

ISSDE: 基于第一性原理随机微分方程的碰撞 等离子体隐式模拟

郑芝峰¹, 王雨雷^{1,*}, 刘 健¹, 秦 宏^{1,2}

(1. 中国科学技术大学近代物理系和核科学与技术系, 合肥 安徽 230026;

2. Plasma Physics Laboratory, Princeton University, Princeton, NJ 08543, USA)

摘 要: 开发一种适用于求解含库仑碰撞等离子体随机微分方程(SDE)的第一性原理隐式模拟程序——Implicit Stratonovich Stochastic Differential Equations (ISSDE). 该程序基于 Fokker-Planck(FP)方程与 Stratonovich SDE 的等价性理论, 通过精确求解 Stratonovich SDE 达到对 FP 方程的高效第一性原理计算的目标. ISSDE 采用隐式格式保证求解的数值稳定性, 同时可以保证粒子碰撞过程的能量守恒. ISSDE 基于 C++ 语言开发, 具有标准接口和灵活的可扩展模组. 通过模拟电子束在非磁化和磁化致密等离子体中的慢化过程验证 ISSDE 的正确性, 并展示该程序在碰撞等离子体模拟中的应用.

关键词: Fokker-Planck 方程; Stratonovich SDE; 隐式; 慢化过程

中图分类号: O53

文献标志码: A

DOI: 10.19596/j.cnki.1001-246x.7843

0 引言

随着计算机技术的发展, 大规模第一性原理模拟在科学和工程研究领域中的地位愈发重要, 尤其是对于非线性和多尺度过程的求解. 等离子体系统是包含大量带电粒子和电磁场的复杂物理系统, 是典型的多体、多尺度系统. 一般而言, 直接通过解析理论进行等离子体研究是不现实的, 往往都需要借助数值模拟. 等离子体系统的模拟包含两个主要内容, 一是对于无碰撞等离子体系统(Vlasov-Maxwell 系统)的模拟, 二是对于含碰撞等离子体系统的模拟. 对于无碰撞等离子体系统, 已经有很多成熟的计算程序^[1-5]. 近几年, 一系列先进等离子体保结构几何算法得到充分的研究, 该类算法可以保证数值计算的长期稳定性, 比如, 带电粒子导心系统的变分辛算法^[6]、经典带电粒子的保体积算法^[7-9]等. 对于含碰撞的等离子体, 其第一性原理模型是 FP 方程, 已经有很多相关的计算程序用于研究激光和致密等离子体的相互作用、电子束能量沉积^[10]、激波、热电子在致密等离子体中的输运^[11]、电子回旋波加热^[12]等. 但是, 等离子体的 FP 方程的模拟方法还有很大的研究空间. 首先, 基于传统方法一般需要通过回旋近似或降维等方式求解简化第一性的 FP 模型^[13-15], 这样损失了原系统的信息; 其次, 由于 FP 碰撞算子的数学理论非常复杂, 也难以从基本理论出发研究高稳定、高保真的几何算法; 最后, FP 方程是 6 维的偏微分方程, 求解需要较大的计算量, 算法实现也比较困难. 寻找高效、高精度的第一性原理 FP 方程数值方法, 还有很多工作有待研究.

SDE 理论在很多科研领域, 如生物、化学、流行病学、力学、微电子学、经济学等, 扮演着重要的角色. 在过去几十年里, 除了数学领域, 在工程和物理中的科研人员也对 SDE 数值方法越发重视. 在物理研究中, SDE 的应用范围覆盖了分子动力学、神经动力学、天体动力学等等. SDE 理论一个重要研究内容就是 SDE 与偏微分 FP 方程的关联性. 利用 SDE 与 FP 方程的随机等价性, 可以处理含碰撞的等离子体问题. Cadjan 等^[16]采用

收稿日期: 2018-02-08; 修回日期: 2018-06-25

基金项目: 国家自然科学基金(NSFC-11575185, 11575186)、国家磁约束聚变能源研究项目(2015GB111003)、国家重点研发计划(2016YFA0400600, 2016YFA0400601, 2016YFA0400602)、GeoAlgorithmic Plasma Simulator(GAPS)、中科院前沿科学重点研究项目(QYZDB-SSW-SYS004)资助项目

作者简介: 郑芝峰(1991-)男, 硕士研究生, 从事等离子体先进几何算法模拟研究, E-mail: Zyifeng@mail.ustc.edu.cn

* 通讯作者: 王雨雷, E-mail: wyulei@ustc.edu.cn

含有库仑碰撞的 Langevin 方法研究激光脉冲入射到致密等离子体时的吸收系数; Sherlock 等^[17]采用库仑碰撞 Monte-Carlo 方法研究电子束入射到等离子体中的慢化行为; Rosin 等^[18]采用 Itô SDE 进行 Monte-Carlo 模拟研究; Zhang 等^[19]采用了一种向后 Monte-Carlo 的方法来计算逃逸电子的动力学描述; Stevens 等^[20]数值上描述了慢化过程中能量的变化. 将 FP 偏微分方程转为类似于常微分方程(ODE)的 SDE 有很大的优势, 首先, 这样处理可以在保证物理信息不丢失的前提下, 简化方程求解; 其次, 采用 SDE 对动力学系统进行描述, 还可以得到粒子演化的轨迹信息; 最后, ODE 的保几何结构算法已经比较成熟, 基于该思想可以利用几何算法理论获得具有更加优良稳定性的 SDE 数值方法.

基于 FP 方程与 Stratonovich SDE 的随机等价性开发了适用于求解含库仑碰撞等离子体 SDE 的第一性原理模拟程序 ISSDE. ISSDE 基于 C++ 语言开发, 其架构设计考虑了标准 IO, 将程序的各个部分进行模块化处理, 使程序具有易扩展的特点, 也方便加入保结构算法模组. ISSDE 包括以下优势: 1) 将 FP 方程对分布函数的演化转化为 Stratonovich SDE 对粒子动力学轨迹的演化, 这样做可以对粒子动力学进行第一性的描述, 可以展示粒子轨迹演化的随机性; 2) 对 Stratonovich SDE 采用隐式中点法计算, 在保证 ISSDE 稳定性前提下, 还可以保证粒子演化过程的动能守恒; 3) 从理论层面可以知道, ISSDE 程序所得结果的系综平均与 FP 方程所给结果是一致的, 而且相比较动力学高维偏微分方程模型, ISSDE 更加高效; 4) ISSDE 模拟程序可扩展模组可用于研究几何算法与碰撞算法的组合效果, 推动几何算法在碰撞过程中的应用.

将 ISSDE 应用于求解电子束在非磁化和磁化致密等离子体中的慢化过程. 将等离子体加热到热核温度有多种可以探索的办法, 其中采用高能电子束入射到致密等离子体进行加热就是一种可能的机制. 因此, 探明入射电子束在等离子体中的慢化过程以及慢化过程中等离子体的集体效应是有意义的. 在这方面, 已经有一定的研究, 比如 Rudakov 等^[21]认为致密等离子体束的慢化是诱发 Cerenkov 效应的结果; Husseniny 等^[22]计算了单能粒子束入射至任意分布等离子体中时总的有效截面. 不仅是热核反应, 在聚变的链式反应中, 慢化过程也是十分重要的, 比如 Dar 等^[23]采用随机相位近似的方法计算了离子在简并电子气中的慢化, 并指出了计算结果和链式反应之间的关联. 通过 ISSDE 准确模拟了单能电子束入射至非磁化和磁化等离子体中的慢化过程. ISSDE 模拟的采样点系综平均的演化行为与 FP 方程描述的分布函数演化行为一致. 还利用 ISSDE 计算了入射电子束在慢化过程中各个方向的能量变化, 展示了在采用 ISSDE 计算慢化过程中入射电子束的动能守恒性质, 因此, ISSDE 在碰撞等离子体模拟中的应用得到了保证.

1 FP 方程与 Stratonovich SDE 的随机等价性

ISSDE 模拟程序的目的是求解 Stratonovich SDE, 其理论基础为 FP 方程与 SDE 的随机等价性. 根据对随机变量积分定义的不同, SDE 具有两种不同的表示, 分别为 Itô SDE 和 Stratonovich SDE. 这两种表示虽然存在等价关系, 但是两者在求解过程中必须采用对应的积分形式, 这种积分形式是与黎曼积分不同的. 因此在数值求解过程中, 需要注意区分采用的是哪一种形式的积分. 研究物理问题更倾向于采用 Stratonovich SDE, 因为 Stratonovich SDE 积分能够和黎曼积分一样保持链式法则^[24]. 下面分别展示 FP 方程与 Itô SDE 的随机等价性, Itô SDE 和 Stratonovich SDE 的等价关系, 以此得到 FP 方程与 Stratonovich SDE 的随机等价性. 考虑库仑碰撞下的 FP 方程, 得到与 Rosenbluth MacDonal Judd (RMJ) 势表示下的 FP 方程具有随机等价性的 Stratonovich SDE.

1.1 FP 方程和 Itô SDE 的随机等价性

FP 方程的碰撞积分和 Itô SDE 为

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c = \frac{\partial}{\partial v_i} \left[-A_i(\mathbf{v})f + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial v_k} B_{ik}(\mathbf{v})f \right], \quad (1)$$

$$dv_i = F_i(\mathbf{v}) dt + D_{ik}(\mathbf{v}) dW_k, \quad (2)$$

式中 $A_i(\mathbf{v})$ 表示摩擦系数的第 i 个分量, B_{ik} 表示扩散系数的第 ik 个分量, f 表示粒子的分布函数, $F_i(\mathbf{v})$, $D_{ik}(\mathbf{v})$ 是确定的函数, W_k 表示 Wiener 过程. FP 方程研究的对象是整个系综粒子的分布函数, 而 Itô SDE 研究的对象是粒子系综中单个粒子的轨迹. 当 $F_i(\mathbf{v})$, $D_{ik}(\mathbf{v})$ 和 $A_i(\mathbf{v})$, $B_{ik}(\mathbf{v})$ 满足关系

$$\begin{cases} F_i(\mathbf{v}) = A_i(\mathbf{v}) , \\ D_{ik}(\mathbf{v}) = B_{ik}^{1/2}(\mathbf{v}) \end{cases} \quad (3)$$

时,FP 方程的解与 Itô SDE 的弱解是随机等价的.Itô SDE 的弱解是指在合适的概率空间, Wiener 过程下,当粒子系综服从某一初始分布函数时,构成整个系综中每一个粒子的坐标和速度的微观分布并不唯一,而一旦确定初始时刻粒子系中每一个粒子的坐标和速度,在相同的 Wiener 过程下,每一时刻每个粒子的坐标和速度都是唯一的,这些作为 Itô SDE 的强解,由这些强解构成分布也作为 Itô SDE 的解,对服从同一分布函数的不同微观分布,在相同的 Wiener 过程下,每一时刻的强解不同,而由这些强解构成的分布则是相同的,这里由强解所构成的分布就是 Itô SDE 的弱解.当只关心分布函数的演化时,FP 方程的解与 Itô SDE 的弱解是随机等价的^[25].

1.2 Itô SDE 和 Stratonovich SDE 的随机等价性

SDE 有多种表示,主要的两种为 Itô SDE 和 Stratonovich SDE,其不同主要体现在对随机变量积分定义的不同.但是,这两种形式本质上是等价的.下面先给出 Itô 和 Stratonovich 积分的定义,再阐述 Itô SDE 和 Stratonovich SDE 的等价关系.Itô 积分的定义为

$$\int_a^b f(t, W_t) dW_t = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^n f(t_{k+1}, W_{k+1}) (W_{k+1} - W_k). \quad (4)$$

Stratonovich 积分的定义为

$$\int_a^b f(t, W_t) \circ dW_t = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^n f(\xi_{k+1}, W(\xi_{k+1})) (W_{k+1} - W_k), \quad \xi_{k+1} = (t_{k+1} + t_k) / 2, \quad (5)$$

式中用“ \circ ”来区分 Itô 积分和 Stratonovich 积分.对任意一个 SDE

$$dX_t = \mu(X_t, t) dt + \sigma(X_t, t) dW_t \quad (6)$$

的解为

$$X_{t_1} = X_{t_0} + \int_{t_0}^{t_1} \mu(X_t, t) dt + \int_{t_0}^{t_1} \sigma(X_t, t) dW_t, \quad t_1 > t_0. \quad (7)$$

如果其中的积分是用 Itô 积分来表示的,则此 SDE 称为 Itô SDE;如果是用 Stratonovich 积分来表示的,则此 SDE 称为 Stratonovich SDE.

如果函数 $f(t, W_t)$ 满足条件^[25]

$$\int_{t_0}^{t_1} E [f(t, W_t)]^2 dt < \infty, \quad \int_{t_0}^{t_1} E \left[\frac{\partial f(t, W_t)}{\partial W_t} \right]^2 dt < \infty, \quad (8)$$

Stratonovich 积分的值是 Itô 积分和一个确定漂移项的和,即

$$\int_{t_0}^{t_1} f(t, W_t) \circ dW_t = \int_{t_0}^{t_1} f(t, W_t) dW_t + \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_1} \frac{\partial f(t, W_t)}{\partial W_t} dt, \quad (9)$$

式中左边为 Stratonovich 积分,右边第一项为 Itô 积分,右边第二项为黎曼积分.式(8)的条件为式(9)右边两项的收敛性条件.Itô SDE 所描述的随机过程可以通过如下 Stratonovich SDE 来描述

$$dX_t = \left(\mu(X_t, t) - \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma(X_t, t)}{\partial X_t} \sigma(X_t, t) \right) + \sigma(X_t, t) \circ dW_t, \quad (10)$$

因此,如果

$$G_i = F_i - \frac{1}{2} D_{jk} \frac{\partial D_{ik}}{\partial v_j}, \quad D = B^{1/2}, \quad (11)$$

那么 Stratonovich SDE

$$dv_i = G_i(\mathbf{v}) dt + D_{ik}(\mathbf{v}) \circ dW_k \quad (12)$$

与方程(2)是等价的^[16],其中 $B = \|B_{ik}\|$, $D = \|D_{ik}\|$ 是对称非负定矩阵.

1.3 等价于 FP 方程的 Stratonovich SDE 的具体表达式

下面得到等价于 RMJ 势表示的 FP 方程的 Stratonovich SDE 的具体表达式, RMJ 势表示的 FP 方程的摩

擦系数 A 和扩散系数 B 为^[16, 26-27]

$$A = \Gamma_a \frac{\partial \mathcal{H}_a}{\partial v_a}, \quad (13)$$

$$B = \Gamma_a \frac{\partial^2 \mathcal{G}_a}{\partial v_a \partial v_a}, \quad (14)$$

式中 $\mathcal{H}_a, \mathcal{G}_a$ 为 RMJ 势函数

$$\mathcal{H}_a = \sum_b \frac{m_a + m_b}{m_b} \int dv_b f_b(\mathbf{v}_b) \frac{1}{v}, \quad (15)$$

$$\mathcal{G}_a = \sum_b \int dv_b v f_b(\mathbf{v}_b), \quad (16)$$

$$\Gamma_a = \frac{z_a^2 z_b^2 e^4}{4\pi \epsilon_0^2 m_a^2} \ln \Lambda. \quad (17)$$

A, B 的分量形式为

$$A_i = -\frac{z_a^2 z_b^2 \ln \Lambda}{4\pi n_b} \frac{n_b^2 e^4}{m_a^2 \epsilon_0^2} \frac{m_a v_{ai}}{m_r v^3} = -\beta \frac{m_a v_{ai}}{m_r v^3}, \quad (18)$$

$$B_{ik} = \frac{z_a^2 z_b^2 \ln \Lambda}{4\pi n_b} \frac{n_b^2 e^4}{m_a^2 \epsilon_0^2} \frac{1}{v} \left(\delta_{ik} - \frac{v_{ai} v_{ak}}{v^2} \right) = \beta \frac{v^2 \delta_{ik} - v_{ai} v_{ak}}{v^3}, \quad (19)$$

式中

$$\beta = \frac{z_a^2 z_b^2 \ln \Lambda}{4\pi n_b} \frac{n_b^2 e^4}{m_a^2 \epsilon_0^2}, \quad m_r = \frac{m_a m_b}{m_a + m_b}, \quad (20)$$

m_a, m_b 为入射粒子 a 、背景粒子 b 的质量, m_r 为粒子 a 和粒子 b 的折合质量, z_a, z_b 为 a, b 粒子的核电荷数, n_b 为 b 粒子的粒子数密度, $\ln \Lambda$ 表示库仑对数, $v = |\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b|$ 为入射粒子 a 和背景粒子 b 的相对速度. 将方程 (18)、(19) 代入式(11) 得

$$G_i = -\frac{m_a}{m_b} \beta \frac{v_{ai}}{v^3}, \quad (21)$$

$$D_{ik} = \sqrt{\frac{\beta}{v}} \left(\delta_{ik} - \frac{v_{ai} v_{ak}}{v^2} \right). \quad (22)$$

将上式代入 Stratonovich SDE 得

$$dv_{ai} = -\frac{m_a}{m_b} \beta \frac{v_{ai}}{v^3} - \sqrt{\frac{\beta}{v}} \left(\delta_{ik} - \frac{v_{ai} v_{ak}}{v^2} \right) \circ dW_k, \quad (23)$$

即有

$$d\mathbf{v}_a = -\frac{m_a}{m_b} \beta \frac{\mathbf{v}_a}{v^3} dt - \Omega(v) \mathbf{v}_a \times (\mathbf{v}_a \times d\mathbf{W}), \quad (24)$$

扩展到外场情况, 有

$$d\mathbf{v}_a = -\frac{m_a}{m_b} \beta \frac{\mathbf{v}_a}{v^3} dt - \Omega(v) \mathbf{v}_a \times (\mathbf{v}_a \times d\mathbf{W}) + \frac{F_L dt}{m_a}, \quad (25)$$

式中 F_L 为洛伦兹力, $\Omega(v) = \sqrt{\beta/|v|^5}$.

2 ISSDE 算法格式与程序设计

得到 Stratonovich SDE 的具体表达式后, 根据 Stratonovich 积分定义对 Stratonovich SDE 离散求解, 便可以构造出包含等离子体库仑碰撞的第一性原理模拟程序 ISSDE. 方程(24)、(25) 为一般的试探粒子在背景等离子体中碰撞的 Stratonovich SDE, 为了简化数值计算, 讨论 Lorentzian 等离子体中的情况, 其它情况也可以进行推广. 对于 Lorentzian 等离子体, 即电子与相对冷的离子的碰撞占主要成分时, 可以将电子和电子的碰撞忽

略, 因此这里的折合质量为电子和离子的折合质量. 又因为

$$m_r = \frac{m_a m_b}{m_a + m_b} = \frac{m_e m_i}{m_e + m_i}, \quad m_e \ll m_i, \quad (26)$$

因此

$$m_r \approx m_e, \quad m_e/m_r \approx 1. \quad (27)$$

此时 FP 方程系数有

$$A_i = -\beta \frac{v_i}{v^3}, \quad B_{ik} = \beta \frac{v^2 \delta_{ik} - v_i v_k}{v^3}. \quad (28)$$

Stratonovich SDE 的系数为

$$G_i = 0, \quad D_{ik} = \sqrt{\frac{\beta}{v}} \left(\delta_{ik} - \frac{v_i v_k}{v^2} \right), \quad (29)$$

带入 Stratonovich SDE 方程, 则有

$$dv = -\Omega(v) \mathbf{v} \times (\mathbf{v} \times d\mathbf{W}), \quad (30)$$

扩展到有外场情况, 有

$$d\mathbf{v} = -\Omega(v) \mathbf{v} \times (\mathbf{v} \times d\mathbf{W}) + \frac{F_L dt}{m_a}, \quad (31)$$

2.1 Stratonovich SDE 的离散求解

对 Stratonovich SDE 进行离散求解, 考虑非磁化情况下需要数值求解的方程

$$\begin{cases} d\mathbf{v} = -\Omega(v) \mathbf{v} \times (\mathbf{v} \times d\mathbf{W}), \\ d\mathbf{x} = \mathbf{v} dt, \end{cases} \quad (32)$$

根据 Stratonovich SDE 的定义进行离散得

$$\begin{cases} \mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^n - \Omega \left(\frac{v^{n+1} + v^n}{2} \right) \frac{\mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{v}^n}{2} \times \left[\frac{\mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{v}^n}{2} \times (\mathbf{W}^{n+1} - \mathbf{W}^n) \right], \\ \mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{x}^n + \frac{\mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{v}^n}{2} dt, \end{cases} \quad (33)$$

式中上标表示时间步, 这个方程为隐格式, 采用 Newton-Raphason 方法迭代求解. 令目标函数为

$$g(\mathbf{v}^{n+1}) = -\mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{v}^n - \Omega \left(\frac{v^{n+1} + v^n}{2} \right) \frac{\mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{v}^n}{2} \times \left[\frac{\mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{v}^n}{2} \times (\mathbf{W}^{n+1} - \mathbf{W}^n) \right], \quad (34)$$

得目标函数 $g(\mathbf{v}^{n+1})$ 对各个分量的 Jacobi 矩阵

$$\mathbf{J} = \left[\frac{\partial g(\mathbf{v}^{n+1})}{\partial v_i^{n+1}} \right], \quad i = x, y, z. \quad (35)$$

令 $\mathbf{J}^- = \mathbf{J}^{-1}$, 给定初值 $\mathbf{v}^0 = (v_x^0, v_y^0, v_z^0)$, 根据迭代式^[28-30]

$$\mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^n - \mathbf{J}^- g(\mathbf{v}^n), \quad (36)$$

来得到 $(v_x^{n+1}, v_y^{n+1}, v_z^{n+1})$, 反复迭代, 直到误差小于给定精度. 由此得到每一步 Stratonovich SDE 的解.

2.2 ISSDE 模拟程序的程序设计

ISSDE 模拟程序是采用 C++ 实现并且可以直接使用到类 Unix 的操作系统. 对于非类 Unix 系统, 用户可以通过类 Unix 兼容层来构建 ISSDE, 比如 Cygwin 和 MSYS. ISSDE 由 I/O 模块, 初始化模块, 推粒子模块, 并行模块, 场配置模块, 外力场模块以及其它可扩展模块构成. I/O 模块从 Lua^[31] 和 HDF5^[32] 程序调用库函数. 输入文件采用 Lua 文件脚本, 这样可以方便用户设置参数和物理问题, 提高程序的编译效率. 输出数据采用 HDF5 格式记录和存储, 主要基于 HDF5 格式的如下优势: 首先 HDF5 格式采用层次式的逻辑结构、B 树物理存储方式; 其次 HDF5 格式具有面向对象的特性, 对数据类型的广泛支持; 最后它具有自我表述以及内容与表达分离的特点. 初始化模块提供了一些静态采样的方法. 推粒子模块将第 3 节中给定的算法进行运用, 并且提供其它类型的推粒子函数, 比如无碰撞的保体积算法, Runge-Kutta 算法等等. 并行模块采用调用 OPENMPI, 可以将多个粒子的采样并行处理, 加快程序计算. 场配置和外力场配置模块包括多种位形的电磁

场和外场,例如辐射场、重力场等.可扩展模型是采用 Bash 语言书写的脚本模块,可以增强 ISSDE 模拟程序的可扩展性.

2.3 ISSDE 程序流程图

如图 1 为 ISSDE 程序的流程图,并行程序运行过程中将分为多个线程同时运行,每一个线程都为单个粒子的演化.在 I/O 设置中分为 Lua 文件的输入和 HDF5 文件的输出.Lua 文件中包含程序运行的基本参数,背景等离子体基本物理参数,各种位形外场的选择开关,以及带电粒子基本参数等.HDF5 文件中结构化存储了每一个粒子每一时刻在相空间的坐标和速度信息.粒子受到碰撞作用的信息包含在 Wiener 过程中,可以根据 Wiener 过程的定义得到 Wiener 过程的每一时刻的值 W_t . Wiener 过程为一个随机过程,其初值 $W_0 = 0$,其增量为随机变量,并服从方差为 dt 均值为 0 的正态分布.利用定义可以根据所需计算的步数和演化的时间步长先单独生成 Wiener 过程每一时刻的值,这些值将带入到主循环的 Newton-Raphason 迭代循环中.初始参数设置目的在于初始化带电粒子参数,如粒子的初始位置分布、初始速度分布等,为粒子演化循环做准备.主循环为带电粒子在外场和由碰撞而产生随机力作用下的演化,并对每一时刻的数据进行存储.主循环中求解 Stratonovich SDE 的迭代过程由图 1(b) 所示.

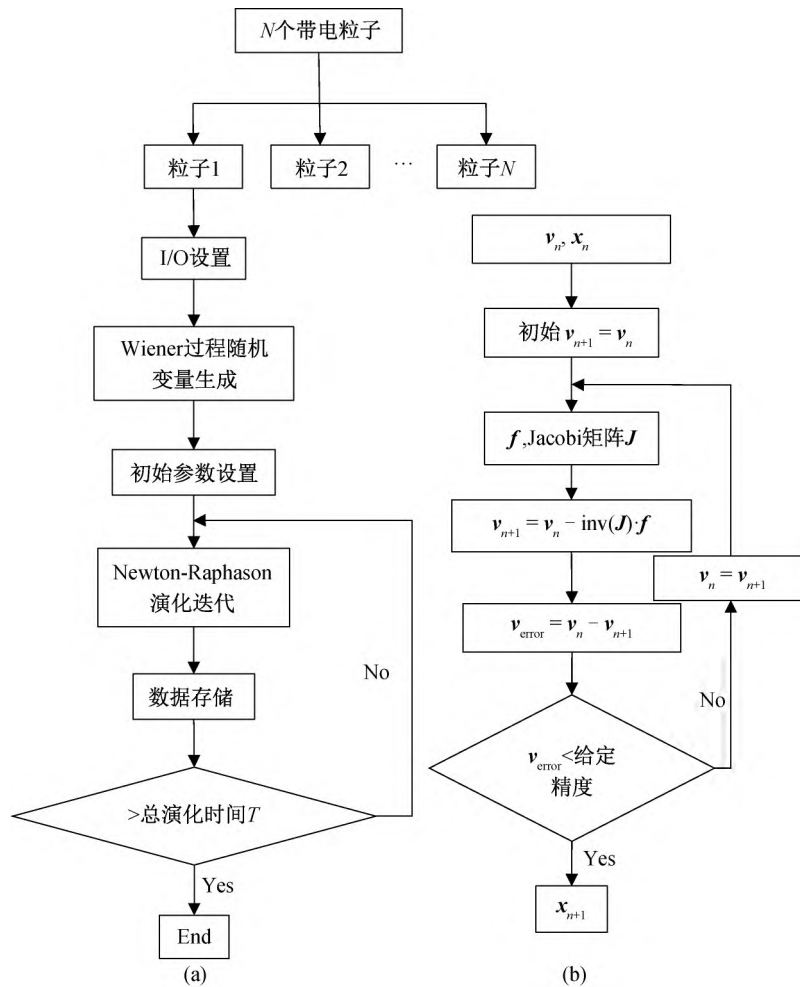


图 1 (a) ISSDE 程序流程图; (b) Newton-Raphason 演化迭代过程

Fig. 1 (a) Flow chart of ISSDE; (b) Iteration of Newton-Raphason method

3 电子束在等离子体中的慢化

采用高速电子束注入的办法加热等离子体是一种可能的加热机制.电子束在等离子体中经历慢化过程,

将能量传递给等离子体,使等离子体温度升高到热核聚变温度以发生聚变反应或者链式反应.因此,研究慢化过程对聚变发生机制的研究是很有意义的.采用 ISSDE 模拟慢化过程,并与 FP 方程给出的结果进行比较.一方面可以验证 ISSDE 模拟的正确性,另一方面也能通过 ISSDE 的第一性数值模拟分析得到慢化过程的更多物理信息.

3.1 电子束慢化的 FP 方程

在试探粒子慢化过程的计算中,假设入射粒子间的相互作用可以忽略,也不考虑试探粒子对背景粒子的相互作用,只考虑背景粒子对试探粒子的散射过程.试探粒子初始时刻以完全相同的速度入射,其分布函数为

$$f_a(\mathbf{v}, t=0) = n_a \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0), \quad \mathbf{v}_0 = v_0 \mathbf{e}_1, \quad (37)$$

式中下标 a 表示试探粒子, n_a 为试探粒子的粒子数密度, \mathbf{v}_0 为粒子在 $t=0$ 时刻的速度, \mathbf{e}_1 为初始入射方向.试探粒子所满足的 FP 方程一般表达式为

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \mathbf{v}_a \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m_a} \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{v}_a} = \left(\frac{\delta f_a}{\delta t} \right)_c = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} \left(f_a \Gamma_a \frac{\partial H_a}{\partial \mathbf{v}_a} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}_a \partial \mathbf{v}_a} \left(f_a \Gamma_a \frac{\partial^2 G_a}{\partial \mathbf{v}_a \partial \mathbf{v}_a} \right). \quad (38)$$

3.2 非磁化等离子体中的慢化过程

3.2.1 FP 理论结果

假设在背景等离子体中没有外场,即 $E=0, B=0$, 则有 $F=0$, 因为只考虑背景等离子体对入射粒子的散射过程,因此入射粒子的分布函数只为速度和时间的即 $f_a = f(\mathbf{v}, t)$, 因此 $\partial f_a / \partial \mathbf{r} = 0$. 带入方程(38) 左边得

$$\left(\frac{\delta f_a}{\delta t} \right)_c = \frac{\partial f_a}{\partial t} + \mathbf{v}_a \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{v}_a} = \frac{\partial f_a}{\partial t}, \quad (39)$$

所以,试探粒子所满足的 FP 方程为

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} \left(f_a \Gamma_a \frac{\partial H_a}{\partial \mathbf{v}_a} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}_a \partial \mathbf{v}_a} \left(f_a \Gamma_a \frac{\partial^2 G_a}{\partial \mathbf{v}_a \partial \mathbf{v}_a} \right), \quad (40)$$

将 f_a 的具体形式代入,方程左右乘上 \mathbf{v}_a 再进行积分得

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v}_0 = \Gamma_a \frac{\partial H_a}{\partial \mathbf{v}_a} \Big|_{\mathbf{v}_a = \mathbf{v}_0} = \Gamma_a \frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_0} \int d\mathbf{v}_b f_b(\mathbf{v}_b) \frac{1}{|\mathbf{v}_0 - \mathbf{v}_b|}. \quad (41)$$

令背景等离子体服从麦克斯韦分布

$$f_b(\mathbf{v}_b, t=0) = \frac{n_b}{\pi^{3/2} v_T^3} \exp\left(-\frac{v_b^2}{v_T^2}\right), \quad v_T = \sqrt{\frac{2T_b}{m_b}}, \quad (42)$$

n_b 为背景粒子的粒子数密度, v_b 表示等离子体背景粒子的速度, v_T 为背景粒子的热速度, T_b 为背景粒子的温度.将其带入方程得

$$\frac{\partial \mathbf{v}_0}{\partial t} = -n_b \Gamma_a \frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{2}{v_0 v_T^2} \psi\left(\frac{v_0}{v_T}\right) \mathbf{v}_0, \quad (43)$$

式中

$$\psi(x) = \frac{\text{Erf}(x) - x \text{Erf}'(x)}{2x^2}, \quad (44)$$

$$\text{Erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-y^2) dy, \quad (45)$$

$$\text{Erf}'(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2), \quad (46)$$

$\text{Erf}(x)$ 为误差函数.定义慢化时间

$$\tau_s(\mathbf{v}_0) = -\mathbf{v}_0 / (\partial \mathbf{v}_0 / \partial t), \quad (47)$$

对应的慢化频率为^[33]

$$\nu_s(v_0) = n_b \Gamma_a \frac{m_a + m_b}{m_a} \frac{2}{v_0 v_T} \psi\left(\frac{v_0}{v_T}\right), \quad (48)$$

此解与文献 [34] 中的解是一致的.

3.2.2 ISSDE 数值结果

在如表 1 所示参数, 采用 ISSDE 模拟程序所得在碰撞作用下单个粒子在三维位置空间的运动轨迹如图 2. 带电粒子在碰撞的作用下作随机运动. 单个带电粒子在三维速度空间的运动轨迹如图 3. 粒子在速度大小固定的球面上进行随机运动, 即粒子在运动过程中是保持动能守恒的, 这与对碰撞过程保持动能守恒的假设是一致的.

表 1 无磁场下试探粒子慢化过程参数(ν_{ei} 表示碰撞频率.)

Table 1 The coefficients of slowing-down process without extra magnetic field (ν_{ei} means collision frequency between electron and ions.)

参数	数值
初始位置/m	(0, 0, 0)
初始速度/(m·s ⁻¹)	(5×10 ⁶ , 0, 0)
时间步长/s	1/ ν_{ei}
初始磁场/T	(0, 0, 0)
等体密度/cm ⁻³	1.6×10 ¹⁵
等体温度/eV	8
初始电场/(V·m ⁻¹)	(0, 0, 0)
总步长数	5 000

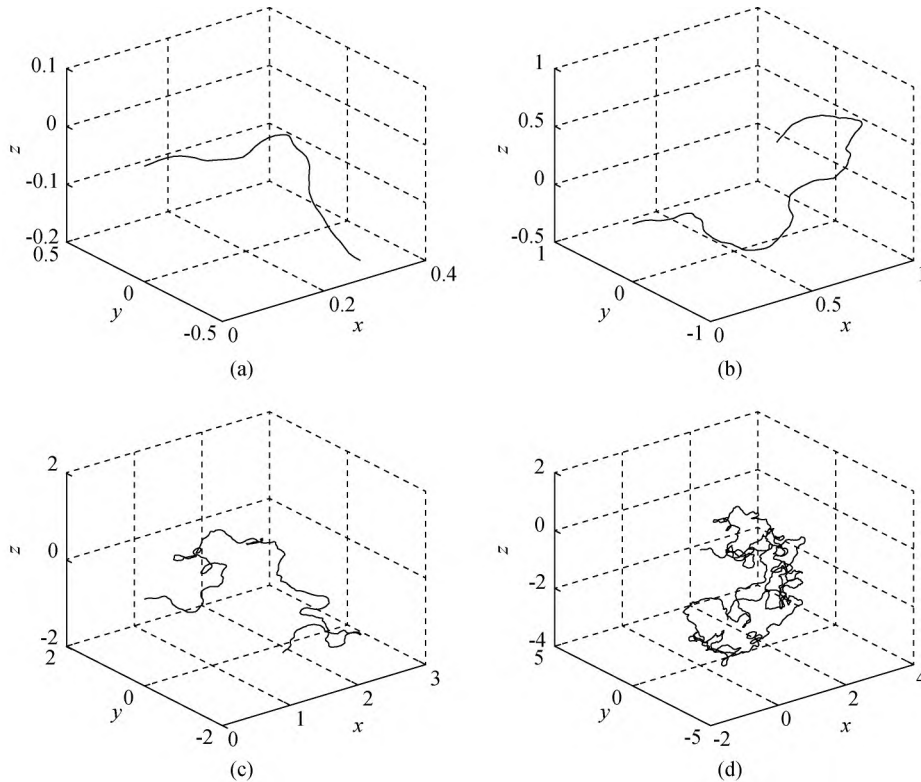


图 2 不同时刻粒子在构型空间的随机演化行为 (a) 50Δt; (b) 200Δt; (c) 1 000Δt; (d) 5 000Δt

Fig. 2 The stochastic evolutions of a single charged particle in configuration space at different moments (a) 50Δt; (b) 200Δt; (c) 1 000Δt; (d) 5 000Δt

采用 ISSDE 模拟程序采样 10 000 个粒子, 并对整个入射粒子系作统计平均, 得到入射粒子系平行入射方向平均速度的演化如图 4. ISSDE 程序模拟的结果用点线表示, 实线表示由 FP 方程所得慢化过程的结果, 即方程 (43) 所描述的结果是吻合的. 入射粒子系平行入射方向的平均速度逐渐减小, 然后趋于平稳. 这个结果与文献 [17] 采用不同方法对慢化过程描述的结果是一致的. 由此可以证明采用 ISSDE 模拟程序计算慢化过程的正确性.

3.3 磁化等离子体中的慢化过程

磁化等离子体中的慢化过程, 采用 ISSDE 程序时将式 (32) 的第一式右边加入 F_L 的分量式, 即得到磁化等离子体中的碰撞算法. 而采用 FP 方程求解却变得复杂, 因此类似于 Stratonovich SDE 方程的求解, 下面先采用 Newton-Raphason 方法求解出 FP 方程下磁化等离子体中慢化过程的解, 然后与 ISSDE 给出解的系综平均结果进行对比.

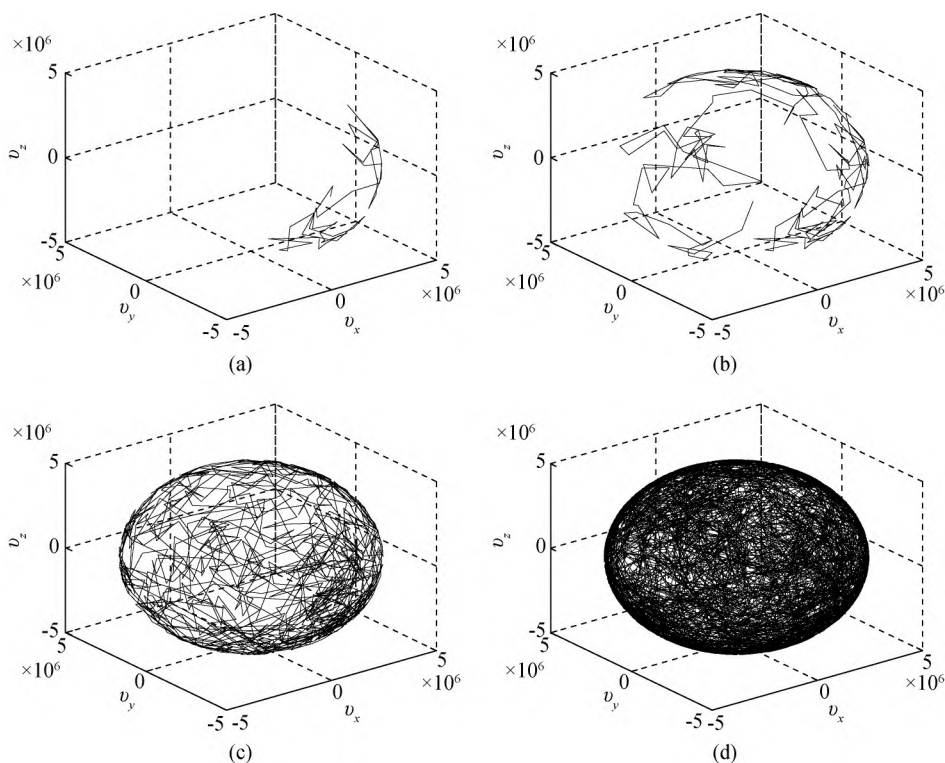


图 3 不同时刻粒子在速度空间的随机演化行为 (a) $50\Delta t$; (b) $200\Delta t$; (c) $1\ 000\Delta t$; (d) $5\ 000\Delta t$
 Fig. 3 The stochastic evolutions of a single charged particle in velocity space at different moments
 (a) $50\Delta t$; (b) $200\Delta t$; (c) $1\ 000\Delta t$; (d) $5\ 000\Delta t$

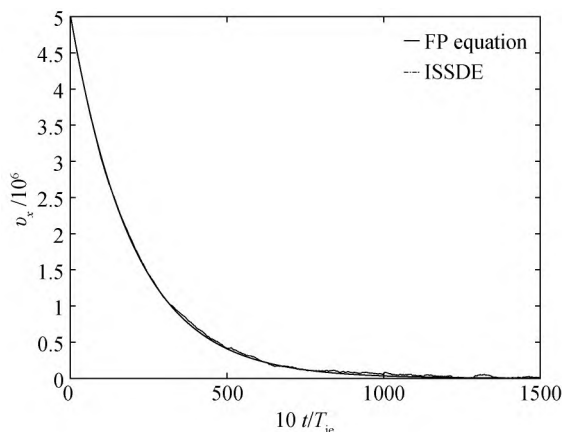


图 4 无磁场作用下入射电子沿入射方向的慢化过程 (实线为 FP 方程的解, 点线为 ISSDE 模拟程序给出结果.)
 Fig. 4 Slowing-down process of the electron beam along the incident direction (The solid line represents the solution of FP equation, while the dotted line represents the simulation result of ISSDE.)

3.3.1 磁化等离子体中慢化过程的 FP 求解方法

假设在背景等离子体处在外电磁场下, 即 $E \neq 0, B \neq 0$ 则有 $F = q(E + v \times B)$, 因此

$$\left(\frac{\delta f_a}{\delta t}\right)_c = \frac{\partial f_a}{\partial t} + \mathbf{v}_a \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{r}} + \frac{q}{m} (\mathbf{E} + \mathbf{v}_a \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{v}_a} = \frac{\partial f_a}{\partial t} + \frac{q}{m} (\mathbf{E} + \mathbf{v}_a \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{v}_a}, \tag{49}$$

所以, 试探粒子所满足的 FP 方程为

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \frac{q}{m} (\mathbf{E} + \mathbf{v}_a \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{v}_a} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} \left(f_a \Gamma_a \frac{\partial H_a}{\partial \mathbf{v}_a} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}_a \partial \mathbf{v}_a} \left(f_a \Gamma_a \frac{\partial^2 G_a}{\partial \mathbf{v}_a \partial \mathbf{v}_a} \right). \tag{50}$$

将 f_a 的具体形式代入, 方程左右乘上 \mathbf{v}_a 再进行积分得

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v}_0 = -\frac{q}{m} (\mathbf{E} + \mathbf{v}_0 \times \mathbf{B}) + \Gamma_a \frac{\partial H_a}{\partial \mathbf{v}_0} \Big|_{\mathbf{v}_a = \mathbf{v}_0} = -\frac{q}{m} (\mathbf{E} + \mathbf{v}_0 \times \mathbf{B}) + \Gamma_a \frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_0} \int d\mathbf{v}_b f_b(\mathbf{v}_b) \frac{1}{|\mathbf{v}_0 - \mathbf{v}_b|}. \tag{51}$$

当背景粒子服从麦克斯韦分布时,对方程有右边第三项进行积分后最终得

$$\frac{\partial \mathbf{v}_0}{\partial t} = -\frac{q}{m} \mathbf{E} - \frac{q}{m} \mathbf{v}_0 \times \mathbf{B} - n_b \Gamma_a \frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{2}{v_0 v_T^2} \psi\left(\frac{v_0}{v_T}\right) \mathbf{v}_0. \quad (52)$$

上述方程进行采用中点格式和 Newton-Raphason 方法迭代求解有

$$f(\mathbf{v}_0^{n+1}) = -\mathbf{v}_0^{n+1} + \mathbf{v}_0^n - \frac{q}{m} \mathbf{E} - \frac{q}{m} \mathbf{v}_0 \times \mathbf{B} - n_b \Gamma_a \frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{2}{v_0 v_T^2} \psi\left(\frac{v_0}{v_T}\right) \frac{\mathbf{v}_0^{n+1} + \mathbf{v}_0^n}{2}, \quad (53)$$

Jacobi 变换矩阵为

$$\mathbf{J} = \left[\frac{\partial f(\mathbf{v}_0^{n+1})}{\partial \mathbf{v}_0^{n+1}} \right]. \quad (54)$$

对于 k 个变量 k 个方程,可以使用 Newton-Raphason 方法来解 k 个非线性方程组.令 $\mathbf{J}^- = \mathbf{J}^{-1}$,则可以通过给定初值 $\mathbf{v}^0 = (v_x^0, v_y^0, v_z^0)$,根据迭代式

$$\mathbf{v}_0^{n+1} = \mathbf{v}_0^n - \mathbf{J}^- f(\mathbf{v}_0^{n+1}) \quad (55)$$

来得到后续时刻的 $(v_{0x}^{n+1}, v_{0y}^{n+1}, v_{0z}^{n+1})$.

3.3.2 ISSDE 模拟程序结果和 FP 方程结果的对比

令电场为 $E = 0$ 磁场 B 沿着 z 方向,大小为 1×10^{-3} T,其它参数如表 1.由 FP 方程所描述的试探粒子在磁化等离子体中的慢化过程和 ISSDE 模拟程序结果的对比如图 5.图中的实线和虚线表示磁化和非磁化的情况下,FP 方程对入射粒子系平行方向平均速度演化的描述.在磁场的作用下,粒子系平行方向的平均速度大小周期性的变化,但总体变化趋势和没有磁场的情况是一样的.因为磁场不改变粒子的总动能,而是将动能在垂直与磁场的方向上进行转移,因此在垂直磁场的两个方向上 x 方向和 y 方向,粒子系的平均速度大小会发生周期性的变化.与此同时,垂直于磁场方向总体的平均速度是减小的,这是因为粒子间的碰撞在速度空间是各向同性的,因此粒子速度在相空间逐渐趋于各向同性的分布,各个方向速度大小相互抵消.当沿 z 方向外加磁场下,采用 ISSDE 模拟得到入射粒子系在粒子入射方向系综平均速度的大小变化和 FP 方程所得的结果在开始阶段十分的相似.在经过大约 80 个碰撞时间后,粒子系的平均速度开始下降,采用 ISSDE 所得粒子系平均速度和 FP 方程所描述的粒子系平均速度就有所不同,采用 ISSDE 所描述的结果显示入射粒子系减速至一定程度后其速度会在平衡位置附近上下摆动,而采用 FP 方程所描述的粒子系平均速度的变化则不能体现这一点.右图为入射粒子系在 y 方向的速度大小变化,在没有磁

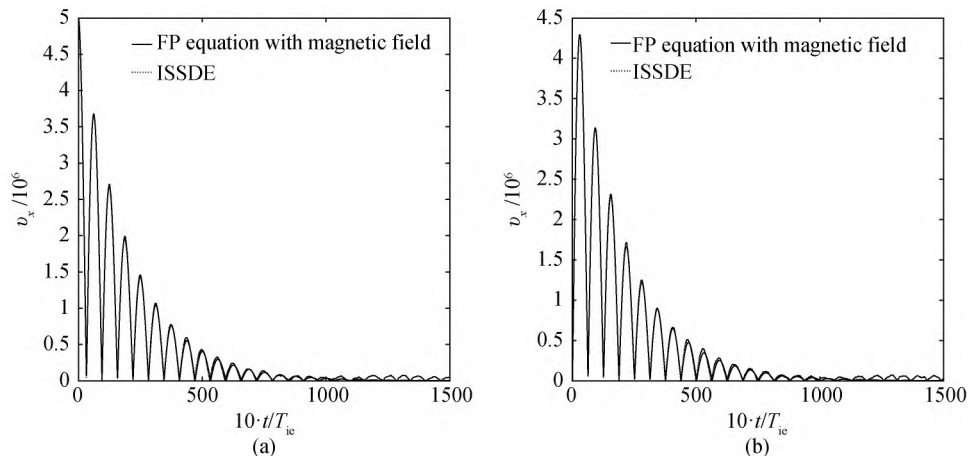


图 5 均匀外磁场作用下带电粒子在垂直磁场方向的慢化过程 (a) 图实线为磁场作用下 FP 方程沿入射方向慢化过程的解,虚线为磁场作用下 ISSDE 模拟给出沿入射方向慢化过程的解; (b) 图垂直磁场和入射方向的慢化过程,实线为 FP 方程的解,点线表示 ISSDE 模拟程序给出的解.

Fig. 5 Slowing-down process of charged particles under uniform magnetic field perpendicular to the incident direction. The solid line in (a) represents the solution of FP equation. The imaginary line of (a) represents the of ISSDE program; (b) shows slowing-down process along the direction perpendicular to both the insert direction and magnetic field direction. The solid line represents solution of FP equation, while the dotted line represents solution of ISSDE program.

场时 y 方向平均速度为 0. 在外加磁场下, 粒子系在 y 方向的平均速度也是周期的变大和减小, 总体呈现出减小的趋势.

采用 ISSDE 模拟程序来模拟试探粒子的慢化过程不仅可以求出动量系综平均的变化, 也能进一步求出各个方向能量系综平均的变化, 并且能够展示 ISSDE 模拟过程中粒子体系是动能守恒的. 在非磁化与磁化等离子体中, 采用 ISSDE 得到试探粒子系各个方向动能的系综平均如图 6. 图中分别为粒子系各个方向动能以及总动能系综平均随时间的变化. 当系统达到平衡态时, 各个方向动能趋于相同, 表明粒子系统因为碰撞而逐渐趋于各向同性. 而系统的总能量的系综平均随时间是不变的, 说明粒子系综是动能守恒的. 由此验证了采用 ISSDE 模拟程序数值计算碰撞的良好性质.

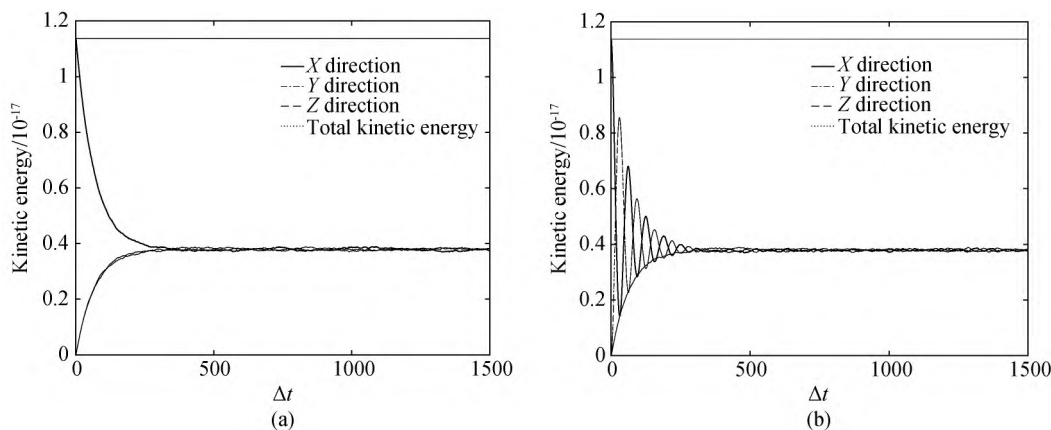


图 6 试探粒子系各个方向动能的系综平均 (a) 为非磁化等离子体中试探粒子系各个方向动能的系综平均, (b) 为磁化等离子体中试探粒子系各个方向动能的系综平均

Fig. 6 Evolution of ensemble averaged particle kinetic energy in different directions (a) without magnetic field, (b) with magnetic field

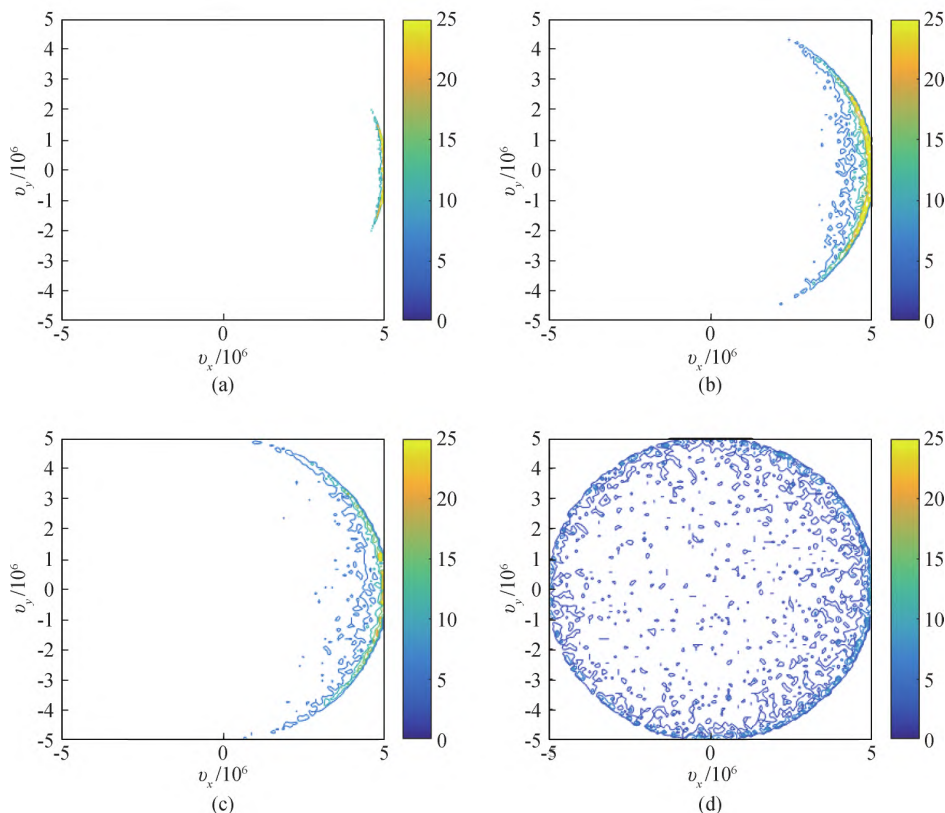


图 7 非磁化等离子体中粒子系在 v_x-v_y 速度空间分布函数演化的 contour 图 (a) $10\Delta t$, (b) $50\Delta t$, (c) $100\Delta t$, (d) $500\Delta t$

Fig. 7 Contour plot of distribution function of insert particles in non-magnetic plasmas in v_x-v_y velocity space

(a) $10\Delta t$, (b) $50\Delta t$, (c) $100\Delta t$, (d) $500\Delta t$

通过对非磁化和磁化等离子体中试探粒子系统二维分布函数的演化,可以进一步表明试探粒子系统在碰撞作用下各个方向逐渐趋于各向同性分布.对于非磁化等离子体中的过程,粒子系在 $v_x - v_y$ 方向和 $v_y - v_z$ 方向速度空间的分布函数演化如图 7 和图 8 所示.在 $v_x - v_y$ 方向,初始时刻,粒子系 v_x 方向速度分布函数的展宽逐渐变大,但因为每个粒子都是动能守恒的,因此粒子的速度上限为 $5 \times 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$,粒子在 v_x 方向速度也将小于 $5 \times 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$,但是出现了小于 $5 \times 10^6 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 的成分.由于碰撞相互作用,使粒子在 v_y 方向具有一个速度分布,因为粒子在 v_y 方向的碰撞是各向同性的,因此 v_y 方向速度分布函数是关于 $v_y = 0 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 对称的,如图 7 (a) (b) 所示.随着慢化过程的不断进行,粒子系在 v_x 方向也逐渐趋于关于 $v_x = 0 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 的对称分布,如图(d) 所示为经过 $500\Delta t$ 后粒子系速度分布.在 $v_y - v_z$ 方向粒子系速度分布在初始时刻是各向同性的,大部分粒子的速度大小由 $0 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 逐渐增大,如图 8 (a) (b) 所示.随着慢化过程的不断进行,粒子系在 $y-z$ 方向的速度分布也逐渐趋于均匀分布.这个过程表明因为碰撞的影响,粒子系在 v_x 方向的速度发生慢化,而因为单个粒子在碰撞过程中动能守恒,粒子系 v_x 方向的动量向 v_y 方向和 v_z 方向转移.

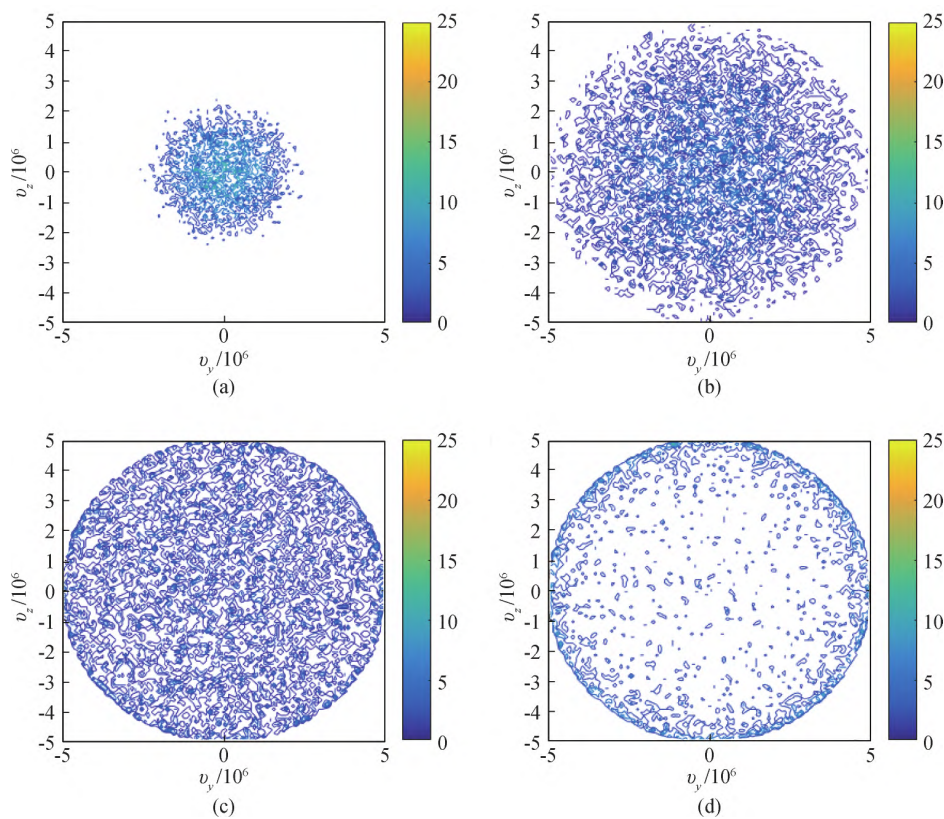


图 8 非磁化等离子体中粒子系在 $v_y - v_z$ 速度空间分布函数演化的 contour 图 (a) $10\Delta t$, (b) $50\Delta t$, (c) $100\Delta t$, (d) $500\Delta t$

Fig. 8 Contour plot of distribution function of insert particles in non-magnetic plasmas in $v_y - v_z$ velocity space

(a) $10\Delta t$, (b) $50\Delta t$, (c) $100\Delta t$, (d) $500\Delta t$

4 结论

基于 FP 方程 Stratonovich SDE 的随机等价性,得到了等价于 RMJ 势表示 FP 方程的 Stratonovich SDE,并构造了用于求解 Stratonovich SDE 的第一性原理隐式模拟程序 ISSDE 来研究等离子体的碰撞行为.考虑背景等离子体服从麦克斯韦分布的情况下,采用 ISSDE 模拟了入射电子束在非磁化与磁化等离子体中的慢化过程; ISSDE 模拟程序的计算结果体现了带电粒子因受到库仑碰撞而具有的随机性,中点格式与隐格式的使用不仅保证了数值计算的稳定性而且能够保证采样粒子演化过程中的动能守恒; ISSDE 模拟结果与采用 FP 方程计算慢化过程所得结果的一致性体现了 ISSDE 的准确性,并且采用 ISSDE 模拟程序可以获得系统更多

的物理信息.

ISSDE 模拟程序因为其简单性可以方便地运用到含碰撞的等离子体动力学问题中去. 当入射粒子系的分布更加复杂时, 采用 FP 方程计算将变得更加困难, 因为在每一步的计算中, 都需要对粒子系分布函数进行重构, 但 ISSDE 是直接对单个粒子的运动轨迹进行刻画, 因此只要给定带电粒子系所有粒子的初始分布, 便可以得到整个带电粒子系任意时刻的所有信息. GeoAlgorithmic Plasma Simulator (GAPS) 项目致力于使用先进几何算法和现代多尺度模拟技术来解决许多等离子体领域相关的困难而关键的问题. ISSDE 作为 GAPS 中的一个项目其目的是促进先进算法在带电粒子碰撞动力学模拟中系统而大范围的运用. GAPS 中收录了大量的保结构几何算法, 这些几何算法在多尺度模拟中能够保证长期的准确性和稳定性, 将 ISSDE 与这些保结构算法混合使用, 在不破坏模型几何结构的基础上考虑碰撞效应, 可以进一步完善 ISSDE 的算法和程序设计.

为简化数值计算, 主要采用的是 Lorentzian 模型, 而一般的碰撞表达式如方程 (25) 所示, 当考虑更一般的物理问题时, 可以根据试探粒子和背景粒子作相应的调整, 以此得到相应的物理. 例如当研究入射电子能量损失时, 可以采用电子-电子碰撞模型, 这时可将试探粒子和背景粒子都设为电子. 作为单粒子模型程序本文忽略了自洽场对粒子体系的影响, 即只考虑外场对粒子系的作用, 包含等离子体中带电粒子运动、粒子自洽场、外加场的动理论模型可以更加全面地描述等离子体行为, 而大多数动理论模型都是针对无碰撞等离子体设计的. 将 Stratonovich SDE 运用到传统动力学模型或者保结构动力学模型, 比如变分辛 Particle-In-Cell (PIC) 算法^[35-36]、正则辛 PIC 算法^[37]、非正则辛 PIC 算法^[38]等, 可以完善先进碰撞算法的研究. 在未来的工作中将考虑如何在破坏原来所构造的隐式模拟程序的同时加入自洽场对等离子体碰撞的影响.

参 考 文 献

- [1] PERONA A , BORGOGNO D , ERIKSSON L G . A test electron model for the study of three dimensional magnetic reconnection effects [J]. Computer Physics Communications , 2014 , 185(1) : 86-95.
- [2] HAMILTON B , FLETCHER L , MCCLEMENTS K , et al . Electron acceleration at reconnecting X-points in solar flares [J]. The Astrophysical Journal , 2005 , 625(1) : 496-505.
- [3] PFEFFERLE D , COPPER W A , GRAVES J P , et al . VENUS-LEVIS and its spline-Fourier interpolation of 3D toroidal magnetic field representation for guiding-center and full-orbit simulations of charged energetic particles [J]. Computer Physics Communications , 2014 , 185(12) : 3127-3140.
- [4] DALENA S , CHUYCHAI P , MACE R L . Streamline generation code for particle dynamics description in numerical models of turbulence [J]. Computer Physics Communications , 2012 , 183(9) : 1974-1985.
- [5] TAUTZ R C . A new simulation code for particle diffusion in anisotropic , large-scale and turbulent magnetic fields [J]. Computer Physics Communications , 2010 , 181(1) : 71-77.
- [6] 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 Letter , 2008 , 100(3) : 035006.
- [7] HE Y , SUN Y , LIU J , et al . Volume-preserving algorithms for charged particle dynamics [J]. Journal of Computational Physics , 2015 , 281: 135.
- [8] HE Y , SUN Y , LIU J , et al . Higher order volume-preserving schemes for charged particle dynamics [J]. Journal of Computational Physics , 2016 , 305: 172.
- [9] ZHANG R , LIU J , QIN H , et al . Application of lie algebra in constructing volume-preserving algorithms for charged particles dynamics [J]. Communications in Computational Physics , 2016 , 19(5) : 1397.
- [10] ZHANG H , WU S Z , ZHOU C T , et al . Numerical method of relativistic Fokker-Planck equation for energy deposition of fast electron [J]. Chinese Journal of Computational Physics . 2017 , 34(5) : 555-562.
- [11] XU H , ZHUO H B , YANG X H , et al . Hybrid particle-in-cell/fluid model for hot electron transport in dense plasmas [J]. Chinese Journal of Computational Physics , 2017 , 34(5) : 505-525.
- [12] ZHENG P W , HE L H , HUANG Q H . Electron cyclotron wave heating and current drive simulation based on three-dimensional Fokker-Planck equation [J]. Chinese Journal of Computational Physics , 2017 , 34(4) : 387-393.
- [13] KERBEL G , MCCOY M . Kinetic-theory and simulation of multispecies plasmas in Tokamaks excited with electromagnetic-

- waves in the ion-cyclotron range of frequencies [J]. *Physics of Fluids*, 1985, 28(12): 3629–3653.
- [14] EPPERIEIN E M, RICKARD G J, BELL A R, A code for the solution of the Vlasov-Fokker-Planck equation in 1-D or 2-D [J]. *Computer Physics Communications*, 1988, 52(1): 7–13.
- [15] MOREL J E, Fokker-Planck calculations using standard discrete ordinates transport codes [J]. *Nuclear Science and Engineering*, 1981, 79(4): 340–356.
- [16] CADJAN M G, IVANOV M F. Langevin approach to plasma kinetics with Coulomb collisions [J]. *Journal of Plasma Physics*, 1997, 61(1): 89–106.
- [17] SHERLOCK M. A Monte-Carlo method for Coulomb collisions in hybrid plasma models [J]. *Journal of Computational Physics*, 2008, 227: 2286–2292.
- [18] ROSIN M S, RICKETSON L F, DIMITS A M, et al. Multilevel Monte Carlo simulation of Coulomb collisions [J]. *Journal of Computation Physics*, 2014 274: 140–157.
- [19] ZHANG Guannan, DIEGO del-Castillo-Negrete. A backward Monte-Carlo method for time-dependent runaway electron simulations [J]. *Physics of Plasma*, 2017, 24: 092511.
- [20] STREVEENS D E. A new approach to charged particle slowing down and dispersion [J]. LLAL-TR-686862, 2016.
- [21] RUDAKOV L I. Collective slowing down of an intense beam of relativistic electrons in a dense plasma target [J]. *Soviet Physics JETP*, 1971, 32(6): 1134–1140.
- [22] HUSSEINY A A, FORSEN H K. Scattering probability for fast test particles in a plasma [J]. *Physics Review A*, 1970, 2(5): 2019–2024.
- [23] DAR A, GRUNZWEIG-GENSSAR J, PERES A, et al. Slowing down of ions by ultrahigh-density electron plasma [J]. *Physical Review Letters*, 1974, 32(23): 1299–1301.
- [24] KLOEDEN P E, PLATEN E. Numerical solution of stochastic differential equations [M] // *Applications of Mathematics*. Berlin, New York: Springer-Verlag, 1992: 101–103.
- [25] ÖTTINGER H C. Stochastic processes in polymeric fluids [M]. Berlin: Springer, 1995: 112.
- [26] ROSENBLUTH M N, MACDONALD W M, JUDD D L. Fokker-Planck equation for an inverse-square force [J]. *The Physical Review*, 1957, 107(1).
- [27] COHEN R S, SPITZER L, Jr, RUTLY P M. The electrical conductivity of an ionized gas [J]. *The Physical Review*, 1950, 80: 230.
- [28] BEN-ISRAEL A. A Newton-Raphson method for the solution of systems of equations [J]. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 1966, 15(2): 243–252.
- [29] ORTEGA J M, RHEINBOLDT W C. Iterative solution of nonlinear equations in several variables [M]. New York and London: Academic Press, 1970: 572.
- [30] BJÖRCK A. Numerical methods for least squares problems [M]. North-Holland, Amsterdam: SIAM, Philadelphia, 1996, 343–345.
- [31] Anonym.Lua. [EB/OL]. <http://www.lua.org/>.
- [32] Anonym.HDF5 [EB/OL]. <http://hdfgroup.org/HDF5/>.
- [33] MONTGOMERY D C, TIDMAN D A. Plasma kinetic theory [M]. New York, San Francisco, Toronto, London: McGRAW-HILL, 1964: 26–37.
- [34] GOEBEL D M, KATZ I. Fundamentals of electric propulsion: Ion and Hall thrusters [M]. Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology, 2008: 479–482.
- [35] KRAUS M. Variational integrators in plasma physics [J]. arXiv preprint arXiv:1307.5665, 2013.
- [36] 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]. *Physical of Plasmas*, 2013, 20(10): 102517.
- [37] QIN H, LIU J, XIAO J, et al. Canonical symplectic particle-in-cell method for long-term large-scale simulations of the Vlasov-Maxwell equations [J]. *Nuclear Fusion*, 2015, 56(1): 014001.
- [38] XIAO J, QIN H, LIU J, et al. Explicit high-order non-canonical symplectic particle-in-cell algorithms for Vlasov-Maxwell systems [J]. *Physical of Plasmas*, 2015, 22(11): 112504.

ISSDE: First-principles Implicit Simulations Based on Stratonovich SDE Approach of Coulomb Collision

ZHENG Yifeng¹, WANG Yulei¹, LIU Jian¹, QIN Hong^{1,2}

(1. *School of Nuclear and Technology and Department of Modern Physics, University of Science and Technology of China, Hefei, Anhui 230026, China*; 2. *Plasma Physics Laboratory, Princeton University, Princeton, NJ 08543, USA*)

Abstract: A first-principles implicit simulation program, Implicit Stratonovich Stochastic Differential Equations (ISSDE), is constructed for stochastic differential equations which describes plasmas with Coulomb collision. Basic idea of the program is stochastic equivalence between Fokker-Planck equation and Stratonovich SDE. Implicit discrete method guarantees numerical stability and conservation of kinetic energy. ISSDE is built with C++ language, and is designed to possess standard interfaces and extendible modules. Slowing-down processes of electron beams in both unmagnetized and magnetized plasmas are studied, which shows correctness of ISSDE. It provides a powerful tool for collisional plasmas studies.

Key words: FP equation; Stratonovich SDE; implicit; slowing-down

Received date: 2018-02-08; **Revised date:** 2018-06-25