -\frac{4}{h^2} \sin^2\left(\frac{h}{2\varepsilon}\right) z_1^1(t) + \frac{2i}{h} \tan\left(\frac{h}{2\varepsilon}\right) \cos\left(\frac{h}{\varepsilon}\right) \dot{z}_1^1(t) + O(\varepsilon) \\ & \quad + \frac{2\varepsilon}{h} \tan\left(\frac{h}{2\varepsilon}\right) P_1 \left(\frac{i}{h} \sin\left(\frac{h}{\varepsilon}\right) z_1^1(t) \times B_1(z^0(t)) + O(\varepsilon) \right), \end{aligned}$$

整理可得 z_1^1 所满足的方程. 同样的, z_1^{-1} 的方程可通过对上式取共轭得到.

类似于定理 4.2 中的证明可得初值的表达. □

4.4 数值解在不同时间尺度下的分析

对 4.2 节中所提出的三种数值格式, 如下我们给出对应的数值解分别在时间尺度 ε^0 、 ε^{-1} 以及 ε^{-N} 下的数值分析以及相应的数值模拟, 其中时间步长远大于 Larmor 回旋周期.

4.4.1 时间尺度 ε^0 : 位置和平行速度的误差

通过对比数值解和精确解的 Modulated Fourier 展开, 根据定理 4.1–4.3, 我们可以得到下面的误差估计.

定理 4.4. 考虑在时间区间 $0 \leq t \leq T$ (T 不依赖于 ε) 上, 对方程 (4.1) 应用 *Boris* 算法, 标准变分格式以及滤子变分格式, 采用步长 h 满足

$$h^2 \geq \varepsilon.$$

对于 *Boris* 算法和标准变分格式, 假设定理 4.2 中的条件均满足. 对于滤子变分格式, 假设定理 4.3 中的条件均满足. 那么对于这三种算法, 位置 x 的误差以及平行速度 $v_{\parallel} = P_0 v$ 的误差在 $t_n = nh \leq T$, 均有如下表达

$$|x^n - x(t_n)| \leq Ch^2, \quad |v_{\parallel}^n - v_{\parallel}(t_n)| \leq Ch^2,$$

其中 C 与 ε , h 和 n 无关, 但依赖于 T .

证明. 该误差估计可以由定理 4.1– 4.3 直接得出. 通过对比精确解和数值解的 **Modulated Fourier** 展开的系数, 可以看出, 三种数值方法的主项函数满足的微分方程与精确解对应主项函数满足的方程直到 $O(h^2)$ 项是一致的, 所以位置误差为 $O(h^2)$. 将数值方法对应数值解的 **Modulated Fourier** 展开代入到相应速度 v^n 的离散格式中, 并与精确解的 **Modulated Fourier** 展开比较, 可得到平行速度 $O(h^2)$ 的误差. \square

注. 对于 $h^2 \sim \varepsilon$ 的情形, 上面的误差阶可以等价表达为 $O(\varepsilon)$. 对于更小的步长 $h \sim \varepsilon$, 采用文献 [34] 中的技巧, 可以证明三种数值方法的误差阶均为 $O(\varepsilon)$. 而文献 [35] 中提出的 **Filtered Boris** 算法, 当采用步长 $h \sim \varepsilon$ 时, 位置和平行速度误差可以达到 $O(\varepsilon^2)$, 垂直速度误差为 $O(\varepsilon)$.

数值实验. 考虑 4.1 节中的数值算例, 图 4.2 展示了数值解 x, v_{\parallel} 以及 v_{\perp} 在 $t = \pi/2$ 时的相对误差关于 ε 的变化: 图 (a) 是 **Boris** 算法采用原始初值的结果, 可以看出 x 和 v_{\parallel} 的误差都随着 $\varepsilon \rightarrow 0$, 且大致正比于 h^2/ε . 图 (b) 是 **Boris** 算法采用修正的初值 (4.9) 计算的结果, 图 (c) 是滤子变分格式采用原始初值的结果, 两种误差趋于常数且正比于 h^2 .

4.4.2 时间尺度 ε^{-1} : 垂直方向漂移

在 4.1 节中, 我们观察到当时间尺度为 $O(\varepsilon^{-1})$ 时, 带电粒子在垂直于磁场平面发生了缓慢的漂移运动, 下面, 我们首先对连续解的漂移运动进行了理论分析, 然后分别考虑三种数值方法对应的性质,

精确解的垂直漂移. 记 $P_{\parallel} = P_0 = B_0 B_0^{\top}$ 为 B_0 方向的正交投影, $P_{\perp} = P_1 + P_{-1} = I - P_{\parallel}$ 为与 B_0 垂直的平面的正交投影. 将 $x \in \mathbb{R}^3$ 分解为

$$x = x_{\parallel} + x_{\perp} \quad \text{其中} \quad x_{\parallel} = P_{\parallel} x, \quad x_{\perp} = P_{\perp} x.$$

假设

$$B_1(x) = B_1(x_{\perp}) + \varepsilon B_2(x), \quad E(x) = E_{\perp}(x_{\perp}) + E_{\parallel}(x) + \varepsilon E_2(x), \quad (4.26)$$

其中 $E_{\perp} \cdot B_0 = 0$, $E_{\parallel} \times B_0 = 0$, 函数 B_1 , B_2 和 E_{\perp} , E_{\parallel} , E_2 以及它们的所有导数关于 ε 一致有界. 我们可得如下定理.

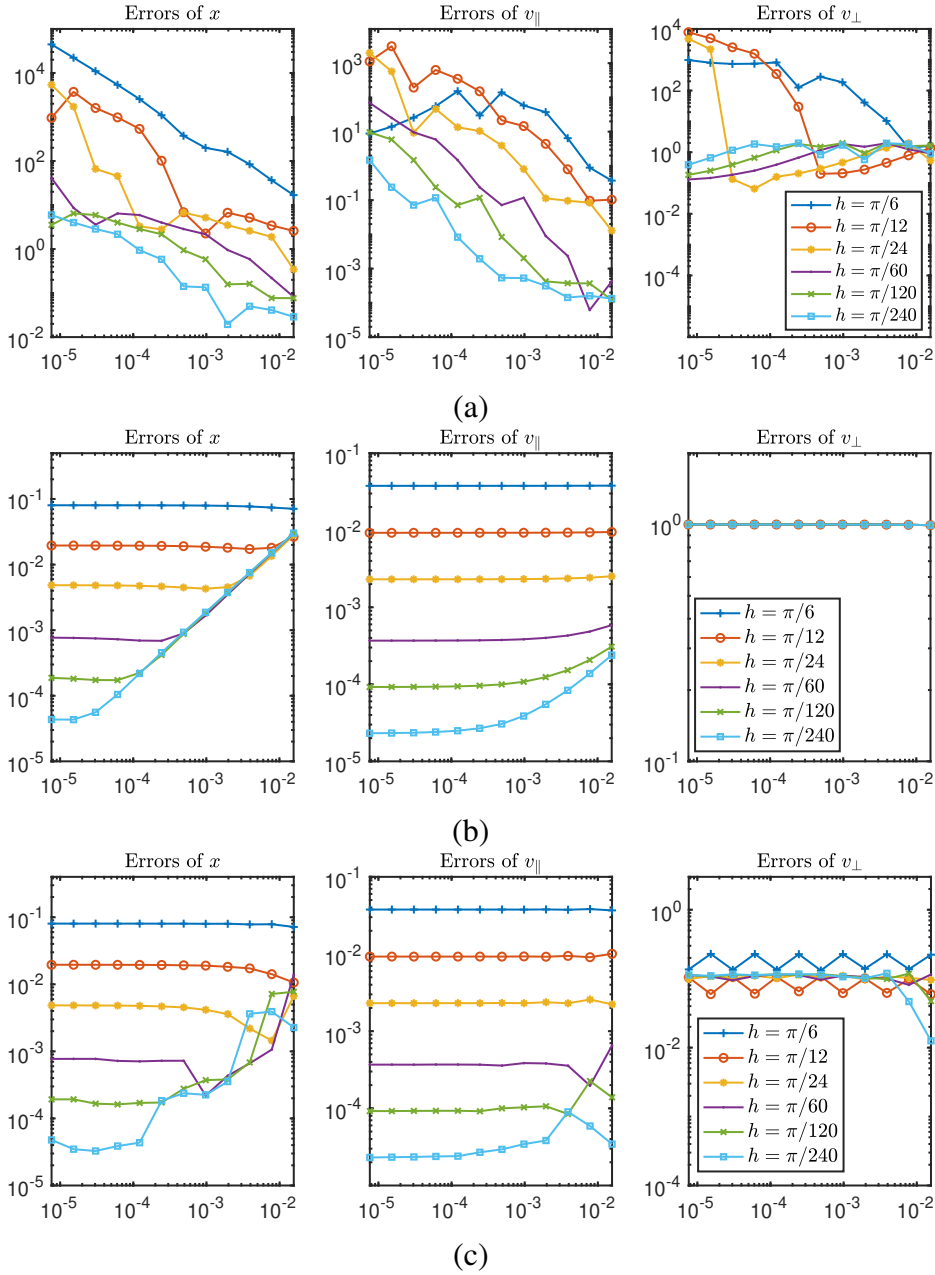


图 4.2 全局误差 vs. ε ($\varepsilon = 1/2^j, j = 6, \dots, 17$). (a) Boris 算法采用初值 $x(0)$, $v(0)$. (b) Boris 算法采用修正初始速度 (4.9). (c) 加滤子变分格式采用初值 $x(0)$, $v(0)$. 步长均取为 $h = 10^{-2}$.

定理 4.5. 记 $x(t)$ 为方程 (4.1) 的解, 其中初始速度的界与 ε 无关 ($|\dot{x}(0)| \leq M$), 电磁场满足 (4.26), 并且假定 $x(t)$ $0 \leq t \leq c\varepsilon^{-1}$ 保持在紧集 \mathbb{K} 上 (\mathbb{K} 和 c 与 ε 无关). 那么, 在 $O(\varepsilon^{-1})$ 长时间内, 下面这个非高振荡初值问题

$$\dot{y}_{\perp}(t) = \varepsilon E_{\perp}(y_{\perp}(t)) \times B_0, \quad y_{\perp}(0) = x_{\perp}(0), \quad (4.27)$$

的解 $y_{\perp}(t)$ 与 $x(t)$ 的垂直分量满足:

$$|x_{\perp}(t) - y_{\perp}(t)| \leq C\varepsilon, \quad 0 \leq t \leq c/\varepsilon. \quad (4.28)$$

其中常数 C 与 ε 和 t ($0 \leq t \leq c/\varepsilon$) 无关, 但依赖于初始速度的界 M , B_1 和 E 导数的界, 紧集 \mathbb{K} 以及 c .

证明. 应用定理 4.1 中的 Modulated Fourier 展开和 (c) 中关于 $z_{\pm 1}^0$ 和 $z_{\pm 1}^{\pm 1}$ 的方程, 我们将证明分为 (a)–(d) 四个步骤:

(a) 在 (短) 时间区间 $0 \leq t \leq 1$ 上, 定理 4.1 给出了

$$x_{\perp}(t) = z_{\perp}^0(t) + z_{\perp}^1(t)e^{it/\varepsilon} + z_{\perp}^{-1}(t)e^{-it/\varepsilon} + O(\varepsilon^2),$$

其中 $z_{\perp}^0(t) = z_{\perp}^0(t) + z_{\perp}^0(t)$, $z_{\perp}^{\pm 1}(t)$ 满足如下的微分方程

$$\begin{aligned} \dot{z}_{\perp}^0 &= \varepsilon \left((\dot{z}_{\parallel}^0 + \dot{z}_{\perp}^0) \times B_1(z_{\perp}^0) + E_{\perp}(z_{\perp}^0) \right) \times B_0 + O(\varepsilon^2), \\ \dot{z}_{\perp}^1 &= P_1(z_{\perp}^1 \times B_1(z_{\perp}^0)) + O(\varepsilon^2), \end{aligned}$$

这里 $z_{\perp}^{-1} = \overline{z_{\perp}^1}$. 由于 $\frac{d}{dt}(z_{\perp}^1 e^{it/\varepsilon}) = (iz_{\perp}^1/\varepsilon + \dot{z}_{\perp}^1)e^{it/\varepsilon} = O(\varepsilon)$, 我们有 $\dot{z}_{\parallel}^0 = \dot{z}_{\parallel}^0 = \dot{x}_{\parallel} + O(\varepsilon)$.

(b) 在每一个时间区间 $n \leq t \leq n+1$ ($n \leq c/\varepsilon$) 类似于 (a) 进行操作. 记 $y_{\perp}^{[n]}$ 表示在这个区间上的函数 z_{\perp}^0 , 记 $z_{\perp}^{[n]}$ 表示在该区间上的函数 z_{\perp}^1 , 我们有

$$x_{\perp}(t) = y_{\perp}^{[n]}(t) + 2 \operatorname{Re}(z_{\perp}^{[n]} e^{it/\varepsilon}) + O(\varepsilon^2), \quad n \leq t \leq n+1,$$

其中 $y_{\perp}^{[n]}$ 和 $z_{\perp}^{[n]}$ 是如下初值问题的解

$$\begin{aligned} \dot{y}_{\perp}^{[n]} &= \varepsilon \left(\dot{x}_{\parallel} \times B_1(y_{\perp}^{[n]}) + E_{\perp}(y_{\perp}^{[n]}) \right) \times B_0, \\ y_{\perp}^{[n]}(n) &= x_{\perp}(n) - 2 \operatorname{Re}(z_{\perp}^{[n]}(n) e^{in/\varepsilon}), \end{aligned}$$

和

$$\dot{z}_{\perp}^{[n]} = P_1(z_{\perp}^{[n]} \times B_1(y_{\perp}^{[n]})),$$

$$z_1^{[n]}(n) = i\varepsilon P_1 \dot{x}(n),$$

在区间 $n \leq t \leq c/\varepsilon$ 上考虑这些初值问题. 由定理 4.1, 得

$$\begin{aligned} y_{\perp}^{[n]}(n+1) &= y_{\perp}^{[n+1]}(n+1) + O(\varepsilon^2), \\ z_1^{[n]}(n+1) &= z_1^{[n+1]}(n+1) + O(\varepsilon^2). \end{aligned}$$

根据 $y_{\perp}^{[n+1]}$ 和 $y_{\perp}^{[n]}$ 的方程可以推出

$$y_{\perp}^{[n+1]}(t) - y_{\perp}^{[n]}(t) = O(\varepsilon^2), \quad n+1 \leq t \leq c/\varepsilon.$$

进一步, 在关于 $z_1^{[n]}$ 的方程两端同时和 $z_1^{[n]}$ 做内积有

$$\frac{d}{dt} |z_1^{[n]}|^2 = 2 \operatorname{Re} z_1^{[n]\top} \dot{z}_1^{[n]} = 0,$$

即 $|z_1^{[n]}(t)| = |z_1^{[n]}(n)|$, $n \leq t \leq c/\varepsilon$.

(c) 下面我们考虑 (4.27) 中 $y_{\perp}(t)$ 和 $y_{\perp}^{[0]}(t)$ 的差. 计算 $y_{\perp}(t) - y_{\perp}^{[0]}(t)$, 得

$$\begin{aligned} y_{\perp}^{[0]}(t) - y_{\perp}(t) &= \left(y_{\perp}^{[0]}(0) - y_{\perp}(0) \right) + \varepsilon \int_0^t \left(E_{\perp}(y_{\perp}^{[0]}(s)) - E_{\perp}(y_{\perp}(s)) \right) \times B_0 ds \\ &\quad + \varepsilon \int_0^t \left(\dot{x}_{\parallel}(s) \times B_1(y_{\perp}^{[0]}(s)) \right) \times B_0 ds, \end{aligned}$$

其中右端第一项的误差为 $O(\varepsilon^2)$, 上式中的第三项可由分部积分得到,

$$\begin{aligned} &\varepsilon \int_0^t \left(\dot{x}_{\parallel}(s) \times B_1(y_{\perp}^{[0]}(s)) \right) \times B_0 ds \\ &= \varepsilon \left(x_{\parallel}(t) \times B_1(y_{\perp}^{[0]}(t)) - x_{\parallel}(0) \times B_1(y_{\perp}^{[0]}(0)) \right) \times B_0 \\ &\quad - \varepsilon \int_0^t \left(x_{\parallel}(s) \times \frac{\partial B_1}{\partial x_{\perp}}(y_{\perp}^{[0]}(s)) \dot{y}_{\perp}^{[0]}(s) \right) \times B_0 ds. \end{aligned}$$

根据假设 $\dot{y}_{\perp}^{[0]}(t) = O(\varepsilon)$ 知 $x_{\parallel}(t)$ 有界, 所以上述表达在 $0 \leq t \leq c/\varepsilon$ 上为 $O(\varepsilon)$. 因为 E 是 Lipschitz 有界的, 可得到上式中的第二项为 ε , 根据 Gronwall 引理, 可

以推出 $y_{\perp}^{[0]}(t)$ 和 $y_{\perp}(t)$ 的差为

$$y_{\perp}^{[0]}(t) - y_{\perp}(t) = O(\varepsilon), \quad 0 \leq t \leq c/\varepsilon.$$

(d) 当 $n \leq t \leq n+1 \leq c/\varepsilon$, 根据上述估计, 我们有

$$\begin{aligned} x_{\perp}(t) - y_{\perp}(t) &= \left(x_{\perp}(t) - y_{\perp}^{[n]}(t) - 2 \operatorname{Re}(z_1^{[n]}(t)e^{it/\varepsilon}) \right) + 2 \operatorname{Re}(z_1^{[n]}(t)e^{it/\varepsilon}) \\ &\quad + \sum_{j=0}^{n-1} \left(y_{\perp}^{[j+1]}(t) - y_{\perp}^{[j]}(t) \right) + \left(y_{\perp}^{[0]}(t) - y_{\perp}(t) \right) \\ &= O(\varepsilon^2) + O(\varepsilon) + O(n\varepsilon^2) + O(\varepsilon) = O(\varepsilon). \end{aligned}$$

□

注. 文献 [24, 107] 证明了粒子的垂直漂移速度取决于 $E \times B$ 这一项. 当考虑更特殊的一类电磁场 $B_{\perp} \equiv 0$ 和 $E_{\parallel} \equiv 0$ 时, 文献 [28] 给出了类似于 (4.28) 的估计.

数值解的垂直方向漂移. 对于 Boris 算法采用大步长 (4.8) 以及修正初始速度, 根据定理 4.2, 我们可以得到下面的结果.

定理 4.6. 在定理 4.2 的条件下 (特别是 (4.15)–(4.16)), 假定 Boris 算法得到的数值解 x^n 在 $0 \leq t \leq c\varepsilon^{-1}$ 内始终保持在紧集 \mathbb{K} 上 (\mathbb{K} 和 c 与 ε 和 h 无关). 那么, 在 $O(\varepsilon^{-1})$ 长时间内, 初值问题 (4.27) 的解 $y_{\perp}(t)$ 与 x^n 的垂直分量满足

$$|x_{\perp}^n - y_{\perp}(t_n)| \leq Ch^2, \quad 0 \leq t_n = nh \leq c/\varepsilon, \quad (4.29)$$

其中常数 C 与 ε , h , n 无关, 但依赖初始速度的界, B_{\perp} 和 E 导数的界, 紧集 \mathbb{K} 以及 c .

证明. 类似于定理 4.5 的证明, 我们可以给出该定理的证明. □

利用定理 4.2 和 4.3, 对于标准变分格式以及滤子变分格式, 可以得到类似的结果. 注意到 Boris 算法和标准变分算法需要初始速度垂直分量很小的假设 (4.16), 而对于滤子变分, 只需步长满足非共振条件 (4.24), 初始速度有界即

可. 但是, 由于定理 4.3 (c) 中给出的 $z_{\pm 1}^0$ 所满足的方程对应的余项为 $O(\varepsilon h)$, 所以滤子变分格式所得数值解 x_{\perp}^n 的误差阶只有 $O(h)$.

数值实验. 对 4.1 节中的算例应用 Boris 算法和滤子变分进行求解. 图 6.1 展示了在三种不同的参数 ε 下, 粒子轨迹在垂直于磁场 $B_0 = e_3$ 平面的投影, 其中 $T = 5/\varepsilon$, 步长为 $h = 10^{-2}$. 可以看出当采用原始初值时, Boris 算法所得的运动轨迹的回旋半径随时间增长, 为了得到正确的轨迹, 需要对初始速度进行修正 (4.9). 对于滤子变分格式, 使用原始初值即可得到正确的轨迹.

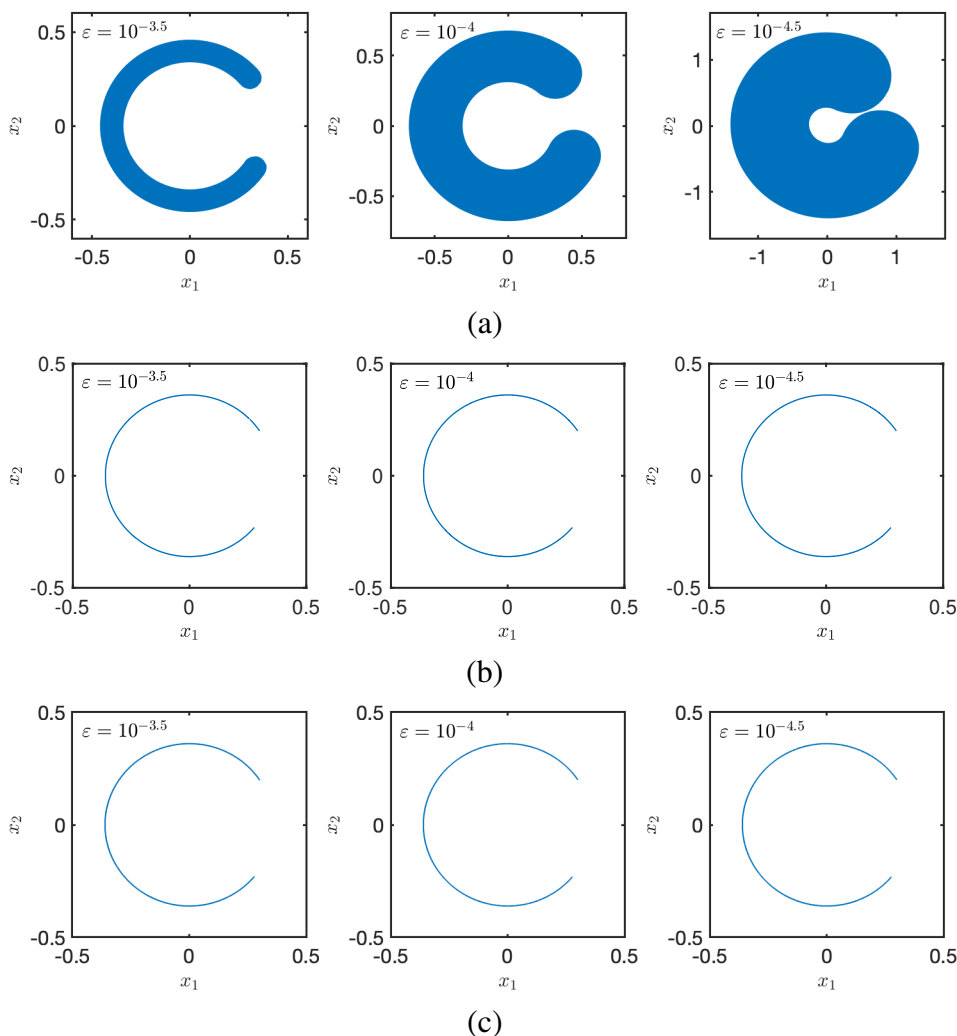


图 4.3 在时间段 $t \leq 5/\varepsilon$ 内投影在垂直于磁场平面的粒子轨迹. (a) Boris 算法采用初值 $x(0)$, $v(0)$. (b) Boris 算法采用修正初始速度 (4.9). (c) 加滤子变分格式采用初值 $x(0)$, $v(0)$. 步长均取为 $h = 10^{-2}$.

4.4.3 长时间能量和磁矩的近似保持

在本节中, 我们主要分析了标准变分格式以及滤子变分格式对能量和磁矩的保持情况. 对于 Boris 算法, 我们没有相应的理论结果. 对于标准变分格式,

我们证明了采用修正初始速度时, 对应的数值能量误差在 $O(\varepsilon^{-1})$ 时间内保持有界. 对于滤子变分格式, 我们借助系统的拉格朗日形式, 可以证明能量和磁矩在 $O(\varepsilon^{-N})$, $\forall N > 1$ 时间内近似被保持.

标准变分格式. 对于标准变分格式, 采用步长 (4.8) 以及修正的初始速度 (4.9), 可证明在 $h^6 \leq \varepsilon$ 的条件下, 能量误差在 $O(\varepsilon^{-1})$ 时间内保持为 $O(h^2)$.

定理 4.7. 在定理 4.2 的条件下, 假设标准变分格式的步长满足 (4.8), 初始速度满足 (4.9), 它的数值解 x^n 在 $0 \leq t \leq c\varepsilon^{-1}$ 内保持在紧集 \mathbb{K} 上 (\mathbb{K} 和 c 与 ε, h 无关), 那么, 能量在 $c \min(\varepsilon^{-1}, h^{-6})$ 时间内与初始能量的误差为 $O(h^2)$,

$$|H(x^n, v^n) - H(x^0, v^0)| \leq Ch^2, \quad 0 \leq nh \leq c \min(\varepsilon^{-1}, h^{-6}). \quad (4.30)$$

进一步, 磁矩 (4.4) 在 $c\varepsilon^{-1}$ 时间内保持 $O(\varepsilon^2)$,

$$|I(x^n, v^n)| \leq C\varepsilon^2, \quad 0 \leq nh \leq c\varepsilon^{-1}, \quad (4.31)$$

其中常数 C 不依赖 ε, h, n , 但依赖 B_1 和 E 导数的界, 紧集 \mathbb{K} 以及 c .

证明. 该定理的证明利用了定理 4.2 以及文献 [110] 中命题 6.2. 我们首先考虑 $0 \leq t \leq 1$ 区间上的能量行为, 在这段区间上, 我们可以应用定理 4.2 的结论. 记 $D = d/dt$ 以及移位算子 e^{hD} , 引入记号 $\delta(\zeta) = (\zeta - \zeta^{-1})/2$ 以及 $\rho(\zeta) = \zeta - 2 + \zeta^{-1}$, 借助展开 $\delta(e^h)/(2h) = (1 + \alpha_2 h^2 + \alpha_4 h^4 + \dots)$ 和 $\rho(e^h)/h^2 = (1 + \beta_2 h^2 + \beta_4 h^4 + \dots)$, 我们可以将 (4.17) 中 $y(t)$ 所满足的方程表达为

$$\begin{aligned} \ddot{y} + \beta_2 h^2 y^{(4)} + \beta_4 h^4 y^{(6)} + \dots &= (\dot{y} + \alpha_2 h^2 y^{(3)} + \alpha_4 h^4 y^{(5)} + \dots) \times \frac{B_0}{\varepsilon} \\ &+ A_1'(y)^\top \frac{\delta(e^{hD})}{2h} y - \frac{\delta(e^{hD})}{2h} A_1(y) - \nabla \varphi(y) + O(|z|^2) + O(h^N), \end{aligned} \quad (4.32)$$

其中左端只含有 y 的偶数阶导数, 而右端只含有 y 的奇数阶导数. 在方程 (4.32) 两端同时乘以 \dot{y}^\top . 左端可表达为某一项关于时间的导数, 利用定理 4.2 (c) 可知该项中 y 的二阶以及更高阶导数可通过 (y, \dot{y}) 表达. 方程的右端会变为

$$-\dot{y}^\top \varepsilon^{-1} \hat{B}_0 (\alpha_2 h^2 y^{(3)} + \alpha_4 h^4 y^{(5)} + \dots) \quad (4.33)$$

$$+ \dot{y}^\top \frac{1}{2h} \left(A_1'(y)^\top \delta(e^{hD})y - \delta(e^{hD})A_1(y) \right) - \frac{d}{dt} \varphi(y) + O(|z|^2) + O(h^N).$$

由于 $\dot{y}_\perp = \dot{y}_1 + \dot{y}_{-1}$, 由定理 4.2 知, 它的导数均为 $O(\epsilon)$, 所以上式中第一项为 $O(h^2)$, 由于 \hat{B}_0 是一个反对称矩阵, 所以第一项可表达为某一项关于时间导数, 并且出现在该项中 y 的二阶以及更高阶导数均可以通过 (y, \dot{y}) 表达. 利用文献 [110] 中命题 6.2 的证明, 可知 (4.33) 第二项也可表达为为某一项关于时间的导数.

于是存在函数 $H_h(x, v)$, 有

$$H_h(x, v) = H(x, v) + O(h^2), \quad (4.34)$$

$$\frac{d}{dt} H_h(y(t), \dot{y}(t)) = O(|z(t)|^2) + O(h^N). \quad (4.35)$$

下面考虑关于 z 的方程. 已知修正初始速度满足 (4.9), 借助定理 4.2 (d) 中的结论可知, 存在常数 c_0 使得 $|z(0)| \leq c_0 h^4$. $z_\perp = z_1 + z_{-1}$ 的微分方程可以表达为

$$\dot{z}_\perp = \frac{4\epsilon}{h^2} z_\perp \times B_0 + O(\epsilon |z_\perp|) + O(\epsilon h^N).$$

该方程两端同时乘以 $2(z_\perp)^\top$, 注意到 $2(z_\perp)^\top \dot{z}_\perp = (d/dt)|z_\perp|^2$, 我们有

$$\frac{d}{dt} |z_\perp|^2 \leq C\epsilon |z_\perp|^2 + O(\epsilon h^N),$$

这表明了 $|z_\perp(t)| \leq e^{\tilde{c}\epsilon t} |z_\perp(0)| + O(t\epsilon h^N)$. 进一步, 根据定理 4.2 的证明, 我们知道 $|z_0(t)| \leq Ch^2 |z_\perp(t)|$. 在每一个区间上, 应用定理 4.2, 可以得到 z 的高振荡分量保持 $O(h^4)$, 类似于定理 4.5 中 (b) 的证明, 可以将时间区间推广到许多长度为 1 的时间区间拼起来到 $c\epsilon^{-1}$. 由 (4.35) 我们有

$$H_h(y(t), \dot{y}(t)) = H_h(y(0), \dot{y}(0)) + O(th^8).$$

最终可得

$$H(x^n, v^n) = H_h(x^n, v^n) + O(h^2) = H_h(y(t_n), \dot{y}(t_n)) + O(h^2).$$

由于 $v_{\perp}^n = \dot{y}_{\perp}(t_n) - (-1)^n \dot{z}_{\perp}(t_n) + O(\epsilon h^2)$, 利用定理 4.2 (c) 中关于 $y_{\pm 1}$ 和 $z_{\pm 1}$ 的方程, 我们有 $v_{\perp}^n = O(\epsilon)$. 因此磁矩 (4.4) 满足

$$I(x, v) = \frac{1}{2} \frac{|v \times B_0 + O(\epsilon)|^2}{1 + O(\epsilon)} = \frac{1}{2} |v_{\perp}|^2 (1 + O(\epsilon)) + O(\epsilon^2). \quad (4.36)$$

根据 (4.36) 可知, 在短时间内 $I(x^n, v^n) \leq C\epsilon^2$. 类似于定理 4.5 的证明, 最终可以得到长时间上磁矩始终保持 $O(\epsilon^2)$. \square

滤子变分格式. 对于滤子变分格式, 假设步长满足 (4.23) 和非共振条件 (4.24), 我们可以得到如下关于能量和磁矩长时间保持情况的结果.

定理 4.8. 记 $M > N$ 为两个任意的正整数, 在定理 4.3 的条件下, 并假设初始速度的界与 ϵ 无关. 假设滤子变分格式所得数值解 x^n 在 $0 \leq t \leq c\epsilon^{-N}$ 时间内保持在紧集 \mathbb{K} 上 (\mathbb{K} 和 c 不依赖 ϵ, h), 那磁矩和能量有如下估计,

$$\begin{aligned} |I(x^n, v^n) - I(x^0, v^0)| &\leq Ch \\ |H(x^n, v^n) - H(x^0, v^0)| &\leq Ch \end{aligned} \quad 0 \leq t \leq c \min(h^{-M}, \epsilon^{-N}),$$

其中常数 C 不依赖 ϵ, h, n ($0 \leq nh \leq c\epsilon$), 但依赖初始速度的界, B_1 和 E 导数的界, 紧集 \mathbb{K} , c , 以及 M 和 N 的选取.

证明. 该定理的证明类似于 [34] 中定理 2.2 和 2.3 的证明. 我们这里只叙述关键的步骤, 记为 (i)-(iv).

这里始终假设存在正整数 $m > 2$, 使得步长满足 $h^m \leq \epsilon$, 并且我们取 $M \geq mN$, 因此下面分析中我们只需考虑时间尺度到 ϵ^{-N} .

(i) 对 $0 \leq t \leq 1$, 考虑

$$y^k(t) = z^k(t) e^{ikt/\epsilon} \quad |k| \leq N \text{ 且 } y^k(t) = 0 \text{ 对于 } |k| > N.$$

记 $\mathbf{y} = (y^k)_{k \in \mathbb{Z}}$, 定义如下电磁势

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(\mathbf{y}) &= \sum_{\substack{0 \leq m \leq N \\ \alpha^1 + \dots + \alpha^m = 0}} \frac{1}{m!} \varphi^{(m)}(y^0) \mathbf{y}^\alpha \\ \mathcal{A}(\mathbf{y}) &= (\mathcal{A}_k(\mathbf{y}))_{k \in \mathbb{Z}} = \left(\sum_{\substack{0 \leq m \leq N \\ \alpha^1 + \dots + \alpha^m = k}} \frac{1}{m!} A^{(m)}(y^0) \mathbf{y}^\alpha \right)_{k \in \mathbb{Z}}, \end{aligned}$$

则滤子变分格式 (4.12) 的展开系统为

$$\Psi^{-1} \delta_h^2 y^k = \sum_{j \in \mathbb{Z}} \left(\frac{\partial \mathcal{A}_j}{\partial y^k}(\mathbf{y}) \right)^* \delta_{2h} y^j - \delta_{2h} \mathcal{A}_k(\mathbf{y}) - \left(\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial y^k}(\mathbf{y}) \right)^* + O(\varepsilon^N), \quad (4.37)$$

其中 $\delta_{2h} f(t) = (f(t+h) - f(t-h))/(2h)$, $\delta_h^2 f(t) = (f(t+h) - 2f(t) + f(t-h))/h^2$ 分别表示一阶和二阶中心差分. 方程 (4.37) 可以通过离散 Euler-Lagrange 方程得到, 其对应的离散拉格朗日函数为

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_h(\mathbf{y}^n, \mathbf{y}^{n+1}) &= \frac{h}{2} \left(\frac{\mathbf{y}^{n+1} - \mathbf{y}^n}{h} \right)^* (\Psi^{-1} \otimes I) \left(\frac{\mathbf{y}^{n+1} - \mathbf{y}^n}{h} \right) \\ &\quad + \frac{h}{2} (\mathcal{A}(\mathbf{y}^n) + \mathcal{A}(\mathbf{y}^{n+1}))^* \left(\frac{\mathbf{y}^{n+1} - \mathbf{y}^n}{h} \right) - \frac{h}{2} (\mathcal{U}(\mathbf{y}^n) + \mathcal{U}(\mathbf{y}^{n+1})). \end{aligned}$$

(ii) 在群作用 $S(\lambda)\mathbf{y} = (e^{ik\lambda} y^k)_{k \in \mathbb{Z}}$ ($\forall \lambda \in \mathbb{R}$) 下, 我们有

$$\mathcal{U}(S(\lambda)\mathbf{y}) = \mathcal{U}(\mathbf{y}), \quad \mathcal{A}(S(\lambda)\mathbf{y}) = S(\lambda)\mathcal{A}(\mathbf{y}),$$

对上式关于 λ 求导并在 $\lambda = 0$ 处取值有

$$\begin{aligned} \sum_{k \in \mathbb{Z}} ik \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial y^k}(\mathbf{y}) y^k &= 0 \\ \sum_{j \in \mathbb{Z}} ij \frac{\partial \mathcal{A}_k}{\partial y^j}(\mathbf{y}) y^j &= ik \mathcal{A}_k(\mathbf{y}), \quad k \in \mathbb{Z}. \end{aligned}$$

对方程 (4.37) 两端乘以 $-ik(y^k)^*$, 关于 k 求和, 利用如上两个等式, 有

$$\mathcal{I}_h[\mathbf{y}](t) - \mathcal{I}_h[\mathbf{y}](t-h) = O(h\varepsilon^{N+1}), \quad (4.38)$$

其中

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_h[\mathbf{y}](t) = & -\frac{i}{\varepsilon h} \sum_k k y^k(t)^* \Psi^{-1} y^k(t+h) \\ & + \frac{i}{2\varepsilon} \sum_k k \left(\mathcal{A}_k(\mathbf{y}(t))^* y^k(t+h) - y^k(t)^* \mathcal{A}_k(\mathbf{y}(t+h)) \right), \end{aligned}$$

所以我们得到 (4.37) 的一个绝热不变量. 进一步有

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_h[\mathbf{y}](t) = & -\frac{i}{\varepsilon h} \left(y^1(t)^* \Psi^{-1} y^1(t+h) - y^{-1}(t)^* \Psi^{-1} y^{-1}(t+h) \right) \\ & + \frac{i}{2\varepsilon^2} \left(y^1(t)^* (y^1(t+h) \times B_0) - y^{-1}(t)^* (y^{-1}(t+h) \times B_0) \right) + O(\varepsilon). \end{aligned}$$

通过计算可知上式右端的第一项是 $(1+\cos(h/\varepsilon))|z_1^1|^2/\varepsilon^2+O(h)$, 第二项是 $-\cos(h/\varepsilon)|z_1^1|^2/\varepsilon^2+O(h)$. 于是得到

$$\mathcal{I}_h[\mathbf{y}](t) = \frac{1}{\varepsilon^2} |z_1^1(t)|^2 + O(h). \quad (4.39)$$

另一方面, 由于

$$\begin{aligned} v^n = & \Phi \frac{x^{n+1} - x^{n-1}}{2h} + O(\varepsilon) \\ = & \left(I + (1 - \text{sinc}(h/\varepsilon))^{-1} \hat{B}_0^2 \right) \frac{x^{n+1} - x^{n-1}}{2h} + O(\varepsilon) \\ = & \dot{z}^0(t) + \frac{i}{\varepsilon} \left(z_1^1(t) e^{it/\varepsilon} - z_{-1}^{-1}(t) e^{-it/\varepsilon} \right) + O(h), \quad t = nh, \end{aligned}$$

以及 $\dot{z}^0(t) \times B_0 = O(\varepsilon)$, 我们有

$$I(x^n, v^n) = \frac{1}{2} |v^n \times B_0|^2 + O(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon^2} |z_1^1(t)|^2 + O(h). \quad (4.40)$$

比较 (4.39) 和 (4.40) 可知

$$I(x^n, v^n) = \mathcal{I}_h[\mathbf{y}](nh) + O(h). \quad (4.41)$$

(iii) 对方程 (4.37) 两端同乘 $(\dot{y}^k)^*$ 并关于 k 求和有

$$\begin{aligned} \sum_k (\dot{y}^k)^* \Psi^{-1} \delta_h^2 y^k - \sum_k \left(\frac{d}{dt} \mathcal{A}_k(\mathbf{y})^* \delta_{2h} y^k - (\dot{y}^k)^* \delta_{2h} \mathcal{A}_k(\mathbf{y}) \right) + \frac{d}{dt} \mathcal{U}(\mathbf{y}) \\ = O(\varepsilon^N). \end{aligned} \quad (4.42)$$

根据文献 [34] 中的定理 5.3 可知, 存在函数 $\mathcal{H}_h[\mathbf{y}](t) = \mathcal{K}_h[\mathbf{y}](t) + \mathcal{M}_h[\mathbf{y}](t) + \mathcal{U}[\mathbf{y}](t)$, 使得 (4.42) 等价于

$$\frac{d}{dt}\mathcal{H}_h[\mathbf{y}](t) = O(\varepsilon^N),$$

其中

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_h[\mathbf{y}] &= \frac{1}{2}(\dot{z}^0)^* \Psi^{-1} \dot{z}^0 + \frac{2(z^1)^* \Psi^{-1} z^1}{h^2} \left(\frac{h}{\varepsilon} \sin(h/\varepsilon) - 2 \sin^2(h/2\varepsilon) \right) + O(h) \\ &= \frac{1}{2}|\dot{z}^0|^2 + \frac{2|z_1^1|^2}{\tan(h/2\varepsilon)h^2} \left(\frac{h}{\varepsilon} \sin(h/\varepsilon) - 2 \sin^2(h/2\varepsilon) \right) + O(h) \\ &= \frac{1}{2}|\dot{z}^0|^2 + \frac{|z_1^1|^2}{\varepsilon^2} (1 + \cos(h/\varepsilon)) + O(h),\end{aligned}$$

$$\mathcal{M}_h[\mathbf{y}] = -\cos(h/\varepsilon) \frac{|z_1^1|^2}{\varepsilon^2} + O(h),$$

$$\mathcal{U}[\mathbf{y}] = \varphi(z^0) + O(h),$$

因此

$$\mathcal{H}_h[\mathbf{y}](t) = \frac{1}{2}|\dot{z}^0(t)|^2 + \frac{|z_1^1(t)|^2}{\varepsilon^2} + \varphi(z^0(t)) + O(h). \quad (4.43)$$

下面考虑数值能量. 根据 (ii) 中 v^n 的表达, 在 $t = nh$ 时, 我们有

$$\frac{1}{2}|v^n|^2 = \frac{1}{2}|\dot{z}^0(t)|^2 + \frac{|z_1^1(t)|^2}{\varepsilon^2} + O(h),$$

因此

$$H(x^n, v^n) = \frac{1}{2}|v^n|^2 + \varphi(x^n) = \frac{1}{2}|\dot{z}^0(t)|^2 + \frac{|z_1^1(t)|^2}{\varepsilon^2} + \varphi(z^0(t)) + O(h). \quad (4.44)$$

比较 (4.43) 和 (4.44), 我们有

$$H(x^n, v^n) = \mathcal{H}_h[\mathbf{y}](t) + O(h).$$

(iv) 现在我们可以通过将每个长度为 1 的时间段上 (ii) 和 (iii) 所得的结果拼起来, 这里借助了系数函数直到 $O(\varepsilon^{N+1})$ 是唯一的, 从而可以得到能量和磁矩的

长时间保持. □

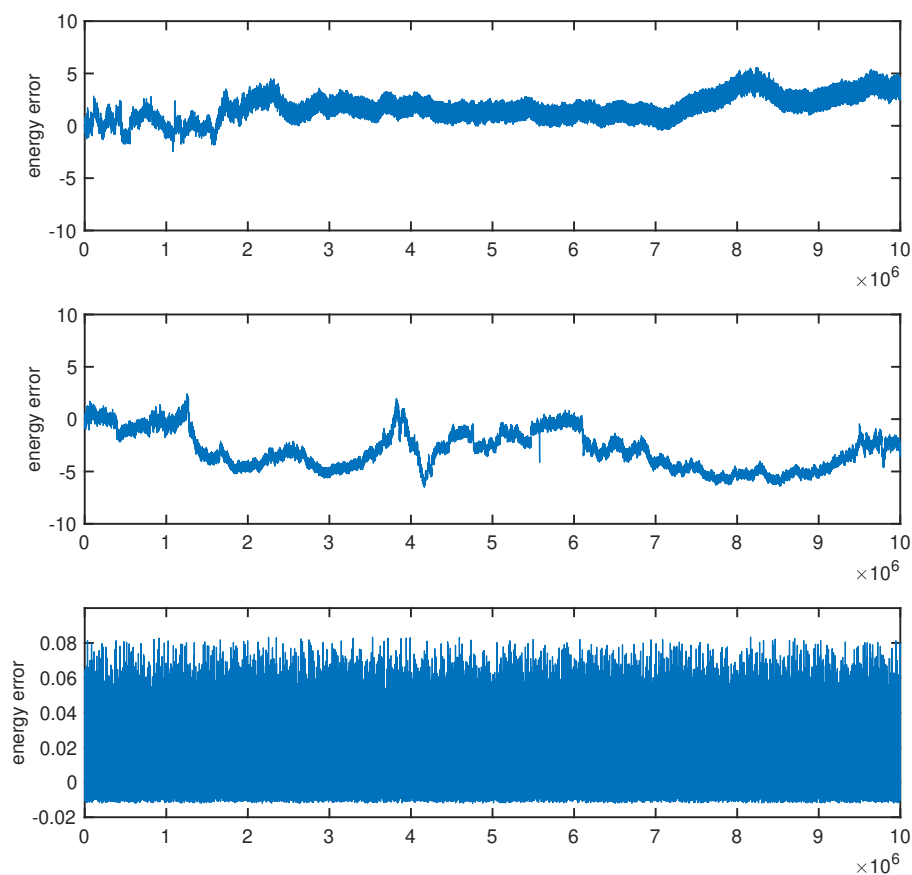


图 4.4 能量误差 $H(x_n, v_n) - H(x_0, v_0)$ 随时间的演化. 上: Boris 算法. 中: 变分格式. 下: 滤子变分格式. ($\epsilon = 10^{-4}$, $h = 10^{-2}$).

数值实验. 在该算例中, 磁场为

$$B(x) = \frac{1}{\epsilon} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0.5 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x_2 - x_3 \\ x_1 + x_3 \\ x_2 - x_1 \end{pmatrix},$$

$\epsilon = 10^{-4}$. 电势为 $\varphi(x) = x_1^3 - x_2^3 + \frac{1}{5}x_1^4 + x_2^4 + x_3^4$. 取初值为 $x(0) = (0, 1, 0.1)^\top$, $v(0) = (0.09, 0.05, 0.2)^\top$.

应用 4.2 节中的三种数值格式, 步长 $h = 10^{-2}$, 终止时刻 $T = 10^7$. 图 4.4 展示了三种格式所得的数值解对应的能量误差. 图 4.5 展示了磁矩误差. 可以看出 Boris 算法以及变分格式计算所得的误差呈现出随机的变化, 并且长时间之后, 数值结果不稳定. 与之比较, 滤子变分格式能保持能量误差和磁矩误差长时间有

界.

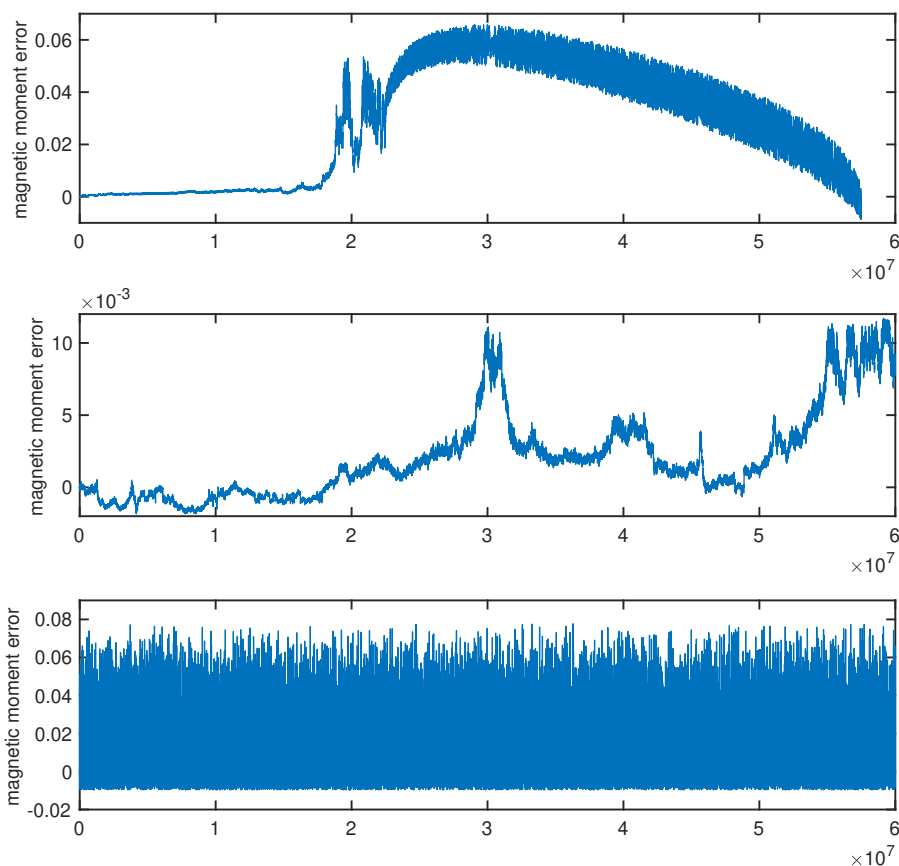


图 4.5 磁矩误差 $I(x_n, v_n) - I(x_0, v_0)$ 随时间的演化. 上: Boris 算法. 中: 变分格式. 下: 滤子变分格式. ($\epsilon = 10^{-4}$, $h = 10^{-2}$).

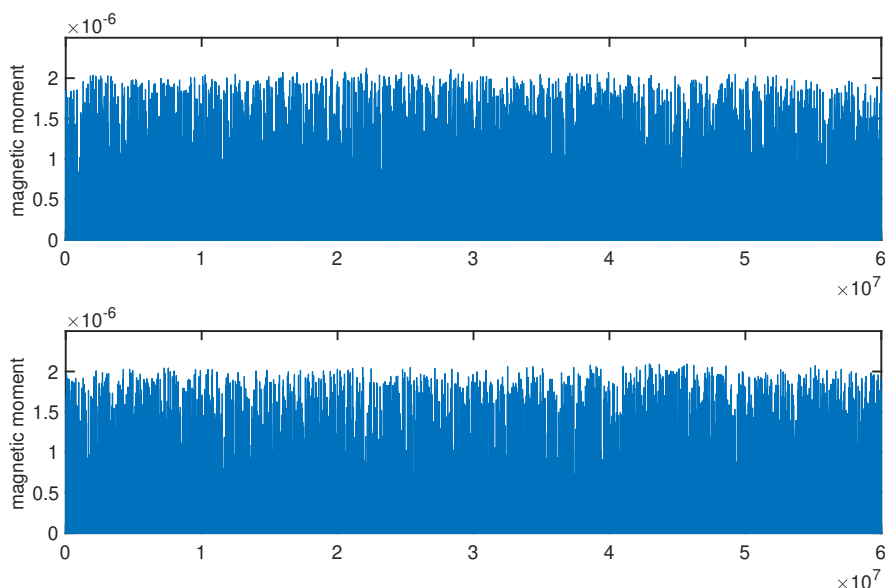


图 4.6 磁矩 $I(x_n, v_n)$ 随时间的演化. 上: Boris 算法取修正初值 (4.9). 下: 变分格式取修正初值 (4.9) ($\epsilon = 10^{-4}$, $h = 10^{-2}$).

在应用 Boris 算法和变分格式时, 如果采用修正的初始速度 (4.9), 可以观察

到两种算法计算的磁矩一直保持在 0 到 $2 \cdot 10^{-6}$ 之间, 如图 4.6 所示. 在该情况下, 变分格式在整个计算时间内展示了很好的能量保持行为, 但是 Boris 算法的误差出现了线性增长, 如图 4.7 所示.

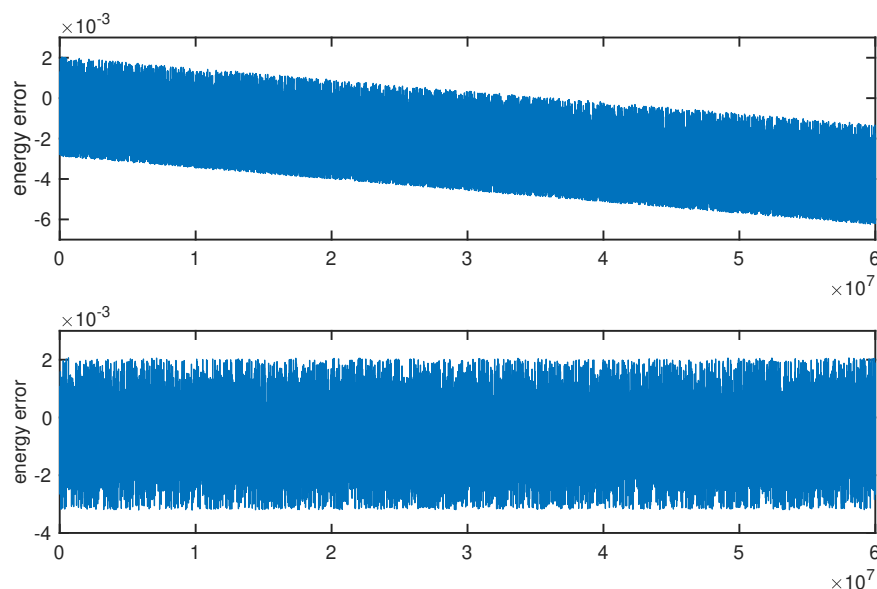


图 4.7 能量误差 $H(x_n, v_n) - H(x_0, v_0)$ 随时间的演化. 上: Boris 算法取修正初值 (4.9). 下: 变分格式取修正初值 (4.9) ($\epsilon = 10^{-4}$, $h = 10^{-2}$).

4.5 本章小节

在本章中, 我们主要考虑了带电粒子在强磁场下的运动, 具体研究了 Larmor 回旋, 导心运动, 缓慢的垂直漂移等动力学行为及其守恒量的长时间保持情况. 对强磁场单粒子模型, 采用三类数值方法: Boris 算法, 标准变分格式以及滤子变分格式进行了模拟. 分析了当步长远大于 Larmor 回旋周期时, 数值解在不同的时间尺度下的误差估计. 我们发现, 新提出的滤子变分格式在各个时间尺度均给出了令人满意的结果. 对于 Boris 算法以及标准变分格式, 为了得到正确的数值结果, 需要对初始速度进行修正.

第 5 章 切触算法及其在 Fokker-Planck 方程中的应用

对于切触哈密顿系统, 通过引进锥辛几何 (或称齐次辛几何), 冯康于 1993 年利用生成函数首次给出了保持切触结构的算法 [3], 并建立了它与齐次哈密顿系统辛算法的关系. 最近几年, 文献 [111, 112] 对切触哈密顿系统从变分形式构造了切触算法. 在本章中, 我们研究了切触哈密顿系统的生成函数理论, 提出了切触算法, 并将该算法应用于研究等离子体物理中带电粒子的碰撞行为. 考虑 Vlasov-Poisson-Fokker-Planck (VPFP) 方程, 我们采用了粒子 (Particle-in-cell) 方法对分布函数进行近似, 粒子的运动满足随机带切触结构的微分方程. 对方程, 我们构造了两种随机切触算法, 并且证明了算法的弱收敛阶, 模拟了等离子体物理中的一些不稳定现象.

5.1 基于生成函数的切触算法

记 M 为一个 $2n + 1$ 维的切触流形, 由 2.3 节预备知识知, 在局部坐标系 (q, p, s) 下, 切触 1-形式 α 可以表达为

$$\alpha = ds - pdq.$$

给定一个切触哈密顿量 $H(q, p, s)$, 切触哈密顿向量场 X_H 由 H 通过下述两个条件确定

$$L_{X_H}\alpha = \mu\alpha, \quad -H = \alpha(X_H).$$

在该局部坐标下, 切触哈密顿向量场 X_H 可以由切触哈密顿系统定义为

$$\begin{aligned} \dot{q} &= \frac{\partial H}{\partial p}, \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial q} - \frac{\partial H}{\partial s}p, \\ \dot{s} &= \left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)^\top p - H. \end{aligned} \tag{5.1}$$

如果 H 不依赖 s , 则从 (5.1) 可看出切触哈密顿系统退化为哈密顿系统, 方程 (5.1) 中的 s 可以看成哈密顿作用函数.

对于切触哈密顿系统，我们有如下定理.

定理 5.1. 切触哈密顿系统的解流是一个切触映射.

证明. 根据方程 (5.1)，我们有

$$\begin{aligned} d\dot{s} &= \frac{\partial^2 H}{\partial \hat{p} \partial \hat{q}} \hat{p} d\hat{q} + \frac{\partial^2 H}{\partial \hat{p}^2} \hat{p} d\hat{p} + \frac{\partial^2 H}{\partial \hat{p} \partial \hat{s}} \hat{p} d\hat{s} + \frac{\partial H}{\partial \hat{p}} d\hat{p} - \frac{\partial H}{\partial \hat{p}} d\hat{p} - \frac{\partial H}{\partial \hat{q}} d\hat{q} - \frac{\partial H}{\partial \hat{s}} d\hat{s}, \\ -\dot{p} d\hat{q} &= \frac{\partial H}{\partial \hat{q}} d\hat{q} + \frac{\partial H}{\partial \hat{s}} \hat{p} d\hat{q}, \\ -\hat{p} d\dot{q} &= -\hat{p} \frac{\partial^2 H}{\partial \hat{p}^2} d\hat{p} - \hat{p} \frac{\partial^2 H}{\partial \hat{p} \partial \hat{q}} d\hat{q} - \hat{p} \frac{\partial^2 H}{\partial \hat{p} \partial \hat{s}} d\hat{s}. \end{aligned}$$

由上述关系式可得

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(d\hat{s} - \hat{p} d\hat{q}) &= d\dot{s} - \dot{p} d\hat{q} - \hat{p} d\dot{q} \\ &= -\frac{\partial H}{\partial \hat{s}}(d\hat{s} - \hat{p} d\hat{q}), \end{aligned}$$

进一步

$$d\hat{s} - \hat{p} d\hat{q} = \exp\left(-\int_0^t \frac{\partial H}{\partial \hat{s}}\right) (d\hat{s} - \hat{p} d\hat{q}),$$

这表明了哈密顿系统的解流是一个切触映射. □

注. 定义拉格朗日量

$$L(q, \dot{q}, s) := \dot{q}p - H(q, p, s), \quad (5.2)$$

可知切触哈密顿系统可以等价于如下推广的 Euler-Lagrange 方程 [111]

$$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \frac{\partial L}{\partial s} = 0.$$

类似于辛算法的生成函数理论，我们可以基于生成函数，构造切触数值算法.

命题 5.2. 定义映射 $g : (q, p, s_0) \mapsto (\hat{q}, \hat{p}, S)$,

- 假设 $S := S(q, \hat{q}, s_0, t)$ ，定义下述关系式

$$\lambda = \frac{\partial S}{\partial s_0}, \quad \lambda p = -\frac{\partial S}{\partial q}, \quad \hat{p} = \frac{\partial S}{\partial \hat{q}}. \quad (5.3)$$

- 假设 $S^1 := S^1(\hat{p}, q, s_0, t)$, 定义下述关系式

$$\lambda = \frac{\partial S^1}{\partial s_0}, \quad \lambda p = \hat{p} - \frac{\partial S^1}{\partial q}, \quad \hat{q} = q - \frac{\partial S^1}{\partial \hat{p}}. \quad (5.4)$$

- 假设 $S^2 := S^2(p, \hat{q}, s_0, t)$, 定义下述关系式

$$\lambda = \frac{\partial S^2}{\partial s_0}, \quad \hat{p} = p + \frac{\partial S^2}{\partial \hat{q}}, \quad \lambda q = \hat{q} + \frac{\partial S^2}{\partial p}. \quad (5.5)$$

- 假设 $S^3 := S^3\left(\frac{\lambda p + \hat{p}}{2}, \frac{q + \hat{q}}{2}, s_0, t\right) =: S^3(u, v, s_0, t)$, 定义下述关系式

$$\lambda = \frac{\partial S^3}{\partial s_0}, \quad \hat{p} = \lambda p + \frac{\partial S^3}{\partial v}, \quad \hat{q} = q - \frac{\partial S^3}{\partial u}. \quad (5.6)$$

可以证明, 映射 $g : (q, p, s_0) \mapsto (\hat{q}, \hat{p}, S)$ 可以由上述等式隐式确定并且可证明是切触的.

特别地, 如果我们取生成函数 S 是 Hamilton-Jacobi 方程的解, 那么通过上述映射可以给出切触哈密顿系统的精确解流.

定理 5.3. 如果 $S(q, \hat{q}, s_0, t)$ 是如下偏微分方程

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(\hat{q}, \frac{\partial S}{\partial \hat{q}}, S\right) = 0, \quad (5.7)$$

的一个光滑解, 其中 (5.7) 称为 S 的 Hamilton-Jacobi 方程. 那么由 (5.3) 定义的映射 $(q, p, s_0) \mapsto (\hat{q}(t), \hat{p}(t), S(t))$ 是方程 (5.1) 的解流.

证明. 对 (5.3) 中的前两个关系式两端同时关于 t 求导并利用 (5.7) 可以得到

$$\begin{aligned} \dot{\lambda} &= \frac{\partial^2 S}{\partial t \partial s_0} + \frac{\partial^2 S}{\partial \hat{q} \partial s_0} \dot{\hat{q}} \\ &= -\frac{\partial H}{\partial S} \frac{\partial S}{\partial s_0} - \frac{\partial H}{\partial \hat{p}} \frac{\partial^2 S}{\partial \hat{q} \partial s_0} + \frac{\partial^2 S}{\partial \hat{q} \partial s_0} \dot{\hat{q}}, \\ p \dot{\lambda} &= -\frac{\partial^2 S}{\partial t \partial q} - \frac{\partial^2 S}{\partial \hat{q} \partial q} \dot{\hat{q}} \\ &= \frac{\partial H}{\partial S} \frac{\partial S}{\partial q} + \frac{\partial H}{\partial \hat{p}} \frac{\partial^2 S}{\partial q \partial \hat{q}} - \frac{\partial^2 S}{\partial \hat{q} \partial q} \dot{\hat{q}}. \end{aligned}$$

因此我们有

$$p \frac{\partial^2 S}{\partial \hat{q} \partial s_0} \left(-\frac{\partial H}{\partial \hat{p}} + \dot{\hat{q}} \right) = \frac{\partial^2 S}{\partial \hat{q} \partial q} \left(\frac{\partial H}{\partial \hat{p}} - \dot{\hat{q}} \right),$$

即

$$\left(\dot{\hat{q}} - \frac{\partial H}{\partial \hat{p}} \right) \left(p \frac{\partial^2 S}{\partial \hat{q} \partial s_0} + \frac{\partial^2 S}{\partial \hat{q} \partial q} \right) = 0. \quad (5.8)$$

对 (5.3) 中的第三个关系式两端求导得

$$\begin{aligned} \dot{\hat{p}} &= \frac{\partial^2 S}{\partial t \partial \hat{q}} + \frac{\partial^2 S}{\partial \hat{q}^2} \dot{\hat{q}} \\ &= -\frac{\partial H}{\partial \hat{q}} - \frac{\partial H}{\partial S} \frac{\partial S}{\partial \hat{q}} + \frac{\partial^2 S}{\partial \hat{q}^2} \left(\dot{\hat{q}} - \frac{\partial H}{\partial \hat{p}} \right). \end{aligned} \quad (5.9)$$

结合 (5.8) 和 (5.9) 我们可以得 \hat{q} 和 \hat{p} 分别满足 (5.1) 的前两个方程. 根据 (5.7) 以及 (5.3) 可得 S 满足 (5.1) 最后一个方程, 即 $(q, p, s_0) \mapsto (\hat{q}(t), \hat{p}(t), S(t))$ 是切触哈密顿系统的精确解流. \square

类似地我们可以给出下面三个定理.

定理 5.4. 如果 $S^1(q, \hat{p}, s_0, t)$ 是偏微分方程

$$\frac{\partial S^1}{\partial t} + H \left(q - \frac{\partial S^1}{\partial \hat{p}}, \hat{p}, S^1 - \hat{p} \frac{\partial S^1}{\partial \hat{p}} \right) = 0, \quad (5.10)$$

的一个光滑解, 那么由 (5.4) 定义的映射 $(q, p, s_0) \mapsto (\hat{q}(t), \hat{p}(t), S(t))$ 是方程 (5.1) 的解流.

定理 5.5. 如果 $S^2(\hat{q}, p, s_0, t)$ 是偏微分方程

$$\frac{\partial S^2}{\partial t} + H \left(\hat{q}, p + \frac{\partial S^2}{\partial \hat{q}}, S^2 - p \frac{\partial S^2}{\partial p} \right) = 0, \quad (5.11)$$

的一个光滑解, 那么由 (5.5) 定义的映射 $(q, p, s_0) \mapsto (\hat{q}(t), \hat{p}(t), S(t))$ 是方程 (5.1) 的解流.

定理 5.6. 如果 $S^3(u, v, s_0, t)$ 是偏微分方程

$$\frac{\partial S^3}{\partial t} + H \left(v - \frac{1}{2} \frac{\partial S^3}{\partial u}, u + \frac{1}{2} \frac{\partial S^3}{\partial v}, S^3 - u \frac{\partial S^3}{\partial u} \right) = 0, \quad (5.12)$$

的一个光滑解, 那么由 (5.6) 定义的映射 $(q, p, s_0) \mapsto (\hat{q}(t), \hat{p}(t), S(t))$ 是方程 (5.1) 的解流.

利用上述定理, 我们可以通过近似对应的 Hamilton–Jacobi 方程的解来构造切触算法. 以定理 5.4 为例, 假设 S^1 有级数展开

$$S^1(q, \hat{p}, s_0, t) = s_0 + tG_1(q, \hat{p}, s_0) + t^2G_2(q, \hat{p}, s_0) + t^3G_3(q, \hat{p}, s_0) + \dots$$

把该展开代入 (5.10) 并比较系数可以得到

$$\begin{aligned} G_1(q, \hat{p}, s_0) &= -H(q, \hat{p}, s_0), \\ G_2(q, \hat{p}, s_0) &= \frac{1}{2} \left(-\frac{\partial H}{\partial \hat{p}} \frac{\partial H}{\partial q} + H \frac{\partial H}{\partial S} - \hat{p} \frac{\partial H}{\partial \hat{p}} \frac{\partial H}{\partial S} \right), \\ G_3(q, \hat{p}, s_0) &= \frac{1}{3} \left(\frac{\partial G_2}{\partial \hat{p}} \frac{\partial H}{\partial q} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial G_1}{\partial \hat{p}} \right)^2 \frac{\partial^2 H}{\partial q^2} - \left(G_2 - \hat{p} \frac{\partial G_2}{\partial \hat{p}} \right) \frac{\partial H}{\partial S} - \frac{1}{2} \left(G_1 - \hat{p} \frac{\partial G_1}{\partial \hat{p}} \right)^2 \frac{\partial^2 H}{\partial S^2} \right), \end{aligned}$$

其它项可以通过上述表达递推得到.

考虑 S^1 的 n 阶截断, 则可得到相应的 n 阶切触数值方法. 当 $n = 1$ 时, 可以得到如下的一阶切触算法

$$\begin{aligned} q_{n+1} &= q_n + hH_p(q_n, p_{n+1}, s_n), \\ p_{n+1} &= p_n - hH_q(q_n, p_{n+1}, s_n) - hp_n H_s(q_n, p_{n+1}, s_n), \\ s_{n+1} &= s_n - hH(q_n, p_{n+1}, s_n) + hp_{n+1} H_p(q_n, p_{n+1}, s_n). \end{aligned}$$

当 $n = 2$ 时, 可得到更为复杂但精度为二阶的切触算法

$$\begin{aligned} \lambda &= 1 - hH_s + \frac{h^2}{2} (H_s^2 + HH_{ss} - H_{sp}H_q - H_pH_{sq} - p_{n+1}H_{sp}H_s - p_{n+1}H_pH_{ss}), \\ q_{n+1} &= q_n + hH_p - \frac{h^2}{2} (HH_{sp} - H_{pp}H_q - H_pH_{pq} - p_{n+1}H_{pp}H_s - p_{n+1}H_pH_{sp}), \\ p_{n+1} &= \lambda p_n - hH_q + \frac{h^2}{2} (H_qH_s + HH_{sq} - H_{pq}H_q - H_pH_{qq} - p_{n+1}H_{pq}H_s - p_{n+1}H_pH_{sq}), \\ s_{n+1} &= s_n - hH + \frac{h^2}{2} (HH_s - H_pH_q - p_{n+1}H_pH_s), \end{aligned}$$

其中右端函数在 (q_n, p_{n+1}, s_n) 处取值.

利用定理 5.6, 假设 S^3 有级数展开的形式, 具体表达见附录 A.2, 采取类似

的步骤可以得到如下一阶切触算法

$$\begin{aligned}\lambda &= 1 - hH_s \left(\frac{q_{n+1} + q_n}{2}, \frac{\lambda p_n + p_{n+1}}{2}, s_n \right), \\ q_{n+1} &= q_n + hH_p \left(\frac{q_{n+1} + q_n}{2}, \frac{\lambda p_n + p_{n+1}}{2}, s_n \right), \\ p_{n+1} &= \lambda p_n - hH_q \left(\frac{q_{n+1} + q_n}{2}, \frac{\lambda p_n + p_{n+1}}{2}, s_n \right), \\ s_{n+1} &= s_n - hH \left(\frac{q_{n+1} + q_n}{2}, \frac{\lambda p_n + p_{n+1}}{2}, s_n \right),\end{aligned}$$

以及二阶切触算法

$$\begin{aligned}\lambda &= 1 - hH_s + \frac{h^2}{2} \left(H_s^2 - \frac{\lambda p_n + p_{n+1}}{2} H_{sp} H_s + \left(H - \frac{\lambda p_n + p_{n+1}}{2} H_p \right) H_{ss} \right), \\ q_{n+1} &= q_n + hH_p + \frac{h^2}{2} \left(\frac{\lambda p_n + p_{n+1}}{2} H_{pp} H_s - \left(H - \frac{\lambda p_n + p_{n+1}}{2} H_p \right) H_{sp} \right), \\ p_{n+1} &= \lambda p_n - hH_q + \frac{h^2}{2} \left(\left(H_q - \frac{\lambda p_n + p_{n+1}}{2} H_{pq} \right) H_s + \left(H - \frac{\lambda p_n + p_{n+1}}{2} H_p \right) H_{sq} \right), \\ s_{n+1} &= s_n - hH + \frac{h^2}{2} \left(H - \frac{\lambda p_n + p_{n+1}}{2} H_p \right) H_s,\end{aligned}$$

其中右端函数在 $\left(\frac{q+q_n}{2}, \frac{\lambda p_n + p_{n+1}}{2}, s_n \right)$ 处取值.

命题 5.7. 考虑对切触哈密顿系统 (5.1) 应用切触数值算法 Φ_h , 那么数值解 $\tilde{\mathbf{Z}} = (\tilde{q}, \tilde{p}, \tilde{s})$ 满足如下的修正的切触哈密顿系统

$$\begin{aligned}\dot{\tilde{q}} &= \frac{\partial \tilde{H}}{\partial p}, \\ \dot{\tilde{p}} &= -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial q} - \frac{\partial \tilde{H}}{\partial s} p, \\ \dot{\tilde{s}} &= \left(\frac{\partial \tilde{H}}{\partial p} \right)^\top \tilde{p} - \tilde{H}.\end{aligned}$$

其中修正切触哈密顿量 $\tilde{H}(h, \tilde{\mathbf{Z}}) = H + hH_1 + h^2H_2 + \dots$.

证明. 首先可将切触算法辛化, 这样我们可以得到一个对应于锥形哈密顿系统的锥辛算法, 根据锥辛算法的向后误差估计, 可知存在一个修正的锥形哈密顿系统, 使得锥辛算法可以给出该修正锥形哈密顿系统的精确解. 最后根据锥形哈密顿系统和切触系统的关系, 便可得到修正的切触哈密顿量. \square

数值实验. 考虑切触哈密顿函数为 $H = \frac{1}{2}(x^2 + y^2)$, 对应的切触动力系统可表达为

$$\begin{aligned} \dot{x} &= -y \\ \dot{y} &= x \\ \dot{z} &= \frac{1}{2}(x^2 - y^2) \end{aligned}$$

图 5.1 分别展示了采用二阶切触算法和 Euler 格式计算的数值解, 其中红线代表精确解. 可以看出切触算法和精确解吻合的很好, 而 Euler 格式给出了错误的结果.

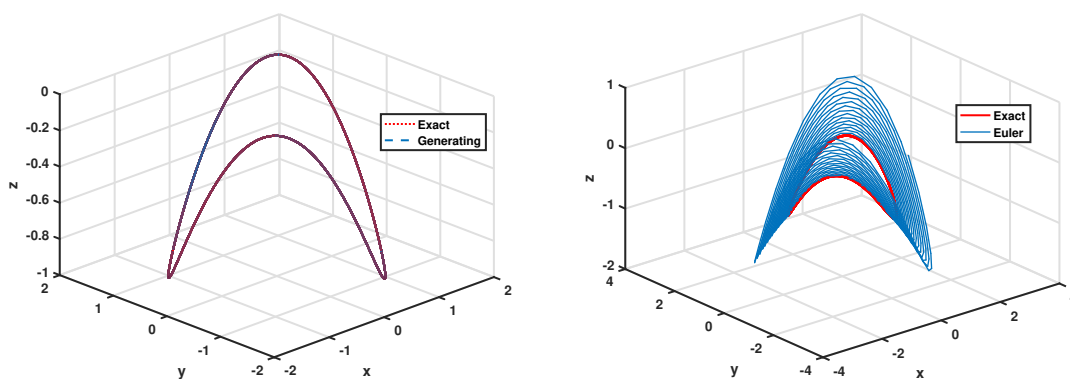


图 5.1 左: 切触算法. 右: Euler 格式. ($h = 0.01, T = 100$).

5.2 Vlasov-Poisson-Fokker-Planck 系统

无碰撞的等离子体可以通过如下的动理学方程描述

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = 0,$$

其中 f 表示粒子的分布函数, \mathbf{x} 和 \mathbf{v} 表示粒子的位置和速度, \mathbf{F} 是粒子体系所受的外力, ∇ 表示梯度算子, \cdot 表示内积.

当外力是来自粒子本身产生的自洽电磁场时, 即 $\mathbf{F} = \mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}$, 外力 \mathbf{F} 被称为 Lorentz 力, 描述粒子运动的 Vlasov 方程要与 Maxwell 方程组进行耦合. 当粒子的速度远小于光速, Lorentz 力中的 $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ 很小可以忽略, 因此我们可以通过如下静电 Vlasov 方程来描述该系统

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = 0,$$

进一步, 如果磁场 \mathbf{B} 随着时间变化很小时, 电场和磁场是可以解耦的, 电场可以通过静电势表达为 $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$, 电势 φ 满足如下的 Poisson 方程

$$-\Delta\varphi = \rho - 1,$$

其中 $\rho(t, \mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}$ 表示电荷密度.

当考虑粒子之间的碰撞效应时, 动理学方程可以表达为

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f &= C(f), \\ \mathbf{E}(\mathbf{x}) &= -\nabla_{\mathbf{x}} \varphi(\mathbf{x}), \\ -\Delta\varphi &= \rho - 1, \end{aligned} \tag{5.13}$$

其中 $C(f)$ 表示碰撞项, 常见的碰撞算子包括 Lorentz 碰撞, Lenard–Bernstein 碰撞, Coulomb 碰撞等 [50, 52, 53]. 我们这主要考虑的是 Fokker–Planck 碰撞, 在这种情况下可表达为 $C(f) = \nabla_{\mathbf{v}} \cdot (\sigma \nabla_{\mathbf{v}} f + \beta(\mathbf{v}f))$, 其中 β 是粘性系数, σ 是扩散系数, 它们之间满足 $\sigma = \beta\kappa T/m$, κ 为 Boltzmann 常数, T 为周围介质温度, m 表示单个粒子的质量. 在本文中, 我们考虑空间方向满足周期边界条件. 如下命题介绍了 VPFP 系统几个重要的物理量.

命题 5.8. 如果 $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ 和 $E(\mathbf{x}, t)$ 在 \mathbf{x} 方向是周期的, 并且 f 在 \mathbf{v} 方向上具有紧支集, 那么 VPFP 系统具有如下性质:

1. 记电荷为 $V = \int f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{x}d\mathbf{v}$, 那么系统的电荷是守恒的

$$\frac{d}{dt} V = 0.$$

2. 记系统动量为 $\mathcal{M} = \int f\mathbf{v}d\mathbf{x}d\mathbf{v}$, 我们有 $\frac{d\mathcal{M}}{dt} = -\beta\mathcal{M}$, 即

$$\mathcal{M}(t) = e^{-\beta t} \mathcal{M}(0). \tag{5.14}$$

3. 记系统能量为 $\mathcal{E} = \frac{1}{2} \int |\mathbf{v}|^2 f d\mathbf{x}d\mathbf{v} + \frac{1}{2} \int |\mathbf{E}|^2 d\mathbf{x}$, 那么

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = 3\sigma V - \beta \int |\mathbf{v}|^2 f d\mathbf{x}d\mathbf{v}. \tag{5.15}$$

4. 记熵函数为 $S = \int f \ln f \, dx dv$, 那么

$$\frac{dS}{dt} = \int \left(-\sigma \frac{|\nabla_v f|^2}{f} + 3\beta f \right) dx dv.$$

证明. 1. 对 (5.13) 中的第一个方程两端关于 \mathbf{x} 和 \mathbf{v} 积分有

$$\int \frac{\partial f}{\partial t} dx dv + \int \mathbf{v} \cdot \nabla_x f dx dv + \int \mathbf{E} \cdot \nabla_v f dx dv = \int C(f) dx dv. \quad (5.16)$$

由于 f 在 \mathbf{x} 方向是周期的, 所以等号左端的第二项和第三项为 0. 根据 f 在 \mathbf{v} 方向具有紧支集, 可以计算出右端积分为

$$\begin{aligned} \int C(f) dx dv &= \int \nabla_v \cdot (\sigma \nabla_v f + \beta(\mathbf{v}f)) dx dv \\ &= \sigma \int \Delta_v f dx dv + 3 \int \beta f dx dv + \int \beta \mathbf{v} \cdot \nabla_v f dx dv \\ &= 3\beta \int f dx dv - 3\beta \int f dx dv = 0. \end{aligned}$$

因此, 我们得到系统的电荷是守恒的, 即

$$\frac{dV}{dt} = 0.$$

2. 根据假设知 \mathbf{E} 具有周期边界条件, 可得

$$\begin{aligned} \int (\nabla \times \mathbf{E}) \times \mathbf{E} dx &= - \int \left(\mathbf{E}(\nabla \cdot \mathbf{E}) + \frac{1}{2} \nabla E^2 \right) dx \\ &= - \int \mathbf{E}(\nabla \cdot \mathbf{E}) dx. \end{aligned} \quad (5.17)$$

由 (5.13) 中的第二个方程, 显然有 $\nabla \times \mathbf{E} = 0$. 由于 $\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho - 1$, 所以由 (5.17) 有

$$\int \mathbf{E}(1 - \rho) dx = 0.$$

另一方面, 由于 $\mathbf{E} = -\nabla \varphi$ 且 φ 满足周期边界条件, 得

$$\int \mathbf{E} \rho dx = 0. \quad (5.18)$$

对 (5.13) 的第一个方程两端同时乘以 \mathbf{v} ，然后关于 \mathbf{x} 和 \mathbf{v} 积分，我们有

$$\frac{d}{dt} \int \mathbf{v} f d\mathbf{x}d\mathbf{v} + \int \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{v} \otimes \mathbf{v} f) d\mathbf{x}d\mathbf{v} + \int \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{v}} \cdot (\mathbf{E} f) d\mathbf{x}d\mathbf{v} = \int \mathbf{v} C(f) d\mathbf{x}d\mathbf{v}, \quad (5.19)$$

已知 f 在 \mathbf{x} 方向是周期的，可知上式左端第二项为 0. 对上式左端第三项应用分部积分有

$$\int \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{v}} \cdot (\mathbf{E} f) d\mathbf{x}d\mathbf{v} = - \int \mathbf{E} f d\mathbf{x}d\mathbf{v} = \int \mathbf{E} \rho d\mathbf{x} = 0,$$

计算 (5.19) 的右端项有

$$\begin{aligned} \int \mathbf{v} C(f) d\mathbf{x}d\mathbf{v} &= \sigma \int \Delta_{\mathbf{v}} f \mathbf{v} d\mathbf{x}d\mathbf{v} + 3\beta \int f \mathbf{v} d\mathbf{x}d\mathbf{v} + \beta \int \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f \mathbf{v} d\mathbf{x}d\mathbf{v} \\ &= -\beta \int f \mathbf{v} d\mathbf{x}d\mathbf{v}. \end{aligned}$$

所以由 (5.19) 推出

$$\frac{d\mathcal{M}}{dt} = -\beta \mathcal{M}.$$

3. 对 (5.13) 的第一个方程两端同时乘以 $|\mathbf{v}|^2$ 并关于 \mathbf{x} 和 \mathbf{v} 积分，得

$$\frac{d}{dt} \int |\mathbf{v}|^2 f d\mathbf{x}d\mathbf{v} + \int \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (|\mathbf{v}|^2 \mathbf{v} f) d\mathbf{x}d\mathbf{v} + \int |\mathbf{v}|^2 \nabla_{\mathbf{v}} \cdot (\mathbf{E} f) d\mathbf{x}d\mathbf{v} = \int |\mathbf{v}|^2 C(f) d\mathbf{x}d\mathbf{v}. \quad (5.20)$$

在命题的假设条件下，等号左端第二项为 0. 对 (5.13) 的第一个方程两端关于 \mathbf{v} 积分有

$$\frac{\partial}{\partial t} \int f d\mathbf{v} + \int \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f d\mathbf{v} + \int \mathbf{E} \cdot (\nabla_{\mathbf{v}} f) d\mathbf{v} = \int C(f) d\mathbf{v}, \quad (5.21)$$

等号左边第三项和右端项均为 0. 根据 (5.13) 的最后一个方程我们有

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \int \mathbf{v} f d\mathbf{v} = -\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad (5.22)$$

由于 $\mathbf{E} = -\nabla_{\mathbf{x}} \phi$ ，结合 (5.22) 以及分部积分可以给出

$$\int |\mathbf{v}|^2 \nabla_{\mathbf{v}} \cdot (\mathbf{E} f) d\mathbf{x}d\mathbf{v} = -2 \int \mathbf{v} \cdot (\mathbf{E} f) d\mathbf{x}d\mathbf{v}$$

$$\begin{aligned}
 &= -2 \int \mathbf{E} \cdot \left(\int \mathbf{v} f \, d\mathbf{v} \right) d\mathbf{x} \\
 &= 2 \int \varphi \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} d\mathbf{x} \\
 &= \frac{d}{dt} \int |\mathbf{E}|^2 d\mathbf{x}. \tag{5.23}
 \end{aligned}$$

将 (5.23) 代入 (5.20) 中有

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \int |\mathbf{v}|^2 f \, d\mathbf{x} d\mathbf{v} + \frac{d}{dt} \int |\mathbf{E}|^2 d\mathbf{x} &= \int |\mathbf{v}|^2 C(f) \, d\mathbf{x} d\mathbf{v} \\
 &= \frac{1}{2} \left(6\sigma \int f \, d\mathbf{x} d\mathbf{v} - 2\beta \int |\mathbf{v}|^2 f \, d\mathbf{x} d\mathbf{v} \right) \tag{5.24} \\
 &= 3\sigma V - \beta \int |\mathbf{v}|^2 f \, d\mathbf{x} d\mathbf{v}.
 \end{aligned}$$

4. 在 (5.13) 的第一个方程两端同时乘以 $\ln f + 1$ ，并关于 \mathbf{x} 和 \mathbf{v} 积分有

$$\frac{d}{dt} \int f \ln f \, d\mathbf{x} d\mathbf{v} + \int \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} (f \ln f) \, d\mathbf{x} d\mathbf{v} + \int \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} (f \ln f) \, d\mathbf{x} d\mathbf{v} = \int (\ln f + 1) C(f) \, d\mathbf{x} d\mathbf{v}.$$

由于 f 在 \mathbf{x} 方向是周期的以及它在 \mathbf{v} 方向具有紧支集，可以看出等号左端的第二三项均为 0。于是我们有

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \int f \ln f \, d\mathbf{x} d\mathbf{v} &= \int (\ln f + 1) \nabla_{\mathbf{v}} \cdot (\sigma \nabla_{\mathbf{v}} f + \beta \mathbf{v} f) \, d\mathbf{x} d\mathbf{v} \\
 &= - \int \left(\frac{\sigma}{f} |\nabla f|^2 + \beta \mathbf{v} \cdot \nabla f \right) \, d\mathbf{x} d\mathbf{v} \\
 &= \int \left(-\frac{\sigma}{f} \|\nabla_{\mathbf{v}} f\|^2 + 3\beta f \right) \, d\mathbf{x} d\mathbf{v}.
 \end{aligned}$$

□

5.3 随机切触粒子方法

粒子方法 (Particle-In-Cell) 方法是等离子体物理数值模拟中的一类重要方法。其主要思路是通过大量宏粒子来近似分布函数，在这个过程中，每个粒子定义在 Lagrangian 网格上，而他们受到的电磁场力定义在 Eulerian 网格上 [113, 114].

记粒子的位置和速度坐标为 $(\mathbf{x}_p(t), \mathbf{v}_p(t))_{1 \leq p \leq N}$ ，记宏粒子的数目为 N ，对应

的权重为 w_p . 我们将分布函数 f 近似表达为为如下的 Dirac 函数求和

$$f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) \approx f_N(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) = \sum_{p=1}^N w_p \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p(t)) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_p(t)). \quad (5.25)$$

在实际物理问题的模拟中, 如果考虑 Vlasov–Poisson–Fokker–Planck 系统, 那么可以证明粒子的位置 $\mathbf{x}_p(t)$ 和速度 $\mathbf{v}_p(t)$ 是一个随机变量, 且满足一个随机微分方程.

定理 5.9. 记 $\mathbf{x}_p(t), \mathbf{v}_p(t)$ 为 \mathbb{R}^3 为如下随机微分方程的解

$$\begin{aligned} d\mathbf{x}_p(t) &= \mathbf{v}_p(t)dt, \\ d\mathbf{v}_p(t) &= (\mathbf{E}(t, \mathbf{x}_p(t)) - \beta\mathbf{v}_p(t))dt + \sqrt{2\sigma} \circ d\mathbf{W}(t), \end{aligned} \quad (5.26)$$

那么由 (5.25) 给出的 f_N 是 VFPF 方程的解.

证明. 假设 f_N 具有 (5.25) 的形式, 对任意 $\psi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \times (0, +\infty))$, 可定义如下的线性泛函 $\langle f_N, \cdot \rangle$

$$\langle f_N, \psi \rangle := \sum_{p=1}^N \int \omega_p \psi(\mathbf{x}_p(t), \mathbf{v}_p(t), t) dt \quad (5.27)$$

根据广义导数的定义, 可知

$$\left\langle \frac{\partial f_N}{\partial t}, \psi \right\rangle = - \left\langle f_N, \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\rangle = - \sum_{k=1}^N \omega_p \int \frac{\partial \psi}{\partial t}(\mathbf{x}_p(t), \mathbf{v}_p(t), t) dt. \quad (5.28)$$

对方程 (5.28) 两端同时取期望有

$$\mathbb{E} \left[\left\langle \frac{\partial f_N}{\partial t}, \psi \right\rangle \right] = - \sum_{k=1}^N \omega_p \int \mathbb{E} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t}(\mathbf{x}_p(t), \mathbf{v}_p(t), t) \right) dt. \quad (5.29)$$

根据 Itô 公式可知 ψ 的随机微分为

$$\begin{aligned} d(\psi(\mathbf{x}_p(t), \mathbf{v}_p(t), t)) &= \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} + \mathbf{v}_p(t) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \psi + (\mathbf{E}(\mathbf{x}_p(t), t) - \beta\mathbf{v}_p(t)) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} \psi + \sigma \Delta_{\mathbf{v}} \psi \right) dt \\ &\quad + \sqrt{2\sigma} \nabla_{\mathbf{v}} \psi \circ d\mathbf{W}. \end{aligned} \quad (5.30)$$

因为 $\mathbb{E}[\mathbf{W}(t)] = 0$ 且 ψ 具有紧支集, 关于 (5.30) 两端同时积分并取期望可得

$$\mathbb{E} \left[\frac{\partial \psi}{\partial t}(\mathbf{x}_p(t), \mathbf{v}_p(t), t) \right] = -\mathbb{E} \left[\mathbf{v}_p(t) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \psi + (\mathbf{E}(\mathbf{x}_p(t), t) - \beta \mathbf{v}_p(t)) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} \psi + \sigma \Delta_{\mathbf{v}} \psi \right]. \quad (5.31)$$

将 (5.31) 代入 (5.29) 得

$$\mathbb{E} \left[\left\langle \frac{\partial f_N}{\partial t}, \psi \right\rangle \right] = -\mathbb{E} \left[\langle \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_N + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot ((\mathbf{E}(\mathbf{x}(t), t) - \beta \mathbf{v}(t)) f_N) - \sigma \Delta_{\mathbf{v}} f_N, \psi \rangle \right].$$

可以看出 f_N 是方程 (5.13) 在弱意义以及期望意义下的解. \square

下面我们介绍采用随机粒子方法求解 VFPF 系统 (5.13) 的主要步骤 [115, 116]:

步骤一 根据分布函数 f 的表达 (5.25), 电荷密度可以表示为

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_p \omega_p \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_p), \quad (5.32)$$

其中 \mathbf{x}_p 表示粒子的位置, ω_p 为粒子的权重. 在实际计算中, 我们需要将 δ 函数近似为一个局域光滑函数 Λ . 在本章中, 我们采用如下函数

$$\Lambda(x) = \begin{cases} 1 - |x|, & 0 \leq |x| \leq 1, \\ 0 & \text{其它.} \end{cases}$$

更多光滑函数的选择参见附录 A.3.

步骤二 根据上一步得到的 ρ , 我们可以数值求解 Poisson 方程

$$\Delta \varphi = 1 - \rho.$$

在离散 Poisson 方程时, 可以采用差分法, 谱方法或者有限元方法等.

步骤三 由步骤二得到的 φ 计算出电场在网格点处的值, 进而可以插值得到粒子

位置处的电场，从而通过求解下面的随机微分方程来模拟粒子的运动，

$$\begin{aligned} d\mathbf{x}(t) &= \mathbf{v}(t)dt, \\ d\mathbf{v}(t) &= (\mathbf{E}(t, \mathbf{x}(t)) - \beta\mathbf{v}(t))dt + \sqrt{2\sigma} \circ d\mathbf{W}(t). \end{aligned} \quad (5.33)$$

在本章中，由于粒子运动满足随机微分方程，我们可以构造随机切触算法进行计算，Poisson 方程的求解我们采用谱方法，具体计算流程见算法 1.

算法 1 求解 VPFP 系统的随机粒子方法.

- 1: 输入 $f(\mathbf{x}_p, \mathbf{v}_p, t = 0)$
 - 2: 初始化粒子：记网格尺寸为 h_x 和 h_v ，分配粒子位于网格中心，且第 p 个粒子的权重为 $w_p = f(\mathbf{x}_p, \mathbf{v}_p, t = 0)h_x h_v$ ；
 - 3: 根据 (5.32) 计算 Eulerian 网格点处的电荷密度 $\rho_{i,j,k}$.
 - 4: 对 $\rho_{i,j,k}$ 采用快速傅立叶变换 (FFT) 求解它的傅立叶系数 $\hat{\rho}_{s_1, s_2, s_3}$ ；
 - 5: 计算电场的傅立叶系数： $\hat{E}_{s_1, s_2, s_3}^i = -(2\pi i s_i / L_i) \hat{\phi}_{s_1, s_2, s_3}$, $i = 1, 2, 3$, 其中 $\hat{\phi}_{s_1, s_2, s_3} = -\hat{\rho}_{s_1, s_2, s_3} / (4\pi^2 (s_1^2 / L_1^2 + s_2^2 / L_2^2 + s_3^2 / L_3^2))$, L_i 表示计算区域尺寸；
 - 6: 对 $\hat{\mathbf{E}}_{s_1, s_2, s_3}^i$ ($i = 1, 2, 3$) 采用逆傅立叶变换得 $\mathbf{E}_{i,j,k}$ ；对所得网格点处的电场进行插值，得粒子位置处的电场；
 - 7: 通过求解方程 (5.33) 推进粒子；
 - 8: 重复步骤 3-7 直到终止时刻 T .
-

考虑随机系统 (5.33)，如下我们给出相应的数值方法. 定义哈密顿函数 $H = \frac{1}{2}\mathbf{v}^2 + \varphi(\mathbf{x})$ ，其中电势 $\varphi(\mathbf{x})$ 满足 $\mathbf{E}(\mathbf{x}) = -\nabla\varphi(\mathbf{x})$ ，对于给定电场 \mathbf{E} ，可以看出随机方程的确定部分满足

$$\frac{dH}{dt} = -\beta\mathbf{v}^2,$$

即哈密顿量不是守恒的. 对于这类随机微分方程，可以引入显含时间的哈密顿量，它被称为 Kanai 哈密顿函数 [117]，具体表达为

$$\tilde{H} = e^{-\beta t} \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{v}}^2 + e^{\beta t} \varphi(\tilde{\mathbf{x}}),$$

其中 $\tilde{\mathbf{v}} = e^{\beta t} \mathbf{v}$, $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x}$. 可知在新的坐标下， \tilde{H} 是守恒的 [118]. 然而，使用该模型可能会产生一些非物理的结果 [119].

我们在本节中是将该系统看作一个随机切触系统进行研究的. 具体的, 通过引入一个辅助变量 s (它在物理中称为 **bath energy**), 可以将原始的 $2d$ -维系统 (5.33) 转换为定义在 $(2d + 1)$ -维空间 $(\mathbf{x}, \mathbf{v}, s)$ 上的系统

$$\begin{aligned} d\mathbf{x} &= \mathbf{v}dt, \\ d\mathbf{v} &= (\mathbf{E} - \beta\mathbf{v})dt + \sqrt{2\sigma} \circ d\mathbf{W}(t), \\ ds &= \left(\frac{\mathbf{v}^2}{2} - \varphi - \beta s \right) dt. \end{aligned} \quad (5.34)$$

定义 $K = \frac{1}{2}\mathbf{v}^2 + \varphi(\mathbf{x}) + \beta s$, 可知 (5.34) 可以表达为如下形式,

$$\begin{aligned} d\mathbf{x} &= \frac{\partial K}{\partial \mathbf{v}} dt, \\ d\mathbf{v} &= \left(-\frac{\partial K}{\partial \mathbf{x}} - \frac{\partial K}{\partial s} \mathbf{v} \right) dt + \sqrt{2\sigma} \circ d\mathbf{W}(t), \\ ds &= \left(\frac{\partial K}{\partial \mathbf{v}} \mathbf{v} - K \right) dt, \end{aligned} \quad (5.35)$$

其中确定部分被称为切触哈密顿系统, K 被称为切触哈密顿函数.

对 (5.34), 我们考虑如下的分裂方法. 将原系统分裂为下面两个子系统

$$\begin{cases} d\mathbf{x} = \mathbf{v}dt, \\ d\mathbf{v} = (\mathbf{E} - \beta\mathbf{v})dt, \\ ds = (\mathbf{v}^2/2 - \varphi - \beta s) dt \end{cases} \quad (5.36)$$

和

$$\begin{cases} d\mathbf{x} = 0, \\ d\mathbf{v} = \sqrt{2\sigma} \circ d\mathbf{W}(t). \\ ds = 0. \end{cases} \quad (5.37)$$

对于随机部分 (5.37), 我们知道该微分方程等价于如下的积分方程

$$\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}_0 + \int_{t_0}^t \sqrt{2\sigma} \circ d\mathbf{W}(s) \quad (5.38)$$

其中 (5.38) 的右端第二项表示 Wiener 积分. 由于 $\int_0^t d\mathbf{W}(s) \sim \mathcal{N}(0, t\mathbf{I})$, 在分布意

义下 (5.38) 等价于

$$\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}_0 + \sqrt{2\sigma}\xi,$$

其中 $\xi \sim \sqrt{t}\mathcal{N}(0, \mathbf{I}_{3 \times 1})$. 因此我们可以计算 (5.37) 的解并得到

$$\psi_t : \begin{cases} \mathbf{x}(t) = \mathbf{x}(0), \\ \mathbf{v}(t) = \mathbf{v}(0) + \sqrt{2\sigma}\xi \\ s(t) = s(0). \end{cases} \quad (5.39)$$

下面, 我们考虑系统的确定部分 (5.36). 由于该系统是一个切触哈密顿系统, 可以应用我们前面构造的切触算法来求解. 具体的, 有如下一阶和二阶切触算法

$$\Phi_h^1 : \begin{cases} \mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + h\mathbf{v}_{n+1} \\ \mathbf{v}_{n+1} = (1 - h\beta)\mathbf{v}_n + h\mathbf{E}(\mathbf{x}_n) \\ s_{n+1} = s_n + h(\mathbf{v}_{n+1}^2/2 - \varphi(\mathbf{x}_n) - \beta s_n) \end{cases}, \quad (5.40)$$

和

$$\Phi_h^2 : \begin{cases} \mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + h\mathbf{v}_{n+1} + \frac{h^2}{2}(\beta\mathbf{v}_{n+1} - \mathbf{E}(\mathbf{x}_n)) \\ \mathbf{v}_{n+1} = (1 - h\beta + \frac{h^2}{2}\beta^2)\mathbf{v}_n + h\mathbf{E}(\mathbf{x}_n) - \frac{h^2}{2}(\beta\mathbf{E}(\mathbf{x}_n) + \nabla^2\varphi(\mathbf{x}_n)\mathbf{v}_{n+1}) \\ s_{n+1} = s_n + h(\mathbf{v}_{n+1}^2/2 - \varphi(\mathbf{x}_n) - \beta s_n) + \frac{h^2}{2}(\beta\mathbf{v}_{n+1}^2/2 + \beta\varphi(\mathbf{x}_n) + \beta^2 s_n) \end{cases}. \quad (5.41)$$

从切触算法的定义 2.5 可以看出, 每一个切触算法对应一个不同的系数因子 μ_h . 如下我们给出了 Φ_h^1 和 Φ_h^2 对应的系数 μ_h .

定理 5.10. 数值格式 Φ_h^1 和 Φ_h^2 均是切触算法, 对应的系数因子分别是 $\mu_h = 1 - h\beta$ 和 $\mu_h = 1 - h\beta + \frac{h^2}{2}\beta^2$.

证明. 在本文中, 我们只给出关于 Φ_h^2 的证明, 关于 Φ_h^1 的证明是类似的.

记 $\lambda = 1 - h\beta + \frac{h^2}{2}\beta^2$. 对 (5.41) 两端取微分, 可得

$$ds_{n+1} = \lambda ds_n + \left(h + \frac{h^2}{2}\beta\right)\mathbf{v}_{n+1}d\mathbf{v}_{n+1} + \left(h - \frac{h^2}{2}\beta\right)\mathbf{E}(\mathbf{x}_n)d\mathbf{x}_n, \quad (5.42)$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{v}_{n+1}d\mathbf{x}_{n+1} &= \lambda \mathbf{v}_n d\mathbf{x}_n + \left(h - \frac{h^2}{2}\beta \right) \mathbf{E}(\mathbf{x}_n) d\mathbf{x}_n \\
 &+ \left(\lambda \left(h + \frac{h^2}{2}\beta \right) \mathbf{v}_n + \left(h^2 - \frac{h^4\beta^2}{4} \right) \mathbf{E}(\mathbf{x}_n) - \left(\frac{h^3}{2} + \frac{h^4}{4}\beta \right) \nabla^2 \varphi(\mathbf{x}_n) \mathbf{v}_{n+1} \right) d\mathbf{v}_{n+1} \\
 &+ \left(\lambda \frac{h^2}{2} \nabla^2 \varphi(\mathbf{x}_n) \mathbf{v}_n + \left(\frac{h^3}{2} - \frac{h^4\beta}{4} \right) \nabla^2 \varphi(\mathbf{x}_n) \mathbf{E}(\mathbf{x}_n) - \frac{h^2}{2} \nabla^2 \varphi(\mathbf{x}_n) \mathbf{v}_{n+1} \right) d\mathbf{x}_n \\
 &- \left(\frac{h^4}{4} \nabla^2 \varphi(\mathbf{x}_n) \nabla^2 \varphi(\mathbf{x}_n) \mathbf{v}_{n+1} \right) d\mathbf{x}_n, \tag{5.43}
 \end{aligned}$$

借助 (5.41) 中的第二个方程，上式等号右端的两项抵消且第三项可以化简为

$$\begin{aligned}
 &\left(\lambda \left(h + \frac{h^2}{2}\beta \right) \mathbf{v}_n + \left(h^2 - \frac{h^4\beta^2}{4} \right) \mathbf{E}(\mathbf{x}_n) - \left(\frac{h^3}{2} + \frac{h^4}{4}\beta \right) \nabla^2 \varphi(\mathbf{x}_n) \mathbf{v}_{n+1} \right) d\mathbf{v}_{n+1} \\
 &= \left(h + \frac{h^2}{2}\beta \right) \mathbf{v}_{n+1} d\mathbf{v}_{n+1}. \tag{5.44}
 \end{aligned}$$

方程 (5.42) 和 (5.43) 相减得

$$ds_{n+1} - \mathbf{v}_{n+1}d\mathbf{x}_{n+1} = \lambda (ds_n - \mathbf{v}_n d\mathbf{x}_n).$$

根据定理 2.5，即证明了 Φ_h^2 是一个切触算法且 $\mu_h = 1 - h\beta + \frac{h^2}{2}\beta^2$. \square

注. 如果 $\beta = \sigma = 0$ ，则 Φ_h^1 和 Φ_h^2 退化为辛算法.

对 (5.34) 的确定部分应用切触算法，对 (5.34) 随机部分采用精确解，应用 Lie-Trotter 分裂和 Strang 分裂算法，最终可以得到如下的随机切触算法

$$\Psi_h^1 = \psi_h \circ \Phi_h^1$$

和

$$\Psi_h^2 = \psi_{h/2} \circ \Phi_h^2 \circ \psi_{h/2}. \tag{5.45}$$

Ψ_h^1 和 Ψ_h^2 的具体表达见附录 A.4. 可以证明，这两种随机切触算法分别是弱一阶和弱二阶，针对格式 Ψ_h^2 ，给出了具体证明， Ψ_h^1 可以类似证明.

定理 5.11. 对 (5.33) 应用 Ψ_h^2 ，记 $(\mathbf{x}_n, \mathbf{v}_n)$ 是其数值解. 假设 $\mathbf{E}(\mathbf{x})$ 是全球 Lipschitz 的并且满足线性增长条件，即对任意的常数 $L > 0$ 和 $C_f \geq 0$ 以及任意的 $\mathbf{u}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^d$,

有

$$\|\mathbf{E}(\mathbf{u}) - \mathbf{E}(\mathbf{w})\| \leq L\|\mathbf{u} - \mathbf{w}\|, \quad \|\mathbf{E}(\mathbf{u})\| \leq C_f(1 + \|\mathbf{u}\|),$$

则存在正常数 h_0 使得, 对任意的 $h \leq h_0$, 有

$$\sup_{n \in \{1, \dots, N\}} \mathbb{E}[\|\mathbf{x}_n\|^k + \|\mathbf{v}_n\|^k] \leq \infty.$$

证明. 考虑 Ψ_h^2 , 对任意给定的初值 $\mathbf{z}_0 = (\mathbf{x}_0^\top, \mathbf{v}_0^\top)^\top$ 和步长 h , 我们有

$$\begin{aligned} \|\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_0\| &\leq \left| -h\beta + \frac{h^2}{2}\beta^2 \right| \|\mathbf{v}_0\| + h \left(1 - \frac{\beta h}{2} \right) \|\mathbf{E}(\mathbf{x}_0)\| + \sqrt{h/2} \left(2 - h\beta + \frac{h^2}{2}\beta^2 \right) \|\sqrt{2\sigma}\xi\| \\ &\quad + \frac{h^2}{2} \|\nabla^2\varphi(\mathbf{x}_0)\| \|\mathbf{v}_0\| + \frac{h^2}{2} \|\nabla^2\varphi(\mathbf{x}_0)\| \|\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_0\| + \sqrt{h/2} \|\frac{h^2}{2}\nabla^2\varphi(\mathbf{x}_0)\| \|\sqrt{2\sigma}\xi\|. \end{aligned}$$

记 $C_\beta = 1 - \frac{\beta h}{2}$. 因为 $\mathbf{E}(\mathbf{x})$ 满足 Lipschitz 条件, 可得

$$\begin{aligned} \|\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_0\| &\leq |-h\beta C_\beta| \|\mathbf{v}_0\| + hC_f C_\beta (1 + \|\mathbf{z}_0\|) + \sqrt{h/2} |2 - h\beta C_\beta| \sqrt{2\sigma} \|\xi\| \\ &\quad + \frac{h^2}{2} L \|\mathbf{z}_0\| + \frac{h^2}{2} L \|\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_0\| + \sqrt{h/2} \frac{h^2}{2} L \sqrt{2\sigma} \|\xi\| \\ &\leq C(1 + \|\mathbf{z}_0\|) (h + \|\xi\| \sqrt{h}) + \frac{h^2}{2} L \|\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_0\|. \end{aligned}$$

对给定 L , 知存在一个正常数 h_0 使得对任意的 $h \leq h_0$, 有

$$L \frac{h^2}{2} \leq \frac{1}{2}. \quad (5.46)$$

代入上式得

$$\|\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_0\| \leq 2C(1 + \|\mathbf{z}_0\|)(h + \sqrt{h}\|\xi\|).$$

另一方面有

$$\begin{aligned} \|\mathbb{E}(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_0)\| &\leq \|(-h\beta C_\beta)\mathbf{v}_0 - \frac{h^2}{2}\nabla^2\varphi(\mathbf{x}_0)\mathbf{v}_0 - hC_\beta\mathbf{E}(\mathbf{x}_0)\| + \|\frac{h^2}{2}\nabla^2\varphi(\mathbf{x}_0)\mathbb{E}(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_0)\| \\ &\leq |-h\beta C_\beta| \|\mathbf{v}_0\| + \frac{h^2}{2} L \|\mathbf{v}_0\| + hC_f C_\beta (1 + \|\mathbf{z}_0\|) + \frac{h^2}{2} L \|\mathbb{E}(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_0)\|, \end{aligned}$$

进一步利用 (5.46), 知当 $h \leq h_0$ 时有

$$\|\mathbb{E}(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_0)\| \leq C(1 + \|\mathbf{z}_0\|)h.$$

类似地, 可得

$$\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\| \leq C(1 + \|\mathbf{z}_0\|)(h + \sqrt{h}\|\xi\|), \quad \|\mathbb{E}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0)\| \leq C(1 + \|\mathbf{z}_0\|)h.$$

因此, 对 $\mathbf{z}_1 = (\mathbf{x}_1^\top, \mathbf{v}_1^\top)^\top$, 我们有

$$\|\mathbf{z}_1 - \mathbf{z}_0\| \leq C(\|\xi\| + \sqrt{h})(1 + \|\mathbf{z}_0\|)\sqrt{h} \leq C(\|\xi\| + 1)(1 + \|\mathbf{z}_0\|)\sqrt{h}.$$

根据文献 [120] 中的引理 9.1 我们可得该定理中的结论. \square

定理 5.12. 在定理 5.11 的假设下, 格式 Ψ_h^2 是弱二阶, 即对任意的 $\phi \in C_c^6(\mathbb{R}^{2d}, \mathbb{R})$ 以及 $T = Nh$, 有

$$|\mathbb{E}\phi(\mathbf{v}(T), \mathbf{x}(T)) - \mathbb{E}\phi(\mathbf{v}_N, \mathbf{x}_N)| = O(h^2).$$

证明. 不失一般性, 我们考虑 $d = 1$ 得情形. 由 Itô 公式我们有

$$\begin{aligned} v(h) &= v_0 + \int_0^h (E(x(s)) - \beta v(s)) ds + \sqrt{2\sigma} \int_0^h dW(s) \\ &= v_0 + \int_0^h \left(E(x_0) - \int_0^s \nabla^2 U(x(\theta))v(\theta) \right) ds + \sqrt{2\sigma} \int_0^s dW(s) \\ &\quad - \beta \int_0^h \left(v_0 + \int_0^s (E(x(\theta)) - \beta v(\theta)) d\theta + \sqrt{2\sigma} \int_0^s dW(\theta) \right) ds, \end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned} v(h) &= v_0 + E(x_0)h - \beta h v_0 - \frac{1}{2} \nabla^2 \varphi(x_0) v_0 h^2 + \sqrt{2\sigma} \int_0^h dW(s) \\ &\quad - \frac{1}{2} \beta h^2 E(x_0) + \frac{1}{2} \beta^2 v_0 h^2 - \beta \sqrt{2\sigma} \int_0^h \int_0^s dW(\theta) ds + \delta_1, \end{aligned} \quad (5.47)$$

其中 $\mathbb{E}\|\delta_1\| = O(h^3)$, $\mathbb{E}\|\delta_1\|^2 = O(h^5)$. 类似地, 我们有

$$\begin{aligned} x(h) &= x_0 + \int_0^h \left(v_0 + \int_0^s (E(x(\theta)) - \beta v(\theta)) d\theta + \sqrt{2\sigma} \int_0^s dW(\theta) \right) ds, \\ &= x_0 + v_0 h + \frac{1}{2} E(x_0) h^2 - \frac{1}{2} \beta v_0 h^2 + \sqrt{2\sigma} \int_0^h \int_0^s dW(\theta) ds + \delta_2 \end{aligned} \quad (5.48)$$

其中 $\mathbb{E}\|\delta_2\| = O(h^3)$, $\mathbb{E}\|\delta_2\|^2 = O(h^5)$. 对于数值格式 Ψ_h^2 , 我们有

$$\begin{aligned} v_1 &= v_0 + hE(x_0) - \beta h v_0 - \frac{h^2}{2} \nabla^2 \varphi(x_0) v_0 + 2\sqrt{2\sigma} \sqrt{h/2\xi} \\ &\quad + \frac{h^2}{2} \beta^2 v_0 - \frac{h^2}{2} \beta E(x_0) - h\beta \sqrt{2\sigma} \sqrt{h/2\xi} + \delta_3, \end{aligned} \quad (5.49)$$

$$x_1 = x_0 + h v_0 - \frac{h^2}{2} \beta v_0 + \frac{h^2}{2} E(x_0) + h\sqrt{2\sigma} \sqrt{h/2\xi} + \delta_4, \quad (5.50)$$

其中 $\mathbb{E}\|\delta_i\| = O(h^3)$, $\mathbb{E}\|\delta_i\|^2 = O(h^5)$. 比较 (5.47) 和 (5.49) 得到

$$v(h) - v_1 = \sqrt{2\sigma} \left(\int_0^h dW(s) - 2\sqrt{h/2\xi} \right) - \beta \sqrt{2\sigma} \left(\int_0^h \int_0^s dW(\theta) ds - h\sqrt{h/2\xi} \right) + (\delta_1 - \delta_3),$$

因此 $\|E(v(h) - v_1)\| = O(h^3)$. 同理可得 $\|E(x(h) - x_1)\| = O(h^3)$. 对 $i = 2, 3, 4, 5$, 我们有

$$\|E[(v(h) - v_0)^i - (v_1 - v_0)^i]\| \leq Ch^3 + O(h^4),$$

$$\|E[(x(h) - x_0)^i - (x_1 - x_0)^i]\| \leq Ch^3 + O(h^4).$$

进一步, 对 $i_1 + i_2 = 2, 3, 4, 5$ 和 $i_1 \geq 1$, 有

$$\|E[(v(h) - v_0)^{i_1} (x(h) - x_0)^{i_2} - (v_1 - v_0)^{i_1} (x_1 - x_0)^{i_2}]\| \leq Ch^3 + O(h^4).$$

由 Taylor 展开和均值定理可以得到

$$\begin{aligned} &|E[\phi(v(h), x(h)) - \phi(v_1, x_1)]| \\ &\leq \left| \frac{\partial \phi}{\partial v}(v_0, x_0) \right| \|E(v(h) - v_1)\| + \left| \frac{\partial \phi}{\partial x}(v_0, x_0) \right| \|E(x(h) - x_1)\| \\ &\quad + \sum_{j=2}^5 \sum_{i=0}^j \left| \frac{\partial^j \phi(v_0, x_0)}{\partial v^i \partial x^{j-i}} \right| \|E[(v(h) - v_0)^i (x(h) - x_0)^{j-i} - (v_1 - v_0)^i (x_1 - x_0)^{j-i}]\| \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \sum_{i=0}^6 \mathbb{E} \left(\left| \frac{\partial^6 \phi(v_0 + \theta_1 v(h), x_0 + \theta_1 x(h))}{\partial v^i \partial x^{6-i}} \right| \|(v(h) - v_0)^i (x(h) - x_0)^{6-i}\| \right) \\
 & + \sum_{i=0}^6 \mathbb{E} \left(\left| \frac{\partial^6 \phi(v_0 + \theta_2 v_1, x_0 + \theta_2 x_1)}{\partial v^i \partial x^{6-i}} \right| \|(v_1 - v_0)^i (x_1 - x_0)^{6-i}\| \right)
 \end{aligned}$$

其中常数 $0 \leq \theta_1 \leq 1$, $0 \leq \theta_2 \leq 1$. 根据 (5.47)-(5.50), 可以推出

$$\begin{aligned}
 & \mathbb{E} \left(\left| \frac{\partial^6 \phi(v_0 + \theta_1 v(h), x_0 + \theta_1 x(h))}{\partial v^i \partial x^{6-i}} \right| \|(v(h) - v_0)^i (x(h) - x_0)^{6-i}\| \right) \\
 & \leq C \left(\mathbb{E} \|(v(h) - v_0)^{2i} (x(h) - x_0)^{12-2i}\| \right)^{\frac{1}{2}} \leq Ch^{6-\frac{i}{2}}.
 \end{aligned}$$

类似地, 对 $0 \leq i \leq 6$, 我们有

$$\mathbb{E} \left(\left| \frac{\partial^6 \phi(v_0 + \theta_2 v_1, x_0 + \theta_2 x_1)}{\partial v^i \partial x^{6-i}} \right| \|(v_1 - v_0)^i (x_1 - x_0)^{6-i}\| \right) = O(h^{6-\frac{i}{2}}).$$

综上所述可得

$$|\mathbb{E}[\phi(v(h), x(h)) - \phi(v_1, x_1)]| \leq O(h^3),$$

利用文献 [120] 中的定理 9.1 可以证明数值格式 Ψ_h^2 是全局弱二阶的. \square

5.4 数值实验

应用上节构造的随机切触粒子方法, 在本节中, 我们数值模拟了朗道阻尼, 双流不稳定性, 尾隆不稳定性以及 Diocotron 不稳定性, 并验证了算法在时间方向上的弱收敛阶. 通过观察能量以及动量随时间的演化, 验证了算法的长时间稳定性.

首先, 考虑给定的一维电场 $E = -x$, 对应电势为 $\varphi(x) = x^2/2$. 取初值为 $(x_0, v_0) = (-1.5, -1.5)$, 分别应用 Ψ_h^1 和 Ψ_h^2 来求解 (5.33). 图 5.2 展示了数值方法在四种步长 $h = [2^{-2}, 2^{-3}, 2^{-4}, 2^{-5}]$ 下的弱误差, 其中 $T = 2$, 样本轨道为 $2 \cdot 10^5$. 从图中可以看出格式 Ψ_h^1 为弱一阶, 格式 Ψ_h^2 为弱二阶, 这与定理 5.12 中的理论结果是一致的.

遍历性是指统计结果在时间和空间上的统一性, 表现为时间均值的极限等

于空间均值. 具体的, 对于方程 (5.33) 来说, 有

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \mathbb{E}[\psi(\mathbf{x}(t), \mathbf{v}(t))] dt = \int \psi d\mu \quad \forall \psi \in C_c(\mathbb{R}^{2d}, \mathbb{R}) \quad (5.51)$$

其中 μ 称为 Boltzmann-Gibbs 不变测度. 定义 $Z = \int \exp(-\beta H(\mathbf{x}, \mathbf{v})) d\mathbf{x} d\mathbf{v}$ 为归一化常数, 则对应的概率密度为 $\pi(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = Z^{-1} \exp(-\beta H(\mathbf{x}, \mathbf{v}))$ [121].

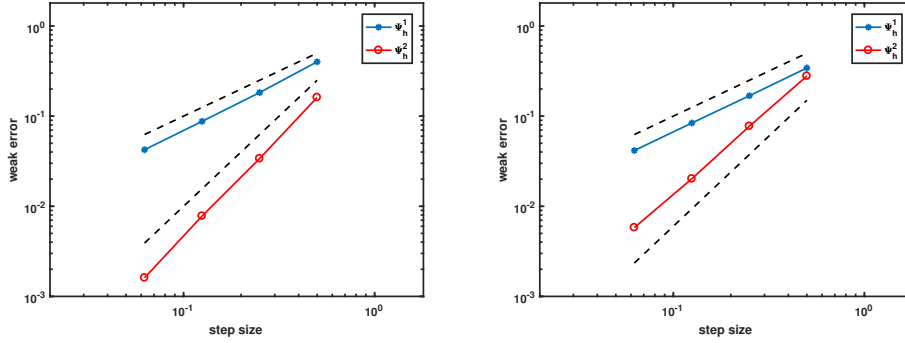


图 5.2 Ψ_h^1 和 Ψ_h^2 的弱收敛阶 ($\beta = \sigma = 0.01$). 左: x 的数值误差; 右: v 的数值误差.

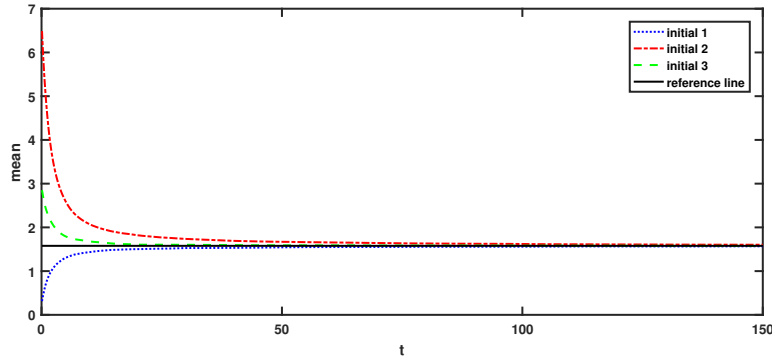


图 5.3 三种不同初值所得的时间平均 $\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbb{E}[H(\mathbf{X}_n, \mathbf{V}_n)]$ 函数.

假设外加电场为

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = \frac{10^{-2}}{(x_1^2 + x_2^2)^{3/2}} [x_1; x_2; 0],$$

在 (5.51) 中取 $\psi = H$. 这里我们选取了三种不同的初值和 5000 个样本路径, 计算了哈密顿函数的时间平均 $\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbb{E}[H(\mathbf{x}_n, \mathbf{v}_n)]$. 图 5.3 中的参考线对应于 H 关于不变测度 μ 的空间平均, 可以观察到不同初值得到的时间平均曲线最终都收敛于参考线, 所以验证了数值算法保持 (5.51).

朗道阻尼 朗道阻尼 (Landau damping) 是非磁化等离子体物理中的一种经典现象, 关于朗道阻尼的理论于 1946 年被朗道提出, 并在 1964 年被 Malmberg 与 Wharton 在实验中进一步证实. 在该现象中等离子体波会随着时间指数衰减, 这可以解释为: 即使忽略粒子之间的碰撞, 粒子动能与电场能量之间仍然存在能量交换. 在本数值算例中, 我们应用上节构造的随机粒子方法, 模拟了线性朗道阻尼现象.

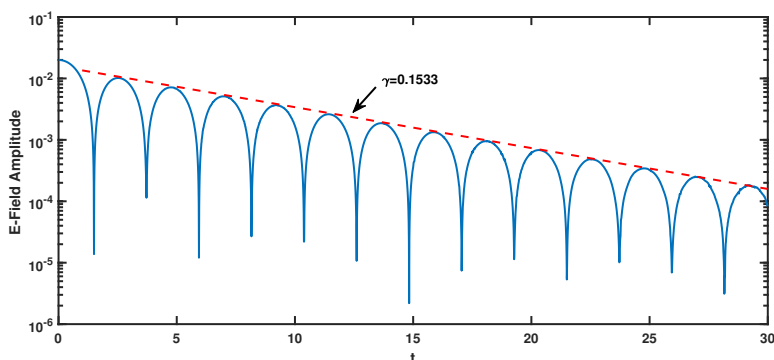


图 5.4 电场振幅随时间的变化.

考虑空间一维, 速度一维的情形, 取 (5.13) 中的 $\beta = \sigma = 0$, 初始分布函数为

$$f(x, v, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-v^2/2)(1 + \alpha \cos(kx)), \quad (x, v) \in [0, L] \times [-v_{\max}, v_{\max}],$$

其中 α 为扰动振幅, $k = 0.5$ 为波数, $L = 2\pi/k$, $v_{\max} = 5$. 时间步长取为 $\Delta t = 0.01$, 位置和速度方向尺寸分别为 $\Delta x = L/64$ 和 $\Delta v = 2v_{\max}/64$. 初始时刻取 $N_p = 64 \times 64 \times 25 = 102400$ 个粒子, 粒子在位置和速度方向的间隔分别为 $h_x = \Delta x/5$ 和 $h_v = \Delta v/5$. 在本数值实验中, 假设系统在速度方向上满足周期条件.

我们考虑线性朗道阻尼的情形, 这时 $\alpha = 0.01$. 对线性化系统, 电场振幅随时间指数衰减, 且衰减率为 $\gamma = 0.1533$ [115, 116]. 在图 5.4 中, 我们展示了线性朗道阻尼的电场振幅随时间的演化, 从图中可以看出电场的振幅随时间指数衰减, 且衰减速率与理论值吻合. 在表达式 (5.14) 和 (5.15), 取 $\beta = \sigma = 0$ 时, 可以验证能量和动量是守恒的. 在图 5.5 中, 我们展示了能量误差以及动量随时间的演化, 可以看到能量误差保持在 10^{-6} 量级, 动量保持在 10^{-16} 量级.

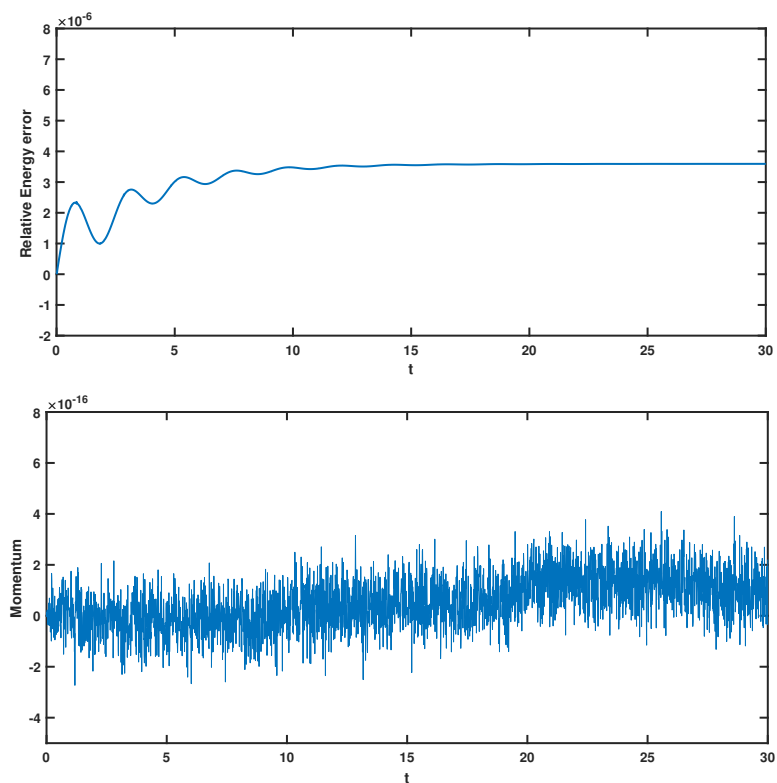


图 5.5 线性朗道阻尼：相对能量误差 $|\mathcal{E} - \mathcal{E}_0|/\mathcal{E}_0$ 和动量 \mathcal{M} 随时间的变化。

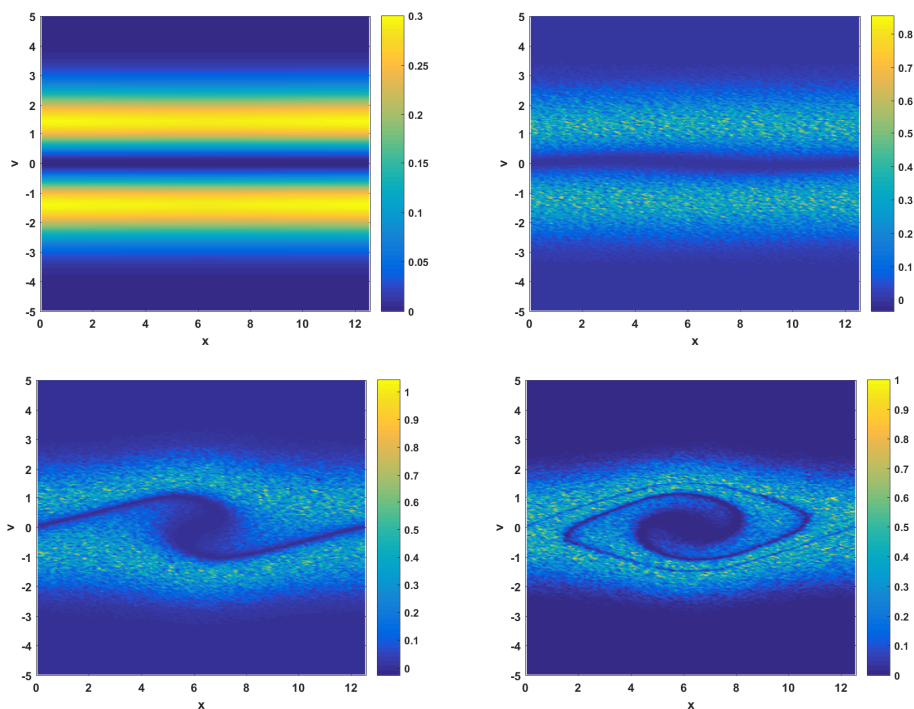


图 5.6 双流不稳定性：分布函数在不同时刻的等高线图 ($\sigma = \beta = 1.25 \cdot 10^{-5}$). (a) $t = 0$. (b) $t = 10$. (c) $t = 20$. (d) $t = 30$.

双流不稳定性 下面我们考虑等离子体物理中的一个常见的不稳定性—双流不稳

定性 (two-stream instability) 现象. 这种现象是当带电粒子束通过等离子体时或者当两群带电粒子在等离子体中作反向运动时激发产生的.

在本数值实验中, 取初始分布函数为

$$f(x, v, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} v^2 \exp(-v^2/2)(1 + \alpha \cos(kx)), (x, v) \in [0, 2\pi/k] \times [-v_{\max}, v_{\max}],$$

其中 $\alpha = 0.01$, $k = 0.5$, $v_{\max} = 5$. 采用周期边界条件, 网格尺寸和参数同上个数值算例一致, 在本数值算例中, 我们考虑了带碰撞和不带碰撞两种情形.

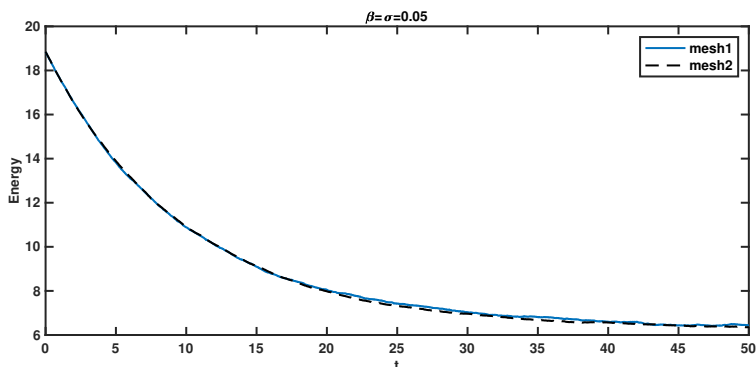


图 5.7 双流不稳定: 能量随时间的变化. (实线: $\Delta x = L/64$, $\Delta v = 2v_{\max}/64$, $\Delta t = 0.01$; 虚线: $\Delta x = L/128$, $\Delta v = 2v_{\max}/128$, $\Delta t = 0.005$).

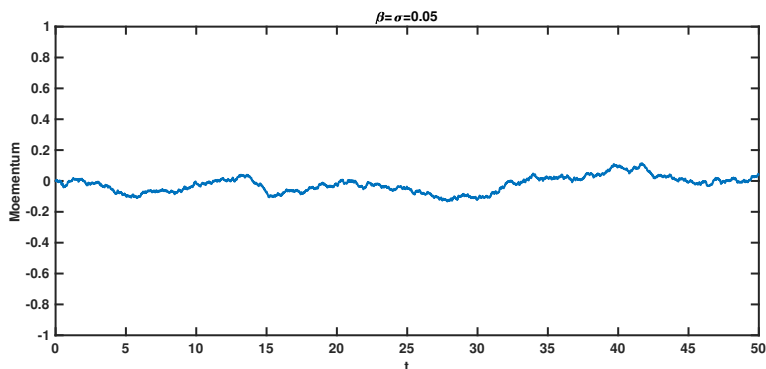


图 5.8 双流不稳定: 动量随时间的变化.

当考虑碰撞效应时, 图 5.6 展示了分布函数在四个不同时刻的等高线图, 可以看出, 在 $t \approx 20$ 时出现了一个洞状的结构. 随着时间推进, 可以观察到粒子一直被约束在洞状结构附近并且逐渐形成了一个涡旋状结构. 进一步我们计算了系统能量并在图 5.7 中展示了能量 \mathcal{E} 随时间的变化. 从图中可以看出能量随时间是衰减的. 为了考虑算法的收敛性, 我们将时间网格和空间网格均缩小 $1/2$, 可以观察到两组参数所得能量曲线是非常接近的. 我们同样计算了系统的动量随时间

的演化, 如图 5.8 所示. 由于初始动量为零, 可以从 (5.14) 看出系统的动量是守恒的, 我们也观察到数值计算所得的动量一直在初始动量 ($= 0$) 附近扰动并无明显增长.

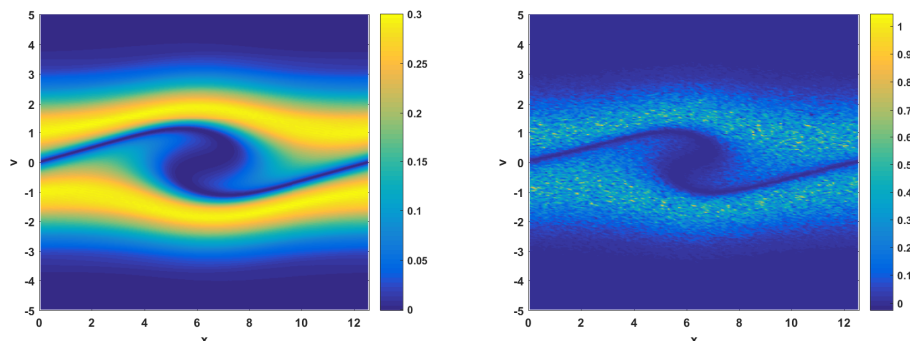


图 5.9 双流不稳定性: 分布函数在 $t = 20$ 的等高线图. (a) $\beta = \sigma = 0$; (b) $\beta = \sigma = 1.25 \cdot 10^{-5}$.

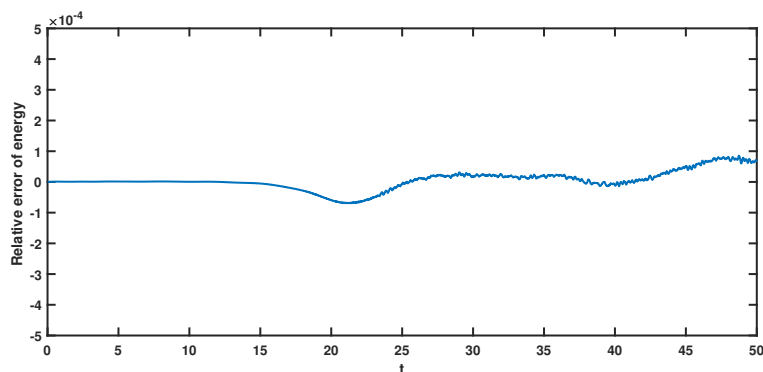


图 5.10 双流不稳定性: 不考虑碰撞时能量相对误差随时间的变化.

若不考虑碰撞效应, Vlasov–Poisson–Fokker–Planck 方程退化为 Vlasov–Poisson 方程, 我们计算了分布函数随时间的演化, 图 5.9 展示了分布函数在 $t = 20$ 时刻等高线图. 其中左图表示分布函数无碰撞 $\beta = \sigma = 0$ 的等高线图, 右图表示带碰撞效应的情形, 这里 $\beta = \sigma = 1.25 \times 10^{-5}$. 可以观察到, 这两种情形下的分布函数具有类似的结构. 此外, 当不考虑碰撞时, 能量和动量均为系统的守恒量, 图 5.10 展示了能量相对误差随时间的演化. 图 5.11 展示了动量绝对误差随时间的变化. 可以看出能量误差保持在 10^{-4} 量级, 动量误差保持在 10^{-14} 量级.

尾隆不稳定性 在等离子体物理中, 有一类波和粒子相互作用引起的不稳定性称为尾隆不稳定性 (Bump-on-tail instability), 它是由于等离子体的电子速度分布的尾部隆起与朗缪尔波相互作用引起的 [122].

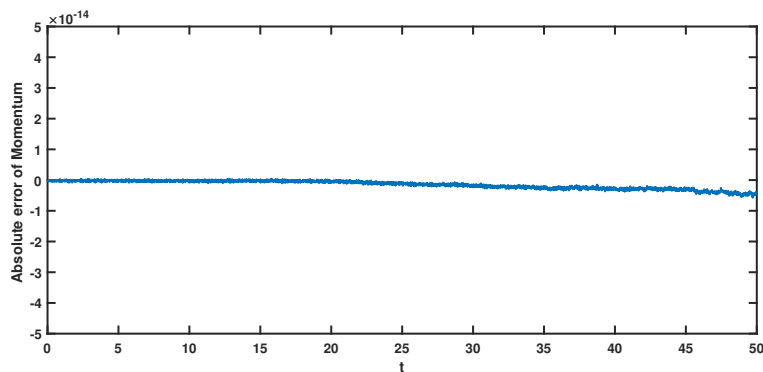
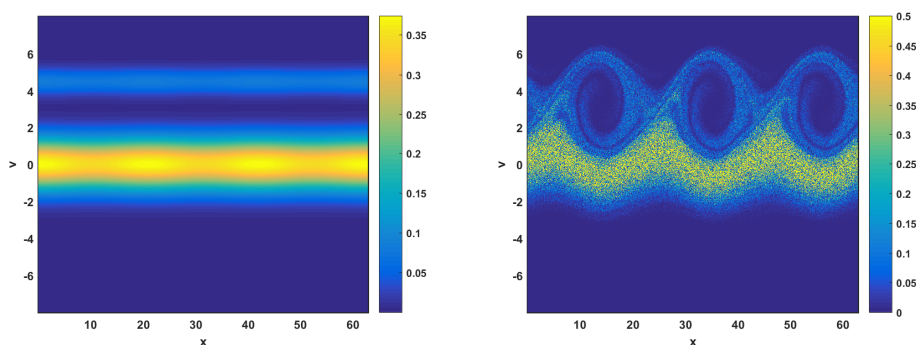


图 5.11 双流不稳定：不考虑碰撞时动量绝对误差随时间的变化。


 图 5.12 尾隆不稳定性：分布函数在不同时刻的等高线图 ($\sigma = \beta = 2.5 \cdot 10^{-4}$). (a) $t = 0$; (b) $t = 40$.

在本数值实验中，我们选择的初始分布函数为

$$f(x, v, 0) = (1 + \epsilon \cos(kx))f_0(v), \quad (x, v) \in [0, L] \times [-v_{\max}, v_{\max}],$$

其中 $\epsilon = 0.04$, $k = 0.3$, $L = 20\pi$, $v_{\max} = 8$, f_0 为如下形式，

$$f_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(0.9e^{-\frac{v^2}{2}} + 0.2e^{-2(v-4.5)^2} \right).$$

假设周期边界条件，空间网格点为 $N_x = 160$ ，速度网格点为 $N_v = 128$ ，时间步长取为 $\Delta t = 0.05$ ，在这里，我们取粒子数目为 $N_p = 160 \cdot 128 \cdot 25 = 512000$ 。

图 5.12 展示了分布函数在初始时刻以及 $t = 40$ 时刻的等高线图。可以看出随着时间推进，出现了三个涡旋结构，这和文献中的结果是一致的 [123]。作为对比，在图 5.13 中我们展示了 $t = 40$ 时考虑碰撞和不考虑碰撞两种情形下分布函数的等高线图。可以看出，考虑碰撞效应时，分布函数变的不光滑。在图 5.14

和 5.15 中，我们展示了不考虑碰撞时能量误差和动量误差随时间的变化，此时方程中取 $\beta = \sigma = 0$ 时，可以看出能量和动量误差没有明显增长，在一段时间内均保持地很好。类似地我们考虑碰撞效应情形，结果展示在图 5.16 和 5.17 中。图 5.16 展示了分别采用两种网格参数计算所得能量 \mathcal{E} 随时间的变化，可以看出两组参数所得结果是吻合的，能量均随着时间衰减且趋于一个定值。图 5.17 展示了数值动量随时间的演化，其中红色线表示根据 (5.14) 计算的理论衰减率，蓝色线表示数值计算的动量，可以看出数值结果与理论衰减率吻合的很好。

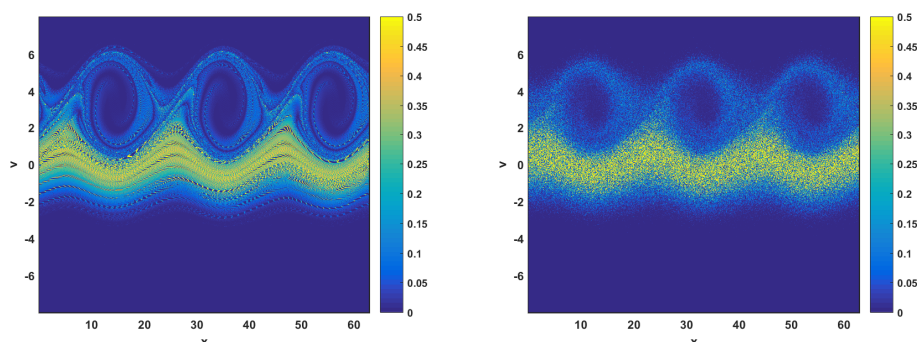


图 5.13 尾隆不稳定性：分布函数在 $t = 40$ 时无碰撞和有碰撞的等高线图。(a) $\sigma = \beta = 0$; (b) $\sigma = \beta = 2.5 \cdot 10^{-3}$ 。

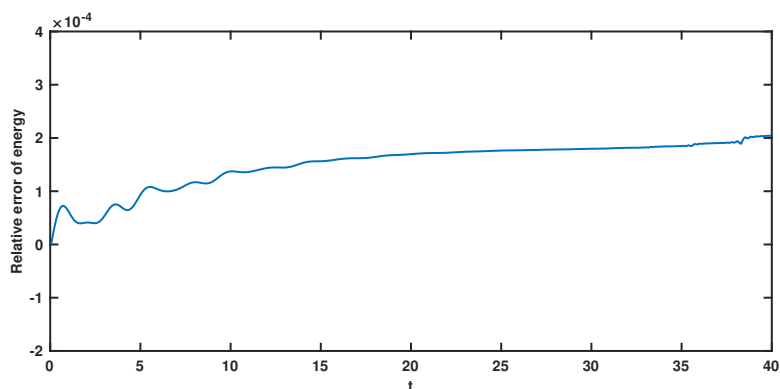


图 5.14 尾隆不稳定性：能量误差随时间的变化。

Diocotron 不稳定性 在本数值算例中，我们考虑等离子体物理中另一个重要的不稳定性现象—Diocotron 不稳定性。Diocotron 不稳定性类似于流体力学中的 Kelvin-Helmholtz 不稳定性。Kelvin-Helmholtz 不稳定性发生在两种流体作平行相对运动时，沿流速方向的小扰动导致运动流体的不稳定性。文献 [24] 构造了渐近保持格式来模拟发生在强磁场 Vlasov–Poisson 模型下的 Diocotron 不稳定性。

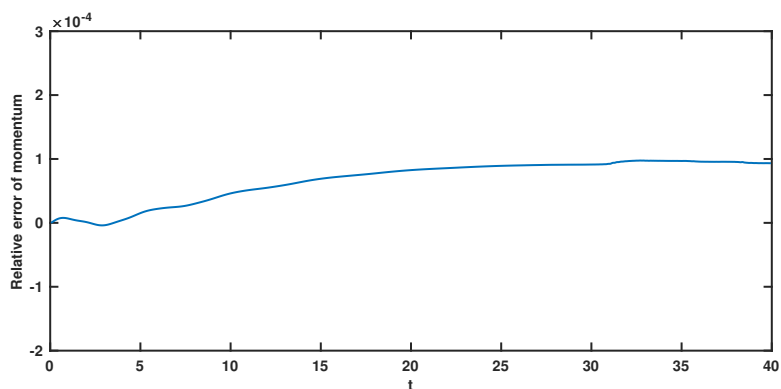


图 5.15 尾隆不稳定性: 动量误差随时间的变化.

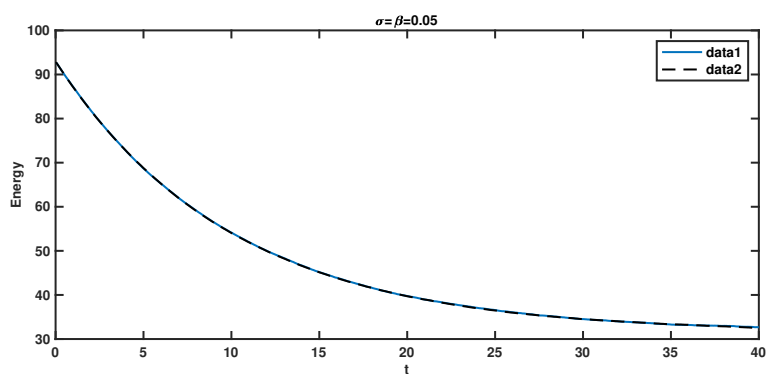


图 5.16 尾隆不稳定性: 能量随时间的变化. 实线: $\Delta x = L/160, \Delta v = 2v_{\max}/128, \Delta t = 0.05$; 虚线: $\Delta x = L/320, \Delta v = 2v_{\max}/256, \Delta t = 0.025$.

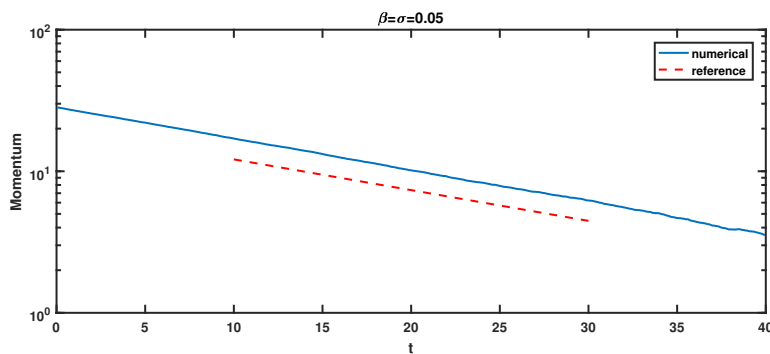


图 5.17 尾隆不稳定性: 动量随时间变化.

在本数值实验中, 我们考虑 2+2-维的 Vlasov-Poisson 系统. 强磁场下的 Vlasov 方程可表示为

$$\varepsilon \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \left(\mathbf{E}(t, \mathbf{x}) + \frac{1}{\varepsilon} \mathbf{v} \times \mathbf{B}_{\text{ext}}(t, \mathbf{x}) \right) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = C(f), \quad (\mathbf{x}, \mathbf{v}) \in \mathbb{R}^4, \quad (5.52)$$

这里 $\mathbf{B}_{\text{ext}} = (0, 0, 1)$. 取初始分布函数为

$$f_0(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = \frac{\rho_0 \mathbf{x}}{2\pi} \exp\left(-\frac{\|\mathbf{v}\|^2}{2}\right)$$

其中初始密度函数为

$$\rho_0(\mathbf{x}) = \begin{cases} (1 + \alpha \cos(l\theta)) \exp(-4(\|\mathbf{x}\| - 6.5)^2), & \text{当 } r_- \leq \|\mathbf{x}\| \leq r_+ \\ 0, & \text{其它} \end{cases}$$

在上式中 $\theta = \text{atan}(y/x)$, $\mathbf{x} = (x, y) \in \mathbb{R}^2$, $r_- = 5$, $r_+ = 8$, $\alpha = 0.2$, l 代表涡旋的数目.

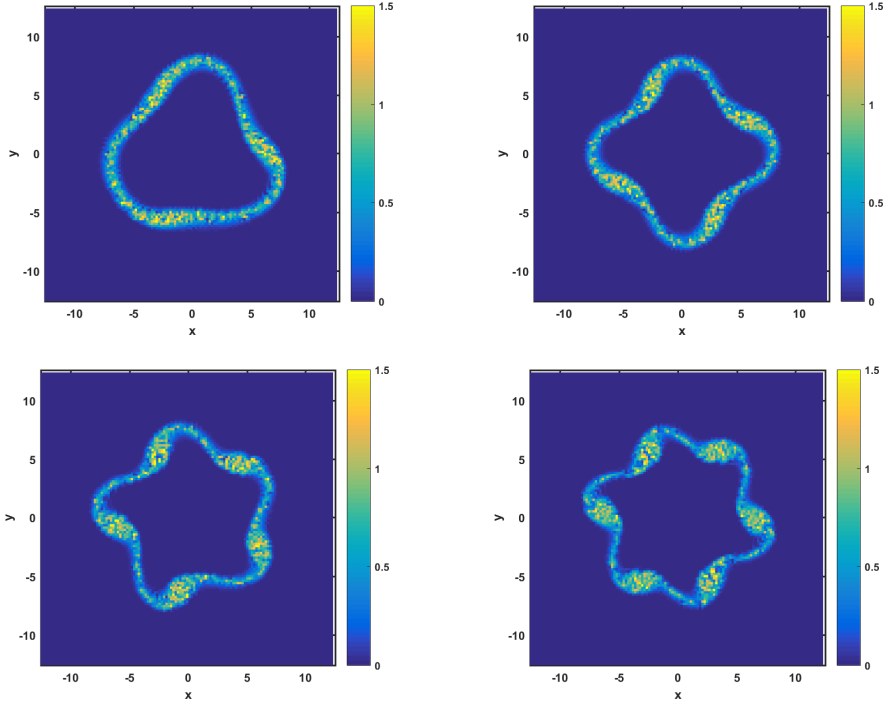


图 5.18 Diocotron 不稳定性: 密度函数 ρ 在 $t = 15$ 时刻的等高线图 ($\sigma = \beta = 0$), 其中四幅图分别为 $l = 3, 4, 5, 6$.

对模型 (5.52) 我们应用随机粒子方法, 相应的随机微分方程为

$$\begin{aligned} \varepsilon d\mathbf{x} &= \mathbf{v} dt, \\ \varepsilon d\mathbf{v} &= \left(\frac{1}{\varepsilon} \mathbf{v} \times \mathbf{B}_{\text{ext}} + \mathbf{E} - \beta \mathbf{v} \right) dt + \sqrt{2\sigma} \circ d\mathbf{W}(t). \end{aligned}$$

注意到该系统的确定部分可以表达为切触哈密顿系统, 我们采用二阶切触算法

切触算法 Ψ^2 (5.45) 来求解, 对于外加磁场 $\frac{1}{\epsilon} \mathbf{v} \times \mathbf{B}_{\text{ext}}$ 部分, 我们采用隐格式来求解.

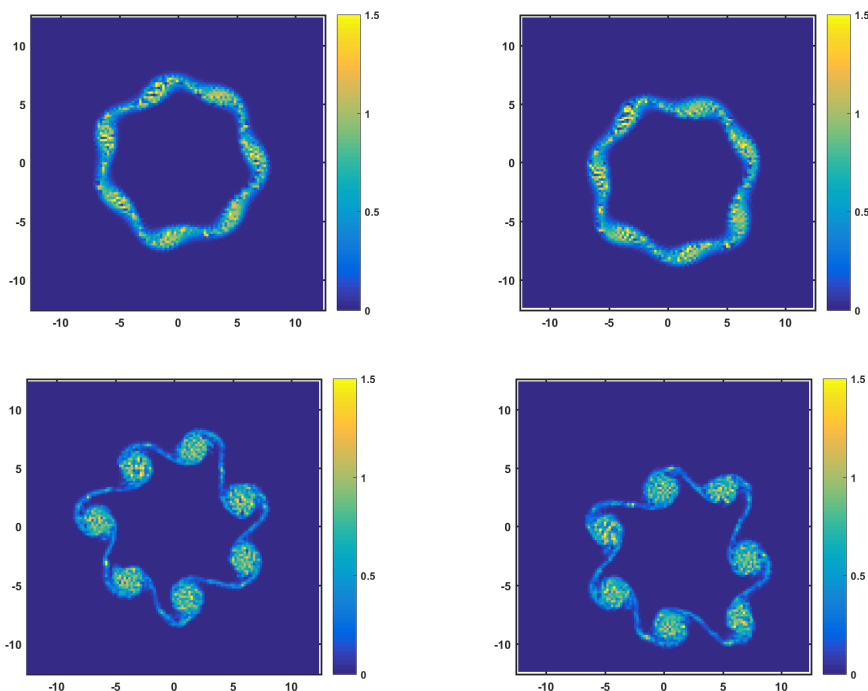


图 5.19 Diocotron 不稳定性: 密度函数 ρ 的等高线图. (a): $t = 10, \beta = \sigma = 0$. (b): $t = 10, \beta = \sigma = 10^{-3}$. (c) $t = 20, \beta = \sigma = 0$. (d): $t = 20, \beta = \sigma = 10^{-3}$.

取 $l = 3, 4, 5, 6$, 在图 5.18 中, 我们展示了密度函数 ρ 在 $t = 15$ 时刻的等高线图. 我们这里考虑了有碰撞和无碰撞两种情形, 对于给定 $l = 7$, 在图 5.19 中, 展示了无碰撞即 $\sigma = 0$ 和 $\sigma = 10^{-3}$ 时密度函数 ρ 的等高线图. 可以观察到两种参数下密度函数 ρ 的结构是相似的, 均有 7 个涡旋结构出现. 但当考虑碰撞效应时, 长时间计算后, 可以观察到粒子向边缘漂移.

5.5 本章小节

本章我们通过研究切触系统的生成函数理论, 对切触系统构造了切触算法. 并应用一阶精度和二阶精度的数值格式于 Vlasov–Poisson–Fokker–Planck 方程的求解. 具体的, 我们给出了两种随机切触算法, 并且验证了收敛阶. 对于 Poisson 方程的求解, 我们采用了谱方法. 最后模拟了一些常见的等离子体不稳定性, 展示了算法长时间的精确性和稳定性.

第6章 总结与展望

在本论文中，我们研究了等离子体物理中的几类数学模型，并基于其结构特点构造并分析了相应的保结构算法。应用所构造的算法模拟了逃逸电子运动、带电粒子在强磁场下的漂移运动以及等离子体中的几类不稳定现象等重要问题。具体地，对单粒子模型通过提出合适的步长函数构造了变步长辛算法，模拟了 10^5 个逃逸电子在 $T = 5 \cdot 10^{10}$ 时间内的运动，有效揭示了逃逸电子的长时间集体行为；此外，对于强磁场模型，利用 **Modulated Fourier** 展开，分析了三类算法在采用远大于回旋周期的步长时在不同时间尺度下的行为。结果表明：滤子变分格式具有一致精确性并在指数时间长内保持能量磁矩误差有界，通过修正初值，可以改善经典的 **Boris** 算法和变分算法在强磁场下的表现；最后，对切触哈密顿系统建立了生成函数理论、构造了切触算法，并结合粒子离散方法应用于 **Vlasov–Poisson–Fokker–Planck** 方程的求解。数值算例验证了算法的收敛阶和遍历性，展示了算法对系统物理量的刻画。

下一步的工作包括：

1. 对于考虑相对论效应下的强磁场单粒子模型进行分析，证明系统的绝热不变量等性质，结合保结构算法和多尺度方法，构造高效且具有长时间稳定性的数值格式；
2. 考虑强磁场下的 **Vlasov–Maxwell (VM)** 方程，对于 **VM** 方程，文献中已经构造了全局保结构算法，但在强磁场作用下，该问题的解具有高振荡行为，我们将试图构造既能保结构，又可以采用大步长（例如，渐近保持格式和一致精确格式等）的数值方法；
3. 对于考虑碰撞效应的动理学方程，可以对其他几类常见的碰撞算子进行研究，分析系统的结构特点，构造保持切触结构或 **Metriplectic** 结构的数值方法。

附录 A

A.1 无量纲化方式

在本文中，我们采用的无量纲化方式如表 A.1 所示.

表 A.1 物理量的无量纲化方式. m_0 为粒子静止质量, e 为元电荷, c 为真空中的光速 B_0 为给定参考磁场强度 ($m_0 = 9.1 \times 10^{-31}$, $e = 1.6 \times 10^{-19}$, $c = 3.0 \times 10^8$).

物理量	记号	非相对论	相对论
		单位	单位
时间	t	$m_0/(eB_0)$	$m_0/(eB_0)$
位置	\mathbf{x}	$m_0/(eB_0)$	$m_0c/(eB_0)$
速度	\mathbf{v}	1	c
动量	\mathbf{p}	m_0	m_0c
典则动量	\mathbf{P}	m_0	m_0c
电场	\mathbf{E}	B_0	B_0c
磁场	\mathbf{B}	B_0	B_0
磁势	\mathbf{A}	m_0/e	m_0c/e
电势	φ	m_0/e	m_0c^2/e
哈密顿量	H	m_0	m_0c^2

A.2 第三类切触系统的生成函数

假设 S^3 有级数展开

$$S^3(v, u, s_0, t) = s_0 + tG_1(v, u, s_0) + t^2G_2(v, u, s_0) + t^3G_3(v, u, s_0) + \dots$$

代入 (5.12) 比较系数有

$$G_1(v, u, s_0) = -H(v, u, s_0),$$

$$G_2(v, u, s_0) = \frac{1}{2} \left(H - u \frac{\partial H}{\partial u} \right) \frac{\partial H}{\partial S},$$

$$G_3(v, u, s_0) = \frac{1}{6} \left(\frac{\partial G_2}{\partial u} \frac{\partial H}{\partial v} - \frac{\partial G_2}{\partial v} \frac{\partial H}{\partial u} - \frac{1}{4} \left(\frac{\partial G_1}{\partial u} \right)^2 \frac{\partial^2 H}{\partial v^2} - \frac{1}{4} \left(\frac{\partial G_1}{\partial v} \right)^2 \frac{\partial^2 H}{\partial u^2} - \left(G_1 - u \frac{\partial G_1}{\partial u} \right)^2 \frac{\partial^2 H}{\partial S^2} \right)$$

其中右端函数在 $\left(\frac{q+q_n}{2}, \frac{\lambda p_n + p_{n+1}}{2}, s_n \right)$ 处取值.

A.3 插值函数

下面是几类常用的插值函数 [124]:

$$\Lambda_2(x) = \begin{cases} 1 - |x|, & 0 \leq |x| \leq 1, \\ 0 & \text{其它.} \end{cases}$$

$$\Lambda_3(x) = \begin{cases} 1 - \frac{5}{2}|x|^2 + \frac{3}{2}|x|^3, & 0 \leq |x| \leq 1, \\ \frac{1}{2}(2 - |x|)^2(1 - |x|), & 1 \leq |x| \leq 2, \\ 0 & \text{其它.} \end{cases}$$

$$\Lambda_4(x) = \begin{cases} 1 - \frac{|x|}{2} - |x|^2 + \frac{|x|^3}{2}, & 0 \leq |x| \leq 1, \\ 1 - \frac{11|x|}{6} + |x|^2 - \frac{|x|^3}{6}, & 1 \leq |x| \leq 2, \\ 0 & \text{其它.} \end{cases}$$

$$\Lambda_6(x) = \begin{cases} 1 - \frac{|x|}{3} - \frac{5|x|^2}{4} + \frac{5|x|^3}{12} + \frac{|x|^4}{4} - \frac{|x|^5}{12}, & 0 \leq |x| \leq 1, \\ 1 - \frac{13|x|}{12} - \frac{5|x|^2}{8} + \frac{25|x|^3}{24} - \frac{3|x|^4}{8} + \frac{|x|^5}{24}, & 1 \leq |x| \leq 2, \\ 1 - \frac{137|x|}{60} + \frac{15|x|^2}{8} - \frac{17|x|^3}{24} + \frac{|x|^4}{8} - \frac{|x|^5}{120}, & 2 \leq |x| \leq 3, \\ 0 & \text{其它.} \end{cases}$$

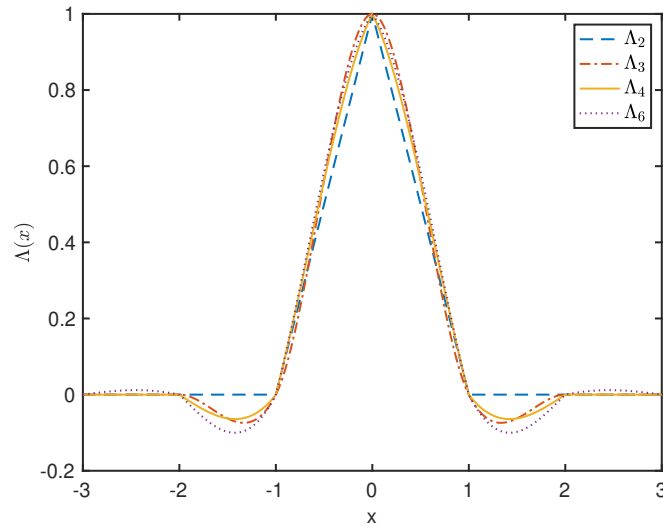


图 A.1 插值核函数.

A.4 随机切触算法

- Ψ_h^1

$$\Psi_h^1 : \begin{cases} \mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + h\mathbf{v}_{n+1} \\ \mathbf{v}_{n+1} = (1 - h\beta)\mathbf{v}_n + h\mathbf{E}(\mathbf{x}_n) + \sqrt{h\sigma}\xi \\ s_{n+1} = s_n + h(\mathbf{v}_{n+1}^2/2 - \varphi(\mathbf{x}_n) - \beta s_n) \end{cases} .$$

- Ψ_h^2

$$\Psi_h^2 : \begin{cases} \tilde{\mathbf{v}}_{n+1} = (1 - h\beta + \frac{h^2}{2}\beta^2)(\mathbf{v}_n + \sqrt{h\sigma}\xi) + (h - \frac{h^2}{2}\beta)\mathbf{E}(\mathbf{x}_n) - \nabla^2\varphi(\mathbf{x}_n)\tilde{\mathbf{v}}_{n+1} \\ \mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + h\tilde{\mathbf{v}}_{n+1} + \frac{h^2}{2}(\beta\tilde{\mathbf{v}}_{n+1} - \mathbf{E}(\mathbf{x}_n)) \\ s_{n+1} = s_n + h(\tilde{\mathbf{v}}_{n+1}^2/2 - \varphi(\mathbf{x}_n) - \beta s_n) + \frac{h^2}{2}(\beta\tilde{\mathbf{v}}_{n+1}^2/2 + \beta\varphi(\mathbf{x}_n) + \beta^2 s_n) \\ \mathbf{v}_{n+1} = \tilde{\mathbf{v}}_{n+1} + \sqrt{h\sigma}\xi \end{cases} .$$

参考文献

- [1] Hirsch M W, Smale S, Devaney R L. Differential equations, dynamical systems, and an introduction to chaos [M]. Academic press, 2012.
- [2] Feng K, Qin M. Hamiltonian algorithms for Hamiltonian dynamical systems [J]. Communication of State Key Laboratories of China, 1991.
- [3] Feng K. Symplectic, contact and volume-preserving algorithms [J]. Proceedings of the First China-Japan Conference on Numerical Mathematics, 1993: 1-28.
- [4] Feng K, Qin M. Symplectic geometric algorithms for Hamiltonian systems [M]. Springer, 2010.
- [5] Hairer E, Lubich C, Wanner G. Springer series in computational mathematics 31: Geometric numerical integration. Structure-preserving algorithms for ordinary differential equations [M]. 2nd ed. Berlin: Springer-Verlag, 2006.
- [6] Feng K, Shang Z. Volume-preserving algorithms for source-free dynamical systems [J]. Numerische Mathematik, 1995, 71(4): 451-463.
- [7] Feng K. Contact algorithms for contact dynamical systems [J]. Journal of Computational Mathematics, 1998: 1-14.
- [8] 冯康, 秦孟兆. 哈密尔顿系统的辛几何算法 [M]. 浙江科学技术出版社, 2003.
- [9] 郑春开. 等离子体物理 [M]. 北京大学出版社, 2009.
- [10] 李定. 等离子体物理学 [M]. 高等教育出版社, 2006.
- [11] Qin H, Guan X. Variational Symplectic integrator for long-time simulations of the guiding-center motion of charged particles in general magnetic fields [J]. Physical Review Letters, 2008, 100(3): 035006.
- [12] Wang Y, Liu J, Qin H. Lorentz covariant canonical symplectic algorithms for dynamics of charged particles [J]. Physics of Plasmas, 2016, 23(12): 122513.
- [13] Zhou Z, He Y, Sun Y, et al. Explicit symplectic methods for solving charged particle trajectories [J]. Physics of Plasmas, 2017, 24(5): 052507.
- [14] Zhang R, Wang Y, He Y, et al. Explicit symplectic algorithms based on generating functions for relativistic charged particle dynamics in time-dependent electromagnetic field [J]. Physics of Plasmas, 2018, 25(2): 022117.
- [15] 周兆琦. 电磁场问题与等离子体物理学中的保结构算法 [D]. 北京: 中国科学院大学, 2018.
- [16] He Y, Sun Y, Liu J, et al. Volume-preserving algorithms for charged particle dynamics [J]. Journal of Computational Physics, 2015, 281: 135-147.

- [17] He Y, Sun Y, Zhang R, et al. High order volume-preserving algorithms for relativistic charged particles in general electromagnetic fields [J]. *Physics of Plasmas*, 2016, 23(9): 092109.
- [18] 何洋. 保结构算法及其在等离子体物理中的应用 [D]. 北京: 中国科学院大学, 2014.
- [19] Knapp C, Kendl A, Koskela A, et al. Splitting methods for time integration of trajectories in combined electric and magnetic fields [J]. *Physical Review E*, 2015, 92(6): 063310.
- [20] He Y, Zhou Z, Sun Y, et al. Explicit K-symplectic algorithms for charged particle dynamics [J]. *Physics Letters A*, 2017, 381(6): 568-573.
- [21] Frénod E, Hirstoaga S A, Lutz M, et al. Long time behaviour of an exponential integrator for a Vlasov–Poisson system with strong magnetic field [J]. *Communications in Computational Physics*, 2015, 18(2): 263-296.
- [22] Frénod E, Hirstoaga S A, Sonnendrücker E. An exponential integrator for a highly oscillatory Vlasov equation [J]. *Discrete & Continuous Dynamical Systems - S*, 2015, 8(1): 169-183.
- [23] Degond P, Filbet F. On the asymptotic limit of the three dimensional Vlasov–Poisson system for large magnetic field: Formal derivation [J]. *Journal of Statistical Physics*, 2016, 165(4): 765-784.
- [24] Filbet F, Rodrigues L M. Asymptotically stable particle-in-cell methods for the Vlasov–Poisson system with a strong external magnetic field [J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 2016, 54(2): 1120-1146.
- [25] Filbet F, Rodrigues L M. Asymptotically preserving particle-in-cell methods for inhomogeneous strongly magnetized plasmas [J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 2017, 55(5): 2416-2443.
- [26] Filbet F, Xiong T, Sonnendrücker E. On the Vlasov–Maxwell system with a strong magnetic field [J]. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 2018, 78(2): 1030-1055.
- [27] Filbet F, Rodrigues L M. Asymptotics of the three-dimensional Vlasov equation in the large magnetic field limit [J]. *Journal de l'École polytechnique—Mathématiques*, 2020, 7: 1009-1067.
- [28] Filbet F, Rodrigues L M, Zakerzadeh H. Convergence analysis of asymptotic preserving schemes for strongly magnetized plasmas [J]. *arXiv preprint arXiv:2003.08104*, 2020.
- [29] Crouseilles N, Lemou M, Méhats F, et al. Uniformly accurate forward semi-Lagrangian methods for highly oscillatory Vlasov–Poisson equations [J]. *Multiscale Modeling & Simulation*, 2017, 15(2): 723-744.
- [30] Crouseilles N, Lemou M, Méhats F, et al. Uniformly accurate particle-in-cell method for the long time solution of the two-dimensional Vlasov–Poisson equation with uniform strong magnetic field [J]. *J. Comput. Phys.*, 2017, 346: 172-190.
- [31] Crouseilles N, Hirstoaga S A, Zhao X. Multiscale particle-in-cell methods and comparisons

- for the long-time two-dimensional Vlasov–Poisson equation with strong magnetic field [J]. *Computer Physics Communications*, 2018, 222: 136-151.
- [32] Chartier P, Crouseilles N, Lemou M, et al. Uniformly accurate methods for Vlasov equations with non-homogeneous strong magnetic field [J]. *Math. Comp.*, 2019, 88(320): 2697-2736.
- [33] Chartier P, Crouseilles N, Lemou M, et al. Uniformly accurate methods for three dimensional Vlasov equations under strong magnetic field with varying direction [J]. *SIAM J. Sci. Comput.*, 2020, 42(2): B520-B547.
- [34] Hairer E, Lubich C. Long-term analysis of a variational integrator for charged-particle dynamics in a strong magnetic field [J]. *Numer. Math.*, 2020, 144(3): 699-728.
- [35] Hairer E, Lubich C, Wang B. A filtered Boris algorithm for charged-particle dynamics in a strong magnetic field [J]. *Numer. Math.*, 2020, 144(4): 787-809.
- [36] Birdsall C K, Langdon A B. *Plasma physics via computer simulation* [M]. Taylor and Francis Group, New York, 2005.
- [37] Dawson J M. Particle simulation of plasmas [J]. *Reviews of modern physics*, 1983, 55(2): 403.
- [38] Kraus M, Kormann K, Morrison P J, et al. GEMPIC: geometric electromagnetic particle-in-cell methods [J]. *Journal of Plasma Physics*, 2017, 83(4).
- [39] 李英哲. 等离子体物理中若干模型的结构与算法 [D]. 北京: 中国科学院大学, 2020.
- [40] Filbet F. Convergence of a finite volume scheme for the Vlasov–Poisson system [J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 2001, 39(4): 1146-1169.
- [41] Einkemmer L, Ostermann A. Convergence analysis of a discontinuous Galerkin/Strang splitting approximation for the Vlasov–Poisson equations [J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 2014, 52(2): 757-778.
- [42] Cheng Y, Gamba I M, Li F, et al. Discontinuous Galerkin methods for the Vlasov–Maxwell equations [J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 2014, 52(2): 1017-1049.
- [43] Manzini G, Delzanno G L, Vencels J, et al. A Legendre–Fourier spectral method with exact conservation laws for the Vlasov–Poisson system [J]. *Journal of Computational Physics*, 2016, 317: 82-107.
- [44] Sonnendrücker E, Roche J, Bertrand P, et al. The semi-Lagrangian method for the numerical resolution of the Vlasov equation [J]. *Journal of Computational Physics*, 1999, 149(2): 201-220.
- [45] Cai Z, Li R, Wang Y. Solving Vlasov equations using NRxx method [J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2013, 35(6): A2807-A2831.
- [46] Di Y, Kou Z, Li R. High order moment closure for Vlasov–Maxwell equations [J]. *Frontiers of Mathematics in China*, 2015, 10(5): 1087-1100.

- [47] Squire J, Qin H, Tang W M. Geometric integration of the Vlasov–Maxwell system with a variational particle-in-cell scheme [J]. *Physics of Plasmas*, 2012, 19(8): 084501.
- [48] Xiao J, Liu J, Qin H, et al. A variational multi-symplectic particle-in-cell algorithm with smoothing functions for the Vlasov–Maxwell system [J]. *Physics of Plasmas*, 2013, 20(10): 102517.
- [49] Xiao J, Qin H, Liu J, et al. Explicit high-order non-canonical symplectic particle-in-cell algorithms for Vlasov–Maxwell systems [J]. *Physics of Plasmas*, 2015, 22(11): 112504.
- [50] Wang C, Lin T, Caflisch R, et al. Particle simulation of Coulomb collisions: Comparing the methods of Takizuka & Abe and Nanbu [J]. *Journal of Computational Physics*, 2008, 227(9): 4308-4329.
- [51] Kraus M. Variational integrators in plasma physics [D]. München, Germany: Technische Universität München, 2013.
- [52] Kraus M, Hirvijoki E. Metriplectic integrators for the Landau collision operator [J]. *Physics of Plasmas*, 2017, 24(10).
- [53] Wu W, Liu J, Qin H. Stochastic simulation of collisions using high-order weak convergence algorithms [J]. arXiv preprint arXiv:1811.05658, 2018.
- [54] Ameres J. Stochastic and spectral particle methods for plasma physics [D]. München, Germany: Technische Universität München, 2018.
- [55] Allen E, Victory H D, Jr. A computational investigation of the random particle method for numerical solution of the kinetic Vlasov–Poisson–Fokker–Planck equations [J]. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 1994, 209(3-4): 318-346.
- [56] Havlak K J, Victory H D, Jr. The numerical analysis of random particle methods applied to Vlasov–Poisson–Fokker–Planck kinetic equations [J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 1996, 33(1): 291-317.
- [57] Schaeffer J. Convergence of a difference scheme for the Vlasov–Poisson–Fokker–Planck system in one dimension [J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 1998, 35(3): 1149-1175.
- [58] Wang Y, Zhang S. Solving Vlasov–Poisson–Fokker–Planck equations using NRxx method [J]. *Communications in Computational Physics*, 2017, 21(3): 782-807.
- [59] John A, Matuszewska A. Convergence analysis of the streamline diffusion and discontinuous Galerkin methods for the Vlasov–Poisson–Fokker–Planck system [J]. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 2005, 21(3): 472-495.
- [60] Jin S, Wang L. An asymptotic preserving scheme for the Vlasov–Poisson–Fokker–Planck system in the high field regime [J]. *Acta Mathematica Scientia*, 2011, 31(6): 2219-2232.
- [61] Jin S, Wang L. Asymptotic-preserving numerical schemes for the semiconductor Boltzmann

- equation efficient in the high field regime [J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2013, 35(3): B799-B819.
- [62] Cheng Y, Rossmanith J A. A class of quadrature-based moment-closure methods with application to the Vlasov–Poisson–Fokker–Planck system in the high-field limit [J]. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2014, 262: 384-398.
- [63] Jackson J D. From Lorenz to Coulomb and other explicit gauge transformations [J]. *American Journal of Physics*, 2002, 70(9): 917-928.
- [64] Guan X, Qin H, Nathaniel J F. Phase-space dynamics of runaway electrons in tokamaks [J]. *Physics of Plasmas*, 2010, 17(9).
- [65] Hairer E, Lubich C. Long-time energy conservation of numerical methods for oscillatory differential equations [J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 2000, 38(2): 414-441.
- [66] Cohen D, Hairer E, Lubich C. Modulated Fourier expansions of highly oscillatory differential equations [J]. *Foundations of Computational Mathematics*, 2003, 3(4): 327-345.
- [67] Hochbruck M, Lubich C. A Gautschi-type method for oscillatory second-order differential equations [J]. *Numerische Mathematik*, 1999, 83(3): 403-426.
- [68] Gautschi W. Numerical integration of ordinary differential equations based on trigonometric polynomials [J]. *Numerische Mathematik*, 1961, 3(1): 381-397.
- [69] Deuffhard P. A study of extrapolation methods based on multistep schemes without parasitic solutions [J]. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik ZAMP*, 1979, 30(2): 177-189.
- [70] García-Archilla B, Sanz-Serna J, Skeel R D. Long-time-step methods for oscillatory differential equations [J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 1998, 20(3): 930-963.
- [71] Lie S. Zur theorie partieller differentialgleichungen erster ordnung; insbesondere über eine classification derselben [J]. *Nachrichten von der Königl. Gesellschaft der Wissenschaften und der Georg-Augusts-Universität zu Göttingen*, 1872, 1872: 473-489.
- [72] Agrachev A A. *Methods of control theory in nonholonomic geometry* [C]//*Proceedings of the International Congress of Mathematicians*. Springer, 1995: 1473-1483.
- [73] Gibbs J W. *Graphical methods in the thermodynamics of fluids* [J]. *The Collected Works of J. Willard Gibbs, Ph. D., LL. D*, 1957: 2.
- [74] Bravetti A, Lopez-Monsalvo C, Nettel F. Contact symmetries and Hamiltonian thermodynamics [J]. *Annals of Physics*, 2015, 361: 377-400.
- [75] Grmela M, Öttinger H C. Dynamics and thermodynamics of complex fluids. I. development of a general formalism [J]. *Physical Review E*, 1997, 56(6): 6620.
- [76] Öttinger H C, Grmela M. Dynamics and thermodynamics of complex fluids. II. illustrations of a general formalism [J]. *Physical Review E*, 1997, 56(6): 6633.

- [77] Joo S H. Contact systems and contact integrators [D]. Massey University, 2003.
- [78] Arnold V I. Geometrical methods in the theory of ordinary differential equations: volume 250 [M]. Springer Science & Business Media, 2012.
- [79] Libermann P, Marle C M. Symplectic geometry and analytical mechanics: volume 35 [M]. Springer Science & Business Media, 2012.
- [80] Calvo M P, Sanz-Serna J. The development of variable-step symplectic integrators, with application to the two-body problem [J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 1993, 14.
- [81] Gladman B, Duncan M, Candy J. Symplectic integrators for long-term integrations in celestial mechanics [J]. *Celestial Mechanics & Dynamical Astronomy*, 1991, 52(3): 221-240.
- [82] Hairer E. Variable time step integration with symplectic methods [J]. *Applied Numerical Mathematics*, 1997, 25: 219-227.
- [83] Reich S. Backward error analysis for numerical integrators [J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 1999, 36(5): 1549-1570.
- [84] Schmitt J, Leok M. Adaptive Hamiltonian variational integrators and symplectic accelerated optimization [J]. arXiv preprint arXiv:1709.01975, 2017.
- [85] Kruskal M. The gyration of a charged particle [J]. *Bangladesh Journal of Scientific & Industrial Research*, 1958, 48(3).
- [86] Kruskal M. Asymptotic theory of Hamiltonian and other systems with all solutions nearly periodic [J]. *Journal of Mathematical Physics*, 1962, 3(4): 806-828.
- [87] Benettin G, Sempio P. Adiabatic invariants and trapping of a point charge in a strong nonuniform magnetic field [J]. *Nonlinearity*, 1994, 7(1): 281-303.
- [88] Liu J, wang Y, Qin H. Collisionless pitch-angle scattering of runaway electrons. [J]. *Nuclear Fusion*, 2016.
- [89] Wang Y, Qin H, Liu J. Multi-scale full-orbit analysis on phase-space behavior of runaway electrons in tokamak fields with synchrotron radiation [J]. *Physics of Plasmas*, 2016, 23(6): 313.
- [90] Liu C, Qin H, Hirvijoki E, et al. Conservative magnetic moment of runaway electrons and collisionless pitch-angle scattering [J]. *Nuclear Fusion*, 2018, 58(10): 106018.
- [91] Huang W, Leimkuhler B. The adaptive verlet method [J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 1997, 18(1): 239-256.
- [92] Kretschmar M. Single particle motion in a Penning trap: description in the classical canonical formalism [J]. *Physica Scripta*, 1992, 46(6): 544-554.
- [93] Rodegheri C C, Blaum K, Kracke H, et al. An experiment for the direct determination of the g-factor of a single proton in a Penning trap [J]. *New Journal of Physics*, 2012, 14(6): 063011.

- [94] Dreicer H. Electron and ion runaway in a fully ionized gas. II [J]. *Physical Review*, 1960, 115(2): 238-249.
- [95] Qin H, Guan X, Tang W M. Variational symplectic algorithm for guiding center dynamics and its application in tokamak geometry [J]. *Physics of Plasmas*, 2009, 16(4): 45-58.
- [96] Liu J, Qin H, Wang Y, et al. Largest particle simulations downgrade the runaway electron risk for ITER [J]. arXiv preprint arXiv:1611.02362, 2016.
- [97] Ricketson L F, Chacón L. An energy-conserving and asymptotic-preserving charged-particle orbit implicit time integrator for arbitrary electromagnetic fields [J]. *J. Comput. Phys.*, 2020: 109639.
- [98] Wang B, Zhao X. Error estimates of some splitting schemes for charged-particle dynamics under strong magnetic field [J]. arXiv preprint arXiv:2005.11192, 2020.
- [99] Brizard A J, Hahm T S. Foundations of nonlinear gyrokinetic theory [J]. *Rev. Modern Phys.*, 2007, 79(2): 421-468.
- [100] Possanner S. Gyrokinetics from variational averaging: existence and error bounds [J]. *J. Math. Phys.*, 2018, 59(8): 082702, 34.
- [101] Boris J P. Relativistic plasma simulation-optimization of a hybrid code [J]. *Proceeding of Fourth Conference on Numerical Simulations of Plasmas*, 1970: 3-67.
- [102] Qin H, Zhang S, Xiao J, et al. Why is Boris algorithm so good? [J]. *Physics of Plasmas*, 2013, 20(8): 084503.1-4.
- [103] Ellison C L, Burby J W, Qin H. Comment on “Symplectic integration of magnetic systems”: A proof that the Boris algorithm is not variational [J]. *J. Comput. Phys.*, 2015, 301: 489-493.
- [104] Hairer E, Lubich C. Energy behaviour of the Boris method for charged-particle dynamics [J]. *BIT*, 2018, 58: 969-979.
- [105] Webb S D. Symplectic integration of magnetic systems [J]. *J. Comput. Phys.*, 2014, 270: 570-576.
- [106] Kruskal M. The gyration of a charged particle [J]. Rept. PM-S-33 (NYO-7903), Princeton University, Project Matterhorn, 1958.
- [107] Northrop T G. *Interscience tracts on physics and astronomy, Vol. 21: The adiabatic motion of charged particles* [M]. Interscience Publishers John Wiley & Sons New York-London-Sydney, 1963.
- [108] Benettin G, Sempio P. Adiabatic invariants and trapping of a point charge in a strong nonuniform magnetic field [J]. *Nonlinearity*, 1994, 7(1): 281.
- [109] Derouillat J, Beck A, Pérez F, et al. Smilei: A collaborative, open-source, multi-purpose particle-in-cell code for plasma simulation [J]. *Computer Physics Commun.*, 2018, 222: 351-373.

- [110] Hairer E, Lubich C. Symmetric multistep methods for charged particle dynamics [J]. *SMAI J. Comput. Math.*, 2017, 3: 205-218.
- [111] Vermeeren M, Bravetti A, Seri M. Contact variational integrators [J]. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 2019, 52(44): 445206.
- [112] Bravetti A, Seri M, Vermeeren M, et al. Numerical integration in celestial mechanics: A case for contact geometry [J]. *Celestial Mechanics & Dynamical Astronomy*, 2020, 132(1).
- [113] Wang B, Miller G H, Colella P. A particle-in-cell method with adaptive phase-space remapping for kinetic plasmas [J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2011, 33(6): 3509-3537.
- [114] Myers A T, Colella P, Van Straalen B. A 4th-order particle-in-cell method with phase-space remapping for the Vlasov–Poisson equation [J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2017, 39(3).
- [115] Wang B, Miller G H, Colella P. A particle-in-cell method with adaptive phase-space remapping for kinetic plasmas [J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2011, 33(6): 3509-3537.
- [116] Myers A, Colella P, Straalen B V. A 4th-order particle-in-cell method with phase-space remapping for the Vlasov–Poisson equation [J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2017, 39(3): B467-B485.
- [117] Kanai E. On the quantization of the dissipative systems [J]. *Progress of Theoretical Physics*, 1948, 3(4): 440-442.
- [118] Schuch D. Dynamical invariants in systems with and without broken time-reversal symmetry [C]//AIP Conference Proceedings: volume 1334. American Institute of Physics, 2011: 291-340.
- [119] Greenberger D M. A critique of the major approaches to damping in quantum theory [J]. *Journal of Mathematical Physics*, 1979, 20(5): 762-770.
- [120] Milstein G N. Numerical integration of stochastic differential equations: volume 313 [M]. Springer Science & Business Media, 1994.
- [121] Bourabee N, Owhadi H. Long-run accuracy of variational integrators in the stochastic context [J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 2010, 48(1): 278-297.
- [122] Shoucri M. Numerical simulation of the bump-on-tail instability [J]. *Numerical Simulations, Applications, Examples, and Theory*, 2011: 3-38.
- [123] Crouseilles N, Einkemmer L, Massot J. Exponential methods for solving hyperbolic problems with application to collisionless kinetic equations [J]. *Journal of Computational Physics*, 2020, 420: 109688.
- [124] Lo B, Minden V, Colella P. A real-space Green’s function method for the numerical solution of Maxwell’s equations [J]. *Communications in Applied Mathematics and Computational Science*, 2016, 11(2): 143-170.

作者简历及攻读学位期间发表的学术论文与研究成果

作者简历

2012年9月—2016年7月，在西北工业大学获得理学学士学位。

2016年9月—2021年7月，在中科院数学与系统科学研究院攻读博士学位。

2020年2月—2021年1月，在图宾根大学访问。

已完成文章目录:

- Shi Y, Sun Y, He Y, et al. Symplectic integrators with adaptive time step applied to runaway electron dynamics[J]. Numerical Algorithms, 2019, 81(4): 1295-1309.
- Shi Y, Sun Y, Wang Y, et al. Study of adaptive symplectic methods for simulating charged particle dynamics[J]. Journal of Computational Dynamics, 2019, 6(2): 429.
- Hairer E, Lubich C, Shi Y. Large-stepsize integrators for charged-particle dynamics over multiple time scales[J]. arXiv preprint arXiv:2101.10403, 2021.
- Shi Y, Sun Y. Contact-PIC numerical methods for simulating Vlasov–Poisson–Fokker–Planck problem, submitted.
- Shi Y, Sun Y. Generating-function based methods for contact Hamiltonian systems, in preparation.

致 谢

首先我要感谢我的导师孙雅娟研究员，从毕业论文的选题、具体分析、编程实现到论文的最终完成，孙老师给了我很多指导。孙老师的谆谆教诲和严格要求使我的毕业论文能有条不紊的进行。感谢孙老师在我博士期间多次提供参加会议和学术交流的机会，与同行专家的讨论大大开阔了我的视野。同时，孙老师在学术上严谨认真的态度也潜移默化的影响着我，让我明白研究一个问题一定要想得够深，做得够细，这样才有可能进步和发展。衷心感谢孙老师这几年的悉心指导！

感谢国科大资助一年的出国访问机会，让我有机会与 Christian Lubich 教授和 Ernst Hairer 教授交流合作。感谢 Hairer 教授和 Lubich 教授富有激情的讨论，在你们身上我看到了对待科研的热情与严谨，也激励我不断向你们学习！感谢 Lubich 教授对我在学习上的指导以及在生活上的关怀，感谢 Gianluca Ceruti, Dominik Edlmann, Balázs Kovács, Jörg Nick, Dominik Sulz 一年的陪伴，和你们一起听报告、午饭后闲聊、烧烤、聚餐... 都成为我在图宾根最美好的回忆！

感谢洪佳林老师、尚在久老师、唐贻发老师，无论是参加你们的讨论班还是阅读你们的工作，都让我受益匪浅！感谢秦宏老师、刘健老师、肖建元师兄、王雨雷师兄、郑江山师兄，是你们让我不断了解等离子体领域的知识，每次问你们问题，总能得到很大的帮助！感谢 Jitse Niesen 博士在科研上的讨论和生活上的关心。感谢课题组的师兄师姐唐文生、何洋、周兆琦、李英哲、屠冉以及师弟师妹王欣、顾安教、刘章、沈亦涵对我的帮助和照顾，你们在讨论班上的出色讲解使我学习到了很多知识，给了我前进的动力。

感谢我的同窗陈雅丹、党海坤、闫晓芳、苑秋月，约饭群成为我每天使用最多的微信群，是你们让我的博士生活变得丰富多彩。还有我研一的所有其它室友，与你们一起玩狼人杀、阿瓦隆的晚上是我最开心的时刻。感谢我的室友徐汾，以及短暂的几个月相处的室友兰慧师姐和姜林硕师妹，和你们的睡前卧谈会永远趣味横生。感谢金鹏展、金典聪、姚璨、杨斌，每次有专业知识或者编程上的问题向你们请教，总能得到认真的解答。感谢国科大 18 级微积分 B 班的 25 位同学，人生中第一次做助教就遇到了可爱的你们，你们带给我难忘又美好的回忆，

祝愿你们前程似锦！感谢数学院和计算数学所的所有老师和工作人员。

感谢家人一直以来给予的关心和支持！尤其感谢父母这么多年的默默付出，你们的勤劳和乐观是我永远学习的榜样！感谢哥哥从小的陪伴，与你一起写作业的情景仿佛还在昨天。感谢嫂子对我的关心与开导，让我学会更加平静地看待问题。感谢周为哥哥一直以来的帮助，在我大三时候鼓励我参加中科院的招生。感谢小侄子带给我的欢乐，愿你以后的生活永远多姿多彩！

最后，特别感谢在百忙之中抽出宝贵时间审阅论文、参加答辩的各位老师！