

О задании начальных и граничных условий при трехмерном моделировании динамики пучков заряженных частиц в ультррелятивистском случае

Боронина М.А.

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН
Новосибирск, Россия

В докладе представляется вниманию модель релятивистской динамики пучков заряженных частиц в ускорителях и связанные с ней проблемы и решения. В настоящий момент особый интерес представляет получение наибольшей светимости пучка частиц с наибольшей энергией. Особенность задачи заключается в высоких значениях релятивистского фактора частиц: чем больше плотность пучка - тем выше силы отталкивания между одноименно заряженными частицами пучка, и особенно в поперечном направлении. Эти эффекты приводят к понижению плотности, изменению его формы – следовательно, понижению светимости, перераспределению полей в области, т.е. возникновению нежелательных и опасных эффектов в дорогостоящих ускорительных установках. Задача состоит в проведении математического моделирования эффектов динамики встречных пучков с целью выяснения оптимальных параметров, при которых светимость и энергия их максимальны.

В настоящее время, в соответствии с имеющимися техническими характеристиками ЭВМ (в том числе и параллельных), наиболее развитый подход к решению задач о встрече сгустков частиц с критическими параметрами является квази-трехмерным. Он основан на разделении пучков вдоль оси коллективного движения на тонкие слои частиц (“слайсы”), взаимодействие которых происходит при совпадении продольных координат, при этом частицы одного слоя через поле сил влияют на динамику частиц другого слоя. Сведение полностью трехмерной задачи к двумерной, в которой продольное движение моделируется путем перестановки слоев, затрудняет наиболее полный учет продольных эффектов, а также исследования движения пучков под углом друг к другу (~20 мрад), в то время как решая, например, полностью трехмерные уравнения Максвелла, подобные эффекты можно учесть автоматически.

В работе предложена полностью трехмерная модель, которая основана на кинетическом уравнении Власова для функции распределения позитронов $f_{e^+} = f_{e^+}(\vec{r}, \vec{p}, t)$ или электронов $f_{e^-} = f_{e^-}(\vec{r}, \vec{p}, t)$, и полностью трехмерных уравнениях Максвелла:

$$\frac{\partial f_{e^{+-}}}{\partial t} + \vec{v}_{e^{+-}} \frac{\partial f_{e^{+-}}}{\partial \vec{r}} + \vec{F}_{e^{+-}} \frac{\partial f_{e^{+-}}}{\partial \vec{p}} = 0$$

$$\begin{aligned}
rot\vec{E} &= -\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{H}}{\partial t}, \\
rot\vec{H} &= \frac{4\pi}{c}\vec{j} + \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{E}}{\partial t}, \\
div\vec{E} &= 4\pi(n_{e^-}e^- + n_{e^+}e^+), \\
div\vec{H} &= 0.
\end{aligned}$$

Сила Лоренца $\vec{F}_{e^{\pm}}$, действующая на заряженную частицу, определяется из соотношения $\vec{F}_{e^{\pm}} = q_{e^{\pm}}\left(\vec{E} + \frac{1}{c}[\vec{v}_{e^{\pm}}, \vec{H}]\right)$. Импульс частицы $\vec{p}_{e^{\pm}}$ связан со скоростью релятивистским фактором $\gamma_{e^{\pm}}$ формулой $\vec{p}_{e^{\pm}} = \gamma_{e^{\pm}}m_e\vec{v}_{e^{\pm}}$, при этом $\gamma_{e^{\pm}} = 1/\sqrt{1-v_{e^{\pm}}^2/c^2}$, где c – скорость света. Входящие в эти уравнения плотность заряда n_{e^+} , n_{e^-} , плотность тока \vec{j} определяются через моменты функции распределения частиц:

$$\begin{aligned}
n_{e^+} &= \int_V f_{e^+} dV, \\
n_{e^-} &= \int_V f_{e^-} dV, \\
\vec{j} &= \int_V (f_{e^+}\vec{v}_{e^+}e - f_{e^-}\vec{v}_{e^-}e) dV.
\end{aligned}$$

Уравнения характеристик уравнения Власова совпадают с уравнениями движения частиц:

$$\begin{aligned}
\frac{d\vec{p}_{e^{\pm}}}{dt} &= \vec{F}_{e^{\pm}}, \\
\frac{d\vec{r}_{e^{\pm}}}{dt} &= \vec{v}_{e^{\pm}}.
\end{aligned}$$

Вычисления проводятся с помощью метода частиц в ячейках на сдвинутых друг относительно друга сетках, что дает второй порядок по времени и по пространству:

$$\begin{aligned}
\frac{H^{m+\frac{1}{2}} - H^{m-\frac{1}{2}}}{\tau} &= -rot_h E^m \\
\frac{E^{m+1} - E^m}{\tau} &= j^{m+\frac{1}{2}} + rot_h H^{m+\frac{1}{2}},
\end{aligned}$$

где

$$rot_h H = \begin{bmatrix} \frac{Hz_{i,k,l-\frac{1}{2}} - Hz_{i,k-1,l-\frac{1}{2}}}{h_y} - \frac{Hy_{i,k-\frac{1}{2},l} - Hy_{i,k-\frac{1}{2},l-1}}{h_z} \\ \frac{Hx_{i-\frac{1}{2},k,l} - Hx_{i-\frac{1}{2},k,l-1}}{h_z} - \frac{Hz_{i,k,l-\frac{1}{2}} - Hz_{i-1,k,l-\frac{1}{2}}}{h_x} \\ \frac{Hy_{i,k-\frac{1}{2},l} - Hy_{i-1,k-\frac{1}{2},l}}{h_x} - \frac{Hx_{i-\frac{1}{2},k,l} - Hx_{i-\frac{1}{2},k-1,l}}{h_y} \end{bmatrix},$$

$$rot_h E = \begin{bmatrix} \frac{Ez_{i-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2},l} - Ez_{i-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2},l}}{h_y} - \frac{Ey_{i-\frac{1}{2},k,l+\frac{1}{2}} - Ey_{i-\frac{1}{2},k,l-\frac{1}{2}}}{h_z} \\ \frac{Ex_{i,k-\frac{1}{2},l+\frac{1}{2}} - Ex_{i,k-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2}}}{h_z} - \frac{Ez_{i+\frac{1}{2},k-\frac{1}{2},l} - Ez_{i-\frac{1}{2},k-\frac{1}{2},l}}{h_x} \\ \frac{Ey_{i+\frac{1}{2},k,l-\frac{1}{2}} - Ey_{i-\frac{1}{2},k,l-\frac{1}{2}}}{h_x} - \frac{Ex_{i,k+\frac{1}{2},l-\frac{1}{2}} - Ex_{i,k-\frac{1}{2},l-\frac{1}{2}}}{h_y} \end{bmatrix},$$

при этом верхний индекс обозначает слой по времени, а нижние индексы указывают на узлы пространственной сетки в направлениях x,y,z соответственно.

Импульсы вычисляются в три этапа, что позволяет реализовать со вторым порядком аппроксимации неявную схему для расчета скоростей:

$$\frac{\vec{p}^{m+\frac{1}{2}} - \vec{p}^{m-\frac{1}{2}}}{\tau} = q \left(\vec{E}^m + \left[\frac{\vec{v}^{m+\frac{1}{2}} + \vec{v}^{m-\frac{1}{2}}}{2}, \vec{H}^m \right] \right).$$

Платой за простоту автоматического учета трехмерности задачи является повышенное внимание к релятивистскому фактору, а следовательно – к начальным и граничным условиям. Для качественного описания электромагнитных полей необходимо мельчить в γ^2 раз пространственную сетку в продольном направлении и увеличивать размеры области в поперечном направлении в γ раз по сравнению с нерелятивистским случаем, что делает задачу неразрешимой даже при использовании новейших суперЭВМ. Один из вариантов решения этой задачи основан на допущении, что расчетная область расположена в ближней зоне, то есть границы ее находятся достаточно близко к пучку. В этом случае не требуется проводить расчеты в большей части расчетной области, где частицы отсутствуют. Кроме того, в этом случае можно пренебречь эффектами запаздывания, которое за такое малое время не успевает развиться. Для такой постановки задачи было исследовано несколько алгоритмов.

- наиболее очевидный способ: суммирование вкладов от отдельных частиц.
- представление пучка не в виде набора отдельных частиц, а в виде сплошной среды. В этом случае по координатам частиц вычисляется плотность пучка, и уже от нее считаются вклады в электромагнитные поля:

$$E_x(x, y, z) = \gamma \iiint_V \frac{n(x', y', z')(x-x')}{\left((x-x')^2 + (y-y')^2 + \gamma^2 (z-z')^2 \right)^{\frac{3}{2}}} dx' dy' dz'$$

$$E_z(x, y, z) = \frac{1}{\gamma^2} \iiint_V \frac{n(x', y', z')(z-z')}{\left((x-x')^2 + (y-y')^2 + \gamma^2 (z-z')^2 \right)^{\frac{3}{2}}} dx' dy' dz'.$$

- разделение на два интеграла, в первом из которых понижается порядок особенности за счет разности плотностей в числителе, а часть второго интеграла можно вычислить аналитически, переписав выражение в виде:

$$E_x(x, y, z) = \int_s \left(\frac{\gamma(z-L_2)}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + \gamma^2(z-L_2)^2}} - \frac{\gamma(z-L_1)}{\sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + \gamma^2(z-L_1)^2}} \right) \cdot \frac{\rho(x', y', z)(x-x') dx' dy'}{(x-x')^2 + (y-y')^2}.$$

- введение искусственного потенциала по формулам

$$E_x = -\frac{\partial \Phi}{\partial x},$$

$$E_y = -\frac{\partial \Phi}{\partial y},$$

$$E_z = -\frac{1}{\gamma^2} \frac{\partial \Phi}{\partial z}.$$

Значения этого потенциала во всей области рассчитываются по плотности частиц из модифицированного уравнения Пуассона с заданными граничными условиями:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + \frac{1}{\gamma^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} = -n(x, y, z)e \\ \Phi(x_0, y_0, z_0) = \gamma \iiint_{V_n} \frac{n(x, y, z)}{\left((x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + \gamma^2(z-z_0)^2 \right)^{\frac{1}{2}}} dx dy dz \end{array} \right.,$$

методом верхней релаксации, а далее дифференцированием этого потенциала вычисляется электрическое поле.

- аналогичный подход, но в этом случае граничные условия для потенциала рассчитываются также с разделением интегралов на два:

$$\Phi(x, y, z) = \gamma \int \frac{(\rho(x', y', z') - \rho(x', y', z)) dx' dy' dz'}{v \left((x-x')^2 + (y-y')^2 + \gamma^2(z-z')^2 \right)^{\frac{1}{2}}} + \int_s \rho(x', y', z) dx' dy' \cdot \ln \left(\gamma(z-z') + \sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + \gamma^2(z-z')^2} \right) \Big|_{L_1}^{L_2}.$$

- представление частиц в виде тонких игл, направленных вдоль оси движения пучка и длиной с продольный шаг, при этом каждая частица дает вклад только в узлы с координатой ближайшего узла по продольной оси, уменьшая сложность алгоритма.

Предлагаемые алгоритмы были запрограммированы на языке Fortran77. В качестве тестовой формы пучка взят цилиндр, движущийся вдоль оси z . Считается, что импульсы частиц также направлены вдоль оси z . В этом случае поперечное поле не должно изменяться с изменением релятивистского фактора, и нет зависимости от z в центральной его области. Численные эксперименты показали, что поперечное поле, вычисленное с помощью разделения на интегралы и изменения формы модельных частиц, достаточно хорошо совпадают с аналитическим решением. В данном случае наихудшим является метод суммирования по частицам, приводящий к колебаниям в решении, уровень которых уменьшается при увеличении расстояния до пучка, а также вследствие имеющейся сходимости метода с увеличением количества частиц пучка. Еще более плохим методом оказался метод суммирования по узлам плотности – полученные таким методом поля сильно завышены, как на границе, так и в центре области. Тем не менее, имеется сходимость при увеличении количества узлов сетки в продольном направлении – так, например,

измельчив продольный шаг в 10 раз для данных параметров можно получить уже видимое совпадение этих графиков.

Для тестирования динамики частиц навстречу цилиндру с гауссовым распределением плотности в поперечном направлении запускается веер частиц, по изменениям параметров которых можно судить о тех полях, которые на них действовали при их пролете через цилиндр.

Результаты замеров демонстрируют меньшее время работы всех методов с использованием модифицированного уравнения Пуассона. Это уравнение решалось методом верхней релаксации, и, конечно, является не самым эффективным из существующих методов, однако, очень простым в реализации. Т.к. начальные условия рассчитываются всего лишь один раз, то выбор метода решения модифицированного уравнения не является первоочередной задачей. При этом решение модифицированного уравнения Пуассона для метода с использованием суммирования по плотности занимает в полтора раза больше времени, чем аналогичного метода и граничных условий, полученных через суммирование частиц и разделение интегралов, это является следствием завышенных значений граничных условия для потенциала.

Вычисление начальных условий с использованием разделения на интегралы занимает больше времени, чем аналогичные методы суммирования по узлам плотности – это связано с затратами на подсчет дополнительного двумерного интеграла. Решение двумерного уравнения, которое получается исключением производной по продольному направлению из модифицированного уравнения Пуассона, приближает решение данной задачу к решению, получаемому слайсовыми методами. При решении методом релаксации исключение продольной производной не дает особого ускорения по сравнению с полным уравнением вследствие слабой зависимости от z , однако все равно учитываются малые продольные значения, которые могут играть существенную роль при резкой деформации пучка или его разрушении. Так как начальные условия считаются всего один раз, то из соображений точности можно использовать и полное уравнение.

С учетом точности получаемого решения самыми оптимальными решениями являются метод, основанный на модифицированном уравнении Пуассона с выделением особенности в подынтегральном выражении для потенциала, а также метод вычисления с помощью модельных частиц в форме игл. Однако использование последнего не позволяет получать продольную компоненту поля. В то же время первый метод дает дополнительное поле по краям пучка в продольном направлении, что не соответствует релятивистской динамике пучка.

Таким образом, для задания начальных и граничных условий в задаче моделирования трехмерной динамики сгустков ультрарелятивистских заряженных частиц созданы и исследованы несколько методов. Проведены сравнения со стандартными методами вычисления граничных и начальных условий. Результаты продемонстрировали целесообразность использования новых методов, которые также могут найти свое применение в других задачах физики релятивистской плазмы.