

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ДВУХ АЛГОРИТМОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИНАМИКИ ЗАРЯЖЕННЫХ ПУЧКОВ

К. В. Лаговская¹, М. А. Боронина²

¹Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск

²Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск

УДК 517.968

В представленной работе рассматривается задача о движении пучка заряженных частиц. Предполагается, что движение частиц происходит под действием самосогласованного поля в вакууме на релятивистских скоростях. Динамику системы описывают уравнения Власова — Максвелла, решение обеспечивается методом частиц-ячеек. Целью работы явилась реализация и исследование возможности применения алгоритма с использованием неявной схемы для расчета уравнений Максвелла для численного моделирования динамики тонких длинных пучков. В работе приведен сравнительный анализ численных результатов явной и неявной схем.

Ключевые слова: метод частиц-ячеек, ультрарелятивизм, математическое моделирование, пучки заряженных частиц, уравнения Максвелла, уравнение Власова, моделирование эффектов встречи, электромагнитное поле, неявная схема.

Введение

Развитие современной физики во многом сосредоточено на исследованиях, связанных с ускорительными установками. В установке формируются пучки заряженных частиц с необходимыми характеристиками (энергией, интенсивностью, пространственными размерами и т.д.), которые затем ускоряются и взаимодействуют между собой. Целью является достижение наибольшей светимости ускорителя путем получения пучка частиц с наибольшей плотностью и энергией. Численные и реальные эксперименты взаимодополняют друг друга при поиске решения поставленной задачи. Проблемой математического моделирования динамики плоских пучков является трехмерность задачи и большие градиенты, связанные с размерами пучков и ультрарелятивистскими скоростями частиц. Пучки являются достаточно плоскими и длинными, соотношение их размеров может достигать $\approx 10^3 : 1 : 10^5$. Например, размеры пучков для проекта Международного Линейного Коллайдера (ILC) [1]: $\sigma_x = 904$ нм, $\sigma_y = 7.8$ нм, $\sigma_z = 300$ мкм. При использовании пространственных сеток известный метод решения задачи требует достаточно малый временной шаг, что очевидно замедляет процесс симуляции движения пучка таких размеров. На основе существующей схемы Лэнгдона — Лазински [2] была предложена неявная схема [3], [4], которая должна помочь в решении данной проблемы. Т.к. ее условие устойчивости не зависит от пространственного шага по одному из направлений, то использование более крупного временного шага приведет к меньшему количеству вызовов трудозатратной процедуры вычисления граничных условий на каждом шаге по времени. Выявлены преимущества и недостатки новой схемы относительно первоначальной на реальных задачах математического моделирования.

1 Постановка задачи и методы решения

В прямоугольной области $[0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, L_z]$ с релятивистской скоростью движется плоский пучок. Движение происходит в вакууме под действием самосогласованного электромагнитного поля. Пучок характеризуется формой, линейными размерами, положением в пространстве и времени, количеством заряженных

частиц и неоднородным распределением плотности заряда внутри пучка. Предполагается, что в начальный момент времени пучок сформирован. Поле, создаваемое им, определяется по принципу суперпозиции суммированием вкладов полей частиц пучка. Излучение не учитывается. Имеем кинетическое уравнение Власова [5]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial f}{\partial r} + \vec{F} \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = 0,$$

Система уравнений Максвелла выражает связь между плотностью зарядов n ($q = \pm e$), током \vec{j} и напряженностью электрического и магнитного полей \vec{E} и \vec{H} :

$$\begin{aligned} \text{rot} \vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}, \\ \text{rot} \vec{H} &= \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \\ \text{div} \vec{E} &= 4\pi n q, \\ \text{div} \vec{H} &= 0. \end{aligned}$$

Плотности заряда и тока определяются через моменты функции распределения частиц:

$$\begin{aligned} n &= \int f dV, \\ \vec{j} &= \int f \vec{v} q dV. \end{aligned}$$

Далее, все уравнения записываются в безразмерных переменных так, что характерная длина пучка равна 1 см, а характерная скорость частиц равна скорости света. Ранее была разработана методика решения данной задачи с учетом ультрарелятивистских скоростей частиц [6], [7]. Методика основана на методе частиц-ячеек [8] с PIC-ядром и с использованием разнесенных сеток с специальным алгоритмом вычисления токов [9].

Компоненты всех величин вычисляются на сдвинутых друг относительно друга на полшага сетках по времени и пространству. Запись производных через центральные разности обеспечивает второй порядок схемы по времени и по пространству. Для решений уравнений Максвелла используется схема Лэнгдона — Лазински [2].

$$\begin{aligned} \frac{Hx^{m+1/2} - Hx^{m-1/2}}{\tau} &= \Delta_z Ey^m - \Delta_y Ez^m, \\ \frac{Hy^{m+1/2} - Hy^{m-1/2}}{\tau} &= \Delta_x Ez^m - \Delta_z Ex^m, \\ \frac{Hz^{m+1/2} - Hz^{m-1/2}}{\tau} &= \Delta_y Ex^m - \Delta_x Ey^m, \\ \frac{Ex^{m+1} - Ex^m}{\tau} &= \Delta_y Hz^{m+1/2} - \Delta_z Hy^{m+1/2} + j_x^{m+1/2}, \\ \frac{Ey^{m+1} - Ey^m}{\tau} &= \Delta_z Hx^{m+1/2} - \Delta_x Hz^{m+1/2} + j_y^{m+1/2}, \\ \frac{Ez^{m+1} - Ez^m}{\tau} &= \Delta_x Hy^{m+1/2} - \Delta_y Hx^{m+1/2} + j_z^{m+1/2}. \end{aligned}$$

Неравенство $\tau^2/h_x^2 + \tau^2/h_y^2 + \tau^2/h_z^2 \leq 1$ описывает её условие устойчивости [10]. Если размеры пучка по оси x минимальны, то шаг τ определяется значением пространственного шага h_x . В работе [3] предложена новая схема с целью ослабить условие на временной шаг. В алгоритме Лэнгдона — Лазински модифицируется расчет двух уравнений для компонент электрического поля:

$$\begin{aligned}
\frac{Ey^{m+1} - 2Ey^m + Ey^{m-1}}{\tau^2} &= \frac{1}{4} \Delta_{xx} Ey^{m+1} + \frac{1}{2} \Delta_{xx} Ey^m + \frac{1}{4} \Delta_{xx} Ey^{m-1} + \\
&+ \Delta_{yy} Ey^m + \Delta_{zz} Ey^m - \Delta_y \rho^m - \frac{j_y^{m+1/2} - j_y^{m-1/2}}{\tau}, \\
\frac{Ez^{m+1} - 2Ez^m + Ez^{m-1}}{\tau^2} &= \frac{1}{4} \Delta_{xx} Ez^{m+1} + \frac{1}{2} \Delta_{xx} Ez^m + \frac{1}{4} \Delta_{xx} Ez^{m-1} + \\
&+ \Delta_{yy} Ez^m + \Delta_{zz} Ez^m - \Delta_z \rho^m - \frac{j_z^{m+1/2} - j_z^{m-1/2}}{\tau},
\end{aligned}$$

Временной и пространственные шаги связаны условием устойчивости. За счет неявности модифицированной схемы её условие устойчивости $\tau^2/h_y^2 + \tau^2/h_z^2 \leq 1$ не зависит от шага по оси x , что дает возможность рассматривать движение плоских пучков, не требуя уменьшения временного шага. Важным вопросом является корректное описание скорости волны схемой. Обе схемы описывают скорость волны со вторым порядком точности [11]:

$$\frac{\omega}{k} = 1 - k^2 \left(\frac{h_x^2 \cos^4 \alpha + h_y^2 \cos^4 \beta + h_z^2 \cos^4 \gamma - \tau^2}{24} \right) + O(\tau^3, h^3, \dots)$$

для схемы Лэнгдона — Лазински и

$$\frac{\omega}{k} = 1 - k^2 \left(\frac{h_x^2 \cos^4 \alpha + h_y^2 \cos^4 \beta + h_z^2 \cos^4 \gamma - \tau^2 + 3\tau^2 \cos^2 \alpha}{24} \right) + O(\tau^3, h^3, \dots)$$

для модифицированной схемы, где ω — скорость волны, k — волновое число, α, β, γ — углы между волновым вектором и соответствующими осями.

В отличие от обычной схемы, для реализации неявной схемы необходимо знать значение электрического поля на двух начальных слоях, как и значение производной тока. В случае простых решений токи в начальный момент вычисляются аналитически по плотности частиц и их скорости. Для данной задачи делается сильное упрощение: предполагается, что электрическое поле при $m = 1$ совпадает с его значением при $m = 0$. Следует отметить, магнитное поле вычисляется на дробных шагах по времени. Но для задания начальных значений для него необходимо несколько раз рассчитать электрическое поле. Поэтому магнитное поле вычисляется через векторное произведение скорости заряда и электрического поля E^0 , что понижает порядок точности до первого, но позволяет ускорить вычисления. Переход на следующий шаг по новой схеме делается с помощью прогонки. Задание граничных условий требует суммирования по узлам плотности (i, l, k) для всех точек границы с (i_1, l_1, k) и очень трудоемко [12]. Более крупный временной шаг требует более редкого вызова процедуры задания граничных условий и существенно сокращает время работы программы.

2 Результаты сравнения численных методов

Алгоритм на основе новой схемы был реализован в однопроцессорной программе на языке Fortran95. Для исходного алгоритма использовалась параллельная программа [6].

Исследование методов проведено на примере плоского пучка электронов цилиндрической формы с гауссовым поперечным распределением плотности. Движение пучка направлено строго по оси z . Предполагается, что заряд пучка достаточно мал, поэтому его поле должно жестко переноситься со временем по оси z .

В общем случае аналитических решений для данной задачи не существует. Равномерное продольное распределение частиц в длинном цилиндре обеспечивает постоянство электрического поля вдоль цилиндра. Если пучок в поперечном сечении круглый, то по теореме Гаусса можно рассчитать аналитически значения электрического поля в поперечном сечении вблизи середины цилиндра. Для гауссова распределения с $\sigma_x = \sigma_y = \sigma$

$$E(r) = \frac{2Q}{rL} \left(1 - \exp \left(-\frac{r^2}{2\sigma^2} \right) \right).$$

Для проведения тестов длина цилиндра взята $L = 0.6$. Для круглого пучка с $\sigma = 0.0002$ (соотношение размеров 1 : 1 : 1000) размеры расчетной области взяты $L_x = 0.002, L_y = 0.004, L_z = 2$. Заряд пучка брался $Q = 10^6$ электронов, релятивистские факторы частиц — $\gamma = 6.85 \cdot 10^3$.

На рисунке 1 изображена поперечная компонента электрического поля по оси z в плоскости ($x = 6.33 \cdot 10^{-4}, y = 1.23 \cdot 10^{-3}$), а на рисунке 2 — продольная в плоскости ($y = 1.23 \cdot 10^{-3}, z = 0.462$) в начальный момент времени.

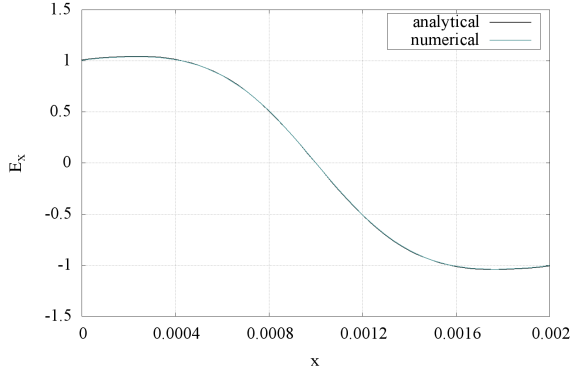


Рис. 1: Поле пучка $E_x(x)$ при $t = 0$

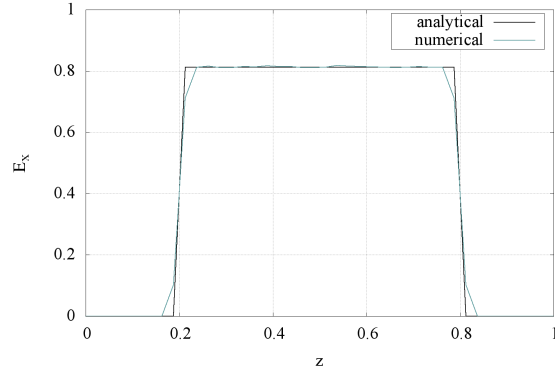


Рис. 2: Поле пучка $E_x(z)$ при $t = 0$

Черным цветом обозначено аналитическое решение, голубым — численное решение. В начальный момент времени для исходной схемы и для новой алгоритм задания поля совпадает, как и результаты. Рисунок демонстрирует корректное задание начальных компонент поля. Градиент на границе пучка на практике определяется величиной пространственного шага, т.к. аналитическое значение недостижимо за счет ультра-релятивистских значений γ . Пространственная сетка состоит из $60 \times 60 \times 80$ узлов. Для некруглых пучков вычислить электрическое поле по теореме Гаусса затруднительно, поэтому сравнение будет проводиться с результатами имеющейся параллельной программы.

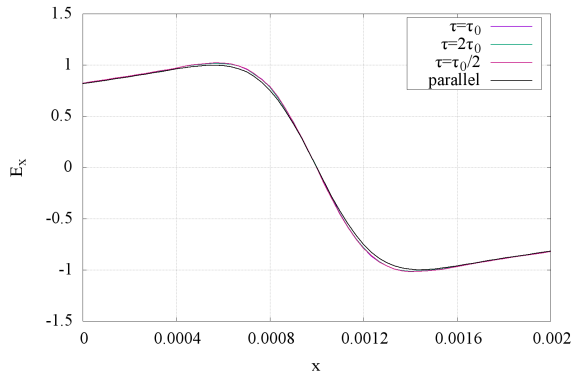
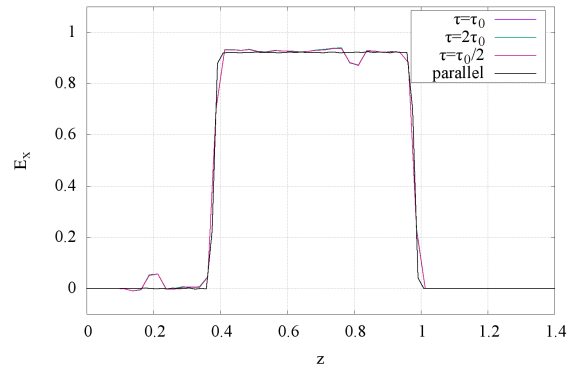
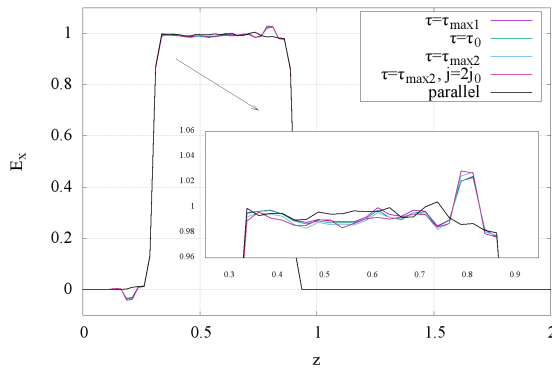
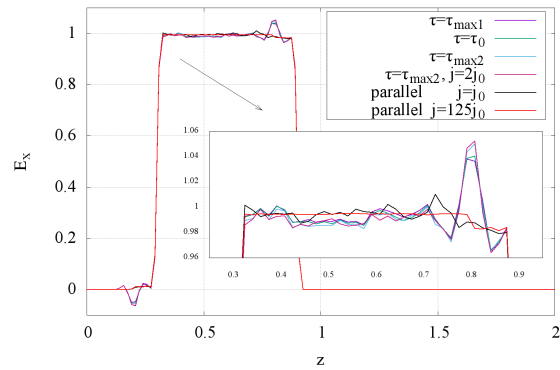
Целью численных экспериментов явилась проверка возможности моделирования при крупном временном шаге τ . Для численных экспериментов стандартными параметрами выбраны размеры области $L_x = 0.002, L_y = 0.0016, L_z = 2$ (соотношение 1 : 8 : 1000). Сетка состоит из $60 \times 60 \times 80$ узлов, временной шаг $\tau_0 = 8 \cdot 10^{-5}$.

На практике максимально возможный временной шаг для устойчивости исходной схемы определяется соотношением $\tau/h_{min} < 0.6$. Таким образом максимальным временным шагом для данных пространственных шагов является $\tau_{max1} = \tau_0/4 = 2 \cdot 10^{-5}$, при этом $c_x = \tau_{max1}/h_x = 0.6, c_y = \tau_{max1}/h_y = 0.075, c_z = \tau_{max1}/h_z = 0.0008$. Для новой схемы также необходимо, чтобы для значений h_y и h_z временной шаг также не превышал значения 0.6. Поэтому максимальный временной шаг для новой схемы $\tau_{max2} = 2\tau_0$, где $\tau_0 = 8 \cdot 10^{-5}$, а $c_x = \tau_{max2}/h_x = 4.8, c_y = \tau_{max2}/h_y = 0.6, c_z = \tau_{max2}/h_z = 0.0064$.

Ну рисунке 3 представлены графики зависимости компоненты E_x от поперечной координаты x в плоскости $y = 0.00787, z = 0.625$, а на рисунке 4 — результаты для E_x в зависимости от z времени $t = 0.18$ в плоскости $x = 0.00047, y = 0.00787$. Для $\tau = \tau_0$ (фиолетовый цвет), $\tau = 2\tau_0$ (зеленый), $\tau = \tau_0/2$ (розовый) вычисления проводились по новой схеме, для исходной схемы $\tau = \tau_{max1}$.

Результаты показывают, что зависимости от временного шага практически нет. Наибольшие значения погрешностей достигаются возле границ пучка в начальный момент времени ($z = 0.2, z = 0.8$). Эксперименты показали, что уровень погрешностей не зависит от сдвига начальных координат частиц, только от положения границ пучка в начальный момент времени.

На рисунках 5 и 6 изображены графики поля $E_x(z)$ в плоскости $x = 0.00046, y = 0.008$ для сетки с числом узлов $N_z = 80$ (слева) и $N_z = 120$ (справа). Фиолетовым цветом отмечен результат работы новой схемы с максимальным возможным временным шагом для исходной схемы τ_{max1} , голубой цвет соответствует τ_0 , зеленый — τ_{max2} . Стандартным количеством модельных частиц в расчетах было $4 \cdot 10^6$. Розовым цветом обозначены графики поля при количестве частиц $8 \cdot 10^6$ и максимальном временном шаге для новой схемы. Черным цветом обозначен результат работы параллельной программы со стандартным количеством частиц и максимальным шагом для нее τ_{max1} . Красным цветом обозначен график поля, полученного с помощью параллельной программы и количества модельных частиц $5 \cdot 10^8$, которое не вмещается в память однопроцессорной машины.

Рис. 3: Поле пучка $E_x(z)$ при $t = 0.18$ Рис. 4: Поле пучка $E_x(z)$ при $t = 0.18$ Рис. 5: Поле пучка $E_x(z)$ при $t = 0.1, h_z = 0.025$ Рис. 6: Поле пучка $E_x(z)$ при $t = 0.1, h_z = 0.0167$

Сложно сказать, какая из схем лучше справилась с задачей. Для данных параметров увеличение сетки в поперечном направлении существенно на результаты не влияет при достаточном количестве частиц в ячейке. При недостаточном количестве частиц возникают колебания, которые уменьшаются с увеличением числа частиц в пучке. Зависимость от продольного шага выражена сильнее — с уменьшением сетки колебания увеличиваются, с увеличением количества частиц j в пучке не изменяются. Существенное увеличение количества частиц для исходного алгоритма дает возможность понизить шумы в методе частиц и увидеть на рис. 6, что исходная схема также дает погрешности на фронте пучка и за пучком, но их уровень существенно ниже. Существенное повышение размеров сетки в каком-либо направлении влечет за собой необходимость увеличения числа частиц, а оно ограничено памятью однопроцессорной ЭВМ. На данном этапе можно сделать вывод, что новая схема хорошо описывает участки области с небольшими градиентами поля. Сеточные эффекты на фронте пучка и за пучком, по-видимому, связаны с несогласованностью начальных условий. В частности, сначала было предложено взять нулевые токи, которые, как видно из схемы, делают прямой вклад в электрическое поле. Т.к. заряд пучка мал, поперечные токи равны нулю. Задание компоненты j_z по плотности цилиндра и постоянной скорости частиц понизило уровень поперечных токов на два порядка, но и этого недостаточно. Требуется более детальное согласование начальных полей, токов и граничных условий.

Тем не менее, новая схема позволяет проводить вычисления при большем временном шаге. Так, временной промежуток $T = 0.02$ с шагом τ_{max1} рассчитывается за 22 минуты программой с использованием неявной схемы и за 10 минут параллельной программой. Новая схема позволяет увеличить временной шаг до τ_{max2} и сократить время вычисления T до 3 минут, то есть примерно в $L_y/L_x = 8$ раз. Увеличение сетки в продольном направлении линейно увеличивает время счета, с 3 минут для 80 узлов до 5 минут для 120 узлов. Таким образом, однопроцессорная версия программы с внедрением новой схемы показала время счета, меньшее в три раза, чем время счета с использованием имеющейся параллельной программы с максимальным временным шагом.

Представленные численные эксперименты проводились для новой схемы на персональном компьютере,

расчеты по параллельной версии программы проводились на суперкомпьютере “Ломоносов” (МГУ).

Авторы благодарят Вшивкова Виталия Андреевича за обсуждение результатов и ценные замечания.

Заключение

В работе приведен сравнительный анализ численных результатов явной и неявной схем для задачи динамики пучка заряженных ультрарелятивистских частиц в самосогласованных электромагнитных полях. Неявная схема позволила проводить расчеты для тонких длинных пучков с существенно более крупным временным шагом, и, следовательно, проводить численные эксперименты намного быстрее. Такие временные шаги для плоских пучков не могут быть реализованы в алгоритме с обычной схемой. Однако корректное задание начальных условий открывает возможность более точного описания решения на границах пучка.

Список литературы

- [1] Adolphsen C. et al. The International Linear Collider Technical Design Report — Volume 3.II: Accelerator Baseline Design. 2013.
- [2] Langdon A., Lasinski B. Electromagnetic and relativistic plasma simulation models // Methods in Computational Physics. 1976. Vol. 16.
- [3] Боронина М. А., Вшивков В. А., Дудникова Г. И. Неявная схема для решения уравнений Максвелла в областях с различными масштабами // Доклады Академии наук высшей школы России. 2014. № 4(25). С. 39–46.
- [4] Boronina M., Vshivkov V. Development and analysis of computational algorithm of the Maxwell's equations in flat domains // Journal of Physics: Conference Series. 2016. V. 722. 012006.
- [5] Власов А.А. Теория многих частиц. М.-Л.: ГИТТЛ, 1950. 348 с.
- [6] Boronina M., Vshivkov V. Parallel 3-D particle-in-cell modelling of charged ultrarelativistic beam dynamics // Journal of Plasma Physics. 2015. V.81. Iss. 6.
- [7] Boronina M. A., Korneev V.D. The parallel three-dimensional PIC code for the numerical modeling of ultrarelativistic beams // Bull. Nov. Comp. Center. 2013. №16. P. 15–22.
- [8] Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М. : Мир, 1962.
- [9] Villaseñor J., Buneman O. Rigorous Charge Conservation for Local Electromagnetic Field Solvers // Computer Physics Communications. 1992. V.69. P. 306–316.
- [10] Самарский А.А. Гулин А.В. Численные методы: Учеб.пособие для вузов. М.:Наука, Гл.ред.физ.-мат.лит., 1989. 432 с.
- [11] Boronina M.A. Numerical experiments for solving Maxwell's equations in thin domains with a new implicit scheme // Bull. Nov. Comp. Center, Num. Anal. 2016. № 18. P. 1–8.
- [12] Вшивков В. А., Боронина М. А., Трехмерное моделирование динамики ультрарелятивистских пучков заряженных частиц: особенности вычисления начальных и граничных условий // Матем. моделирование. 2012. Т. 24. № 2. С. 67–83.

*Боронина Марина Андреевна — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института
вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;
e-mail: boronina@ssd.sccc.ru;*

*Лаговская Кира Вячеславовна — магистрант Новосибирского национального
исследовательского государственного Университета;
e-mail: klagovskaya@gmail.com.*

Дата поступления — 31 мая 2017 г.