

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«НОВОСИБИРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ» (НОВОСИБИРСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ, НГУ)

Факультет механико-математический
Кафедра вычислительных систем

Направление подготовки прикладная математика и информатика

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА

Воропаева Екатерина Сергеевна

**Исследование алгоритмов движения заряженных частиц
в электромагнитном поле**

«К защите допущена»

Глинский Б. М.,
д.т.н., г.н.с. ИВМиМГ СО РАН,
зав.кафедрой вычислительных систем НГУ,
профессор

...../.....

(фамилия , И., О.) / (подпись, МП)

«.....».....20...г.

Научный руководитель

Вшивков В. А., д.ф.-м.н.,
профессор, г.н.с. ИВМиМГ
СО РАН

...../.....

(фамилия , И., О.) / (подпись,
МП)

«.....».....20...г.

Дата защиты: «.....».....20...г.

Новосибирск, 2021

Реферат

Исследование алгоритмов движения заряженных частиц в электромагнитном поле

Объём: 44 страница текста, 14 иллюстраций, 7 таблиц, список литературы включает 15 литературных источников.

Ключевые слова: движение заряженной частицы, модификация метода Бориса, разностная схема с перешагиванием, сдвинутые сетки, интерполяция.

В настоящей работе предложена новая модификация метода Бориса, основанная на идее использования точного решения дифференциального уравнения для скорости заряженной частицы на шаге по времени. Схема предлагается в двух вариантах: для плоского и объёмного случая. Предложены упрощенные формулы метода для случая, когда индукция магнитного поля близка к нулю.

Выполнен сравнительный анализ метода Бориса и трех его модификаций с новой схемой в двумерной и трёхмерной постановках. Показано, что новая модификация обладает наименьшей погрешностью.

Отдельно проводился анализ случаев дискретно заданных электрического и магнитного полей. Для интерполяции полей в каждый момент времени в текущую точку траектории движения частицы использовалась 2d и 3d-линейная интерполяция. Фиксировалось время работы метода вычисления траектории и скорости частицы и время выполнения интерполяции. По итогам многочисленных запусков одной программы проведён статистический анализ быстродействия модификаций метода Бориса с учетом и без учета интерполяции и показано, что в трёхмерном случае время выполнения интерполяции превышает время работы метода в десятки раз, в то время как выбор более быстрой модификации метода Бориса может помочь выиграть не более 6% процессорного времени. Таким образом, при выборе модификации для конкретной задачи в первую очередь следует обращать внимание на её точность, так как более простая и быстрая схема может не дать выигрыша по времени.

Содержание

1. Введение	4
2. Постановка задачи	6
3. Численное решение	8
3.1. Метод Бориса	8
3.2. Модификации метода Бориса	10
3.2.1. Модификация A	10
3.2.2. Модификация B	11
3.2.3. Модификация C	12
3.3. Тестовая задача	12
4. Разработка новой схемы расчёта движения заряженной частицы....	16
4.1. Двумерный случай	16
4.2. Сравнение модификаций A и C	22
4.3. Вывод схемы D для трёхмерного случая.....	24
4.4. Трёхмерная тестовая задача.....	29
5. Сравнение модификаций метода Бориса по быстродействию	34
5.1. Описание проблемы.....	34
5.2. Применение интерполяции	35
5.3. Сравнение времени работы методов в случае использования интерполяции.....	38
6. Заключение	41
Список литературы	43

1. Введение

Для численного решения многих физических задач, в том числе задач физики плазмы, широко используется метод частиц в ячейках, разработанный Ф.Х. Харлоу [1]. В методе частиц плазма представляется как достаточно большой набор модельных заряженных частиц, которые движутся по законам классической механики в заданном электромагнитном поле. Электромагнитное поле определяется по уравнениям Максвелла с учётом зарядов и токов в качестве источников. Их плотности вычисляются как функции координат и скоростей частиц с помощью какого-либо достаточно точного алгоритма. Моделирование поведения плазмы требует проведения больших серий расчётов и обработки огромных массивов данных, поэтому важным критерием выбора алгоритма для вычисления движения частицы является простота алгоритма [2].

Наиболее часто используемый способ решения задач определения траектории и скорости частицы – метод Бориса [3]. Свойства этого метода подробно описаны в литературе (см., например, [2, 4]): он относится к схемам типа «чехарда», обладает 2 порядком точности, одинаково хорошо работает на малых и больших временах развития процесса и достаточно экономичен. В 2013 году появилась статья [5], в которой теоретически доказаны устойчивость метода Бориса и свойство сохранения энергии с точки зрения методов решения обыкновенных дифференциальных уравнений в отсутствие электрического поля.

Анализ литературы показал, что в последнее время возрос интерес к методу Бориса и его модификациям, которые могли бы упростить, уточнить либо ускорить вычисление траектории и скорости заряженной частицы. Наиболее известные и широко используемые модификации были рассмотрены и исследованы в работах [2–4]. В статье [6] предлагается трёхступенчатый интегратор, обладающий той же точностью, что и метод Бориса. Интегратор из n шагов одинаковой с методом Бориса точности рассмотрен в работе [7].

Статья [8] 2019 года предлагает алгоритм, использующий двухшаговую процедуру Бориса n раз, он обладает меньшей ошибкой, чем метод Бориса. Работа [9] рассматривает модификацию, основанную на точном решении уравнений движения частицы с силой Лоренца, и точно разрешает поворот частицы под воздействием магнитного поля. В статье [10] рассматриваются неявные методы для релятивистских задач, сохраняющие энергию, в том числе метод, основанный на аппроксимации направляющего центра. Алгоритм, предложенный в работе [11], обладает высоким порядком точности и основан на комбинации метода Бориса и других известных алгоритмов и схем высоких порядков. В работе [12] исследуются методы высоких (3-го и 4-го) порядков, позволяющие использовать больший шаг по времени и уменьшить время работы программы для решения релятивистских задач.

В настоящей работе метод Бориса и его наиболее часто используемые модификации сравниваются по точности и эффективности вычислений на классических тестовых задачах в двумерной и трёхмерной постановках. В каждом случае рассматривались варианты аналитически и дискретно заданных электрического и магнитного полей. Для дискретно заданных полей использовалась 2d- или 3d-линейная интерполяция на сдвинутых сетках. Разработана новая модификация метода Бориса, позволяющая точнее вычислять траекторию и скорость заряженной частицы без значительного увеличения сложности расчётов.

2. Постановка задачи

Рассматривается движение одной заряженной частицы массой m с зарядом q в электромагнитном поле [13,14]. Состояние частицы определяется координатами в пространстве $\vec{x} = (x, y, z)$ и вектором скорости в данной точке пространства в конкретный момент времени $\vec{v} = (u, v, w)$ в декартовой системе координат. Движение частицы осуществляется под влиянием внешнего поля, в данном случае – электромагнитного поля, которое описывает сила Лоренца:

$$\vec{F} = q\vec{E} + \frac{q}{c}\vec{v} \times \vec{B}, \quad (2.1)$$

где \vec{E} – вектор напряжённости электрического поля, \vec{B} – индукция магнитного поля, c – скорость света. Известно, что под воздействием только магнитного поля частица вращается в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, по окружности ларморовского радиуса $r = \frac{m}{qB}v_{\perp}$, где v_{\perp} – перпендикулярная магнитному полю компонента скорости. Под воздействием только электрического поля происходит дрейф частицы в направлении, электрического поля \vec{E} . Скорость дрейфа частицы в скрещенных полях определяется соотношением:

$$\vec{v}_D = \frac{c\vec{E} \times \vec{B}}{B^2}. \quad (2.2)$$

В рамках метода частиц движение заряженной частицы удовлетворяет законам классической механики, поэтому его можно описать при $t \in [t_0, T]$ следующей задачей Коши:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\vec{x}(t)}{dt} = \vec{v}(\vec{x}, t), \end{array} \right. \quad (2.3a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} m\gamma(\vec{v}) \frac{d\vec{v}(\vec{x}, t)}{dt} = q \left(\vec{E}(\vec{x}, t) + \frac{\vec{v} \times \vec{B}(\vec{x}, t)}{c} \right), \end{array} \right. \quad (2.3b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{x}(t_0) = \vec{x}^0, \end{array} \right. \quad (2.3c)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{v}(t_0) = \vec{v}^0, \end{array} \right. \quad (2.3d)$$

состоящей из классического определения скорости и II закона Ньютона в СГС,

где $\gamma(\vec{v}) = 1/\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}$. В данной работе рассматривается нерелятивистское движение частицы, когда можно положить $\gamma = 1$.

В общем случае задачу (2.3) невозможно решить аналитически, из-за чего возникает необходимость в использовании методов приближённого решения задачи.

3. Численные методы решения задачи

3.1. Метод Бориса

В исследовании плазмы для вычисления траектории и скорости частицы обычно используется метод Бориса [3]. Основная идея метода состоит в замене системы ОДУ (2.3) системой конечно-разностных уравнений и её решении с помощью расщепления по физическим процессам.

Введём расчётную сетку $\{t_k = t_0 + kh_t, k = 1, \dots, n_t\}$. Приближённые значения координаты частицы $\vec{x}(t_k) \approx \vec{x}_k$, векторов скорости $\vec{v}(t_k) \approx \vec{v}_k$, магнитной индукции $\vec{B}(\vec{x}_k, t_k) = \vec{B}_k$ и электрической напряжённости $\vec{E}(\vec{x}_k, t_k) = \vec{E}_k$ вычисляются последовательно в узлах сетки. Для повышения точности используется сдвинутая на полшага сетка, то есть вводится приближённый вектор скорости $\vec{v}(t_{k+1/2}) \approx \vec{v}_{k+1/2}$, который вычисляется в узлах сетки $\left\{t_{k+\frac{1}{2}} = t_0 + \left(k + \frac{1}{2}\right)h_t, k = 1, \dots, n_t\right\}$.

Тогда в рамках метода Бориса задача сводится к решению следующей системы конечно-разностных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\vec{x}_{k+1} - \vec{x}_k}{\Delta t} = \vec{v}_{k+1/2}, & (3.1a) \\ \frac{\vec{v}_{k+1/2} - \vec{v}_{k-1/2}}{\Delta t} = \frac{q}{m} \left(\vec{E}_k + \frac{(\vec{v}_{k+1/2} + \vec{v}_{k-1/2}) \times \vec{B}_k}{2c} \right), & (3.1b) \\ \vec{x}_0 = \vec{x}^0, & (3.1c) \\ \vec{v}_0 = \vec{v}^0. & (3.1d) \end{cases}$$

Таким образом, в схеме Бориса положение частицы в следующий момент времени явно вычисляется из скорости, значение которой определяется в промежуточный момент времени, что гарантирует второй порядок точности вычисления траектории.

Для решения системы (3.1) необходимо задать дополнительное начальное условие для скорости. Вводится значение $\vec{v}_{-\frac{1}{2}}$ в фиктивный момент времени $t_{-1/2}$, и в уравнении (3.1b) в момент времени t_0 производная скорости заменяется односторонней конечной разностью:

$$\frac{\vec{v}_0 - \vec{v}_{-\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} \approx \left. \frac{d\vec{v}}{dt} \right|_{t=t_0} = \frac{q}{m} \vec{E}(t_0) + \frac{q}{mc} [\vec{v}(t_0) \times \vec{B}(t_0)]. \quad (3.2)$$

Тогда искомое дополнительное условие имеет вид:

$$\vec{v}_{-\frac{1}{2}} = \vec{v}_0 - \frac{\Delta t q}{2m} \left(\vec{E}(t_0) + \frac{1}{c} [\vec{v}_0 \times \vec{B}(t_0)] \right). \quad (3.3)$$

На следующем этапе влияние силы Лоренца (2.1) расщепляется на вклад электрического поля на полушаге (3.4), (3.6) и вклад магнитного поля (3.5):

$$\vec{v}^- = \vec{v}_{k-1/2} + \frac{q}{m} \vec{E}_k \frac{h_t}{2}, \quad (3.4)$$

$$\frac{\vec{v}^+ - \vec{v}^-}{\Delta t} = \frac{q}{2mc} (\vec{v}^+ + \vec{v}^-) \times \vec{B}_k, \quad (3.5)$$

$$\vec{v}_{k+1/2} = \vec{v}^+ + \frac{q}{m} \vec{E}_k \frac{h_t}{2}. \quad (3.6)$$

Векторное уравнение (3.5) отражает поворот вектора \vec{v}^- до \vec{v}^+ за шаг по времени под влиянием вектора \vec{B} . На рисунке 3.1 изображен геометрический процесс преобразования вектора скорости на шаге по времени.

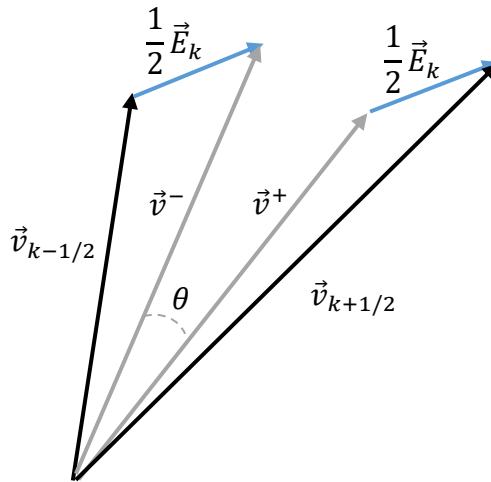


Рисунок 3.1 – Преобразование скорости методом Бориса

Решение уравнения (3.5) сводится к простейшей процедуре решения СЛАУ размерности 3x3 методом Гаусса. Однако в ходе запуска программы решение СЛАУ может вызываться тысячи раз и суммарно занимать много времени.

3.2. Модификации метода Бориса

Модификации метода Бориса нацелены на то, чтобы упростить вычисления или уменьшить погрешность численного решения задачи (2.3). В качестве основной идеи используется замена СЛАУ (3.5) на более простые вычисления или переход от трёхступенчатого интегратора к менее громоздким методам.

3.2.1. Модификация А

На идее отказа от решения СЛАУ основана модификация, предложенная Борисом в 1970 году [3], будем обращаться к ней как к модификации или схеме А. Предлагается ввести в метод Бориса дополнительные векторы \vec{p} и \vec{v}' , благодаря которым можно найти \vec{v}^+ явным образом:

$$\vec{p} = \operatorname{tg}\left(\frac{\theta}{2}\right) \vec{b}, \quad (3.7)$$

$$\vec{b} = \frac{\vec{B}_k}{|\vec{B}_k|}, \quad (3.8)$$

$$\vec{v}' = \vec{v}^- + \vec{v}^- \times \vec{p}, \quad (3.9)$$

$$\vec{v}^+ = \vec{v}^- + \frac{2}{1 + p^2} (\vec{v}' \times \vec{p}), \quad (3.10)$$

где $\theta = \frac{qh_t}{m} |\vec{B}_k|$ – угол поворота вектора скорости за шаг по времени. Такой выбор вектора \vec{p} позволяет точно разрешать поворот вектора скорости под воздействием магнитного поля на угол θ в схеме.

3.2.2. Модификация В

Модификацией В мы будем называть предложенный в работе Бэдсела и Ленгдона [4] алгоритм, который отличается от модификации А способом представления вектора \vec{p} , что даёт приближённое вычисление поворота на угол θ :

$$\vec{p} = \frac{\theta}{2} \vec{b}. \quad (3.11)$$

Такое представление вектора \vec{p} позволяет сэкономить время выполнения программы, но может привести к увеличению погрешности в сравнении с модификацией А. Разницу в интерпретации модификациями А и В воздействия магнитного поля на вектор скорости иллюстрирует рис. 3.2.

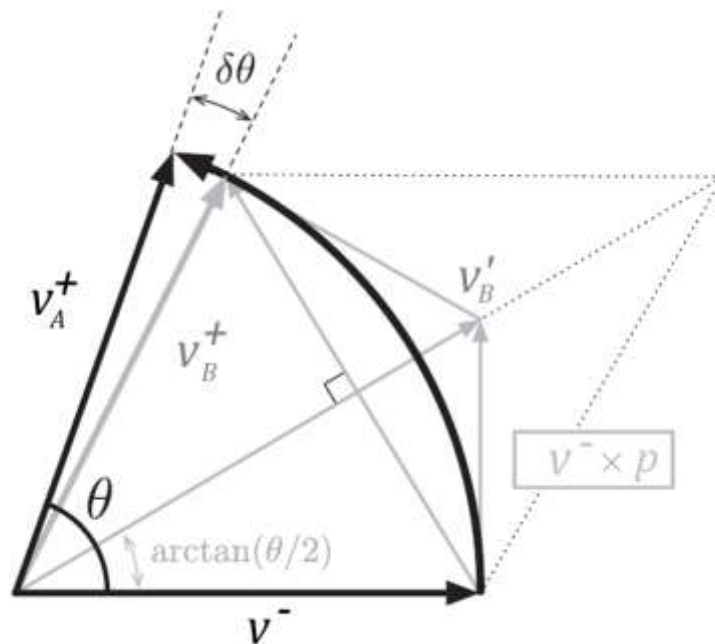


Рисунок 3.2 – Схематичное изображение второго этапа модификаций метода

Бориса

На рис. 3.2 чёрными линиями изображён поворот на угол θ вектора \vec{v}^- до \vec{v}_A^+ в модификации А без промежуточных шагов. Серыми линиями изображён процесс преобразования с помощью модификации В вектора \vec{v}^- до \vec{v}_B^+ . Разница между получившимися векторами \vec{v}_A^+ и \vec{v}_B^+ можно охарактеризовать величиной $\delta\theta$ – разницей между углами поворота вектора скорости в приведённых модификациях.

3.2.3. Модификация С

В работе [4] предлагается альтернативная модификация метода Бориса, позволяющая точно определять поворот вектора скорости. Для этого вводится параллельная вектору магнитной индукции компонента вектора \vec{v}^- :

$$\vec{v}_{||}^- = (\vec{v}^- \cdot \vec{b})\vec{b}. \quad (3.12)$$

Тогда

$$\vec{v}^+ = \vec{v}_{||}^- + (\vec{v}^- - \vec{v}_{||}^-)\cos\theta + (\vec{v}^- \times \vec{b})\sin\theta. \quad (3.13)$$

Модификацию метода Бориса, состоящую из уравнений (3.4), (3.12), (3.13), (3.6), будем называть модификацией С. Как и модификация А, она позволяет точно повернуть вектор скорости за шаг по времени и может увеличить время работы программы за счёт наличия тригонометрических функций.

3.3. Тестовая задача

Для проверки алгоритмов, как и в работе [4], использовалась классическая тестовая задача, в которой магнитное поле \vec{B} и потенциальное электрическое поле \vec{E} зависят от положения частицы в пространстве в пространстве и вычисляются по формулам:

$$\vec{B} = (x^2 + y^2)^{1/2}\vec{e}_z, \quad (3.14)$$

$$\varphi = 0.01(x^2 + y^2)^{-1/2}, \quad (3.15)$$

$$\vec{E} = -\nabla\varphi = 0.01 \left(\frac{x}{(x^2 + y^2)^{\frac{3}{2}}}, \frac{y}{(x^2 + y^2)^{\frac{3}{2}}}, 0 \right), \quad (3.16)$$

где φ – потенциал электрического поля. Пусть $m=1$, $q=1$, $c=1$, начальные данные равны $\vec{x}_0 = (0.9, 0, 0)$, $\vec{v}_0 = (0.1, 0, 0)$. В тестовой задаче все величины приведены в безразмерном виде.

Теоретический анализ полей показывает, что частица будет двигаться в плоскости $z=0$. Вращение под воздействием магнитного поля будет происходить с дрейфом (2.2) вдоль изолиний электрического поля, что соответствует траектории на рисунке 3.3, полученной с помощью метода Бориса:

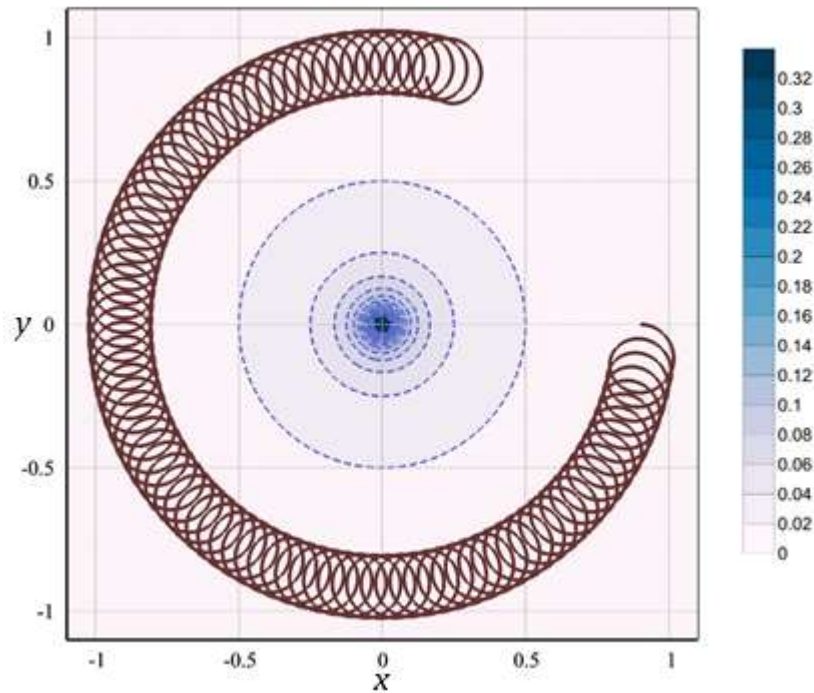


Рисунок 3.3 – Траектория заряженной частицы в электромагнитном поле на промежутке времени $[0, 600]$ секунд, $h_t = 0.05$

На рисунке 3.3. пунктирной линией изображены изолинии потенциала электрического поля $\varphi = const$, вдоль которых происходит вращение

частицы. С увеличением времени траектория замкнётся и частица будет продолжать движение без изменения радиусов вращения.

Особенностью задачи (2.3), (3.14)–(3.16) является сохранение кинетической энергии. В работе [5] было показано, что не все методы могут точно отобразить это явление. Например, при использовании метода Рунге-Кутты 4 порядка происходит накопление ошибки на каждом шаге по времени, в том числе из-за диссипативных эффектов. Метод Бориса и его известные ранее модификации не обладают таким недостатком и сохраняют энергию. Зависимость полученной кинетической энергии от времени представлена на рисунке 3.4.

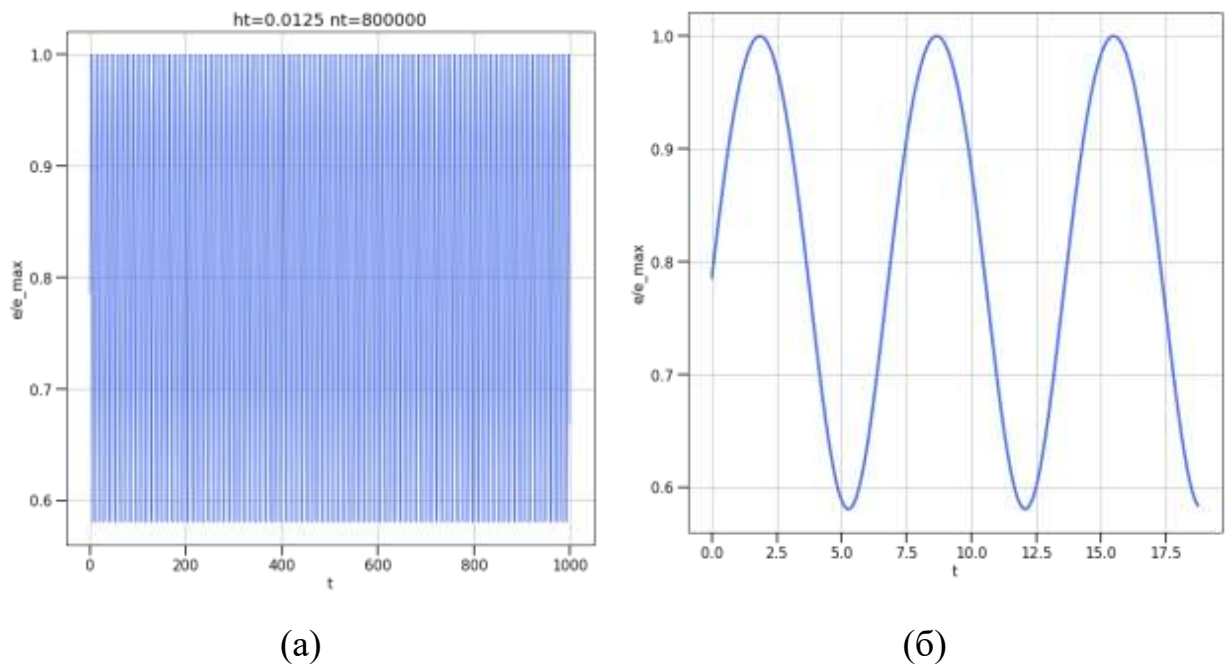


Рисунок 3.4 – Поведение нормированной кинетической энергии в зависимости от времени в тестовой задаче, решённой методом Бориса,

$$h_t = 0.0125$$

На рисунке 3.4(а) видно, что поведение энергии остается неизменным на большом промежутке времени до 1000 единиц, что соответствует 800000 шагов по времени. Рисунок 3.4(б) дает более детальное, на интервале времени $[0, 18]$, представление о колебательном характере поведения кинетической

энергии, причем период и амплитуда колебаний являются постоянными. Один период колебаний кинетической энергии соответствует продвижению частицы по одной окружности ларморовского радиуса.

4. Разработка новой схемы расчёта движения заряженной частицы

4.1. Двумерный случай

Предлагается новая модификация метода Бориса. Введём расчётную сетку $\{t_k = t_0 + kh_t, k = 1, \dots, n_t\}$ и приближённые значения координаты частицы $\vec{x}(t_k) \approx \vec{x}_k$, скорости $\vec{v}(t_k) \approx \vec{v}_k$, векторов магнитной индукции $\vec{B}(\vec{x}_k, t_k) = \vec{B}_k$ и электрической напряжённости $\vec{E}(\vec{x}_k, t_k) = \vec{E}_k$. Система уравнений движения заряженной частицы последовательно рассматривается на каждом шаге по времени $t \in [0, h_t]$:

$$\begin{cases} \frac{d\vec{x}(t)}{dt} = \vec{v}(\vec{x}, t), \end{cases} \quad (4.1a)$$

$$\begin{cases} m \frac{d\vec{v}(\vec{x}, t)}{dt} = q \left(\vec{E} + \frac{\vec{v} \times \vec{B}}{c} \right), \end{cases} \quad (4.1b)$$

$$\begin{cases} \vec{x}(0) = \vec{x}_k, \end{cases} \quad (4.1c)$$

$$\begin{cases} \vec{v}(0) = \vec{v}_{k-1/2}, \end{cases} \quad (4.1d)$$

где $t_{k-\frac{1}{2}} = t_0 + \left(k - \frac{1}{2}\right) h_t$ и учитывается предположение, что на таком временном промежутке электромагнитное поле постоянно

$$\vec{E}(\vec{x}, t) = \vec{E}(\vec{x}^k, t_k) = \vec{E}, \quad (4.2)$$

$$\vec{B}(\vec{x}, t) = \vec{B}(\vec{x}^k, t_k) = \vec{B}. \quad (4.3)$$

В таком случае возможно найти аналитическое решение системы ОДУ (4.1).

Рассматривалось аналитическое решение уравнения (4.1b). Для начала был рассмотрен упрощённый вариант задачи – двумерный, когда $\vec{B} = (0, 0, B_z)$, $\vec{E} = (E_x, E_y, 0)$. Тогда уравнение (4.1b) выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} u' = \frac{q}{m} \left(E_x + \frac{B_z}{c} v \right), \\ v' = \frac{q}{m} \left(E_y - \frac{B_z}{c} u \right), \end{cases} \quad (4.4)$$

где $\vec{v} = (u, v, 0)$. В качестве начальных данных используется значение скорости $\vec{v}_{k-1/2}$, вычисленное на предыдущем шаге сетки.

Собственные числа системы:

$$\lambda = \pm \frac{iqB_z}{mc} = \pm i\theta. \quad (4.5)$$

Тогда общее решение однородной системы будем искать в виде:

$$\vec{v}_1 = c_1 \begin{pmatrix} \sin(\theta t) \\ \cos(\theta t) \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} \cos(\theta t) \\ -\sin(\theta t) \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

Частное решение будем искать в виде:

$$\vec{v}_2(t) = \begin{pmatrix} a_1 t + b_1 \\ a_2 t + b_2 \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

После подстановки в систему (4.4) найдём неизвестные коэффициенты:

$$\begin{cases} a_1 = 0, \\ a_2 = 0, \\ b_1 = \frac{E_y}{B_z} c, \\ b_2 = -\frac{E_x}{B_z} c. \end{cases} \quad (4.8)$$

Тогда общее решение системы (4.4) предстаёт в виде:

$$\vec{v} = \vec{v}_1 + \vec{v}_2 = \begin{pmatrix} \frac{E_y}{B_z} c \\ -\frac{E_x}{B_z} c \end{pmatrix} + c_1 \begin{pmatrix} \sin(\theta t) \\ \cos(\theta t) \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} \cos(\theta t) \\ -\sin(\theta t) \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

Учитывая начальное условие, можно найти неизвестные c_1 и c_2 , тогда решение системы выглядит следующий образом:

$$\begin{cases} u(t) = \frac{E_y}{B_z} c + \left(v_{k-\frac{1}{2}} + \frac{E_x}{B_z} c \right) \sin(\theta t) + \left(u_{k-\frac{1}{2}} - \frac{E_y}{B_z} c \right) \cos(\theta t), \\ v(t) = \frac{-E_x}{B_z} c + \left(v_{k-\frac{1}{2}} + \frac{E_x}{B_z} c \right) \cos(\theta t) - \left(u_{k-\frac{1}{2}} - \frac{E_y}{B_z} c \right) \sin(\theta t). \end{cases} \quad (4.10)$$

Решение системы в момент времени $t_{k+1/2}$ примем за искомый вектор $\vec{v}_{k+1/2}$, который можно записать следующим образом:

$$\begin{cases} u_{k+\frac{1}{2}} = S_y c + \left(v_{k-\frac{1}{2}} + S_x c \right) \sin(\theta h_t) + \left(u_{k-\frac{1}{2}} - S_y c \right) \cos(\theta h_t), \\ v_{k+\frac{1}{2}} = -S_x c + \left(v_{k-\frac{1}{2}} + S_x c \right) \cos(\theta h_t) - \left(u_{k-\frac{1}{2}} - S_y c \right) \sin(\theta h_t), \end{cases} \quad (4.11)$$

где $S_x = \frac{E_x}{B_z}$, $S_y = \frac{E_y}{B_z}$. Здесь вектор $\vec{S} = (S_y, -S_x)$ – скорость дрейфа (2.2) частицы в скрещенных полях.

После нахождения вектора скорости в промежуточный момент времени $t_{k+\frac{1}{2}}$ с помощью разностного уравнения из метода Бориса можно явным образом найти координаты частицы:

$$\frac{\vec{x}_{k+1} - \vec{x}_k}{h_t} = \vec{v}_{k+1/2}. \quad (4.12)$$

Таким образом, на каждом шаге по времени вычисляются значения электромагнитного поля в текущей \vec{x}_k точке пространства, затем вычисляется новый вектор скорости по формулам (4.11), по которому находится положение частицы \vec{x}_{k+1} из соотношения (4.12).

Свойства нового алгоритма исследовались и сравнивались с другими модификациями на тестовой задаче из раздела 3.3. Полученная траектория, изображённая на рисунке 4.1, визуально совпадает с полученной с помощью метода Бориса.

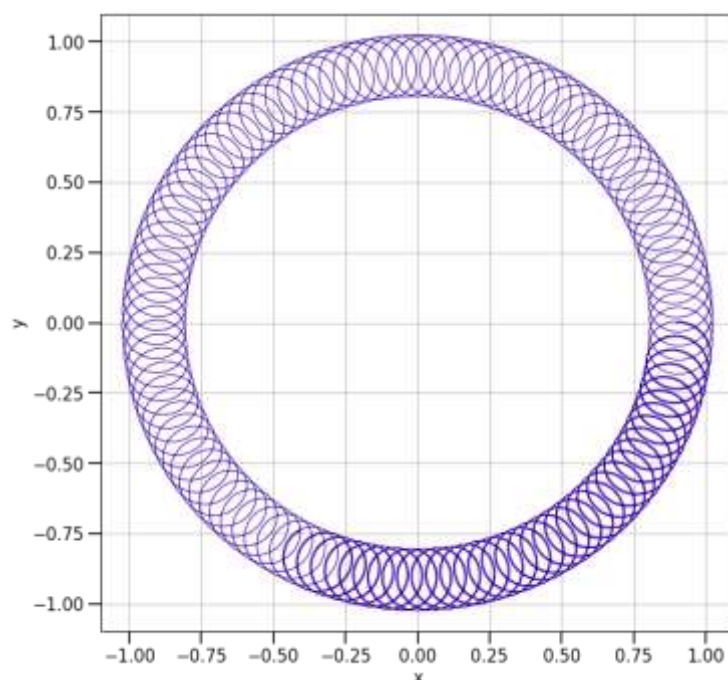


Рис. 4.1 – Траектория заряженной частицы в тестовой задаче, решённой с помощью модификации D, $h_t = 0.0125, n_t = 8 \cdot 10^5$

Погрешности методов, представленные в таблицах 4.1 и 4.2, вычислялись по правилу Рунге на последовательности сеток с шагом по времени $h_t = \left\{ h_n = \frac{h_0}{2^n} \mid n = 0, \dots, 5, h_0 = 0.1 \right\}$.

Таблица 4.1

Погрешность траектории частицы, вычисленная методом Бориса и его модификациями

h_t	Метод Бориса	Мод. А	Мод. В*	Мод. С	Мод. D
h_0	$5.652 \cdot 10^{-3}$	$1.576 \cdot 10^{-3}$	$5.652 \cdot 10^{-3}$	$1.576 \cdot 10^{-3}$	$1.147 \cdot 10^{-3}$
h_1	$1.413 \cdot 10^{-3}$	$3.978 \cdot 10^{-4}$	$1.413 \cdot 10^{-3}$	$3.978 \cdot 10^{-4}$	$2.903 \cdot 10^{-4}$
h_2	$3.532 \cdot 10^{-4}$	$9.991 \cdot 10^{-5}$	$3.532 \cdot 10^{-4}$	$9.991 \cdot 10^{-5}$	$7.304 \cdot 10^{-5}$
h_3	$8.8304 \cdot 10^{-5}$	$2.503 \cdot 10^{-5}$	$8.8304 \cdot 10^{-5}$	$2.503 \cdot 10^{-5}$	$1.832 \cdot 10^{-5}$
h_4	$2.208 \cdot 10^{-5}$	$6.267 \cdot 10^{-6}$	$2.208 \cdot 10^{-6}$	$6.267 \cdot 10^{-6}$	$4.587 \cdot 10^{-6}$
h_5	$5.519 \cdot 10^{-6}$	$1.568 \cdot 10^{-6}$	$5.519 \cdot 10^{-6}$	$1.568 \cdot 10^{-6}$	$1.148 \cdot 10^{-6}$

Таблица 4.2

Погрешность скорости частицы, вычисленная методом Бориса и его модификациями

h_t	Метод Бориса	Мод. А	Мод. В*	Мод. С	Мод. D
h_0	$7.465 \cdot 10^{-3}$	$2.629 \cdot 10^{-3}$	$7.465 \cdot 10^{-3}$	$2.629 \cdot 10^{-3}$	$2.634 \cdot 10^{-3}$
h_1	$2.514 \cdot 10^{-3}$	$1.319 \cdot 10^{-3}$	$2.514 \cdot 10^{-3}$	$1.319 \cdot 10^{-3}$	$1.32 \cdot 10^{-3}$
h_2	$9.52 \cdot 10^{-4}$	$6.604 \cdot 10^{-4}$	$9.52 \cdot 10^{-4}$	$6.604 \cdot 10^{-4}$	$6.608 \cdot 10^{-4}$
h_3	$3.997 \cdot 10^{-4}$	$3.305 \cdot 10^{-4}$	$3.997 \cdot 10^{-4}$	$3.305 \cdot 10^{-4}$	$3.305 \cdot 10^{-4}$
h_4	$1.808 \cdot 10^{-4}$	$1.605 \cdot 10^{-4}$	$1.808 \cdot 10^{-4}$	$1.605 \cdot 10^{-4}$	$1.605 \cdot 10^{-4}$
h_5	$8.563 \cdot 10^{-5}$	$8.267 \cdot 10^{-5}$	$8.563 \cdot 10^{-5}$	$8.267 \cdot 10^{-5}$	$8.267 \cdot 10^{-5}$

* Различие в погрешностях метода Бориса и модификации В наблюдается в 6-м знаке после запятой.

Из таблицы 4.1 видно, что погрешность вычисления траектории каждым методом убывает как Ch^2 , где:

- 1) $C=0.565$ – для метода Бориса и модификации В,
- 2) $C=0.160$ – для модификаций А и С,
- 3) $C=0.117$ – для модификации D.

Это наглядно изображено на рисунке 4.2.

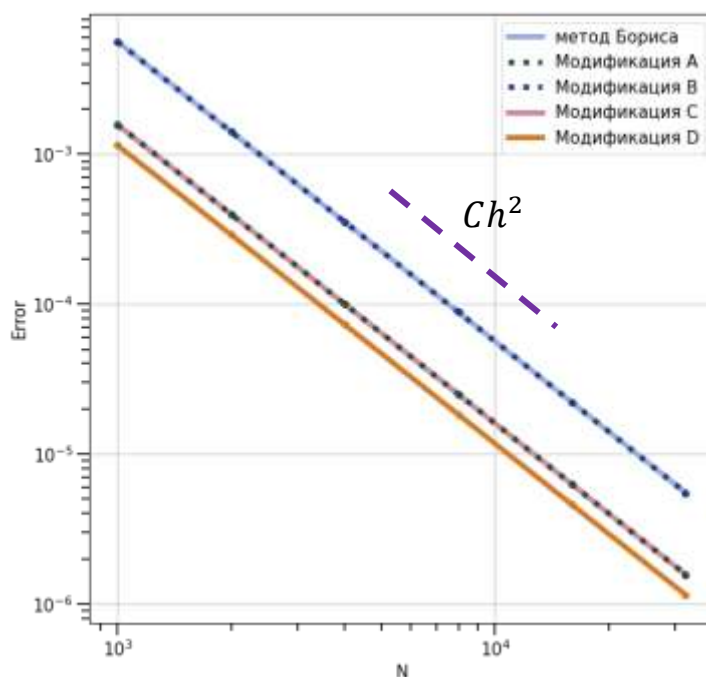
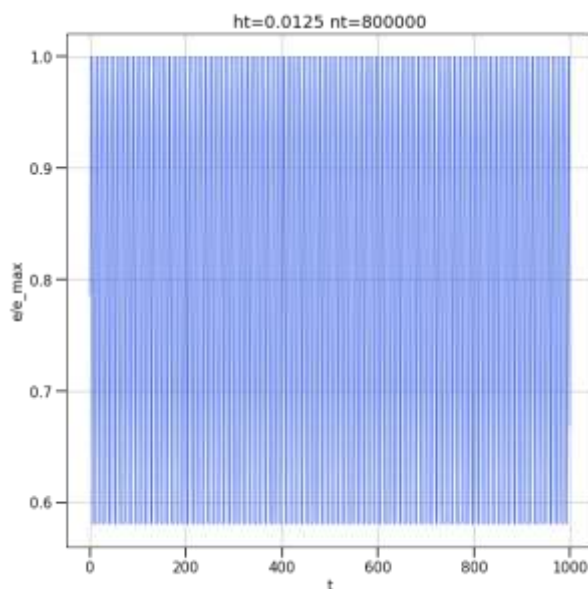


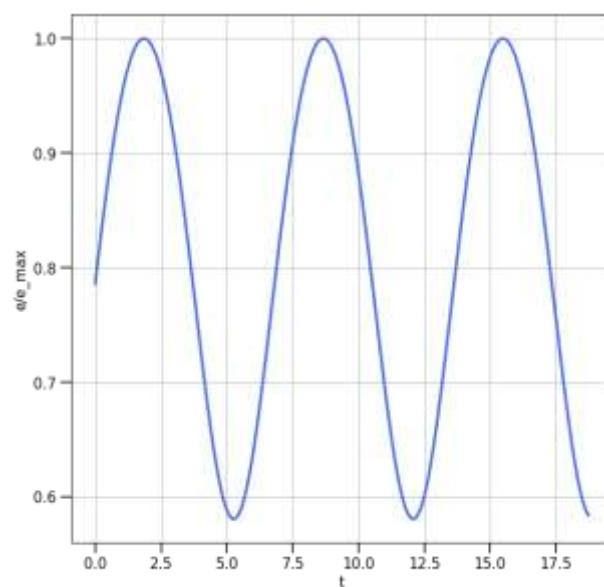
Рисунок 4.2 – Погрешности вычисления траектории частицы

Из рисунка и таблиц видно, что наименьшая погрешность определения траектории получена с применением новой схемы D – она в 4.8 раз меньше погрешности, которую даёт схема Бориса. Схема D даёт также хорошую погрешность вычисления скорости движения частицы, уступая только модификации A на величину порядка 10^{-5} . В то же время различие в погрешностях метода Бориса и модификации В наблюдается лишь в 6-й значащей цифре. Интересно отметить также, что модификации A и C, предложенные в работах [3] и [9] соответственно, дают абсолютно одинаковые погрешности (ниже причины совпадения будут проанализированы более подробно).

В разделе 3 было показано, что схема Бориса и её модификации A и B точно отображают явление сохранения энергии в данной задаче. Расчёты показали, что при решении задачи 1 с помощью схемы D энергия сохраняется, что видно на рисунке 4.3.



(a)



(б)

Рисунок 4.3 – Поведение нормированной кинетической энергии в зависимости от времени в тестовой задаче при использовании схемы D,

$$h_t = 0.0125$$

Дополнительное сравнение кинетической энергии, вычисленной разными алгоритмами, показывает различие порядка 10^{-6} , а также минимумы нормированной энергии отличаются на величину порядка 10^{-5} .

4.2. Сравнение модификаций А и С

Сравнение погрешностей разных модификаций показало совпадение погрешностей, полученных с помощью модификаций А и С. Рассмотрим эти схемы более подробно.

Для простоты рассмотрим их в двумерном случае. Тогда $\vec{E}_k = (E_x^k, E_y^k, 0)$, $\vec{B}_k = (0, 0, B_z^k)$, и схема А примет вид:

$$\begin{cases} u^- = u_{k-1/2} + \frac{q}{m} E_x^k \frac{h_t}{2}, \\ v^- = v_{k-1/2} + \frac{q}{m} E_y^k \frac{h_t}{2}, \end{cases} \quad (4.13)$$

$$\begin{cases} u'_A = u^- + p \cdot v^-, \\ v'_A = v^- - p \cdot u^-, \end{cases} \quad (4.14)$$

$$\begin{cases} u_A^+ = u^- + \frac{2p}{1+p^2} \cdot v'_A, \\ v_A^+ = v^- - \frac{2p}{1+p^2} \cdot u'_A. \end{cases} \quad (4.15)$$

$$p = tg\left(\frac{1}{2}\theta\right) = tg\left(\frac{h_t B_z^k}{2}\right). \quad (4.16)$$

Уравнения (4.13) также фигурируют в схеме С, поэтому она будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{cases} u_B^+ = u^- \cos(\theta) + v^- \sin(\theta), \\ v_B^+ = v^- \cos(\theta) - u^- \sin(\theta), \end{cases} \quad (4.17)$$

$$\theta = h_t B_z^k, \quad (4.18)$$

где \vec{v}^- вычисляется по формулам (4.13). Систему (4.15) можно упростить с помощью известного соотношения

$$\frac{2p}{1+p^2} = \frac{2 \, tg\left(\frac{\theta}{2}\right)}{1 + tg\left(\frac{\theta}{2}\right)^2} = \sin(\theta),$$

тогда получим систему:

$$\begin{cases} u_A^+ = u^- + \sin(\theta) \cdot u'_A, \\ v_A^+ = v^- - \sin(\theta) \cdot v'_B. \end{cases} \quad (4.19)$$

Подставив в (4.19) выражения (4.14), получим:

$$\begin{cases} u_A^+ = \left(1 - 2\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right)u^- + \sin(\theta) \cdot v^-, \\ v_A^+ = \left(1 - 2\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right)v^- - \sin(\theta) \cdot u^-. \end{cases} \quad (4.20)$$

Так как $\cos(\theta) = 1 - 2\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$, то система (4.20) совпадает с системой (4.17).

Поэтому в дальнейших сравнениях схем модификация С опускается.

4.3. Вывод схемы D для трёхмерного случая

В трёхмерном случае $\vec{B} = (B_x, B_y, B_z)$, $\vec{E} = (E_x, E_y, E_z)$ исходная система ОДУ для нахождения компонент вектора скорости $\vec{v} = (u, v, w)$ заряженной частицы выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = \frac{q}{m}E_x + \frac{q}{mc}B_zv - \frac{q}{mc}B_yw, \\ \frac{dv}{dt} = \frac{q}{m}E_y + \frac{q}{mc}B_xw - \frac{q}{mc}B_zu, \\ \frac{dw}{dt} = \frac{q}{m}E_z + \frac{q}{mc}B_yu - \frac{q}{mc}B_xv. \end{cases} \quad (4.21)$$

Аналогично двумерному случаю, необходимо найти точное решение системы ОДУ на шаге по времени $t \in [0, h_t]$. В качестве начального условия использовалось значение скорости на предыдущем дробном шаге $\vec{v}_{k-1/2}$.

Сначала было получено точное решение для случая, когда $\vec{B} = (0, 0, B_z)$, $\vec{E} = (E_x, E_y, E_z)$. Тогда система (4.21) имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = \frac{q}{m}E_x + \theta v, \\ \frac{dv}{dt} = \frac{q}{m}E_y - \theta u, \\ \frac{dw}{dt} = \frac{q}{m}E_z, \end{cases} \quad (4.22)$$

где $\theta = qB/(mc)$. Уравнение для v_z не связано с остальными уравнениями и имеет решение:

$$w(t) = w(0) + \frac{q}{m} E_z t = w_{k-1/2} + \frac{q}{m} E_z t. \quad (4.23)$$

Решение оставшихся двух уравнений искали в виде:

$$\begin{pmatrix} u(t) \\ v(t) \end{pmatrix} = e^{\lambda t} \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \end{pmatrix}. \quad (4.24)$$

Собственные значения системы - $\lambda_{1,2} = \pm i\theta$. Тогда общее решение однородной системы имеет вид:

$$\begin{cases} u(t) = C_1 \cos \theta t + C_2 \sin \theta t, \\ v(t) = C_2 \cos \theta t - C_1 \sin \theta t. \end{cases} \quad (4.25)$$

Для нахождения решения неоднородной системы уравнений (4.22) будем считать, что коэффициенты C_1, C_2 зависят от t : $C_1(t), C_2(t)$. Подставив в систему (4.22), получим

$$\begin{cases} C_1'(t) \cos \theta t + C_2'(t) \sin \theta t = \frac{q}{m} E_x, \\ C_2'(t) \cos \theta t - C_1'(t) \sin \theta t = \frac{q}{m} E_y. \end{cases} \quad (4.26)$$

Выразив $C_1'(t)$ и $C_2'(t)$, проинтегрируем коэффициенты:

$$\begin{cases} C_1(t) = \frac{q}{m} \frac{E_x}{\theta} \sin \theta t + \frac{q}{m} \frac{E_y}{\theta} \cos \theta t + C_3, \\ C_2(t) = -\frac{q}{m} \frac{E_x}{\theta} \cos \theta t + \frac{q}{m} \frac{E_y}{\theta} \sin \theta t + C_4. \end{cases} \quad (4.27)$$

Подставив полученные решения в систему (4.22), найдём

$$\begin{cases} u(t) = \frac{q}{m} \frac{E_y}{\theta} + C_3 \cos \theta t + C_4 \sin \theta t, \\ v(t) = -\frac{q}{m} \frac{E_x}{\theta} + C_4 \cos \theta t - C_3 \sin \theta t. \end{cases} \quad (4.28)$$

Константы C_3 и C_4 определяются из начальных условий при $t_0 = 0$:

$$\begin{cases} u_{k-1/2} = \frac{q}{m} \frac{E_y}{\theta} + C_3, \\ v_{k-1/2} = -\frac{q}{m} \frac{E_x}{\theta} + C_4. \end{cases} \quad (4.29)$$

Таким образом, решение системы (4.22) будет иметь вид:

$$\begin{cases} u(t) = c \frac{E_y}{B_z} + \left(u_{k-1/2} - c \frac{E_y}{B_z} \right) \cos \theta t + \left(v_{k-1/2} + c \frac{E_x}{B_z} \right) \sin \theta t, \\ v(t) = -c \frac{E_x}{B_z} + \left(v_{k-1/2} + c \frac{E_x}{B_z} \right) \cos \theta t - \left(u_{k-1/2} - c \frac{E_y}{B_z} \right) \sin \theta t \\ w(t) = w_{k-1/2} + \frac{q}{m} E_z t. \end{cases} \quad (4.30)$$

Важно отметить следующее. В формулах для компоненты скорости u и v присутствует деление на величину B_z . Если B_z мало или равно нулю, то формулы должны быть преобразованы. Для этого тригонометрические функции разлагаются в ряд Тейлора, и в формулах разложения оставляется первый ненулевой член. Формулы принимают вид

$$\begin{cases} u(t) = u_{k-1/2} \cos \theta t + \frac{q}{m} E_x t + v_{k-1/2} \sin \theta t + \frac{q}{2m} E_y \theta t^2, \\ v(t) = v_{k-1/2} \cos \theta t + \frac{q}{m} E_y t - u_{k-1/2} \sin \theta t - \frac{q}{2m} E_x \theta t^2. \end{cases} \quad (4.31)$$

Для нахождения точного решения системы (4.22) использовались формулы (4.30) и разложение вектора скорости на компоненты, параллельные и

перпендикулярные вектору магнитной индукции. Напомним, что изменение скорости вдоль магнитного поля происходит только за счёт электрического поля, а поперёк магнитного поля происходит дрейфовое движение в скрещенных полях и вращение в плоскости, перпендикулярной магнитному полю. Продольные компоненты векторов скорости и напряжённости электрического поля вычисляются по формулам:

$$\vec{v}_{||} = (\vec{v} \cdot \vec{b})\vec{b}, \quad (4.32)$$

$$\vec{E}_{||} = (\vec{E} \cdot \vec{b})\vec{b} \quad (4.33)$$

$$\vec{b} = \frac{\vec{B}_k}{|\vec{B}_k|}. \quad (4.34)$$

Продольная скорость изменяется по формуле:

$$\vec{v}_{||}(t) = \vec{v}_{||}(0) + \vec{E}_{||}t. \quad (4.35)$$

Поперечные компоненты предстают в виде:

$$\vec{v}_{\perp} = \vec{v} - \vec{v}_{||}, \quad (4.36)$$

$$\vec{E}_{\perp} = \vec{E} - \vec{E}_{||}. \quad (4.37)$$

С помощью перехода к произвольным координатам в системе (4.30) можно найти решение для перпендикулярной компоненты скорости:

$$\begin{cases} u_{\perp}(t) = E'_y b_z - E'_z b_y + [u_{\perp}(0) - E'_y b_z + E'_z b_y] \cos(\theta t) + \\ \quad + [v_{\perp}(0) b_z - w_{\perp}(0) b_y + E'_x] \sin(\theta t), \\ v_{\perp}(t) = E'_z b_x - E'_x b_z + [v_{\perp}(0) - E'_z b_x + E'_x b_z] \cos(\theta t) + \\ \quad + [w_{\perp}(0) b_x - u_{\perp}(0) b_z + E'_y] \sin(\theta t), \\ w_{\perp}(t) = E'_x b_y - E'_y b_x + [w_{\perp}(0) - E'_x b_y + E'_y b_x] \cos(\theta t) + \\ \quad + [u_{\perp}(0) b_y - v_{\perp}(0) b_x + E'_z] \sin(\theta t), \end{cases} \quad (4.38)$$

где $\vec{E}' = \frac{c\vec{E}_\perp}{B}$. С добавлением продольной компоненты скорости, а также с учётом того, что решение рассматривается на шаге по времени и в качестве начального условия выступает значение скорости на шаге $t_{k-1/2}$, дискретный аналог формул (4.38) выглядит следующим образом:

$$\left\{ \begin{array}{l} u_{k+\frac{1}{2}} = E'_y b_z - E'_z b_y + \left[u_{k-\frac{1}{2}}^\perp - E'_y b_z + E'_z b_y \right] \cos(\theta h_t) + \\ \quad + \left[v_{k-\frac{1}{2}}^\perp b_z - w_{k-\frac{1}{2}}^\perp b_y + E'_x \right] \sin(\theta h_t) + u_\parallel, \\ v_{k+\frac{1}{2}} = E'_z b_x - E'_x b_z + \left[v_{k-\frac{1}{2}}^\perp - E'_z b_x + E'_x b_z \right] \cos(\theta h_t) + \\ \quad + \left[w_{k-\frac{1}{2}}^\perp b_x - u_{k-\frac{1}{2}}^\perp b_z + E'_y \right] \sin(\theta h_t) + v_\parallel, \\ w_{k+\frac{1}{2}} = E'_x b_y - E'_y b_x + \left[w_{k-1/2}^\perp - E'_x b_y + E'_y b_x \right] \cos(\theta h_t) + \\ \quad + \left[u_{k-\frac{1}{2}}^\perp b_y - v_{k-\frac{1}{2}}^\perp b_x + E'_z \right] \sin(\theta h_t) + w_\parallel. \end{array} \right. \quad (4.39)$$

Возможен случай, когда магнитное поле в процессе решения задачи станет нулевым или очень маленьким. Тогда формулы (4.39) являются непригодными к использованию. В этом случае следует использовать разностный аналог уравнений (4.31) для общего трёхмерного случая:

$$\left\{ \begin{array}{l} u_{k+\frac{1}{2}} = u_{k-\frac{1}{2}}^{\perp} \cos(\theta h_t) + \frac{E_x^{\perp} q h_t}{m} + (E_y^{\perp} b_z - E_z^{\perp} b_y) \frac{q}{2m} \theta h_t^2 + \\ \quad + \left[v_{k-\frac{1}{2}}^{\perp} b_z - w_{k-\frac{1}{2}}^{\perp} b_y \right] \sin(\theta h_t) + u_{\parallel}, \\ v_{k+\frac{1}{2}} = v_{k-\frac{1}{2}}^{\perp} \cos(\theta h_t) + \frac{E_y^{\perp} q h_t}{m} + (E_z^{\perp} b_x - E_x^{\perp} b_z) \frac{q}{2m} \theta h_t^2 + \\ \quad + \left[w_{k-\frac{1}{2}}^{\perp} b_x - u_{k-\frac{1}{2}}^{\perp} b_z \right] \sin(\theta h_t) + v_{\parallel}, \\ w_{k+\frac{1}{2}} = w_{k-\frac{1}{2}}^{\perp} \cos(\theta h_t) + \frac{E_z^{\perp} q h_t}{m} + (E_x^{\perp} b_y - E_y^{\perp} b_x) \frac{q}{2m} \theta h_t^2 + \\ \quad + \left[u_{k-\frac{1}{2}}^{\perp} b_y - v_{k-\frac{1}{2}}^{\perp} b_x \right] \sin(\theta h_t) + w_{\parallel}. \end{array} \right. \quad (4.40)$$

В качестве критерия для замены основных формул на формулы (4.40) можно использовать условие $\frac{|\vec{E}|}{|\vec{B}|} \text{с} > 10^6$.

4.4. Трёхмерная тестовая задача

В качестве задачи для тестирования схемы D в общем виде модернизировалась тестовая задача из раздела 3.3.

Пусть в некоторой системе координат $\{x', y', z'\}$ с базисными векторами $\{\vec{e}'_x, \vec{e}'_y, \vec{e}'_z\}$ и с началом координат в точке O вектор магнитной индукции и напряжённости электрического поля совпадают с заданными в тестовой задаче:

$$\vec{B}'(\vec{x}') = \vec{B}'(x', y', z') = (x'^2 + y'^2)^{\frac{1}{2}} \vec{e}'_z, \quad (4.41)$$

$$\vec{E}'(\vec{x}') = \vec{E}'(x', y', z') = -\nabla\varphi = 0.01 \left(\frac{x'}{(x'^2 + y'^2)^{\frac{3}{2}}}, \frac{y'}{(x'^2 + y'^2)^{\frac{3}{2}}}, 0 \right), \quad (4.42)$$

$$\varphi(\vec{x}') = 0.01(x'^2 + y'^2)^{-1/2}. \quad (4.43)$$

Начальные данные: $\vec{x}'_0 = (0.9, 0, 0)$, $\vec{v}'_0 = (0.1, 0, 0)$.

Текущая система координат $\{x, y, z\}$ получается из $\{x', y', z'\}$ поворотом вокруг оси Ox на 30° , который характеризует матрица перехода:

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}. \quad (4.44)$$

Связь между векторами скорости и положения заряженной частицы в пространстве в рассматриваемых системах координат:

$$\vec{x} = M\vec{x}', \quad (4.45)$$

$$\vec{v} = M\vec{v}'. \quad (4.46)$$

Тогда зависимость электромагнитного поля от координат в текущей системе координат определяется следующим образом:

$$\vec{B}(\vec{x}) = M\vec{B}'(\vec{x}') = M\vec{B}'(M^{-1}\vec{x}), \quad (4.47)$$

$$\vec{E}(\vec{x}) = M\vec{E}'(\vec{x}') = M\vec{E}'(M^{-1}\vec{x}). \quad (4.48)$$

Таким образом, сформулирована постановка трёхмерной задачи (2.3) с электромагнитным полем, задаваемым формулами (4.41)–(4.43), (4.47), (4.48), $m=q=c=1$. Её решение можно сравнить с решением плоской задачи путём поворота уже известных результатов вокруг оси Ox на 30° . На рисунке 4.4 представлена траектория частицы в получившемся электромагнитном поле.

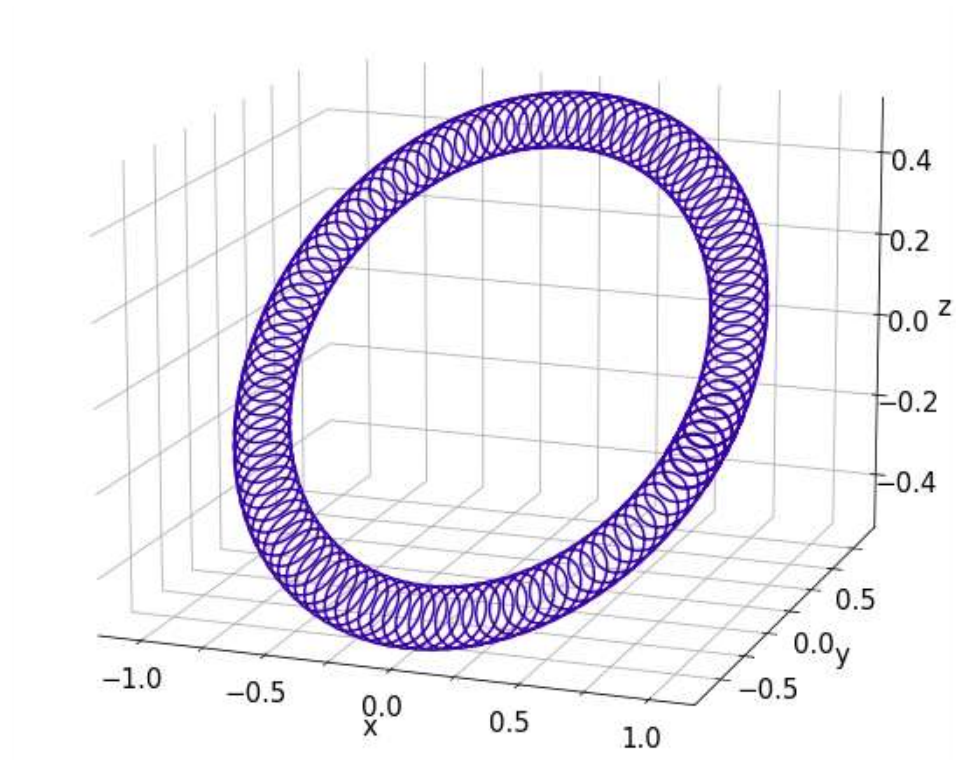
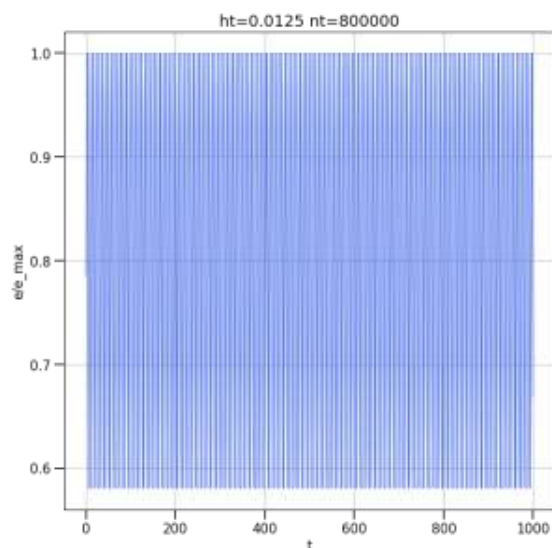


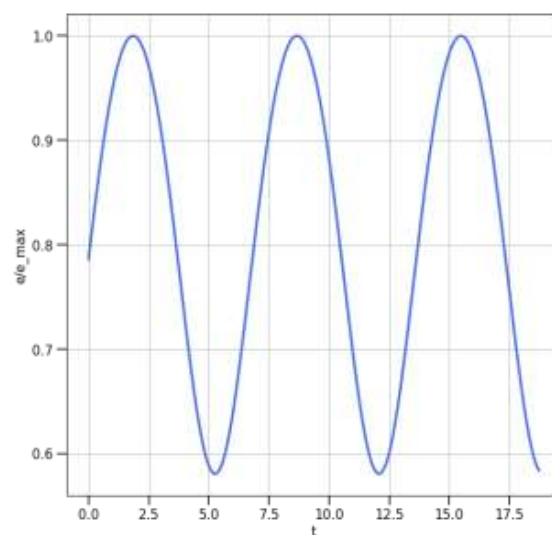
Рисунок 4.4 – Траектория частицы в электромагнитном поле,
модификация D, $h_t = 0.0125, n_t = 8 \cdot 10^5$

Из рисунка видно, что полученная траектория визуально напоминает траекторию плоской задачи в другой повёрнутой системе координат.

Численный анализ показал, что трёхмерный вариант задачи также обладает свойством сохранения кинетической энергии, что демонстрируют все четыре рассматриваемые алгоритма.



(а)



(б)

Рисунок 4.5 – Поведение нормированной кинетической энергии в зависимости от времени в трёхмерной тестовой задаче

В таблицах 4.3 и 4.4 погрешность трёхмерной схемы D, которая вычислялась по правилу Рунге на последовательности сеток с шагом по времени $h_t = \left\{ h_n = \frac{h_0}{2^n} \mid n = 0, \dots, 5, h_0 = 0.1 \right\}$, сравнивается с погрешностями метода Бориса и модификаций А, В.

Таблица 4.3

Погрешность траектории заряженной частицы в электромагнитном поле, заданном трёхмерной тестовой задачей.

h_t	Метод Бориса	А	В	D
h_0	$5.652 \cdot 10^{-3}$	$1.576 \cdot 10^{-3}$	$5.652 \cdot 10^{-3}$	$1.147 \cdot 10^{-3}$
h_1	$1.413 \cdot 10^{-3}$	$3.978 \cdot 10^{-4}$	$1.413 \cdot 10^{-3}$	$2.903 \cdot 10^{-4}$
h_2	$3.532 \cdot 10^{-4}$	$9.991 \cdot 10^{-5}$	$3.532 \cdot 10^{-4}$	$7.304 \cdot 10^{-5}$
h_3	$8.8304 \cdot 10^{-5}$	$2.503 \cdot 10^{-5}$	$8.8304 \cdot 10^{-5}$	$1.832 \cdot 10^{-5}$
h_4	$2.208 \cdot 10^{-5}$	$6.267 \cdot 10^{-6}$	$2.208 \cdot 10^{-5}$	$4.587 \cdot 10^{-6}$
h_5	$5.519 \cdot 10^{-6}$	$1.568 \cdot 10^{-6}$	$5.519 \cdot 10^{-6}$	$1.148 \cdot 10^{-6}$

Таблица 4.4

**Погрешность скорости заряженной частицы в электромагнитном поле,
заданном трёхмерной тестовой задачей.**

h_t	Метод Бориса	Мод. А	Мод. В	Мод. D
h_0	$7.257 \cdot 10^{-3}$	$2.629 \cdot 10^{-3}$	$7.257 \cdot 10^{-3}$	$2.634 \cdot 10^{-3}$
h_1	$2.449 \cdot 10^{-3}$	$1.319 \cdot 10^{-3}$	$2.449 \cdot 10^{-3}$	$1.32 \cdot 10^{-3}$
h_2	$9.295 \cdot 10^{-4}$	$6.604 \cdot 10^{-4}$	$9.295 \cdot 10^{-4}$	$6.608 \cdot 10^{-4}$
h_3	$3.909 \cdot 10^{-4}$	$3.305 \cdot 10^{-4}$	$3.909 \cdot 10^{-4}$	$3.305 \cdot 10^{-4}$
h_4	$1.7703 \cdot 10^{-4}$	$1.653 \cdot 10^{-4}$	$1.7703 \cdot 10^{-4}$	$1.605 \cdot 10^{-4}$
h_5	$8.4101 \cdot 10^{-5}$	$8.267 \cdot 10^{-5}$	$8.4101 \cdot 10^{-5}$	$8.267 \cdot 10^{-5}$

Выводы, сделанные в разделе 3.1 для двумерного аналога метода, справедливы и для трёхмерной схемы, что видно на рисунке 4.6.

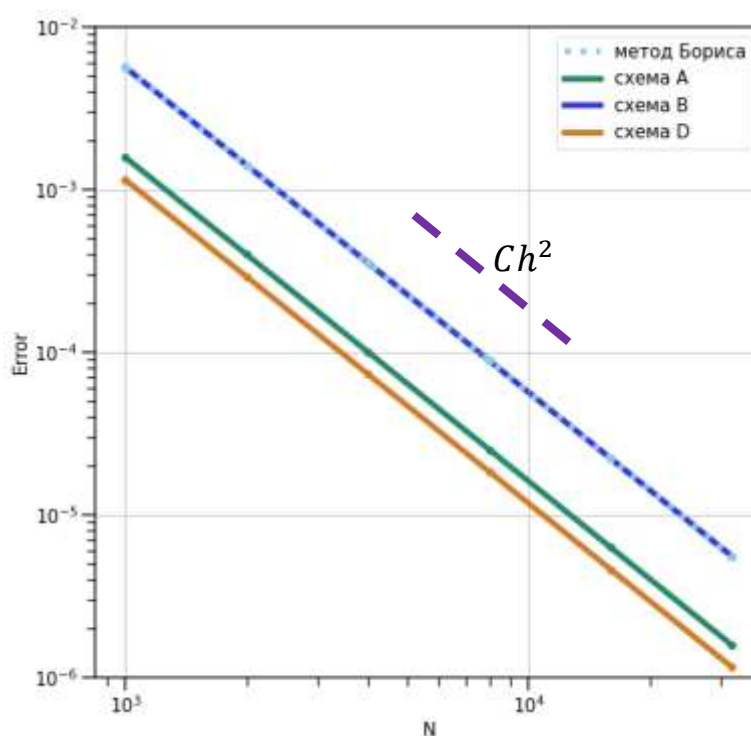


Рисунок 4.6 – Погрешности траектории частицы в трёхмерном случае

Из таблицы и рисунка видно, что сохраняется второй порядок точности для всех методов.

5. Сравнение модификаций метода Бориса по быстродействию

5.1. Описание проблемы

Ранее в разделе 3 было показано, что рассматриваемые методы вычисления траектории заряженной частицы отличаются по лежащим в их основе гипотезам и точности вычислений. Также они отличаются сложностью и количеством арифметических операций, что влияет на скорость работы программного кода. Кроме того, временные затраты на вычисление траекторий и скоростей частицы могут различаться от запуска к запуску программы.

Поэтому, чтобы провести сравнение модификаций метода Бориса по скорости работы, было выполнено 100 запусков программы тестовой задачи в обеих постановках с использованием каждого метода и фиксировалось время работы метода отдельно от остального кода за $n_t = 8 \cdot 10^7$ шагов по времени величиной $h_t = 0.0125$. Расчёты проводились на процессоре Intel Core i7-8550U в Visual Studio 2019, код был написан на языке Fortran. На рисунке 5.1 изображено распределение процессорного времени, затраченное на работу каждого метода в трёхмерном случае.

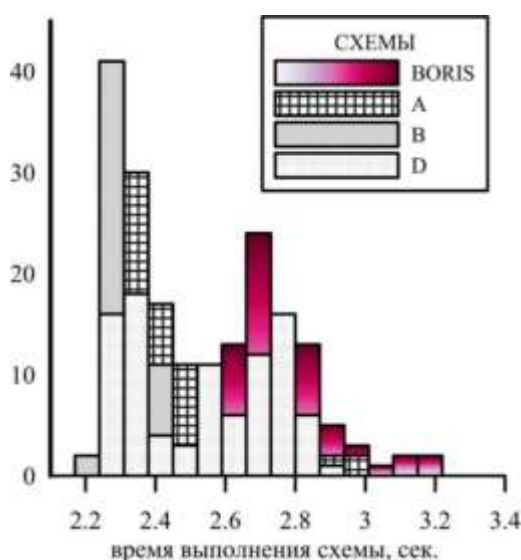


Рисунок 5.1 – Распределение времени выполнения метода Бориса и его модификаций

Из рисунка видно, что полученные статистические распределения времени работы модификаций метода Бориса далеки от нормального, а наиболее близким к нему оказывается распределение времени, затраченного на метод Бориса. Поэтому в качестве сравнительной характеристики будет использоваться медианное время, указанное в таблице 5.1.

Таблица 5.1

Медианные значения времени работы модификаций метода Бориса в 2d- и 3d-мерной постановках

	Метод Бориса	Схема А	Схема В	Схема D
Плоская задача	2.013	2.127	2.070	2.108
Трёхмерная задача	2.708	2.432	2.324	2.577

Таким образом, времена, затраченные на метод Бориса, модификации А, В, D, соотносятся как:

- $1 : 1.057 : 1.028 : 1.047$ соответственно в двумерном случае,
- $1.165 : 1.046 : 1 : 1.108$ соответственно в трёхмерном случае.

Из таблицы видно, что в двумерном случае разница в скорости работы методов остаётся в пределах 6%. В то же время в трёхмерном случае метод Бориса работает медленнее модификации В на 16%, а присутствие в модификации А тригонометрической функции замедляет метод лишь на 4%. В обоих случаях схема D не даёт сильного выигрыша по времени в сравнении с остальными алгоритмами, но и не оказывается самой медленной.

5.2. Применение интерполяции

В реальных задачах редко встречаются аналитически заданные электрические и магнитные поля. Обычно они представляют собой сеточные функции, поэтому для определения полей в текущей точке пространства необходимо использовать интерполяцию.

Рассматривалось применение линейной интерполяции в двумерной и трёхмерной постановках тестовой задачи. В электродинамике принято использовать сдвинутые относительно друг друга сетки при интерполировании электромагнитных полей, что позволяет аппроксимировать уравнения Максвелла со вторым порядком на минимальном шаблоне. Воспользуемся этим подходом.

Введём две пространственные сетки, сдвинутые друг относительно друга на половину шага по каждому направлению: $\{x_i, y_j, z_m\}$ и $\{x_{i-1/2}, y_{j-1/2}, z_{m-1/2}\}$. Здесь узлы задаются формулами

$$x_i = x_0 + ih_x, i = 0, \dots N_x, \quad (5.1)$$

$$y_j = y_0 + jh_y, j = 0, \dots N_y, \quad (5.2)$$

$$z_m = z_0 + mh_z, m = 0, \dots N_z, \quad (5.3)$$

$$x_{i-1/2} = x_0 + \left(i - \frac{1}{2}\right) h_x, i = 0, \dots N_x, \quad (5.4)$$

$$y_{j-1/2} = y_0 + \left(j - \frac{1}{2}\right) h_y, j = 0, \dots N_y, \quad (5.5)$$

$$z_{m-1/2} = z_0 + \left(m - \frac{1}{2}\right) h_z, m = 0, \dots N_z. \quad (5.6)$$

Тогда в общем случае сеточные функции – компоненты электромагнитного поля – задаются следующим образом:

- $B_x^{i-\frac{1}{2}, j, m}, B_y^{i, j-\frac{1}{2}, m}, B_z^{i, j, m-\frac{1}{2}}$ – магнитное поле,
- $E_x^{i, j-\frac{1}{2}, m-\frac{1}{2}}, E_y^{i-\frac{1}{2}, j, m-\frac{1}{2}}, E_z^{i-\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, m}$ – электрическое поле,

где индексы показывают, в какой точке сетки задана величина. Из обозначений видно, что значения компонент магнитных полей задаются на рёбрах ячейки-куба, а значения компонент электрического поля – в центрах граней ячейки-куба. Расположение заданных компонент полей в пространственной ячейке изображено на рисунке 5.2.

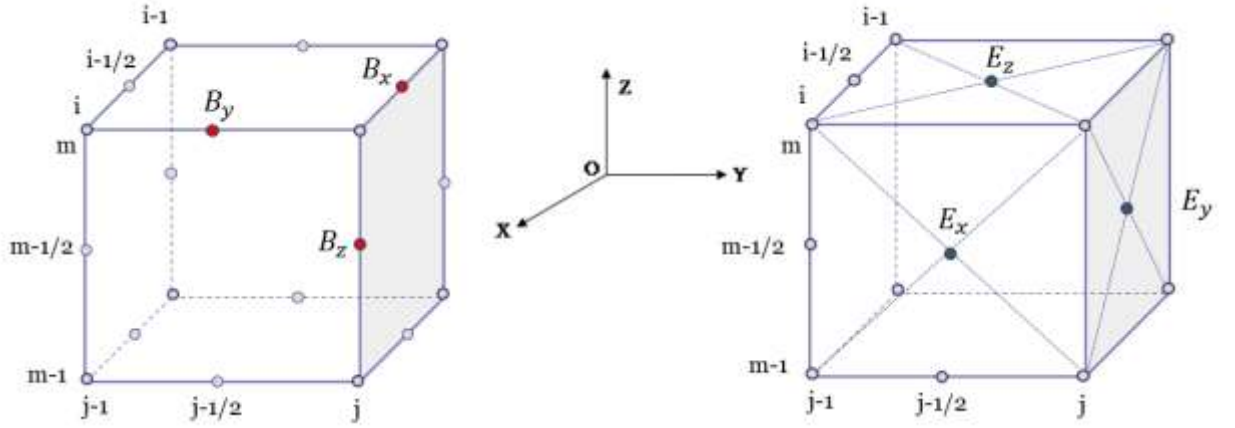


Рисунок 5.2 – Схема расположения узлов в пространственной ячейке

Пусть текущая точка $\vec{x}^0 = (x^0, y^0, z^0)$ попала в ячейку сетки компоненты B_x магнитного поля $\left\{ \{x, y, z\} \mid x \in \left[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}} \right], y \in [y_j, y_{j+1}], z \in [z_m, z_{m+1}] \right\}$, тогда приближённое значение компоненты B_x можно вычислить по следующей формуле:

$$\begin{aligned}
 B_x(\vec{x}^0) = d & \left(B_x^{i-\frac{1}{2}, j, m} \left(x_{i+\frac{1}{2}} - x^0 \right) (y_{j+1} - y^0) (z_{m+1} - z^0) \right. \\
 & + B_x^{i+\frac{1}{2}, j, m} \left(x^0 - x_{i-\frac{1}{2}} \right) (y_{j+1} - y^0) (z_{m+1} - z^0) \\
 & + B_x^{i-\frac{1}{2}, j+1, m} \left(x_{i+\frac{1}{2}} - x^0 \right) (y^0 - y_j) (z_{m+1} - z^0) \\
 & + B_x^{i+\frac{1}{2}, j+1, m} \left(x^0 - x_{i-\frac{1}{2}} \right) (y^0 - y_j) (z_{m+1} - z^0) \\
 & + B_x^{i-\frac{1}{2}, j, m+1} \left(x_{i+\frac{1}{2}} - x^0 \right) (y_{j+1} - y^0) (z^0 - z_m) \\
 & + B_x^{i+\frac{1}{2}, j, m+1} \left(x^0 - x_{i-\frac{1}{2}} \right) (y_{j+1} - y^0) (z^0 - z_m) \\
 & + B_x^{i-\frac{1}{2}, j+1, m+1} \left(x_{i+\frac{1}{2}} - x^0 \right) (y^0 - y_j) (z^0 - z_m) \\
 & \left. + B_x^{i+\frac{1}{2}, j+1, m+1} \left(x^0 - x_{i-\frac{1}{2}} \right) (y^0 - y_j) (z^0 - z_m) \right), \tag{5.7}
 \end{aligned}$$

где $d = 1/(h_x h_y h_z)$. Аналогичные формулы используются для интерполяции остальных компонент электрического и магнитного полей.

5.3. Сравнение времени работы методов в случае использования интерполяции

Основное последствие использования интерполяции – увеличение количества арифметических операций, а значит и увеличение времени работы программы. Для изучения влияния интерполяции на скорость работы программы использовалась тестовая задача из разделов 3 и 4. Область интерполяции – квадрат или куб со стороной 2.2 и центром в начале координат. Дополнительно вычислялись 2 величины:

- T1 – время выполнения арифметических операций, предусмотренных формулами конкретного алгоритма вычисления координат и компонент скорости,
- T2 – временные затраты на расчёт электрического и магнитного полей с помощью линейной интерполяции.

Результаты измерений, выполненных с помощью программного кода, написанного на языке Фортран с использованием формул 2d и 3d линейной интерполяции (5.7), представлены на рисунках 5.3 и 5.4 для двумерной и трёхмерной постановок соответственно. Видно, что в двумерном случае на выполнение интерполяции требуется столько же времени, сколько на метод, а в трёхмерном случае расчёт интерполяции значительно увеличивает время программы. Для более подробного анализа вновь сравнивались медианные значения полученных времён работы программы в плоской и объёмной постановках; результаты представлены в таблицах 5.2 и 5.3 соответственно.

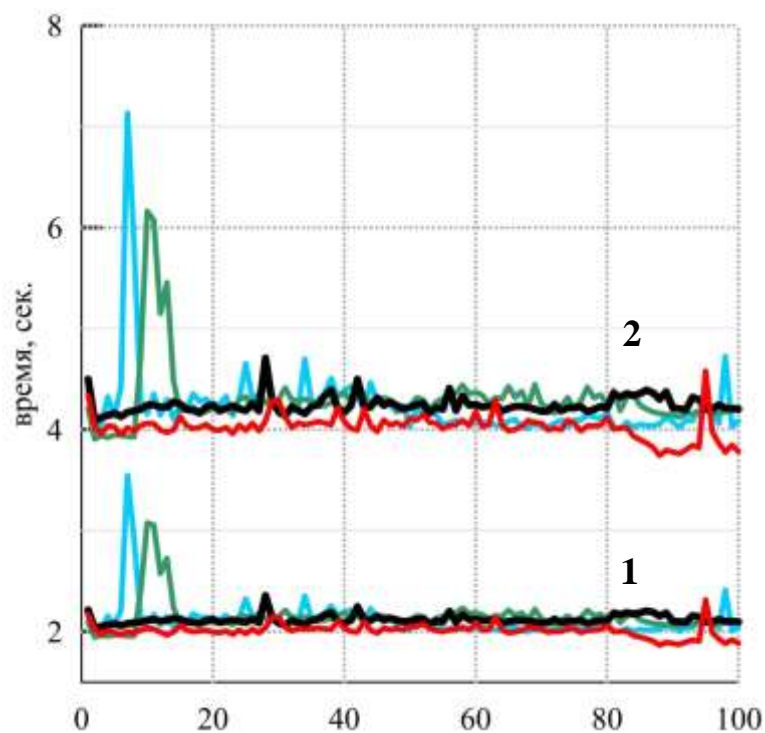


Рисунок 5.3 – Времена выполнения операций метода (1) и интерполяции с методом (2) в двумерной постановке на каждом из 100 запусков. Линии: *красный* – метод Бориса, *голубой* – схема А, *зелёный* – схема В, *чёрный* – схема D

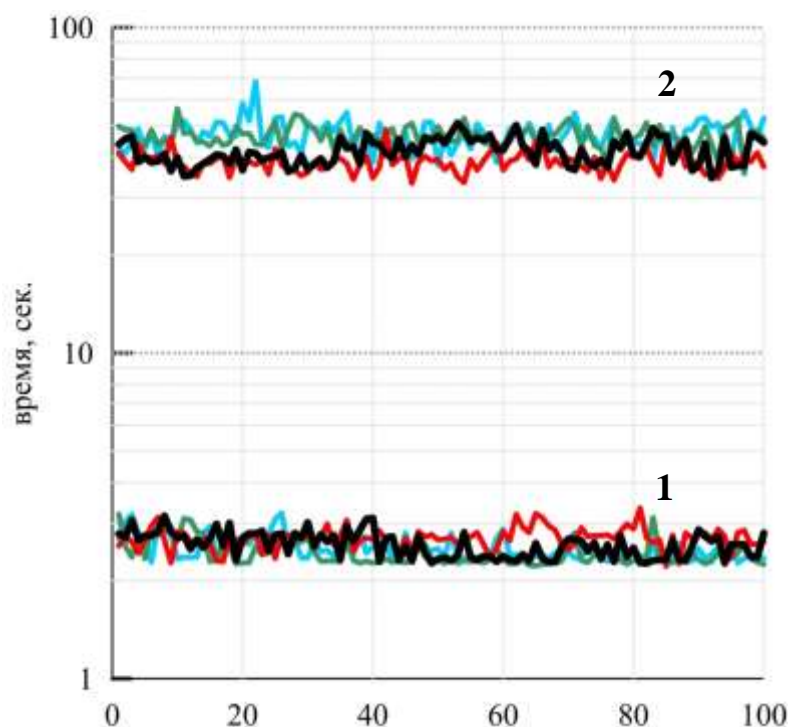


Рисунок 5.4 – Времена выполнения операций метода (1) и интерполяции с методом (2) в трёхмерной постановке на каждом из 100 запусков. Линии: *красный* – метод Бориса, *голубой* – схема А, *зелёный* – схема В, *чёрный* – схема D

Таблица 5.2

**Медианные значения времени выполнения операций метода (T1, сек) и
интерполяции с методом (T2, сек) в двумерном случае**

Метод	T1	T2	T1/(T1+T2)
Бориса	2.013	2.021	0.499
A	2.127	2.134	0.499
B	2.070	2.078	0.499
D	2.108	2.114	0.499

Таблица 5.3

**Медианные значения времени выполнения операций метода (T1 сек) и
интерполяции с методом (T2, сек) в трехмерном случае**

Метод	T1	T2	T1/(T1+T2)
Бориса	2.708	38.546	0.065
A	2.432	46.666	0.049
B	2.324	46.471	0.047
D	2.577	41.236	0.058

Из таблицы 5.2. видно, что в плоской постановке выполнение интерполяции занимает примерно столько же времени, сколько и сам метод. Таблица 5.3 показывает, что в трёхмерном случае интерполяция может увеличить время решения задачи на нахождение траектории заряженной частицы более чем в 20 раз, соответственно сам метод будет занимать около 5-6% времени работы программы. В таком случае выигрыш по времени за счёт выбора более быстрой схемы будет незначительным.

6. Заключение

В настоящей работе предложена новая модификация D метода Бориса, основанная на идее использования точного решения дифференциального уравнения для скорости заряженной частицы на шаге по времени. Схема предлагается в двух вариантах: для плоского и объёмного случая.

Выполнен сравнительный анализ метода Бориса и его модификаций с новой схемой в двумерной и трёхмерной постановках. В результате было показано, что новая модификация обладает наименьшей погрешностью.

Отдельно проводился анализ случаев дискретно заданных электрического и магнитного полей. Для интерполяции полей в текущую точку траектории частицы использовалась линейная интерполяция. Проводились измерения времени работы метода нахождения траектории и скорости частицы и времени выполнения интерполяции. По итогам многочисленных запусков программы был проведён анализ быстродействия модификаций метода Бориса с учетом и без учета интерполяции и было выяснено, что в трёхмерном случае время выполнения интерполяции превышает время работы метода в десятки раз, в то время как выбор более быстрой модификации может помочь выиграть не более 6% времени. В двумерном случае проведение интерполяции занимает столько же времени, сколько вычисление траектории и скорости частицы. Таким образом, в общем случае не всегда целесообразно обосновывать выбор конкретной модификации метода Бориса её быстродействием.

Основные результаты работы состоят в следующем:

- 1) Предложена новая модификация метода Бориса, основанная на использовании точного решения уравнения движения заряженной частицы, полученного на шаге по времени.
- 2) Выполнен сравнительный анализ пяти методов (в том числе новой модификации) решения задачи о движении заряженной частицы в электромагнитном поле в двумерной и трехмерной постановках.

- 3) Показано, что предлагаемая схема является более точной в сравнении с методом Бориса и двумя его известными модификациями.
- 4) Разработан алгоритм и программный код решения задачи для вариантов электромагнитного поля, заданных аналитически или в виде сеточных функций. Для сеточных функций использовалась 2d- или 3d-линейная интерполяция. Исследовано время выполнения алгоритма линейной интерполяции полей и показано, что оно увеличивает время работы рассмотренных методов решения уравнений движения примерно в 2 раза в случае плоской задачи и примерно на порядок в случае объёмной постановки задачи.

Результаты исследований были представлены на международной научной конференции МНСК-2021 [15].

Список литературы

1. Харлоу Х. Ф. Численный метод частиц в ячейках для задач гидродинамики // Вычислительные методы в гидродинамике. — М.: Мир, 1967. 316 с.
2. Березин Ю. А., Вшивков В. А. Метод частиц в динамике разреженной плазмы. Новосибирск: Наука, 1980. 90 с.
3. Boris J. P. Relativistic plasma simulation – optimization of a hybrid code // Proceedings of 4th Conference On Numerical Simulation of Plasmas. Washington, 1970. 3-67 p.
4. Бэдсел Ч., Ленгдон А. Физика плазмы и численное моделирование. М.: Энергоатомиздат, 1989. 456 с.
5. H. Qin, S. Zhang, J. Xiao et al. Why is Boris algorithm so good? // Physics of Plasmas 20, 2013, 084503
6. Umeda T. A three-step Boris integrator for Lorentz force equation of charged particles // Comput. Phys. Commun., 228 (2018), 1-4 p.
7. Umeda T. Multi-step Boris rotation schemes for Lorentz force equation of charged particles // Comput. Phys. Commun., 237 (2019), 37-41 p.
8. Zenitani S., Kato T. N. Multiple Boris integrators for particle-in-cell simulation // Physics of Plasmas Communications, 2019, 106954
9. Zenitani S., Umeda T. On the Boris solver in particle-in-cell simulation // Physics of Plasmas 25, 2018, 112110
10. Ripperda B., Bacchini F., Teunissen J. et al. A comprehensive comparison of relativistic particle integrators // The astrophysical journal supplement series, 235, 2018, 20 p.
11. Winkel M., Speck R., Ruprecht D. A high-order Boris integrator // Journal of computational physics 295, 2015, 456-474 p.
12. Qiang J. High order numerical integrators for relativistic charged particle tracking // arXiv:1702.04486
13. Кролл Н., Трайвелпис А. Основы физики плазмы. М.: Мир, 1975. 526 с.
14. Поттер Д. Вычислительные методы в физике. М.: Мир, 1975. 392 с.

15. Воропаева Е.С. Численный анализ модификаций метода Бориса решения уравнений движения заряженной частицы // Математика: Материалы 59-й Междунар. науч. студ. конф. 12–23 апреля 2021 г. / Новосиб. гос. ун-т. – Новосибирск : ИПЦ НГУ, 2021. — 90 с.