

Numerische Modelle der
Farley-Buneman-Instabilität im polaren
Elektrojet

Vom Fachbereich Physik
der Universität Hannover

zur Erlangung des Grades
Doktor der Naturwissenschaften
– Dr. rer. nat. –

genehmigte Dissertation
von

Dipl.-Phys. Axel vom Endt
geb. am 12. Januar 1968 in Bremen, jetzt Ense

1998

Referent: Prof. Dr. F. Demmig
Korreferent: Prof. Dr. K. Schlegel
Tag der Promotion 12. November 1998

Für meine Mutter Johanna

Kurzzusammenfassung

Numerische Modelle der *Farley-Buneman*-Instabilität im polaren Elektrojet

In der vorliegenden Arbeit wurden verschiedene numerische Modelle zur Beschreibung von Plasmen auf ihre Eignung zum Studium der *Farley-Buneman*-Instabilität im polaren Elektrojet in der ionosphärischen *E*-Schicht der Erde hin untersucht. Diese Untersuchung war notwendig, weil gezeigt werden konnte, daß frühere Studien unter verschiedenen numerischen Problemen litten, aufgrund derer die Ergebnisse dieser Arbeiten einer weiteren Überprüfung bedürfen.

Das parallelisierte explizite *particle-in-cell*-Verfahren und das direkte implizite *particle-in-cell*-Verfahren erwiesen sich als potentiell geeignet zur Modellierung der *Farley-Buneman*-Instabilität in der polaren *E*-Schicht der Ionosphäre. Die ideale Skalierbarkeit des parallelisierten expliziten Verfahrens konnte gezeigt werden.

Es wurde ein physikalisch detailliertes Modell zur Beschreibung der Stöße mit dem Neutralgas entwickelt, das durch die Verwendung der Nullstoß-Methode keinen größeren Rechenaufwand benötigt als die einfacheren Modelle aus älteren Arbeiten. Es wurde gezeigt, daß dieses Stoßmodell die experimentell bekannten Stoßfrequenzen für ein ionosphärisches Plasma im thermischen Gleichgewicht korrekt wiedergibt.

Die Stabilität beider Verfahren wurde untersucht. Hierbei wurde eine bisher nicht analytisch beschriebene Stabilitätsgrenze für die Gitterweite im Zusammenhang mit der Zahl der Simulationsteilchen pro Gitterzelle gefunden, die in einigen früheren Arbeiten nicht beachtet wurde. Für das direkte implizite PIC-Verfahren wurde bestätigt, daß das Verhältnis von Gitterweite zu Zeitschrittweite um einen Faktor drei größer sein muß als die thermische Geschwindigkeit der Elektronen, um die Stabilität zu gewährleisten.

Bei verschiedenen Initialisierungen zeigte das implizite PIC-Verfahren in einem Bereich der physikalischen Parameter, der nach der linearisierten Theorie instabil ist, keinerlei Anwachsen einer Instabilität. Dies legt die Schlußfolgerung nahe, daß die numerische Dämpfung, die dem impliziten Verfahren eigen ist, so stark ist, daß die *Farley-Buneman*-Instabilität an ihrem Entstehen gehindert wird.

Das explizite PIC-Verfahrens hingegen zeigt ein deutliches Anwachsen der Instabilität. Die generelle Anwendbarkeit des Verfahrens wurde gezeigt, der äußerst große Rechenaufwand dieses Verfahrens ist mit heutigen Parallelrechnern zu bewältigen.

Schlagnworte: *Farley-Buneman*-Instabilität, Ionosphäre, PIC-Verfahren

Abstract

Numerical Models of the *Farley-Buneman*-Instability in the Auroral Electrojet

Different numerical models of plasmas have been analysed with respect to their suitability for the study of the *Farley-Buneman*-instability in the polar electrojet of the Earth's ionosphere. This was considered necessary, since previous work in this field suffered from numerical problems. These older results therefore need to be critically reviewed.

Two methods, the parallelised explicit particle-in-cell (PIC) method and the direct implicit PIC method were found to be potentially applicable to model the *Farley-Buneman*-instability in the auroral *E*-region of the ionosphere. The perfect scalability of the parallelisation was shown.

A detailed model for the collisions with the neutral gas was developed. By means of the null-collision method, it was computationally not more expensive than the rather simple models of previous authors.

The stability of both methods was analysed. Besides the well known limit for the time step in the explicit method, another limit for the grid spacing in combination with the number of particles per cell was found, which was not taken into account in some previous work. For the implicit method, it could be reproduced that the ratio of grid spacing to time step must be about three times the electron thermal velocity in order to achieve stability.

For different initialisations, the direct implicit method did not show any instability in cases where linear theory does predict it. This leads to the conclusion that the numerical damping inherent to that method is too strong to allow for the growth of the *Farley-Buneman*-instability

The parallelised explicit method in contrast shows the growth of an instability. The general applicability of this method was shown. The extremely high computational expense of this method can be accomplished by today's parallel computers.

Key words: *Farley-Buneman*-instability, Ionosphere, PIC-simulation

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Physik der Ionosphäre	2
1.1.1	Zur Geschichte	2
1.1.2	Aufbau der Atmosphäre	3
1.2	<i>Farley-Buneman</i> -Instabilität	7
1.2.1	Zur Geschichte	7
1.2.2	Theorie	9
1.2.3	Frühere Simulationsrechnungen	15
2	Numerische Verfahren	19
2.1	Anforderungen	19
2.2	Kontinuumsmechanische Verfahren	21
2.2.1	Magnetohydrodynamik	21
2.2.2	Zweiflüssigkeitsmodell	22
2.3	Kinetische Verfahren	23
2.3.1	Vlasov-Verfahren	23
2.3.2	<i>Particle-in-cell</i> -Verfahren	24
2.3.3	Explizites PIC-Verfahren	26
2.3.4	Driftnäherung	30
2.3.5	Hybridverfahren	30
2.3.6	Implizites PIC-Verfahren	31
2.3.7	Parallelisierung	38
2.3.8	Initialisierung	40
2.4	Stöße mit dem Neutralgas	42
2.4.1	Einfaches Modell	43
2.4.2	Verfeinertes Modell	44
2.4.3	Nullstoß-Methode	45
2.4.4	Details des Stoßprozesses	46
2.5	Fazit	53

3	Resultate der verschiedenen PIC-Verfahren	55
3.1	Stabilitätsuntersuchung	55
3.1.1	Explizites Verfahren	56
3.1.2	Implizites Verfahren	59
3.2	Anwendung auf die <i>Farley-Buneman</i> -Instabilität	61
3.2.1	Implizites Verfahren	62
3.2.2	Explizites Verfahren	66
3.3	Fazit	72
4	Zusammenfassung	75
A	Parameter der <i>E</i>-Schicht	79
B	Details der numerischen Verfahren	81
B.1	Struktur des Programms	81
B.2	<i>Hammersley</i> -Sequenzen	83
B.3	Parallelisierung	84
B.4	Glättung der Ladungsdichte	86
C	Symbolverzeichnis	87
	Literaturverzeichnis	88

Abbildungsverzeichnis

1.1	Schichtstruktur der Atmosphäre und deren Nomenklatur	4
1.2	Neutrgaskomposition der oberen Atmosphäre (aus <i>Hargreaves</i> , 1992).	5
1.3	Typische Elektronendichte in mittleren Breiten als Funktion der Höhe (nach W. Swider, zitiert aus <i>Hargreaves</i> , 1992)	6
1.4	Schematische Darstellung der Verteilungsfunktion im ruhenden Plasma (links) und im Fall einer Drift v_d zwischen Elektronen (e) und Ionen (i)	10
1.5	Koordinatensystem zur Beschreibung der <i>Farley-Buneman</i> -Instabilität.	11
2.1	Lösung der eindimensionalen linearisierten Dispersionsrelation für $ E_{ext} = 60 \text{ mV/m}$, Massenverhältnis $m_i/m_e = 55000$, Temperatur $T_e = T_i = 250 \text{ K}$	20
2.2	Räumliches Gitter und Ladungszuweisung im 2D <i>particle-in-cell</i> -Verfahren.	25
2.3	Numerische Aufheizung des Plasmas bei dem expliziten PIC-Verfahren in Abhängigkeit von der Gitterweite Δx	29
2.4	Aufteilung des Simulationsgebiets auf 4 Prozessorelemente (PE).	39
2.5	Effizienz der Parallelisierung (nur für die Teilchen).	40
2.6	Phasenraumschnitte zum Vergleich der Initialisierungen mit Zufallszahlen und mit <i>Hammersley</i> -Sequenzen.	41
2.7	Schema der Nullstoß-Methode: Der zusätzliche Stoßkanal bewirkt eine konstante Stoßfrequenz über alle Energien.	45
2.8	Vektordiagramm der Geschwindigkeiten im Stoßprozeß.	47
2.9	Stoßquerschnitte für Elektronen in N_2 nach <i>Phelps und Pitchford</i> (1985a).	49
2.10	Stoßquerschnitte für Elektronen in O_2 nach <i>Phelps und Pitchford</i> (1985a).	50
2.11	Numerisch ermittelte Stoßfrequenzen im kumulierten Mittel.	51
3.1	Explizites PIC-Verfahren, Elektronentemperatur für verschiedene Gitterweiten $\Delta x/\lambda_D$	57

3.2	Explizites PIC-Verfahren, Elektronentemperatur für verschiedene Anzahlen der Simulationsteilchen pro Gitterzelle n_p	58
3.3	Explizites PIC-Verfahren, Elektronentemperatur für gleiche Anzahl der Simulationsteilchen pro Debyeefläche $n_D = 100$	58
3.4	Implizites PIC-Verfahren, Elektronentemperatur für verschiedene Zeitschrittweiten Δt bei fester Gitterweite $\Delta x = \Delta y = 5\lambda_D$	59
3.5	Implizites PIC-Verfahren, Elektronentemperatur für verschiedene Zeitschrittweiten Δt bei fester Gitterweite $\Delta x = \Delta y = 25\lambda_D$	60
3.6	Wachstumsrate der <i>Farley-Buneman</i> -Instabilität, bestimmt aus der kinetischen Dispersionsrelation (1.19) mit den physikalischen Parametern aus Anhang A.	62
3.7	Die stärksten Fourier-Komponenten der Elektronendichte aus Lauf Nr. 064072 (implizites Verfahren).	63
3.8	Die stärksten Fourier-Komponenten der Elektronendichte aus Lauf Nr. 064972 (implizites Verfahren) mit Initialisierung durch <i>Hammersley</i> -Sequenzen.	65
3.9	Die stärksten Fourier-Komponenten der Elektronendichte aus Lauf Nr. 256072 (explizites Verfahren).	68
3.10	Die stärksten Fourier-Komponenten der Elektronendichte aus Lauf Nr. 256000 (explizites Verfahren).	69
3.11	Explizites PIC-Verfahren, Vergleich der Elektronentemperatur aus zwei Läufen mit und ohne äußerem elektrischen Feld \mathbf{E}_0	70
3.12	Die stärksten Fourier-Komponenten der Elektronendichte aus Lauf Nr. 256001 (explizites Verfahren) mit Glättung der Ladungsdichte.	71
3.13	Die stärksten Fourier-Komponenten der Elektronendichte aus dem längeren Lauf Nr. 256772 (explizites Verfahren).	73
B.1	Aufteilung des räumlichen Gitters mit Hilfspunkten der benachbarten Prozessorelemente.	84
B.2	Filter zur Glättung der Ladungsdichte für verschiedene Werte des Glättungsparameters a	86

Kapitel 1

Einleitung

Die modifizierte Zweistrominstabilität oder nach ihren Entdeckern auch *Farley-Buneman*-Instabilität (Farley, 1963; Buneman, 1963) ist nach heutigem Wissensstand die wichtigste Plasmainstabilität in der *E*-Schicht der Ionosphäre. Sie tritt sowohl in der Nähe des magnetischen Äquators als auch in den hohen geografischen Breiten der Polarlichtregion auf und beeinflusst bei stark gestörten magnetischen Bedingungen die Energiebilanz Ionosphäre–Thermosphäre. Für den Funkverkehr ergeben sich direkte Konsequenzen aus dieser Instabilität.

Die *Farley-Buneman*-Instabilität entsteht, wenn die Relativgeschwindigkeit zwischen Elektronen und Ionen eine gewisse Schwelle nahe der Ionenschallgeschwindigkeit überschreitet. Dies ist genau in der *E*-Schicht der Ionosphäre der Fall, da dort die Elektronen magnetisiert sind, während die Ionen stoßdominiert sind und daher fast keine $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift ausführen. Am Äquator wird das treibende elektrische Feld durch Dynamoeffekte hervorgerufen, die von der Gezeitenbewegung¹ der Atmosphäre verursacht werden. In der Polarlichtregion wird das elektrische Feld durch Konvektion in der Magnetosphäre verursacht, die vom Sonnenwind getrieben wird, und kann um ein Mehrfaches stärker sein als am Äquator.

Diese stärkeren Felder führen dazu, daß die Instabilität eine Aufheizung des Elektronengases bewirkt. In dieser Arbeit werden numerische Modelle vorgestellt, mit denen diese starke Form der Instabilität untersucht werden kann.

Die Arbeit ist wie folgt aufgebaut: Zunächst wird in diesem Kapitel eine kurze Einführung in die Physik der Ionosphäre gegeben, um die Begriffe für die folgenden Kapitel einzuführen. Außerdem wird die Entstehung und Erscheinungsform der *Farley-Buneman*-Instabilität erläutert. Verschiedene numerische Verfahren zur Behandlung von Plasmen werden in Kapitel 2 vorgestellt und auf ihre generelle Eignung zur

¹Man nennt auch die tägliche thermische Expansionsbewegung der Atmosphäre Gezeiten, obwohl sie von der Sonne, nicht vom Mond, getrieben werden.

Untersuchung der *Farley-Buneman*-Instabilität geprüft. Dieses Kapitel nimmt einen breiten Raum ein, weil in der veröffentlichten Literatur verschiedene Verfahren benutzt wurden, zum Teil mit numerisch fragwürdigen Ergebnissen. Diejenigen Verfahren, die von ihren numerischen Eigenschaften her als geeignet erscheinen, werden in Kapitel 3 eingehender betrachtet und auf die *Farley-Buneman*-Instabilität angewandt.

1.1 Physik der Ionosphäre

In diesem Abschnitt soll eine kurze Einführung in die Teilgebiete der Physik der Ionosphäre gegeben werden, die für diese Arbeit von Belang sind. Hierbei werden keine eigenen Ergebnisse dargestellt, sondern nur bekannte Tatsachen in knapper Form wiedergeben, um die Begriffe für die folgenden Kapitel einzuführen. Ausführliche Darstellungen findet man z. B. bei *Kelley* (1989) oder *Hargreaves* (1992).

1.1.1 Zur Geschichte

Bereits seit dem Beginn der Neuzeit beobachteten Seefahrer, daß die Nadeln der Magnetkompass in der Nähe des Äquators leicht mit der Tageszeit variierten. 1839 vermutete F. Gauss, daß diese Schwankungen von der Gegenwart starker Ströme in der Atmosphäre hervorgerufen werden. B. Stewart schlug 1882 als Erklärung vor, daß diese Ströme von einem von der Sonne getriebenen Dynamo in einer ionisierten Schicht der oberen Atmosphäre hervorgerufen werden. Auf größeres Interesse stieß die Erforschung der Ionosphäre mit der Übertragung eines Funksignals von England nach Neufundland durch G. Marconi 1901. Ein Jahr später erklärten A. Kennelley und O. Heaviside unabhängig voneinander diese überraschend große Reichweite mit der Reflexion des Signals an einer Schicht ionisierter Teilchen in 100 km Höhe.

Mit der Verbreitung des Rundfunks in den ersten beiden Jahrzehnten dieses Jahrhunderts begannen die Versuche, die Ionosphäre genauer zu erforschen. In den zwanziger Jahren zeigten Appleton und Barnes, daß Radiowellen an einer elektrisch aktiven Schicht in 100 km Höhe reflektiert werden, die sie *E*-Schicht nannten (E für elektrisch). Später konnte Appleton mit Interferenzverfahren zeigen, daß es unter- und oberhalb dieser Schicht weitere elektrisch aktive Schichten gab, die er dann alphabetisch *D*- bzw. *F*-Schicht nannte (siehe auch Abb. 1.3). Appleton erhielt 1947 den Nobelpreis für Physik für diese Entdeckungen.

In den zwanziger Jahren wurden auch die ersten Versuche unternommen, die fundamentalen physikalischen Prozesse in der Ionosphäre zu verstehen und die Elektrodichte als Funktion der Höhe zu bestimmen. *Pedersen* (1927) und *Chapman* (1931) erklärten, daß diese Schichten durch die ultraviolette Strahlung der Sonne gebildet

werden. Zu dieser Zeit glaubten *Chapman, Pedersen* und andere fälschlicherweise, daß überwiegend negativ geladene Ionen für die Effekte in der Ionosphäre verantwortlich seien. Es dauerte bis in die vierziger Jahre (*Bates und Massey, 1946; Bates, 1994; Fukushima, 1994*), diesen Irrtum aufzuklären.

Einen hervorragenden geschichtlichen Überblick, der natürlich sowohl ein größeres Gebiet der Physik des erdnahen Weltraumes umfaßt als auch viel tiefer in die Details vordringt, als es hier möglich ist, findet man in der Sammlung von Veröffentlichungen zum 75. Jahrestag der American Geophysical Union (AGU) von *Bates (1994); Fukushima (1994); Friedman (1994); Parker (1994); Simpson (1994); Sonett (1994); Dungey (1994); Axford (1994)*.

Die heutige Beobachtung der Ionosphäre geschieht auf drei verschiedene Weisen: 1. *Bodengebunden*, mittels aktiver (Radar, Lidar) oder passiver (Riometer, Kameras) Techniken. Diese Verfahren wurden seit den zwanziger Jahren kontinuierlich weiterentwickelt und erlauben heute eine routinemäßige Beobachtung vieler Größen in der Ionosphäre. 2. *Weltraumgestützt* von Satelliten aus. In den tieferen Schichten der Ionosphäre, bis etwa 200 km Höhe, ist der Luftwiderstand zu groß, um dort Satelliten auf einer dauerhaften Umlaufbahn zu halten. Die Beobachtung dieser Schichten ist also auch von Satelliten nur aus der Ferne möglich, während die höheren Schichten der Ionosphäre und die Magnetosphäre von mehreren Satelliten kontinuierlich beobachtet werden. 3. *In-situ* mit Sonden auf ballistischen Raketen. Diese Raketenkampagnen liefern zwar nur Momentaufnahmen der Ionosphäre, sind aber unerlässlich, um die tieferen Schichten der Ionosphäre mit hoher Ortsauflösung zu beobachten.

1.1.2 Aufbau der Atmosphäre

Schichtstruktur

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, die Atmosphäre der Erde in einzelne Bereiche aufzuteilen (siehe Abb. 1.1). Anhand verschiedener Eigenschaften der Atmosphäre gelangt man zu folgenden Einteilungen:

- *Temperatur*: Dies ist die geläufigste Einteilung. Die verschiedenen Schichten der unteren und mittleren Atmosphäre sind hier nicht relevant, es sei nur erwähnt, daß sich die *Farley-Buneman*-Instabilität in der unteren Thermosphäre in 90 - 120 km Höhe, also direkt über der Mesopause, der kältesten Schicht der Atmosphäre, ergibt.
- *Zusammensetzung*: Bis zur Turbopause in etwa 100 km Höhe ist die Atmosphäre turbulent durchmischt, so daß die Zusammensetzung im Wesentlichen der Luft in Bodennähe entspricht. Oberhalb der Turbopause nimmt die Konzentration an

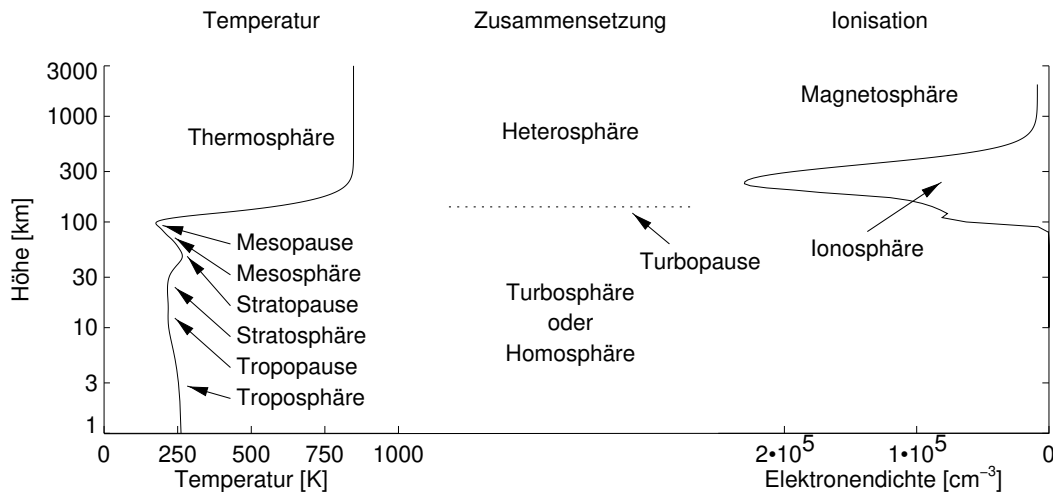


Abbildung 1.1: Schichtstruktur der Atmosphäre und deren Nomenklatur. Die Temperatur entstammt dem MSIS-E-90 - Modell der Atmosphäre (Labitzke *et al.*, 1985; Hedin, 1991), die Elektronendichte der internationalen Referenzionosphäre IRI (Bilitza, 1990), jeweils für den 1. April 1997, 70° Nord, 0° West, 12 Uhr UT.

atomarem Sauerstoff immer weiter zu, so daß in ca. 125 km Höhe die Konzentrationen von O_2 und O gleich groß sind. In größeren Höhen überwiegt dann der atomare Sauerstoff (siehe Abb. 1.2).

- *Ionisation:* In der unteren und mittleren Atmosphäre ist die Elektronendichte verschwindend gering, zum einen weil die ionisierende Strahlung der Sonne bereits größtenteils in höheren Schichten absorbiert wurde, zum anderen weil das dichtere Gas eine schnellere Rekombination der Ionen bewirkt. Zu größeren Höhen steigt der Ionisierungsgrad an, bis die Elektronendichte in der *F*-Schicht in 200 - 300 km Höhe ein Maximum erreicht. Darüber hinaus nimmt der Ionisierungsgrad weiterhin zu, aufgrund der exponentiellen Abnahme der Gesamtdichte nimmt die Elektronendichte jedoch wieder ab.

Auf die Chemie der Atmosphäre soll hier nicht weiter eingegangen werden, die Aufzählung der verschiedenen Reaktionen würde den Rahmen dieser Arbeit sprengen. Ausführliche Darstellungen findet man z. B. bei Hargreaves (1992) oder Dieminger *et al.* (1996). Für die Modellierung der *Farley-Buneman*-Instabilität ist allerdings die Kenntnis der Neutralgas- und Ionenzusammensetzung der *E*-Schicht von Bedeutung, da bei dem geringen Ionisierungsgrad des Plasmas Stöße der geladenen Teilchen untereinander vernachlässigt werden können und nur die Stöße der geladenen Teilchen mit dem Neutralgas zu berücksichtigen sind.

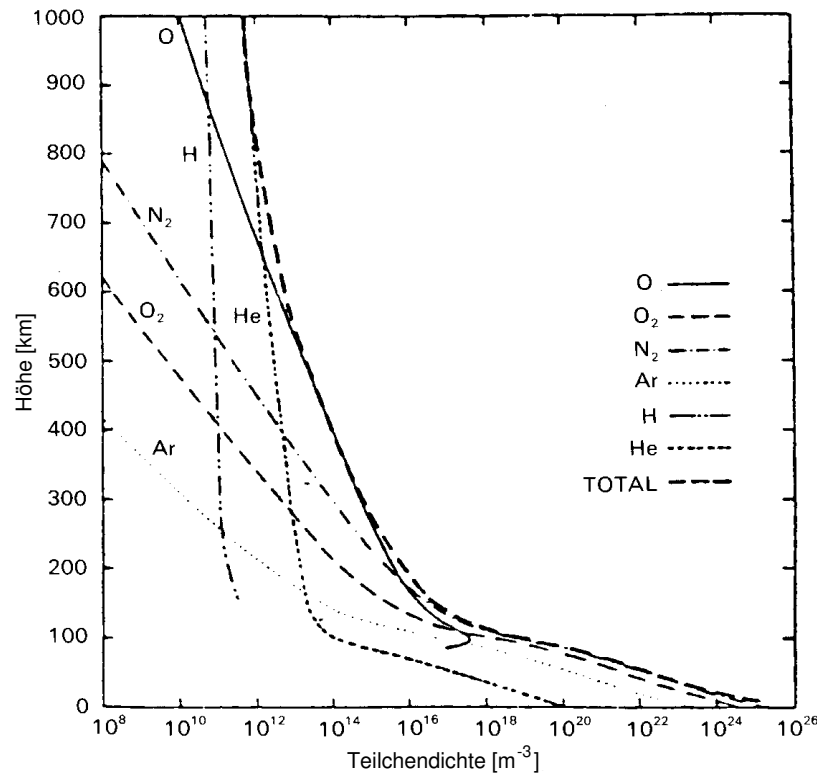


Abbildung 1.2: Neutralgaskomposition der oberen Atmosphäre (aus *Hargreaves*, 1992).

Wie man aus Abb. 1.2 ersieht, herrschen bis in eine Höhe von gut 150 km molekularer Stickstoff und Sauerstoff vor, mit Beimengungen anderer Spurengase. Zur Modellierung der *Farley-Buneman*-Instabilität in dieser Höhe ist es also ausreichend, diese beiden Gase als Stoßpartner zu verwenden. In größeren Höhen müßte man auch noch molekularen Sauerstoff in das Modell mit einbeziehen. Das numerische Modell der Stöße, welches in Abschnitt 2.4 vorgestellt wird, läßt sich problemlos auf weitere Gase erweitern, sofern die experimentell zu bestimmenden energieabhängigen Stoßquerschnitte vorliegen.

Ionosphäre

Der ionisierte Teil der Atmosphäre, die *Ionosphäre*, enthält eine signifikante Anzahl von freien Elektronen und positiven Ionen. In niedrigen Höhen unterhalb von 90 km gibt es noch einen kleinen Anteil an negativ geladenen Ionen. Die Ionosphäre ist quasi-neutral, d. h. in einem gegebenen Volumen befinden sich im Mittel gleichviel positive und negative Ladungen. Obwohl die Ionosphäre nur schwach ionisiert ist – der Ionisierungsgrad beträgt in 100 km Höhe etwa 10^{-7} – bestimmen die geladenen Teilchen

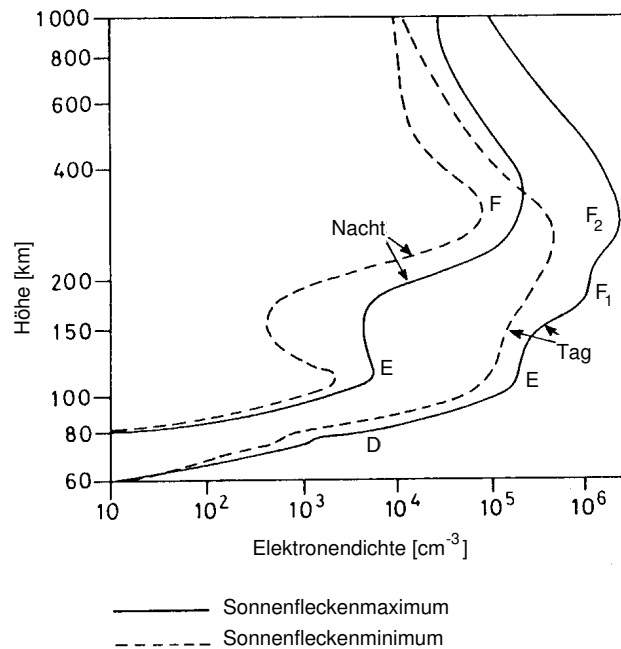


Abbildung 1.3: Typische Elektronendichte in mittleren Breiten als Funktion der Höhe (nach W. Swider, zitiert aus *Hargreaves*, 1992)

die elektrischen Eigenschaften und damit die meisten der physikalischen Prozesse in der Ionosphäre.

Wie in Abschnitt 1.1.1 bereits erwähnt, wird die Ionosphäre noch weiter in Schichten unterteilt, die historisch bedingt *D*- *E*- und *F*-Schicht genannt werden (Abb. 1.3). Die *E*-Schicht zeichnet sich dadurch aus, daß in ihr sowohl am Äquator als auch in polaren Breiten große Ströme fließen können. Diese Hall-Ströme, die durch ein äußeres elektrisches Feld angetrieben werden, können nur in der *E*-Schicht fließen, da in tieferen Schichten sowohl die Elektronen als auch die Ionen durch Stöße mit dem Neutralgas an der $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift gehindert werden, während sich in höheren Schichten beide Teilchensorten magnetisiert sind und die gleiche $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Driftbewegung ausführen, woraus sich netto kein Strom ergibt. Wegen der unterschiedlichen Gyration- und Stoßfrequenzen liegt der Übergang von dem stoßdominierten zum magnetisierten Bereich für Elektronen in etwa 90 km Höhe und für Ionen bei etwa 125 km. Diese beiden Übergangszonen bilden die Ränder der *E*-Schicht.

Die Ionosphäre zeigt ein weites Spektrum von Irregularitäten, d. h. Schwankungen der Elektronendichte. Es würde hier zu weit führen, all die verschiedenen Effekte aufzulisten, die hierzu beitragen. Im folgenden Abschnitt wird nur die modifizierte Zwei-strominstabilität, nach ihren Entdeckern auch *Farley-Buneman*-Instabilität genannt, als wichtigste Plasmainstabilität der Ionosphäre betrachtet.

1.2 Farley-Buneman-Instabilität

In diesem Abschnitt werden die bisherigen Kenntnisse der *Farley-Buneman*-Instabilität zusammengefaßt, aus denen sich dann die offenen Fragen ergeben, die in dieser Arbeit untersucht werden sollen. Diese Darstellung ist keinesfalls vollständig, vielmehr sollen hier nur diejenigen Aspekte beschrieben werden, die für die vorliegende Arbeit von Belang sind. Für eine umfassendere Darstellung siehe z. B. *Farley* (1985) oder *Fejer und Kelley* (1980).

1.2.1 Zur Geschichte

Hier soll nur ein kurzer Einblick gegeben werden, *Schlegel* (1990) beschreibt die historische Entwicklung ausführlich, besonders im Hinblick auf Beobachtungen. Eine ausführliche Darstellung der Geschichte der experimentellen Untersuchung der *Farley-Buneman*-Instabilität, die die verschiedenen Radareinrichtungen und Raketenkampagnen mit ihren jeweiligen Vor- und Nachteilen beschreibt, findet man auch in einem Übersichtsartikel von *Sahr und Fejer* (1996).

Die ersten Beobachtungen, die – wie man heute weiß – auf die *Farley-Buneman*-Instabilität zurückzuführen sind, stammen von *Appleton et al.* (1937) und *Harang und Stoffregen* (1940). Diese Autoren beschrieben die Rückstreuung von Radiowellen im HF- und VHF-Bereich an Strukturen, die offenbar im Zusammenhang mit sichtbaren Polarlichtern standen. Im englischen Sprachgebrauch wird diese Erscheinung mit „radio aurora“ bezeichnet, im Deutschen wird die etwas unglückliche Übersetzung „Radiopolarlicht“ verwendet.

Funkamateure erkannten schnell, daß sich dieser Effekt dazu eignet, übergroße Reichweiten bei der Meterwellenkommunikation zu erreichen (*Moore*, 1951), auch bei der Nachrichtenübertragung im 2. Weltkrieg spielte er eine große Rolle (vgl. *Lange-Hesse*, 1968). Gezielte Forschung auf diesem Gebiet brachte in den fünfziger Jahren drei wichtige Ergebnisse (*Moore*, 1951; *Dyce*, 1955):

- die Rückstreuung der Radiowellen tritt nur während geomagnetisch gestörter Bedingungen auf
- die Rückstreuung ist nur dann möglich, wenn die Ausbreitungsrichtung der Wellen einen Winkel von etwa 90° mit dem Erdmagnetfeld bildet
- die Rückstreuzentren befinden sich in etwa 110 km Höhe

Selbst bei geringer Abweichung von der Senkrechten, auch Aspektwinkelbedingung genannt, verringerte sich die Rückstreuleistung um mehr als eine Größenordnung. Es wurde deutlich, daß die Rückstreuung nicht einfach eine Totalreflektion an

vertikalen Ionisationsflächen (*Lovell et al.*, 1947) war, die – wie das sichtbare Polarlicht – durch einfallende energiereiche Teilchen verursacht werden, sondern tatsächlich eine Streuung an Strukturen, deren Wellenlänge die halbe Wellenlänge der Radiosignale betrug (*Booker*, 1956). In den sechziger Jahren wurde herausgefunden, daß diese Strukturen, die die Rückstreuung bewirken, durch eine Plasmainstabilität hervorgerufen werden (*Leadabrand et al.*, 1965; *Unwin und Knox*, 1968).

Grundlage zu dieser Erkenntnis waren Arbeiten von *Farley* (1963) und *Buneman* (1963), denen es gelang, diese Plasmainstabilität theoretisch zu beschreiben und eine Dispersionsrelation aufzustellen. Von der Zweistrominstabilität ausgehend, die für stoßfreie Plasmen bereits recht gut erforscht war (*Penrose*, 1960), konnten sie zeigen, daß die Anwesenheit eines Magnetfeldes und die Stöße der Elektronen und Ionen mit den Neutralgasteilchen völlig andere Effekte hervorrief. Die Relativgeschwindigkeit v_d zwischen Elektronengas und Ionengas muß nur knapp über der Ionenschallgeschwindigkeit liegen, um diese Instabilität anzuregen. Diese spezielle Form der Zweistrominstabilität wird deshalb „modifizierte Zweistrominstabilität“ oder auch „*Farley-Buneman*-Instabilität“ genannt. Damit war auch geklärt, warum die Erscheinung des Radiopolarlichts erst ab einem Mindestwert der geomagnetischen Unruhe auftritt: Ein Schwellenwert der Relativgeschwindigkeit v_d muß überschritten sein, die Geschwindigkeit hängt aber von der geomagnetischen Unruhe ab.

Ähnliche Ergebnisse für die Rückstreuung von Radiowellen wurden auch am geomagnetischen Äquator gefunden (z. B. *Bowles et al.*, 1960). Auch dort gilt die Aspektwinkelbedingung, d. h. der Wellenvektor muß senkrecht zum Erdmagnetfeld stehen. Die Rückstreuung tritt am Äquator allerdings praktisch unabhängig von geomagnetischen Störungen auf. Dies liegt in einem anderen Anregungsmechanismus der Instabilität begründet. Die primäre Ursache ist hier der sogenannte „äquatoriale Elektrojet“, der durch Polarisationsfelder angetrieben wird, die durch die Dynamowirkung des globalen Windsystems verursacht werden (siehe z. B. *Untiedt*, 1967).

In den siebziger Jahren wurde die Abhängigkeit der rückgestreuten Leistung von Größen wie dem Aspektwinkel, der Richtung der Relativgeschwindigkeit \hat{v}_d oder der Wellenlänge der Radiosignale weiter systematisch untersucht. Gleichzeitig fand eine weitere Meßgröße zunehmende Beachtung, nämlich die Doppler-Verschiebung des rückgestreuten Signals, die als Phasengeschwindigkeit der instabilen Wellen interpretiert wurde. Dies führte vom eigentlichen Studium der *Farley-Buneman*-Instabilität weg zu einer Anwendung des Effekts zur geophysikalischen Diagnostik. Ausgehend von der vereinfachten Dispersionsrelation (1.1) ergibt sich, daß die gemessene Doppler-Verschiebung direkt proportional zur Relativgeschwindigkeit v_d zwischen Elektronen und Ionen ist. Diese Geschwindigkeit ist aber ein direktes Maß für die in der *E*-Schicht herrschenden elektrischen Felder. Auf diese Weise konnte das Verständnis der Magnetosphären-Ionosphären-Kopplung deutlich vertieft werden (z. B. *Baum-*

johann et al., 1980).

Ein neuer Gesichtspunkt in der Erforschung der *Farley-Buneman*-Instabilität ergab sich ab 1980 mit der Entdeckung einer unbekanntes Wärmequelle in der polaren *E*-Schicht. *Schlegel et al.* (1980) und *Schlegel und St.-Maurice* (1981) hatten mit Hilfe der *incoherent scatter* Anlage in Chatanika/Alaska gefunden, daß die Elektronentemperatur im Bereich zwischen 110 und 115 km Höhe stark zunimmt, wenn die elektrischen Felder einen bestimmten Wert überschreiten. *St.-Maurice et al.* (1981) konnten diese Aufheizung eindeutig auf die *Farley-Buneman*-Instabilität zurückführen. Durch eine nichtlineare Welle-Teilchen-Wechselwirkung geben die instabilen Wellen Energie an das Elektronengas ab.

Diese Aufheizung der Elektronen soll in der vorliegenden Arbeit mit numerischen Modellen weiter untersucht werden. Hierzu ist es zunächst notwendig, ein geeignetes Modell zu finden, welches die nichtlinearen Wechselwirkungen beschreiben kann. *Oppenheim et al.* (1995) haben ein numerisches Modell für die *Farley-Buneman*-Instabilität im äquatorialen Elektrojet vorgestellt, das allerdings keine Aufheizung der Elektronen vorsieht. Für die schwächeren elektrischen Felder² am Äquator ist das ausreichend, dort ist keine erhöhte Elektronentemperatur beobachtet worden. Leider läßt sich dies Modell nicht auf die polare *E*-Schicht übertragen. Verschiedene Möglichkeiten der Modellierung eines Plasmas werden in Kap. 2 vorgestellt und auf ihre Eignung zur Untersuchung der Elektronenheizung hin untersucht.

1.2.2 Theorie

Die *Farley-Buneman*-Instabilität ist eine sogenannte Mikroinstabilität, d. h. sie kann über die Verteilungsfunktion des Plasmas beschrieben werden. Der Name „Zweistrominstabilität“ bezeichnet die Ursache: Zwei Plasmakomponenten müssen relativ zueinander strömen, hier sind dies die Elektronen mit der $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Driftgeschwindigkeit und die Ionen in Ruhe relativ zum Neutralgas.

Wenn wir annehmen, daß beide Plasmakomponenten relativ zueinander ruhen, so daß nur die thermischen Bewegungen der Teilchen vorhanden sind (Abb. 1.4, links), kann das Plasma mit einer Verteilungsfunktion beschrieben werden, die sich aus einer schmalen Maxwell-Verteilung der Ionen und, wegen der geringeren Masse, einer breiten Maxwell-Verteilung der Elektronen zusammensetzt. Die Dichteverteilung im Plasma ist weder zeitlich noch räumlich konstant, es finden vielmehr ständig thermische Fluktuationen statt, die man als elektrostatische Wellen ansehen kann. Diese Wellen stehen mit den Teilchen in ständiger Wechselwirkung. Einer Teilchengeschwindigkeit v_0 entsprechen dabei Wellen der Frequenz $\omega_0 = k \cdot v_0$. Teilchen mit einer Geschwin-

²Die physikalischen Parameter der *E*-Schicht am Äquator und in polaren Breiten sind in Anhang A zusammengefaßt.

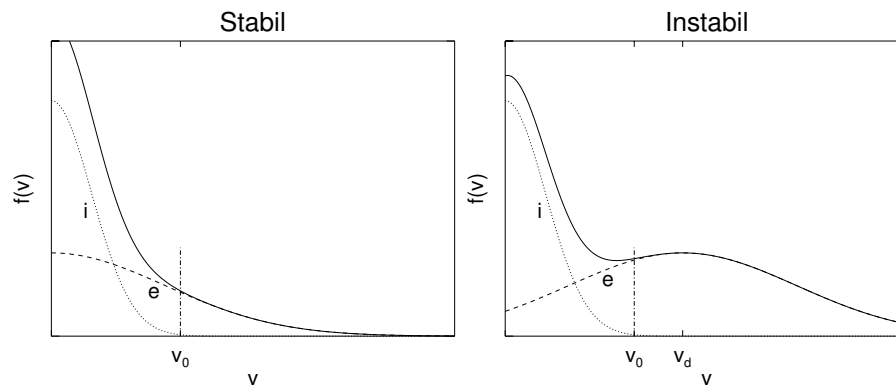


Abbildung 1.4: Schematische Darstellung der Verteilungsfunktion im ruhenden Plasma (links) und im Fall einer Drift v_d zwischen Elektronen (e) und Ionen (i)

digkeit $v > v_0$ liefern Energie in diese Wellen, solche mit $v < v_0$ entziehen ihnen Energie. Bei monoton abnehmender Verteilungsfunktion gibt es in der Umgebung von v_0 immer mehr Teilchen mit $v < v_0$ als solche mit $v > v_0$. Insgesamt wird den Wellen mehr Energie entzogen als zugeführt. Die Wellen können also nicht anwachsen, das Plasma bleibt stabil.

Eine andere Situation ergibt sich bei einer hinreichend großen relativen Geschwindigkeit zwischen Ionen und Elektronen (Abb. 1.4, rechts). In diesem Fall gibt es einen Geschwindigkeitsbereich, in dem die Verteilungsfunktion ansteigt. Es gibt in der Umgebung von v_0 also mehr Teilchen mit $v > v_0$ als mit $v < v_0$. Den Wellen wird insgesamt mehr Energie zugeführt als entzogen, sie wachsen an und das Plasma wird instabil.

Die *Farley-Buneman*-Instabilität ist eine spezielle Form der allgemeinen Zwei-strominstabilität. Bei letzterer muß die Driftgeschwindigkeit v_d in der Größenordnung der thermischen Geschwindigkeit der Elektronen liegen, damit die Instabilität ange-regt wird. Ist jedoch ein Magnetfeld vorhanden, das senkrecht zur Driftrichtung liegt, so liegt der Schwellwert von v_d in der Nähe der Ionenschallgeschwindigkeit. Dieser Fall liegt bei der *Farley-Buneman*-Instabilität vor. Er kommt dadurch zustande, daß die Elektronen sich nur längs der Magnetfeldlinien frei bewegen können, während sie senkrecht dazu Gyrationen ausführen. Die relative Driftgeschwindigkeit zwischen Elektronen und Ionen ergibt sich aus dem unterschiedlichen Stoßverhalten: Die Elektronen vollenden oberhalb von 75 km mehrere Gyrationen, bevor sie mit einem Neutralgasteilchen zusammenstoßen. Ihre Gyrationenfrequenz Ω_e ist groß gegen die Stoßfrequenz ν_e , sie sind „magnetisiert“. Anders hingegen die Ionen: Für sie gilt $\Omega_i = \nu_i$ in einer Höhe von etwa 125 km. Da die Stoßzahl proportional zur Dichte ist, nimmt ν_i zu niedrigeren Höhen hin zu, im Bereich der *E*-Schicht sind die Ionen also

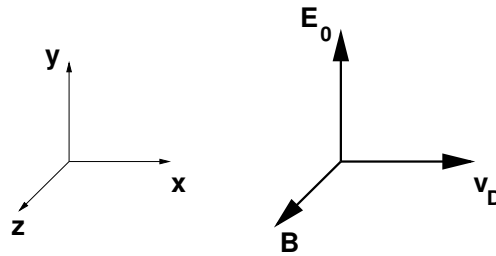


Abbildung 1.5: Koordinatensystem zur Beschreibung der *Farley-Buneman*-Instabilität. \mathbf{B} ist das Erdmagnetfeld, \mathbf{E}_0 das in der Magnetosphäre erzeugte äußere elektrische Feld, \mathbf{v}_D ist die Driftgeschwindigkeit der Elektronen.

stoßdominiert und folgen der Bewegung des Neutralgases. Ein äußeres elektrisches Feld senkrecht zum Magnetfeld kann daher die Elektronen ungehindert beschleunigen, die Ionen bleiben aber mit dem Neutralgas in Ruhe, eine relative Drift bildet sich. In der polaren Ionosphäre steht das Magnetfeld fast senkrecht zur Erdoberfläche, ein elektrisches Feld wird durch die magnetosphärische Konvektion meist in Nord-Süd-Richtung wirksam, die relative Driftgeschwindigkeit bildet sich in Ost-West-Richtung aus. Wie man sieht, stellt sie einen Hall-Strom dar, den sogenannten „polaren Elektrojet“.

Die *Farley-Buneman*-Instabilität wird nur in einem recht schmalen Höhenbereich von 100 - 120 km beobachtet. Oberhalb dieser Schicht nimmt die relative Driftgeschwindigkeit exponentiell ab, da auch die Ionen mit zunehmender Höhe immer stärker magnetisiert werden. Oberhalb von 160 km driften beide Plasmakomponenten praktisch gleich schnell in die gleiche Richtung. Unterhalb 100 km nimmt die Ionisierung stark ab, so daß dort der „Träger“ der Instabilität verschwindet.

Da die Schwerkraft keinen nennenswerten Einfluß auf so kleinskalige Phänomene wie die *Farley-Buneman*-Instabilität hat, ist es sinnvoller, statt der Richtung der Schwerkraft die Richtung des Erdmagnetfeldes als ausgezeichnete Richtung im Koordinatensystem zu verwenden (vgl. Abb. 1.5). Die Ebene, in der sich die Instabilität entwickelt, liegt dann in der $x - y$ -Ebene, und nicht schief im Koordinatensystem.

Lineare Zweiflüssigkeitstheorie

Reduziert man die Zweiflüssigkeitsgleichungen unter Vernachlässigung des Dichtegradienten auf eine Dimension parallel zur Driftrichtung der Elektronen und führt eine Fouriertransformation durch, so erhält man folgende Dispersionsrelation (vgl. z. B. *Oppenheim*, 1995):

$$(\omega^2 + i\omega\nu_i - C_s^2 k^2) - iv_d \Omega_i \kappa k + \frac{m_e}{m_i} \nu_e (1 - \kappa^2) i\omega = 0 \quad (1.1)$$

Hierbei bezeichnen $C_s = \sqrt{(T_i + T_e)/m_i}$ die Ionenschallgeschwindigkeit, v_d die Driftgeschwindigkeit der Elektronen, $\kappa = \Omega_e/\nu_e$ den Hall-Koeffizienten der Elektronen, Ω die Gyrationfrequenz, ν die Stoßfrequenz. Diese Dispersionsrelation läßt sich nach der komplexen Frequenz ω lösen, wenn man voraussetzt, daß die Wachstumsrate $\Im(\omega)$ klein gegenüber der Frequenz $\Re(\omega)$ und der Stoßfrequenz ν_e ist und außerdem $\kappa \gg 1$ ist:

$$\Re(\omega) = \frac{v_d k}{1 + \Psi_0} \quad (1.2a)$$

$$\Im(\omega) = \frac{\Re(\omega) - C_s^2 k^2}{\nu_i (1 + \Psi_0^{-1})} \quad (1.2b)$$

$$\Psi_0 = \frac{\nu_e \nu_i}{\Omega_e \Omega_i} \quad (1.2c)$$

Die Instabilität entsteht, wenn der Imaginärteil der Frequenz größer ist als Null. Dies ist der Fall, wenn die Driftgeschwindigkeit größer ist als die Ionenschallgeschwindigkeit multipliziert mit einem Faktor der Größenordnung eins:

$$\Im(\omega) > 0 \Rightarrow v_d > C_s (1 + \Psi_0). \quad (1.3)$$

Aus der linearisierten Zweiflüssigkeitstheorie resultiert eine Wachstumsrate der Instabilität, die zu kleinen Wellenlängen hin unbegrenzt ansteigt. Dies unphysikalische Ergebnis rührt daher, daß eine Flüssigkeitsbeschreibung nur für Wellenlängen, die größer sind als die kinetischen Längen wie mittlere freie Weglänge $\lambda_m \approx 0.57m$, Debyelänge $\lambda_D = 2.4mm$ oder Gyrationradius $r_L \approx 14mm$, gerechtfertigt ist. Der Gültigkeitsbereich der Zweiflüssigkeitstheorie ist also überschritten, es ist daher notwendig, eine kinetische Dispersionsrelation aufzustellen.

Lineare kinetische Theorie

Die erste kinetische Theorie der *Farley-Buneman*-Instabilität stammt von *Farley* (1963). *Schmidt und Gary* (1973) erweiterten diese Theorie und bestimmten Wachstumsraten. Da diese Rechnungen und die Wachstumsraten für die Wahl der numerischen Modelle von Bedeutung sind, soll diese Theorie hier kurz wiedergegeben werden.

Da die kinetische Dispersionsrelation für die Bestimmung der Größe des Simulationsgebiets in Kap. 2 von ausschlaggebender Bedeutung ist, soll hier kurz die Herleitung von *Farley* in der Notation dieser Arbeit vorgestellt werden. Anders als in der Originalarbeit ist hier vereinfachend vorausgesetzt, daß sich die Wellen in Driftrichtung ausbreiten, $\mathbf{k} \parallel \mathbf{v}_D$.

Die Stromdichte \mathbf{j} in einem Plasma folgt Ohms Gesetz:

$$\mathbf{j} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E} \quad (1.4a)$$

Hierbei bezeichnet E das elektrische Feld. Die Strom- und Ladungsdichte müssen außerdem die Kontinuitätsgleichung und die Poissongleichung erfüllen.

$$\nabla \cdot \mathbf{j} + \dot{\rho} = 0 \quad (1.4b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho/\varepsilon_0 \quad (1.4c)$$

Aus den Gleichungen (1.4) kann man \mathbf{j} und ρ eliminieren:

$$\nabla(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E}) + \varepsilon_0 \nabla \cdot \dot{\mathbf{E}} = 0 \quad (1.5)$$

\mathbf{E} sei proportional zu $\exp[i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})]$ mit reellem \mathbf{k} und komplexem ω . Der Einfachheit halber sei das Koordinatensystem so gewählt, daß $\mathbf{k} = (0, 0, k)$, dann ist für longitudinale Wellen auch $\mathbf{E} = (0, 0, E)$. Gleichung (1.5) wird damit zu

$$\sigma_{xx} E + i\omega \varepsilon_0 E = 0 \quad (1.6)$$

wenn man $\sigma(\omega, k)$ als räumlich konstant voraussetzt. Um nichttriviale Lösungen $E \neq 0$ zu erhalten, muß gelten

$$\sigma_{xx} + i\omega \varepsilon_0 = 0 \quad (1.7)$$

Um die Dispersionsrelation zu erhalten, muß man also lediglich die longitudinale Komponente des Leitfähigkeitstensors bestimmen.

Hierzu beginnt man mit der Verteilungsfunktion der verschiedenen geladenen Teilchen. Diese läßt sich durch die Boltzmann-Gleichung beschreiben. Für ein schwach ionisiertes Plasma kann man den Stoßterm recht gut mit dem BGK-Stoßterm (*Bhatnagar et al.*, 1954) nähern:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \frac{q}{m} \mathbf{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = -\nu \left(f - \frac{n}{n_0} f_0 \right) \quad (1.8)$$

Hierbei ist $f = f(\mathbf{v}, \mathbf{x}, t)$ die zeitabhängige Verteilungsfunktion, $f_0 = f_0(\mathbf{v})$ die anfängliche homogene Verteilungsfunktion, $n = n(\mathbf{x})$ die Teilchendichte und n_0 die anfängliche isotrope Teilchendichte. Zur Linearisierung zerlegt man f in $f = f_0(\mathbf{v}) + f_1(\mathbf{v}, \mathbf{x}, t) + \mathcal{O}(2)$, wobei die Terme zweiter und höherer Ordnung vernachlässigt werden. Mit einem ebene-Welle-Ansatz, $f_1 \propto \exp[i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})]$ erhält man

$$i(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) f_1 + \frac{q}{m} \mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}} + \frac{q}{m} (\mathbf{v} \times \mathbf{B}_0) \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{v}} = -\nu \left(f_1 - \frac{n_1}{n_0} f_0 \right), \quad (1.9)$$

wobei n_0 und n_1 die Teilchendichten zu f_0 und f_1 nach der Definition

$$n(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbf{v}} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d^3 v \quad (1.10)$$

sind. Nachdem man f_1 gefunden hat, bestimmt man die Stromdichte der einzelnen Teilchensorten nach

$$\mathbf{j} = q \int_{\mathbf{v}} \mathbf{v} f_1 d^3v \quad (1.11)$$

und erhält aus Gleichung (1.4a) die Komponenten des Leitfähigkeitstensors. Dieser Schritt ist mathematisch recht mühsam, weswegen hier nur das Ergebnis zitiert werden soll: Nimmt man für f_0 eine Maxwellverteilung

$$f_0(v) = (2\pi k_B T/m)^{3/2} n_0 \exp(-mv^2/2k_B T) \quad (1.12)$$

an, ergibt sich folgende Dispersionsrelation:

$$y_e(\theta_e - \zeta_e, \psi_e, \phi_e) + \frac{T_e}{T_i} y_i(\theta_i, \psi_i, \phi_i) + i\lambda_D^2 k^2 = 0 \quad (1.13)$$

Hierbei steht y für

$$y = \frac{(\theta - i\psi)J + i}{1 - \psi J} \quad (1.14)$$

mit

$$J(\theta - i\psi, \phi) = \int_0^\infty \exp[-i(\theta - i\psi)t - \phi^{-2} \sin^2(\phi t/2)] dt \quad (1.15)$$

Die Größen θ , ϕ , ψ und ζ sind die normierte Schwingungsfrequenz ω , Gyrationfrequenz Ω , Stoßfrequenz ν und Driftgeschwindigkeit v_d :

$$\theta = \frac{\omega}{k} v_{th}^{-1} \sim \frac{\text{Phasengeschwindigkeit}}{\text{thermische Geschwindigkeit}} \quad (1.16a)$$

$$\phi = \frac{\Omega}{k} v_{th}^{-1} \sim \frac{\text{Wellenlänge} / 2\pi}{\text{Larmorradius}} \quad (1.16b)$$

$$\psi = \frac{\nu}{k} v_{th}^{-1} \sim \frac{\text{Wellenlänge} / 2\pi}{\text{freie Weglänge}} \quad (1.16c)$$

$$\zeta = v_d v_{th}^{-1} \sim \frac{\text{Driftgeschwindigkeit}}{\text{thermische Geschwindigkeit}} \quad (1.16d)$$

mit der jeweils entsprechenden thermischen Geschwindigkeit v_{th} . Dieser noch eher unhandliche Ausdruck für die Dispersionsrelation läßt sich weiter vereinfachen. Da die Ionen stoßdominiert sind, gilt $\nu \gg \Omega \Leftrightarrow \psi \gg \phi$. Damit läßt sich Glg. (1.14) durch die Plasmadispersionsfunktion Z (siehe z. B. *Fried und Conte*, 1961) ausdrücken:

$$y_i = -\frac{1}{2\psi} \frac{Z'(\beta_i)}{Z(\beta_i) - i}, \quad Z'(\beta) = \frac{dZ}{d\beta} \quad (1.17)$$

mit $\beta_i = -\theta_i + i\psi_i$. Eine andere Näherung ist für die Elektronen möglich, hier gilt $\phi \gg 1$ und $\phi \gg \psi$, d. h. der Larmorradius ist klein gegenüber der Wellenlänge und der freien Weglänge. Dann gilt

$$y_e = \frac{i}{2\phi_e^2} \frac{\theta_e - \zeta_e - i\psi_e}{\theta_e - \zeta_e - i\psi_e/2\phi_e^2} \quad (1.18)$$

Setzt man nun die Näherungen (1.17) und (1.18) in die Dispersionsrelation (1.13) ein, so erhält man folgende kinetische Dispersionsrelation der *Farley-Buneman-Instabilität*:

$$\frac{\omega_{pe}^2 (1 + i(\omega - v_d k)/\nu_e)}{v_{th,e}^2 k^2 + 2i\kappa^2 \nu_e (\omega - v_d k)} - \frac{T_e}{T_i} \frac{\omega_{pi} Z'(\frac{-\omega + i\nu_i}{v_{th,i} k})}{2iv_{th,i}\nu_i k Z(\frac{-\omega + i\nu_i}{v_{th,i} k}) + 2v_{th,i}^2 k^2} + 1 = 0 \quad (1.19)$$

Numerische Lösungen dieser Dispersionsrelation werden in Abschnitt 2.1 vorgestellt.

1.2.3 Frühere Simulationsrechnungen

Man könnte vermuten, daß die neuesten theoretischen Erkenntnisse der *Farley-Buneman-Instabilität* mit Hilfe von numerischen Resultaten gewonnen wurden. Dies ist jedoch nicht der Fall, was damit zusammenhängen mag, daß es sich als recht schwierig erwiesen hat, auf diesem Gebiet verwertbare numerische Resultate zu erzielen.

Die ersten Modellrechnungen der *Farley-Buneman-Instabilität* wurden Ende der siebziger Jahre von *Newman* (1979) und *Newman und Ott* (1981) durchgeführt. Hierbei wurde ein Zweiflüssigkeitsmodell verwendet, bei dem eine erhöhte, wellenlängenabhängige Viskosität die Landau-Dämpfung der Ionen bewirken soll. Wie *Oppenheim* (1995) bemerkt hat, hatte allerdings deren Methode zur Lösung der Gleichung für das Potential ein numerisches Problem, das sie nicht lösen konnten. Das gleiche Problem tritt auch beim impliziten *particle-in-cell*-Verfahren auf, welches in dieser Arbeit verwendet wird. Hierauf und wie man das Problem löst wird in Abschnitt 2.3.6 genauer eingegangen. Das wesentliche Resultat ihrer Arbeit war die Feststellung, daß sich die Richtung der Wellenausbreitung von der Driftrichtung der Elektronen wegbewegt.

Der erste wirkliche Vorläufer dieser Arbeit in dem Sinne, daß sie zum ersten Mal ein reines *particle-in-cell*-Verfahren zur Modellierung der *Farley-Buneman-Instabilität* im polaren Elektrojet anwendeten, waren in der Mitte der achtziger Jahre die Rechnungen von *Machida und Goertz* (1988). Da *Schlegel und St.-Maurice* (1981) und *Nielsen und Schlegel* (1985) in den frühen achtziger Jahren eine Aufheizung der Elektronen in der *E*-Schicht in polaren Breiten beobachtet hatten und dies auf die *Farley-Buneman-Instabilität* zurückführten, war es zur Untersuchung dieses Phänomens notwendig, kinetische Effekte der Elektronen zu berücksichtigen. Das Ziel von *Machida und*

Goertz war es, zwischen verschiedenen vorgeschlagenen Mechanismen der Elektronenheizung zu unterscheiden. Ihre Ergebnisse bestätigten den Mechanismus von *Primdahl* (1986), *Robinson* (1986) und *Sudan* (1983) und standen im Widerspruch zu dem Erklärungsversuch von *Schlegel und St.-Maurice* (1981).

Da C. K. Goertz auf so tragische Weise früh verstarb, wurde diese Arbeit leider nicht fortgesetzt.

Thiemann und Schlegel (1994) führten dann diese Rechnungen fort. Deren Resultate haben, wie auch die von *Machida und Goertz*, das Problem, daß sie sich bei periodischen Randbedingungen in einem fundamentalen Mode mit den Wellenzahlen $(1, 1)$ befinden. Dies bedeutet aber, daß die Randbedingungen das Verhalten des Systems bestimmen, also genau das, was man mit periodischen Randbedingungen eigentlich vermeiden will. Des weiteren beschränken sich sowohl *Machida und Goertz* als auch *Thiemann und Schlegel* auf die $v_D - B_0$ - Ebene und können somit den stärksten nichtlinearen Einfluß des $\delta \mathbf{E} \times \mathbf{B}_0$ - Terms nicht berücksichtigen. Ein weiteres numerisches Problem dieser Arbeiten liegt in der Wahl der Gitterweite, die zu numerischen Instabilitäten führt, die letztendlich eine rein numerisch bedingte Aufheizung des Plasmas bewirken, wie in Abschnitt 2.3.3 noch ausführlicher dargestellt wird.

Janhunnen (1992) benutzte ein dreidimensionales Zweiflüssigkeitsmodell, um zu untersuchen, weshalb die Phasengeschwindigkeit der Instabilität gleich der Ionenschallgeschwindigkeit $C_s = \sqrt{k_B(T_i + T_e)/m_i}$ ist, unabhängig von der Stärke des treibenden elektrischen Feldes. Da er eine konstante Elektronentemperatur voraussetzt, ist es mit diesem Modell nicht möglich, die beobachtete Elektronenheizung und ihren Einfluß über die geänderte Ionenschallgeschwindigkeit auf die Instabilität zu berücksichtigen. *Janhunnen* folgert aus seinen Resultaten, daß sich die Wellen nicht exakt senkrecht zum Magnetfeld (Aspektwinkel 0) ausbreiten. Die Resultate dieses Modells befinden sich aber in Moden mit sehr niedrigen Wellenzahlen, was die Schlußfolgerung des Autors zumindest etwas zweifelhaft erscheinen läßt, da das Verhalten des Plasmas von den numerischen Randbedingungen diktiert zu sein scheint.

In einer weiteren Arbeit benutzte *Janhunnen* (1994b) ein *particle-in-cell*-Modell. Hierbei verwendete er die gleiche Geometrie wie in der vorliegenden Arbeit, ein zweidimensionales Simulationsgebiet senkrecht zum Erdmagnetfeld mit periodischen Randbedingungen und drei Geschwindigkeitskomponenten der Teilchen zur Modellierung der Stöße. Bei seinen Rechnungen verwendete *Janhunnen* eine Gitterweite von $\Delta x = \Delta y = 1\lambda_D$, womit er die numerische Instabilität wie bei *Machida und Goertz* und *Thiemann und Schlegel* vermied. Mit einer Größe von $128 \times 128\lambda_D$ ist sein Simulationsgebiet allerdings zu klein, um mehrere der nach der linearisierten kinetischen Dispersionsrelation (1.19) am stärksten instabile Moden zu enthalten. Damit ist auch die Schlußfolgerung dieser Arbeit, daß sich die Wellen nicht exakt zur Driftrichtung der Elektronen ausbreiten, in Frage zu stellen, da die Ausbildung der Wellen von den

periodischen Randbedingungen zu stark beeinflußt werden.

Eine Zusammenfassung des Standes der *particle-in-cell* - Simulationen der *Farley-Buneman*-Instabilität in der *E*-Schicht der Ionosphäre vor der hier vorgelegten Arbeit findet man in dem Übersichtsartikel von *Janhunen* (1995).

Die numerischen Probleme, die in den oben erwähnten früheren Arbeiten auftreten, machen es notwendig, genauer zu untersuchen, auf welche Weise die *Farley-Buneman*-Instabilität in der *E*-Schicht der polaren Ionosphäre modelliert werden kann. Nur auf der Grundlage eines soliden numerischen Verfahrens ist es möglich, ein physikalisch aussagekräftiges Modell zu entwickeln. Diese Suche nach einem neuen, geeigneteren Modell ist das Hauptziel dieser Arbeit. Verschiedene mögliche Ansätze werden in Kapitel 2 vorgestellt und auf ihre Eignung hin untersucht.

Kapitel 2

Numerische Verfahren

In diesem Kapitel werden die Anforderungen an ein numerisches Verfahren zur Untersuchung der *Farley-Buneman*-Instabilität analysiert.

In der theoretischen Plasmaphysik gibt es grundsätzlich zwei Möglichkeiten, ein Plasma mathematisch zu beschreiben: Zum einen *kontinuumsmechanisch* im Rahmen der Magnetohydrodynamik, zum anderen *kinetisch* mittels der Boltzmann-Gleichung oder der Vlasov-Gleichung für stoßfreie Plasmen. Verschiedene hierauf aufbauende Verfahren der numerischen Behandlung von Plasmen werden im folgenden vorgestellt und auf ihre Tauglichkeit zur Behandlung der *Farley-Buneman*-Instabilität untersucht.

Bevor man Modellrechnungen durchführen kann, müssen einige Überlegungen zur Wahl des geeigneten Modells zur Beschreibung des Plasmas getroffen werden. Die ersten beiden Entscheidungen sind (1.) für jede Teilchensorte im Plasma, ob sie kinetisch oder kontinuumsmechanisch behandelt werden muß und (2.) ob die vollen Maxwell-Gleichungen oder eine Vereinfachung davon zu lösen sind. Diese Fragen legen den Typ der Modellrechnung fest. Des weiteren muß (3.) die Geometrie des Problems festgelegt werden, insbesondere die Anzahl der erforderlichen räumlichen Dimensionen. Außerdem benötigt man noch (4.) geeignete Anfangsbedingungen und (5.) Randbedingungen für die Teilchen und Felder.

2.1 Anforderungen

Für die Wahl des geeigneten Simulationsverfahrens ist es zunächst einmal notwendig, die wesentlichen physikalischen Einflüsse bei der *Farley-Buneman*-Instabilität herauszustellen, damit die unwesentlichen Effekte vernachlässigt werden können.

Kinetische Effekte der Ionen spielen eine wesentliche Rolle, wie man sieht, wenn man die eindimensionale Dispersionsrelation betrachtet (Abb. 2.1). Löst man für das linearisierte Zweiflüssigkeitsmodell die Dispersionsrelation (1.1), so steigt die Wachs-

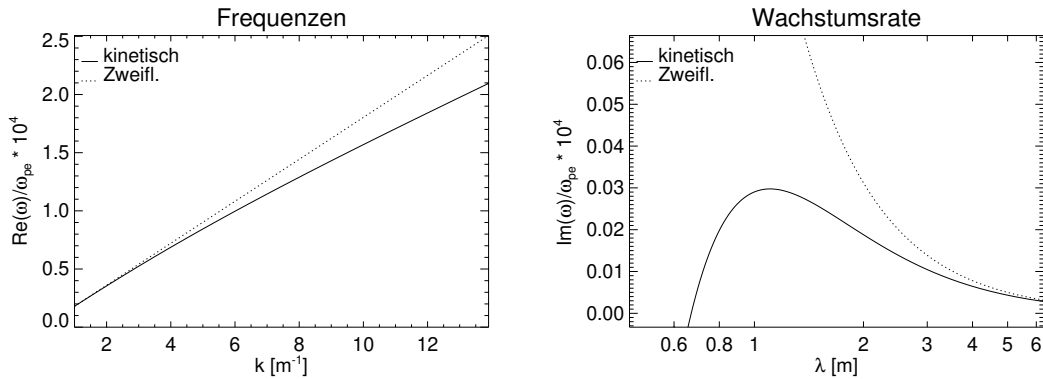


Abbildung 2.1: Lösung der eindimensionalen linearisierten Dispersionsrelation für $|E_{ext}| = 60 \text{ mV/m}$, Massenverhältnis $m_i/m_e = 55000$, Temperatur $T_e = T_i = 250 \text{ K}$.

tumsrate zu kleinen Wellenlängen unbegrenzt an, während aus der kinetischen Dispersionsrelation (1.19) eine Instabilität mit einem maximalen Wachstum bei einer bestimmten Wellenlänge $\lambda > 0$ folgt.

Die in der linearen kinetischen Theorie am stärksten instabile Wellenlänge beträgt je nach Stärke des äußeren elektrischen Feldes etwa 100 – 400 Debyelängen, das sind in der E -Schicht ungefähr 0.25 – 1m. Die vertikale Ausdehnung der E -Schicht beträgt einige 10 Kilometer, übersteigt diese Wellenlänge also um mehrere Größenordnungen, so daß Randeﬀekte keine Rolle spielen und das Plasma als unendlich ausgedehnt angenommen werden kann. Da man natürlich nur ein endliches Gebiet numerisch behandeln kann, verwendet man periodische Randbedingungen in jeder Raumrichtung. Hierdurch und durch die Verwendung eines räumlichen Gitters wird das kontinuierliche Spektrum von Wellenvektoren eines unendlich ausgedehnten Plasmas auf diskrete Werte $k = 2\pi i \Delta x / L$ eingeschränkt, i läuft über die Gitterpunkte. Dies ist nur dann zulässig, wenn die diskreten k -Werte im physikalisch bedeutsamen Teil des Spektrums genügend dicht liegen. Da diese Anforderung schwer zu quantifizieren ist, begnügt man sich statt dessen mit der direkt anschaulichen Bedingung, daß das Ergebnis der Modellrechnung sich nicht in einem fundamentalen Mode $k = 1$ befinden soll. Dies bedeutet, daß das Simulationsgebiet mehrere Wellenzüge umfassen soll, damit z. B. nichtlineare Modenkopplungen möglich sind. Eine weitere Bedingung für die Verwendung von periodischen Randbedingungen ist, daß die Korrelationslängen der physikalischen Größen kleiner als die Größe des Rechengebiets sein müssen. Diese Korrelationslängen sind aber *a-priori* nicht bekannt, so daß man aus dieser Bedingung keine Abschätzung der erforderlichen Größe des Rechengebiets gewinnen kann.

Da man bei den Messungen eine Aufheizung der Elektronen beobachtet und die Erklärung dieses Effekts weiterhin Gegenstand einer kontroversen Diskussion (*Hamza und St-Maurice*, 1995; *Schlegel und St.-Maurice*, 1981) ist, muß das Verfahren in der

Lage sein, eine Aufheizung und auch eine eventuell auftretende Nichtgleichgewichtsverteilung der Elektronen zu beschreiben. Die Instabilität entwickelt sich innerhalb einer sehr kurzen Zeitspanne, so daß eine Aufheizung des Neutralgases vernachlässigt werden kann.

Radarbeobachtungen zeigen außerdem, daß sich die Wellen nicht exakt in Drift-richtung, also senkrecht zum Magnetfeld und zum elektrischen Feld, ausbreiten, sondern einen kleinen Winkel mit ihr bilden. Daher ist eine eindimensionale Simulation nicht ausreichend, das Verfahren muß mindestens die Ebene senkrecht zum Magnetfeld beschreiben.

Das konstante Erdmagnetfeld überwiegt bei weitem das vom Plasma hervorgerufene Magnetfeld, so daß in guter Näherung $\partial \mathbf{B} / \partial t = 0$ gilt. Die E -Schicht ist ein Plasma mit einem niedrigen β , dem Verhältnis zwischen Druck und magnetischer Energiedichte. Es ist daher möglich, eine elektrostatische Näherung der Maxwell-Gleichungen zu verwenden. Da diese Näherung keine Wellenlösungen enthält, gibt es keine Courant-Friedrichs-Levi-Bedingung (*Courant und Hilbert*, 1993), die die Zeitschrittweite bei einer numerischen Lösung der vollen Maxwell-Gleichungen einschränkt.

Da die hier betrachteten Wellenlängen in der Größenordnung von einem Meter liegen und damit viel kleiner sind als die Skalenhöhe der ionosphärischen E -Schicht, können die Gradienten der Teilchendichte vernachlässigt werden. Hierdurch wird gleichzeitig die längerwellige Gradient-Drift-Instabilität unterdrückt, die hier nicht weiter betrachtet werden soll.

Der Einfluß der Schwerkraft auf kleinskalige Effekte wie die *Farley-Buneman*-Instabilität ist vernachlässigbar gering.

2.2 Kontinuumsmechanische Verfahren

2.2.1 Magnetohydrodynamik

Eine besonders in astrophysikalischen Problemen häufig verwendete Möglichkeit zur Modellierung von Plasmen ist die Beschreibung durch MHD - Gleichungen (siehe z. B. *Kippenhahn und Möllenhoff*, 1975, §16):

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \quad (2.1a)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.1b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.1c)$$

$$\mathbf{j} = \sigma \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right) \quad (2.1d)$$

$$\rho_m \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] = -\nabla P + \frac{1}{c} \mathbf{j} \times \mathbf{B} + \rho_m \eta \Delta \mathbf{v} \quad (2.1e)$$

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v}) \quad (2.1f)$$

$$P = P(\rho_m, T) \quad (2.1g)$$

Hierbei bezeichnet \mathbf{B} die magnetische Induktion, \mathbf{j} die Stromdichte, \mathbf{E} die elektrische Feldstärke, \mathbf{v} die makroskopische Strömungsgeschwindigkeit, c die Lichtgeschwindigkeit, σ die Leitfähigkeit, ρ_m die Massendichte, η die kinematische Viskosität, P den Druck und T die Temperatur.

Man hat dann ein Anfangs-Randwertproblem zu lösen. Zur numerischen Behandlung sind diese Gleichungen noch geeignet zu diskretisieren. Bei dieser Beschreibung des Plasmas sind allerdings sämtliche kinetischen Effekte außer der kinematischen Viskosität vernachlässigt worden. Diese Beschreibung ist nur für großskalige Phänomene geeignet.

2.2.2 Zweiflüssigkeitsmodell

Eine weitere Möglichkeit zur Modellierung der *Farley-Buneman*-Instabilität ist die Verwendung von getrennten Flüssigkeitsgleichungen für das Elektronen- bzw. Ionen-gas, wie in der Arbeit von *Newman und Ott* (1981):

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n \mathbf{v}_i) = 0 \quad (2.2a)$$

$$\frac{d \mathbf{v}_i}{dt} = -\frac{1}{nm_i} \nabla P_i + \frac{e}{m_i} (\mathbf{E}_0 - \nabla \phi + \mathbf{v}_i \times \mathbf{B}) - \nu_i \mathbf{v}_i - \mu \nabla^2 \mathbf{v}_i \quad (2.2b)$$

$$0 = -\frac{1}{nm_e} \nabla P_e - \frac{e}{m_e} (\mathbf{E}_0 - \nabla \phi + \mathbf{v}_i \times \mathbf{B}) - \nu_e \mathbf{v}_e \quad (2.2c)$$

$$\nabla \cdot (n \mathbf{v}_e) = \nabla \cdot (n \mathbf{v}_i) \quad (2.2d)$$

Hierbei bezeichnen n , \mathbf{v} und p Plasmadichte, Geschwindigkeit und Druck, die Indizes E und I stehen für Elektronen und Ionen. Der Druck ist über die isotherme Zustandsgleichung $\nabla P = k_B T \nabla n$ definiert. \mathbf{E}_0 ist das äußere elektrische Feld, ϕ das elektrostatische Potential, \mathbf{B} das konstante Erdmagnetfeld. Die Stoßfrequenzen ν_e und ν_i beschreiben Stöße mit dem Neutralgas. Ein Viskositätsterm $\mu \nabla^2 \mathbf{v}_i$ soll die Landau-Dämpfung bei kurzen Wellenlängen wiedergeben. *Newman und Ott* selbst stellen fest, daß dieser Ansatz für die Ionen fragwürdig ist, da die freie Weglänge der Ionen größer als die Wellenlänge der *Farley-Buneman*-Instabilität ist. Des weiteren wird angenommen, daß das Plasma quasineutral ist, daß die Trägheit der Elektronen vernachlässigbar ist und daß die Elektronen und Ionen isothermal sind, $T_e = T_i$. Die letzte Annahme

schließt also die Möglichkeit einer Aufheizung der Elektronen von vornherein aus dem Modell aus.

Da der Prozeß, der die Aufheizung der Elektronen in der *Farley-Buneman*-Instabilität bewirkt, nicht bekannt ist, lassen sich hierfür keine Ratengleichungen angeben, die den Prozeß quantitativ beschreiben. Wenn der Prozeß, der zur Elektronenheizung bei der *Farley-Buneman*-Instabilität führt, identifiziert ist, könnte es möglich sein, anhand der Ergebnisse aus Modellrechnungen genäherte Ratengleichungen zu finden, die dann eine kontinuumsmechanische Beschreibung des Problems erlauben.

Für den äquatorialen Elektrojet, für den *Newman und Ott* das Modell entwickelt hatten, ist die Annahme einer konstanten Temperatur physikalisch sinnvoll. Für die Behandlung der *Farley-Buneman*-Instabilität im polaren Elektrojet ist dies Modell allerdings nicht geeignet.

2.3 Kinetische Verfahren

Kinetische Vorgänge in Plasmen werden durch die Boltzmann-Gleichung

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\mathbf{F}}{m_s} \cdot \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{v}} = \left(\frac{\partial f_s}{\partial t} \right)_{\text{Stöße}} \quad (2.3)$$

beschrieben. Hierbei ist $f_s(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ die Verteilungsfunktion der s -ten Plasmakomponente, \mathbf{F} ist die Summe der Kräfte auf die Teilchen, das elektrische (\mathbf{E}) und magnetische (\mathbf{B}) Feld ist durch die Maxwell-Gleichungen gegeben, wobei die Quellterme durch die Momente aller Plasmakomponenten ($s = 1, \dots, M$) bestimmt werden:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi \sum_{s=1}^M q_s \int f_s d\mathbf{v} \quad (2.4a)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \sum_{s=1}^M q_s \int f_s \mathbf{v} d\mathbf{v} \quad (2.4b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.4c)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.4d)$$

2.3.1 Vlasov-Verfahren

Für den Fall stoßfreier Plasmen ohne äußere Kräfte geht die Boltzmann-Gleichung (2.3) in die Vlasov-Gleichung

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{x}} + \frac{q_s}{m_s} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{v}} = 0 \quad (2.5)$$

über.

Es existieren eine Reihe von Arbeiten, die sich mit der numerischen Lösung der Vlasovgleichung beschäftigen (z. B. *Schumer und Holloway*, 1998; *Klimas*, 1987). Hierzu werden oftmals spektrale Verfahren angewandt, die sowohl eine gute Auflösung der Details der Verteilungsfunktion als auch günstige numerische Eigenschaften hinsichtlich der Erhaltungsgrößen bieten. Leider sind diese Arbeiten auf Probleme mit je einer Geschwindigkeits- und Ortskomponente beschränkt. Da diese spektralen Verfahren ein *operator-splitting* verwenden, ist es auch nicht auf triviale Weise möglich, diese Verfahren auf höhere Dimensionen zu verallgemeinern.

2.3.2 Particle-in-cell-Verfahren

Die Vorgehensweise der *particle-in-cell*-Verfahren zur Lösung der Boltzmann-Gleichung (2.3) besteht darin, die Verteilungsfunktion f_s durch eine Anzahl von Makroteilchen zu repräsentieren. Da man nicht jedes einzelne Elektron und Ion im Plasma verfolgen kann, verwendet man Makroteilchen, d. h. jedes Simulationsteilchen steht für sehr viele wirkliche Teilchen, wobei das Verhältnis von Ladung zu Masse dabei gleich bleibt. Frühere Verfahren (z. B. *Dawson*, 1962) behandelten die Teilchen als diskrete Punkte und bestimmten die elektrische Kraft auf jedes Teilchen durch Summation über alle anderen Teilchen:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_i) = \sum_{k=1, k \neq i}^N q_i q_k \frac{\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_i}{|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_i|^3} \quad (2.6)$$

Hierbei steigt allerdings der Rechenaufwand quadratisch mit der Anzahl der Teilchen, so daß auf diese Weise nur wenige hundert Teilchen gleichzeitig betrachtet werden können. In speziellen Fällen, wie z. B. der Kühlung von Ionenstrahlen durch Elektronen (*Seele et al.*, 1997) wird diese Methode immer noch erfolgreich verwendet.

Die grundlegende Idee der *particle-in-cell*-Verfahren (PIC) (*Birdsall und Langdon*, 1991) ist, die Bewegungsgleichungen der einzelnen Elektronen und Ionen im Plasma zu lösen und aus den so gefundenen Positionen der Teilchen die Kräfte, die auf die Teilchen wirken, selbstkonsistent zu bestimmen. Da die Wellenausbreitung bei der *Farley-Buneman*-Instabilität nur in der Ebene senkrecht zum Magnetfeld stattfindet, genügt es, nur zwei Raumdimensionen zu betrachten. Um die Stöße mit dem Neutralgas zu modellieren, werden alle drei Geschwindigkeitskomponenten der Teilchen berücksichtigt. Man bezeichnet dies oft etwas salopp als 2,5-dimensionale Simulation. Das neutrale Gas bildet einen Hintergrund mit konstanter Temperatur. Es dient nur als Stoßpartner und wird daher bei Bedarf mit einer zufällig aus einer Maxwellverteilung gewählten Geschwindigkeit gebildet und nach dem Stoß nicht weiter verfolgt. Die Mo-

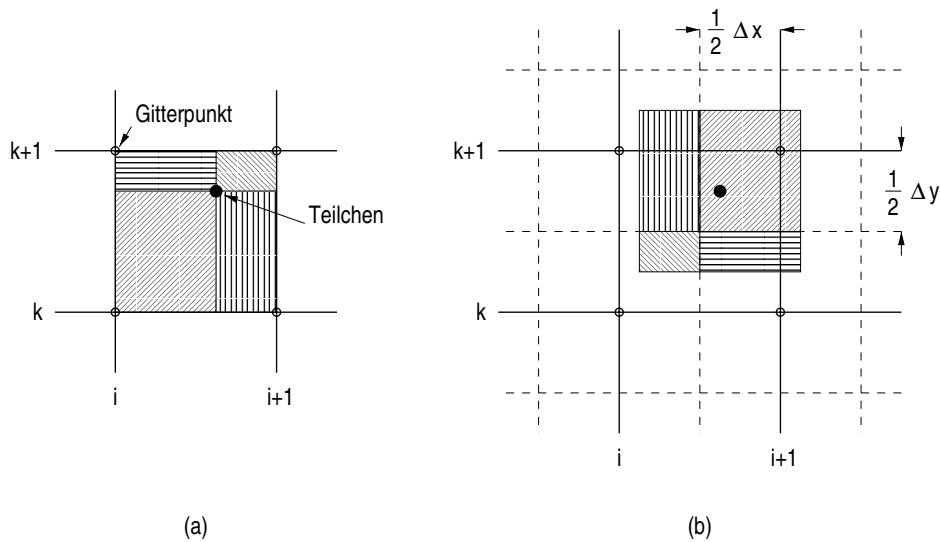


Abbildung 2.2: Räumliches Gitter und Ladungszuweisung im zweidimensionalen *particle-in-cell*-Verfahren, (a) bilineare Interpolation, (b) Interpretation als Ladungswolke.

dellierung dieser Stöße wird in Abschnitt 2.4 genauer ausgeführt, die Aussagen dieses Abschnitts gelten auch für stoßfreie Plasmen.

Berechnung der Kräfte

Das PIC-Verfahren benutzt ein räumliches Gitter in der Größenordnung der Debye-Länge zur Ermittlung der Teilchenwechselwirkungen. Anstelle einer Summe über alle Zweiteilchenwechselwirkungen wird die Ladungsdichte auf dem räumlichen Gitter bestimmt und daraus das elektrische Feld berechnet. Dann wird jedes einzelne Teilchen entsprechend den klassischen Bewegungsgleichungen um einen Zeitschritt Δt weiterbewegt. Hierzu wird das elektrische Feld, das nur auf dem Gitter bekannt ist, an der Position des Teilchens interpoliert.

Diese Methode hat zwei wesentliche Vorteile: Erstens steigt der Rechenaufwand nur noch linear mit der Anzahl der Teilchen, man kann also eine viel größere Zahl von Simulationsteilchen verwenden und dadurch die statistischen Fluktuationen verringern. Es ist dennoch unmöglich, eine ausreichend hohe Dichte der Simulationsteilchen zu erreichen, um die Debye-Abschirmung korrekt wiederzugeben. Dies würde bei Punktteilchen dazu führen, daß Coulomb-Stöße mit kleinen Stoßparametern, also großen Ablenkwinkeln, überrepräsentiert sind. Hier zeigt sich der zweite Vorteil des *particle-in-cell*-Verfahrens: Die bilineare Interpolation bei der Berechnung der Ladungsdichte läßt sich, wie in Abb. 2.2 dargestellt, auch als eine Verschmierung der Ladung eines Punktteilchens in eine Ladungswolke interpretieren. Bei großen Abständen zweier Teilchen ist die Kraft dieser Teilchen aufeinander im Wesentlichen unverändert,

bei Abständen unterhalb der Gitterweite nimmt die Kraft jedoch stark ab. Auf diese Weise erreicht man auch mit wenigen Teilchen den Effekt der Debye-Abschirmung. Für das langreichweitige Verhalten des Plasmas, also für Effekte bei Wellenlängen oberhalb der Debyelänge, sind diese Unterschiede irrelevant.

Für die Beschreibung des PIC-Verfahrens ist es hilfreich, sich die Ladung eines Teilchens am Ort \mathbf{x}' als eine diffuse Wolke $qS(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ vorzustellen. Zur Vereinfachung der Ausdrücke ist hier nur eine Dimension berücksichtigt. Die Ladungsdichte ρ eines Plasmas mit der Teilchendichte $n(x, t)$ in einer Dimension ist dann

$$\rho(x, t) = S(x) * qn(x, t) = \int dx' S(x - x') qn(x', t) \quad (2.7)$$

Diese Ladungsdichte wird an den Gitterpunkten X_j über alle Teilchen i aufsummiert:

$$\rho_j = \sum_i q_i S(X_j - x_i) \quad (2.8)$$

Für die Gewichtungsfunktion $S(x)$ sucht man nach günstigen numerischen Eigenschaften. Früher wurde die Ladung nur dem nächst benachbarten Gitterpunkt zugewiesen, mittlerweile hat sich die bilineare Interpolation (*Birdsall und Langdon, 1991*) durchgesetzt, da sie bei nur geringfügig höherem Rechenaufwand viel geringere Fluktuationen der Ladungsdichte liefert.

2.3.3 Explizites PIC-Verfahren

Für die Zeitdiskretisierung der Bewegungsgleichungen der Teilchen wird eine zeitenzentrierte *leapfrog*-Methode von *Buneman (1967)* benutzt:

$$(\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n)/\Delta t = \mathbf{v}_{n+1/2} \quad (2.9a)$$

$$(\mathbf{v}_{n+1/2} - \mathbf{v}_{n-1/2})/\Delta t = \mathbf{a}_n + \frac{1}{2}(\mathbf{v}_{n+1/2} + \mathbf{v}_{n-1/2}) \times (q\mathbf{B}_n/mc) \quad (2.9b)$$

$$\text{mit } \mathbf{a}_n = (q/m)\mathbf{E}_n \quad (2.9c)$$

Aus der Ladungsdichte ρ berechnet man das Potential ϕ und das elektrische Feld E , zur besseren Übersicht hier nur in einer Raumdimension, nach

$$E_j = -(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})/2\Delta x \quad (2.10)$$

$$-4\pi\rho_j = (\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1})/\Delta x^2 \quad (2.11)$$

in cgs-Einheiten (*Jackson, 1975*). Die Kraft auf das i -te Teilchen erhält man durch eine Interpolation der Form

$$F_i = q_i \Delta x \sum_j E_j S(X_j - x_i), \quad (2.12)$$

wobei die Summe über die Gitterpunkte X_j gebildet wird. Hierbei ist es wichtig, daß zur Interpolation die gleiche Funktion S wie zur Gewichtung des Teilchens bei der Berechnung der Ladungsdichte benutzt wird, da sonst das Teilchen eine Kraft auf sich selbst ausüben könnte.

Bei der oben benutzten Diskretisierung der Poisson-Gleichung tritt das Problem auf, daß bei periodischen Randbedingungen das Potential nicht mehr eindeutig definiert ist, sondern für jedes ϕ auch $\phi' = \phi + \text{const}$ eine Lösung ist. Dies führt dazu, daß die Matrix der Koeffizienten in Glg. (2.11) singulär wird, was bei der Wahl des numerischen Lösungsverfahrens zu beachten ist (siehe auch Abschnitt 2.3.6).

Da im hier betrachteten Modell periodische Randbedingungen verwendet werden, kann man statt dessen die Poisson-Gleichung durch eine Fouriertransformation (FT) lösen. In einer Raumdimension:

$$\Delta\phi(x) = -4\pi\rho(x) \xrightarrow{\text{FT}} -k^2\phi(k) = -4\pi\rho(k) \quad (2.13)$$

oder, in der Diskretisierung aus Glg. (2.11)

$$(\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1})/\Delta x^2 = -4\pi\rho_j \xrightarrow{\text{FT}} -K_j^2\phi_j = -4\pi\rho_j \quad (2.14)$$

mit

$$K_j^2 = k_j^2 \left(\frac{\sin \frac{k_j \Delta x}{2}}{\frac{k_j \Delta x}{2}} \right)^2, \quad k_j = 2\pi j/L \quad (2.15)$$

Dadurch erreicht man zwei Vorteile: Erstens ist der Wert der Konstanten in Glg. (2.14) durch den Fourierkoeffizienten bei $k = 0$ gegeben, zweitens ist der Rechenaufwand für die Hin- und Rücktransformation bei Verwendung einer schnellen Fouriertransformation (siehe z. B. *Walker*, 1996) viel geringer als bei der numerischen Lösung des Gleichungssystems 2.11.

Der Index n bezeichnet den Zeitschritt $t_n = n \Delta t$. Die Gleichungen (2.8) - (2.12) und (2.9) beschreiben einen vollständigen Zeitschritt des PIC-Verfahrens.

Zeitschrittweite

Zur Stabilitätsanalyse der *leapfrog*-Methode in Glg. (2.9) betrachtet man einen harmonischen Oszillator. Auf ein Plasma angewandt, ist dies die Plasmaschwingung mit der Plasmafrequenz ω_{pe} . Der harmonische Oszillator wird durch die Differentialgleichung 2. Ordnung

$$\frac{d^2}{dt^2}x = a(t) = -\omega_0^2 x(t) \quad (2.16)$$

beschrieben. Diese Gleichung hat Lösungen der Form

$$x(t) = A_0 e^{-i\omega_0 t} \quad (2.17)$$

Substituiert man in den Diskretisierungen der *leapfrog*-Methode Glg. (2.9a) für die Zeitpunkte t und $t + \Delta t$ in Glg. (2.9b), so erhält man

$$\frac{x_{t+\Delta t} - 2x_t + x_{t-\Delta t}}{\Delta t^2} = a_t = -\omega_0^2 x_t \quad (2.18)$$

Dies ist eine einfache Differenzgleichung mit Lösungen der Form

$$x_t = A e^{-i\omega t}. \quad (2.19)$$

A ist ein Anfangswert, ω die Unbekannte. Setzt man diesen Lösungsansatz in Glg. (2.18) ein, so erhält man

$$\sin\left(\omega \frac{\Delta t}{2}\right) = \pm \omega_0 \frac{\Delta t}{2} \quad (2.20)$$

Für $\omega_0 \Delta t < 2$ ist ω reell, die Schwingungen werden weder gedämpft noch verstärkt. Für $\omega_0 \Delta t > 2$ wird ω komplex, es gibt eine Lösung mit $\Im(\omega) > 0$.

Wie (Cohen *et al.*, 1982) gezeigt hat, tritt diese numerische Instabilität bei jeder expliziten Diskretisierung der Bewegungsgleichungen bei einer Zeitschrittweite Δt in der Größenordnung der inversen Eigenfrequenz ω_0^{-1} auf.

Gitterweite

Ein weiteres Stabilitätskriterium ergibt sich für die Gitterweite Δx . Hier ist bislang keine vergleichbar einfache analytische Beschreibung wie bei der Zeitschrittweite gefunden worden. Unsere Erfahrung mit dem expliziten PIC-Verfahren zeigt aber, daß die Gitterweite nicht wesentlich größer als die Debyelänge sein darf. In Abb. 2.3 ist das simulierte Plasma mit einer Maxwellverteilung gleicher Temperatur für Elektronen und Ionen initialisiert und dann ohne äußere Kräfte und ohne Stöße mit dem Neutralgas über eine Dauer von $1000 \omega_{pe}^{-1}$ verfolgt worden. Da sich das Plasma im thermischen Gleichgewicht befindet, sollte sich die Temperatur im Laufe der Simulation nicht ändern. Tatsächlich beobachtet man aber eine Erhöhung der Temperatur in Abhängigkeit der Gitterweite Δx . Man erkennt, daß mit zunehmender Gitterweite eine rein numerisch bedingte Aufheizung des Plasmas auftritt. Für Gitterweiten $\Delta x \lesssim 2\lambda_{De}$ ist diese Aufheizung nicht mehr zu tolerieren. Dieser Punkt ist in den früheren Arbeiten von Thiemann und Schlegel (1994) und Machida und Goertz (1988) nicht korrekt berücksichtigt worden, diese Autoren verwendeten jeweils eine Gitterzelle der Größe

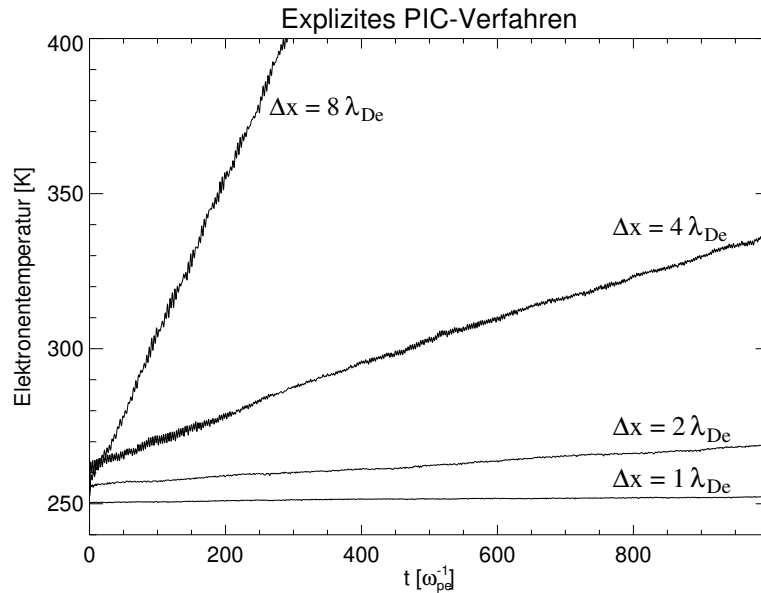


Abbildung 2.3: Numerische Aufheizung des Plasmas bei dem expliziten PIC-Verfahren in Abhängigkeit von der Gitterweite Δx .

$21 \times 2.1 \lambda_{De}$. *Thiemann und Schlegel* waren so freundlich, ihr Programm zum Vergleich zur Verfügung zu stellen, so daß diese numerische Instabilität auch mit ihrer Implementierung des PIC-Verfahrens verifiziert werden konnte.

Eine genauere Stabilitätsuntersuchung des expliziten *particle-in-cell*-Verfahrens wird in Abschnitt 3.1 vorgenommen.

Die Zahl der Teilchen pro Gitterzelle betrug bei diesen Rechnungen 100, die Zeitschrittweite $0.2 \omega_{pe}^{-1}$. Hält man statt dessen die Zahl der Teilchen pro Debyeefläche konstant, erhöht man also die Zahl der Teilchen pro Zelle mit zunehmendem Gitterabstand, ändern sich diese Resultate nicht wesentlich.

Diese Beschränkung in der Gitterweite macht es praktisch unmöglich, die *Farley-Buneman*-Instabilität mit einem einfachen expliziten PIC-Verfahren zu behandeln, da das Maximum der linearen Instabilität bei etwa 100 Debyelängen liegt. Für eine sinnvolle Rechnung mit periodischen Randbedingungen muß das Rechengebiet viele Wellenzüge enthalten, um den Einfluß der Randbedingungen zu minimieren und nichtlineare Effekte wie Modenkopplungen zu ermöglichen. Dies ist jedoch mit den heute verfügbaren Rechnerkapazitäten auf herkömmlichen sequentiell arbeitenden Computern nicht in akzeptablen Zeiten zu berechnen.

2.3.4 Driftnäherung

Da das einfache explizite Verfahren nicht ausreicht, muß ein verbessertes Verfahren gefunden werden, welches den Bereich der Anwendbarkeit des PIC - Verfahrens erweitert. Ein möglicher Ansatz, wie z. B. von *Oppenheim* (1995) vorgeschlagen, ist das Verfahren der Driftnäherung von *Lee und Okuda* (1976). Hierbei werden die Bewegungsgleichungen der Elektronen des PIC-Verfahrens (2.9) durch ein Prädiktor-Korrektor Verfahren zur Diskretisierung der $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ - Driftbewegung

$$\frac{\tilde{\mathbf{x}}_{t+\Delta t}^\perp - \mathbf{x}_{t-\Delta t}^\perp}{\Delta t} = 2 \frac{\mathbf{E}_t \times \mathbf{B}}{B^2} \quad (2.21)$$

$$\mathbf{x}_{t+\Delta t} = \mathbf{x}_t^\perp + \frac{\Delta t}{2} \left(\mathbf{E} + \tilde{\mathbf{E}}_{t+\Delta t} \right) \times \mathbf{B} \quad (2.22)$$

ersetzt. Hierbei ist $\tilde{\mathbf{E}}_{t+\Delta t}$ das elektrische Feld, das aus der Prädiktorposition $\tilde{\mathbf{x}}$ bestimmt wird. Auf diese Weise ist die Simulation nicht mehr auf die Zeitskala der Gyrationbewegung beschränkt.

Dennoch kann man die Zeitschrittweite nicht beliebig erhöhen, da bei $\Delta t > 2\omega_{pe}^{-1}$ eine numerische Instabilität auftritt. In der E -Schicht der Ionosphäre sind jedoch Gyration- und Plasmafrequenz in der gleichen Größenordnung.

Eine weitere schwächere numerische Instabilität tritt auf, wenn man die Gitterweite $\Delta \mathbf{x}$ größer als einige Debyelängen wählt. Daher ist es auch nicht möglich, die Gitterweite gegenüber dem einfachen PIC-Verfahren zu erhöhen.

Die einfache Idee der Driftnäherung, die aus der Fusionsforschung stammt und bei den dort herrschenden Bedingungen eine bedeutende Erweiterung des numerischen Stabilitätsbereichs gegenüber dem expliziten Simulationsverfahren darstellt, läßt sich also für das Plasma der Ionosphäre nicht anwenden.

2.3.5 Hybridverfahren

Ein häufig benutzter Ansatz, um die Beschränkungen in der Orts- und Zeitschrittweite zu überwinden, ist die Beschreibung der Elektronen mit MHD-Gleichungen und der Ionen als Teilchen, wie z. B. in der Arbeit von *Oppenheim* (1995). In diesem Modell gibt es keine Plasmaschwingungen, keine Elektronenzyklotronbewegung und auch keine Debyelänge. Die schwächere Form der *Farley-Buneman*-Instabilität in der E -Schicht am magnetischen Äquator, bei der keine Elektronenheizung auftritt, läßt sich auf diese Weise hervorragend beschreiben. Kinetische Effekte der Elektronen, die die Aufheizung bewirken, sind bei diesem Verfahren jedoch von vornherein unberücksichtigt, so daß ein Hybridmodell des Plasmas für das hier untersuchte Problem ausscheidet.

2.3.6 Implizites PIC-Verfahren

Einen weiteren Ansatz, die Beschränkungen des expliziten PIC-Verfahrens zu überwinden, stellen die sogenannten impliziten Verfahren dar. Hierbei ist die grundlegende Idee, die Bewegungsgleichungen auf eine Weise zu diskretisieren, die auch bei großen Zeitschrittweiten numerisch stabil und gleichzeitig genau genug ist, um die Vorgänge bei niedrigeren Frequenzen als der Elektronzyklotron- und Elektronplasmafrequenz richtig wiederzugeben.

Hierzu sind von *Cohen et al.* (1982) verschiedene Methoden untersucht worden, von diesen wird üblicherweise (*Langdon und Barnes*, 1985; *Gibbons und Hewett*, 1995) das „ D_1 “-Schema benutzt.

Die Zeitdiskretisierung der Bewegungsgleichungen der Elektronen in diesem Schema hat folgende Form:

$$(\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n)/\Delta t = \mathbf{v}_{n+1/2} \quad (2.23a)$$

$$(\mathbf{v}_{n+1/2} - \mathbf{v}_{n-1/2})/\Delta t = \bar{\mathbf{a}}_n + \frac{1}{2}(\mathbf{v}_{n+1/2} + \mathbf{v}_{n-1/2}) \times (q\mathbf{B}_n/mc) \quad (2.23b)$$

$$\text{mit } \bar{\mathbf{a}}_n = \frac{1}{2}[\bar{\mathbf{a}}_{n-1} + (q/m)\mathbf{E}_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1})] \quad (2.23c)$$

Dies ist das gleiche *leapfrog*-Schema wie in den Gleichungen (2.9), nur die Beschleunigung \mathbf{a}_n ist durch die rekursiv zeitgemittelte Beschleunigung $\bar{\mathbf{a}}_n$ ersetzt.

Das in Abschnitt 2.4 beschriebene Modell der Stöße mit dem Neutralgas liefert für die Neutralgasdichten und Temperaturen der ionosphärischen E -Schicht eine obere Grenze für die Zeitschrittweite Δt , die weit unterhalb der Zeitskalen der Ionenbewegung liegt. Es ist deshalb möglich, die Ionen weiterhin mit den expliziten Gleichungen (2.9) zu beschreiben.

Lösung der impliziten Gleichungen

In dem impliziten Schema hängen die neuen Positionen $\{\mathbf{x}_{n+1}\}$ von dem elektrischen Feld \mathbf{E}_{n+1} ab. Dies Feld ist aber noch nicht bekannt, da es von der Ladungsdichte ρ_{n+1} der Teilchenpositionen zum Zeitpunkt $n+1$ abhängt. Die Lösung dieses Systems von nichtlinear gekoppelten Teilchen- und Feldgleichungen ist der wichtigste Teil des Verfahrens.

Hierzu gibt es verschiedene Ansätze, wie z. B. die Momentenmethode von *Denavit* (1981) und *Mason* (1981). Dies Verfahren benutzt höhere Momente der Verteilungsfunktion, um den kinetischen Spannungstensor zum neuen Zeitpunkt zu nähern. Dann wird ein System von gekoppelten Feld- und Flüssigkeitsgleichungen gelöst. Wenn das elektrische Feld bekannt ist, werden die Teilchen um einen Zeitschritt weiterbewegt. Man kann dann einen neuen Spannungstensor berechnen und das Verfahren iterieren.

Direkte Methode

Eine andere Methode von *Friedman et al.* (1981), *Barnes et al.* (1983) und *Langdon et al.* (1983) besteht darin, die gekoppelten Teilchen- und Feldgleichungen zu linearisieren und so das neue Feld \mathbf{E}_{n+1} zu nähern. Diese Methode bietet einen erheblich einfacheren Ansatz zur Lösung der impliziten Gleichungen und wird deshalb in dieser Arbeit benutzt.

Der wesentliche Gedanke bei diesem Ansatz ist, *direkt* mit den Bewegungsgleichungen der Teilchen und den Teilchen-Feld-Kopplungsgleichungen zu arbeiten. Diese Gleichungen werden um einen extrapolierten Schätzwert zum neuen Zeitpunkt linearisiert. Die Lösung der Bewegungsgleichung wird in zwei Schritte geteilt: der erste Schritt benutzt nur zum Zeitpunkt n bekannte Werte, um die Teilchen zu einem Schätzwert, im folgenden mit $\mathbf{x}_{n+1}^{(0)}$ usw. bezeichnet, zu bewegen. Aus diesen Schätzwerten wird das elektrische Feld zum neuen Zeitpunkt bestimmt. Mit diesem Feld werden dann die impliziten Bewegungsgleichungen gelöst. Durch eine Iteration dieser Schritte bekommt man ein vollständig implizites Verfahren. Die meisten Autoren betonen jedoch, daß eine Iteration in der Praxis nicht notwendig ist.

Die Gleichung (2.23b) kann man exakt nach $\mathbf{v}_{n+1/2}$ lösen, wenn man $\frac{1}{2}\bar{\mathbf{a}}_n\Delta t$ zu $\mathbf{v}_{n+1/2}$ addiert, eine Rotation ausführt und noch einmal $\frac{1}{2}\bar{\mathbf{a}}_n\Delta t$ addiert:

$$\mathbf{v}_{n+1/2} = \frac{1}{2}\bar{\mathbf{a}}_n\Delta t + \mathcal{R} \cdot [\mathbf{v}_{n+1/2} + \frac{1}{2}\bar{\mathbf{a}}_n\Delta t]. \quad (2.24)$$

Der Operator \mathcal{R} bewirkt eine Rotation um den Winkel $-2 \arctan(qB\Delta t/2mc)$ und läßt sich schreiben als

$$\mathcal{R} = [(1 + |\Theta|^2)\mathcal{I} - 2\Theta \times \mathcal{I} + 2\Theta \circ \Theta]/(1 + |\Theta|^2), \quad (2.25)$$

mit $\Theta = qB\Delta t/2mc$ und dem Einheitstensor \mathcal{I} , \circ bezeichnet das dyadische Produkt. Die neuen Werte $\{\mathbf{x}_{n+1}, \mathbf{v}_{n+1}\}$ kann man in zwei Anteile zerlegen:

1. Ein Inkrement $\{\delta\mathbf{x}, \delta\mathbf{v}\}$, daß nur von dem unbekanntem elektrischen Feld zum neuen Zeitpunkt $n + 1$ abhängt,
2. Schätzwerte $\{\mathbf{x}_{n+1}^{(0)}, \mathbf{v}_{n+1}^{(0)}\}$, die alle anderen, zum Zeitpunkt n bekannten Beiträge enthalten.

Die geschätzte Ladungsdichte $\rho_{n+1}^{(0)}$ wird aus den Positionen $\{\mathbf{x}_{n+1}^{(0)}\}$ bestimmt, die sich aus den Bewegungsgleichungen mit $\mathbf{E}_{n+1}^{(0)}$, einem Schätzwert für \mathbf{E}_{n+1} , ergeben. Diese Ladungsdichte erfüllt aber noch nicht das Gauss'sche Gesetz, d. h. $\nabla \cdot \mathbf{E}_{n+1}^{(0)} \neq \rho_{n+1}^{(0)}$. Man berechnet nun ein genaueres Feld \mathbf{E}_{n+1} , mit dem die Teilchen zu neuen Positionen $\{\mathbf{x}_{n+1}\}$ bewegt werden, so daß die Ladungsdichte ρ_{n+1}

$$\nabla \cdot \mathbf{E}_{n+1} = \rho_{n+1} \quad (2.26)$$

erfüllt. Zu diesem Zweck schreibt man Gleichung (2.26) als

$$\nabla \cdot \mathbf{E}_{n+1}^{(0)} - \rho_{n+1}^{(0)} = -\nabla \cdot \delta \mathbf{E}_{n+1} + \delta \rho_{n+1} \quad (2.27)$$

mit $\mathbf{E}_{n+1} = \mathbf{E}_{n+1}^{(0)} + \delta \mathbf{E}_{n+1}$ usw.; $\delta \rho_{n+1}$ stammt von den Inkrementen in der Teilchenposition $\delta \mathbf{x}_{n+1}$, die wiederum von der Differenz $\delta \mathbf{E}_{n+1}$ herrühren.

Berechnung der Inkremente

Wie auch bei *Gibbons und Hewett* (1995) wird im folgenden die einfachste Wahl des Schätzwertes, $\mathbf{E}_{n+1}^{(0)} = 0$ verwendet. Alle Werte, die zu dieser Wahl von $\mathbf{E}_{n+1}^{(0)}$ gehören, werden im folgenden mit einer Tilde gekennzeichnet.

Eine weitere naheliegende Wahl wäre, den Wert von \mathbf{E} vom vorigen Zeitschritt zu benutzen. Hierbei ist dann auf eine Diskretisierung zu achten, die mit derjenigen der impliziten Poissongleichung konsistent ist. Die übliche Methode der zentralen Differenzen, also $\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho \rightarrow \frac{E_{j+1} - E_{j-1}}{2\Delta x} = \rho_j$ ist nicht anwendbar, da dann $E = -\nabla\phi \rightarrow E_j = -\frac{\phi_{j+1} - \phi_{j-1}}{2\Delta x}$ gilt. Hieraus ergibt sich aber $-\rho_j = \frac{\phi_{j+2} - 2\phi_j + \phi_{j-2}}{4\Delta x^2}$, im Widerspruch zu der Diskretisierung $\nabla^2\phi = -\rho \rightarrow \frac{\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}}{\Delta x^2} = -\rho_j$.

Die Inkremente $\{\delta \mathbf{x}, \delta \mathbf{v}\}$ werden durch eine Linearisierung der Bewegungsgleichungen um die Position $\{\tilde{\mathbf{x}}_{n+1}\}$ bestimmt:

$$\delta \mathbf{x}_{n+1} = \delta \mathbf{v}_{n+1/2} \Delta t \quad (2.28a)$$

$$\delta \mathbf{v}_{n+1/2} = \frac{1}{2} (\mathcal{I} + \mathcal{R}) \cdot (q\Delta t/2m) \delta \mathbf{E}(\tilde{\mathbf{x}}) \quad (2.28b)$$

Damit kann man den impliziten Term $\delta \rho = -\nabla \cdot (\rho \delta \mathbf{x}_{n+1}^{(0)})$ umformen zu

$$\delta \rho = -\nabla \cdot (\rho \delta \tilde{\mathbf{x}}) = -\nabla \cdot \left[\frac{\tilde{\rho}_E e \Delta t^2 (\mathcal{I} + \mathcal{R})}{4m_E} \right] \cdot \delta \mathbf{E} = -\nabla \cdot (\boldsymbol{\chi} \cdot \mathbf{E}) \quad (2.29)$$

In der eckigen Klammer steht nur die extrapolierte Elektronendichte, da nur die Elektronen implizit behandelt werden. Die implizite Suszeptibilität

$$\boldsymbol{\chi} = \frac{\tilde{\rho}_E e \Delta t^2 (\mathcal{I} + \mathcal{R})}{4m_E} \quad (2.30)$$

ist wegen der Rotation \mathcal{R} ein Tensor. Da nur die Elektronendichte vom Ort abhängt, bietet es sich an, die Konstanten in einem Tensor zusammenzufassen:

$$\mathcal{T} = \frac{e \Delta t^2 (\mathcal{I} + \mathcal{R})}{4m_E} \quad (2.31)$$

Damit kann man eine Gleichung für $\delta \mathbf{E} = -\nabla \delta \phi$ angeben. Substituiert man die Ausdrücke für $\tilde{\rho}$ und $\delta \rho$ in der Gleichung (2.27), so erhält man die implizite elektrostatische Poissongleichung

$$\nabla \cdot [1 + \boldsymbol{\chi}] \cdot \nabla \delta \phi_{n+1} = -(\tilde{\rho}_E + \rho_I). \quad (2.32)$$

Hier ist die Wahl $\mathbf{E}_{n+1}^{(0)} = 0$ vorausgesetzt. Dies ist eine elliptische Gleichung, deren Koeffizienten *direkt* von den Teilchendaten abhängen, die auf dem räumlichen Gitter in Form einer impliziten Suszeptibilität aufsummiert wurden.

Lösung der Poissongleichung

Nach der Diskretisierung der impliziten Poissongleichung (2.32) tritt wie beim expliziten Verfahren für doppelt periodische Randbedingungen das Problem auf, daß das Potential ϕ nicht eindeutig bestimmt ist, wodurch die Matrix der Koeffizienten singular wird. Durch den asymmetrischen Tensor χ ist die Koeffizientenmatrix außerdem ebenfalls asymmetrisch. Eine Lösung der Gleichung (2.32) durch eine Fouriertransformation ist hier nicht möglich, da der Operator $\nabla \cdot [1 + \chi] \cdot \nabla$ wegen der impliziten Suszeptibilität χ ortsabhängig ist.

Die numerische Lösung für diesen Fall ist in der veröffentlichten Literatur nicht ausführlich behandelt worden, obwohl (oder gerade weil?) hierbei einige Besonderheiten zu beachten sind. *Gibbons und Hewett* (1995) benutzen ein bikonjugiertes Gradientenverfahren für den Fall von in mindestens einer Dimension vorgegebenen Randbedingungen und „our own version“ für doppelt periodische Randbedingungen.

Die meisten numerischen Verfahren zur Lösung einer schwach besetzten Matrixgleichung verlangen zumindest entweder eine symmetrische oder eine nichtsinguläre Matrix. *Duff und Reid* (1996) beschreiben ein Verfahren zur direkten Lösung von asymmetrischen, singulären Matrixgleichungen. Hierbei wird die Basis so transformiert, daß der Nullraum herausprojiziert wird. Diese Methode erwies sich aber als unpraktikabel langsam.

Eine andere Möglichkeit besteht darin, das Potential ϕ in einem Gitterpunkt auf Null zu setzen. Wenn man dann die entsprechende Gleichung streicht, erhält man eine nichtsinguläre, asymmetrische Koeffizientenmatrix. Hierbei ist jedoch zu beachten, daß die Gleichung, die zu diesem Gitterpunkt gehört, weiterhin erfüllt sein muß. Dies ist genau dann der Fall, wenn alle anderen Gleichungen addiert gerade die gestrichene Gleichung ergeben, oder mit anderen Worten, wenn alle Faktoren in der Linearkombination 1 sind. Um dies zu erreichen, muß die Gleichung geeignet diskretisiert werden.

Wie *Oppenheim* (1995) herausgefunden hat, lag an dieser Stelle das numerische Problem der Arbeit von *Newman und Ott* (1981). Sie verwendeten eine Diskretisierung, bei der die gestrichene Gleichung nicht erfüllt war. Dadurch ergab sich an diesem Gitterpunkt eine falsche Lösung, was zu numerischen Schwingungen führte. Sie reduzierten das Problem dadurch, daß sie den Gitterpunkt, dessen zugehörige Gleichung gestrichen wird, bei jedem Zeitpunkt zufällig neu wählten und außerdem die Lösung ϕ noch glätteten. Dies kann natürlich eine echt Lösung des Problems nicht ersetzen.

Diskretisierung der impliziten Poissongleichung

Multipliziert man die implizite Poissongleichung (2.32) aus, erhält man für ein zwei-dimensionales Problem in der x - y Ebene:

$$[\nabla^2 + \partial_x(\chi^{11}\partial_x + \chi^{12}\partial_y) + \partial_y(\chi^{21}\partial_x + \chi^{22}\partial_y)] \phi_{n+1} = -(\tilde{\rho}_E + \rho_I) \quad (2.33)$$

Im folgenden wird der Zeitindex $n + 1$ weggelassen und nur noch die linke Seite der Gleichung betrachtet. Die Diskretisierung der äußeren Ableitung ergibt

$$\frac{(\partial_x\phi + \chi^{11}\partial_x\phi + \chi^{12}\partial_y\phi)_{i+\frac{1}{2},j} - (\partial_x\phi + \chi^{11}\partial_x\phi + \chi^{12}\partial_y\phi)_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta x} - \frac{(\partial_y\phi + \chi^{21}\partial_x\phi + \chi^{22}\partial_y\phi)_{i,j+\frac{1}{2}} - (\partial_y\phi + \chi^{21}\partial_x\phi + \chi^{22}\partial_y\phi)_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta y}. \quad (2.34)$$

Nun werden die inneren Ableitungen diskretisiert:

$$\begin{aligned} & \left(1 + \chi_{i+\frac{1}{2},j}^{11}\right) \frac{(\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j})}{\Delta x^2} + \chi_{i+\frac{1}{2},j}^{12} \frac{(\phi_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - \phi_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}})}{\Delta x \Delta y} \\ & - \left(1 + \chi_{i-\frac{1}{2},j}^{11}\right) \frac{(\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j})}{\Delta x^2} + \chi_{i-\frac{1}{2},j}^{12} \frac{(\phi_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - \phi_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}})}{\Delta x \Delta y} \\ & + \left(1 + \chi_{i,j+\frac{1}{2}}^{22}\right) \frac{(\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j})}{\Delta x^2} + \chi_{i,j+\frac{1}{2}}^{21} \frac{(\phi_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - \phi_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}})}{\Delta x \Delta y} \\ & - \left(1 + \chi_{i,j-\frac{1}{2}}^{22}\right) \frac{(\phi_{i,j} - \phi_{i,j-1})}{\Delta x^2} + \chi_{i,j-\frac{1}{2}}^{21} \frac{(\phi_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} - \phi_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}})}{\Delta x \Delta y} \end{aligned} \quad (2.35)$$

Zusammengefaßt ergibt dies z. B. für den Term $\partial_x(\chi^{12}\partial_y\phi)$ folgende Diskretisierung zweiter Ordnung

$$\partial_x(\chi^{12}\partial_y\phi) = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \left(\chi_{i+\frac{1}{2},j}^{12} \phi_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - \chi_{i+\frac{1}{2},j}^{12} \phi_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} - \chi_{i-\frac{1}{2},j}^{12} \phi_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} + \chi_{i-\frac{1}{2},j}^{12} \phi_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} \right), \quad (2.36)$$

mit entsprechenden Ausdrücken für die anderen Terme.

In dieser Diskretisierung tritt ϕ an Zwischengitterpunkten auf. Die Werte an diesen Punkten werden durch einen Mittelwert aus den vier benachbarten Gitterpunkten gebildet. Sortiert man dann nach ϕ , so erhält man ein Neun-Punkt-Schema von Koeffizienten:

$$\begin{aligned} & c_{pp} \phi_{i+1,j+1} + c_{po} \phi_{i+1,j} + c_{pm} \phi_{i+1,j-1} \\ & + c_{op} \phi_{i,j+1} + c_{oo} \phi_{i,j} + c_{om} \phi_{i,j-1} \\ & + c_{mp} \phi_{i-1,j+1} + c_{mo} \phi_{i-1,j} + c_{mm} \phi_{i-1,j-1} = -(\tilde{\rho}_e + \rho_i)_{i,j} \end{aligned} \quad (2.37)$$

mit

$$\begin{aligned}
c_{pp} &= \frac{1}{4\Delta x \Delta y} \left(\chi_{i+\frac{1}{2},j}^{12} + \chi_{i,j+\frac{1}{2}}^{21} \right) \\
c_{po} &= \frac{1}{\Delta x^2} \left(1 + \chi_{i+\frac{1}{2},j}^{11} \right) + \frac{1}{4\Delta x \Delta y} \left(\chi_{i,j+\frac{1}{2}}^{21} - \chi_{i,j-\frac{1}{2}}^{21} \right) \\
c_{pm} &= \frac{1}{4\Delta x \Delta y} \left(-\chi_{i+\frac{1}{2},j}^{12} - \chi_{i,j-\frac{1}{2}}^{21} \right) \\
c_{op} &= \frac{1}{\Delta y^2} \left(1 + \chi_{i,j+\frac{1}{2}}^{22} \right) + \frac{1}{4\Delta x \Delta y} \left(\chi_{i+\frac{1}{2},j}^{12} - \chi_{i-\frac{1}{2},j}^{12} \right) \\
c_{oo} &= -2 \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right) - \frac{1}{\Delta x^2} \left(\chi_{i+\frac{1}{2},j}^{11} + \chi_{i-\frac{1}{2},j}^{11} \right) - \frac{1}{\Delta y^2} \left(\chi_{i,j+\frac{1}{2}}^{22} + \chi_{i,j-\frac{1}{2}}^{22} \right) \\
c_{om} &= \frac{1}{\Delta y^2} \left(1 + \chi_{i,j-\frac{1}{2}}^{22} \right) + \frac{1}{4\Delta x \Delta y} \left(-\chi_{i+\frac{1}{2},j}^{12} + \chi_{i-\frac{1}{2},j}^{12} \right) \\
c_{mp} &= \frac{1}{4\Delta x \Delta y} \left(-\chi_{i-\frac{1}{2},j}^{12} - \chi_{i,j+\frac{1}{2}}^{21} \right) \\
c_{mo} &= \frac{1}{\Delta x^2} \left(1 + \chi_{i-\frac{1}{2},j}^{11} \right) + \frac{1}{4\Delta x \Delta y} \left(-\chi_{i,j+\frac{1}{2}}^{21} + \chi_{i,j-\frac{1}{2}}^{21} \right) \\
c_{mm} &= \frac{1}{4\Delta x \Delta y} \left(\chi_{i-\frac{1}{2},j}^{12} + \chi_{i,j-\frac{1}{2}}^{21} \right)
\end{aligned}$$

In den Koeffizienten der Gleichung (2.37) kommt die implizite Suszeptibilität χ noch mit halbzahligem Indizes vor. Auch hier wird deshalb über die beiden benachbarten Gitterpunkte gemittelt. Bei der hier betrachteten Geometrie $\mathbf{B} \parallel \hat{z}$ ist der Tensor χ antisymmetrisch, es gilt

$$\chi_{11} = \chi_{22}, \quad \chi_{12} = -\chi_{21} \quad (2.38)$$

Hierdurch kann man die entstehenden Ausdrücke noch etwas vereinfachen.

Um diese Gleichungen für $\phi_{i,j}$ in Matrixform zu bringen, werden ϕ und die rechte Seite der Gleichung als Vektor $(\phi_{0,0}, \phi_{0,1}, \dots, \phi_{n_x-1, n_y-1})$ gespeichert.

Für ein Rechengebiet der Größe $n_x = n_y = 4$ erhält man dann das Gleichungssystem (2.39) für das Potential in den 16 Gitterpunkten. Man erkennt eine Blockstruktur von 4×4 -Blöcken auf den Haupt- und Nebendiagonalen. Wegen den periodischen Randbedingungen erscheint auf den äußersten Diagonalen auch noch jeweils ein Block. Jeder 4×4 -Block zeigt die gleiche Struktur von Einträgen auf Haupt- und Nebendiagonalen sowie je einem Eintrag auf den äußersten Diagonalen. Insgesamt

besitzt das Gleichungssystem 21 Diagonalen, die von Null verschieden sind.

$$\begin{pmatrix} c_{0,0}^{o,o} & c_{0,0}^{o,p} & & & & & & & & & & & & & & & & & c_{0,0}^{m,o} & c_{0,0}^{m,p} & c_{0,0}^{m,m} \\ c_{0,1}^{o,m} & c_{0,1}^{o,o} & c_{0,1}^{o,p} & & & & & & & & & & & & & & & & c_{0,1}^{m,m} & c_{0,1}^{m,o} & c_{0,1}^{m,p} \\ & & c_{0,2}^{o,m} & c_{0,2}^{o,o} & c_{0,2}^{o,p} & & & & & & & & & & & & & & c_{0,2}^{m,m} & c_{0,2}^{m,o} & c_{0,2}^{m,p} \\ c_{0,3}^{o,p} & & & c_{0,3}^{o,m} & c_{0,3}^{o,o} & c_{0,3}^{o,p} & & & & & & & & & & & & & c_{0,3}^{m,p} & c_{0,3}^{m,m} & c_{0,3}^{m,o} \\ c_{1,0}^{m,o} & c_{1,0}^{m,p} & & & & & & & & c_{1,0}^{o,m} & c_{1,0}^{o,o} & c_{1,0}^{o,p} & & & & & & c_{1,0}^{p,m} & c_{1,0}^{p,o} & c_{1,0}^{p,p} \\ c_{1,1}^{m,m} & c_{1,1}^{m,o} & c_{1,1}^{m,p} & & & & & & & c_{1,1}^{o,m} & c_{1,1}^{o,o} & c_{1,1}^{o,p} & & & & & & c_{1,1}^{p,m} & c_{1,1}^{p,o} & c_{1,1}^{p,p} \\ & & c_{1,2}^{m,m} & c_{1,2}^{m,o} & c_{1,2}^{m,p} & & & & & c_{1,2}^{o,m} & c_{1,2}^{o,o} & c_{1,2}^{o,p} & & & & & & c_{1,2}^{p,m} & c_{1,2}^{p,o} & c_{1,2}^{p,p} \\ c_{1,3}^{m,p} & & & c_{1,3}^{m,m} & c_{1,3}^{m,o} & c_{1,3}^{m,p} & & & & c_{1,3}^{o,m} & c_{1,3}^{o,o} & c_{1,3}^{o,p} & & & & & & c_{1,3}^{p,m} & c_{1,3}^{p,o} \\ & & & & & & & & & c_{2,0}^{m,o} & c_{2,0}^{m,p} & c_{2,0}^{m,m} & c_{2,0}^{o,o} & c_{2,0}^{o,p} & c_{2,0}^{o,m} & c_{2,0}^{o,p} & c_{2,0}^{p,m} & c_{2,0}^{p,o} & c_{2,0}^{p,p} \\ & & & & & & & & & c_{2,1}^{m,m} & c_{2,1}^{m,o} & c_{2,1}^{m,p} & c_{2,1}^{o,m} & c_{2,1}^{o,o} & c_{2,1}^{o,p} & c_{2,1}^{p,m} & c_{2,1}^{p,o} & c_{2,1}^{p,p} \\ & & & & & & & & & c_{2,2}^{m,m} & c_{2,2}^{m,o} & c_{2,2}^{m,p} & c_{2,2}^{o,m} & c_{2,2}^{o,o} & c_{2,2}^{o,p} & c_{2,2}^{p,m} & c_{2,2}^{p,o} & c_{2,2}^{p,p} \\ & & & & & & & & & c_{2,3}^{m,p} & c_{2,3}^{m,m} & c_{2,3}^{m,o} & c_{2,3}^{o,p} & c_{2,3}^{o,m} & c_{2,3}^{o,o} & c_{2,3}^{p,p} & c_{2,3}^{p,m} & c_{2,3}^{p,o} \\ c_{3,0}^{p,o} & c_{3,0}^{p,p} & & & & & & & & & c_{3,0}^{m,o} & c_{3,0}^{m,p} & c_{3,0}^{m,m} & c_{3,0}^{o,o} & c_{3,0}^{o,p} & c_{3,0}^{o,m} & c_{3,0}^{p,m} & c_{3,0}^{p,o} & c_{3,0}^{p,p} \\ c_{3,1}^{p,m} & c_{3,1}^{p,o} & c_{3,1}^{p,p} & & & & & & & & c_{3,1}^{m,m} & c_{3,1}^{m,o} & c_{3,1}^{m,p} & c_{3,1}^{o,m} & c_{3,1}^{o,o} & c_{3,1}^{o,p} & c_{3,1}^{p,m} & c_{3,1}^{p,o} & c_{3,1}^{p,p} \\ & & & c_{3,2}^{p,m} & c_{3,2}^{p,o} & c_{3,2}^{p,p} & & & & & c_{3,2}^{m,m} & c_{3,2}^{m,o} & c_{3,2}^{m,p} & c_{3,2}^{o,m} & c_{3,2}^{o,o} & c_{3,2}^{o,p} & c_{3,2}^{p,m} & c_{3,2}^{p,o} & c_{3,2}^{p,p} \\ c_{3,3}^{p,p} & & & c_{3,3}^{p,m} & c_{3,3}^{p,o} & & & & & & c_{3,3}^{m,p} & c_{3,3}^{m,m} & c_{3,3}^{m,o} & c_{3,3}^{o,p} & c_{3,3}^{o,m} & c_{3,3}^{o,o} & c_{3,3}^{p,m} & c_{3,3}^{p,o} & c_{3,3}^{p,p} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \phi_{0,0} \\ \phi_{0,1} \\ \phi_{0,2} \\ \phi_{0,3} \\ \phi_{1,0} \\ \phi_{1,1} \\ \phi_{1,2} \\ \phi_{1,3} \\ \phi_{2,0} \\ \phi_{2,1} \\ \phi_{2,2} \\ \phi_{2,3} \\ \phi_{3,0} \\ \phi_{3,1} \\ \phi_{3,2} \\ \phi_{3,3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{0,0} \\ \rho_{0,1} \\ \rho_{0,2} \\ \rho_{0,3} \\ \rho_{1,0} \\ \rho_{1,1} \\ \rho_{1,2} \\ \rho_{1,3} \\ \rho_{2,0} \\ \rho_{2,1} \\ \rho_{2,2} \\ \rho_{2,3} \\ \rho_{3,0} \\ \rho_{3,1} \\ \rho_{3,2} \\ \rho_{3,3} \end{pmatrix} \quad (2.39)$$

Wie oben bereits beschrieben, wird zur Behebung der Singularität die letzte Gleichung weggelassen und statt dessen $\phi_{n_x-1, n_y-1} = 0$ gesetzt. Dies reduzierte System von $(n_x \cdot n_y - 1)$ Gleichungen hat nun eine reguläre, asymmetrische Koeffizientenmatrix. Wie man leicht sieht, ergibt die Addition der ersten $(n_x \cdot n_y - 1)$ Gleichungen gerade die Gleichung für den Gitterpunkt $(i = n_x - 1, j = n_y - 1)$.

Zur Lösung des so erhaltenen Gleichungssystems wird ein bikonjugiertes Gradientenverfahren (siehe z. B. *Press et al.*, 1992; *Golub und Van Loan*, 1990) benutzt. Hierzu dient das Paket PETSc von *Balay et al.* (1998b,a), es ist bei den Autoren frei erhältlich.

Bei Verwendung des Pakets PETSc ist es aus programmertechnischen Gründen einfacher, das Gleichungssystem in seiner ursprünglichen Größe zu belassen und die geänderte Gleichung $\phi_{n_x-1, n_y-1} = 0$ mitzulösen. Für verschiedene Größen des Rechengebiets wurde die Kondition des geänderten Gleichungssystems bestimmt, es ergab sich eine Konditionszahl

$$\text{cond}(A) := \|A\|_{\infty} \|A^{-1}\|_{\infty} \approx 4n_x n_y. \quad (2.40)$$

An der Abschätzung (siehe z. B. *Stoer*, 1972)

$$\frac{\|\Delta\phi\|_\infty}{\|\phi\|_\infty} \leq \text{cond}(A) \frac{\|\Delta\rho\|_\infty}{\|\rho\|_\infty} \quad (2.41)$$

erkennt man, daß für eine bestimmte Genauigkeit der Lösung ϕ die Fehlergrenze des bikonjugierten Gradientenverfahrens $\Delta\rho$ mit zunehmender Größe des Rechengebietes entsprechend kleiner gewählt werden muß. Dies erhöht die benötigte Anzahl an Iterationen des bikonjugierten Gradientenverfahrens, wodurch der Rechenaufwand zur Lösung der impliziten Poissongleichung (2.32) stärker als linear mit der Anzahl der Gitterpunkte steigt.

2.3.7 Parallelisierung

Nach der Vergrößerung der Gitterzellen wie beim impliziten Verfahren gibt es natürlich eine weitere Möglichkeit, zu realistischen Größen des Simulationsgebiets zu gelangen: Die Verwendung einer entsprechend großen Anzahl von Gitterzellen im expliziten Verfahren. Hierbei gelangt man jedoch schnell an die Grenzen der Leistungsfähigkeit heutiger Computer. In letzter Zeit gewinnt die parallele Berechnung von extrem zeitaufwendigen Problemen zunehmend an Bedeutung, da hier die meisten Reserven für zukünftige Entwicklungen der Computertechnik gesehen werden.

Da der Hauptanteil der Rechenzeit bei einem expliziten PIC-Verfahren für die Lösung der Bewegungsgleichungen benötigt wird, ist es am einfachsten, nur die entsprechenden Schleifen zu parallelisieren, also nur die Teilchen auf die einzelnen Prozessorelemente (PE) zu verteilen, das räumliche Gitter aber auf jedem PE vollständig zu haben. Auch wenn der Anteil der Rechenzeit zur sequentiellen Berechnung der Gittergrößen ϕ und E bei Verwendung eines einzelnen Prozessorelements nur etwa 2.5% beträgt, verhindert dies bereits eine effiziente Parallelisierung. Während der Geschwindigkeitsgewinn bei 2 PE noch 1.95 beträgt, steigt er bei 16 PE nur auf 11.6 und bei 64 PE nur noch auf 24.9. Mit anderen Worten, die Rechenleistung von 64 PE wird nur zu 39 Prozent genutzt.

Eine effizientere Parallelisierung wird erreicht, wenn man das Simulationsgebiet auf die einzelnen PE aufteilt, wie in Abb. 2.4 für 4 PE dargestellt. Wie auch bei *Ferraro et al.* (1993) wird die Aufteilung nur in einer Dimension, also in Streifen vorgenommen, und nicht in beiden Dimensionen. Auf diese Weise behält man in einer Richtung die periodischen Randbedingungen, vermeidet also Kommunikation zwischen den PE. In der anderen Richtung müssen kompliziertere Randbedingungen verwendet werden. Teilchen, die sich über diesen Rand hinwegbewegen, müssen von einem PE zum nächsten übertragen werden. Die Lösung der Poissongleichung (2.14) wird mit einer parallelisierten schnellen Fouriertransformation von *Frigo und Johnson* (1997, 1998)

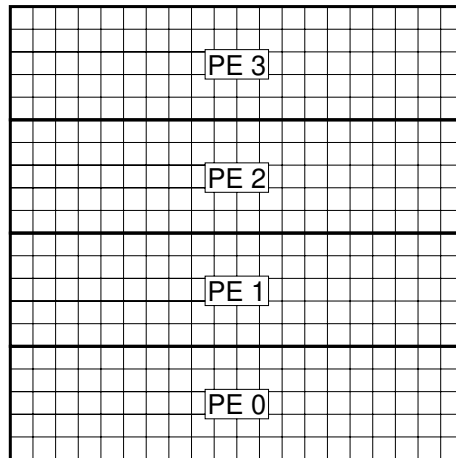


Abbildung 2.4: Aufteilung des Simulationsgebiets auf 4 Prozessorelemente (PE).

gewonnen. Bei der Organisation der Verteilung der Daten auf die PE wurde das Programmpaket PETSc von *Balay et al.* (1998b,a) verwendet. Dies Paket abstrahiert von der zugrunde liegenden *message-passing*-Bibliothek und erlaubt die Verwendung von Objekten wie z. B. verteilten zweidimensionalen Gittern mit überlappenden Rändern. Weitere Details hierzu finden sich in Anhang B.3.

Die Effizienz dieser Parallelisierung ist in Abb. 2.5 dargestellt. Man erkennt für kleine Simulationsgebiete eine eher schlechte Effizienz, die Kurve fällt nicht so schnell ab wie im Idealfall. Dies liegt daran, daß für ein Problem mit 8×8 Gitterzellen auf 8 Prozessoren jeder einzelne Prozessor nur einen Streifen mit einer Breite von einer Gitterzelle bearbeitet. Das Gebiet des einzelnen Prozessors besteht also nur noch aus Rand, an dem Teilchen mit den benachbarten Gebieten, also den benachbarten Prozessoren, ausgetauscht werden. Für mittelgroße Simulationsgebiete, etwa $n_x = n_y = 64$, liegt der Geschwindigkeitsgewinn auf der Ideallinie. Für sehr große Simulationsgebiete, wie $n_x = n_y = 256$, fällt die Rechenzeit sogar schneller als idealerweise erwartet ab. Dies liegt an der Speicherstruktur der einzelnen PE, die eine höhere Lokalität der Daten im Speicher erreichen und dadurch den schnellen Zwischenspeicher besser ausnutzen können.

Hier zeigt sich ein typisches Verhalten von parallelen Rechnungen: Bei kleinen Problemen übersteigt der Kommunikationsaufwand den Nutzen, effizient parallel rechnen ist erst ab einer gewissen Problemgröße möglich. Dies ist aber in der Praxis nicht weiter relevant, da man den programmiertechnischen Aufwand der Parallelisierung von vornherein nur für Aufgaben mit großem Bedarf an Rechenzeit auf sich nimmt.

Da bei der Modellierung der *Farley-Buneman*-Instabilität ein anfänglich homogenes Plasma benutzt wird, ist zu Beginn der Rechnung die Last perfekt auf die PE verteilt. Im Laufe der Rechnung bilden sich geringe Unterschiede in der Zahl der Teilchen

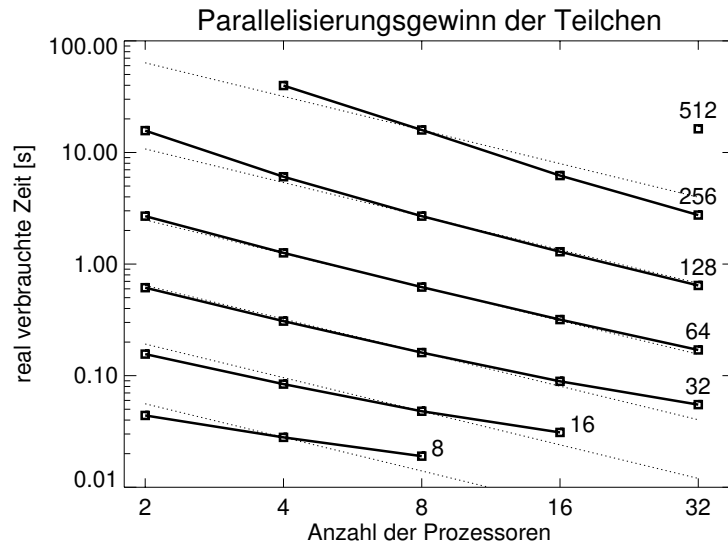


Abbildung 2.5: Effizienz der Parallelisierung (nur für die Teilchen) für verschiedene Größen des Simulationsgebiets von $n_x = n_y = 8$ bis $n_x = n_y = 512$. In allen Läufen war die Anzahl der Teilchen pro Gitterzelle $N_p = 100$, die Zahl der Zeitschritte $N_t = 10$. Die gestrichelten Linien geben den idealen Verlauf, Rechenzeit umgekehrt proportional zur Anzahl der Prozessoren, wieder.

pro PE, so daß die Last nicht mehr völlig gleichverteilt ist. Durch die Aufteilung des Rechengebiets in Streifen quer zur Driftrichtung und damit quer zur Vorzugsrichtung der instabilen Wellen tragen nur die statistischen Schwankungen in der Teilchenzahl, nicht aber die Dichteberge und -täler der Wellen zu dieser ungleichmäßigen Verteilung der Last bei. Auf diese Weise gelingt es, die Last bis auf wenige Prozent gleichmäßig auf die PE zu verteilen, ohne einen speziellen Lastausgleich durchzuführen. Wie *Ferraro et al.* (1993) gezeigt haben, lohnt sich ein Lastausgleich, also eine Neuaufteilung des Rechengebiets auf die PE mit dem dafür nötigen hohen Kommunikationsaufwand, erst bei Problemstellungen mit deutlichen räumlichen Inhomogenitäten, wie z. B. der Expansion eines Plasmastrahls im Vakuum.

2.3.8 Initialisierung

Zu Beginn der Simulation muß eine meist analytisch vorgegebene Verteilungsfunktion $f(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ wie die Maxwellverteilung durch die zur Verfügung stehende Population der Simulationsteilchen möglichst gut repräsentiert werden. Die am häufigsten verwendete Methode hierzu ist die Verwendung von normierten Zufallszahlen $R \in [0, 1]$. Für ein räumlich homogenes Plasma ergeben sich die Ortskoordinaten dann einfach aus $\{x_i\} = L_i \{R\}$, wobei L_i die Länge des Systems in der i -ten Richtung ist.

Initialisierung mit Zufallszahlen

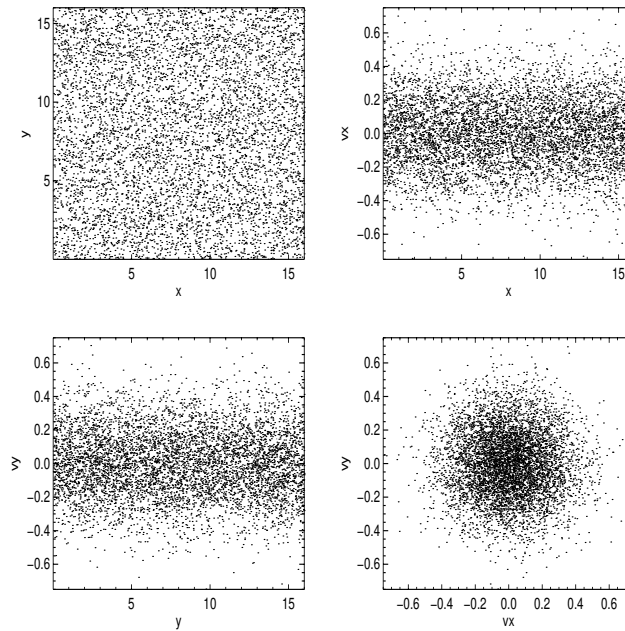
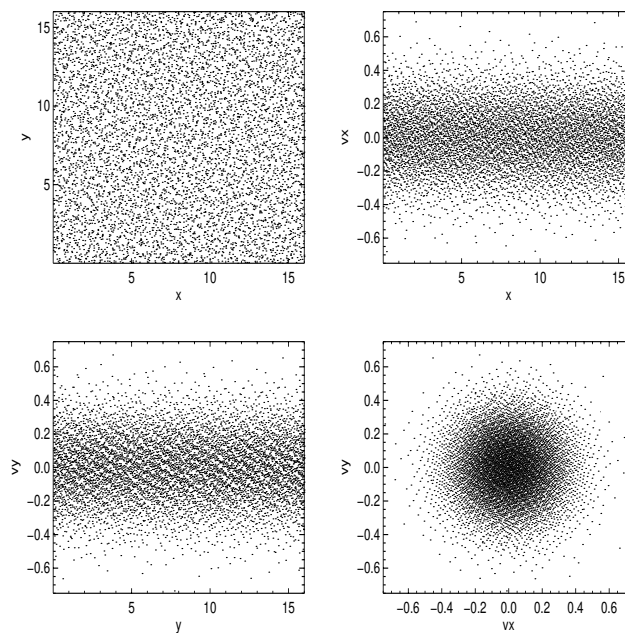
Initialisierung mit *Hammersley*-Sequenzen

Abbildung 2.6: Phasenraumschnitte zum Vergleich der Initialisierungen mit Zufallszahlen und mit *Hammersley*-Sequenzen für ein 16×16 -Gitter mit 25 Teilchen pro Zelle. Man erkennt die geordnete Struktur bei der Verwendung von *Hammersley*-Sequenzen, besonders deutlich in der $y - vy$ -Ebene.

Zur Bestimmung der Geschwindigkeitskomponenten verwendet man die kumulierte Verteilungsfunktion (*Birdsall und Langdon*, 1991, Kap. 16-2):

$$F(v) \equiv \frac{\int_{-\infty}^v f(v') dv'}{\int_{-\infty}^{\infty} f(v') dv'} \quad (2.42)$$

wobei $\lim_{v \rightarrow -\infty} F(v) = 0$ und $\lim_{v \rightarrow \infty} F(v) = 1$. Diese kumulierte Verteilungsfunktion kann man nun invertieren und erhält so

$$v = F^{-1}(R) \quad (2.43)$$

Die numerische Lösung der Gleichung (2.43) ist recht unproblematisch, da die kumulierte Verteilungsfunktion unabhängig von der konkreten Form der Verteilungsfunktion monoton ansteigt und auf das Intervall $[0, 1]$ beschränkt ist. Da diese Werte, außer bei den Stößen mit dem Neutralgas, nur zu Beginn der Rechnung benötigt werden, ist auch der Rechenzeitbedarf unkritisch.

Wie in Abb. (2.6) gezeigt, gibt es noch andere Möglichkeiten, die Teilchen zu initialisieren. Die Wahl von Zufallszahlen aus dem Intervall $[0, 1]$ bewirkt ein maximales Rauschen. Wählt man statt dessen Zahlen, die das Intervall gleichmäßig und geordnet füllen, wie die *Hammersley-Sequenzen* (*Hammersley und Handscomb*, 1964, siehe auch Anhang B.2), so erhält man Anfangswerte mit einem deutlich reduzierten Rauschen. *Denavit und Walsh* (1981) konnten zeigen, daß diese Art der Initialisierung die Möglichkeit bietet, schwache Instabilitäten zu betrachten, die bei einer Initialisierung mit Zufallszahlen bereits vom Rauschen überdeckt werden.

2.4 Stöße mit dem Neutralgas

Für die Entstehung der modifizierten Zweistrominstabilität in der ionosphärischen *E*-Schicht sind die Stöße der Ionen mit dem umgebenden Neutralgas wesentlich, da sie die Ionenbewegung an die des Neutralgases koppeln, während die Elektronen aufgrund ihrer höheren Zyklotronfrequenz magnetisiert sind und daher eine $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift ausführen. In geringeren Höhen unterhalb 90 km ist das Plasma so schwach ionisiert, daß kaum noch meßbare Ströme auftreten. In größeren Höhen oberhalb 125 km sind wegen der geringeren Neutralgasdichte auch die Ionen magnetisiert, so daß alle geladenen Teilchen die gleiche Driftbewegung erfahren.

Des weiteren steht das Plasma durch die Stöße in thermischem Kontakt mit dem Neutralgas. Da die Ionenmasse in der gleichen Größenordnung wie die Masse der Neutralgasmoleküle liegt, können die Ionen bei elastischen Stößen sowohl Impuls als

auch Energie übertragen. Da die Details der Verteilungsfunktion der Ionen hier nicht interessieren, genügt es, diese elastischen Stöße zu modellieren. Im Gegensatz dazu können die Elektronen aufgrund ihrer geringeren Masse nur Impuls, aber kaum Energie durch elastische Stöße übertragen. Um die Aufheizung der Elektronen zu untersuchen, ist es notwendig, die inelastischen Stöße der Elektronen mit dem Neutralgas, die zur Anregung von Vibrations- und Rotationsniveaus führen, genauer zu modellieren, da sie einen wichtigen Beitrag zur Energiebilanz der Elektronen darstellen (*Schunk und Nagy, 1978*).

Da sich die hier betrachteten Vorgänge innerhalb von weniger als $10^{-1} s$ abspielen, tritt keine nennenswerte Temperaturänderung des Neutralgases auf, die sich auf einer Zeitskala von $10^3 s$ abspielt. Das Neutralgas kann somit als konstanter Hintergrund angesehen werden.

Im Modell des *particle-in-cell*-Verfahrens ist hier ein Sprung in der Betrachtungsweise nötig: Für die Lösung der gekoppelten Bewegungs- und Feldgleichungen betrachtet man die Simulationsteilchen als Makropartikel, also als räumlich ausgedehnte Teilchen mit großer Ladung und Masse, deren Verhältnis q/m gleich dem der realen Teilchen ist. Bei der Modellierung der Stöße betrachtet man die Simulationsteilchen als reale Elektronen und Ionen, die mit dem Neutralgas Stöße ausführen. Auf diese Weise erhält man eine Stichprobe der Gesamtzahl der Stoßvorgänge im Plasma.

2.4.1 Einfaches Modell

In den Arbeiten von *Machida und Goertz (1988)*, *Janhunen (1994b)* und *Thiemann und Schlegel (1994)* wurden jeweils recht einfache Modelle für die Stöße mit dem Neutralgas verwendet. Alle Autoren betrachten drei verschiedene Arten von Stößen:

- elastische Elektron–Neutralgasstöße
- inelastische Elektron–Neutralgasstöße
- elastische Ion–Neutralgasstöße

Machida und Goertz und *Thiemann und Schlegel* nehmen eine konstante Stoßfrequenz ν für die verschiedenen Stoßprozesse an, *Janhunen* hingegen eine konstante freie Weglänge. Hierbei wählt er willkürlich ein reduziertes Verhältnis der freien Weglängen λ bezüglich der elastischen und inelastischen Stöße der Elektronen mit dem Neutralgas von $\lambda_{inel.} = 7\lambda_{el.}$, um, wie er selbst schreibt, die Aufheizung der Elektronen in der gewünschten Größenordnung in der Simulation zu reproduzieren.

2.4.2 Verfeinertes Modell

Wenn man eine kinetische Beschreibung des Plasmas wählt, liegt es nahe, ein detaillierteres Modell für die Stöße zu finden, als es mit der Beschreibung durch mittlere Stoßfrequenzen oder freie Weglängen der Fall ist. In der veröffentlichten Literatur über die numerische Behandlung solar-terrestrischer Plasmen ist zu diesem Problem nichts weitergehendes zu finden, da sich ein Großteil der Arbeiten auf die Magnetosphäre, den Sonnenwind oder die Sonnenkorona beziehen, also auf Gebiete mit stoßfreien Plasmen.

Auf einem anderen Gebiet der Plasmaphysik, von den physikalischen Parametern der Ionosphäre viel näher verwandt als z. B. der Sonnenwind, sind Stoßprozesse schon seit einiger Zeit modelliert worden: Dies ist die Physik der plasmaunterstützten Prozessverfahren (siehe z. B. *Vahedi und Surendra, 1995; Birdsall, 1991*).

Hierbei geht es darum, die Stoßprozesse im Detail zu modellieren, ausgehend von den energieabhängigen Stoßquerschnitten der einzelnen Stoßkanäle.

Beschreibung des Stoßmodells

Nehmen wir an, daß ein Teilchen der Sorte s in N verschiedenen Stoßkanälen mit dem Neutralgas reagieren kann. Die kinetische Energie des i -ten einfallenden Teilchens der Sorte s ist gegeben durch

$$E_i = \frac{1}{2}m_s v_i^2 = \frac{1}{2}m_s(v_{i,x}^2 + v_{i,y}^2 + v_{i,z}^2) \quad (2.44)$$

Mit dieser Energie kann man die Stoßquerschnitte berechnen. Der totale Stoßquerschnitt $\sigma_T(E_i)$ ist die Summe

$$\sigma_T(E_i) = \sigma_1(E_i) + \dots + \sigma_N(E_i) \quad (2.45)$$

wobei $\sigma_j(E_i)$ der Stoßquerschnitt des j -ten Stoßkanals ist. Die Stoßwahrscheinlichkeit P_i für das i -te Teilchen ist mit der pro Zeitschritt Δt zurückgelegten Wegstrecke $\Delta x = v_i \Delta t$

$$P_i = 1 - \exp(-\Delta x \sigma_T(E_i) n_n) = 1 - \exp(-\nu(E_i) \Delta t) \quad (2.46)$$

mit der energieabhängigen Stoßfrequenz

$$\nu(E_i) = v_i \sigma_T(E_i) n_n \quad (2.47)$$

Hierbei ist n_n die Teilchendichte des Neutralgases.

Ein Stoß des i -ten Teilchen findet statt, wenn eine Zufallszahl aus dem Intervall $[0, 1]$ kleiner ist als P_i . Die Details des Stoßprozesses werden im Abschnitt 2.4.4 beschrieben. Wenn ein Stoß stattfindet, wird mit einer weiteren Zufallszahl der Stoßkanal bestimmt.

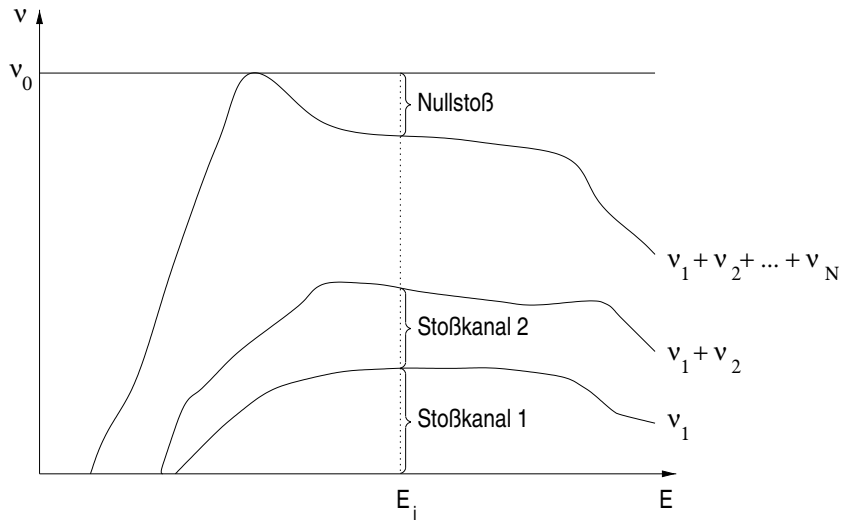


Abbildung 2.7: Schema der Nullstoß-Methode: Der zusätzliche Stoßkanal bewirkt eine konstante Stoßfrequenz über alle Energien.

Der Zeitschritt Δt legt fest, wie oft überprüft wird, ob ein Stoß stattfindet und beeinflusst die Genauigkeit des Stoßmodells. Für jedes endliche Δt ist $P_i < 1$. Nehmen wir zur Vereinfachung an, daß sich die Energie des Teilchens beim Stoß nicht ändert. Dann ist die Wahrscheinlichkeit für n Stöße im Zeitraum Δt gleich P_i^n . Da dies Stoßmodell nur einen Stoß pro Teilchen und Zeitschritt erlaubt, ist der Fehler, definiert als Zahl der unberücksichtigten Stöße

$$r = \sum_{k=2}^{\infty} P_i^k = \frac{P_i^2}{1 - P_i}. \quad (2.48)$$

Um einen Fehler von $r < 0.01$ zu erreichen, muß $P_i < 0.095$ sein. Hierdurch wird eine obere Grenze für Δt gesetzt.

2.4.3 Nullstoß-Methode

Es ist offensichtlich, daß die Berechnung von P_i für jedes Teilchen zu jedem Zeitschritt einen großen Rechenaufwand darstellt. Für jedes Teilchen müssen die kinetische Energie und die verschiedenen Stoßquerschnitte berechnet werden.

Diese aufwendigen Berechnungen kann man stark einschränken, wenn man, wie in Abb. 2.7 schematisch dargestellt, eine konstante Stoßfrequenz ν_0 einführt, die das Maximum über alle vorkommenden Stoßfrequenzen bildet:

$$\nu_0 = \max_i(\nu(E_i)) = n_n \max_i(\sigma_T(E_i)v_i) \quad (2.49)$$

Man kann dies so auffassen, daß man einen weiteren Stoßprozess einführt, mit einer Stoßfrequenz, die, addiert zu der totalen Stoßfrequenz, gerade den konstanten Wert ν_0 über alle E ergibt. Dieser Stoßprozess wird „Nullstoß“ genannt, weil keine Wechselwirkung mit dem Neutralgas stattfindet.

Der maximale Anteil der Teilchen, die in einem Zeitschritt einen Stoß ausüben, ist gegeben durch

$$P_0 = 1 - \exp(-\nu_0 \Delta t) \quad (2.50)$$

Die Teilchen, die an einem Stoß teilnehmen sollen, werden zufällig aus der Gesamtmenge der Teilchen ausgewählt. Für jedes dieser Teilchen werden die Stoßfrequenzen berechnet, um dann mit einer Zufallszahl $0 \leq R \leq \nu_0$ nach dem Schema

$$\begin{aligned} R &\leq \nu_1(E_i) && \text{(Stoßkanal 1)} \\ \nu_1(E_i) < R &\leq \nu_1(E_i) + \nu_2(E_i) && \text{(Stoßkanal 2)} \\ &\vdots && \\ \sum_{j=1}^N \nu_j(E_i) < R &&& \text{(Nullstoß)} \end{aligned}$$

den Stoßkanal festzulegen.

Die Effizienz dieses Verfahrens hängt von der Größe von P_0 ab. Wie oben bereits ausgeführt, muß die Zeitschrittweite Δt so gewählt werden, daß P_0 kleiner als 0.095 ist. In dem hier betrachteten Fall der ionosphärischen E -Schicht ist die Stabilitätsanforderung des PIC-Verfahrens an die Zeitschrittweite jedoch stärker, so daß hierdurch keine weitere Beschränkung auftritt. Im Falle des expliziten PIC-Verfahrens ist die Zeitschrittweite so klein, daß P_0 Werte von weniger als 0.01 erreicht. Die Einsparungen an Rechenzeit sind in diesem Fall enorm, da für 99 Prozent der Teilchen die Berechnung der energieabhängigen Stoßfrequenzen entfällt. Tatsächlich nimmt die komplette Modellierung der Stöße weniger als 5 Prozent der gesamten Rechenzeit in Anspruch.

2.4.4 Details des Stoßprozesses

Elektronen

Bei einem elastischen Stoß wird das Elektron um einen Winkel χ abgelenkt, den *Surendra et al.* (1990) mit folgendem differentiellen Stoßquerschnitt angenähert hat:

$$\sigma(E, \chi) = \frac{E}{4\pi[1 + E \sin^2(\chi/2)] \ln(1 + E)} \quad (2.51)$$

wobei E die Energie des einfallenden Elektrons in Elektronvolt ist. Den Winkel kann man mit einer gleichverteilten Zufallszahl $R \in [0, 1]$ aus dem normierten kumulierten

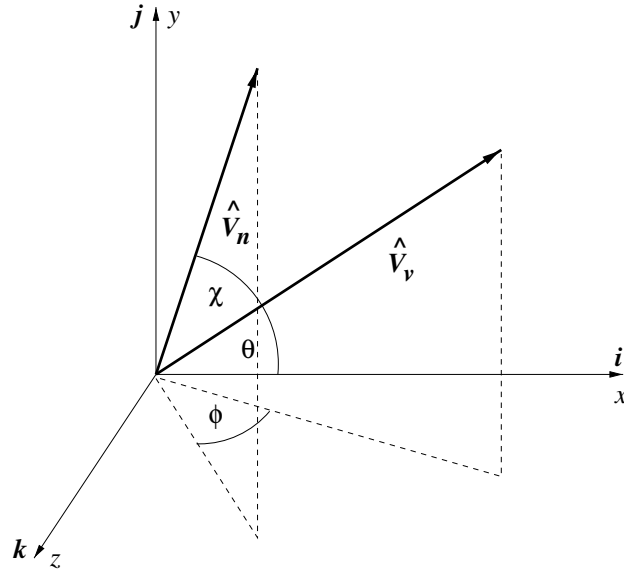


Abbildung 2.8: Vektordiagramm der Geschwindigkeiten im Stoßprozeß.

differentiellen Stoßquerschnitt wählen:

$$R = \frac{\int_0^\chi \sigma(E, \chi') \sin(\chi') d\chi'}{\int_0^\pi \sigma(E, \chi') \sin(\chi') d\chi'} \quad (2.52)$$

Diese Gleichung kann man nach $\cos \chi$ lösen:

$$\cos \chi = \frac{2 + E - 2(1 + E)^R}{E} \quad (2.53)$$

Wie auch bei *Vahedi und Surendra* (1995) wird Glg. (2.53) für alle Arten von Elektron – Neutralgasstößen verwendet. Für hohe Energien ergibt Glg. (2.53) vor allem kleine Winkel, also Vorwärtsstreuung, während für niedrigere Energien die Streuung eher isotrop erfolgt. Der azimutale Streuwinkel ϕ wird gleichförmig im Intervall $[0, 2\pi]$ verteilt und mit einer zweiten Zufallszahl $R' \in [0, 1]$ bestimmt aus

$$\phi = 2\pi R'. \quad (2.54)$$

Nachdem man χ und ϕ gewählt hat, kann man anhand geometrischer Überlegungen die Richtung der Geschwindigkeit des gestreuten Elektrons bestimmen. In Abb. 2.8 bezeichnen \hat{v}_v und \hat{v}_n Einheitsvektoren in Richtung der Geschwindigkeit vor und nach dem Stoß. Wie man Abb. 2.8 entnimmt, errechnet sich \hat{v}_n aus \hat{v}_v aus folgender Beziehung:

$$\hat{v}_n = \hat{v}_v \cos \chi + \hat{v}_v \times \mathbf{i} \frac{\sin \chi \sin \phi}{\sin \theta} + \hat{v}_v \times (\mathbf{i} \times \hat{v}_v) \frac{\sin \chi \cos \phi}{\sin \theta} \quad (2.55)$$

θ ist gegeben durch $\cos \theta = \hat{v}_v \cdot \mathbf{i}$.

Realistische Stoßfrequenzen im Höhenbereich von 90 - 150 km für N₂ und O₂
Schunk und Nagy (1978) geben folgende Näherung für die mittleren Stoßfrequenzen an, die auf eine Arbeit von *Banks* (1966) zurückgehen:

$$\langle \nu_{e, N_2} \rangle = 2.33 \times 10^{-11} n(N_2) [1 - 1.21 \times 10^{-4} T_e] T_e \quad (2.56a)$$

$$\langle \nu_{e, O_2} \rangle = 1.82 \times 10^{-10} n(O_2) [1 + 3.6 \times 10^{-2} T_e^{1/2}] T_e^{1/2} \quad (2.56b)$$

Hierbei sind die Dichten in cm^{-3} und die Temperaturen in K anzugeben. Für eine Teilchendichte von $n(N_2) = 0.16 \times 10^{13} cm^{-3}$ bzw. $n(O_2) = 0.4 \times 10^{12} cm^{-3}$ und eine Elektronentemperatur von $250K$, dies entspricht der internationalen Referenzatmosphäre CIRA (*Strickland, 1972*) in einer Höhe von etwa 110 km, ergibt sich $\nu(N_2) = 9038 \text{ Hz}$ und $\nu(O_2) = 1806 \text{ Hz}$.

Aus den tabellierten Stoßquerschnitten von *Phelps und Pitchford* (1985b) (siehe Abb. 2.9 und 2.10) und einer Maxwellverteilung $f(v)$ der Elektronen erhält man mit der allgemeinen Definition

$$\langle \nu \rangle = \frac{\int f(v) \sigma(v) n v dv}{\int f(v) dv} \quad (2.57)$$

bei gleicher Neutralgasdichte und Elektronentemperatur Werte von $\nu(N_2) = 8832 \text{ Hz}$ bzw. $\nu(O_2) = 877 \text{ Hz}$. Die Werte für Stickstoff stimmen gut überein, während beim Sauerstoff die Stoßfrequenz nach den Stoßquerschnitten von *Phelps und Pitchford* deutlich kleiner ist. Da die Daten dieser Autoren auf den Werten von *Banks* aufbauen, jedoch auch neuere Ergebnisse mitberücksichtigen, wurden die neueren Werte von *Phelps und Pitchford*, wie in Abb. 2.9 und 2.10 dargestellt, in dieser Arbeit benutzt.

Vahedi und Surendra (1995) zeigen in ihrer Abb. 8 Kurven für die Stoßquerschnitte in O₂, die so aussehen, als ob die einzelnen Spitzen aus Abb. 2.10 miteinander verbunden wären. Dies führt natürlich bei Integration über die Energie zu einer höheren mittleren Stoßfrequenz für die inelastischen Stöße.

Test des Modells

Zur Überprüfung des Stoßmodells wurde das Programm mit einem thermischen Plasma bei einer Temperatur von $T_e = T_i = T_n = 250K$ und einer Teilchenzahl von $N = 25600$ initialisiert. Danach wurden in jedem Zeitschritt nur die Stöße der Elektronen mit dem Neutralgas berechnet, die Lösung der Bewegungs- und Feldgleichungen war abgeschaltet. Da die Stoßquerschnitte für Vibrationsanregung von N₂ und O₂ (vgl. Abb. 2.9 und 2.10 jeweils unten) wegen der Anregungsenergie erst weit im Schwanz der Maxwellverteilung größer als Null sind, wurde die Vibrationsanregung in diesem Test nicht berücksichtigt. Zählt man die Stöße in den einzelnen Stoßkanälen und teilt

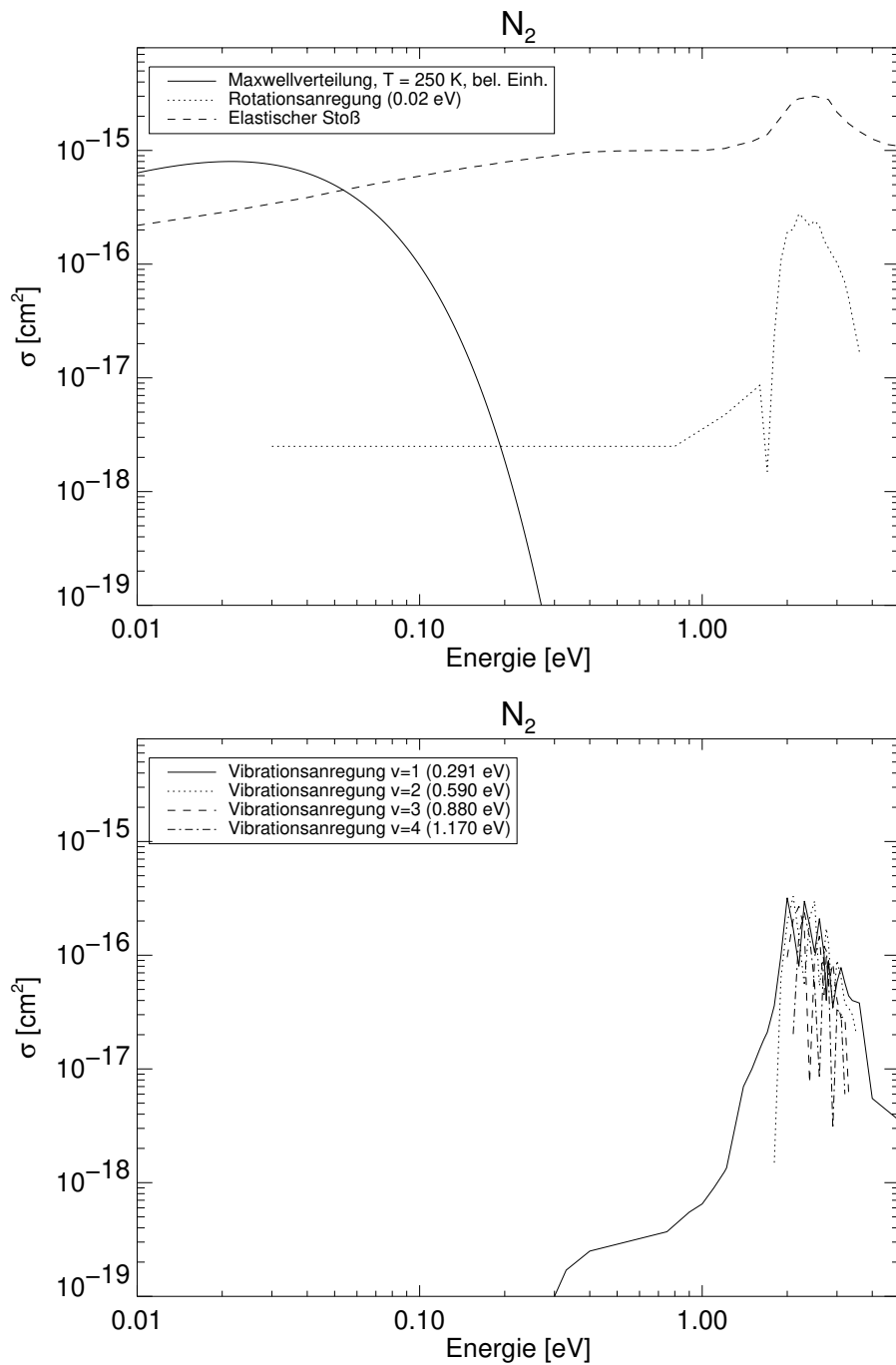


Abbildung 2.9: Stoßquerschnitte für Elektronen in N_2 nach *Phelps und Pitchford* (1985a). Die Werte in Klammern sind die Anregungsenergien der jeweiligen Niveaus. Im oberen Bild ist zusätzlich die Form einer Maxwellverteilung für eine Temperatur von 250K dargestellt. Die Maxima der verschiedenen Vibrationsniveaus liegen bei vergleichbaren Energien, wegen den verschiedenen Anregungsenergien unterscheiden sie sich aber im niedrigerenergetischen Teil.

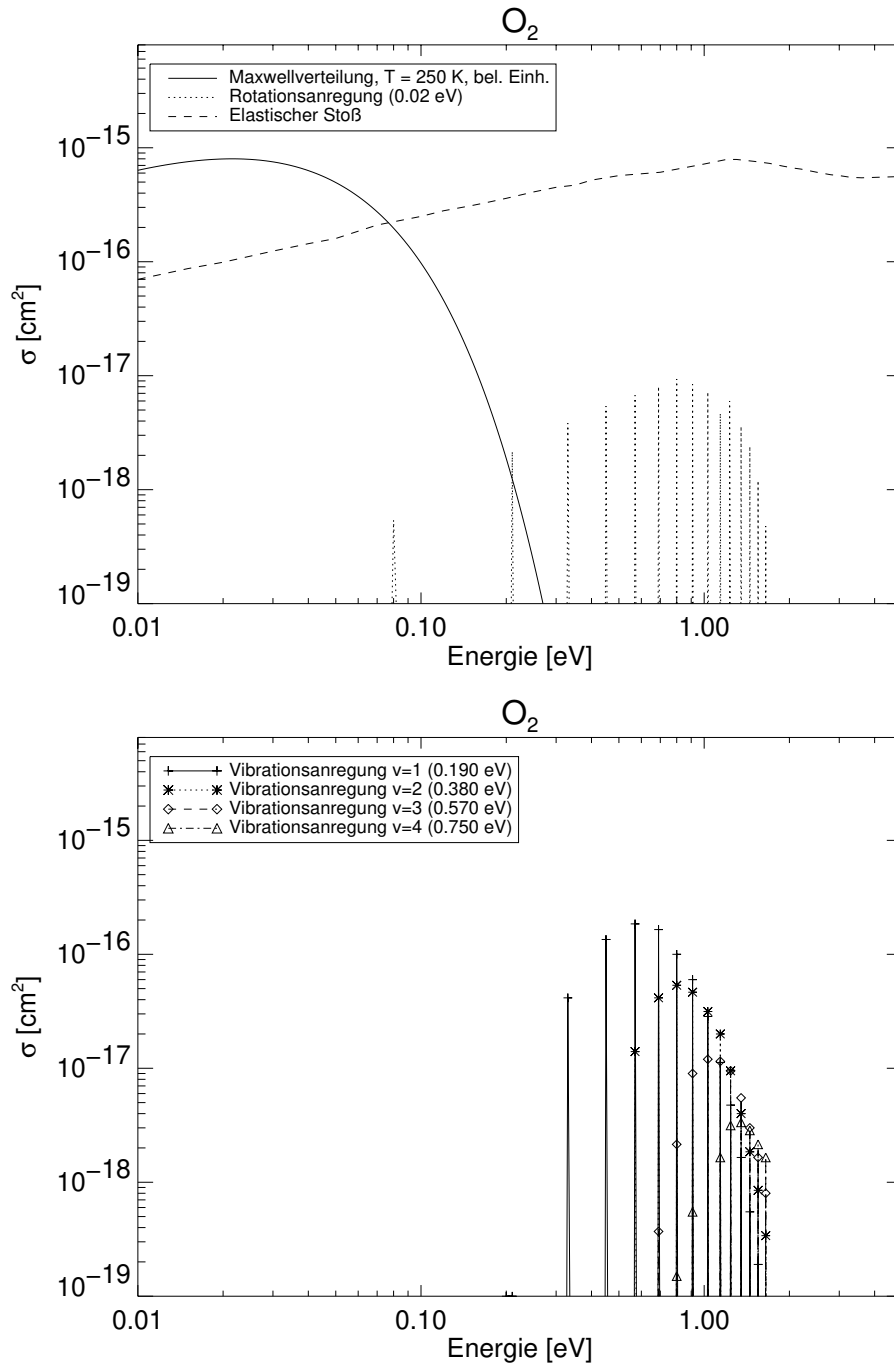


Abbildung 2.10: Stoßquerschnitte für Elektronen in O_2 nach *Phelps und Pitchford* (1985a). Die Werte in Klammern sind die Anregungsenergien der jeweiligen Niveaus. Im oberen Bild ist zusätzlich die Form einer Maxwellverteilung für eine Temperatur von 250K dargestellt. Man beachte die Auflösung einzelner Spitzen in den Stoßquerschnitten für Rotations- und Vibrationsanregung.

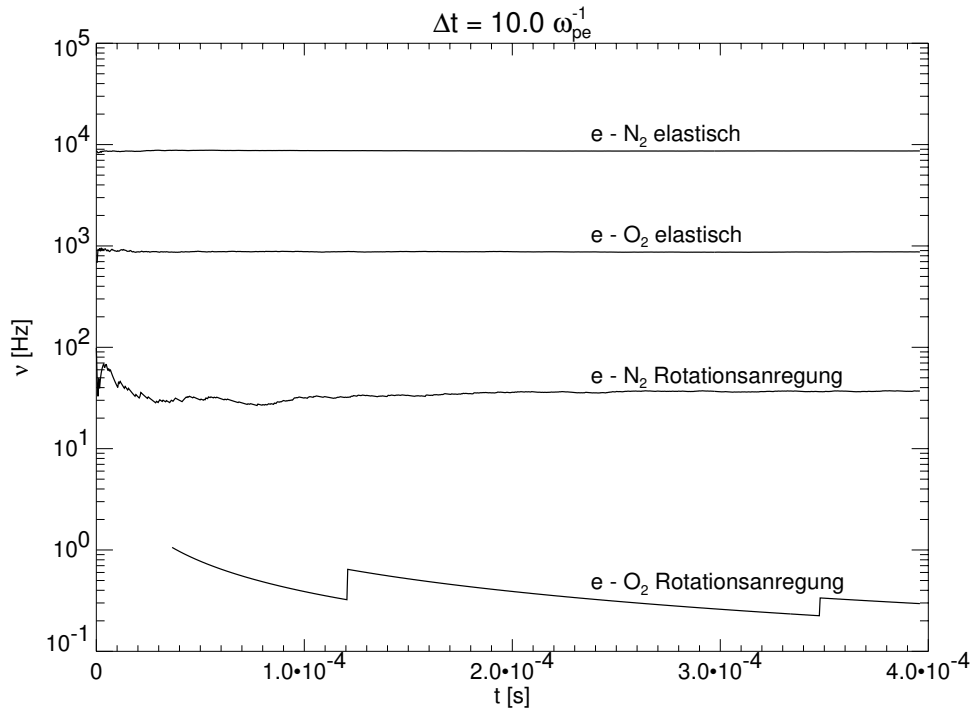


Abbildung 2.11: Kumulierte Mittelwerte der in der Modellierung gefundenen Stoßfrequenzen mit den Stoßquerschnitten nach *Phelps und Pitchford* (1985a).

durch die Anzahl der Teilchen N , erhält man die Stoßwahrscheinlichkeit P . Nach Glg. (2.46) gilt

$$\nu(m) = \frac{-\ln(1-P)}{t} = \frac{-\ln(1 - \frac{n_{coll}}{Nm})}{m\Delta t} \quad (2.58)$$

für die mittlere Stoßfrequenz $\nu(m)$ zum Zeitpunkt $t = m\Delta t$, wie in Abb. 2.11 dargestellt. Wie zu erwarten, sind bei niedrigeren Stoßfrequenzen die statistischen Schwankungen deutlicher ausgeprägt. Bei der Rotationsanregung von O_2 sind während des gesamten Laufs nur drei Stöße vorgekommen. Die aus dem Modell gewonnenen Stoßfrequenzen sind in Tabelle 2.1 zusammen mit den aus einer Maxwellverteilung berechneten Werten aufgelistet. Zum Vergleich sind noch die Stoßfrequenzen nach *Schunk und Nagy* aus Glg. (2.56) angegeben.

Diese Werte stimmen sowohl für N_2 als auch O_2 hervorragend mit den aus einer Maxwellverteilung gewonnenen Stoßfrequenzen überein.

Zusammenfassend kann man sagen, daß das Modell die Stöße der Elektronen mit dem Neutralgas geeignet beschreibt, wobei die Energieabhängigkeit des Stoßprozesses voll berücksichtigt wird. Durch die Einführung des Nullstoßes ist es möglich, den Rechenaufwand in der gleichen Größenordnung wie bei einem einfachen Modell zu

Stoßkanal	SN ν [Hz]	TM ν [Hz]	Mod ν [Hz]
elastisch $e - N_2$		8793	8650
Rotationsanregung $e - N_2$		39.4	36.5
Summe $e - N_2$	9038	8832	8687
elastisch $e - O_2$		876	871
Rotationsanregung $e - O_2$		0.27	0.29
Summe $e - O_2$	1806	877	872

Tabelle 2.1: Vergleich der Stoßfrequenzen nach *Schunk und Nagy* (SN) mit den Resultaten nach *Phelps und Pitchford* im thermischen Mittelwert (TM) und den aus dem Modell gewonnenen Werten (Mod).

halten. Für ein thermisches Plasma ergibt das Modell die erwarteten mittleren Stoßfrequenzen. Lediglich bei den Werten für molekularen Sauerstoff gibt es Diskrepanzen zu früher veröffentlichten Näherungsausdrücken. Dies liegt aber sehr wahrscheinlich an der unterschiedlichen Wahl der Eingangsdaten. Leider lassen sich die verwendeten Stoßquerschnitte und Neutralgasdichten aus der Arbeit von *Schunk und Nagy* (1978) nicht ableiten, so daß hier keine weitere Aussage über die Herkunft dieses Unterschieds gemacht werden kann. Die Gültigkeit des Stoßmodells bleibt hiervon unberührt.

Ionen

Das Modell der Stöße von Ionen mit dem Neutralgas braucht für das hier behandelte Problem bei weitem nicht so detailliert zu sein wie das für die Stöße der Elektronen, da die Ionen wegen ihrer annähernd gleichen Masse sehr effizient Energie mit dem Neutralgas austauschen. Weitere Details des Stoßprozesses, insbesondere alle inelastischen Vorgänge, sind deswegen für die Energiebilanz der Ionen unwesentlich, zumindest bei den hier betrachteten niedrigen Energien. Es genügt also, wenn die Ionen genügend oft mit neutralen Atomen stoßen, um die $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift zu unterbinden. Hierzu wurde, wie auch bei *Thiemann und Schlegel* (1994), eine konstante Stoßfrequenz von $\nu = 2500\text{Hz}$ verwendet. Die Annahme einer konstanten freien Weglänge, wie bei *Janhunen* (1994a), ist genau so gut gerechtfertigt, benötigt aber einen etwas höheren Rechenaufwand. Der eigentliche Stoß wird so modelliert, daß das Ion die Geschwindigkeit des Neutralgasatoms annimmt, dies entspricht einem Stoß mit Ladungsübergang.

Für die Modellierung von Plasmen, bei denen man an der genauen Verteilungsfunktion der Ionen interessiert ist, kann man natürlich die Nullstoß-Methode auch auf

die Ionen anwenden. Hierzu benötigt man dann die entsprechenden energieabhängigen Stoßquerschnitte.

2.5 Fazit

In diesem Kapitel wurden die physikalischen Anforderungen an ein Modell zur Beschreibung der *Farley-Buneman*-Instabilität dargestellt. Ein geeignetes Modell muß folgende Punkte beinhalten:

1. Kinetische Beschreibung der Elektronen und Ionen
2. Elektrostatische Näherung der Maxwell-Gleichungen
3. Zwei Raumdimensionen senkrecht zum Erdmagnetfeld, drei Geschwindigkeitskomponenten der Teilchen
4. Initialisierung beider Teilchensorten im thermischen Gleichgewicht mit der jeweiligen Driftgeschwindigkeit
5. Periodische Randbedingungen in beiden Raumrichtungen
6. Stöße der Elektronen und Ionen mit dem Neutralgas

Eine weitere numerische Anforderung ergibt sich aus dem zum Teil sehr hohen Rechenzeitbedarf der verschiedenen hier vorgestellten Verfahren.

Von den hier untersuchten Verfahren erweisen sich zunächst lediglich zwei als geeignet zur Modellierung der *Farley-Buneman*-Instabilität in der polaren *E*-Schicht der Ionosphäre:

1. Das parallelisierte explizite PIC-Verfahren
2. Das direkte implizite PIC-Verfahren

Kapitel 3

Resultate der verschiedenen PIC-Verfahren

Anhand der folgenden Resultate werden die beiden Verfahren, die in Kapitel 2 als potentiell zur Untersuchung der *Farley-Buneman*-Instabilität im polaren Elektrojet geeignet bewertet wurden, konkret auf ihre Tauglichkeit zum Studium der *Farley-Buneman*-Instabilität hin untersucht.

3.1 Stabilitätsuntersuchung

Wie bereits in Abschnitt 2.3.3 dargestellt, birgt das explizite *particle-in-cell*-Verfahren verschiedene numerische Instabilitäten. Eine dieser Instabilitäten betrifft die Wahl der Zeitschrittweite, eine weitere die Wahl der Gitterweite. Diese Effekte sind natürlich von besonderer Bedeutung, wenn man ein numerisches Modell für eine physikalische Instabilität finden will, da dann das Risiko besteht, die numerische Instabilität mit der physikalischen zu verwechseln. Deswegen sollen die numerischen Effekte zunächst an einer stabilen physikalischen Situation getestet werden, bevor man darangehen kann, das numerische Modell auf die *Farley-Buneman*-Instabilität anzuwenden.

In allen folgenden Rechnungen zur Untersuchung der numerischen Stabilität der verschiedenen Verfahren sind die äußeren Felder E_0 und B sowie die Stöße mit dem Neutralgas abgeschaltet, um nur den Effekt der gekoppelten Bewegungs- und Feldgleichungen zu studieren. Auf diese Weise kann man die gewonnenen Resultate mit den veröffentlichten Ergebnissen für stoßfreie Plasmen vergleichen. Es gibt nur wenige Arbeiten (z. B. *Surendra et al.*, 1990; *Birdsall*, 1991; *Ashtiani et al.*, 1995), die sich mit der Modellierung von schwach ionisierten Plasmen beschäftigen. Ausführliche Stabilitätsuntersuchungen sind bislang nur für Modelle stoßfreier Plasmen vorgenommen worden (*Birdsall und Langdon*, 1991), so daß nur diese Resultate zum Vergleich her-

angezogen werden können.

Da die Beobachtung der Aufheizung der Elektronen in der polaren E -Schicht den Anstoß für diese Arbeit gab, ist die Entwicklung der Elektronentemperatur entscheidend für die Tauglichkeit eines Verfahrens. Als Test bietet sich an, das Plasma mit einer Maxwellverteilung mit gleicher Elektronen- und Iontentemperatur zu initialisieren und dann die Temperatur der Elektronen über einen gewissen Zeitraum zu beobachten. Es wird also nicht wie bei *Birdsall und Langdon* (1991) die zeitliche Entwicklung der Gesamtenergie betrachtet, da eine geringe Änderung der potentiellen Energie des Plasmas eher zu tolerieren wäre als eine unphysikalische Änderung der Elektronentemperatur, deren Erhöhung durch die Instabilität ja überhaupt erst den Anlaß für ein *particle-in-cell*-Verfahren gegeben hat. Im hier betrachteten Fall eines Plasmas im thermischen Gleichgewicht ohne äußere Kräfte sollte aber jeder Beitrag zur Gesamtenergie für sich im Rahmen der thermischen Fluktuationen konstant bleiben.

3.1.1 Explizites Verfahren

Für das explizite Verfahren wurde mit Glg. (2.20) bereits eine obere Grenze für die Zeitschrittweite gefunden.

Weitere Parameter, die die numerische Stabilität des Verfahrens beeinflussen können, sind die Gitterweite Δx und die Zahl der Simulationsteilchen. Für beide Größen läßt sich keine vergleichbare analytische Stabilitätsbedingung finden, so daß einige Testläufe erforderlich sind, um deren Einfluß zu bestimmen.

In der ersten Serie von Testläufen wurde die Zahl der Simulationsteilchen pro Gitterzelle $n_p = 100$ konstant gehalten und nur die Gitterweite variiert. Dadurch verändert sich natürlich das Verhältnis von Simulationsteilchen zu realen Teilchen, oder anders ausgedrückt, die Anzahl der Simulationsteilchen pro Debye-Fläche (λ_D^2). In Abb. 3.1 ist die zeitliche Entwicklung der Elektronentemperatur für verschiedene Werte der Gitterweite, normiert auf die Debyelänge, dargestellt. Man erkennt eine numerisch bedingte Aufheizung des Plasmas, die mit steigender Gitterweite zunimmt. Wie *Birdsall und Langdon* (1991) gezeigt haben, ist es eine generelle Eigenschaft des expliziten PIC-Verfahrens in der hier verwendeten Form, daß der Gesamtimpuls erhalten bleibt, nicht jedoch die Gesamtenergie. Hier ist diese numerische Aufheizung bereits für eine Gitterweite von $\Delta x = \Delta y = 2\lambda_D$ nicht mehr zu tolerieren.

Hält man dagegen die Gitterweite konstant und ändert die Zahl der Simulationsteilchen pro Gitterzelle n_p , so ergibt sich ein anderes Bild. In Abb. 3.2 ist die Elektronentemperatur für eine Serie von Läufen mit einer konstanten Gitterweite von $\Delta x = \Delta y = 2\lambda_D$ dargestellt. Die numerisch bedingte Aufheizung des Plasmas nimmt mit zunehmender Zahl der Simulationsteilchen ab, bis bei $n_p = 400$ eine annähernd gleiche Rate der Aufheizung wie in Abb. 3.1 für eine Gitterweite von $\Delta x = \Delta y = 1\lambda_D$

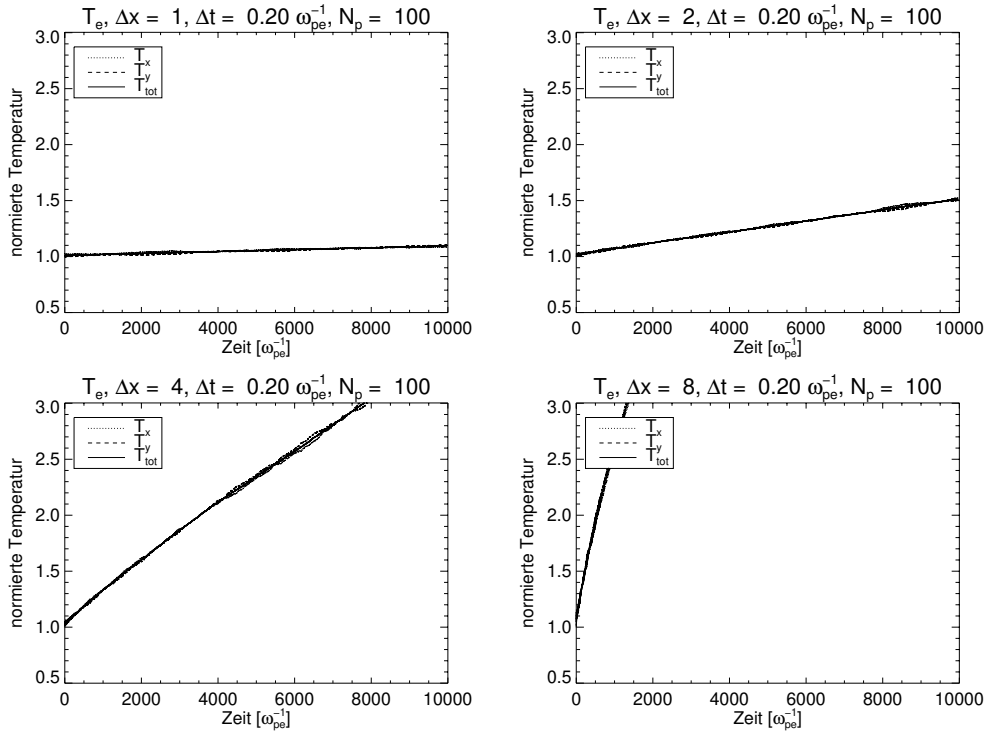


Abbildung 3.1: Explizites PIC-Verfahren, Elektronentemperatur für verschiedene Gitterweiten $\Delta x/\lambda_D$. Die Zeitschrittweite betrug jeweils $\Delta t = 0.2 \omega_{pe}^{-1}$, die Zahl der Teilchen pro Gitterzelle $n_p = 100$, die Zahl der Gitterpunkte $n_x = n_y = 16$. Mit zunehmender Gitterweite steigt auch die numerische Aufheizung der Elektronen.

und eine Anzahl $n_p = 100$ erreicht wird.

Bei diesen beiden Läufen mit $\Delta x = \Delta y = 2\lambda_D$, $n_p = 400$ sowie $\Delta x = \Delta y = 1\lambda_D$, $n_p = 100$ ist die Anzahl der Simulationsteilchen pro Debyeﬂäche $N_D = n_p/\Delta x\Delta y$ gleich. Dies läßt vermuten, daß für eine gleiche Anstiegsrate der Elektronentemperatur die Zahl der Simulationsteilchen pro Debyeﬂäche konstant gehalten werden muß. Betrachtet man die Elektronentemperaturen allerdings genauer, wie in Abb. 3.3 mit einer anderen Skalierung, so erkennt man, daß die Aufheizung im Falle der größeren Gitterweite stärker ist, während durch die größere Gesamtzahl der Teilchen im Modell die Fluktuation geringer geworden sind. Selbst wenn die Aufheizung der Elektronen exakt gleich wäre, hätte man hierdurch keinen Vorteil, da auf diese Weise nur der Rechenzeitbedarf zur Lösung der Poisson-Gleichung bei gleicher physikalischer Ausdehnung des Rechengebiets verringert wird. Der Anteil dieser Rechenzeit an der Gesamtzeit beträgt aber bei 400 Simulationsteilchen pro Gitterzelle weniger als 2 Prozent. Der größte Anteil an Rechenzeit wird für die Lösung der Bewegungsgleichungen sowie für die Interpolation des elektrischen Feldes an der Teilchenposi-

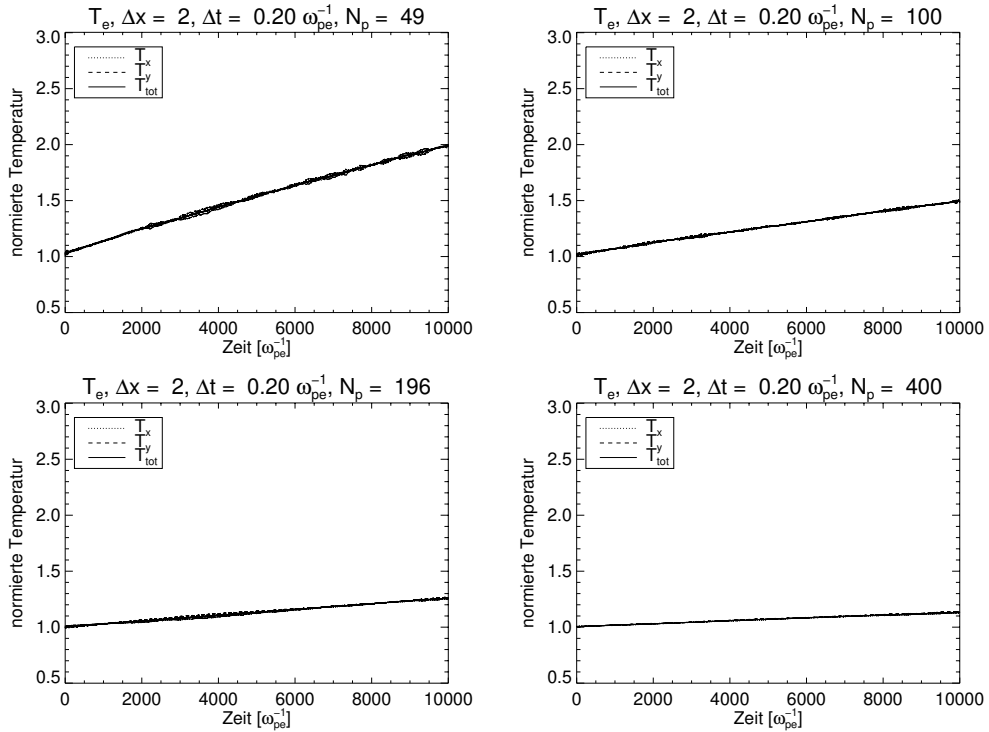


Abbildung 3.2: Explizites PIC-Verfahren, Elektronentemperatur für verschiedene Anzahlen der Simulationsteilchen pro Gitterzelle n_p . Die Zeitschrittweite betrug jeweils $\Delta t = 0.2\omega_{pe}^{-1}$, die Gitterweite $\Delta x/\lambda_D = 2$, die Zahl der Gitterpunkte $n_x = n_y = 16$. Mit zunehmender Zahl der Simulationsteilchen pro Zelle sinkt die numerische Aufheizung der Elektronen.

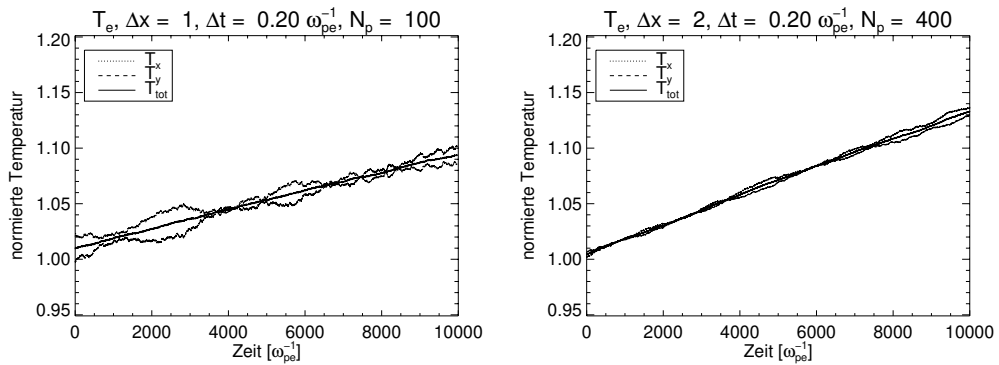


Abbildung 3.3: Explizites PIC-Verfahren, Elektronentemperatur für gleiche Anzahl der Simulationsteilchen pro Debyeﬂäche $n_D = 100$. Die Zeitschrittweite betrug jeweils $\Delta t = 0.2\omega_{pe}^{-1}$, die Zahl der Gitterpunkte $n_x = n_y = 16$. Man beachte die geänderte Skala im Vergleich zu Abb. 3.1 und 3.2. Die numerische Aufheizung der Elektronen ist bei der größeren Gitterweite (rechtes Bild) etwas stärker.

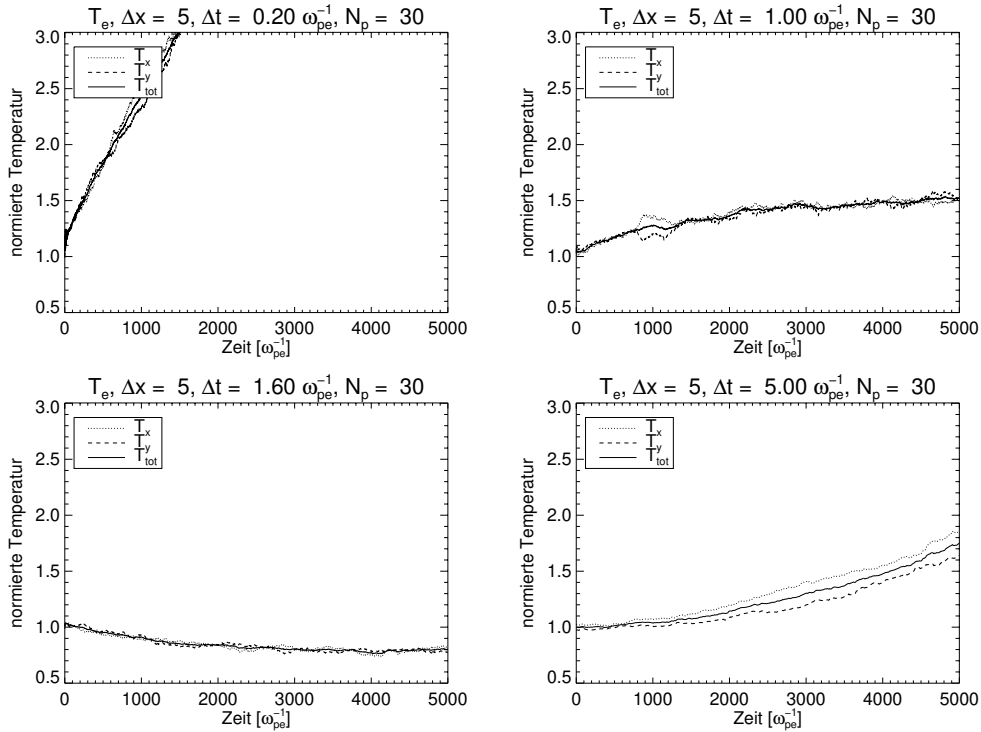


Abbildung 3.4: Implizites PIC-Verfahren, Elektronentemperatur für verschiedene Zeitschrittweiten Δt bei fester Gitterweite $\Delta x = \Delta y = 5\lambda_D$.

tion und die Gewichtung der Ladung des Teilchens auf die umliegenden Gitterpunkte benötigt. Dieser Rechenaufwand ist aber proportional zur Gesamtzahl der Simulationsteilchen im Modell, so daß sich keine nennenswerte Verringerung des Aufwands erreichen läßt.

Zur Modellierung der *Farley-Buneman*-Instabilität ist nach diesen Feststellungen ein explizites *particle-in-cell*-Verfahren mit einer Gitterweite von $\Delta x = 1\lambda_D$ und einer Anzahl von Simulationsteilchen pro Gitterzelle $n_p = 100$ geeignet. Die hierbei benötigte Rechenleistung kann durch die in Abschnitt 2.3.7 beschriebene Parallelisierung des Verfahrens zur Verfügung gestellt werden.

3.1.2 Implizites Verfahren

Das implizite PIC-Verfahren erlaubt die Verwendung einer wesentlich größeren Gitter- und Zeitschrittweite. Um dies genauer zu untersuchen, wurden mehrere Serien von Läufen durchgeführt, bei dem sowohl die äußeren Felder zu Null gesetzt waren als auch die Stöße mit dem Neutralgas unberücksichtigt blieben. Die so erhaltenen Resultate kann man dann mit den veröffentlichten Ergebnissen für stoßfreie Plasmen von *Cohen et al.* (1989) vergleichen.

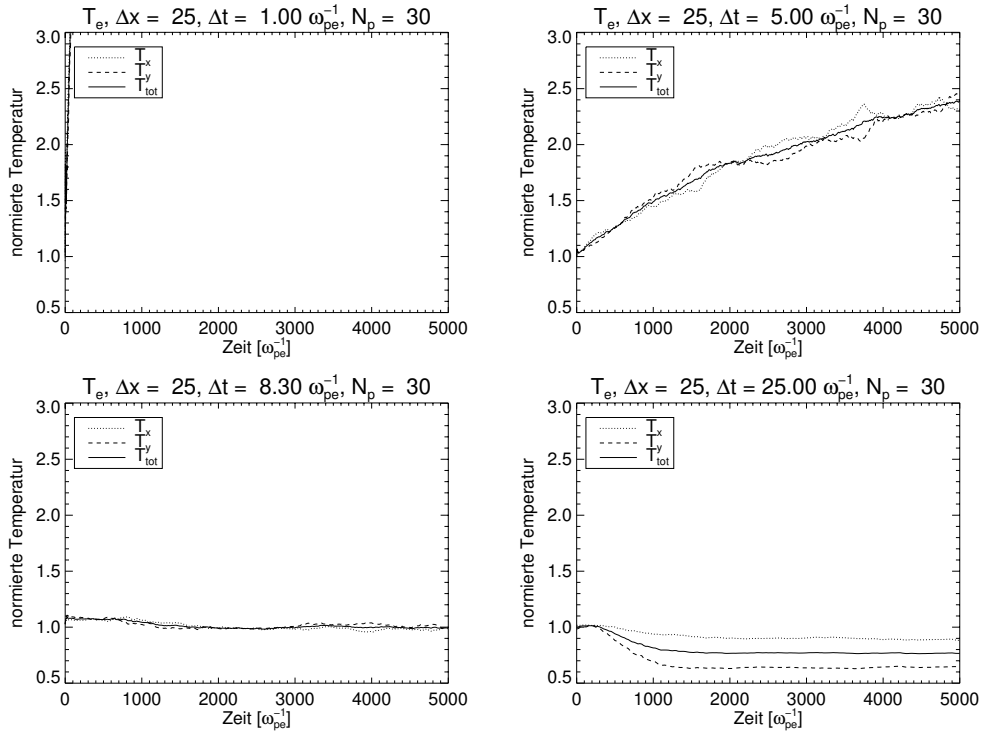


Abbildung 3.5: Implizites PIC-Verfahren, Elektronentemperatur für verschiedene Zeitschrittweiten Δt bei fester Gitterweite $\Delta x = \Delta y = 25\lambda_D$.

In der ersten Serie von Läufen wurde die Gitterweite konstant bei $\Delta x = \Delta y = 5\lambda_D$ gehalten und die Zeitschrittweite Δt variiert (Abb. 3.4). Es zeigt sich, daß das Verfahren nicht für beliebige Werte der Zeitschrittweite stabil ist, sondern nur für ein Δt von etwa $1.6\omega_{pe}^{-1}$. Dieser Effekt zeigt sich auch bei einer größeren Gitterweite von $\Delta x = \Delta y = 25\lambda_D$ (Abb. 3.5). Hier beträgt die erforderliche Zeitschrittweite $\Delta t = 8.3\omega_{pe}^{-1}$. Diese Zeitschrittweite liegt noch unterhalb der Grenze, die das Stoßmodell aus Abschnitt 2.4 setzt. Nach Glg. (2.48) wäre noch ein Zeitschritt $\Delta t \leq 30\omega_{pe}^{-1}$ möglich, diese Grenze sollte aber möglichst deutlich unterschritten werden, um den Fehler durch die unberücksichtigten Stöße nicht zu groß werden zu lassen. Für die Zeitschrittweite $\Delta t = 8.3\omega_{pe}^{-1}$ liegt der Anteil der unberücksichtigten Stöße bei vernachlässigbaren 0.07 Prozent. Die Gitterweite $\Delta x = 25\lambda_d$ ist groß genug, um eine sinnvolle Rechnung zu ermöglichen: Bei einer Gittergröße von 128×128 Gitterpunkten beträgt die reale Ausdehnung des Rechengebietes ca. $8 \times 8m$, das entspricht dem Rechengebiet von *Oppenheim et al.* (1995, 1996) für Modellrechnungen der *Farley-Buneman*-Instabilität im äquatorialen Elektrojet.

Bei den beiden Serien in den Abbildungen 3.4 und 3.5 sowie bei weiteren, hier nicht abgebildeten Serien mit anderen Gitterweiten zeigt sich, daß das Verhältnis von

Gitterweite zu Zeitschrittweite etwa $\Delta x/\Delta t = 1/3$ betragen muß, um die Stabilität des Verfahrens zu gewährleisten. Bei der hier gewählten Normierung bedeutet das, daß die „Gittergeschwindigkeit“ $v_G := \Delta x/\Delta t$ etwa $1/3$ der thermischen Geschwindigkeit der Elektronen betragen muß. Dies bedeutet aber auch, daß die Gitterweite in beiden Raumrichtungen gleich groß gewählt werden muß, was für die hier gewählte Geometrie, senkrecht zum Erdmagnetfeld, kein Problem darstellt. Der hier gefundene Stabilitätsbereich des impliziten PIC-Verfahrens stimmt mit den Ergebnissen von *Cohen et al.* (1989) überein.

Die obere Grenze für die Zeitschrittweite ist direkt physikalisch zu begründen: Bei einem zu großen Zeitschritt würden sich die Elektronen so weit bewegen, daß die Linearisierung in der Herleitung der impliziten Poissongleichung (2.32) nicht mehr gerechtfertigt ist. Die untere Grenze für Δt ist hingegen nicht anschaulich zu erklären.

Hier erkennt man eine Grenze der Anwendbarkeit des impliziten Verfahrens: Bei einem festen äquidistanten Gitter muß die Elektronentemperatur über das Rechengbiet konstant sein. Bei einer starken zeitlichen Änderung der Temperatur kann man die Zeitschrittweite entsprechend anpassen. Starke räumliche Gradienten in der Elektronentemperatur hingegen führen lokal zu einer Abweichung von der Stabilitätsbedingung, die die numerische Gültigkeit des Verfahrens verletzt. Bei der *Farley-Buneman-Instabilität* sind solche Gradienten der Elektronentemperatur jedoch nicht zu erwarten.

3.2 Anwendung auf die Farley-Buneman-Instabilität

Nachdem im vorigen Abschnitt die Stabilitätsbereiche des expliziten und des impliziten PIC-Verfahrens für den Fall eines stoßfreien Plasmas im thermischen Gleichgewicht ohne äußere Kräfte untersucht wurden, sollen diese Verfahren nun auf die *Farley-Buneman-Instabilität* im polaren Elektrojet angewendet werden. Neben der Plasmafrequenz ω_{pe} und der Stoßfrequenz ν_e ist dann noch die Gyrationfrequenz Ω_e der Elektronen im Erdmagnetfeld zu berücksichtigen. Um die Gyrationbewegung der Elektronen noch aufzulösen, muß die Zeitschrittweite kleiner sein als die Gyrationperiode: $\Delta t < \Omega_e^{-1}$. Mit den physikalischen Parametern aus Anhang A ergibt sich damit ein maximaler Zeitschritt von $\Delta t \leq 3.18 \omega_{pe}^{-1}$. Diese Beschränkung ist stärker als die im vorigen Abschnitt bereits erwähnte Grenze $\Delta t \leq 30 \omega_{pe}^{-1}$, die durch das Stoßmodell gesetzt wird.

Mit den physikalischen Parametern aus Anhang A erhält man aus der kinetischen Dispersionsrelation (1.19) eine maximale Wachstumsrate der *Farley-Buneman-Instabilität* von $\Im(\omega) = 2.6 \cdot 10^{-4} \omega_{pe}$ bei einer Wellenlänge von $\lambda = 84 \lambda_D$ (siehe Abb. 3.6). Um das Wachstum der Instabilität zu beobachten, reicht es aus, das Plasma über eine Zeit von einer inversen Wachstumsrate, das sind etwa $4000 \omega_{pe}^{-1}$, zu beobachten.

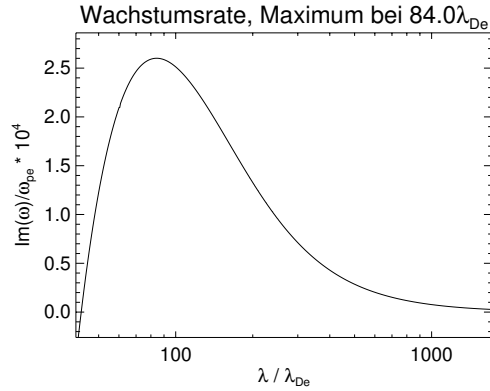


Abbildung 3.6: Wachstumsrate der *Farley-Buneman*-Instabilität, bestimmt aus der kinetischen Dispersionsrelation (1.19) mit den physikalischen Parametern aus Anhang A.

Für eine eingehendere Untersuchung der Prozesse, die zur Aufheizung der Elektronen und zur Sättigung der *Farley-Buneman*-Instabilität führen, reicht dies natürlich nicht aus. Eine exakte Bestimmung der notwendigen Ausdehnung des Rechengebiets erfordert die Kenntnis der Korrelationslängen der verschiedenen physikalischen Größen, die man aber erst aus den Ergebnissen der Modellrechnung gewinnen kann. Die Größe des Rechengebiets sollte aber mindestens $500\lambda_D$ betragen, um mehrere der am stärksten instabilen Wellenlängen zu umfassen. Auf diese Weise wird der Einfluß der periodischen Randbedingungen auf das Ergebnis zumindest abgemildert.

3.2.1 Implizites Verfahren

Lauf Nr. 064072 mit $\Delta x = 8\lambda_D$, $\Delta t = 8/3 \omega_{pe}^{-1}$

Neben den physikalischen Parametern aus Anhang A wurden in diesem Lauf die numerischen Parameter aus Tabelle 3.1 verwendet. Wie im obigen Abschnitt ausgeführt wurde, sollte mit diesen Werten die Instabilität bereits gut zu erkennen sein. Selbst

Gitterweite	$\Delta x = 8\lambda_D$
Zeitschrittweite	$\Delta t = 8/3 \omega_{pe}^{-1}$
Zahl d. Gitterpunkte	$n_x = n_y = 64$
Zahl d. Teilchen pro Gitterzelle	$n_p = 100$
Ausdehnung des Rechengebiets	$L_x = L_y = 512\lambda_D$
Dauer der Rechnung	$T_{max} = 4000 \omega_{pe}^{-1}$

Tabelle 3.1: Numerische Parameter des Laufs Nr. 064072

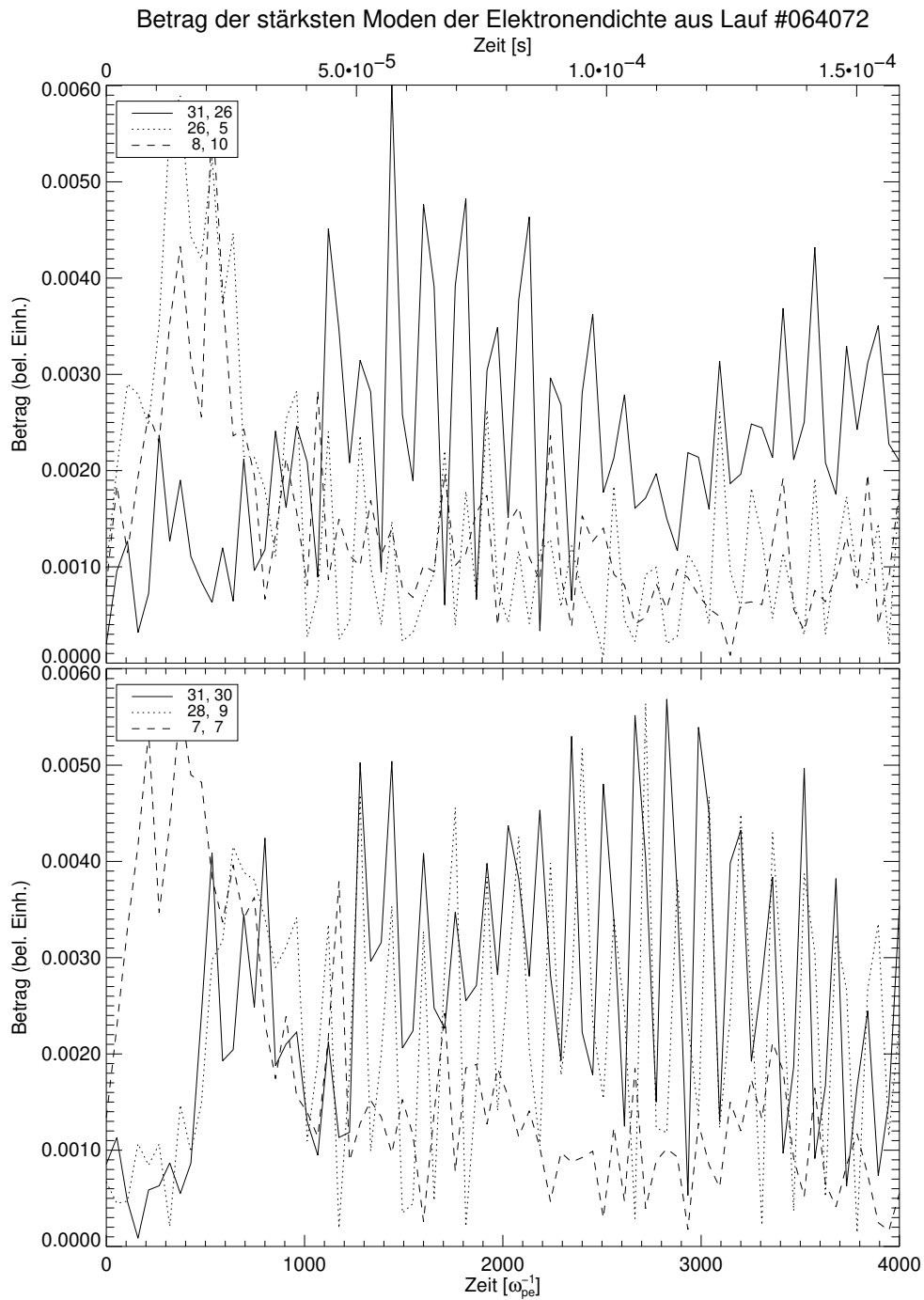


Abbildung 3.7: Die stärksten Fourier-Komponenten der Elektronendichte aus Lauf Nr. 064072 (implizites Verfahren) mit den Parametern aus Tabelle 3.1. Im oberen Bild sind die drei stärksten Moden abgebildet, im unteren die drei nächst schwächeren.

wenn das Rechengebiet zu klein sein sollte, um die nichtlinearen Prozesse, die zur Sättigung der Instabilität führen, zu ermöglichen, sollte das Anwachsen der Instabilität in einem Rechengebiet, das sechs der am stärksten instabilen Wellenlängen umfaßt, möglich sein. Tatsächlich ist aber, wie in Abb. 3.7 dargestellt, keinerlei Anwachsen von Moden der Elektronendichte, also keine Ausbildung von kohärenten Strukturen, zu erkennen. Dies bedeutet, daß die *Farley-Buneman*-Instabilität in diesem Modell nicht zu beobachten ist.

Es gibt zwei Möglichkeiten, diesen Befund zu erklären. Zum einen könnte es sein, daß die numerische Dämpfung des impliziten Verfahrens so groß ist, daß die *Farley-Buneman*-Instabilität überdeckt wird. Zum anderen ist es möglich, daß das Rauschen der Elektronendichte, bedingt durch die Initialisierung mittels Quasi-Zufallszahlen, die Instabilität überdeckt. Um die zweite Möglichkeit auszuschließen, wurde alternativ die Initialisierung mit *Hammersley*-Sequenzen (*Denavit und Walsh*, 1981) vorgenommen.

Lauf Nr. 064972 mit $\Delta x = 8\lambda_D$, $\Delta t = 8/3 \omega_{pe}^{-1}$, Initialisierung mit *Hammersley*-Sequenzen

In diesem Lauf wurden die gleichen physikalischen und numerischen Parameter aus Anhang A und Tabelle 3.1 wie in Lauf Nr. 064072 verwendet. Lediglich die Invertierung der kumulierten Verteilungsfunktion (2.43) bei der Initialisierung geschah mit *Hammersley*-Sequenzen, wie sie in Tabelle 3.2 angegeben sind, anstatt mit Quasi-Zufallszahlen, die in allen anderen Läufen verwendet wurden.

Eine Verringerung der Fluktuationen, wie man sie mit dieser Art der Initialisierung erreichen will, erkennt man nur in den ersten Zeitschritten, ungefähr bis zu einer Zeit von $50 \omega_{pe}^{-1}$. Danach, in den ersten $500 \omega_{pe}^{-1}$ der Rechnung, sind stark ausgeprägte Fluktuationen der Elektronendichte zu erkennen. Diese Fluktuationen werden durch die Anfangsbedingungen bewirkt und bleiben auch ohne äußeres elektrisches Feld erhalten, sie werden also nicht durch die *Farley-Buneman*-Instabilität verursacht. Es liegt die Vermutung nahe, daß die Initialisierung mit *Hammersley*-Sequenzen, wie sie von *Denavit und Walsh* (1981) für ein explizites PIC-Verfahren benutzt wurde, für die Initialisierung des impliziten Verfahrens in dieser Form nicht geeignet ist.

Im weiteren Verlauf der Rechnung ist auch bei dieser Art der Initialisierung kein

	x	y	v_x	v_y	v_z
Elektronen	2	3	5	7	11
Ionen	13	17	19	23	29

Tabelle 3.2: Basen der *Hammersley*-Sequenzen zur Initialisierung der jeweiligen Koordinaten.

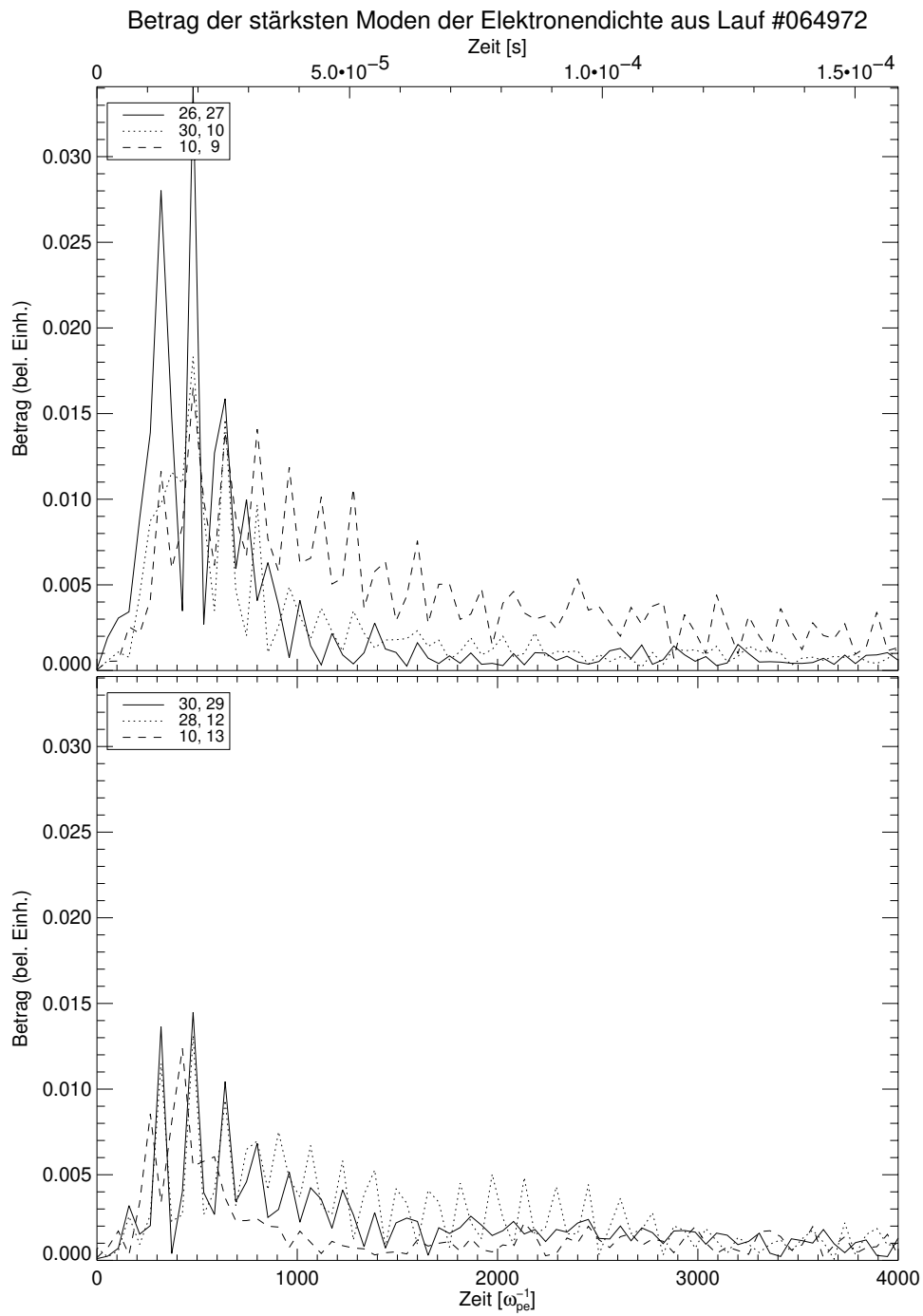


Abbildung 3.8: Die stärksten Fourier-Komponenten der Elektronendichte aus Lauf Nr. 064972 (implizites Verfahren) mit Initialisierung durch *Hammersley*-Sequenzen und den Parametern aus Tabelle 3.1. Im oberen Bild sind die drei stärksten Moden abgebildet, im unteren die drei nächst schwächeren.

Anwachsen einer Instabilität zu erkennen. Dies legt die Schlußfolgerung nahe, daß das direkte implizite *particle-in-cell*-Verfahren aufgrund der ihm eigenen numerischen Dämpfung nicht in der Lage ist, die *Farley-Buneman*-Instabilität wiederzugeben.

Eine weitere Erklärung für das Ausbleiben der Instabilität könnte natürlich ein Programmierfehler sein, der auch bei größter Sorgfalt niemals völlig zu vermeiden ist. Um diese Möglichkeit auszuschließen, wurde das direkte implizite Verfahren zweimal unabhängig voneinander entwickelt. Beide Male wurden die fehlerträchtigen Indizes bei der Diskretisierung der impliziten Poisson-Gleichung (2.32 - 2.39) mit Hilfe des Symbolmanipulationsprogramms Maple V neu berechnet, eine Version wurde in Fortran 90, die andere in C programmiert. Beide Versionen führten zu den gleichen Resultaten.

3.2.2 Explizites Verfahren

Lauf Nr. 256072 mit $\Delta x = 1\lambda_D$, $\Delta t = 0.2 \omega_{pe}^{-1}$

Neben den physikalische Parametern aus Anhang A wurden in diesem Lauf die numerischen Parameter aus Tabelle 3.3 verwendet. Wie oben bereits ausgeführt, sollte mit diesen Werten die Instabilität zu erkennen sein. Um die gleiche Größe des Rechengebiets bei gleicher Dauer der Rechnung zu erreichen, benötigt das explizite Verfahren im Vergleich zu dem impliziten aus dem vorigen Abschnitt wegen der kleineren Gitter- und Zeitschrittweite einen um den Faktor 850 größeren Rechenaufwand. Dies relativiert sich noch etwas, da die Lösung der expliziten Poissongleichung mittels schneller Fouriertransformation nur mit ca. 2.5% zum Zeitaufwand beiträgt, während die Lösung der impliziten Poissongleichung mit einem bikonjugierten Gradientenverfahren etwa 70% der Gesamtzeit benötigt. Dennoch ist der Rechenaufwand so groß, daß das Rechengebiet verkleinert und die Zahl der Teilchen pro Zelle verringert wurde, um mit der zur Verfügung stehenden Kapazität von 16 Prozessorelementen zu einem wenigstens annähernd vergleichbaren Ergebnis zu kommen. Bei Verwendung von 100 Teilchen pro Gitterzelle würde die Rechenzeit bereits mehr als acht Stunden betragen und damit das Limit für einen einzelnen Lauf überschreiten. Das Rechengebiet ist sicherlich zu klein, um die Verwendung von periodischen Randbedingungen für eine Untersuchung der nichtlinearen Effekte zu rechtfertigen; zumindest das anfängliche Wachstum der Instabilität, das durch die linearisierte Dispersionsrelation (1.19) beschrieben wird, sollte aber deutlich werden.

Im Gegensatz zu den Resultaten des impliziten Verfahrens ist in Abb. 3.9 das Anwachsen der Instabilität klar zu erkennen. Nach einer Zeit von etwa $800 \omega_{pe}^{-1}$ sind die anfänglich vorhandenen Fluktuationen abgeklungen. Danach wächst über einen Zeitraum von etwa $1400 \omega_{pe}^{-1}$ eine Komponente stark an, um danach wieder abzuklingen.

Lauf Nr. 256000 mit $\Delta x = 1\lambda_D$, $\Delta t = 0.2 \omega_{pe}^{-1}$ und $E_0 = 0$

Um zu überprüfen, ob die in Abb. 3.9 dargestellte Instabilität tatsächlich von der Driftbewegung der Elektronen hervorgerufen wird, wurde in diesem Lauf das äußere elektrische Feld E_0 auf Null gesetzt. Alle anderen Parameter blieben gegenüber dem Lauf Nr. 256072 unverändert. Die Initialisierung geschah mit exakt den gleichen Quasi-Zufallszahlen wie in Lauf Nr. 256072.

Wie in Abb. 3.10 dargestellt, sind auch ohne äußeres elektrisches Feld die gleichen anfänglichen Fluktuationen wie in Abb. 3.9 zu beobachten. Nachdem diese abgeklungen sind, ist bei dieser Rechnung jedoch kein Anwachsen einer Fourier-Komponente einer einzelnen Elektronendichte zu erkennen. Dies erlaubt die Schlußfolgerung, das es sich bei der beobachteten Instabilität in Abb. 3.9 tatsächlich um die *Farley-Buneman*-Instabilität handelt.

Eine Änderung der Elektronentemperatur durch die Instabilität ist, wie in Abb. 3.11 gezeigt, nicht zu erkennen. Dies ist auch nicht unbedingt zu erwarten, da sich die Instabilität nur für kurze Zeit entwickelt, bevor sie, vermutlich durch den Einfluß der periodischen Randbedingungen, an ihrem weiteren Wachstum gehindert wird.

Für eine genaue Untersuchung der Instabilität sollte aber, wie oben bereits ausgeführt, das Rechenggebiet erheblich größer sein als es in diesen beiden Läufen der Fall war. Dies stellt prinzipiell kein Problem dar, da die erforderliche Rechenleistung durch die Parallelisierung des expliziten PIC-Verfahrens bei Benutzung von entsprechend vielen Prozessorelementen bereitgestellt werden kann.

Lauf Nr. 256001 mit $\Delta x = 1\lambda_D$, $\Delta t = 0.2 \omega_{pe}^{-1}$ und Glättung der Ladungsdichte ($a = 0.1$)

In diesem Lauf wurden wiederum die Parameter aus Tabelle 3.3 verwendet, mit dem gleichen äußeren elektrischen Feld $E_0 = 72 \text{ mV/m}$ wie im Lauf Nr. 256072. Zusätzlich wurde die Ladungsdichte noch mit dem Filter aus Anhang B.4 mit einem Glättungsparameter $a = 0.1$ geglättet. Diese Glättung wird häufig bei *particle-in-cell*-

Gitterweite	$\Delta x = 1\lambda_D$
Zeitschrittweite	$\Delta t = 0.2 \omega_{pe}^{-1}$
Zahl d. Gitterpunkte	$n_x = n_y = 256$
Zahl d. Teilchen pro Gitterzelle	$n_p = 49$
Ausdehnung des Rechengebiets	$L_x = L_y = 256\lambda_D$
Dauer der Rechnung	$T_{max} = 4000 \omega_{pe}^{-1}$

Tabelle 3.3: Numerische Parameter des Laufs Nr. 256072

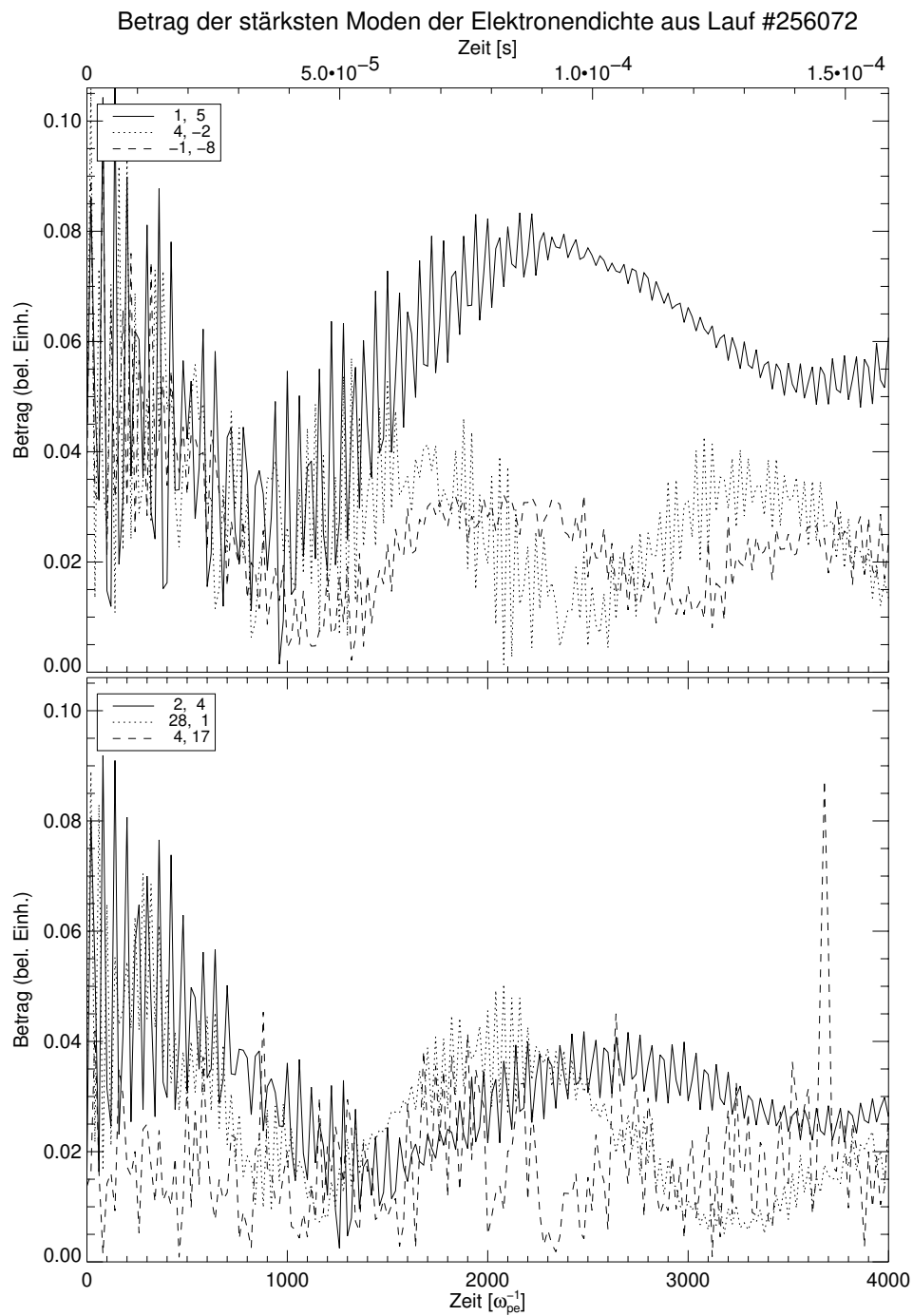


Abbildung 3.9: Die stärksten Fourier-Komponenten der Elektronendichte aus Lauf Nr. 256072 (explizites Verfahren) mit den Parametern aus Tabelle 3.3. Im oberen Bild sind die drei stärksten Moden abgebildet, im unteren die drei nächst schwächeren.

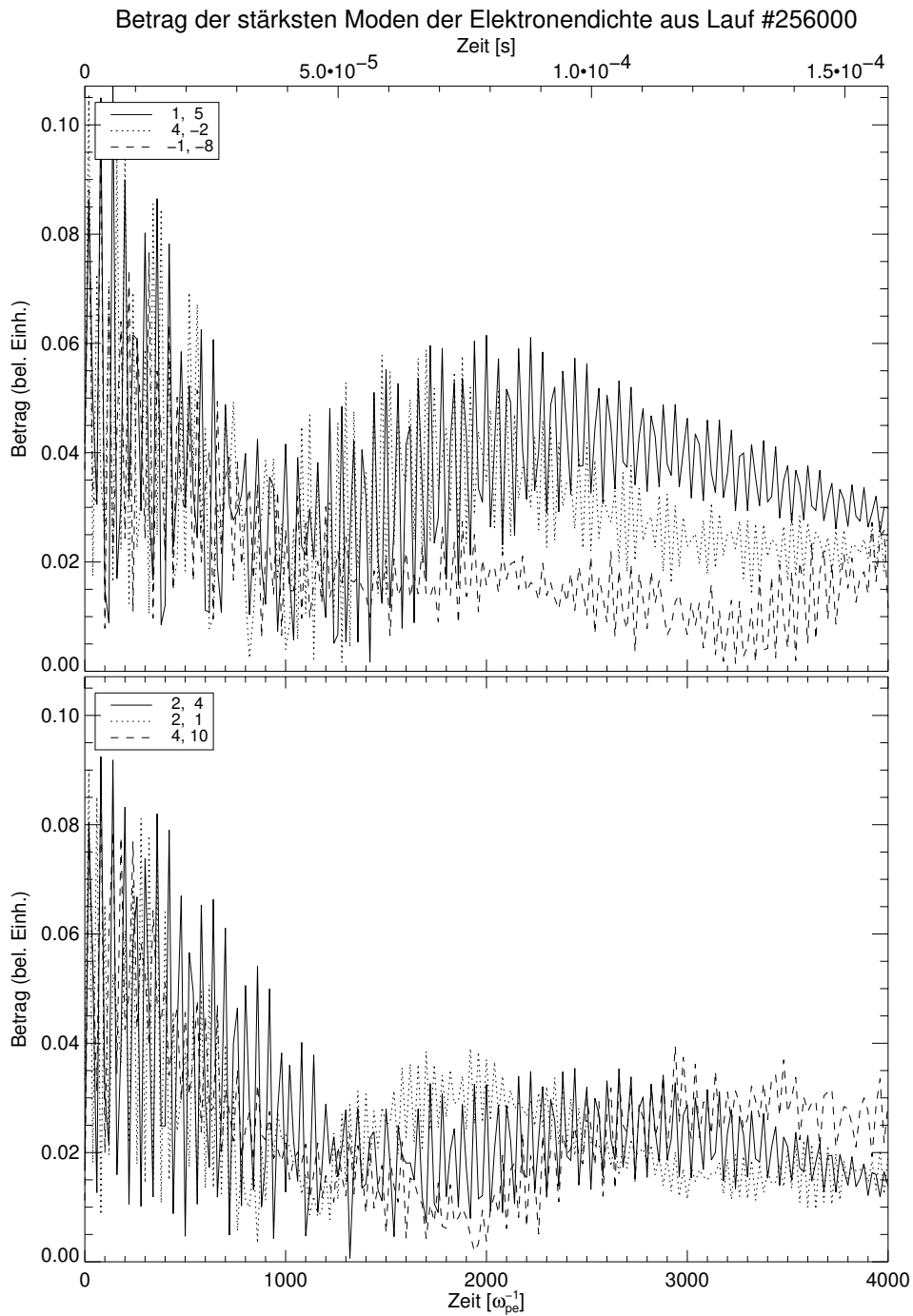


Abbildung 3.10: Die stärksten Fourier-Komponenten der Elektronendichte aus Lauf Nr. 256000 (explizites Verfahren) mit den Parametern aus Tabelle 3.3, aber $E_0 = 0$. Im oberen Bild sind die drei stärksten Moden abgebildet, im unteren die drei nächst schwächeren.

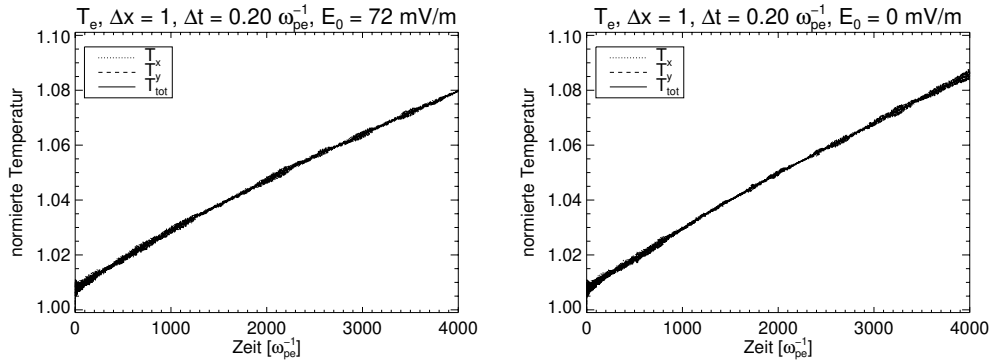


Abbildung 3.11: Explizites PIC-Verfahren, Vergleich der Elektronentemperatur aus zwei Läufen mit und ohne äußerem elektrischen Feld E_0 .

Verfahren verwendet (*Birdsall und Langdon, 1991*), um die unphysikalisch starken Fluktuationen der Ladungsdichte auf kleinen Skalen zu verringern.

Die relativ starken Fluktuationen zu Beginn der Rechnung konnten auf diese Weise nicht reduziert werden. Grundsätzlich ändert sich durch diese Glättung nichts an den Resultaten, es kann weiterhin ein Anwachsen verschiedener Moden der Elektronendichte beobachten werden. Eine genauere Untersuchung des Einflusses der Glättung ist an dieser Stelle nicht sinnvoll, da die periodischen Randbedingungen das System noch zu stark stören.

Da die Glättung im Programmablauf direkt vor der Lösung der expliziten Poisson-Gleichung vorgenommen wird, kann man dies als Faltung des Glättungsoperators mit dem Nabla-Operator der Poisson-Gleichung auffassen. Es bietet sich dann an, diese Faltung durch eine Multiplikation im k -Raum auszuführen. Der Filter ist durch Gleichung (B.3) gegeben, der Nabla-Operator der Poisson-Gleichung durch Gleichung (2.15). Anstatt der Koeffizienten aus Gleichung (2.14) verwendet man dann die mit dem Filter (B.3) multiplizierten Koeffizienten zur Lösung der Poisson-Gleichung. Auf diese Weise läßt sich die Glättung der Ladungsdichte ohne den zusätzlichen Rechenaufwand einer weiteren Fouriertransformation in Hin- und Rückrichtung durchführen.

Lauf Nr. 256772 mit $\Delta x = 1\lambda_D$, $\Delta t = 0.2\omega_{pe}^{-1}$

Auch in diesem Lauf wurden die Parameter aus Tabelle 3.3 verwendet, mit dem gleichen äußeren elektrischen Feld $E_0 = 72\text{ mV/m}$ wie im Lauf Nr. 256072. Lediglich die Dauer der Rechnung wurde im Unterschied zu den vorigen Läufen auf eine Zeitspanne von $7000\omega_{pe}^{-1}$ erweitert, um das Anwachsen der Instabilität weiter zu beobachten. Die stärksten Fourierkomponenten der Elektronendichte sind in in Abb. 3.13 dargestellt. Mit diesem Lauf ist die Grenze der Rechenzeit erreicht, die auf dem Parallelrechner Cray T3E bei der Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung in Göttingen,

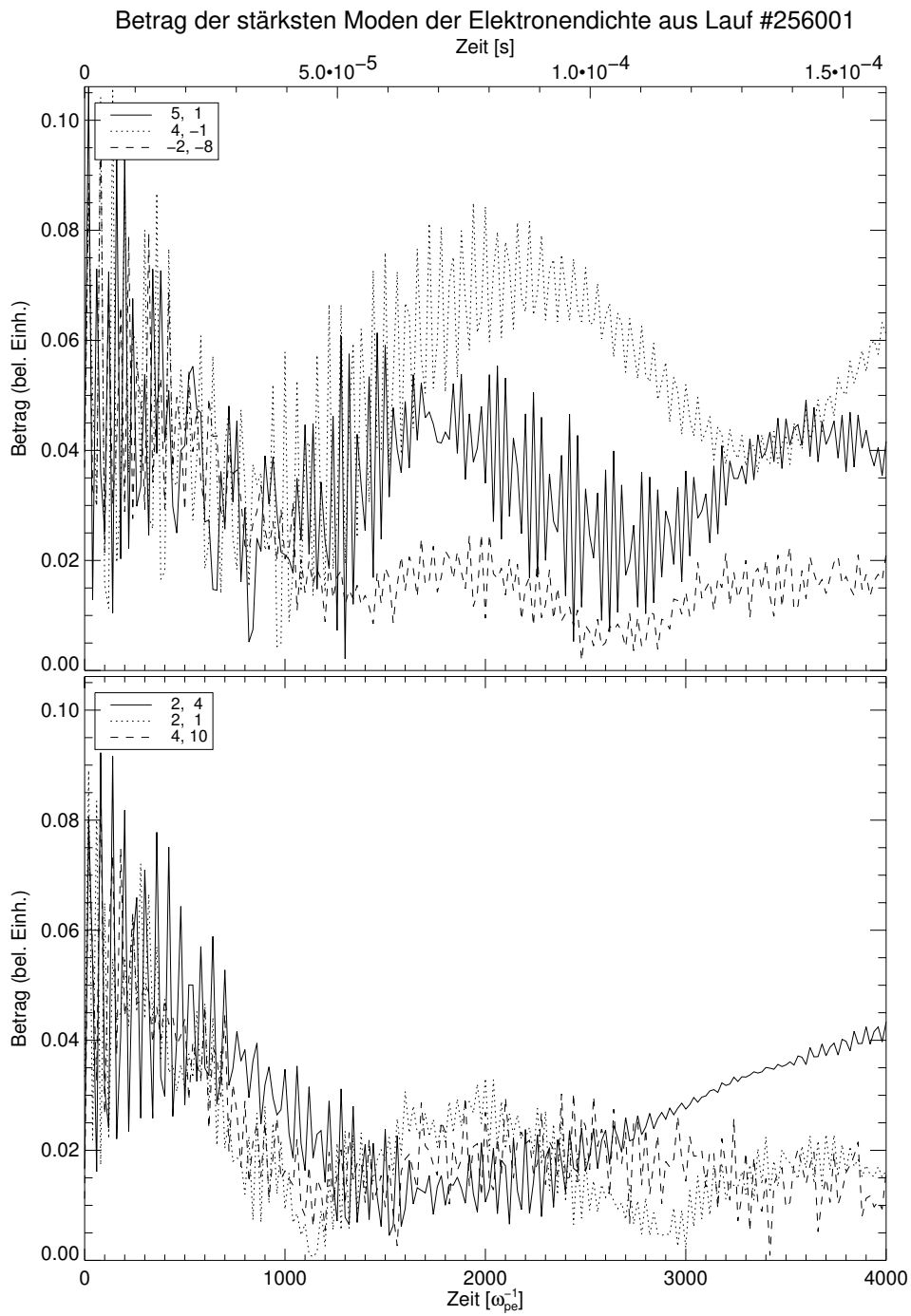


Abbildung 3.12: Die stärksten Fourier-Komponenten der Elektronendichte aus Lauf Nr. 256001 (explizites Verfahren) mit Glättung der Ladungsdichte mit den Parametern aus Tabelle 3.3. Im oberen Bild sind die drei stärksten Moden abgebildet, im unteren die drei nächst schwächeren.

Verfahren	Größe $L_{x,y}$	Dauer	Lauf Nr.	CPU-Stunden
implizit	512 λ_D	4000 ω_{pe}^{-1}	064072, 064972	3:40
explizit	256 λ_D	4000 ω_{pe}^{-1}	256072, 256000, 256001	69:20
explizit	256 λ_D	7000 ω_{pe}^{-1}	256772	121:07

Tabelle 3.4: Rechenzeit der verschiedenen Läufe

wo diese Rechnungen durchgeführt wurden, verfügbar ist. Für diesen Lauf wurden insgesamt 121 CPU-Stunden benötigt (vgl. Tabelle 3.4), was bei Verwendung von 16 Prozessorelementen noch unter dem Limit von 8 tatsächlich abgelaufenen Stunden liegt. Es ist natürlich möglich, den Zwischenstand eines Laufs abzuspeichern und dann für weitere 8 Stunden, also 128 CPU-Stunden, die Rechnung fortzuführen. Wie oben aber bereits ausgeführt, ist bei diesem Lauf im Vergleich zu den Läufen mit dem impliziten Verfahren die Größe des Rechengebietes bereits um einen Faktor vier verkleinert und die Zahl der Simulationsteilchen pro Gitterzelle halbiert worden. Um also eine vergleichbare Rechnung durchzuführen, müßte der Lauf bereits acht mal gestartet werden. Dies ist für eine physikalische Studie, bei der noch verschiedene Parameter variiert werden, nicht mehr praktikabel.

Nachdem die Fluktuationen, die von den Anfangsbedingungen herrühren, nach etwa $1000 \omega_{pe}^{-1}$ abgeklungen sind, steigt wie in Lauf Nr. 256072 eine Fourierkomponente der Elektronendichte stark an. Deren Wachstum endet nach weiteren $1000 \omega_{pe}^{-1}$. Währenddessen wuchs die Komponente $(2, 1)$ an, deren Wachstumsrate zwar geringer ist, die aber für den gesamten Zeitraum der Rechnung weiter anwächst. Dem Wachstum dieser stärksten Moden ist noch eine Schwingung überlagert, die wahrscheinlich ihren Ursprung in den Anfangsbedingungen hat. Die Initialisierung mit Quasi-Zufallszahlen bewirkt, daß die Teilchen nicht die Geschwindigkeit besitzen, die sich aus dem elektrischen Feld ergibt, das durch ihre Positionen hervorgerufen wird. Diese Schwingung ist in Lauf Nr. 256000 mit $E_0 = 0$ viel schwächer ausgeprägt, sie wird also durch die mittlere Driftgeschwindigkeit v_d verursacht, mit der die Elektronen zusätzlich zu ihrer quasi-zufällig aus einer Maxwellverteilung gewählten Geschwindigkeit initialisiert werden.

3.3 Fazit

Die hohen Erwartungen, die mit dem impliziten *particle-in-cell*-Verfahren verbunden waren, konnten nicht erfüllt werden. Dies Verfahren erlaubt zwar in physikalisch stabilen Situationen wie einem Plasma im thermischen Gleichgewicht eine erhebliche Vergrößerung der Gitter- und Zeitschrittweite, wodurch der Rechenaufwand drastisch

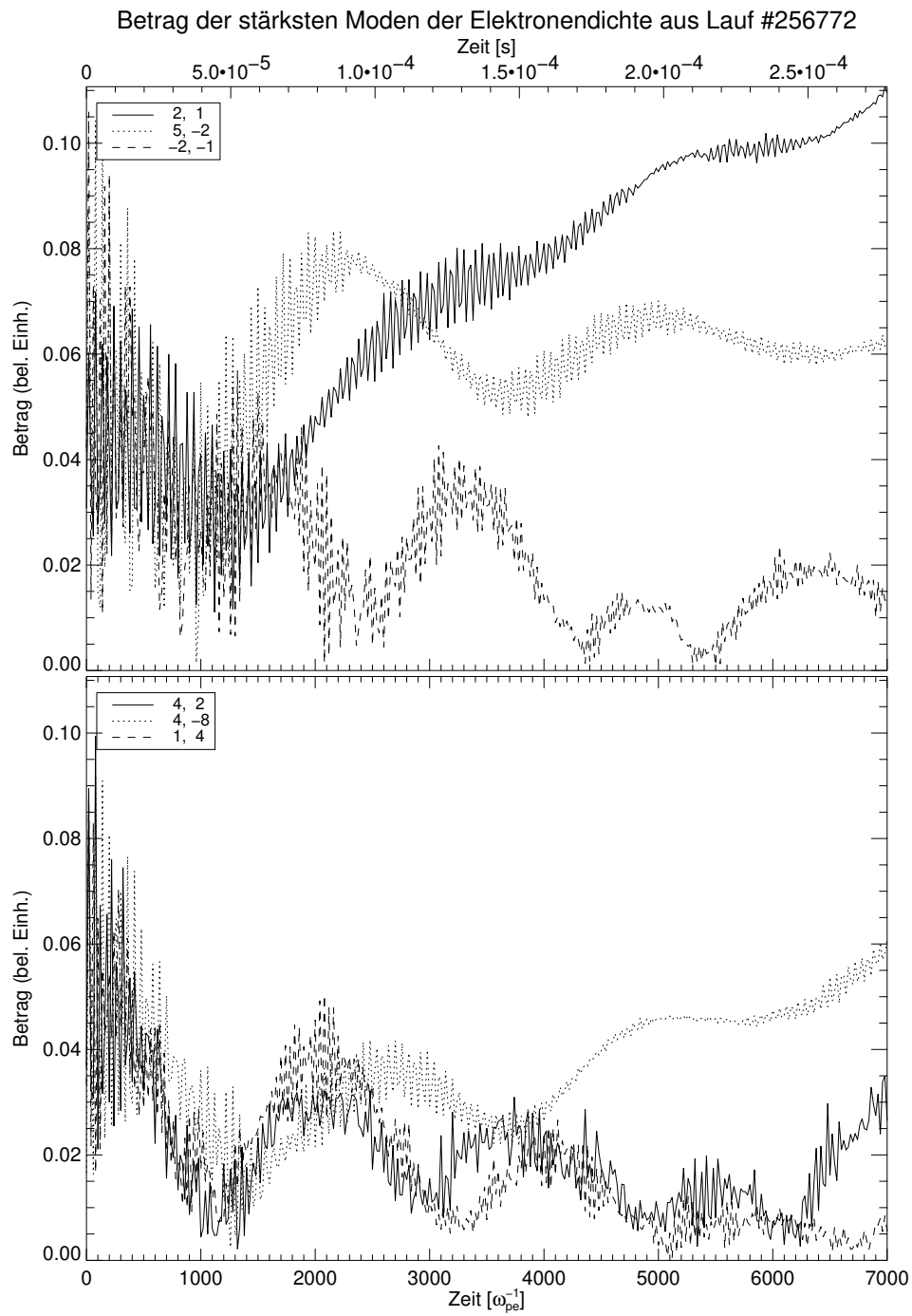


Abbildung 3.13: Die stärksten Fourier-Komponenten der Elektronendichte aus dem längeren Lauf Nr. 256772 (explizites Verfahren) mit den Parametern aus Tabelle 3.3 und einer Dauer von $7000 \omega_{pe}^{-1}$. Im oberen Bild sind die drei stärksten Moden abgebildet, im unteren die drei nächst schwächeren.

gesenkt werden kann. Die diesem Verfahren eigene numerische Dämpfung erwies sich aber als zu stark, um die *Farley-Buneman*-Instabilität noch anwachsen zu lassen.

Das explizite *particle-in-cell*-Verfahren ist seit Jahren bewährt, verschiedenste Plasmainstabilitäten im Modell zu untersuchen. Der damit verbundene extrem hohe Rechenaufwand konnte durch die effiziente Parallelisierung dieses Verfahrens zwar nicht reduziert werden. Die parallele Berechnung des Plasmamodells ermöglicht aber, durch Verwendung entsprechend vieler Prozessorelemente die Rechenleistung im Prinzip beliebig zu steigern. Natürlich sind die Ressourcen immer beschränkt, so daß es im Rahmen dieser Arbeit nicht möglich war, ein Modell der *Farley-Buneman*-Instabilität in einer physikalisch aussagekräftigen Größenordnung zu berechnen. An einigen dem Autor nicht zugänglichen Höchstleistungsrechenzentren existiert die hierfür erforderliche Ausstattung an Parallelrechnern bereits, für die Zukunft wird allgemein die größte Leistungsentwicklung im Bereich der Höchstleistungsrechner bei den Parallelrechnern gesehen.

Von den hier untersuchten Verfahren bietet also lediglich das explizite *particle-in-cell*-Verfahren das Potential, physikalische Aussagen über den Prozeß der Elektronenheizung durch die *Farley-Buneman*-Instabilität im polaren Elektrojet zu gewinnen. Die grundsätzliche Eignung dieses Verfahrens zur Untersuchung der Aufheizung der Elektronen durch die Instabilität konnte gezeigt werden. Eine ausführliche Untersuchung würde allerdings den Rahmen dieser Arbeit sprengen, deren Ziel es war, die Grundlagen für weiterführende Arbeiten, die sich mit dem physikalischen Problem der *Farley-Buneman*-Instabilität befassen, zu legen.

Kapitel 4

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurden verschiedene numerische Modelle zur Beschreibung von Plasmen auf ihre Eignung zum Studium der *Farley-Buneman*-Instabilität im polaren Elektrojet in der ionosphärischen *E*-Schicht der Erde untersucht. Diese Untersuchung war notwendig, weil gezeigt werden konnte, daß frühere Arbeiten von *Newman und Ott* (1981), *Machida und Goertz* (1988), *Thiemann und Schlegel* (1994) und *Janhunen* (1994a,b) unter verschiedenen numerischen Problemen litten, die zum Teil zu rein numerisch bedingten Instabilitäten führten oder in anderen Fällen den Einfluß der künstlichen periodischen Randbedingungen so stark werden ließen, daß die Ergebnisse dieser Arbeiten einer weiteren Überprüfung bedürfen.

Zur Auswahl eines geeigneten numerischen Modells wurden zunächst die wesentlichen physikalischen Effekte, die bei der *Farley-Buneman*-Instabilität eine Rolle spielen, herausgestellt. Um diese Effekte geeignet zu beschreiben, muß ein numerisches Modell folgende Punkte beinhalten:

1. Kinetische Beschreibung der Elektronen und Ionen
2. Elektrostatische Näherung der Maxwell-Gleichungen
3. Zwei Raumdimensionen senkrecht zum Erdmagnetfeld, drei Geschwindigkeitskomponenten der Teilchen
4. Initialisierung beider Teilchensorten im thermischen Gleichgewicht mit der jeweiligen Driftgeschwindigkeit
5. Periodische Randbedingungen in beiden Raumrichtungen
6. Stöße der Elektronen und Ionen mit dem Neutralgas

Damit scheidet kontinuumsmechanische Modelle, die den Vorteil eines vergleichsweise niedrigen Rechenaufwands bieten, aus.

Von den verschiedenen kinetischen Verfahren erwiesen sich die folgenden Zwei als potentiell geeignet zur Modellierung der *Farley-Buneman*-Instabilität in der polaren *E*-Schicht der Ionosphäre:

1. Das parallelisierte explizite *particle-in-cell*-Verfahren
2. Das direkte implizite *particle-in-cell*-Verfahren

Da das explizite *particle-in-cell*-Verfahren mit seinem extrem großen Bedarf an Rechenzeit die Grenzen der Leistungsfähigkeit heutiger Computer nach dem *von Neumann*-Prinzip der seriellen Informationsverarbeitung überschreitet, wurde es in einer parallelisierten Version entwickelt. Es konnte eine ideale Skalierbarkeit des Verfahrens gezeigt werden, für große Rechengebiete wuchs die Geschwindigkeit stärker als linear mit der Zahl der Prozessorelemente („*superlinearer speed-up*“). Das direkte implizite *particle-in-cell*-Verfahren bietet gegenüber dem expliziten die Möglichkeit, weitaus größere Gitterweiten Δx und Zeitschrittweiten Δt zu verwenden und auf diese Weise den Rechenaufwand drastisch zu senken.

Es wurde ein Modell zur Beschreibung der Stöße mit dem Neutralgas entwickelt, das die physikalische Situation der Stöße erheblich genauer wiedergeben kann, als die Modelle von *Thiemann und Schlegel* (1994) oder *Janhunen* (1994b). Durch die Verwendung eines zusätzlichen Stoßkanals, des sogenannten Nullstoßes, konnte der Aufwand zur Berechnung der Stöße in der gleichen Größenordnung wie bei den vorgenannten Autoren gehalten werden. Es wurde gezeigt, daß dies Stoßmodell die experimentell bekannten Stoßfrequenzen für ein ionosphärisches Plasma im thermischen Gleichgewicht korrekt wiedergibt.

Da frühere Arbeiten Probleme mit numerischen Instabilitäten des PIC-Verfahrens hatten, wurde die Stabilität der beiden Verfahren eingehender untersucht. Es zeigte sich, daß für das explizite Verfahren außer der bekannten Grenze für die Zeitschrittweite eine weitere, bisher nicht analytisch beschriebene Stabilitätsgrenze für die Gitterweite im Zusammenhang mit der Zahl der Simulationsteilchen pro Gitterzelle existiert. Diese Stabilitätsgrenze ist in den Arbeiten von *Machida und Goertz* (1988) und *Thiemann und Schlegel* (1994) verletzt worden. Für das direkte implizite PIC-Verfahren wurde das Ergebnis von *Cohen et al.* (1989) bestätigt, daß das Verhältnis von Gitterweite zu Zeitschrittweite, $\Delta x/\Delta t$, um einen Faktor drei größer sein muß als die thermische Geschwindigkeit der Elektronen, um die numerische Stabilität des Verfahrens zu gewährleisten.

Die Anwendung des impliziten PIC-Verfahrens auf die *Farley-Buneman*-Instabilität zeigte aber, daß in einem Rechengebiet, welches groß genug war, um mehrere der am stärksten instabilen Wellenlängen zu umfassen, über die Zeitdauer einer inversen Wachstumsrate keinerlei Anwachsen einer Instabilität zu beobachten war. Auch eine

andere Form der Initialisierung mittels *Hammersley*-Sequenzen änderte nichts an diesem Resultat. Dies legt die Schlußfolgerung nahe, daß die numerische Dämpfung, die dem impliziten Verfahren zu eigen ist, so stark ist, daß die *Farley-Buneman*-Instabilität an ihrem Entstehen gehindert wird.

Das explizite PIC-Verfahrens hingegen zeigt ein deutliches Anwachsen der Instabilität. Die zur Verfügung stehenden Rechnerkapazitäten reichten allerdings nicht aus, um physikalisch aussagekräftige Ergebnisse aus diesem Modell der *Farley-Buneman*-Instabilität zu gewinnen. Bei Verwendung entsprechend leistungsfähiger Parallelrechner, wie sie an einigen Höchstleistungsrechenzentren bereits existieren, ist es aber Dank der idealen Skalierbarkeit des hier vorgestellten parallelisierten PIC-Verfahrens möglich, solche Resultate zu erzielen und damit die Fragen, die im Hinblick auf die numerische Gültigkeit früherer Resultate anderer Autoren aufgeworfen wurden, zu beantworten.

Ausblick

In dieser Arbeit wurde systematisch untersucht, wie die *Farley-Buneman*-Instabilität im polaren Elektrojet in der ionosphärischen *E*-Schicht der Erde numerisch modelliert werden kann. Mit dem parallelisierten expliziten *particle-in-cell*-Verfahren in Verbindung mit der Nullstoß-Methode wurde eine Möglichkeit gefunden, die Aufheizung der Elektronen durch die Instabilität am numerischen Modell zu studieren.

Diese Studie würde allerdings den Rahmen dieser Arbeit sprengen, deren Ziel es war, die Grundlagen für weiterführende Arbeiten, die sich mit dem physikalischen Problem der *Farley-Buneman*-Instabilität befassen, zu legen. Ohne eine vorausgehende gründliche Analyse der numerischen Modelle, wie sie in dieser Arbeit durchgeführt wurde, ist es nicht möglich, zu verlässlichen physikalischen Aussagen zu kommen, wie auch die in dieser Arbeit aufgeworfenen Zweifel an den Resultaten früherer Arbeiten gezeigt haben.

Anhang A

Parameter der E -Schicht

Bei allen Programmläufen wurden die folgenden physikalischen Parameter zur Beschreibung des Plasmas in der E -Schicht der polaren Ionosphäre verwendet:

	phys. Größe	polare Breiten	Äquator
Erdmagnetfeld	B_0	$4.5 \cdot 10^{-5} T$	$2.5 \cdot 10^{-5} T$
äußeres elektrisches Feld	E_0	$7.2 \cdot 10^{-2} V/m$	$1.4 \cdot 10^{-2} V/m$
Plasmateilchendichte	n_0	$2 \cdot 10^{11} m^{-3}$	$2 \cdot 10^{11} m^{-3}$
Neutralgasteilchendichte	n_n	$2 \cdot 10^{18} m^{-3}$	$2 \cdot 10^{18} m^{-3}$
Elektronentemperatur	T_e	230 K	250 K
Ionentemperatur	T_i	232 K	250 K
Neutralgastemperatur	T_n	232 K	250 K
mittlere Ionenmasse	m_i	$55000 m_e$	$55000 m_e$
Debyelänge	λ_{De}	$2.34 \cdot 10^{-3} m$	$2.44 \cdot 10^{-3} m$
Plasmafrequenz	ω_{pe}	$2.52 \cdot 10^7 Hz$	$2.52 \cdot 10^7 Hz$
Gyrationsfrequenz	Ω_e	$7.91 \cdot 10^6 Hz$	$4.40 \cdot 10^6 Hz$
$\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ - Driftgeschwindigkeit	v_d	1600 m/s	560 m/s
Ionenschallgeschwindigkeit	C_s	358 m/s	371 m/s

Tabelle A.1: In den Rechnungen verwendete typische physikalische Parameter der E -Schicht der polaren Ionosphäre, zum Vergleich die Parameter der äquatorialen Ionosphäre, wie sie Oppenheim (1995) verwendet hat.

Im Vergleich zur äquatorialen E -Schicht ist vor allem die $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ - Driftgeschwindigkeit in polaren Breiten deutlich höher. Die weiteren Parameter, wie Gitterweite Δx , Zeitschrittweite Δt , Gittergröße oder Zahl der Teilchen pro Zelle n_p unterscheidet sich bei den einzelnen Läufen und ist dort jeweils angegeben.

Anhang B

Details der numerischen Verfahren

B.1 Struktur des Programms

Technische Details wie Speicherallokierung, Variablendeklarationen, Ausgabe usw. sind hier weggelassen.

Die folgende Struktur ist die für das implizite PIC-Verfahren. Das explizite Verfahren hat eine ganz ähnliche Struktur, hier werden die Elektronen genauso wie die Ionen behandelt und natürlich die explizite Poissongleichung gelöst.

Zunächst werden die Elektronen und Ionen initialisiert. Hierbei wird die Position $\{\mathbf{x}(0)\}$ zufällig über das Gitter verteilt, die Geschwindigkeitskomponenten $\{\mathbf{v}(0)\}$ werden zufällig aus einer Maxwellverteilung genommen.

```
int main( int argc, char **argv )
{
    eons_init();
    ions_init();
```

Dann werden die Elektronen- und Ionendichten zum Zeitpunkt $t = 0$ bestimmt.

```
ions_accum(ion_dens);
eons_accum(eon_dens);
```

Das elektrische Feld zum Zeitpunkt $t = 0$ wird mit der normalen Poissongleichung $\nabla^2\phi = -\rho$ berechnet, da die exakten Dichten bekannt sind.

```
poisson_solve_explicit(eon_dens, ion_dens, phi);
```

In der Hauptschleife wird der Schritt von n nach $n + 1$ durchgeführt.

```
for (timestep=1; timestep<=global.nt; timestep++){
```

Zuerst werden die Ionen weiterbewegt und die Ionendichte $\rho_{i,n+1}$ bestimmt.

```
ions_push(ex, ey);
ions_accum(ion_dens);
```

Dann werden die Elektronen zu den extrapolierten Werten bewegt, indem in Gleichung (2.23c) $\mathbf{E}_{n+1} = 0$ gesetzt wird.

```
eons_prepush();
```

Aus den so gefundenen Positionen $\{\tilde{\mathbf{x}}\}$ wird die extrapolierte Elektronendichte $\tilde{\rho}_e$ bestimmt.

```
eons_accum(eon_dens);
```

Mit der Ionendichte $\rho_{i,n+1}$ und der Elektronendichte $\tilde{\rho}_e$ wird dann die implizite Poissongleichung (2.32) gelöst, um das Potential ϕ_{n+1} und damit das elektrische Feld \mathbf{E}_{n+1} zu erhalten.

```
poisson_solve_implicit(eon_dens, ion_dens, phi);
```

Hiermit werden dann die Inkremente $\{\delta\mathbf{x}, \delta\mathbf{v}\}$ bestimmt, mit denen die Elektronen zu ihren endgültigen Positionen bewegt werden. Hierbei wird auch die gemittelte Beschleunigung $\bar{\mathbf{a}}_{n+1}$ gespeichert.

```
eons_finalpush(ex, ey);
```

Zum Schluß der Schleife werden noch die Stöße mit dem Neutralgas ausgeführt, wie in Kapitel 2.4 beschrieben. Bei den Stabilitätsuntersuchungen des Verfahrens waren diese Stöße abgeschaltet.

```
eons_collide
ions_collide
} /* Ende der Hauptschleife */
```

B.2 Hammersley-Sequenzen

Hammersley-Sequenzen sind die Verallgemeinerung der bit-invertierten Folgen. Schreibt man eine Zahl n in der Darstellung zur Basis p :

$$n = a_0 + a_1 p + a_2 p^2 + \dots + a_m p^m, \quad (0 \leq a_i < p) \quad (\text{B.1})$$

so erhält man die zugehörige Zahl $h_p(n)$ aus der *Hammersley*-Sequenz der Basis p , in dem man die Reihenfolge der Koeffizienten a_i invertiert und als p -adischen Bruch interpretiert:

$$h_p(n) = a_0 p^{-1} + a_1 p^{-2} + \dots + a_m p^{m-1} \quad (\text{B.2})$$

Als Beispiel die ersten acht Zahlen der *Hammersley*-Sequenz zur Basis 2:

n (dezimal)	n (binär)	$h_2(n)$ (binär)	$h_2(n)$ (dezimal)
0	0	0.0	0.0
1	1	0.1	0.5
2	10	0.01	0.25
3	11	0.11	0.25
4	100	0.001	0.125
5	101	0.101	0.625
6	110	0.011	0.375
7	111	0.111	0.875

Und zur Basis 3:

n (dezimal)	n (triadisch)	$h_2(n)$ (triadisch)	$h_2(n)$ (dezimal)
0	0	0.0	0.0
1	1	0.1	0.33333
2	2	0.2	0.66667
3	10	0.01	0.11111
4	11	0.11	0.44444
5	12	0.21	0.77778
6	20	0.02	0.22222
7	21	0.12	0.55556

Wie *Denavit und Walsh* (1981) gezeigt haben, muß die Basis p eine Primzahl sein, um eine geeignete gleichmäßige Folge zur Invertierung der kumulierten Verteilungsfunktion zu liefern. Außerdem sollte man für die Elektronen und Ionen verschiedene

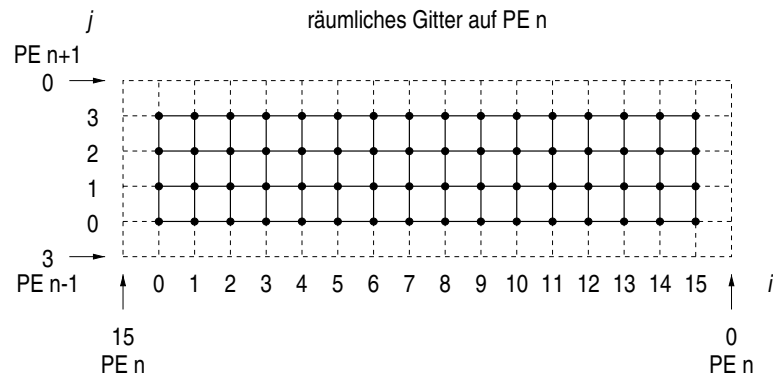


Abbildung B.1: Aufteilung des räumlichen Gitters (schwarze Punkte) mit Hilfspunkten (durch einen Pfeil markiert) der benachbarten Prozessorelemente.

Hammersley-Sequenzen verwenden, um nicht jeweils ein Elektron und ein Ion am exakt gleichen Ort im Phasenraum zu initialisieren.

B.3 Parallelisierung

Gitter

Die hervorragende Effizienz der Parallelisierung der Unterprogramme zur Lösung der Bewegungsgleichungen, zur Gewichtung der Ladungsdichte auf die umliegenden Gitterpunkte und zur Interpolation des elektrischen Feldes am Ort des Teilchens wurde bereits in Abschnitt 2.3.7 dargestellt. Die Rechenzeit nimmt stärker als linear mit der Zahl der Prozessorelemente (PE) ab. Dieser auf den ersten Blick verblüffende Geschwindigkeitszuwachs wird durch die entsprechend der Zahl der PE vergrößerte Kapazität des schnellen Zwischenspeichers erreicht.

Zur Aufteilung des Rechengebiets in einzelne Streifen, die jeweils von einem PE bearbeitet werden, erwies sich die Programmbibliothek PETSc von *Balay et al.* (1998b,a) als überaus hilfreich. Diese Bibliothek stellt einen abstrakten Datentyp *distributed array* bereit, der genau diese Aufteilung vornimmt und außerdem die jeweils benachbarten Gitterpunkte der angrenzenden PE in y -Richtung bzw. die entsprechenden Gitterpunkte des eigenen PE in x -Richtung als Hilfspunkte zur Verfügung stellt (siehe Abb. B.1).

Bei der Aufsummierung der Ladungsdichte wird dann zunächst auf jedem PE unabhängig voneinander die Ladungsdichte auf dem Gitter mit den Hilfspunkten berechnet. Danach wird dann die Ladungsdichte, die auf den Hilfspunkten aufsummiert wurde, zu dem entsprechenden benachbarten PE übertragen und dort zu der bereits auf diesem Gitterpunkt berechneten Ladungsdichte addiert. Dieser Schritt geschieht

vollständig unter Benutzung von Bibliotheksfunktionen.

Für die schnelle Fouriertransformation zur Lösung der Poissongleichung wurde das frei verfügbare Paket FFTW von *Frigo und Johnson* (1997, 1998) verwendet. Dies Paket erreicht eine ausgezeichnete Effizienz, mit dem weiteren Vorteil, nicht auf herstellerabhängige Bibliotheksfunktionen mit ihren jeweils anderen Aufrufkonventionen angewiesen zu sein.

Teilchen

Für die Teilchen war keine geeignete Bibliotheksfunktion verfügbar, so daß hier eine eigene Methode auf der Basis des standardisierten *message-passing interfaces* (*Gropp et al.*, 1994) entwickelt werden mußte. Die Lösung der Bewegungsgleichungen, die Gewichtung der Ladungsdichte auf die umliegenden Gitterpunkte und die Interpolation des elektrischen Feldes am Ort des Teilchens geschieht für jedes Teilchen unabhängig voneinander, weshalb diese Teile des Programms, die den größten Anteil an der Rechenzeit benötigen, mit einer seriellen Version des PIC-Verfahrens identisch sind. Der einzige Unterschied liegt in den Randbedingungen: Während bei periodischen Randbedingungen die Teilchen, die sich über den Rand hinwegbewegen, auf der anderen Seite wieder in das System eintreten, müssen diejenigen Teilchen, die sich über den Rand zwischen zwei PE bewegen, von demjenigen PE zu dem benachbarten transferiert werden.

Da jeder Aufruf einer Kommunikationsfunktion mit einem gewissen Aufwand verbunden ist, empfiehlt es sich, nicht jedes Teilchen einzeln zu dem benachbarten PE zu übertragen. Statt dessen werden erst alle Teilchen, die übertragen werden müssen, in einen lokalen Sendepuffer kopiert. Die entstehende Lücke im Feld der Teilchen wird dann sofort gefüllt, in dem das letzte Teilchen aus diesem Feld an die freigewordene Stelle verschoben wird. Dies erwies sich als effizienter, als erst die Teilchen vom benachbarten PE zu empfangen und dann in die Lücken einzusortieren. Die Kommunikationsfunktionen erwarten die Angabe eines Sende- und Empfangspuffers, so kann das freie Ende des Feldes für die Teilchen gleich als Empfangspuffer dienen, die Teilchen müssen dann nicht noch einmal im lokalen Speicher kopiert werden. Es muß natürlich dafür Sorge getragen werden, daß der Empfangspuffer ausreichend groß ist. Deshalb werden vor dem eigentlichen Austausch der Teilchen erst die Anzahl der zu empfangenden Teilchen ausgetauscht. Bei Bedarf muß dann der Speicherbereich für die Teilchen vergrößert werden. Da dies sehr zeitaufwendig ist, wird von vornherein auf jedem PE 10 Prozent mehr Speicher für die Teilchen reserviert, als sie zu Beginn der Rechnung benötigen. Auf diese Weise konnte eine aufwendige Reallozierung zur Laufzeit vermieden werden.

B.4 Glättung der Ladungsdichte

Um die unphysikalisch hohen Fluktuationen der Ladungsdichte auf kleinen Skalen zu verringern, werden die Elektronen- und Ionendichte jeweils mit folgendem Filter (*Birdsall und Langdon, 1991, Anh. B*) im k -Raum geglättet:

$$f(k_x, k_y) = \exp\left(-a \tan^4\left(\frac{\mathbf{k} \cdot \Delta \mathbf{x}}{2}\right)\right) \quad (\text{B.3})$$

Für verschiedene Werte von a nimmt der Filter im k -Raum diese Formen an:

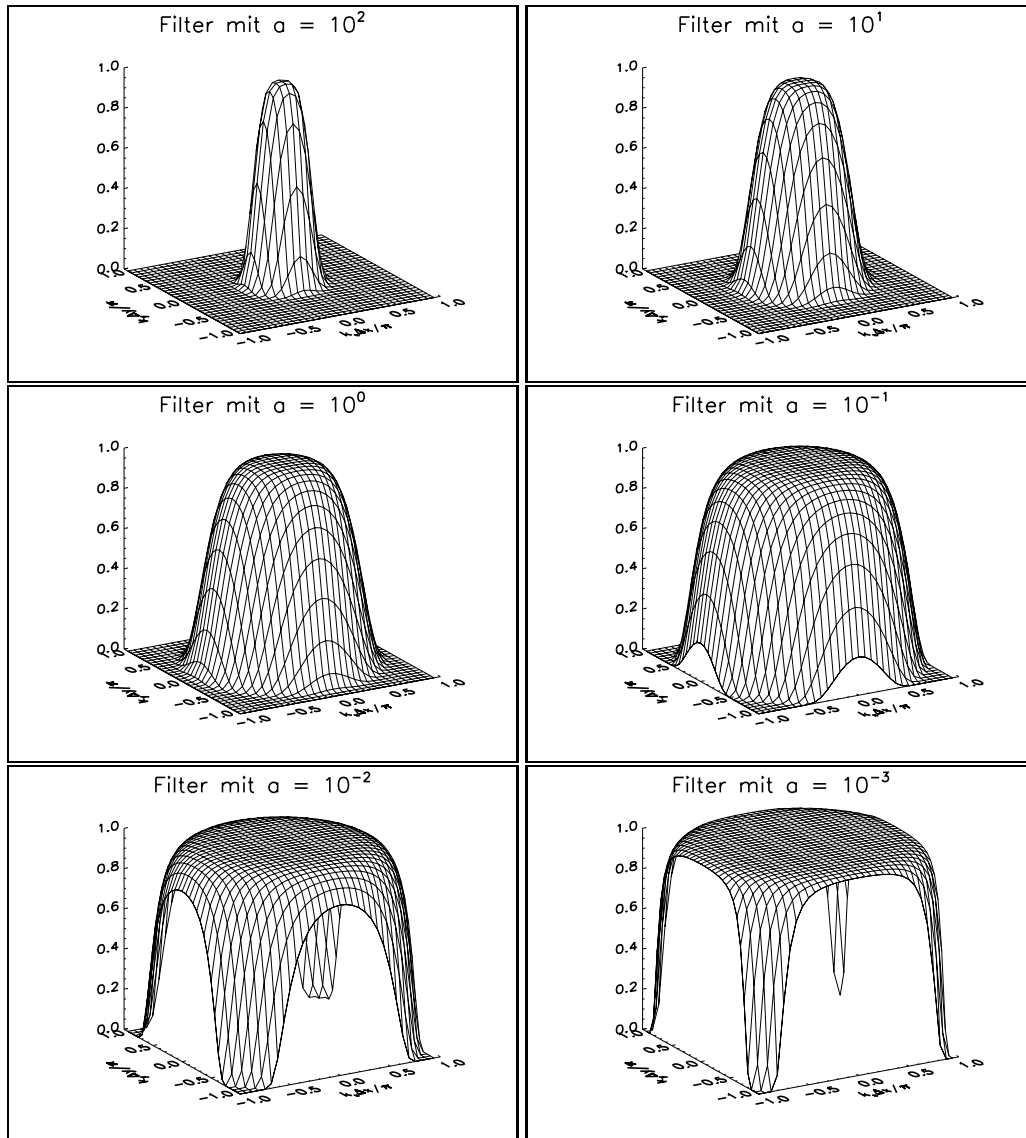


Abbildung B.2: Filter zur Glättung der Ladungsdichte für verschiedene Werte des Glättungsparameters a . Die Achsenbeschriftungen lauten $k_x \Delta x / \pi$ bzw. $k_y \Delta y / \pi$.

Anhang C

Symbolverzeichnis

\mathbf{E}	elektrische Feldstärke	\mathbf{B}	magnetische Induktion
v, \mathbf{v}	Geschwindigkeit	f	Verteilungsfunktion
ω	Frequenz	k, \mathbf{k}	Wellenzahl, -vektor
Ω	Gyrationsfrequenz	ν	Stoßfrequenz
\mathbf{E}_0	äußeres elektrisches Feld	C_s	Ionenschallgeschwindigkeit
κ	Hallkoeffizient d. Elektronen	\Re, \Im	Real- u. Imaginärteil
Ψ_0	$\frac{\nu_e \nu_i}{\Omega_e \Omega_i}$	v_d, \mathbf{v}_d	Driftgeschw. d. Elektronen
λ_D	Debyelänge	\mathbf{j}	Stromdichte
σ	Leitfähigkeit	ρ	Ladungsdichte
ε_0	Permittivität d. Vakuums	n	Teilchendichte
k_B	Boltzmannkonstante	T	Temperatur
v_{th}	thermische Geschwindigkeit	L	Ausdehnung des Rechengebiets
ρ_m	Massendichte	c	Lichtgeschwindigkeit
P	Druck	η	kinematische Viskosität
ϕ	elektrostatisches Potential	m	Masse
q	Ladung	λ	Wellenlänge
S	Gewichtungsfunktion	x, \mathbf{x}	Ort
\mathbf{a}	Beschleunigung	F, \mathbf{F}	Kraft
ω_{pe}	Plasmafrequenz	\mathcal{R}	Rotationsoperator
\mathcal{I}	Einheitstensor	χ	implizite Suszeptibilität
F	kumulierte Verteilungsfunktion	σ	Stoßquerschnitt
P	Stoßwahrscheinlichkeit	E	Energie

Literaturverzeichnis

- Appleton, E. V., R. Naismith, und L. J. Ingram, British Radio Observation During the Second International Polar Year, *Philos. Trans. Roy. Soc. London*, **A 236**, 191–259 (1937)
- Ashtiani, K. A., J. L. Shohet, W. N. G. Hitchon, G.-H. Kim, und N. Hershkowitz, A Two-Dimensional Particle-in-Cell Simulation of an Electron-Cyclotron Resonance Etching Tool, *J. Appl. Phys.*, **78**, 4, 2270–2278 (1995)
- Axford, W. I., The Good Old Days, *J. Geophys. Res.*, **99**, 19199–19212 (1994)
- Balay, S., W. D. Gropp, L. C. McInnes, und B. F. Smith, PETSc 2.0 Users Manual, Techn. Ber. ANL-95/11 - Revision 2.0.22, Argonne National Laboratory (1998a)
- Balay, S., W. D. Gropp, L. C. McInnes, und B. F. Smith, PETSc Home Page, <http://www.mcs.anl.gov/petsc> (1998b)
- Banks, P. M., Collision Frequencies and Energy Transfer, Electrons, *Planet. Space Sci.*, **14**, 1085–1102 (1966)
- Barnes, D. C., T. Kamimura, J.-N. LeBoeuf, und T. Tajima, Implicit Particle Simulation of Magnetized Plasmas, *J. Comp. Phys.*, **52**, 480–502 (1983)
- Bates, D. R., Some Facets of the Ionosphere and of the Nightglow, *J. Geophys. Res.*, **99**, 19101–19112 (1994)
- Bates, D. R. und H. S. W. Massey, The Basic Reactions in the Upper Atmosphere, *Proc. Roy. Soc. London*, **187**, 112 (1946)
- Baumjohann, W., J. Untiedt, und R. A. Greenwald, Joint Two-Dimensional Observations of Ground Magnetic and Ionospheric Electric Fields Associated with Auroral Zone Currents. 1. Three Dimensional Current Flow Associated with a Substorm-Intensified Eastward Electrojet, *J. Geophys. Res.*, **85**, 1963–1978 (1980)
- Bhatnagar, P. L., E. P. Gross, und M. Krook, A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems, *Phys. Rev.*, **94**, 511–525 (1954)

- Bilitza, D., International Reference Ionosphere 1990, Techn. Ber. NSSDC 90-22, NASA/Goddard Space Flight Center, National Space Science Data Center, Greenbelt, Maryland (1990)
- Birdsall, C. K., Particle-In-Cell Charged Particle Simulations, plus Monte Carlo Collisions with Neutral Atoms, PIC-MCC, *IEEE Trans. Plasma Sci.*, **19**, 65–85 (1991)
- Birdsall, C. K. und A. B. Langdon, *Plasma Physics via Computer Simulation*, Adam Hilger (1991)
- Booker, H. G., A Theory of Scattering by Nonisotropic Irregularities with Application to Radar Reflection from the Aurora, *J. Atmos. Terr. Phys.*, **8**, 204–221 (1956)
- Bowles, K. L., R. Cohen, G. R. Ochs, und B. B. Balsley, Radar Echoes from Field-Aligned Ionization Above the Magnetic Equator and Their Resemblance to Auroral Echoes, *J. Geophys. Res.*, **65**, 1853–1855 (1960)
- Buneman, O., Excitation of Field Aligned Sound Waves by Electron Streams, *Phys. Rev. Lett.*, **10**, 285–287 (1963)
- Buneman, O., Time Reversible Difference Procedures, *J. Comp. Phys.*, **1**, 517–535 (1967)
- Chapman, S., Some Phenomenon of the Upper Atmosphere, *Proc. Roy. Soc. London*, **132**, 252 (1931)
- Cohen, B. I., A. B. Langdon, und A. Friedman, Implicit Time Integration for Plasma Simulation, *J. Comp. Phys.*, **46**, 15–38 (1982)
- Cohen, B. I., A. B. Langdon, D. H. Hewett, und R. J. Procassini, Performance and Optimization of Direct Implicit Particle Simulation, *J. Comp. Phys.*, **81**, 151–168 (1989)
- Courant, R. und D. Hilbert, *Methoden der Mathematischen Physik*, Springer, 4. Aufl. (1993)
- Dawson, J. M., One-Dimensional Plasma Model, *Phys. Fluids*, **5**, 445 (1962)
- Denavit, J., Time Filtering Particle Simulations with $\omega_{pe} \gg 1$, *J. Comp. Phys.*, **42**, 337–366 (1981)
- Denavit, J. und J. M. Walsh, Nonrandom Initialization of Particle Codes, *Comm. Plasma Phys. & Controlled Fusion*, **6**, 6, 209–223 (1981)
- Dieminger, W., G. K. Hartmann, und R. Leitinger, Hg., *The Upper Atmosphere*, Springer (1996)

- Duff, I. S. und J. K. Reid, The Design of MA48: A Code for the Direct Solution of Sparse Unsymmetric Linear Systems of Equations, *ACM Trans. Math. Softw.*, **22**, 187–226 (1996)
- Dungey, J. W., Memories, Maxims, and Motives, *J. Geophys. Res.*, **99**, 19189–19197 (1994)
- Dyce, R., Auroral Echoes Observed North of the Auroral Zone on 51.5 mc/s, *J. Geophys. Res.*, **60**, 317–323 (1955)
- vom Endt, A. und K. Schlegel, Particle-in-cell Simulationen der Farley-Buneman Instabilität, in *Kleinheubacher Berichte*, URSI (1996)
- vom Endt, A. und K. Schlegel, Simulations of the Farley-Buneman Instability in the Polar Electrojet, in *Proceedings of the Fifth International Symposium for Space Simulations*, Kyoto, Japan (1997)
- Farley, D. T., A Plasma Instability Resulting in Field-Aligned Irregularities in the Ionosphere, *J. Geophys. Res.*, **68**, 22, 6083–6097 (1963)
- Farley, D. T., Theory of Equatorial Electrojet Plasma Waves: New Development and Current Status, *J. Atmos. Terr. Phys.*, **47**, 8-10, 729–744 (1985)
- Fejer, B. G. und M. C. Kelley, Ionospheric Irregularities, *Rev. Geophys. Space Phys.*, **18**, 2, 401–454 (1980)
- Ferraro, R. D., P. C. Liewer, und V. K. Decyk, Dynamic Load Balancing for a 2D Concurrent Plasma PIC Code, *J. Comp. Phys.*, **109**, 329–341 (1993)
- Fried, B. D. und S. D. Conte, *The plasma dispersion function*, Acad. Press (1961)
- Friedman, A., A. B. Langdon, und B. I. Cohen, A Direct Method for Implicit Particle-In-Cell Simulation, *Comm. Plasma Phys. & Controlled Fusion*, **6**, 225–236 (1981)
- Friedman, H., From Ionosonde to Rocket Sonde, *J. Geophys. Res.*, **99**, 19143–19153 (1994)
- Frigo, M. und S. G. Johnson, The Fastest Fourier Transform in the West, Techn. Ber. MIT-LCS-TR-728, Massachusetts Institute of Technology (1997)
- Frigo, M. und S. G. Johnson, FFTW Home Page, <http://theory.lcs.mit.edu/~fftw/> (1998)
- Fukushima, N., Some Topics and Historical Episodes in Geomagnetism and Aeronomy, *J. Geophys. Res.*, **99**, 19113–19142 (1994)

- Gibbons, M. R. und D. W. Hewett, The Darwin Direct Implicit Particle-In-Cell (DA-DIPIC) Method for Simulation of Low Frequency Plasma Phenomena, *J. Comp. Phys.*, **120**, 231–247 (1995)
- Golub, G. H. und C. F. Van Loan, *Matrix Computations*, Johns Hopkins Univ. Press (1990)
- Gropp, W., E. Lusk, und A. Skjellum, *Using MPI : portable parallel programming with the message-passing interface*, MIT Press (1994)
- Hammersley, J. M. und D. C. Handscomb, *Monte Carlo Methods*, Methuen (1964)
- Hamza, A. M. und J.-P. St-Maurice, A Fully Self-Consistent Fluid Theory of Anomalous Transport in Farley-Buneman Turbulence, *J. Geophys. Res.*, **100**, A6, 9653–9668 (1995)
- Harang, L. W. und W. Stoffregen, Echoversuche auf Ultrakurzwellen, *Hochfreq. u. Elektroak.*, **55**, 105–108 (1940)
- Hargreaves, J. K., *The Solar-Terrestrial Environment*, Cambridge Univ. Press (1992)
- Hedin, A. E., Extension of the MSIS Thermospheric Model into the Middle and Lower Atmosphere, *J. Geophys. Res.*, **96**, 1159–1172 (1991)
- Jackson, J. D., *Classical Electrodynamics*, Wiley, 2. Aufl. (1975)
- Janhunen, P., Three Dimensional Stabilization Mechanism for the Auroral Farley-Buneman Instability, *J. Atmos. Terr. Phys.*, **54**, 1633–1643 (1992)
- Janhunen, P., *Numerical Simulations of E-Region Irregularities and Ionosphere-Magnetosphere Coupling*, Dissertation, Finnish Meteorological Institute (1994a)
- Janhunen, P., Perpendicular Particle Simulation of the E-Region Farley-Buneman Instability, *J. Geophys. Res.*, **99**, 11461–11473 (1994b)
- Janhunen, P., On Recent Developments in E-region Irregularity Simulations and a Summary of Related Theory, *Ann. Geophys.*, **13**, 7, 791–806 (1995)
- Kelley, M. C., *The Earth's Ionosphere : Plasma Physics and Electrodynamics*, Acad. Press (1989)
- Kippenhahn, R. und C. Möllenhoff, *Elementare Plasmaphysik*, Bibliograph. Inst. (1975)
- Klimas, A. J., A Method for Overcoming the Velocity Space Filamentation Problem in Collisionless Plasma Model Solutions, *J. Comp. Phys.*, **68**, 202 (1987)

- Labitzke, K., J. J. Barnett, und B. Edwards, Handbook MAP 16, Techn. Ber., University of Illinois, Urbana (1985)
- Langdon, A. B. und D. C. Barnes, Direct Implicit Plasma Simulation, in J. U. Brackbill und B. I. Cohen, Hg., *Multiple Timescales*, Academic Press (1985)
- Langdon, A. B., B. I. Cohen, und A. Friedman, Direct Implicit Large Time-Step Particle Simulation of Plasmas, *J. Comp. Phys.*, **51**, 107–138 (1983)
- Lange-Hesse, G., Radio-Polarlicht, *Zeitschr. f. Geophys.*, **34**, 323–352 (1968)
- Leadabrand, R. L., J. C. Schlobohm, und M. J. Baron, Simultaneous Very High Frequency and Ultra High Frequency Observations of the Aurora at Fraserburg, Scotland, *J. Geophys. Res.*, **70**, 4235–4284 (1965)
- Lee, W. W. und H. Okuda, A Simulation Model for Studying Low-Frequency Microinstabilities, *J. Comp. Phys.*, **26**, 139–52 (1976)
- Lovell, A. C. B., J. A. Clegg, und C. D. Ellyett, Radio Echoes from the Aurora Borealis, *Nature*, **160**, 372–373 (1947)
- Machida, S. und C. K. Goertz, Computer Simulation of the Farley-Buneman Instability and Anomalous Electron Heating in the Auroral Ionosphere, *J. Geophys. Res.*, **93**, 9993–10000 (1988)
- Mason, R. J., Implicit Moment Particle Simulation of Plasmas, *J. Comp. Phys.*, **41**, 233–244 (1981)
- Moore, R. K., A VHF Propagation Phenomena Associated with Aurora, *J. Geophys. Res.*, **56**, 97–106 (1951)
- Newman, A. L., *Nonlinear Simulations of Type I Irregularities in the Equatorial Electrojet*, Dissertation, Cornell University (1979)
- Newman, A. L. und E. Ott, Nonlinear Simulations of Type 1 Irregularities in the Equatorial Electrojet, *J. Geophys. Res.*, **86**, A8, 6879–6891 (1981)
- Nielsen, E. und K. Schlegel, Coherent Radar Doppler Measurements and their Relationship to the Ionospheric Electron Drift Velocity, *J. Geophys. Res.*, **90**, 3498–3504 (1985)
- Oppenheim, M., *Nonlinear Simulations and Theory of the Farley-Buneman Instability in the E-Region Ionosphere*, Dissertation, Cornell University (1995)
- Oppenheim, M., N. Otani, und C. Ronchi, Simulations of the Saturated Farley-Buneman Instability in the Ionosphere, *Geophys. Res. Lett.*, **22**, 353–356 (1995)

- Oppenheim, M., N. Otani, und C. Ronchi, Saturation of the Farley-Buneman Instability via Nonlinear Electron $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ Drift, *J. Geophys. Res.*, **101**, 17273–17286 (1996)
- Parker, E. N., Vital Phase of Space Science, *J. Geophys. Res.*, **99**, 19155–19157 (1994)
- Pedersen, P. O., The Propagation of Radio Waves along the Surface of the Earth and in the Atmosphere, *Dan. Naturvidensk. Samfund*, **15** (1927)
- Penrose, O., Electrostatic Instabilities of a Uniform Non-Maxwellian Plasma, *Phys. Fluids*, **3**, 258–265 (1960)
- Phelps, A. V. und L. C. Pitchford, Anisotropic Scattering of Electrons by N_2 and its Effect on Electron Transport, *Phys. Rev. A*, **31**, 2932–2949 (1985a)
- Phelps, A. V. und L. C. Pitchford, Anisotropic Scattering of Electrons by N_2 and its Effect on Electron Transport: Tabulation of Cross Section and Results, Techn. Ber., JILA, University of Colorado, Boulder (1985b)
- Press, W. H., S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, und B. P. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran: The Art of Scientific Computing*, Cambridge Univ. Pr. (1992)
- Primdahl, F., Polar Ionospheric E-Region Plasma Wave Stabilization and Electron Heating by Wave-Induced Enhancement of the Electron Collision Frequency, *Phys. Scripta*, **33**, 187 (1986)
- Robinson, T. R., Towards a Self-Consistent Non-Linear Theory of Radar Auroral Backscatter, *J. Atmos. Terr. Phys.*, **48**, 417–422 (1986)
- Sahr, J. D. und B. G. Fejer, Auroral Electrojet Plasma Irregularity Theory and Experiment: A Critical Review of Present Understanding and Future Directions, *J. Geophys. Res.*, **101**, A12, 26893–26909 (1996)
- Schlegel, K., Die modifizierte Zweistrom-Plasmainstabilität in der Ionosphäre, Habilitation, Göttingen (1990)
- Schlegel, K., H. Kohl, und K. Rinnert, Temperatures and Collision Frequency in the Polar E-Region Measured with the Incoherent Scatter Technique, *J. Geophys. Res.*, **85**, 710–714 (1980)
- Schlegel, K. und J.-P. St.-Maurice, Anomalous Heating of the Polar E-Region by Unstable Plasma Waves - 1. Observations, *J. Geophys. Res.*, **86**, 1447–1452 (1981)
- Schmidt, M. J. und S. P. Gary, Density Gradients and the Farley-Buneman Instability, *J. Geophys. Res.*, **78**, 8261–8265 (1973)
- Schumer, J. W. und J. P. Holloway, Vlasov Simulations Using Velocity-Scaled Hermite Representations, *J. Comp. Phys.*, **144**, 626–661 (1998)

- Schunk, R. W. und A. F. Nagy, Electron Temperatures in the *F* Region of the Ionosphere: Theory and Observation, *Rev. Geophys. Space Phys.*, **16**, 3, 355–399 (1978)
- Seele, C., G. Zwicknagel, C. Toepffer, und P.-G. Reinhard, Time-Dependent Stopping Power and Influence of an Infinite Magnetic Field, *Phys. Rev. E*, **57**, 3368–3378 (1997)
- Simpson, J. A., A Physicist in the World of Geophysics and Space, *J. Geophys. Res.*, **99**, 19159–19173 (1994)
- Sonett, C. P., Romancing the Solar System, *J. Geophys. Res.*, **99**, 19175–19187 (1994)
- St.-Maurice, J.-P., K. Schlegel, und P. M. Banks, anomalous heating of the polar e-region by unstable plasma waves - 2. theory, *J. Geophys. Res.*, **86**, 1453–1462 (1981)
- Stoer, J., *Einführung in die numerische Mathematik*, Bd. 1, Springer (1972)
- Strickland, A., Hg., *COSPAR International Reference Atmosphere (CIRA): 1972*, Akademie-Verlag, Berlin (1972)
- Sudan, R. N., Unified Theory of Type I and Type II Irregularities in the Equatorial Electrojet, *J. Geophys. Res.*, **88**, A6, 4853–4860 (1983)
- Surendra, M., D. B. Graves, und I. J. Morey, Electron Heating in Low-Pressure RF Glow Discharges, *Appl. Phys. Lett.*, **56**, 1022–1024 (1990)
- Thiemann, H. und K. Schlegel, Particle-In-Cell Plasma Simulations of the Modified Two-Stream Instability, *Ann. Geophys.*, **12**, 1091–1100 (1994)
- Untiedt, J., A Model of the Equatorial Electrojet with a Meridional Current System, *J. Geophys. Res.*, **72**, 5799–5810 (1967)
- Unwin, R. S. und F. B. Knox, The Morphology of the VHF Radio Aurora at Sunspot Maximum, *J. Atmos. Terr. Phys.*, **30**, 25–46 (1968)
- Vahedi, V. und M. Surendra, A Monte Carlo Collision Model for the Particle-In-Cell Method: Applications to Argon and Oxygen Discharges, *Comp. Phys. Comm.*, **87**, 179–198 (1995)
- Walker, J. S., *Fast Fourier Transforms*, CRC Press, 2. Aufl. (1996)

Danksagung

Die vorliegende Arbeit wurde am Max-Planck-Institut für Aeronomie (MPAe) in Katlenburg-Lindau angefertigt. Den Direktoren des Instituts danke ich für die Bereitstellung des Arbeitsplatzes und der Max-Planck-Gesellschaft für die Gewährung des Stipendiums.

Herrn Prof. Dr. K. Schlegel danke ich für die Anregung des Arbeitsthemas, die Betreuung der Arbeit und fruchtbare Diskussionen, vor allem zur Physik der Ionosphäre. Herrn Prof. Dr. F. Demmig danke ich für die Betreuung der Arbeit von der Seite der Universität Hannover, wo mir weiterhin ein Arbeitsplatz zur Verfügung gestellt wurde, und manchen hilfreichen Hinweis zu numerischen Problemen. Nicht jeder befindet sich in der angenehmen Lage, von zwei sich hervorragend ergänzenden Seiten betreut zu werden!

M. Oppenheim, PhD, gebührt mein Dank für eine äußerst fruchtbare Zusammenarbeit während seiner Zeit als Postdoktorand am MPAe.

Mein Dank gilt auch den Mitarbeitern der Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung, Göttingen. Dort wurden auf einer Cray T3E die in dieser Arbeit dargestellten Ergebnisse von parallelisierten Verfahren gewonnen. Weiterhin gilt mein Dank der stetig wachsenden Gruppe von Linux-Anwendern im MPAe, auf deren Rat bei Computerproblemen immer Verlaß war.

Ich danke Frau Dipl.-Phys. K. Cierpka und Herrn Dipl.-Phys. M. Bantin für die Durchsicht des Manuskripts.

Der 10:23-Runde und allen anderen im Institut möchte ich für eine stimulierende Arbeitsatmosphäre und eine schöne Zeit während der letzten drei Jahre danken.

Das wichtigste zum Schluß: Der herzlichste Dank gebührt meiner Frau Frauke. Ohne ihre Anteilnahme hätte ich die Höhen und Tiefen der letzten drei Jahre sicher nicht so meistern können.

Lebenslauf

Geburtsdatum/-ort	12. 01. 1968 in Bremen, jetzt Ense
Schulbildung	Kath. Grundschule in Werl 1974 – 1978 Mariengymnasium Werl 1978 – 1987 Abschluß mit Abitur 6/1987
Zivildienst	10/1987 – 5/1989
Studium	Studium der Physik an der Universität Freiburg 10/1989 – 3/1992 Studium der Physik an der Universität Hannover 4/1992 – 7/1995 Abschluß mit Diplom 13. 7. 1995 Stipendiat am Max-Planck-Institut für Aeronomie in Katlenburg-Lindau seit 1. 9. 1995
Veröffentlichungen	vom Endt, A. und K. Schlegel, Particle-in-cell Simulationen der Farley-Buneman Instabilität, in <i>Kleinheubacher Berichte</i> , URSI (1996) vom Endt, A. und K. Schlegel, Simulations of the Farley-Buneman Instability in the Polar Electrojet, in <i>Proceedings of the Fifth International Symposium for Space Simulations</i> , Kyoto, Japan (1997)
Vorträge	XXVth General Assembly of the International Union of Radio Science, Lille, 28. 8. - 5. 9. 1996: <i>PIC-Simulations of the Farley-Buneman Instability in the Ionospheric E-Region</i> Kleinheubacher Tagung der URSI, 30. 9. - 4. 10. 1996: <i>Particle-in-cell Simulationen der Farley-Buneman Instabilität in der E-Schicht der Ionosphäre</i> Fifth International Symposium for Space Simulations, Kyoto, 13. - 19.3. 1997: <i>Simulations of the Farley-Buneman Instability in the Polar Electrojet</i> 58. Jahrestagung der Deutschen Geophysikalischen Gesellschaft, Göttingen, 30. 3. - 3. 4. 1998: <i>PIC-Simulationen der Farley-Buneman-Instabilität</i> XXIIIth General Assembly of the European Geophysical Society, Nice, 20. - 24. 4. 1998: <i>Implicit PIC Simulations of the Farley-Buneman Instability</i> VIIth International Plasma Astrophysics and Space Physics Conference, Katlenburg-Lindau, 4. - 8. 5. 1998: <i>PIC simulations of the Farley-Buneman instability: a parallel approach</i>