

Моделирование движения пучка в электромагнитном поле с помощью GPU

Кадров Виктор Максимович

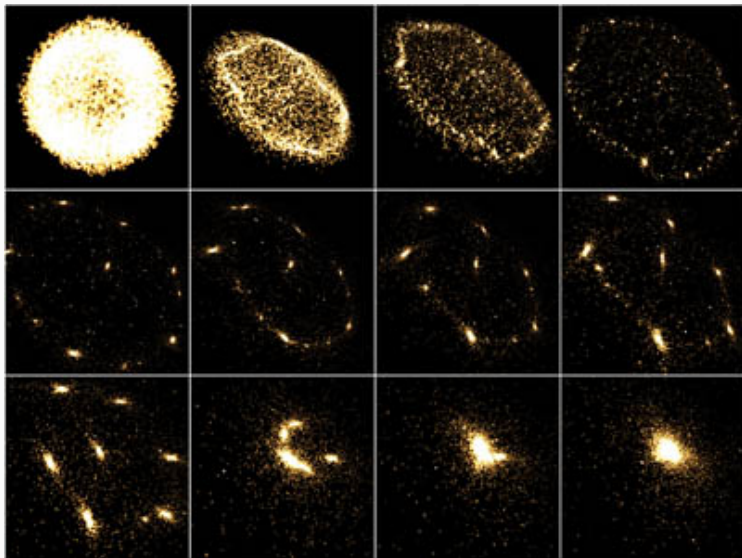
16 мая 2025

Российский университет дружбы народов, Москва, Россия

В докладе рассматривается подход к моделированию взаимодействия заряженных частиц в пучке. В качестве отправной точки анализируется задача с гравитационным взаимодействием, поскольку она во многом аналогична электрической, но проще для понимания на первом этапе.

$$\begin{cases} \dot{\vec{v}}_i = G \sum_{j \neq i} \frac{m_j}{\|\vec{r}\|^3} \vec{r}, \\ \dot{\vec{x}}_i = \vec{v}_i, \\ \vec{x}_i(0) = \vec{x}_0, \vec{v}_i(0) = \vec{v}_0, \end{cases}$$

где $\vec{r} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ – радиус-вектор между телами



Известно, что даже задача трёх тел в гравитационном взаимодействии не имеет общего аналитического решения, и при увеличении числа тел (N -тел) задача усложняется ещё больше. Однако уже на этом уровне можно выделить два важных аспекта: 1. Наличие члена, обратного к расстоянию в третьей степени, приводит к численным сложностям при моделировании близких взаимодействий. 2. С увеличением числа тел индивидуальные траектории теряют значение, уступая место коллективной динамике всей системы — в данном случае, пучка частиц.

Замена гравитационного взаимодействия на электрическое

Поскольку в задаче рассматриваются заряженные частицы, гравитационное взаимодействие заменяется на кулоновское.

$$\dot{\vec{v}}_i = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 m_i} \sum_{j \neq i} \frac{q_i q_j}{\|\vec{r}\|^3} \vec{r}.$$

Замена гравитационного взаимодействия на электрическое Обозначим теперь

$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j \neq i} \frac{q_j}{\|\vec{r}\|^3} \vec{r}$ как \vec{E}_s . Добавим внешнее электрическое (\vec{E}_{ext}) и магнитное (\vec{B}_{ext}) поле и получим

$$\dot{\vec{v}}_i = \frac{q_i}{m_i} (\vec{E}_s + \vec{E}_{ext} + [\vec{v}_i, \vec{B}_{ext}]).$$

Таким образом, формулируется следующая задача Коши: заданы начальные положения и скорости частиц, а также известно внешнее по отношению к пучку электромагнитное поле

$$\begin{cases} \dot{\vec{v}}_i = \frac{q_i}{m_i}(\vec{E}_s + \vec{E}_{ext} + [\vec{v}_i, \vec{B}_{ext}]), \\ \dot{\vec{x}}_i = \vec{v}_i, \\ \vec{x}_i(0) = \vec{x}_0, \vec{v}_i(0) = \vec{v}_0, \end{cases}$$

Следует отметить, что рассматривается нерелятивистская постановка задачи, и в таком виде она далее и решается.

Уравнения движения решаются методом конечных разностей

$$\vec{x}_{t+1} = \vec{x}_t + F(\vec{x}_t, \dots) \Delta t$$

Особое внимание уделяется выбору численной схемы, поскольку на каждом шаге моделирования возникает множество взаимодействий, и даже незначительные численные ошибки могут существенно повлиять на результат.

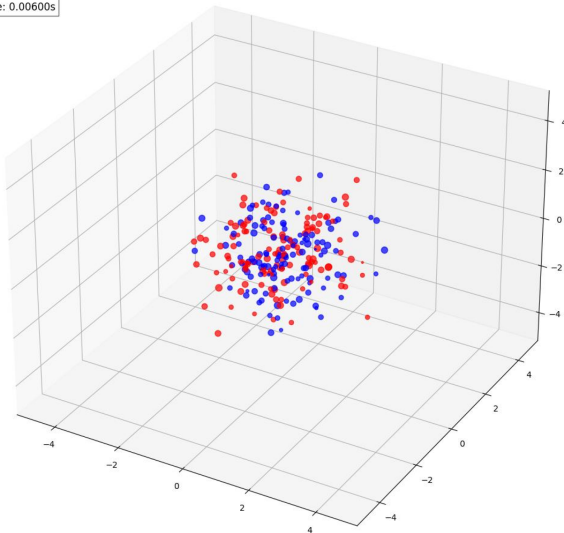
В рамках тестирования применялась явная схема Эйлера, однако учитывались её ограничения.

Среди альтернативных схем рассматривается метод Бориса — численная схема второго порядка, обладающая временной обратимостью. Однако он вносит в систему дополнительные силы, отсутствующие в исходной физической постановке, и на релятивистских скоростях эти силы становятся заметными и искажают результат.

Наибольшие сложности связаны не с решением уравнений движения, а с вычислением собственного поля пучка. Прямое моделирование взаимодействий по схеме “каждый с каждым” (Particle-to-Particle) требует вычислительных затрат порядка $\mathcal{O}(N^2)$, что делает этот подход непрактичным даже при относительно малом числе частиц. Для иллюстрации изображена система из 256 частиц, но в реальных задачах их число может достигать 10^{15} .

Трудности в расчёте собственного поля

Bodies: 256
Time: 0.00600s



Одним из способов снижения вычислительной сложности является объединение множества частиц в макрочастицы (Метод крупных частиц).

Для каждой i -й макрочастицы пару

$$(\vec{r}_i, \vec{v}_i)$$

можно взять, например, как среднее по микрочастицам.

Тогда, взяв макрочастицу как облако с радиусом R поле вычисляется как

$$(\vec{E}_s(j \rightarrow i) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_j}{R^3} \vec{r}, \quad \|\vec{r}\| < R)$$

Кроме того, этот подход позволяет смягчить проблему моделирования близких взаимодействий, так как взаимодействие происходит только при пересечении облаков, то есть когда расстояние между ними меньше R . Это позволяет сократить число взаимодействий с 10^{15} до, например, 10^9 , что всё ещё является вычислительно затратным. Поэтому на практике чаще применяется другой метод — Particle-In-Cell (PIC).

Метод PIC исключает необходимость моделирования парных взаимодействий. Вместо этого рассчитывается распределение заряда на сетке, и далее решается краевая задача для уравнения Пуассона с целью нахождения электрического поля.

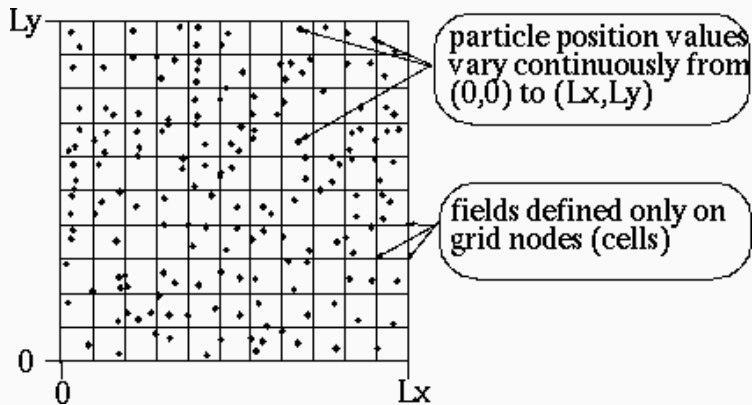


Рис. 3: PIC

Именно этот метод чаще всего используется в прикладных задачах.

Даже при использовании макрочастиц и метода PIC последовательное решение задачи остаётся неприемлемо медленным. Поэтому в современных вычислениях активно применяются графические ускорители (GPU). Они позволяют эффективно распараллелить как решение уравнений движения, так и вычисление собственного поля пучка.

В рамках практической части проекта была разработана архитектура, сочетающая удобство настройки с возможностью высокопроизводительных вычислений

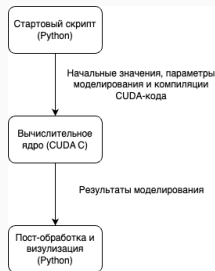


Рис. 4: Схема программного решения

Реализация позволяет моделировать динамику пучка заряженных частиц в электромагнитном поле. Легко моделируются пучки до 200 тыс. частиц и приемлемо – до 500 тыс.

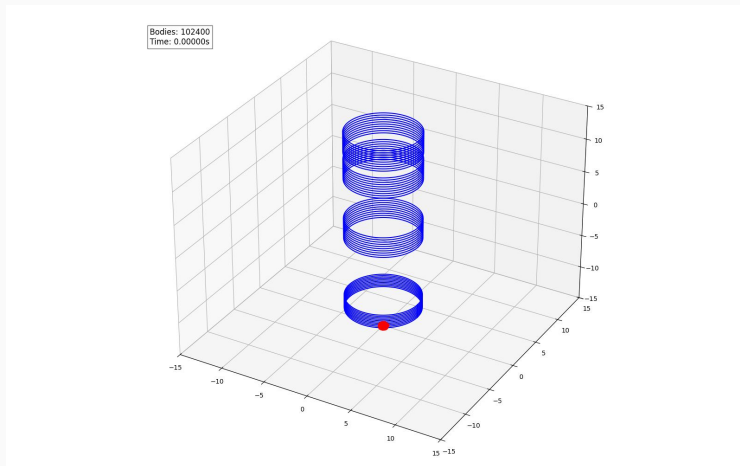


Рис. 5: Пучок 100 тыс. частиц на старте симуляции, вектор скорости направлен в катушку

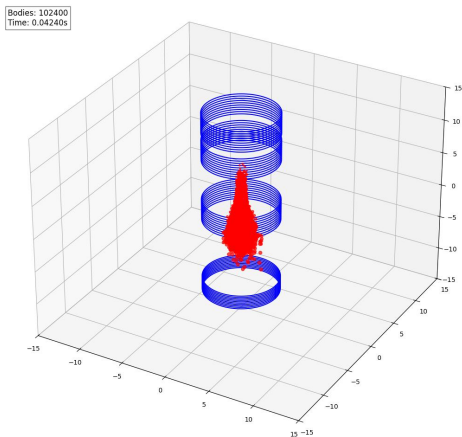


Рис. 6: Фокусировка пучка

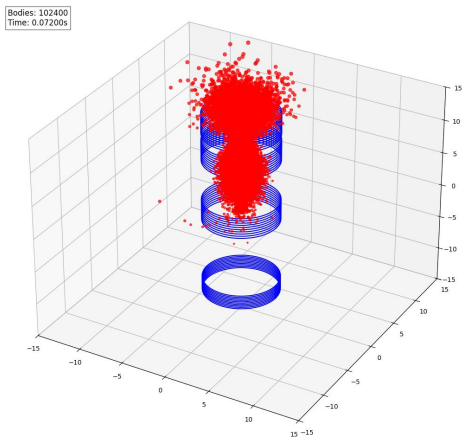


Рис. 7: Разлет на выходе из катушки

Отдельной задачей остаётся учёт геометрии экспериментальной установки. Даже при её упрощении и грубой дискретизации проблема столкновений частиц становится вычислительно трудоёмкой, особенно при прямом переборе всех возможных пар.

Наконец, важным аспектом является правильное использование различных уровней памяти в архитектуре видеокарт NVIDIA

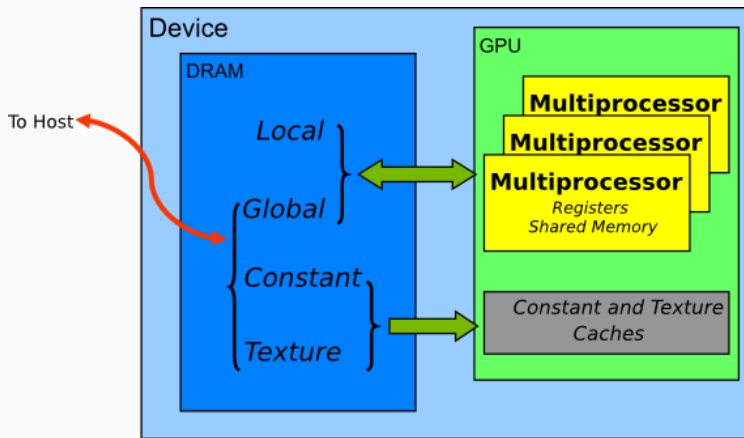


Рис. 8: Архитектура памяти GPU

Рассмотренная задача моделирования пучков заряженных частиц в электромагнитных полях требует комплексного подхода, сочетающего точные численные методы, эффективную архитектуру программного обеспечения и использование современных вычислительных ресурсов. Несмотря на ряд нерешённых проблем, разработанная архитектура демонстрирует потенциал для дальнейшего развития и внедрения в более сложные модели, включая учёт геометрии установки и использование PIC-методов.