

Адаптация метода Монте-Карло для расчёта динамики заряженных частиц в электромагнитном поле

А.Д. Кошкин, А.М. Альтмарк, Н.А. Лесив, С.А. Фёдоров

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»

Аннотация: в данной работе исследовалась возможность применения вероятностных методов Монте-Карло для ускорения вычислений динамики пучка заряженных частиц. Описан способ применения bootstrap метода для оценки дальности пролёта пучка. Проведён численный эксперимент, показывающий эффективность предлагаемого метода.

Ключевые слова: ускорители, СВЧ, макрочастицы, Монте-Карло, bootstrap

1. Введение

В настоящее время, одной из основных проблем современной физики является фундаментальное исследование материи, которое связано с изучением природы элементарных частиц [1]. Эксперименты в данной области проводятся на ускорителях заряженных частиц, а подготовительная часть данной работы связана с численным моделированием физических процессов [2].

Важно отметить, что проведение эксперимента на ускорителе требует больших затрат времени и денег. Именно поэтому всё больше учёных предпочитают, проводить предварительные эксперименты виртуально, перед запуском ускорителя, чтобы подобрать нужные параметры установки и пучков заряженных частиц и, хотя бы примерно оценить результат, который можно будет получить после запуска ускорителя.

К сожалению, проведение виртуальных экспериментов, хоть и решает часть проблем, но обладает своими недостатками, одним из которых является низкая скорость работы при проведении сложных расчётов. Дело в том, что моделируемые пучки состоят из множества частиц, а их физическая природа обязует считать силы взаимодействия между каждой парой частиц, что приводит к значительным затратам времени при увеличении количества частиц.

До сих пор данная задача решалась двумя способами: ускорением вычислений и уменьшением числа вычислений.

К методам ускорения можно отнести различные виды распараллеливания вычислений: OpenMP [3], CUDA[4], и др. Данные методы хоть и помогают ускорить проведение эксперимента, но не решают проблему быстрого роста вычислений, поэтому на практике они чаще комбинируются с другими методами.

В частности, более прорывными методами в области динамики элементарных частиц оказались методы, позволяющие уменьшить количество вычислений, сохранив приемлемую точность результата.

Одним из таких методов является метод макрочастиц [5], предложенный учёными из ЦЕРНа. Данный метод позволяет рассматривать несколько частиц как одну частицу с изменённой массой и зарядом, что позволяет значительно уменьшить количество сил, необходимых для вычисления.

В данной работе рассматривается возможность создания нового метода для уменьшения количества вычислений на основе статистики и теории вероятности.

2. Теоретические сведения

Поставим задачу следующим образом: по заданным параметрам пучка заряженных частиц необходимо оценить дальность его пролёта по оси Z (продольное направление) и отклонение по оси X (поперечная координата) после заданного количества шагов.

Пусть в пучок входит n частиц. Тогда необходимо будет вычислить $O(n^2)$. сил Кулона и сил поля Вавилова-Черенкова. Пучки, представляющие практический интерес могут включать в себя десятки тысяч частиц и более. Такое число частиц способно сильно замедлить вычисления и, соответственно, подготовку к эксперименту.

Для ускорения будем применять bootstrap метод [6], который основывается на взятии подвыборок из некоторой выборки от генеральной совокупности. В данной задаче в качестве генеральной совокупности будет выступать идеальный пучок, заданный описанием его параметров. На практике мы не можем смоделировать идеальный пучок, так как сложность вычислений слишком большая, поэтому работа ведётся с пучком-выборкой, который состоит из n частиц. Его дальность пролёта и требуется оценить.

Зафиксируем количество подвыборок и обозначим для них некоторый размер, например $(p\% * n)$. Сгенерируем подвыборки из исходного пучка применяя случайный выбор с возвратом.

Каждую из подвыборок будем рассчитывать независимо, поэтому количество сил необходимых для вычисления станет равно $O((p\% * n)^2)$. Таким образом, хоть верхняя граница количества сил, необходимых для вычисления на одном шаге осталась квадратичной, мы всё же уменьшили её за счёт уменьшения константы и получили преимущество в скорости. Отдельно следует найти процент подвыборки, при котором точность останется приемлемой, так как вычисления должны быть не только быстрыми, но и правильными.

Более интересный результат можно получить если ввести функциональную зависимость для количества частиц в подвыборке, но в данной работе этот подход не проверяется экспериментально, а лишь описывается сам подход.

Рассмотрим пример. Пусть для пучка из n частиц, размер подвыборки будет равен \sqrt{n} , тогда для k подвыборок число необходимых сил перестанет расти с квадратической скоростью и станет равно $O(k * (\sqrt{n})^2) = O(k * n)$, т.е. число сил необходимых для вычисления на одном шаге станет расти линейно.

3. Проведение численного эксперимента

Для проведения численного эксперимента воспользуемся программой BD_WF, которая позволяет генерировать пучки на основе заданных параметров и рассчитывать их динамику, под воздействием сил Кулона и поля Вавилова-Черенкова.

С помощью программы сгенерируем нормально распределённый пучок со следующими параметрами:

Таблица 1. Параметры образцов

Параметр	Значение	Параметр	Значение
Число частиц	1000 шт	Проницаемость диэлектрика	3.75
Энергия пучка	50 МэВ	Число шагов	10
Разброс энергий	1 МэВ	Временной шаг	0.1 нс
Заряд пучка	-100e-9 Кл	Число подвыборок	5 шт
Масса частицы	9,109e-31 кг	Волновые числа, μ	3
Смещение по X	0.0001 м	Волновые числа, ν	3

Смещение по Y	0 м	Разброс по Z	0.0015 м
Смещение по Z	0 м	Разброс по импульсу	1e-3 кг*м/с
Разброс по X	1e-4 м	Внутренний диаметр	0.5 см
Разброс по Y	1e-5 м	Внешний диаметр	1 см

На рисунке 1 приведена зависимость времени затраченного на моделирование динамики пучка от размера используемых подвыборок.

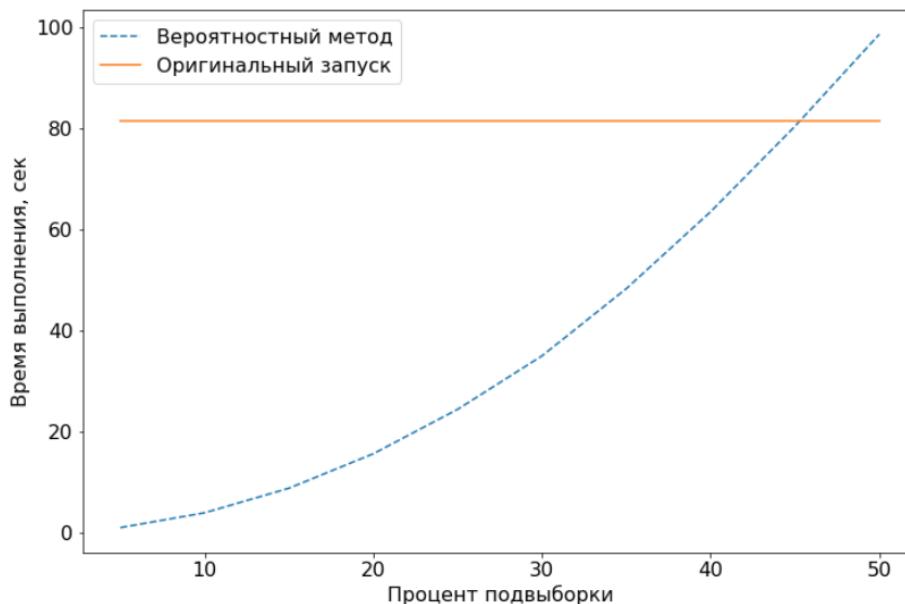


Рисунок 1. Зависимость времени выполнения от процента подвыборки.

На рисунках 2 и 3 приведены графики, которые показывают, что метод сходится и обеспечивает приемлемую точность в рассмотренных случаях.

Кроме того, заметим, что после достижения 25% подвыборки, верхняя и нижняя границы метода перестали сходиться.

Можно сделать вывод, что дальнейшее увеличение размера подвыборки не принесёт пользы и эффективнее всего зафиксировать размер подвыборки равный 25% от размера исходного пучка. Таким образом, мы добьёмся ускорения вычислений примерно в четыре раза, по сравнению с исходными вычислениями без вероятностного метода.

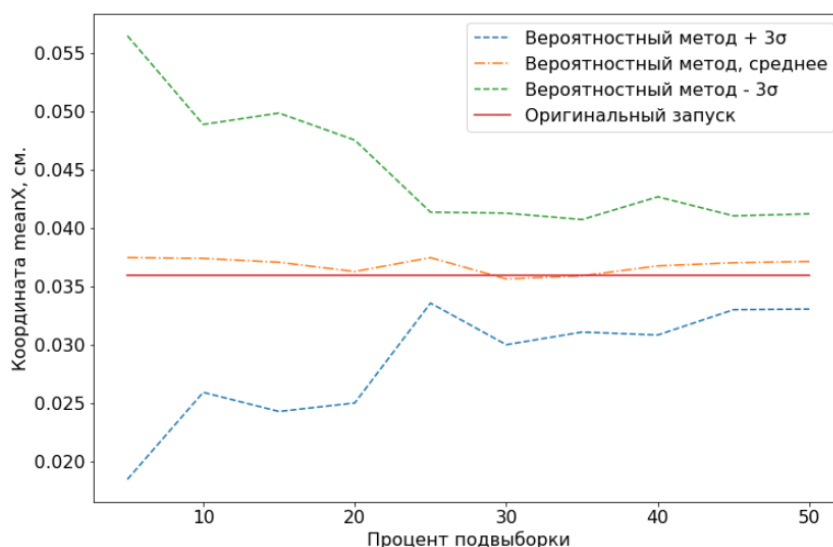


Рисунок 2. Зависимость центра масс пучка по оси X от процента подвыборки.

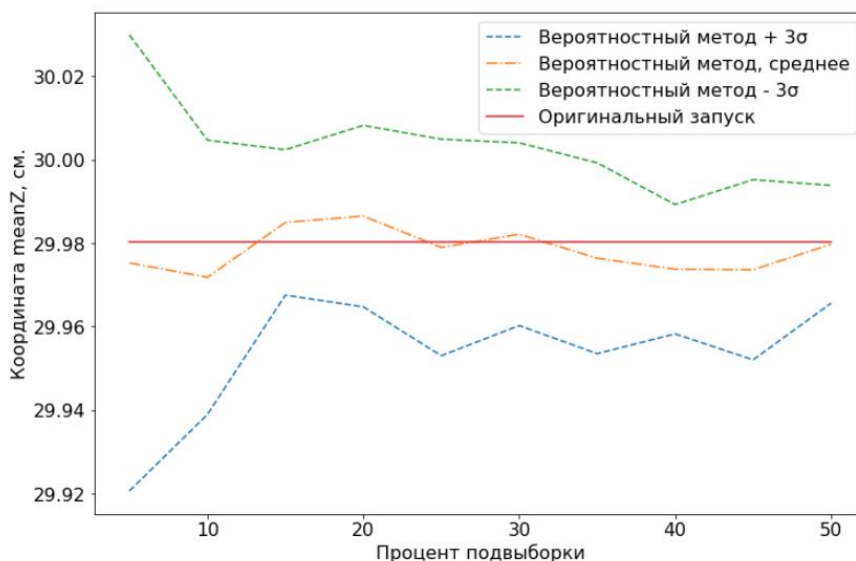


Рисунок 3. Зависимость центра масс пучка по оси Z от процента подвыборки.

4. Заключение

Проведение численного эксперимента позволило подтвердить эффективность предлагаемого вероятностного метода. Кроме того, предлагаемый метод прост в реализации и может комбинироваться как с методами распараллеливания, так и с методами уменьшения количества вычислений.

В ходе выполнения работы, были обнаружены перспективы для дальнейших исследований, в частности:

- Анализ применимости метода для нескольких пучков и проведение численного эксперимента;
- Поиск новых методов ускорения, основанных на теории вероятности и частичных вычислениях;
- Более детальное рассмотрение возможности комбинирования данного метода с существующими;
- Проведение численного эксперимента для функциональной зависимости размера подвыборки.

Список литературы

1. Castelvechi D. Plans for LHC's super successor // Nature - 2019. - №. 565. - С. 410.
2. Sheinman I., Kanareykin A. Numerical and analytical methods of modelling of bunch dynamics in dielectric filled accelerating structures // Proceedings of RUPAC2012 - 2012. - С. 266.
3. Haugboelle T., Haugboelle J., Trier J., Nordlund A. Photon-Plasma: a modern high-order particle-in-cell code // Physics of Plasmas - 2013. - №. 6. - С. 062904.
4. Oeftiger A. Parallelisation of PyHEADTAIL, a Collective Beam Dynamics Code for Particle Accelerator Physics [Электронный ресурс] // arXiv.org. - 2014. URL: <https://arxiv.org/pdf/1610.05801.pdf> (Дата обращения 10.05.2020)
5. Pukhov A. Particle-In-Cell Codes for Plasma-based Particle Acceleration // Proceedings of the CAS-CERN Accelerator School: Plasma Wake Acceleration. - 2014. - С. 181.
6. Бутстрэп (статистика) [Электронный ресурс] // ru.wikipedia.org. - 2021. URL: [https://ru.wikipedia.org/wiki/Бутстрэп_\(статистика\)](https://ru.wikipedia.org/wiki/Бутстрэп_(статистика)) (Дата обращения 10.05.2021)