



流體模式電漿數值模擬

呂凌霄
中央大學 太空科學研究所



大綱

- 為什麼要做數值模擬？
- 電漿數值模擬碼的基本類型
- 流體電漿數值模擬適用範圍
- 流體電漿的基本方程式
- 各種流體電漿數值模擬碼的介紹
- 數值模擬應注意與檢驗的事項
- 數值模擬結果之診斷與分析
- 總結與分析



為什麼要做數值模擬？

- 檢驗理論模式
 - 理論模式通常是為了解釋一種觀測現象而設計出來的。
 - 理論模式，通常可以簡化為一組聯立的微分方程式 (system ODEs or PDEs)。
 - 根據這些方程式，寫個程式，進行電腦數值模擬，看看是否可以重新建構觀測到的現象。藉以檢驗理論模式是否正確。
- 彌補實驗或觀測上之不足
 - 實驗或觀測受到時空條件的限制，往往無法取得足夠精細的時空資訊。
 - 藉由高時空解析度的模擬結果，可幫助我們了解非線性過程中的因果關係與主要的物理機制。
- 預測 (預報) 在不同初始條件與邊界條件下非線性過程的發展情形。



如何選擇電漿數值模擬碼

- 選擇模擬碼，要對症下藥：Choose a right simulation code for your problem
- 要隨時保有：宏觀的視野與微觀的警惕。知道你的模擬碼，適用的底線在哪裡！
- 要先學過電漿物理，才會做正確的選擇！



電漿數值模擬碼的基本類型

- Fluid Simulations
 - MHD code
 - Two-Fluid code
 - Multi-Fluid code
- Kinetic Simulations
 - Hybrid code (Fluid ions and kinetic electrons)
 - Full particle code
 - Test particle code
 - Vlasov code

The particle-code simulation is indeed a multiple-fluid simulation.



Simulation Codes

	Simulation Code	Phenomena scale length λ	Assuming thermal dynamic equilibrium?		
			e-e	i-i	e-i
Fluid Simulations	MHD code	$\lambda \geq 10^3 \lambda_i$	yes	yes	yes
	Two-Fluid code	$10^2 \lambda_i \geq \lambda \geq 10 \lambda_e$	yes	yes	no
Kinetic Simulations	Hybrid code <i>fluid electrons & kinetic ions</i>	$10 \lambda_e \geq \lambda \geq \lambda_i$	yes	no	no
	Full particle code	$\lambda_e \geq \lambda \geq \lambda_e$	no	no	no
	Test particle code	Strong magnetic field	n/a	n/a	n/a
	Vlasov Code	$\lambda_e \geq \lambda \geq \lambda_e$	no	no	no

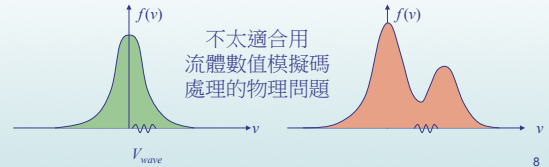


流體電漿數值模擬適用範圍

- 接近熱平衡的狀態
 - 當電漿中，不同種類的粒子，若維持接近熱平衡的狀態時，就可以用流體變數：密度、流速、與溫度，來描述它們的行為特性。
 - 熱平衡態的分布，可以用常態分布函數來描述：只要知道密度、流速、與熱壓力，就可寫出該種粒子的速度空間分布函數
- 粒子群所見波速遠大於粒子群的熱速度
 - 所要考慮的波動，在以流體處理的粒子群運動座標系上，所看到的傳播速度 V_{wave} ，須遠大於該種類粒子的熱速度 V_{th0} 。
 - 如果 $V_{wave} \gg V_{th0}$ 這個條件不滿足，那麼走得比波快的粒子與走得比波慢的粒子，所看到的波的特性，往往截然不同。因此平均速度、密度、與壓力，就不再具有代表性。



流體電漿數值模擬適用範圍



流體電漿的基本方程式

- 遠大於正離子時空尺度之磁流體方程式
 - 磁流體：magnetohydrodynamics (MHD)
- 正離子時間尺度之雙流體方程式
- 相對論多流體方程式



遠大於正離子時空尺度之磁流體方程式

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{V} \times \mathbf{B})$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{V})$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{V})}{\partial t} = -\nabla \cdot [\rho \mathbf{V} \mathbf{V} + (p + \frac{B^2}{2\mu_0}) \mathbf{1} - \frac{\mathbf{B} \mathbf{B}}{\mu_0}]$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\frac{1}{2} \rho V^2 + \frac{3}{2} p + \frac{B^2}{2\mu_0}) = -\nabla \cdot [(\frac{1}{2} \rho V^2 + \frac{5}{2} p + \frac{B^2}{\mu_0}) \mathbf{V} - \frac{\mathbf{B} \mathbf{B}}{\mu_0} \cdot \mathbf{V}]$$

Initial condition
 $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$

The MHD Ohm's law $\mathbf{E} = -\mathbf{V} \times \mathbf{B}$ has been used to eliminate the electric field in the above equations.



正離子時間尺度之電子-正離子雙流體方程式

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} = -\nabla \cdot (n_e \mathbf{V}_e)$$

$$\frac{\partial \mathbf{V}_e}{\partial t} = +\frac{e}{m_e} \mathbf{V}_e \times \mathbf{B} + \frac{e}{m_e} \mathbf{E} - \frac{\nabla p_e}{m_e n_e} - \mathbf{V}_e \cdot \nabla \mathbf{V}_e$$

$$\frac{\partial p_e}{\partial t} = -\nabla \cdot (p_e \mathbf{V}_e) - \frac{2}{3} p_e (\nabla \cdot \mathbf{V}_e)$$

$$\frac{\partial p_e}{\partial t} = -\nabla \cdot (p_e \mathbf{V}_e) - \frac{2}{3} p_e (\nabla \cdot \mathbf{V}_e)$$

$$n_e = n_i \text{ (quasi-neutral assumption)}$$

$$\mathbf{J} = \frac{\nabla \times \mathbf{B}}{\mu_0}$$

$$\mathbf{V}_e = \mathbf{V}_i - \frac{\mathbf{J}}{en_i} = \mathbf{V}_i - \frac{\nabla \times \mathbf{B}}{\mu_0 en_i}$$

For $\frac{m_e}{eB} \frac{\partial \mathbf{V}_e}{\partial t} \approx 0, \frac{m_e}{eB} \frac{1}{n_i} \frac{\partial n_i}{\partial t} \approx 0,$

$$\mathbf{E} = -\mathbf{V}_e \times \mathbf{B} - \frac{\nabla p_e}{en_i} - \frac{m_e}{e} \mathbf{V}_e \cdot \nabla \mathbf{V}_e + \frac{c^2}{\omega_{pe}^2} \nabla^2 \mathbf{E}$$

Initial condition:
 $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$



相對論多流體方程式

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}$$

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = c^2 \nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{\epsilon_0} \sum_{\alpha} (e_{\alpha} n_{\alpha} \mathbf{V}_{\alpha})$$

$$\frac{\partial n_{\alpha}}{\partial t} = -\nabla \cdot (n_{\alpha} \mathbf{V}_{\alpha})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (U_{\alpha}) = -\mathbf{V}_{\alpha} \cdot \nabla U_{\alpha} + \frac{e_{\alpha}}{m_{\alpha}} (\mathbf{E} + \mathbf{V}_{\alpha} \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\nabla p_{\alpha}}{m_{\alpha} n_{\alpha}}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (p_{\alpha}) = -\nabla \cdot (p_{\alpha} \mathbf{V}_{\alpha}) - \frac{2}{3} p_{\alpha} \nabla \cdot \mathbf{V}_{\alpha} - \frac{2}{3} \mathbf{V}_{\alpha} \cdot \nabla (\frac{\Gamma_{\alpha} - 1}{2\Gamma_{\alpha}} p_{\alpha})$$

$$\mathbf{V}_{\alpha} = \frac{\mathbf{U}_{\alpha}}{\Gamma_{\alpha}}$$

$$\Gamma_{\alpha} = \sqrt{1 + \frac{\mathbf{U}_{\alpha} \cdot \mathbf{U}_{\alpha}}{c^2}}$$

Initial conditions:
 $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$
 $\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{1}{\epsilon_0} \sum_{\alpha} (e_{\alpha} n_{\alpha})$



各種流體電漿數值模擬碼的介紹

- 數值模擬 = 對時間積分
- **Explicit scheme**
 - 利用過去與現在的資訊，估算時間積分之值，以預測未來的結果。
 - 運算比較快、程式比較好寫，但是誤差會不斷地累積。
- **Implicit scheme**
 - 利用過去、現在、與未來的資訊，估算時間積分之值。其中未來的資訊，可藉由聯立方程式求解，或利用疊代法求解。
 - 運算費時、程式難寫，但是誤差不會累積。



傳統流體數值模擬架構

- **The 2nd Order Lax-Wendroff Scheme**
 - 歷史悠久 (Richtmyer and Morton, 1967)
 - 速度快、誤差不大、記憶體用量省，可以在短期內獲得不錯的模擬結果。
 - **an explicit scheme**，誤差會累積，不適合用來研究非線性波，長期的發展。
 - **Explicit schemes** 只適合模擬只含奇次空間微分項的時間微分方程式 (Press et al., 1988)
- **The implicit scheme for the diffusion term**
 - 當方程式中出現偶次空間微分項時，切不可用 **explicit schemes** 來處理之，否則會出現，西洋棋盤-黑白格子狀分布的假波動結構。(Press et al., 1988)
 - 流體方程式中的擴散項或攪散項，多為對空間的二次微分項，宜用 **implicit scheme** 來處理之。



Traditional simulation scheme: The 2nd Order Lax-Wendroff Scheme

適用問題：

- 如果一組基本方程式可以寫成以下通量守恆形式 (例如：磁流體 (MHD) 方程式)

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} = 0$$

- 只含奇次空間微分項的時間微分方程式 (例如：Korteweg-deVries (KdV) Equation)

$$\frac{\partial V}{\partial t} + (C_0 + V) \frac{\partial V}{\partial x} + \alpha \frac{\partial^3 V}{\partial x^3} = 0$$



磁流體方程式形式的時間微分方程式

- 方程式基本形式 $\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} = 0$

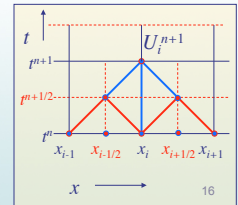
可用二階 Lax-Wendroff scheme 來進行數值模擬

- **第一步：**

$$\mathbf{U}_{i+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}} = \frac{\mathbf{U}_{m+1}^n + \mathbf{U}_i^n}{2} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} [\mathbf{F}(\mathbf{U}_{m+1}^n) - \mathbf{F}(\mathbf{U}_i^n)]$$

- **第二步：**

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [\mathbf{F}(\mathbf{U}_{i+\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}}) - \mathbf{F}(\mathbf{U}_{i-\frac{1}{2}}^{m+\frac{1}{2}})]$$



Korteweg-deVries (KdV) Equation

$$\frac{\partial V}{\partial t} + (C_0 + V) \frac{\partial V}{\partial x} + \alpha \frac{\partial^3 V}{\partial x^3} = 0$$

- 含一個對時間的微分項
- 只含奇次空間微分項
- 只有一個變數
- 有解析解
- 是練習撰寫 the 2nd order Lax-Wendroff scheme 的最佳範例



Traditional simulation scheme: The implicit scheme for the diffusion term

- The diffusion equation $\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$
- The implicit scheme

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} = \frac{\kappa}{(\Delta x)^2} \frac{1}{2} [(T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n) + (T_{i+1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i-1}^{n+1})]$$

$$\begin{pmatrix} (1+2\alpha) & -\alpha & 0 & \dots & 0 \\ -\alpha & (1+2\alpha) & -\alpha & & \vdots \\ 0 & & \ddots & & 0 \\ \vdots & & & -\alpha & (1+2\alpha) & -\alpha \\ 0 & \dots & 0 & -\alpha & (1+2\alpha) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_1^{n+1} \\ T_2^{n+1} \\ \vdots \\ T_{N_i-2}^{n+1} \\ T_{N_i-1}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\alpha T_0^n + (1-2\alpha)T_1^n + \alpha T_2^n \\ \alpha T_1^n + (1-2\alpha)T_2^n + \alpha T_3^n \\ \vdots \\ \alpha T_{N_i-3}^n + (1-2\alpha)T_{N_i-2}^n + \alpha T_{N_i-1}^n \\ \alpha T_{N_i-2}^n + (1-2\alpha)T_{N_i-1}^n + 2\alpha T_{N_i}^n \end{pmatrix}$$

where $\alpha = \frac{\kappa \Delta t}{2(\Delta x)^2}$ $T(x=0) = T_0$ $T(x = N_i \Delta x) = T_{N_i}$



Non-traditional simulation scheme: Higher Order Implicit Simulation Scheme

- 高階implicit流體數值模擬架構
 - 誤差小、需要用到較多記憶體
 - An implicit scheme，誤差不會累積
 - 過去的老電腦跑不動，適合在現在與未來高速的電腦上運算
 - 範例：The 4th Order Predictor-Corrector Method

19



Non-traditional simulation scheme: The 4th Order Predictor-Corrector Method

Solving $\partial y / \partial t = f$ with $f = f(t, y, \partial y / \partial x, \dots)$ and $h = \Delta t$

- 空間微、積分：
 - 利用Fast Cubic Spline或其他高階差分法，求網格點上的空間微分、積分之值
- 初始三步驟：
 - 利用 the 4th order Runge-Kutta method，求 y^1, y^2, y^3 之值
- 預測步驟：
 - 利用 the 4th order Adams' open formula，根據 $y^n, y^{n-1}, y^{n-2}, y^{n-3}$ ，預測 y^{n+1} 之值
- 校正（疊代）步驟：
 - 利用 the 4th order Adams' close formula，根據前一次預測所得的 y^{n+1} ，以及原有之 y^n, y^{n-1}, y^{n-2} ，重新預測 y^{n+1} 之值
- 重複校正（疊代）數次，直到收斂，即可進行下一步的預測

20



數值模擬應注意與檢驗的事項

- Always use **double precision** in your simulation
 - **Normalize your equations** 可以幫助你選取模擬相關係數，如系統長度、時間間距、空間間距。
 - 檢查系統總能量是否守恆
 - 檢查是否滿足 Courant condition: $\Delta t * V_{max} < \Delta x$
- 其他進一步的檢查：確認一下
- 當系統長度增加一倍，模擬結果沒有重大改變。
 - 當時間間距減半，模擬結果沒有重大改變。
 - 當空間間距減半，模擬結果沒有重大改變。
 - 當粒子數增加一倍，模擬結果沒有重大改變。
 - 選用真實離子電子質量比，模擬結果沒有重大改變。

21



數值模擬的效率與精確度

- 數值模擬就是利用一套**精準有效**的數值方法，解一組聯立的微分方程式（system ODEs or PDEs），其中，至少有一組方程式是**對時間微分**的方程式。
- 一套精準有效的數值方法
 - 有限的電腦資源：RAM, HD, CPU, I/O速率
 - 有限的研究時間
- 一套精準有效的數值方法，不只要**穩**，還要**快**、要**準**！

22



善用資源、能省則省、錙銖必較

Do your best to save

- **Memory**
 - 務必重複使用working Arrays
- **CPU time**
 - 避免重複計算：指數、對數、三角函數。
 - 重複計算部份，務必先建立Table。
- **Real time**
 - Watch out your I/O scheme
 - 千萬不要小筆、小筆資料，分批進行傳輸，這樣會非常慢
 - 要一大筆資料，一口氣一起傳輸，才快

23



數值模擬結果之診斷與分析

- **Display your simulation results**
 - 利用 Matlab或 IDL 等軟體，寫一個簡單繪圖檔（指令檔）自動處理大量數值模擬結果。
 - 利用 Excel 等軟體，個別處理總結形式的圖片。
- 要用心分析你的模擬結果，不要浪費了辛苦算出來的模擬結果！
 - Carefully trace the time evolutions of all fluid variables.
 - 最好不要一邊模擬一邊做診斷繪圖。如果模擬一個Case所花費的時間，超過一天，最好把需要分析的資料存下來，用另外一台電腦慢慢的仔細分析。
- 要熟練各種數值方法，活學活用，才能做出最有效、最有創意的診斷分析。

24



總結與討論

- 選擇模擬碼，要對症下藥：Choose a right simulation code for your problem
- 要隨時保有：宏觀的視野與微觀的警惕。知道自己的模擬碼，適用的底線在哪裡！
- 能省則省，錙銖必較：Do your best to save memory, CPU time, and real time (Watch out your I/O scheme).
- 好的診斷（good diagnostics）可以幫助我們了解模擬現象背後的物理過程。

25



總結與討論

- 好的模擬研究，需要
 - 好的硬體
 - 好的軟體，
 - 優秀的、有經驗的模擬人才（manpower）。
- 一個真正有經驗的模擬專家，不必用電腦，也可以大致預估模擬的結果。就好像貝多芬失聰後，仍然能作曲。

26



參考文獻

- Hildebrand, F. B., *Advanced Calculus for Applications*, 2nd edition, Prentice-Hall, Inc., Englewood, Cliffs, New Jersey, 1976.
- Press, W. H., B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes (in C or in FORTRAN and Pascal)*, Cambridge University Press, Cambridge, 1988.
- Richtmyer, R. D., and K. W. Morton, *Difference Methods for Initial-Value Problems*, 2nd edition, John Wiley & Sons, Inc., 1967.
- Shampine, L. F., and M. K. Gordon, *Computer Solution of Ordinary Differential Equation: the Initial Value Problem*, W. H. Freeman and Company, San Francisco, 1975.

27