

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

«НОВОСИБИРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ» (НОВОСИБИРСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ, НГУ)

Факультет: **ФИЗИЧЕСКИЙ**

Кафедра: **ФИЗИКИ ПЛАЗМЫ**

Направление подготовки: **03.04.02 ФИЗИКА**

Образовательная программа: **МАГИСТРАТУРА**

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА

Каргаполова Ивана Юрьевича

Тема работы: Разработка кода для трёхмерного моделирования
плазменного кильватерного ускорения в квазистатическом приближении
LCODE 3D

«К защите допущена»

И.О. заведующего кафедрой

к.ф.-м.н.

с.н.с., ИЯФ СО РАН

Научный руководитель

д.ф.-м.н., профессор РАН

г.н.с., ИЯФ СО РАН

Сковородин Д.И./_____

(подпись, МП)

Лотов К.В./_____

(подпись, МП)

«_____» _____ 2022 г.

«_____» _____ 2022 г.

Дата защиты: «_____» _____ 2022 г.

Новосибирск — 2022 г.

Содержание

Введение	3
1 Основы трёхмерного квазистатического PIC кода	7
1.1 Основные физические уравнения метода частиц в ячейках	7
1.2 Квазистатическое приближение	10
1.3 Физические уравнения при квазистатическом подходе	12
1.4 Раскладка частиц на сетку и интерполяция полей	16
1.5 Численная схема одного шага по времени	19
2 Численные шумы и корректность расчётов кода LCODE 3D	22
2.1 Основные численные шумы в PIC моделировании	22
2.2 Двойное плазменное представление	23
2.3 Сеточное ядро более гладкой формы	24
2.4 Тестирование корректности расчётов отклика плазмы	25
2.5 Тестирование корректности расчётов динамики пучка	29
3 Быстродействие кода LCODE 3D	32
3.1 Методы ускорения вычислений PIC кодов	32
3.2 Ускорение вычислений на CPU	33
3.3 Ускорение вычислений на GPU	34
3.4 Тестирование быстродействия LCODE 3D на CPU и GPU	36
Заключение	39

Список использованных источников	40
Приложение А	46

Введение

Успехи в научном понимании окружающего мира неразрывно связаны с созданием приборов и аппаратов, расширяющих возможности человеческого восприятия, что позволяет исследовать физические процессы в широком диапазоне масштабов времени и длины. Так, синхротронные источники света используются для исследования атомных и молекулярных процессов, происходящих на фемтосекундных и нанометровых масштабах. Коллайдеры высокой энергии, в свою очередь, предоставляют возможность анализировать субатомные процессы и параметры фундаментальных взаимодействий, которые находятся на ещё более мелких масштабах времени и длины.

Работа источников синхротронного излучения и коллайдеров основана на использовании релятивистских пучков частиц, создаваемых в ускорителях. Стремление к большему разрешению на установках с пучками частиц ведёт, в том числе, и к стремлению получить пучки частиц с более высокими энергиями. Темп ускорения в классических резонаторах достигает и превышает 35 МВ/м [1], но он ограничен величиной порядка 100 МВ/м из-за разрушения металлической стенки ускоряющей камеры, происходящего во время электрического пробоя. Следовательно, проведение всё более сложных фундаментальных исследований потребует строительства всё более крупных и дорогих установок; другим выходом из данной ситуации становится развитие новых методов ускорения частиц.

Одна из многообещающих концепций относительно дешёвых и доступных ускорителей электронов будущего основана на плазменном кильватерном ускорении [2–4]. Этот метод ускорения использует экстремальные поля в плазменных волнах, создаваемые так называемым драйвером (высокоинтенсивным лазерным импульсом или сильноточным пучком заряженных частиц), для транспортировки и ускорения электронных сгустков

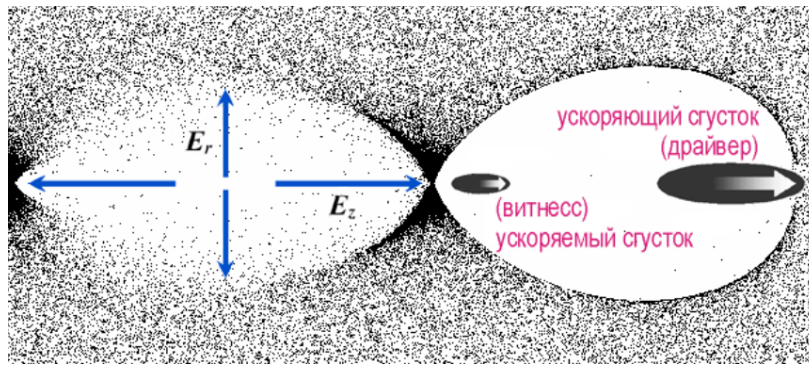


Рисунок 1: Принципиальная схема кильватерного ускорения.

до высоких энергий на коротких расстояниях (рис. 1). Продольные электрические поля в таких плазменных волнах достигают величин порядка 10–100 ГВ/м [5], что, в принципе, позволяет сократить длину ускоряющих структур на три порядка в сравнении с классическими резонаторами. Исследования в области развития кильватерного ускорения пережили бурное развитие в последние десятилетия, с большим количеством важных экспериментальных результатов [6–8]. Вместе с тем, потребуется провести ещё большое количество всесторонних теоретических, численных и экспериментальных исследований для развития возможностей кильватерного ускорения до того уровня, когда оно может быть использовано в различных приложениях.

Прогрессу в развитии и изучении кильватерного ускорения значительно способствует использование численных расчётов. Численные исследования плазменного кильватерного ускорения проводится в основном с использованием метода частиц в ячейке (PIC) [9, 10], который позволяет моделировать кинетические, релятивистские и электромагнитные взаимодействия интенсивных лазерных импульсов или релятивистских сильноточных пучков заряженных частиц с плазмой. Существующие инструменты моделирования предоставляют широкие возможности для изучения динамики плазмы в условиях, близких к экспериментальным и требующих коротких вычислительных окон [11]. Однако существует нехватка надежных

инструментов, позволяющих численно исследовать долговременную эволюцию плазменной волны, инициируемую пучковым драйвером, в трёхмерной геометрии. Создаваемые для этого коды моделирования должны обеспечивать низкий численный шум при разумном потреблении компьютерных ресурсов, что является сложной задачей разработки подобных кодов.

Значительное снижение потребления компьютерных ресурсов возможно за счёт реализации численной PIC схемы, основанной на квазистатическом приближении [12, 13]. Эта схема применима, если пучок заряженных частиц эволюционирует на гораздо более длительных, чем плазма, масштабах времени. Одним из использующих эту схему кодов является двумерный код LCODE [14, 15], позволяющий проводить численные исследования долговременной эволюции кильватерной волны [16, 17]. На данный момент ведётся разработка трёхмерного кода LCODE 3D [18], являющегося модификацией LCODE. За счёт трёхмерной геометрии новый код LCODE 3D позволит численно исследовать недоступные ранее физические явления. Однако моделирование в трёхмерной геометрии приводит как к возникновению новых численных шумов, так и к повышению потребления компьютерных ресурсов.

Первая глава данной работы посвящена описанию ключевых элементов численного алгоритма, лежащего в основе квазистатического трёхмерного PIC кода LCODE 3D. Описаны основные физические уравнения, являющиеся фундаментом метода частиц в ячейках. Рассмотрено квазистатическое приближение, как оно позволяет построить быстрый численный алгоритм, позволяющий моделировать кильватерное ускорение, и как оно позволяет свести трёхмерную задачу к упрощённой двумерной. Изложены основы схемы раскладки параметров макрочастиц на сетку плотности заряда и тока и интерполяции полей с сетки на положения макрочастиц, и какой вид эта схема принимает для квазистатического трёхмерного кода.

Вторая глава данной работы посвящена исследованию устойчивости

численных PIC алгоритмов по отношению к нефизическим шумам при моделировании долговременной эволюции плазмы на примере разрабатываемого кода LCODE 3D. Мы фокусируемся на численных шумах, связанных с работой алгоритма по расчёту отклика плазмы на жёсткий пучок заряженных частиц, и предлагаем методы уменьшения шумов. Мы предлагаем использовать сеточное ядро более высокого порядка для макрочастиц плазмы, так как это повышает стабильность кода. Мы также представляем так называемый метод двойного плазменного представления, который подавляет мелкомасштабный шум. После применения предложенных методов результаты моделирования нового кода сравниваются с результатами двумерного кода LCODE.

Третья глава данной работы посвящена методам увеличения быстродействия кода LCODE 3D, разработанного на интерпретируемом, и поэтому изначально медленном, языке программирования Python. При расчётах на центральном процессоре (CPU) ускорение работы кода достигается за счёт использования библиотек NumPy и Numba, обеспечивающих быстрые векторные операции с массивами данных, компиляцию в оптимизированный машинный код и многопоточковые вычисления. Для достижения ещё большего быстродействия численные алгоритмы были модифицированы для проведения вычислений на графическом процессоре (GPU).

1 Основы трёхмерного квазистатического PIC кода

Мы будем использовать следующие обозначения в данной работе: n_0 — невозмущенная плотность плазмы, m_e — масса электрона, c — скорость света, e — элементарный заряд, $\omega_p = \sqrt{4\pi n_0 e^2 / m_e}$ — плазменная частота, пучок заряженных частиц распространяется вдоль оси z .

1.1 Основные физические уравнения метода частиц в ячейках

Физической основой PIC метода, используемого в физике бесстолкновительной плазмы, является система уравнений Власова — Максвелла. Эта система уравнений полностью описывает эволюцию во времени t функции распределения $f_s(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ частиц сорта s и самосогласованного электромагнитного поля, источником которого являются заряды и токи с добавлением, при наличии, внешнего поля.

Плотности (пространственного) заряда ρ и тока \mathbf{j} определяются выражениями

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_s q_s \int f_s(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{p}, \quad (1.1)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \sum_s q_s \int \mathbf{v} f_s(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{p}, \quad (1.2)$$

где q_s и m_s — заряд и масса частицы сорта s , а $\mathbf{r}, \mathbf{v} = \mathbf{p}/\sqrt{m_s^2 + \mathbf{p}^2/c^2}$ и \mathbf{p} — её координата, скорость и импульс соответственно. Эти выражения связывают между собой уравнение Власова (кинетическое уравнение бесстолкновительной плазмы) для каждого имеющегося сорта частиц

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{r}} + q_s \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B} \right) \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{p}} = 0, \quad (1.3)$$

и уравнения Максвелла

$$\operatorname{rot} \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \operatorname{div} \mathbf{E} = 4\pi\rho, \quad \operatorname{div} \mathbf{B} = 0, \quad (1.4)$$

где \mathbf{E} и \mathbf{B} — напряжённость электрического и магнитного полей соответственно. Вместе эти уравнения и выражения образуют замкнутую систему. Из-за пренебрежения столкновениями уравнение Власова обратимо во времени, а его решения эволюционируют вдоль характеристик (траекторий частиц) в фазовом пространстве.

В PIC методе разные величины описываются эйлеровыми или лагранжевыми переменными. С помощью эйлеровых переменных описываются величины на пространственной сетке: электрическое $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ и магнитное $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ поля, плотность заряда $\rho(\mathbf{r}, t)$ и тока $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$. Лагранжево описание появляется из-за введения набора макрочастиц. Это позволяет провести численную дискретизацию функции распределения в уравнении Власова (1.3), представив её как сумму по относительно небольшому числу макрочастиц N_s :

$$f_s(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \approx \sum_{\alpha=1}^{N_s} \tilde{S}_{s,\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{s,\alpha}(t)) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_{s,\alpha}(t)), \quad (1.5)$$

где $\tilde{S}_{s,\alpha}$ — функция пространственной плотности макрочастицы α сорта s с координатой $\mathbf{r}_{s,\alpha}$ и импульсом $\mathbf{p}_{s,\alpha}$.

Характеристики уравнения Власова (1.3) в случае функции распределения в виде (1.5) являются траекториями макрочастиц, определяемыми уравнениями движения

$$\frac{d\mathbf{r}_{s,\alpha}}{dt} = \mathbf{v}_{s,\alpha}, \quad \frac{d\mathbf{p}_{s,\alpha}}{dt} = Q_{s,\alpha} \left(\tilde{\mathbf{E}} + \frac{\mathbf{v}_{s,\alpha}}{c} \times \tilde{\mathbf{B}} \right), \quad (1.6)$$

где $\mathbf{v}_{s,\alpha} = \mathbf{p}_{s,\alpha} / \sqrt{M_{s,\alpha}^2 + \mathbf{p}_{s,\alpha}^2 / c^2}$ — скорость макрочастицы, $Q_{s,\alpha}$ и $M_{s,\alpha}$ — интегральный заряд и масса макрочастицы соответственно, а $\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}_{s,\alpha})$ и $\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{r}_{s,\alpha})$ — электрическое и магнитное поля, действующие на макрочастицу. Таким образом, уравнение Власова (1.3) в частных производных заменяется обыкновенными дифференциальными уравнениями движения Ньютона. С учётом дискретизации (1.5), плотности заряда (1.1) и тока (1.2) вычисляются как

$$\rho(\mathbf{r}, t) \approx \sum_s q_s \sum_{\alpha=1}^{N_s} \tilde{S}_{s,\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{s,\alpha}(t)), \quad (1.7)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \approx \sum_s q_s \sum_{\alpha=1}^{N_s} \mathbf{v}_{s,\alpha} \tilde{S}_{s,\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{s,\alpha}(t)). \quad (1.8)$$

РIS метод, основанный на замкнутой системе уравнений (1.4), (1.6)–(1.8), позволяет проводить эффективные численные исследования кинетических и релятивистских явлений в плазме, в то время как прямой подход через уравнение Власова неприменим для большинства задач кильватерного ускорения.

Численная схема одного шага в РIS методе состоит из трёх последовательных подшагов, повторяющихся итерационно необходимое число раз:

1. Раскладка макрочастиц на сетку плотности заряда и тока согласно уравнениям (1.7) и (1.8);
2. Решение уравнений Максвелла (1.4) на сетке;

3. Интерполяция полей на положения макрочастиц согласно формулам, которые обсуждаются в разделе 1.4; и движение макрочастиц согласно (1.6).

Численная схема кодов, основанных на квазистатическом приближении, во многом схожа с описанной выше, но уравнения несколько изменены, а макрочастицы плазмы и пучка эволюционируют с разными временными шагами и согласно разным уравнениям движения.

1.2 Квазистатическое приближение

Исследовать физические процессы распространения плазменных волн и кильватерного ускорения часто оказывается удобно в системе координат

$$\tau = t, \quad \xi = z - vt, \quad \tilde{x} = x, \quad \tilde{y} = y, \quad (1.9)$$

где в качестве v обычно выбирается скорость света c , что мы и используем далее, x и y — поперечные координаты. Для частных производных некоторой величины $H = H(\xi, \tau)$ преобразование координат (1.9) влечёт

$$\frac{\partial}{\partial t} H(\xi, \tau) = \frac{\partial \tau}{\partial t} \frac{\partial H}{\partial \tau} + \frac{\partial \xi}{\partial t} \frac{\partial H}{\partial \xi}, \quad \frac{\partial}{\partial z} H(\xi, \tau) = \frac{\partial \tau}{\partial z} \frac{\partial H}{\partial \tau} + \frac{\partial \xi}{\partial z} \frac{\partial H}{\partial \xi}. \quad (1.10)$$

Производные по продольным координатам не меняются: $\partial_{\tilde{x}} = \partial_x$ и $\partial_{\tilde{y}} = \partial_y$.

Динамика различных физических процессов в кильватерном ускорении охватывает широкий диапазон временных масштабов, и характерные временные масштабы для эволюции пучковых драйверов и плазмы могут различаться на порядки. Характерное время, в течение которого плазма реагирует на возмущение, определяется обратной плазменной частотой $\tau_p \sim \omega_p^{-1}$. Характерное время эволюции пучка частиц же определяется обратной бетатронной частотой $\tau_b \sim \omega_\beta^{-1} \simeq \sqrt{2\gamma_b m_b / m_e} \omega_p^{-1}$, где γ_b и m_b —

лоренц-фактор и масса частицы пучка соответственно. Эти временные масштабы различаются на порядки $\tau_b \gg \tau_p$ для ультрарелятивистских пучков, и/или состоящих из тяжёлых частиц, то есть когда выполняется условие $\gamma_b m_b / m_e \gg 1$.

Выводы, полученные выше, используются для формулировки квазистатического приближения [12,13]. Рассмотрим величины F , которые описываются в эйлеровых переменных: плотности заряда и тока, электромагнитные поля. Частная производная по времени таких величин в системе координат преобразуется, согласно (1.10), как

$$\frac{\partial}{\partial t} F(\xi, \tau) = \frac{\partial F}{\partial \tau} - c \frac{\partial F}{\partial \xi}, \quad \frac{\partial}{\partial z} F(\xi, \tau) = \frac{\partial F}{\partial \xi}.$$

Отметим, что $|\partial_\tau F| \sim \tau_b^{-1} |F|$ и $c |\partial_\xi F| \sim \tau_p^{-1} |F|$. Идея квазистатического приближения тогда состоит в том, что для случая $\tau_b \gg \tau_p$ полагается $c |\partial_\xi F| \gg |\partial_\tau F|$, и производная по времени $\partial_t F$ определяется только зависимостью F от ξ . Электромагнитные поля и плотности заряда и тока считаются квазистатическими во время эволюции плазмы в новой системе координат (1.9), то есть не зависящими от τ , и

$$-\frac{\partial F}{\partial(ct)} \simeq \frac{\partial F}{\partial \xi} = \frac{\partial F}{\partial z}. \quad (1.11)$$

Кроме того, из-за неравенства $\tau_b \gg \tau_p$ изменение распределения заряда пучка частиц полагается несущественным в течении характерного времени отклика плазмы на возмущение, вызванное этим пучком.

Любая относящаяся к макрочастице плазмы величина X_p описывается лагранжевыми переменными в поперечном направлении и эйлеровыми переменными в продольном направлении в новой системе координат. Пре-

образование координат (1.9) тогда, следуя (1.10) и (1.6), влечёт

$$\frac{dX_p}{dt} = \frac{\partial X_p}{\partial \tau} + \left(\frac{dz}{dt} - \frac{d(ct)}{dt} \right) \frac{\partial X_p}{\partial \xi} \simeq (v_{p,z} - c) \frac{dX_p}{d\xi}, \quad (1.12)$$

где $v_{p,z}$ — скорость макрочастицы плазмы в продольном направлении. Так как обычно рассматривается ультрарелятивистский пучок заряженных частиц с $v_{b,z} \simeq 1$, квазистатическое приближение не применяется для описания его динамики, и его величины эволюционируют во времени t . Это приводит к раздельному вычислению динамики макрочастиц пучка и плазмы.

Квазистатическое приближение используется для решения уравнений, описывающих структуру плазменных волн и кильватерного ускорения, но также является основой квазистатических PIC кодов. Основная идея численных схем таких кодов — использование двух разных шагов по времени для моделирования плазмы и пучка заряженных частиц, и для пучка шаг может быть значительно больше шага для плазмы. Квазистатический подход позволяет проводить моделирование с шагом по времени, на порядки превышающим шаг в стандартных (полностью явных) PIC кодах.

1.3 Физические уравнения при квазистатическом подходе

Для получения электромагнитных полей, как было описано в разделе 1.1, решаются уравнения Максвелла. Для удобства построения численного алгоритма электрические и магнитные поля мы измеряем в единицах $E_0 = m_e c \omega_p / e$, время — ω_p^{-1} , длину — $k_p^{-1} = c / \omega_p$, массу — m_e , заряд — e , скорость — c , плотность — n_0 , плотность заряда — en_0 , плотность тока — $en_0 c$. Все величины и уравнения далее записаны в нормализованном

безразмерном виде. Уравнения Максвелла (1.4) в нормализованном виде

$$\operatorname{rot} \mathbf{B} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \operatorname{div} \mathbf{E} = \rho, \quad \operatorname{div} \mathbf{B} = 0. \quad (1.13)$$

Мы рассматриваем ультрарелятивистские пучки заряженных частиц, для которых можно пренебречь поперечными составляющими тока: $\mathbf{j}_b = \rho_b \mathbf{e}_z$, где \mathbf{e}_z — направленный вдоль оси z единичный вектор. Плотность заряда равна сумме плотностей заряда пучка ρ_b , электронов ρ_e и ионов плазмы ρ_i :

$$\rho = \rho_b + \rho_p = \rho_b + \rho_e + \rho_i.$$

Плотность тока равна сумме плотностей токов пучка \mathbf{j}_b , электронов \mathbf{j}_e и ионов плазмы \mathbf{j}_i :

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_b + \mathbf{j}_p = \rho_b \mathbf{e}_z + \mathbf{j}_e + \mathbf{j}_i.$$

Квазистатическое приближение позволяет переписать уравнения Максвелла (1.13), используя (1.11), превращая их в уравнения Пуассона для каждой компоненты поля:

$$\Delta_{\perp} E_x = \frac{\partial \rho}{\partial x} - \frac{\partial j_x}{\partial \xi}, \quad \Delta_{\perp} E_y = \frac{\partial \rho}{\partial y} - \frac{\partial j_y}{\partial \xi}, \quad \Delta_{\perp} E_z = \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y}, \quad (1.14)$$

$$\Delta_{\perp} B_x = \frac{\partial j_y}{\partial \xi} - \frac{\partial j_z}{\partial y}, \quad \Delta_{\perp} B_y = \frac{\partial j_z}{\partial x} - \frac{\partial j_x}{\partial \xi}, \quad \Delta_{\perp} B_z = \frac{\partial j_x}{\partial y} - \frac{\partial j_y}{\partial x}, \quad (1.15)$$

где $\Delta_{\perp} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$. В качестве граничных условий мы берём условия для идеально проводящей прямоугольной трубы со сторонами $2x_{max}$ на $2y_{max}$

и площадью поперечного сечения S :

$$x = \pm x_{\max}: B_x = E_y = E_z = 0; \quad \frac{\partial E_x}{\partial x} = \rho, \quad \frac{\partial B_y}{\partial x} = -j_z, \quad \frac{\partial B_z}{\partial x} = j_y; \quad (1.16)$$

$$y = \pm y_{\max}: B_y = E_x = E_z = 0; \quad \frac{\partial E_y}{\partial y} = \rho, \quad \frac{\partial B_x}{\partial y} = j_z, \quad \frac{\partial B_z}{\partial y} = -j_x, \quad (1.17)$$

$$\frac{1}{S} \int_S B_z dx dy = B_0, \quad (1.18)$$

где B_0 — нормализованное внешнее продольное магнитное поле, если такое имеется. Зная все величины в правых частях уравнений (1.14)–(1.18), можно решить уравнения Пуассона и найти сеточные функции для всех полей (см. формулы (A.1)–(A.2) и далее в Приложении А).

Уравнения движения макрочастиц плазмы (1.6), учитывая (1.12) в связи с переходом в новую систему координат, принимают вид

$$\frac{dx_p}{d\xi} = \frac{v_{p,x}}{v_{p,z} - 1}, \quad \frac{dy_p}{d\xi} = \frac{v_{p,y}}{v_{p,z} - 1}, \quad (1.19)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_p}{d\xi} = \frac{Q_p}{v_{p,z} - 1} \left(\tilde{\mathbf{E}} + \mathbf{v}_p \times \tilde{\mathbf{B}} \right), \quad \mathbf{v}_p = \frac{\mathbf{p}_p}{\sqrt{M_p^2 + \mathbf{p}_p^2}}, \quad (1.20)$$

где $x_p, y_p, \mathbf{p}_p, \mathbf{v}_p, Q_p$ — нормализованные поперечные координаты, импульс, скорость и интегральный заряд макрочастицы плазмы массы M_p , а индекс сорта макрочастицы плазмы опущен. Численная реализация решения уравнений (1.19)–(1.20) основана на схеме, содержащей несколько шагов, в которых производится сначала предсказание, а после уточнение параметров макрочастицы плазмы [19]. Дополнительное условие на движение состоит в том, что при пересечении боковой границы окна моделирования макрочастицы плазмы отражаются от неё, но теряют энергию.

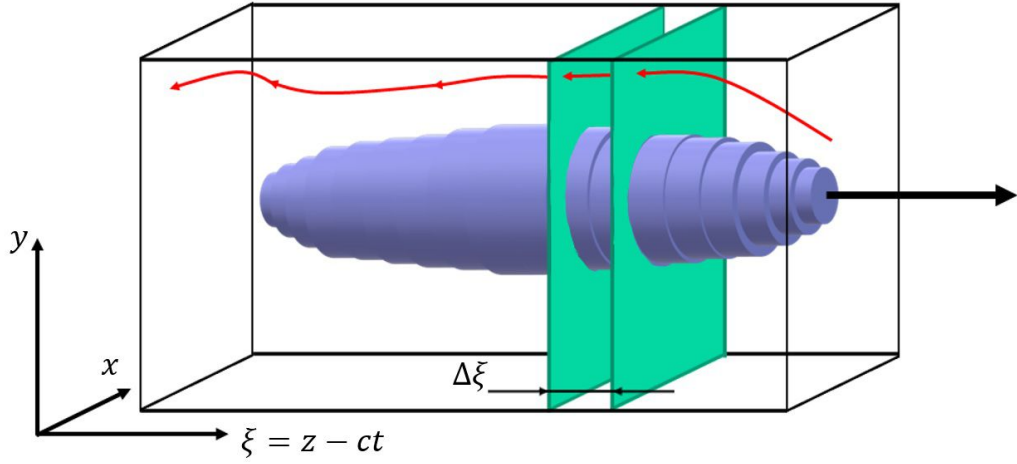


Рисунок 1.1: Схема расчёта отклика плазмы при квазистатическом подходе.

Нормализованные уравнения движение макрочастиц пучка имеют вид

$$\frac{dx_b}{dt} = v_{b,x}, \quad \frac{dy_b}{dt} = v_{b,y}, \quad \frac{d\xi_b}{dt} = v_{b,z} - 1, \quad (1.21)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_b}{dt} = Q_b \left(\tilde{\mathbf{E}} + \mathbf{v}_b \times \tilde{\mathbf{B}} \right), \quad \mathbf{v}_b = \frac{\mathbf{p}_b}{\sqrt{M_b^2 + \mathbf{p}_b^2}}, \quad (1.22)$$

где $x_p, y_p, \xi_b, \mathbf{p}_b, \mathbf{v}_b, Q_b, M_b$ — нормализованные поперечные и продольная координаты, импульс, скорость, интегральный заряд и масса макрочастицы пучка. Численная реализация решения уравнений движения макрочастиц пучка основана на сохраняющей фазовый объём схеме второго порядка по времени [20].

Основываясь на квазистатическом подходе, численная схема строится в два шага: на первом шаге, исходя из распределения плотности заряда пучка, рассчитывается плазменный отклик, — это наиболее затратный на компьютерные ресурсы этап, также называемый плазменным решателем. На втором шаге, исходя из рассчитанных полей в плазме, эволюционируют параметры пучка.

При заданном распределении пучка отклик плазмы рассчитывается в системе координат (1.9). Слой плазмы инициализируется перед пучком на координате $\xi = 0$ и двигается в сторону уменьшения ξ , то есть от головы

пучка к его хвосту. Поскольку система координат выбрана как движущаяся со скоростью света в сторону распространения пучка z , информация тоже распространяется только в сторону уменьшения ξ . В каждом продольном положении электромагнитные поля вычисляются на двумерном плазменном слое. Таким образом трёхмерная задача решается как n двумерных поперечных задач, где n — количество точек продольной сетки в окне моделирования. Рисунок 1.1 иллюстрирует схему расчёта отклика плазмы на слоях. Как только поля во всей трёхмерной области вычислены, макрочастицы пучка двигаются на один временной шаг. Продольный шаг моделирования плазмы равен $\Delta\xi > 0$, шаг моделирования пучка равен Δt . Передвинув макрочастицы пучка, схема возвращается к началу и далее процесс повторяется необходимое число раз.

Если не задано специфичное начальное состояние плазмы, то макрочастицы плазмы и поля в начале окна берутся как для невозмущенного состояния, существовавшего до взаимодействия с пучком при $\xi = 0$:

$$\begin{aligned}\mathbf{E} &= (0, 0, 0), & \mathbf{B} &= (0, 0, B_0), \\ \mathbf{v}_e = \mathbf{v}_i &= (0, 0, 0), & n_e = n_i &= 1.\end{aligned}$$

1.4 Раскладка частиц на сетку и интерполяция полей

Удобно представить функцию формы частицы $\tilde{S}_{s,\alpha}$ в виде произведения “веса” макрочастицы $\tilde{N}_{s,\alpha}$ и нормализованного на единицу ядра $S_{s,\alpha}$, которое в PIC методе описывает геометрическую форму, размер и распределение плотности заряда частицы:

$$\tilde{S}_{s,\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{s,\alpha}) = \tilde{N}_{s,\alpha} S_{s,\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{s,\alpha}). \quad (1.23)$$

Вес макрочастицы связан с её интегральным зарядом $Q_{s,\alpha}$ и зарядом q_s частиц сорта s (например, $q_e = -1$ для электронов) как $Q_{s,\alpha} = q_s \tilde{N}_{s,\alpha}$. Аналогично, масса макрочастицы $M_{s,\alpha}$, для сорта которой s масса частицы равна m_s (например, $m_e = 1$ для электронов), равна $M_{s,\alpha} = m_s \tilde{N}_{s,\alpha}$.

Поскольку вычисление электромагнитных полей происходит на пространственной сетке, а макрочастицы раскладываются на плотности заряда и тока тоже на сетку, необходимо перейти от непрерывных функций в уравнениях до этого к сеточным величинам. Далее сеточные величины обозначены индексами i, j , если они относятся к какому-то плазменному слою, и i, j, k , если они относятся к плазменному слою с порядковым номером k . Величина

$$R_{s,\alpha}(\mathbf{r}) = \frac{1}{|V|} \int_V S_{s,\alpha}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) d\mathbf{r}',$$

где V — небольшой объём вокруг узла сетки, называется сеточным ядром и позволяет связать сеточные величины и макрочастицы плазмы и пучка.

Для описания макрочастиц плазмы мы используем двумерное сеточное ядро, равное произведению двух одномерных, поскольку вычисление отклика плазмы производятся на двумерном слое: $R_p(\mathbf{r}) = R_p(x)R_p(y)$. В качестве одномерного сеточного ядра можно выбрать произвольную функцию, гладкую необходимое число раз и нормированную на единицу. Обычно в PIC моделировании выбирают параболическое ядро [21]:

$$R_p(x) = \begin{cases} \frac{1}{h} - \frac{1}{h^3} \left(x^2 + \frac{h^2}{4} \right), & |x| \leq \frac{1}{2}h, \\ \frac{1}{2h^3} \left(\frac{3}{2}h - |x| \right)^2, & \frac{1}{2}h < |x| \leq \frac{3}{2}h, \\ 0, & |x| > \frac{3}{2}h, \end{cases} \quad (1.24)$$

где h — размер шага пространственной сетки. Мы обнаружили, что в расчётах интересующих нас задач ядро четвёртого порядка показало меньший

уровень численных шумов, чему посвящена глава 2 данной работы.

Для описания макрочастиц пучка мы используем трёхмерное сеточное ядро, равное произведению трёх одномерных, поскольку заряд макрочастицы пучка вносит свой вклад на разные — соседние — плазменные слои: $R_b(\mathbf{r}) = R_b(x)R_b(y)R_b(\xi)$. Здесь в качестве одномерного сеточного ядра вдоль всех направлений обычно выбирают так называемое сеточное ядро PIC, которое удобно для построения численного алгоритма и экономично использует компьютерные ресурсы:

$$R_b(x) = \begin{cases} \frac{1}{h} \left(1 - \frac{|x|}{h}\right), & |x| \leq h, \\ 0, & |x| > h. \end{cases} \quad (1.25)$$

Способ вычисления плотности заряда (1.7) и тока (1.8) плазмы, с учётом квазистатического приближения (1.12), преобразуется в случае вычисления этих величин в узлах двумерной сетки в сумму по макрочастицам плазмы на слое:

$$\begin{aligned} \rho_{p,i,j} = \rho_p(\mathbf{r}_{i,j}) &= \sum_{\alpha} \frac{Q_{p,\alpha}}{1 - v_{p,\alpha,z}} R_p(\mathbf{r}_{i,j} - \mathbf{r}_{p,\alpha}), \\ \mathbf{j}_{p,i,j} = \mathbf{j}_p(\mathbf{r}_{i,j}) &= \sum_{\alpha} \frac{\mathbf{v}_{p,\alpha} Q_{p,\alpha}}{1 - v_{p,\alpha,z}} R_p(\mathbf{r}_{i,j} - \mathbf{r}_{p,\alpha}), \end{aligned}$$

где $\mathbf{r}_{i,j}$ — координата узла сетки с индексами i, j .

Электромагнитные поля в уравнении (1.6), которые действуют на макрочастицу плазмы, интерполируется с двумерной сетки на положение макрочастицы с использованием того же сеточного ядра:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}_{p,\alpha}) &= \sum_{i,j} \mathbf{E}_{i,j} R_p(\mathbf{r}_{i,j} - \mathbf{r}_{p,\alpha}), \\ \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{r}_{p,\alpha}) &= \sum_{i,j} \mathbf{B}_{i,j} R_p(\mathbf{r}_{i,j} - \mathbf{r}_{p,\alpha}). \end{aligned}$$

При вычислении плотности заряда пучка, как было сказано выше, необходимо учитывать, что заряд частицы пучка вносит вклад в два соседних слоя плазмы. Рассмотрим частицы пучка, заключённые между k и $k + 1$ слоями плазмы, и дадим этому толстому слою частиц пучка порядковый номер k . Тогда вклад макрочастиц пучка этого слоя в плазменные слои k и $k + 1$ рассчитывается как

$$\begin{aligned}\rho_{b,k}(\mathbf{r}_{i,j}) &= \rho_b(\mathbf{r}_{i,j}, \xi_k) = \sum_{\alpha} Q_{b,\alpha} R_p(\mathbf{r}_{i,j,k} - \mathbf{r}_{b,\alpha}), \\ \rho_{b,k+1}(\mathbf{r}_{i,j}) &= \rho_b(\mathbf{r}_{i,j}, \xi_{k+1}) = \sum_{\alpha} Q_{b,\alpha} R_p(\mathbf{r}_{i,j,k+1} - \mathbf{r}_{b,\alpha}),\end{aligned}$$

где ξ_k и ξ_{k+1} — продольная координата плазменных слоёв с номерами k и $k + 1$ соответственно. Для любого слоя с порядковым номером k имеем $\xi_k = -k\Delta\xi$. Таким образом, чтобы вычислить электромагнитные поля на плазменном слое k , необходимо сначала рассчитать вклад в плотность заряда от частиц пучка со слоёв $k - 1$ и k .

При вычислении электрического и магнитного полей, которые действуют на частицу пучка на слое $k - 1$, необходимо интерполировать поля с плазменных слоёв $k - 1$ и k :

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}_{b,\alpha}) &= \sum_{i,j} \mathbf{E}_{i,j,k-1} R_b(\mathbf{r}_{i,j,k-1} - \mathbf{r}_{b,\alpha}) + \sum_{i,j} \mathbf{E}_{i,j,k} R_b(\mathbf{r}_{i,j,k} - \mathbf{r}_{b,\alpha}), \\ \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{r}_{b,\alpha}) &= \sum_{i,j} \mathbf{B}_{i,j,k-1} R_b(\mathbf{r}_{i,j,k-1} - \mathbf{r}_{b,\alpha}) + \sum_{i,j} \mathbf{B}_{i,j,k} R_b(\mathbf{r}_{i,j,k} - \mathbf{r}_{b,\alpha}).\end{aligned}$$

1.5 Численная схема одного шага по времени

В уравнениях (1.14)–(1.15), почти все величины в правых частях доступны для расчёта электромагнитных полей сразу после этапа раскладки макрочастиц на сетку плотности заряда и тока. Исключением являются производные $\partial_{\xi} j_x$ и $\partial_{\xi} j_y$. В численных алгоритмах, основанных на квази-

статическом приближении, данные производные могут быть получены с помощью явного интегрирования [22], либо с помощью схемы предиктор-корректор (см., например, [23]).

Идея схемы предиктор-корректор состоит в том, чтобы сначала оценить параметры плазмы на новом шаге, а после уточнить их. Эта схема, являющаяся модификацией стандартной схемы в PIC методе (см. раздел 1.1), состоит из нескольких шагов, реализующих расчёт плазменного отклика на одном плазменном слое с порядковым номером k и с продольной координатой $\xi_k = -k\Delta\xi$, если известна вся информация на предыдущем плазменном слое $\xi_{k-1} = \xi_k + \Delta\xi$:

1. На плазменном слое $k - 1$ макрочастицы плазмы раскладываются на сетку плотности заряда и тока;
2. Макрочастицы плазмы передвигаются на слой k , двигаясь поперечно полями со слоя $k - 1$, то есть происходит оценка параметров макрочастиц плазмы на слое k ;
3. Макрочастицы плазмы раскладываются на сетку плотности заряда и тока на слое k ;
4. Используя плотности заряда и тока со слоёв k и $k-1$, рассчитываются производные $\partial_\xi j_x$ и $\partial_\xi j_y$ и вычисляются поля на слое k ;
5. Макрочастицы плазмы снова передвигаются на слой k , но теперь двигаются в поперечном направлении с использованием поля, равного полусумме полей на слоях $k - 1$ и k . Происходит уточнение параметров макрочастиц плазмы на слое k ;
6. Шаги 3-5 повторяются ещё раз, дополнительно уточняя параметры плазмы на новом слое.

Дополняя описанную выше схему расчёта отклика плазмы вычислением динамики пучка, численная схема одного шага по времени Δt строится следующим образом:

1. Макрочастицы пучка раскладываются на сетку плотности заряда и тока;
2. Рассчитывается отклик плазмы во всём окне;
3. Макрочастицы пучка двигаются с помощью вычисленных электромагнитных полей.

Численный алгоритм, построенный на описанных в данной главе принципах, лежит в основе трёхмерного кода для моделирования плазменного кильватерного ускорения в квазистатическом приближении LCODE 3D. После реализации данного численного алгоритма на интерпретируемом языке программирования Python тестирование нового кода показало наличие развивающихся численных шумов, которые не позволяли моделировать долговременную эволюцию кильватерной волны в плазме. Увеличению стабильности кода по отношению к численным шумам и тестированию корректности результатов моделирования посвящена глава 2 данной работы. Кроме того, изначально код LCODE 3D показывал крайне низкую скорость вычислений из-за выбора Python в качестве языка разработки. Техникам ускорения вычислений посвящена глава 3.

2 Численные шумы и корректность расчётов кода LCODE 3D

В данной главе будут рассмотрены некоторые особенности трёхмерного PIC моделирования, связанные с возникновением численных шумов, и методы уменьшения этих шумов [18]. PIC код, использованный в данной главе — код LCODE 3D, основы численного алгоритма которого рассмотрены в главе 1 данной работы.

2.1 Основные численные шумы в PIC моделировании

Моделирование PIC кодами может включать в себя численные ошибки, не связанные с реальными физическими процессами, в том числе численный нагрев [24–27]. Другой причиной численных шумов может стать относительное колебание количества макрочастиц в ячейке во время моделирования, которое вызывает нефизическое изменение значений электромагнитного поля на сетке, что приводит к дополнительной мгновенной нефизической силе, действующей на макрочастицы. Численные шумы также могут быть связаны с особенностью решения уравнений Максвелла на сетке [28]. Интегрированные в течение длительного периода времени, эти эффекты могут суммироваться, и после достаточно большого числа шагов результатам моделирования уже нельзя доверять.

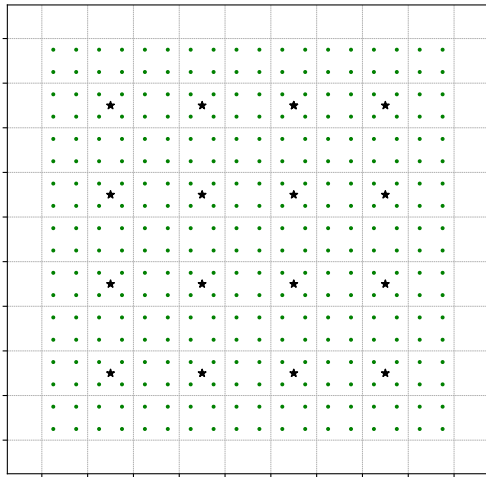
В основном, невозможно полностью устранить рассмотренные выше источники численных шумов, возможно только ослабить их. Некоторые основные методы подавления численного нагрева включают в себя использование сеточного ядра частиц более высокого порядка, более сложных схем интерполяции и разложения плотности заряда и тока на сетку [29], или просто уменьшение пространственной сетки [30]. Большое количество возможных источников численных шумов и их разное влияние на моделирование в зависимости от выбранного численного алгоритма означает, что для каждого кода необходимо отдельно подбирать методы подавления.

При начальном тестировании нового кода LCODE 3D было обнаружено, что на этапе расчёта отклика плазмы возникают численные шумы, сильно влияющие на результаты моделирования в длинных окнах моделирования. Для подавления численных шумов мы выявили два наиболее эффективных метода: использование сеточных ядер более высокого порядка и новый предложенный А. П. Соседкиным метод движения и разложения на сетку макрочастиц плазмы, называемый двойным плазменным представлением [18].

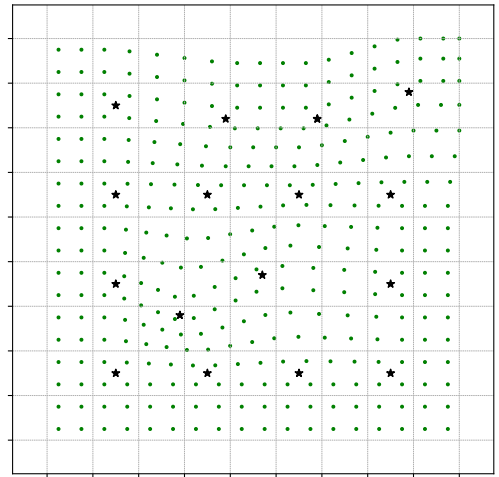
2.2 Двойное плазменное представление

Одним из численных эффектов, приводящих к нарастанию численного шума, является “слипание” макрочастиц плазмы. “Слипание” происходит в изначально холодной плазме из-за некорректного вычисления взаимодействия между частицами, если они находятся в одной или в соседних ячейках.

Мы предлагаем новый метод решения этой проблемы, называемый двойным плазменным представлением. Идея состоит в том, чтобы представить плазму в моделировании двумя наборами частиц (рис. 2.1). Первый набор состоит из редко расположенных “реальных” частиц, например, одна ча-



Невозмущённая плазма



Возмущённая плазма

Рисунок 2.1: Схематичное расположение «реальных» (черные звезды) и «виртуальных» (зеленые точки) макрочастиц плазмы с использованием метода двойного плазменного представления.

стица на 4 или 9 ячеек. Эти частицы двигаются как обычные частицы в PIC моделировании согласно тем же уравнениям движения. Второй набор является «виртуальным», с большим количеством частиц на ячейку, и существует только на этапе вычисления плотностей заряда и тока плазмы на сетке. Параметры «виртуальных» частиц получаются из первого набора путем билинейной интерполяции параметров соседних «реальных» частиц. Вблизи свободной границы плазмы параметры «виртуальных» частиц определяются одной или двумя ближайшими «реальными» частицами.

2.3 Сеточное ядро более гладкой формы

Как было сказано в разделе 1.4, обычно в численных PIC алгоритмах используются параболическое сеточное ядро (1.24) для вычисления плотностей заряда и тока плазмы на сетке и для интерполяции электромагнитного поля на положения макрочастиц плазмы. Однако при квазистатическом моделировании долговременной эволюции плазменной волны частицы плазмы многократно пересекают границы между ячейками. Каж-

дый переход приводит к численной ошибке, которая возникает из-за не бесконечно-гладкой функции сеточного ядра. Чтобы уменьшить ошибку, которая непрерывно накапливается со временем и значительно ухудшает качество результатов моделирования, мы предлагаем использовать сеточное ядро более высокого порядка как для разложения параметров макро-частиц плазмы на сетку плотностей заряда и тока, так и для интерполяции полей на положения макрочастиц плазмы. Следующее сеточное ядро имеет третий порядок гладкости и генерирует меньше шума:

$$R_p(x) = \begin{cases} \frac{115}{192h} - \frac{5x^2}{8h^3} + \frac{x^4}{4h^5}, & |x| \leq \frac{1}{2}h, \\ \frac{55}{96h} + \frac{5|x|}{24h^2} - \frac{5x^2}{4h^3} + \frac{5|x|^3}{6h^4} - \frac{x^4}{6h^5}, & \frac{1}{2}h < |x| \leq \frac{3}{2}h, \\ \frac{1}{24h} \left(\frac{|x|}{h} - \frac{5}{2} \right)^4, & \frac{3}{2}h < |x| \leq \frac{5}{2}h, \\ 0, & |x| > \frac{5}{2}h, \end{cases} \quad (2.1)$$

где h — размер шага пространственной сетки.

2.4 Тестирование корректности расчётов отклика плазмы

Для проверки корректности расчётов отклика плазмы с помощью плазменного решателя мы используем так называемый AWAKE Тест 1 [31]. В тесте исследуется долговременная эволюцию плазменной волны малой амплитуды, генерируемая коротким протонным пучком. Форма пучка не меняется в сопутствующем окне моделирования и определяется аналитически:

$$\rho_b(r, \xi) = \begin{cases} \frac{\rho_{b,0}}{2} \exp\left(\frac{-r^2}{2\sigma_r^2}\right) \left[1 - \cos\left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\xi}{\sigma_z}\right)\right], & -2\sqrt{2\pi} < \frac{\xi}{\sigma_z}, \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases} \quad (2.2)$$

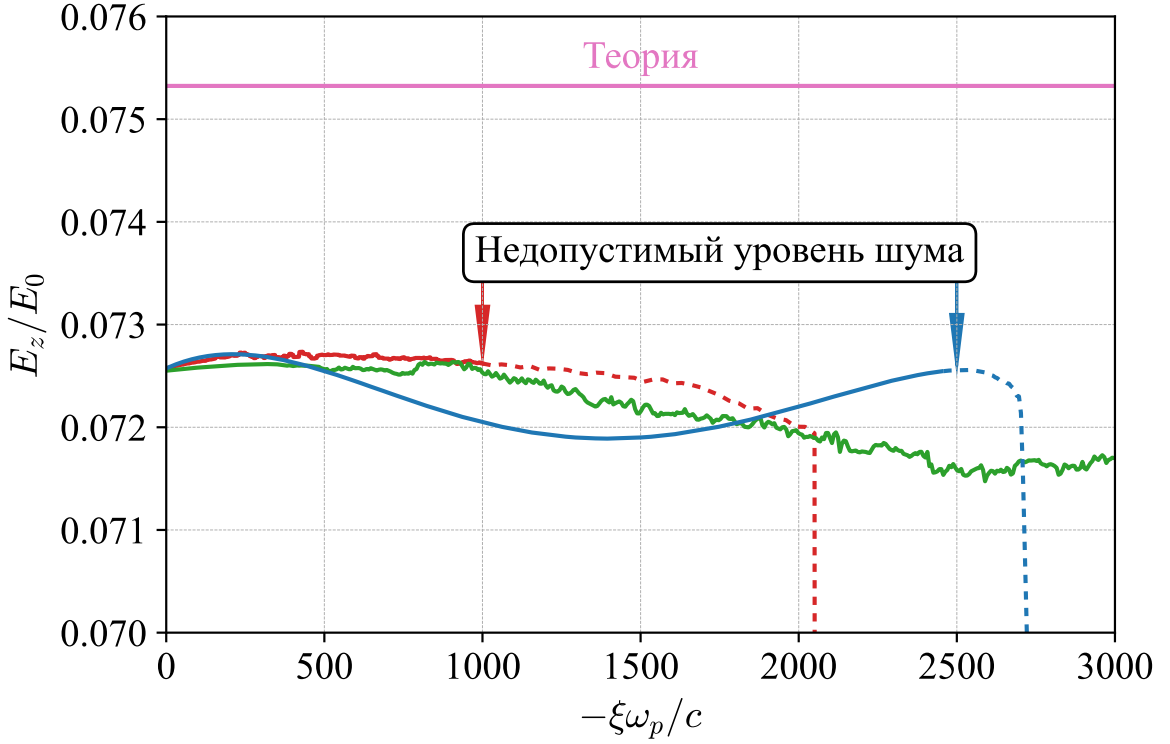


Рисунок 2.2: Положительные локальные максимумы продольного электрического поля E_z на оси в тесте 1, вычисленные с помощью LCODE (зеленая линия), LCODE 3D с использованием обычного (красная линия) и улучшенного (синяя линия) решателей.

где r — поперечная координата. Параметры пучка

$$\sigma_r = c/\omega_p, \quad \sigma_z = c/\omega_p, \quad \rho_{b,0} = 0,1n_0. \quad (2.3)$$

Ионы плазмы неподвижны.

Сравним результаты моделирование, полученные с помощью “обычного” плазменного PIC решателя с частицами параболической формы и с помощью “улучшенного” решателя, который включает двойное плазменное представление и сеточное ядро более высокого порядка. В обоих случаях ширина окна составляет $15,37c/\omega_p$ в поперечном направлении, шаг сетки $\Delta x = \Delta y = \Delta \xi = 0,01c/\omega_p$. Для описания плазмы используются 90 601 “настоящих” макрочастиц.

Мы фокусируемся на двух параметрах: амплитуде волны, которая должна быть почти постоянной на протяжении сотен периодов волны (рис. 2.2),

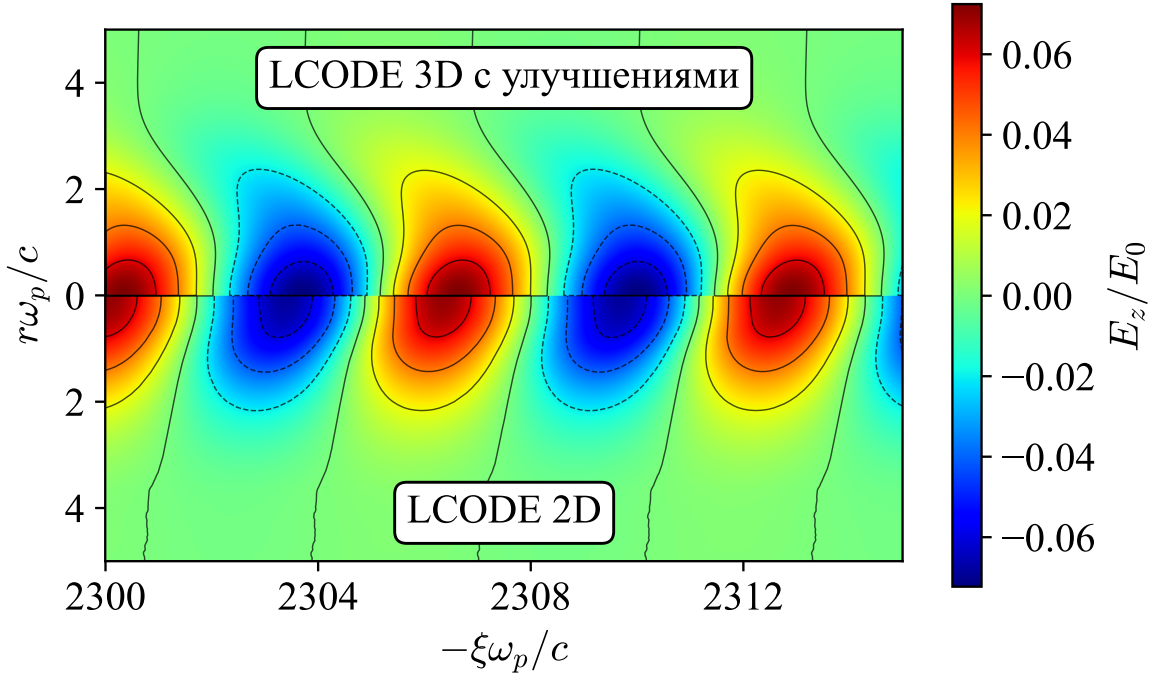


Рисунок 2.3: Сравнение профилей поля после долговременной эволюции волны.

и периоде волны, который должен быть близок к $2\pi\omega_p^{-1}$. Амплитуда волны может быть приблизительно рассчитана с помощью линейной теории для кильватерного ускорения [32], но здесь мы стремимся к большей точности и сравниваем наши результаты с моделированием LCODE высокого разрешения (с шагом сетки $\Delta r = \Delta \xi = 0,005c/\omega_p$), которое учитывает нелинейные эффекты.

Согласно линейной теории, продольное электрическое поле на оси колеблется с постоянной амплитудой $E_{z,max} = 0,07532E_0$. Из-за нелинейных эффектов амплитуда при моделировании меньше. Как обычные, так и улучшенные плазменные решатели воспроизводят это уменьшение амплитуды с той же точностью, что и LCODE. Период волны также зависит от нелинейных эффектов [33] и в обоих случаях превышает $2\pi\omega_p^{-1}$ на 0,07%, что близко к значению 0,053%, полученному с помощью LCODE. Разница, вероятно, возникает из-за разной геометрии численных алгоритмов кодов и/или разного разрешения. Двумерные карты поля E_z после длительного времени эволюции волны также показывают хорошее совпадение резуль-

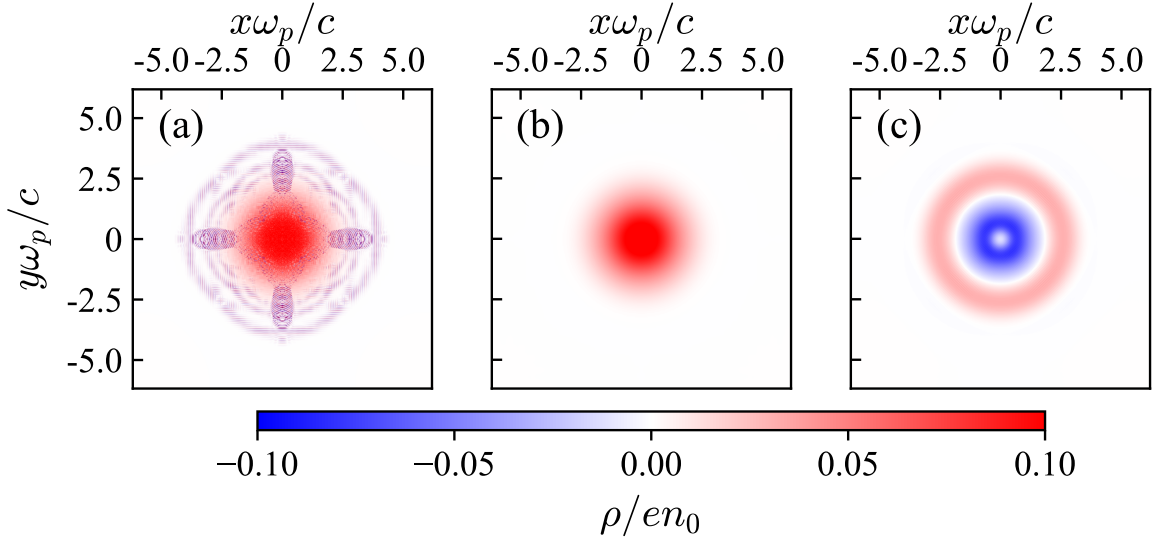


Рисунок 2.4: Поперечные распределения плотности заряда плазмы: (а) обычный плазменный решатель, $\xi = -1000c/\omega_p$, (б) улучшенный плазменный решатель, $\xi = -1000c/\omega_p$, и (с) улучшенный плазменный решатель, $\xi = -2300c/\omega_p$.

татов моделирования с помощью разных кодов, если сделать поправку на небольшую разницу в периодах (рис. 2.3).

Разница между обычным и улучшенным плазменными решателями видна в поперечных распределениях плотности заряда плазмы (рис. 2.4). Обычный решатель дает очень зашумлённый результат вычислений, и этот шум в конечном итоге приводит к быстрому разрушению волны (рис. 2.2). Усовершенствованный решатель также не свободен от численных шумов, и эти шумы также приводят к разрушению волны. Однако профили амплитуды волны и плотности плазмы воспроизводятся правильно практически до момента коллапса волны.

Таким образом, предложенные методы шумоподавления позволяют моделировать эволюцию плазменной волны с помощью квазистатического трехмерного кода LCODE 3D до нескольких сотен волновых периодов. Возможность моделирования в таком крайне длинном окне выгодно отличает разработанный код LCODE 3D от других PIC кодов, которые используются для численного изучения плазменного кильватерного ускорения.

2.5 Тестирование корректности расчётов динамики пучка

Для проверки корректности расчётов динамики пучка рассматривается задача, похожая на задачу из раздела 2.4. Выбирается окно моделирования, ограниченное по продольной координате $L_\xi = -5c/\omega_p$, с шагом сетки $\Delta x = \Delta y = \Delta \xi = 0,01c/\omega_p$, и шагом по времени для пучка $\Delta t = 10\omega_p^{-1}$. Пучок теперь не является статичным и может эволюционировать во времени, его поперечное распределение осесимметричное (таблица 2.1), поэтому мы можем сравнивать динамику пучка, вычисленную с помощью двумерного осесимметричного кода LCODE и трёхмерного кода LCODE 3D.

Таблица 2.1: Основные начальные параметры пучка в моделировании

Распределение плотности заряда $\rho_b(r, \xi)$	аналогично (2.2) с параметрами (2.3)
Продольный импульс частиц пучка	$1000m_e c$, одинаковый для всех частиц
Распределение в поперечном импульсном пространстве $f_\perp(p_x, p_y)$	Гауссово с постоянным угловым разбросом $\alpha_b = 10^{-5}$
Сорт частиц пучка	позитроны
Полное число одинаковых макрочастиц пучка	$\sim 10^6$

Начальные распределения и продольные электрические поля на оси после одного шага в случае моделирования двумерным кодом LCODE и трёхмерным кодом LCODE 3D крайне близки (рис. 2.5). После ста шагов по времени, когда $t = 100\Delta t = 1000\omega_p^{-1}$, распределения и продольные элек-

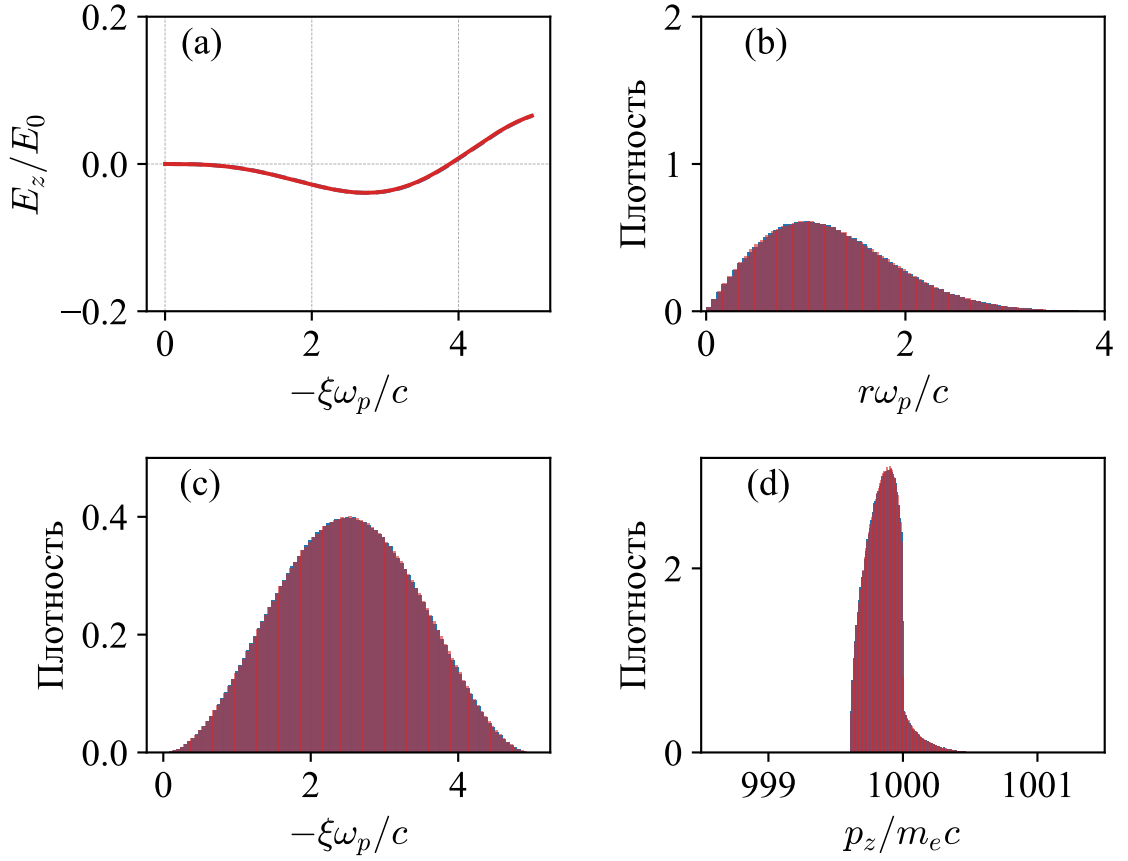


Рисунок 2.5: Результаты моделирования разными кодами после первого шага по времени, $t = 10\omega_p^{-1}$. Везде синий или штрихованный синий — LCODE, красный — LCODE 3D: (a) продольное электрическое поле E_z на оси, (b) гистограмма плотности распределения частиц пучка по радиусу, (c) гистограмма плотности распределения частиц пучка по продольной координате ξ , (d) гистограмма плотности распределения частиц пучка по продольному импульсу. Все гистограммы нормированы так, чтобы площадь под каждой равнялась единице.

трические поля также близки (рис. 2.6), небольшие различия объясняются различной геометрией. Несмотря на то, что был выбран изначально осесимметричный пучок, всё равно появляются различия при моделировании в трёхмерной геометрии из-за ненулевого начального разброса по поперечным импульсам $\mathbf{p}_{\perp,b}$.

В результате тестирования можно сделать вывод, что разработанный трёхмерный код LCODE 3D может использоваться для моделирования трёхмерной эволюции не только плазменной волны, но и пучков заряженных

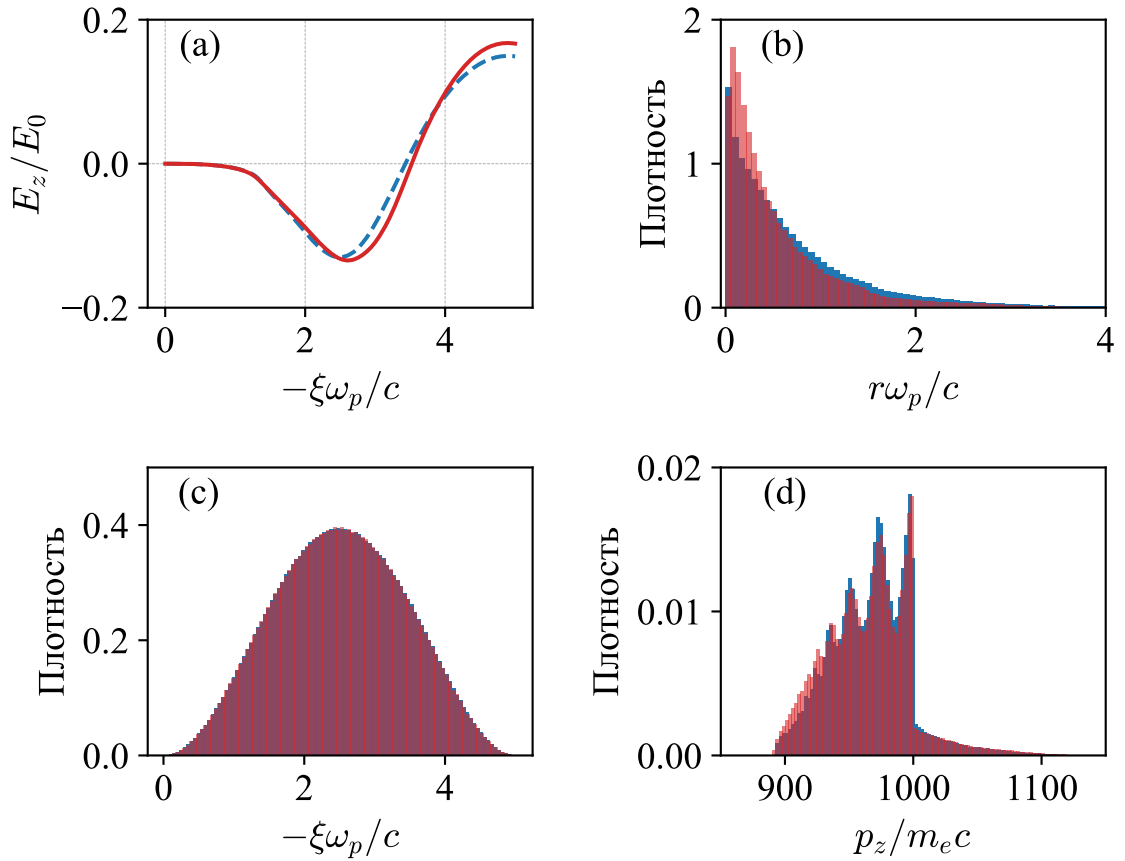


Рисунок 2.6: Результаты моделирования кодами после ста шагов по времени, $t = 1000\omega_p^{-1}$. Везде синий или штрихованный синий — LCODE, красный — LCODE 3D: (a) продольное электрическое поле на оси E_z , (b) гистограмма плотности распределения частиц пучка по радиусу, (c) гистограмма плотности распределения частиц пучка по продольной координате ξ , (d) гистограмма плотности распределения частиц пучка по продольному импульсу. Все гистограммы нормированы так, чтобы площадь под каждой равнялась единице.

частиц на протяжении сотен шагов по времени.

3 Быстродействие кода LCODE 3D

Новый код LCODE 3D разработан на интерпретируемом языке программирования Python, который не обеспечивает такую же скорость работы, как, например, компилируемый язык программирования C++, но позволяет приблизиться к ней за счёт использования сторонних библиотек, реализованных на компилируемых языках. Таким образом, наличие у языка программирования Python большого количества поддерживаемых библиотек упрощает разработку и поддержку нового кода. Стоит отметить, что на том же языке происходит и практически вся обработка результатов моделирования. Перечисленные факты обосновывают использование языка Python для разработки кода LCODE 3D, и в данной главе будут рассмотрены основные техники и использованные библиотеки языка Python, позволившие значительно увеличить скорость работы нового кода LCODE 3D при вычислениях на центральном процессоре (CPU) или графическом процессоре (GPU).

3.1 Методы ускорения вычислений PIC кодов

Решение реальных задач в области кильватерного ускорения с помощью численных методов зачастую требует моделирования структур субмикронного масштаба, распространяющихся на метровые расстояния. По этой причине для моделирования таких задач с помощью полностью явных электромагнитных PIC кодов необходимы расчёты с миллионами временных шагов, чего требует критерий Куранта – Фридрихса – Леви [34].

Численные схемы, позволяющие обойти это ограничение и увеличить временные шаги, включают в себя квазистатический подход, описанный в главе 1, и метод PIC моделирования в так называемом Лоренц-ускоренном окне [35]. Оба метода доказали свою эффективность для моделирования кильватерного ускорения и успешно используются сегодня [16, 36].

Помимо алгоритмических улучшений, дальнейшего ускорения вычислений можно достигнуть за счёт улучшения аппаратного обеспечения. В частности, использование графических процессоров становится всё более популярным методом ускорения вычислений, в том числе PIC моделирования [37]. Для квазистатических PIC кодов были разработаны специализированные методы параллелизации численного алгоритма на многопроцессорные системы, имеющие несколько центральных или графических процессоров [15, 38, 39]. Но прежде чем производить параллелизацию численного алгоритма кода LCODE 3D на случай большого числа процессоров, мы оптимизировали работу кода на однопроцессорных устройствах.

3.2 Ускорение вычислений на CPU

Наиболее требовательными на компьютерные ресурсы элементами численной схемы кода LCODE 3D являются алгоритмы решения уравнений на электромагнитные поля на сетке. Основным инструментом для увеличения скорости работы данных алгоритмов на CPU являются библиотеки NumPy и Numba. NumPy позволяет хранить и эффективно оперировать с массивами любых размеров. В том числе, в данной библиотеке реализованы быстрые векторизованные операции линейной алгебры, имеющие простой и понятный интерфейс.

Библиотека NumPy не позволяет ускорить работу кода в случае, когда численный алгоритм не может быть эффективно векторизован. В данном случае в коде LCODE 3D используется библиотека just-in-time компиляции

Numba, которая позволяет компилировать код, написанный на Python, в оптимизированный машинный код. Кроме того, библиотека Numba может провести автоматическую параллелизацию программы на несколько вычислительных ядер в случае многоядерного процессора. Для эффективного использования библиотеки Numba, как и библиотеки NumPy, необходимо использовать только допустимые операции, но набор таких операций крайне обширен.

3.3 Ускорение вычислений на GPU

Численный алгоритм кода LCODE 3D для центрального процессора не сильно отличается от модификации LCODE 3D, использующей для вычислений графический процессор. Библиотеки, использованные для ускорения работы кода на графическом процессоре CuPy и Numba.cuda являются практически полной аналогией библиотек NumPy и Numba. Главной особенностью LCODE 3D для GPU является то, что в используемых библиотеках CuPy и Numba.cuda нет реализации дискретных синусного DST-I (Discrete Sine Transform) и косинусного DCT-I (Discrete Cosine Transform) преобразований первого типа, необходимых для решения сеточных уравнений на электромагнитные поля (см. уравнения (A.1)–(A.2) и далее в Приложении A). По этой причине эти преобразования необходимо выразить через дискретное преобразование Фурье DFT (Discrete Fourier Transform) [40], имеющееся в арсенале библиотеки CuPy, с помощью пошагового алгоритма [41, 42]. Возможность запуска двумерного DFT на одном графическом процессоре вместо параллельного DFT на многих CPU имеет здесь решающее значение для обеспечения хорошей производительности, учитывая, что параллельная реализация DFT требует большого объема обмена данных между процессорами.

Рассмотрим все действия по порядку для одномерного массива

$$A_0 = [a_1, a_2, \dots, a_{n-1}, a_n].$$

Для построения численного алгоритма, использующего дискретное преобразование Фурье DFT, и результат которого равен тому, который получается в случае использования дискретного синусного преобразования DST-I, необходимо провести следующие операции над изначальным массивом A_0 :

1. Добавить нули по краям начального массива и дополнить его справа антисимметрично:

$$A_{supp} = [0, a_1, a_2, \dots, a_{n-1}, a_n, 0, -a_n, -a_{n-1}, \dots, -a_2, -a_1];$$

2. К получившемуся массиву применить быстрое преобразование Фурье: $A_f = \text{DFT}(A_{supp})$;
3. Взять мнимую часть от элементов массива: $I = \text{Im}(A_f)$;
4. Выделить из массива элементы, имеющих порядковые номера $2, 3, \dots, n, n + 1$, в новый массив: $I_{cut} = I_{2,3,\dots,n,n+1}$;
5. В получившемся новом массиве все элементы необходимо умножить на -1: $I_{result} = -I_{cut}$.

Вычисленный таким образом итоговый массив равен массиву, который получается при применении дискретного синусного преобразования к первоначальному:

$$I_{result} = \text{DST-I}(A_0).$$

Для случая дискретного косинусного преобразования DST-II необходимо провести следующие операции:

1. Добавить справа симметричный массив с обрезанными краями:

$$A_{supp} = [a_1, a_2, \dots, a_{n-1}, a_n, a_{n-1}, a_{n-2}, \dots, a_3, a_2];$$

2. К получившемуся массиву применить быстрое преобразование Фурье: $A_f = \text{DFT}(A_{supp})$;
3. Взять вещественную часть от элементов массива: $R = \text{Re}(A_f)$;
4. Необходимо выделить из массива элементы, имеющие порядковые номера $1, 2, \dots, n$, в новый массив: $R_{result} = R_{2,3,\dots,n}$.

Вычисленный таким образом итоговый массив равен массиву, который получается при применении дискретного косинусного преобразования к первоначальному:

$$R_{result} = \text{DCT-I}(A_0).$$

Численное решение только разностных задач на центральном процессоре занимает значительную часть всего времени моделирования. Поэтому, в совокупности с переносом алгоритма раскладки макрочастиц на плотность заряда и тока и функции движения макрочастицы на графический процессор, итоговое время моделирования одного шага по ξ уменьшается на порядки по сравнению с вычислениями на процессоре.

3.4 Тестирование быстродействия LCODE 3D на CPU и GPU

Для тестирования быстродействия кода LCODE 3D была взята задача, рассмотренная в разделе 2.4 данной работы, но с ограниченной продольной длиной окна $L_\xi = -10c/\omega_p$ и с варьируемыми поперечными и продольными шагами, но при сохранении условия $\Delta x = \Delta y = \Delta \xi$. Выбор этой

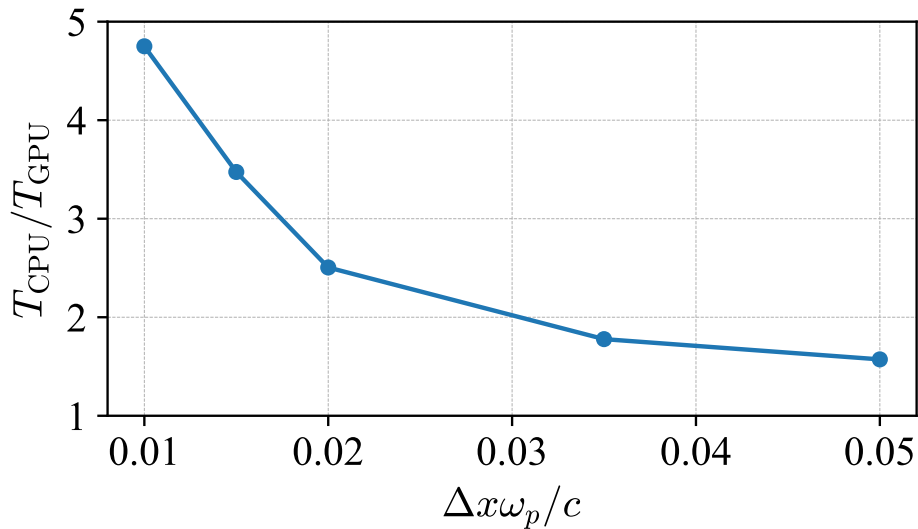


Рисунок 3.1: Повышение скорости работы кода LCODE 3D на GPU в сравнении с ускоренными вычислениями на CPU.

задачи обусловлен тем, что в большинстве случаев компьютерные затраты на расчёт отклика плазмы составляют львиную долю всех компьютерных затрат квазистатических PIC кодов. Изначальная версия кода LCODE 3D, реализованная для CPU, не оптимизированная и не ускоренная, требовала в десятки раз больше времени на вычисление рассматриваемой задачи, чем ускоренный для CPU код. Результаты увеличения скорости работы кода LCODE 3D на GPU относительно CPU показаны на рисунке 3.1, где T_{CPU}/T_{GPU} — отношение времени моделирования ускоренной версией кода LCODE 3D для CPU к времени моделирования с помощью версии кода, ускоренной для GPU. Вычисления производились на процессоре Intel i7-7700HQ и “игровой” видеокарте NVIDIA GeForce GTX 1050 Ti.

Разница во времени работы версий кода LCODE 3D достигает пятикратных значений при малом размере шага пространственной сетки окна моделирования, но приближается к единице при большом размере шага сетки. Это объясняется тем, что в случае многих операций, в том числе дискретного преобразования Фурье DFT, эффективность вычислений на графическом процессоре повышается при увеличении размера массива, над которым производят операцию. По этой причине при малом размере шага

сетки, когда операции производятся над массивами примерно 1500×1500 , и наблюдается заметное превосходство GPU в скорости работы.

Реализованные техники ускорения вычислений заметно снижают время моделирования задач в сравнении с неоптимизированной версией кода LCODE 3D. Дальнейшего ускорения можно достигнуть за счёт параллелизации численного алгоритма для проведения вычислений на многопроцессорных системах, имеющих в распоряжении несколько CPU или несколько GPU.

Заключение

Данная работа представляет новый код для трёхмерного моделирования плазменного кильватерного ускорения в квазистатическом приближении LCODE 3D. Описаны физические уравнения и предположения, лежащие в основе метода частиц в ячейках и квазистатического приближения, и как, совмещая эти два подхода, строится численный алгоритм трёхмерного квазистатического PIC кода. Для разработанного на данной основе кода LCODE 3D предложены методы, повышающие устойчивость по отношению к численным нефизическим шумам. Тестирование кода LCODE 3D с использованием методов шумоподавления показало, что LCODE 3D может использоваться для моделирования долговременной эволюции плазменной волны и динамики пучков заряженных частиц. Представлены техники оптимизации численного алгоритма кода LCODE 3D для эффективных вычислений на CPU и GPU, которые позволили заметно снизить временные затраты на моделирование с помощью нового кода. Таким образом, новый код LCODE 3D готов к использованию для моделирования трёхмерных задач кильватерного ускорения.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- [1] Achievement of 35 MV/m in the superconducting nine-cell cavities for TESLA / L. Lilje, E. Kako, D. Kostin et al. // [Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment](#). — 2004. — Vol. 524, no. 1. — P. 1–12.
- [2] Tajima T., Dawson J. M. Laser Electron Accelerator // [Phys. Rev. Lett.](#) — 1979. — Jul. — Vol. 43. — P. 267–270.
- [3] Acceleration of Electrons by the Interaction of a Bunched Electron Beam with a Plasma / Pisin Chen, J. M. Dawson, Robert W. Huff, T. Katsouleas // [Phys. Rev. Lett.](#) — 1985. — Feb. — Vol. 54. — P. 693–696.
- [4] Overview of plasma-based accelerator concepts / E. Esarey, P. Sprangle, J. Krall, A. Ting // [IEEE Transactions on Plasma Science](#). — 1996. — Vol. 24, no. 2. — P. 252–288.
- [5] Electron acceleration from the breaking of relativistic plasma waves / A. Modena, Z. Najmudin, A. E. Dangor et al. // [Nature](#). — 1995. — Oct. — Vol. 377, no. 6550. — P. 606–608.
- [6] Energy-Spread Preservation and High Efficiency in a Plasma-Wakefield Accelerator / C. A. Lindstrøm, J. M. Garland, S. Schröder et al. // [Phys. Rev. Lett.](#) — 2021. — Jan. — Vol. 126. — P. 014801.
- [7] Directions in plasma wakefield acceleration / B. Hidding, B. Foster,

- Mark Hogan et al. // [Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences](#). — Vol. 377. — P. 20190215.
- [8] Костюков Игорь Юрьевич, Пухов А. М. Плазменные методы ускорения электронов: современное состояние и перспективы // [Успехи физических наук](#). — 2015. — Т. 185, № 1. — С. 89–96.
- [9] Hockney R.W., Eastwood J.W. [Computer Simulation Using Particles](#). — CRC Press, 2021. — ISBN: [1439822050](#).
- [10] Birdsall C.K., Langdon A.B. [Plasma Physics via Computer Simulation](#). Series in Plasma Physics and Fluid Dynamics. — Taylor & Francis, 2004. — ISBN: [9780750310253](#).
- [11] Vay Jean-Luc, Lehe Rémi. Simulations for Plasma and Laser Acceleration // [Reviews of Accelerator Science and Technology](#). — Vol. 09. — P. 165–186.
- [12] Sprangle P., Esarey E., Ting A. Nonlinear interaction of intense laser pulses in plasmas // [Phys. Rev. A](#). — 1990. — Apr. — Vol. 41. — P. 4463–4469.
- [13] Mora Patrick, Antonsen Thomas M. Electron cavitation and acceleration in the wake of an ultraintense, self-focused laser pulse // [Phys. Rev. E](#). — 1996. — Mar. — Vol. 53. — P. R2068–R2071.
- [14] Lotov K. V. Fine wakefield structure in the blowout regime of plasma wakefield accelerators // [Physical Review Special Topics – Accelerators and Beams](#). — 2003. — 05. — Vol. 6, no. 6. — P. 061301.
- [15] Sosedkin A. P., Lotov K. V. LCODE: A parallel quasistatic code for computationally heavy problems of plasma wakefield acceleration // [Nuclear](#)

Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. — 2016. — Vol. 829. — P. 350–352. — 2nd European Advanced Accelerator Concepts Workshop - EAAC 2015.

- [16] Proton beam defocusing in AWAKE: comparison of simulations and measurements / A A Gorn, M Turner, E Adli et al. // [Plasma Physics and Controlled Fusion](#). — 2020. — nov. — Vol. 62, no. 12. — P. 125023.
- [17] Dissipation of electron-beam-driven plasma wakes / Rafal Zgadzaj, T. Silva, V. K. Khudiyakov et al. // [Nature Communications](#). — 2020. — Sep. — Vol. 11, no. 1. — P. 4753.
- [18] [Methods for Numerical Noise Mitigation in Quasistatic Three-Dimensional Particle-in-Cell Code LCODE3D](#) / I.Yu. Kargapolov, K.V. Lotov, I.A. Shalimova et al. // Proc. IPAC'21. — International Particle Accelerator Conference no. 12. — JACoW Publishing, Geneva, Switzerland, 2021. — 08. — P. 1725–1727.
- [19] Tuev P. V., Spitsyn R. I., Lotov K. V. Advanced quasistatic approximation. — 2022.
- [20] Higuera A. V., Cary J. R. Structure-preserving second-order integration of relativistic charged particle trajectories in electromagnetic fields // [Physics of Plasmas](#). — 2017. — Vol. 24, no. 5. — P. 052104.
- [21] Вшивков В. А., Терехов А. В. О самодействии в методе частиц в ячейках // Вычислительные Методы И Программирование: Новые Вычислительные Технологии. — Т. 9, № 1. — С. 48–57.
- [22] Wang Tianhong, Khudik Vladimir, Kim Jihoon, Shvets Gennady. WAND-PIC: an accelerated three-dimensional quasi-static particle-in-cell code. — 2020.

- [23] QUICKPIC: A highly efficient particle-in-cell code for modeling wake-field acceleration in plasmas / C. Huang, V.K. Decyk, C. Ren et al. // [Journal of Computational Physics](#). — 2006. — Vol. 217, no. 2. — P. 658–679.
- [24] Hockney R.W. Measurements of collision and heating times in a two-dimensional thermal computer plasma // [Journal of Computational Physics](#). — 1971. — Vol. 8, no. 1. — P. 19–44.
- [25] Langdon A.Bruce. Effects of the spatial grid in simulation plasmas // [Journal of Computational Physics](#). — 1970. — Vol. 6, no. 2. — P. 247–267.
- [26] Lindman E.L. Dispersion relation for computer-simulated plasmas // [Journal of Computational Physics](#). — 1970. — Vol. 5, no. 1. — P. 13–22.
- [27] Vshivkov V.A., Romanov Dmitry, Snytnikov Valeriy. The problem of spontaneous heating of a model plasma in the method of particles // [Computational technologies](#). — Vol. 4, no. 3. — P. 62–72.
- [28] Numerical methods for instability mitigation in the modeling of laser wakefield accelerators in a Lorentz-boosted frame / J.-L. Vay, C.G.R. Geddes, E. Cormier-Michel, D.P. Grote // [Journal of Computational Physics](#). — 2011. — Vol. 230, no. 15. — P. 5908–5929.
- [29] Esirkepov T.Zh. Exact charge conservation scheme for Particle-in-Cell simulation with an arbitrary form-factor // [Computer Physics Communications](#). — 2001. — Vol. 135, no. 2. — P. 144–153.
- [30] Unphysical kinetic effects in particle-in-cell modeling of laser wakefield accelerators / Estelle Cormier-Michel, B. A. Shadwick, C. G. R. Geddes et al. // [Phys. Rev. E](#). — 2008. — Jul. — Vol. 78. — P. 016404.

- [31] Lotov K.V. AWAKE-related benchmarking tests for simulation codes // [Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment](#). — 2018. — Vol. 909. — P. 446–449. — 3rd European Advanced Accelerator Concepts workshop (EAAC2017).
- [32] Chen Pisin. Grand Disruption: A Possible Final Focusing Mechanism for Linear Colliders // [Part. Accel.](#) — 1987. — Vol. 20. — P. 171–182.
- [33] Lotov K. V. Excitation of two-dimensional plasma wakefields by trains of equidistant particle bunches // [Physics of Plasmas](#). — 2013. — Vol. 20, no. 8. — P. 083119.
- [34] Courant R., Friedrichs K., Lewy H. Über die partiellen Differenzengleichungen der mathematischen Physik // [Mathematische Annalen](#). — 1928. — Dec. — Vol. 100, no. 1. — P. 32–74.
- [35] Vay J.-L. Noninvariance of Space- and Time-Scale Ranges under a Lorentz Transformation and the Implications for the Study of Relativistic Interactions // [Phys. Rev. Lett.](#) — 2007. — Mar. — Vol. 98. — P. 130405.
- [36] Modeling of a chain of three plasma accelerator stages with the WarpX electromagnetic PIC code on GPUs / J.-L. Vay, A. Huebl, A. Almgren et al. // [Physics of Plasmas](#). — 2021. — Vol. 28, no. 2. — P. 023105.
- [37] Porting WarpX to GPU-accelerated platforms / A. Myers, A. Almgren, L.D. Amorim et al. // [Parallel Computing](#). — 2021. — Vol. 108. — P. 102833.
- [38] Enhancing parallel quasi-static particle-in-cell simulations with a pipelining algorithm / B. Feng, C. Huang, V. Decyk et al. // [Journal of Computational Physics](#). — 2009. — Vol. 228, no. 15. — P. 5340–5348.

- [39] HiPACE++: a portable, 3D quasi-static Particle-in-Cell code / S. Diederichs, C. Benedetti, A. Huebl et al. // [Computer Physics Communications](#). — 2022. — P. 108421.
- [40] Frigo M., Johnson S.G. The Design and Implementation of FFTW3 // [Proceedings of the IEEE](#). — 2005. — Vol. 93, no. 2. — P. 216–231.
- [41] Cooley J.W., Lewis P.A.W., Welch P.D. The fast Fourier transform algorithm: Programming considerations in the calculation of sine, cosine and Laplace transforms // [Journal of Sound and Vibration](#). — 1970. — Vol. 12, no. 3. — P. 315–337.
- [42] Bleichrodt Folkert, Bisseling Rob H., Dijkstra Henk A. Accelerating a barotropic ocean model using a GPU // [Ocean Modelling](#). — 2012. — Vol. 41. — P. 16–21.

Приложение А

В данном приложении рассмотрен использующийся в трёхмерном квазистатическом PIC коде LCODE 3D метод численного решения разностной задачи для нахождения сеточных функций электромагнитных полей. Подробно рассмотрен случай полей E_x , E_y , B_x и B_y , и кратко прокомментированы случаи E_z и B_z .

Следует обратить внимание на то, что задачи на поля E_x , E_y , B_x , B_y фактически идентичны с точностью до перестановки индексов и некоторых величин. В общем виде уравнения на данные поля (1.14) и (1.15) в координатах (x_1, x_2) можно записать как

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial x_2^2} = -\phi(x_1, x_2), \quad (\text{A.1})$$

с граничными условиями (1.16) и (1.17) в виде

$$x_1 = \pm x_{1,m}: U = 0; \quad x_2 = \pm x_{2,m}: \frac{\partial U}{\partial x_2} = g(x_1, \pm x_{2,m}), \quad (\text{A.2})$$

где введены обозначения $x_{1,m} = x_{1,\max}$ и $x_{2,m} = x_{2,\max}$.

На равномерной сетке в прямоугольнике данная задача становится разностной задачей со смешанными граничными условиями на сеточную функцию, определенную в узлах сетки. Разностная аппроксимация задачи (A.1)–(A.2) имеет вид

$$\left(\begin{array}{c} -x_{1,m} + h_1 \leq x_1 \leq x_{1,m} - h_1 \\ -x_{2,m} \leq x_2 \leq x_{2,m} \end{array} \right): (\Delta_1 + \Delta_2)U = -f(x_1, x_2), \quad (\text{A.3})$$

$$\left(\begin{array}{c} x_1 = \pm x_{1,m} \\ -x_{2,m} \leq x_2 \leq x_{2,m} \end{array} \right): U = 0, \quad (\text{A.4})$$

где h_1 и h_2 – шаги сетки вдоль осей x_1 и x_2 соответственно, и остальные

ВЕЛИЧИНЫ

$$f(x_1, x_2) = \phi(x_1, x_2) + \begin{cases} 2g(x_1, x_{2,m})/h_2, & x_2 = x_{2,m}, \\ 0, & |x_2| \leq x_{2,m} - h_2, \\ -2g(x_1, -x_{2,m})/h_2, & x_2 = -x_{2,m}, \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

$$\Delta_2 U = \begin{cases} -2(U(x_1, x_{2,m}) - U(x_1, x_{2,m} - h))/h_2^2, & x_2 = x_{2,m}, \\ U_{x_2, x_2}, & |x_2| \leq x_{2,m} - h_2, \\ 2(U(x_1, -x_{2,m} + h) - U(x_1, -x_{2,m}))/h_2^2, & x_2 = -x_{2,m}, \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

$$\Delta_1 U = U_{x_1, x_1}, \quad (\text{A.7})$$

где

$$U_{x_k, x_k} = 1/h_k^2 (U(x_k - h) - 2U(x_k) + U(x_k + h)), \quad k = 1, 2.$$

Теперь перейдём от непрерывных переменных к дискретным i и j , которые меняются в пределах от 0 до $N_1 = 2x_{1,m}/h_1$ и от 0 до $N_2 = 2x_{2,m}/h_2$ соответственно. Тогда $x_1 = -x_{1,m} + ih_1$ и $x_2 = -x_{2,m} + jh_2$.

Для полученных разностных операторов Δ_1 и Δ_2 (A.7) и (A.6) соответственно известны собственные значения λ_α и собственные функции μ_α — решения задачи $\Delta_\alpha \mu_\alpha + \lambda_\alpha \mu_\alpha = 0$:

$$\lambda_1 = \frac{4}{h_1^2} \sin^2 \left(\frac{k_1 \pi}{2N_1} \right), \quad k_1 = 1, 2, \dots, N_1 - 1, \quad (\text{A.8})$$

$$\mu_1(i) = \sqrt{\frac{2}{h_1 N_1}} \sin \left(\frac{k_1 \pi}{N_1} i \right), \quad k_1 = 1, 2, \dots, N_1 - 1, \quad (\text{A.9})$$

$$\lambda_2 = \frac{4}{h_2^2} \sin^2 \left(\frac{k_2 \pi}{2N_2} \right), \quad k_2 = 0, 1, \dots, N_2, \quad (\text{A.10})$$

$$\mu_2(j) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{h_2 N_2}} \cos \left(\frac{k_2 \pi}{N_2} i \right), & k_2 = 1, 2, \dots, N_2 - 1, \\ \sqrt{\frac{1}{h_2 N_2}} \cos \left(\frac{k_2 \pi}{N_2} i \right), & k_2 = 0, N_2. \end{cases} \quad (\text{A.11})$$

Функции $U(i, j)$ и $f(i, j)$ можно представить в виде разложения по полученным собственным функциям (A.9) и (A.11):

$$U(i, j) = \sum_{k_1=1}^{N_1-1} \sum_{k_2=0}^{N_2} U_{k_1, k_2} \mu_1(i) \mu_2(j), \quad 1 \leq i \leq N_1 - 1, \quad 0 \leq j \leq N_2, \quad (\text{A.12})$$

$$f(i, j) = \sum_{k_1=1}^{N_1-1} \sum_{k_2=0}^{N_2} f_{k_1, k_2} \mu_1(i) \mu_2(j), \quad 1 \leq i \leq N_1 - 1, \quad 0 \leq j \leq N_2. \quad (\text{A.13})$$

После подстановки полученных разложений (A.12) и (A.13) в уравнение (A.3) и учёта ортонормированности собственных функций, получаем

$$U_{k_1, k_2} = \frac{f_{k_1, k_2}}{\lambda_1 + \lambda_2}, \quad 1 \leq k_1 \leq N_1 - 1, \quad 0 \leq k_2 \leq N_2.$$

Подставляя это выражение в (A.12), получаем решение задачи (A.3)–(A.4) в виде

$$U(i, j) = \sum_{k_1=1}^{N_1-1} \sum_{k_2=0}^{N_2} \frac{f_{k_1, k_2}}{\lambda_1 + \lambda_2} \mu_1(i) \mu_2(j), \quad 0 \leq i \leq N_1, \quad 0 \leq j \leq N_2, \quad (\text{A.14})$$

где коэффициенты Фурье f_{k_1, k_2} , с учётом общей нормировки, определяются как

$$f_{k_1, k_2} = \sum_{i=1}^{N_1-1} \sum_{j=0}^{N_2} \frac{4f(i, j)}{N_1 N_2} \mu_1(i) \mu_2(j), \quad 1 \leq k_1 \leq N_1 - 1, \quad 0 \leq k_2 \leq N_2. \quad (\text{A.15})$$

Тут стоит отметить, что постоянную матрицу $A = 4/(N_1 N_2 (\lambda_1 + \lambda_2))$ можно вычислить один раз и после использовать во всех итерациях.

В версии кода LCODE 3D, в которой для расчётов используется центральный процессор CPU, численная схема решения разностной задачи для одного конкретного поля из E_x , E_y , B_x , B_y производится в четыре шага:

1. На сетке размером N_1 на N_2 в соответствии с (A.5) вычисляется сеточная функция $f(i, j)$, представляющая из себя двумерную матрицу.

Вид функций $\phi(x_1, x_2)$ и $g(x_1, x_2)$ задан уравнениями (1.14)–(1.17), и на данном этапе считается, что можно вычислить данные функции на сетке. Для случая вычисления полей B_y и E_x матрица $f(i, j)$ транспонируется, поскольку если для E_y и B_x имеем $x_1 = x$ и $x_2 = y$, то для B_y и E_x получаем $x_1 = y$ и $x_2 = x$.

2. Согласно формула (A.15) вычисляется f_{k_1, k_2} , где по первой оси x_1 проведено дискретное синусное преобразование первого типа DST-I (Discrete Sine Transform) сеточной функции $f(i, j)$, а после по второй оси x_2 проведено дискретное косинусное преобразование первого типа DCT-I (Discrete Cosine Transform).
3. Матрица f_{k_1, k_2} умножается на заранее вычисленную матрицу A .
4. Согласно формуле (A.14) вычисляется $U(i, j)$ по алгоритму, аналогичному шагу 2. Для вычисления полей B_y и E_x получившаяся матрица $U(i, j)$ транспонируется.

Итоговая вычисленная матрица $U(i, j)$ равна искомой сеточной функции поля.

Существенным отличием алгоритма нахождения поля E_z является то, что, кроме несколько иначе вычисленной аналогичной сеточной функции $f(i, j)$ на шаге 1 численной схемы, на шагах 2 и 4 необходимо провести дискретное синусное преобразование первого типа DST-I по обеим осям. В случае же вычисления B_z необходимо провести дискретное косинусное преобразование первого типа DCT-I по обеим осям.