

非平衡辐射刚性问题中一种实用的差分格式

—— 二次牛顿迭代格式

北京九所

张国平

一、物理假设

考虑的微观过程有：韧致过程，光电过程和电子碰撞电离和三体复合过程。自由电子服从Maxwell分布。束缚电子采用平均离子模型估计及主量子数。相互作用截面全部采用经典和类氢近似。

二、方程

光子方程为：

$$\frac{\partial f_\nu}{\partial t} = D_\nu - C_\nu f_\nu$$

占据数方程为：

$$\frac{\partial P_n}{\partial t} = A_n - B_n P_n$$

能量方程为：

$$\frac{\partial}{\partial t} (C_\nu T + V + \frac{u^{(p)}}{\bar{p}}) = 0$$

$$C_\nu = \sum_{n=1}^{n_0} C_{n\nu} + C_{T\nu}$$

$$D_\nu = \sum_{n=1}^{n_0} D_{n\nu} + D_{T\nu}$$

$$C_{T\nu} = \frac{2.03122 \times 10^9 A_0 N_e^3}{\rho \nu^3 \sqrt{T}} (1 - e^{-\nu/T})$$

$$D_{T\nu} = \frac{2.03122 \times 10^9 A_0 N_e^3}{\rho \nu^3 \sqrt{T}} e^{-\nu/T}$$

当 $\nu < E_n$ 时, $C_{n\nu} = D_{n\nu} = 0$

当 $\nu \geq E_n$ 时

$$C_{rv} = \frac{2.2529 \times 10^{10}}{n A_0 \nu^3} (2n^2) E_n^2 P_n - D_{nv}$$

$$D_{rv} = \frac{2.2529 \times 10^{10}}{n A_0 \nu^3} (2n^2) E_n^2 P_n \frac{N_e (1-P_n)}{4.82 T^{3/2}} \exp[(E_n - \nu)/T]$$

$$A_n = A_{ne} + A_{nv}$$

$$B_n = B_{ne} + B_{nv}$$

$$A_{ne} = \frac{0.817481 \times 10^{10} N_e^2}{4.82 T^2 E_n} \sum (E_n/T)$$

$$B_{ne} = A_{ne} + \frac{0.817481 \times 10^{10} N_e}{\sqrt{T} E_n} \exp(-E_n/T) \sum (E_n/T)$$

$$A_{nv} = \frac{0.315487 \times 10^6 E_n^2 N_e}{4.82 n T^{3/2}} \int_{E_n}^{\infty} \frac{d\nu}{\nu} (1+f_\nu) \exp[(E_n - \nu)/T]$$

$$B_{nv} = A_{nv} + \frac{0.315487 \times 10^6 E_n^2}{n} \int_{E_n}^{\infty} \frac{d\nu}{\nu} f_\nu$$

$$\sum(x) = 1 - x e^x \int_x^{\infty} \frac{dt}{t} e^{-t}$$

$$N_0 = \frac{0.6025 P}{A_0} (Z_0 - \sum_{n=1}^{n_0} 2n^2 P_n)$$

$$V = \frac{83.1091}{A_0} \sum_{n=1}^{n_0} 2n^2 E_n (1-P_n)$$

$$C_v = \frac{124.75365}{A_0} (Z_0 + 1 - \sum_{n=1}^{n_0} 2n^2 P_n)$$

$$U^{(2)} = 1.1646 \times 10^{-3} \int_0^{\infty} \nu^3 d\nu f_\nu$$

Z_0 、 A_0 分别为介质的原子序数和原子量。

三、困难

(1) 方程数目多。 r_i 分 60—100 群， P_n 有 5 个。

(2) 刚性大。一般说来 r_i 方程刚性最大， P_n 方程次之， T 方程最小。韧致吸收系数可达 10^{14} (μs^{-1})。光电吸收系数可达 10^{10} (μs^{-1})。 B_n 最大的 10^{10} (μs^{-1})。如果要求计算步长为 $10^{-2} - 10^{-5} \mu s$ 则在一个 Δt 内韧致吸收达 10^6 次，光电吸收达 10^5 次，空穴复合可达 10^5 次。由此可见问题的复杂性。

(3) 方程是非线性、变系数、强耦合的。

显式格式既简单又守恒，但不稳定， Δt 很小。严格的隐式无法求解，只能采用分开算的隐式。它是稳定的， Δt 可放大，但不守恒，结果不可信。用简单迭代去使它守恒，又碰到迭代不收敛。而且简单迭代的收敛条件和显式的稳定性条件是一致的。单靠迭代解决不了问题。因此不稳定、不守恒和不收敛成为刚性问题中很难摆脱的三种命运。

四、亚稳态

刚性问题中有快过程又有慢过程。快过程很快就平衡了。我们对它的非平衡的细节不会感兴趣。而慢过程来不及平衡。这样系统就处于亚稳态。在韧致过程为主的快过程中亚稳态为： $f_n = \frac{1}{e^{E_n/kT} - 1}$ 取 $P \ell G n k$ 分布。在光电过程为主的快过程中亚稳态为：

$$f_n = \frac{1}{\frac{4.82 T^{3/2} P_n}{N_e (1 - P_n)} e^{(U - E_n)/T} - 1} \quad \text{取 Bose-Einstein 分布。}$$

在电子碰撞起主要作用的快过程中亚稳态为：

$$P_n = \left(\frac{4.82 T^{3/2}}{N_e} e^{-E_n/T} + 1 \right)^{-1}$$

为 Fermi-Dirac 分布。由此可见当系统处于亚稳态时 r_i 、

P_n 、 T 不再是独立变量。而是有很強的相互依赖、相互制约的关系。我们的目标是要用大步长计算亚稳态的变化过程。要达到此目标关键在于：第一要保证快过程的平衡。第二要正确反映系统各物理量随快过程而产生的相互依赖和相互制约的关系。

五、一次牛顿迭代格式。

先用全隐式计算 f_n 和 P_{n+1} ：

$$f_n^{n+1(s+1)} = \frac{f_n^n + D_n^{n+1(s)} \Delta t}{1 + C_n^{n+1(s)} \Delta t}$$

$$P_n^{n+1(s+1)} = \frac{P_n^n + A_n^{n+1(s)} \Delta t}{1 + B_n^{n+1(s)} \Delta t}$$

对于显式的能量方程用牛顿法去得：

$$-h_{n+1(s+1)} = \frac{C_n^n T^n + V_n^{n+1(s+1)} + \frac{1}{\bar{p}} (u^{(2)n} - u^{(2)n+1(s+1)}) + \theta \Delta t + (\frac{\partial V}{\partial T} + \frac{1}{\bar{p}} \frac{\partial V}{\partial T}) T^{n+1(s)}}{C_n^{n+1} + (\frac{\partial V}{\partial T}) + \frac{1}{\bar{p}} (\frac{\partial h_{n+1}}{\partial T})}$$

$$\frac{\partial V}{\partial T} = - \frac{83.1691}{A_0} \sum_{n=1}^{\infty} 2n^2 E_n \frac{\partial P_n}{\partial T}$$

$$\frac{\partial V}{\partial T} = 1.16466 \times 10^{-3} \int_0^{\infty} \nu^3 \frac{\partial f_{\nu}}{\partial T} d\nu$$

$$\frac{\partial P_n}{\partial T} = -G_n + H_n \frac{\partial N_n}{\partial T}$$

$$G_n = \frac{\Delta t}{1 + B_n \Delta t} \left\{ \frac{1}{T^2} [B_{ne} (E_n - \frac{T}{2}) P_n + A_{ne} (2T(1 - P_n) - (P_n - \frac{T}{2}) P_n)] \right.$$

$$\left. + 0.31148 \times 10^6 \frac{(1 - P_n) N_e E_n^2}{4.32 \times n T^{3/2}} \int_{E_n}^{\infty} \frac{d\nu}{\nu} (E_n + \frac{3T}{2} - \nu) (1 + f_{\nu}) \exp[(e_2 - \nu)/T] \right\}$$

$$H_n = \frac{\Delta t}{1 + B_n \Delta t} \left\{ \frac{1}{N_e} [A_{ne} (2 - P_n) - B_{ne} P_n] \right.$$

$$+ 0.315487 \times 10^{-6} \frac{(1-p_n) E_n^2}{4.8 z n T^{3/2}} \int_{E_n}^{\infty} \frac{d\nu}{\nu} (1+f_\nu) \exp[-(E_n-\nu)A] \Big\}$$

$$\frac{\partial N_e}{\partial T} = \frac{\frac{0.6025}{A_0} \rho \sum_{n=1}^{n_0} z n^2 E_n}{1 + \frac{0.6025}{A_0} \rho \sum_{n=1}^{n_0} z n^2 H_n}$$

$$\begin{aligned} \frac{df_\nu}{\partial T} = \frac{\Delta t}{1+C_{\nu} \Delta t} \Big\{ \sum_{n=1}^{n_0} [D_{n\nu} (1+f_\nu) \Big(\frac{\nu-E_n-\frac{3}{2}T}{T^2} \\ - \frac{1}{1-p_n} \frac{\partial P_n}{\partial T} + N_e \frac{\partial N_e}{\partial T} \Big) \\ - \frac{C_{n\nu} + D_{n\nu}}{P_n} f_\nu \frac{\partial P_n}{\partial T}] \\ + \frac{1}{T^2} [D_{T\nu} (\nu(1+f_\nu) - \frac{T}{2}) + \frac{T}{2} C_{T\nu} f_\nu] \Big\} \end{aligned}$$

迭代初值为: $f_\nu^{n+1(0)} = f_\nu^n$, $P_n^{n+1(0)} = P_n^n$, $T^{n+1(0)} = T^n$

迭代以 P_n 和 T 相对误差收敛到 10^{-4} 为止。计算结果表明它对于低温是相当好的，对于低密度高温也适用。对于高密度的铅，在 $T < 20$ 时也适用。当 $T \approx 20$ 时，铅的第三壳层开始电离时，此格式就失效了。原因在于铅的第三壳层以光致电离为主，韧致作用也很小。 r_ν 不仅取决于 T ，而且主要由 P_n 所决定。

六、二次牛顿迭代格式

先用全隐式计算 r_ν :
$$f_\nu^{n+1(s+1)} = \frac{f_\nu^n + D_\nu^{n+1(s)} \Delta t}{1 + C_\nu^{n+1(s)} \Delta t}$$

P_n 和 T 分别从全隐式和显式出发。预估下一次迭代时 r_ν , P_n ,

取什么值。予估用泰勒展开只取到一次项为止。先算的 x 不用予估。因此此方法也叫做单向后予估法。并不是严格的牛顿迭代。

$$P_n^{n+1(s+1)} = \frac{1}{1+\Delta N_n} \left[P_n^n + M_n^* + \Delta N_n^* P_n^{n+1(s)} + \Delta N_{\text{ent}} (T^{n+1(s)} - T^{n+1(s+1)}) + \sum_{k \neq n} \Delta N_{\text{ent}k} (P_k^{n+1(s+1)} - P_k^{n+1(s)}) \right]$$

$$T^{n+1(s+1)} = \frac{1}{C_n^{n+1} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial u^{(n)}}{\partial T}} \left\{ C_n^n T^n + V^n - V^{n+1(s)} + \frac{1}{\rho} (u^{(n)} - u^{(n+1(s))}) + \theta \Delta t + \frac{1}{\rho} \frac{\partial u^{(n)}}{\partial T} T^{n+1(s)} + \sum_{k \neq n} \frac{1}{\rho} \frac{\partial u^{(n)}}{\partial P_k} (P_k^{n+1(s)} - P_k^{n+1(s+1)}) \right\}$$

$$\Delta N_n = B_{ne} \Delta t + \frac{X_n}{P_n} \int_{E_n}^{\infty} C_{nv} f_v v^2 dv + \Delta N_n^*$$

$$\Delta N_n^* = [(2-P_n) A_{ne} - B_{ne} P_n] \left(\frac{-1}{N_e} \frac{\partial N_e}{\partial P_n} \right) \Delta t + \frac{X_n}{P_n} \int_{E_n}^{\infty} v^2 dv C_{nv} \frac{\partial f_v}{\partial P_n} + X_n \int_{E_n}^{\infty} v^2 dv [D_{nv} (1+f_v) \left(\frac{-1}{N_e} \frac{\partial N_e}{\partial P_n} \right) + \frac{D_{nv}}{P_n} f_v + \frac{D_{nv}}{1-P_n} (1+f_v)]$$

$$M_n^* = A_{ne} \Delta t + \int_{E_n}^{\infty} v^2 dv D_{nv} X_n$$

$$\Delta N_{\text{ent}} = \frac{\Delta t}{T} [2(1-P_n) A_{ne} + \left(\frac{E_n}{T} - 0.5 \right) (B_{ne} - b_{ne}) P_n] - \frac{X_n}{T} \int_{E_n}^{\infty} v^2 dv (v - E_n - 1.5T) (1+f_v) D_{nv} + X_n \int_{E_n}^{\infty} v^2 dv C_{nv} \frac{\partial f_v}{\partial T}$$

$$\Delta N_{\text{ent}n'} = -[(2-P_n) A_{ne} - B_{ne} P_n] \left(\frac{-1}{N_e} \frac{\partial N_e}{\partial P_n'} \right) \Delta t - X_n \left(\frac{-1}{N_e} \frac{\partial N_e}{\partial P_n'} \right) \int_{E_n}^{\infty} D_{nv} (1+f_v) v^2 dv - X_n \int_{E_n}^{\infty} C_{nv} \frac{\partial f_v}{\partial P_n'} v^2 dv$$

$$X_n = \frac{1.40035 \times 10^{-5} A_0 \Delta t}{2n^2 \rho}$$

$$\frac{\partial f_V}{\partial p_n} = \frac{\Delta t}{1+C_{v\Delta t}} \left\{ \left(\frac{-1}{N_e} \frac{\partial N_e}{\partial p_n} \right) [(D_{TV}-D_V)(1+f_V) + 3(C_{TV}f_V - D_{TV})] - \frac{C_{vn}+D_{nv}}{P_n} f_V + \frac{D_{nv}}{1-p_n} (1+f_V) \right\}$$

$$\frac{\partial f_V}{\partial T} = \frac{\Delta t}{(1+C_{v\Delta t})T^2} \left\{ \left[\frac{T}{2} (C_{TV}f_V - D_{TV}) + (1+f_V) \nu D_{TV} \right] + \sum_{n=1}^{n_0} D_{nv} (1+f_V) (\nu - E_n - \frac{3}{2}T) \right\}$$

$P_n^{n+1(s+1)}$ 和 $T^{n+1(s+1)}$ 是一个线性方程组，准备用迭代法求解，这是第二重迭代。也叫做小迭代。小迭代不收敛。为此再对后算 T 方程予估下次小迭代时 P_n 和 T 取什么值。 P_n 格式对 T 求偏微分得：

$$\frac{\partial P_n}{\partial T} = - \frac{\Delta N_{sn} T}{1+\Delta N_n} \quad \text{不难得到:}$$

$$T^{n+1(s_2+1)} = \frac{1}{(C_n^{n+1} + \Delta W + \frac{1}{P} \frac{\partial h^{n+1}}{\partial T})} \left\{ C_n^h T^n + V^n - V^{n+1(s_2+1)} + \frac{1}{P} (h^{(n)} - h^{(n+1(s_2+1))}) \right. \\ \left. + \theta \Delta t + \Delta W T^{n+1(s_2)} + \frac{1}{P} \frac{\partial h^{(n)}}{\partial T} T^{n+1(s)} + \frac{1}{P} \sum_{n=1}^{n_0} \frac{\partial h^{(n)}}{\partial p_n} (P_n^{n+1(s)} - P_n^{n+1(s_2+1)}) \right\}$$

$$\Delta W = - \sum_{n=1}^{n_0} \Delta N_{sn} T \left(\frac{\partial V}{\partial p_n} + \frac{1}{P} \frac{\partial h^{(n)}}{\partial p_n} \right) \div (1+\Delta N_n)$$

另外从全微分观点看来， $\frac{1}{P} \left(\frac{\partial h^{(n)}}{\partial T} \right)$ 是偏微分。而 $\frac{1}{P} \left(\frac{\partial h^{(n)}}{\partial T} \right) + \Delta W$ 才是全微分。

大小迭代均以 P_n 和 T 相对误差小于 10^{-5} 为收敛条件。加上 ΔW 项后即使 S_2 不迭代，大迭代仍能收敛。只是大迭代次数要增加

一、二次。此格式迭代收敛很快，往往步长放大十倍百倍，大迭代次数才增加一、二次。收敛误差从 10^{-4} 增加到 10^{-5} 大迭代次数也是增加一、二次。 10^{-4} 收敛和 10^{-5} 收敛 T 和 P_n 可对上四位有效数字。说明此格式是真收敛而不是假收敛。只要是真收敛此格式一定能退化到原方程。由于我们是从 r_ν 和 P_n 全隐式出发的，快过程的平衡一定能得到保证。 10^{-4} 收敛就能保证能量守恒，为了外壳层光电效应中光子数加空穴数守恒要求 10^{-5} 收敛。大迭代次数一般在 5-6 次之间，小迭代次数在 30-40 次之间。此格式无论对于低温、高温、低密度、高密度均可胜任。步长基本上不受快过程制约。但格式并不是绝对稳定的，当一个 Δt 中 r_ν ， P_n ， T 变化太大时，迭代中会出现粒子数反转，此时 r_ν 就要出负，迭代就无法收敛。严格从理论上证明此格式的稳定性收敛性相当困难。但从直观上看来，如果一个 Δt 内 r_ν ， P_n ， T 变化太大，使泰勒展开失效，或者泰勒展开中二次及二次以上的项的总贡献大于零次和一次项的和格式就可能是不稳定或不收敛的了。总之我们实践了用大步长计算亚稳态变化过程的目标。成功地解决了不考虑线效应的非平衡辐射的刚性问题。

七、结束语

本人是受了 G. Cooper 和 J. S. Chng 对 Fokker-Planck 方程差分格式处理的启发。在于敏同志对亚稳态论述的指导下，对倪水林同志等大量计算数据的分析和比较中逐步发展起来的。我们不要把差分格式看成是纯数学的东西，可以从计算的具体物理问题出发，弄清了具体的物理图景，分析问题的主要矛盾。从

物理直观出发去试验排选合适的差分格式。本工作是在于敏同志的指导下进行的。邱玉波和彭惠民同志参加了上机和物理分析工作，在此表示感谢。

参 考 文 献

1. J. S. Chang and G. Cooper., "A Practical Difference Scheme for Fokker-Planck Equations" J. Comp. Phys. Vol 6, p 1-16 (1970)
2. Я. Б. Зельдович . и. Ю. П. Райзер., "Физика Ударных Волн и Високотемпературных Гидродинамических Явлений" Москва 1966.