



doi 10.26089/NumMet.v22r418

УДК 519.688

Алгоритмы движения в методе частиц в ячейках

Е. С. Воропаева

*Новосибирский государственный университет,
Новосибирск, Российская Федерация*

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-5630-1019>, e-mail: kate.voropaeva@gmail.com

К. В. Вшивков

*Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,
Новосибирск, Российская Федерация*

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8264-2522>, e-mail: kovsh@ssd.sssc.ru

Л. В. Вшивкова

*Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,
Новосибирск, Российская Федерация*

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9152-208X>, e-mail: lyudmila.vshivkova@sscc.ru

Г. И. Дудникова

*Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,
Новосибирск, Российская Федерация*

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6786-129X>, e-mail: gdudnikova@gmail.com

А. А. Ефимова

*Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,
Новосибирск, Российская Федерация*

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9223-8013>, e-mail: anna.an.efimova@gmail.com

Аннотация: В настоящей работе представлен новый метод решения уравнений движения заряженных частиц в электромагнитных полях и проведено его сравнение с различными известными модификациями метода Бориса. Созданные двумерный и трехмерный алгоритмы основаны на использовании точного решения дифференциального уравнения для скорости заряженной частицы на шаге по времени. Сравнительный анализ метода Бориса и его модификаций проводился как по точности методов, так и по времени их работы. Новая модификация метода Бориса позволяет точнее вычислять траекторию и скорость заряженной частицы без значительного увеличения сложности расчетов. Показано, что при выборе модификации метода Бориса для решения задачи в первую очередь следует обращать внимание на точность решения, так как более простая и быстрая схема может не дать выигрыша по времени.

Ключевые слова: модификация метода Бориса, гибридные численные модели, метод частиц в ячейках, магнитная гидродинамика, кинетическое уравнение Власова, уравнения Максвелла, вычислительная физика плазмы.

Благодарности: Работа выполнена в рамках государственного задания ИВМиМГ СО РАН (0315–2019–0009) при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант 18–29–21025–мк.

Для цитирования: Воропаева Е. С., Вшивков К. В., Вшивкова Л. В., Дудникова Г. И., Ефимова А. А. Алгоритмы движения в методе частиц в ячейках // Вычислительные методы и программирование. 2021. 22, 281–293. doi 10.26089/NumMet.v22r418.



Algorithms of motion in the particle-in-cell method

Ekaterina S. Voropaeva

Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russia

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-5630-1019>, e-mail: kate.voropaeva@gmail.com

Konstantin V. Vshivkov

Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8264-2522>, e-mail: kovsh@ssd.sccc.ru

Lyudmila V. Vshivkova

Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9152-208X>, e-mail: lyudmila.vshivkova@sccc.ru

Galina I. Dudnikova

Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6786-129X>, e-mail: gdudnikova@gmail.com

Anna A. Efimova

Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9223-8013>, e-mail: anna.an.efimova@gmail.com

Abstract: The article proposes a new method for solving the equations of motion of charged particles in electromagnetic fields and compares this method with various known modifications of the Boris method. The created two-dimensional and three-dimensional algorithms are based on the use of an exact solution of the differential equation for the velocity of a charged particle at a time step. A comparative analysis of the Boris method and its modifications was carried out both in terms of the accuracy of the methods and the time of their operation. A new modification of the Boris method allows more accurate calculations of the trajectory and velocity of a charged particle without a significant increase in the complexity of calculations. It is shown that, when choosing a modification of the Boris method to solve a problem, one should pay attention first of all to the accuracy of the solution, since a simpler and faster scheme may not give a gain in time.

Keywords: modification of Boris method, hybrid numerical models, particle-in-cell method, magnetohydrodynamics, kinetic Vlasov equation, Maxwell equations, computational plasma physics.

Acknowledgements: The work was performed within the framework of the state assignment of the ICM&MG SB RAS (project 0315–2019–0009) with the support of the Russian Foundation for Basic Research, grant No. 18–29–21025–мк.

For citation: E. S. Voropaeva, K. V. Vshivkov, L. V. Vshivkova, G. I. Dudnikova, A. A. Efimova, “Algorithms of Motion in the Particle-in-Cell Method,” Numerical Methods and Programming. 22 (4), 281–293 (2021). doi 10.26089/NumMet.v22r418.

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 в само-согласованном электромагнитном поле. Электромагнитное поле определяется по уравнениям Максвелла с учетом 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 расчетов и обработки огромных массивов данных, поэтому важным критерием выбора алгоритма для вычисления движения частицы является простота алгоритма [2].

В настоящее время наиболее часто используемый алгоритм 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 вторым порядком точности, одинаково хорошо работает



на малых и больших временах развития процесса и достаточно экономичен. Теоретическое доказательство устойчивости метода Бориса и свойство сохранения энергии с точки зрения методов решения обыкновенных дифференциальных уравнений в отсутствие электрического поля представлено в [5].

В последнее время возрос интерес к методу Бориса и его модификациям, которые могли бы упростить, уточнить или ускорить вычисление траектории и скорости заряженной частицы. Наиболее известные и широко используемые модификации рассмотрены в работах [2–4]. В статье [6] предлагается трехшаговый алгоритм, обладающий той же точностью, что и метод Бориса. Алгоритм из n шагов, имеющий одинаковую с методом Бориса точность, рассмотрен в работе [7]. В [8] предложен метод, использующий двухшаговый алгоритм Бориса n раз, обладающий меньшей ошибкой, чем метод Бориса. Модификация метода, основанная на точном решении уравнений движения и точно определяющая поворот частицы под воздействием магнитного поля, рассмотрена в [9]. В работе [10] рассматриваются неявные методы решения 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, 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 при решении релятивистских задач.

В настоящей работе представлен новый метод решения уравнений движения заряженных частиц в электромагнитных полях и проведено его сравнение с наиболее часто используемыми модификациями метода Бориса. Рассматриваемые методы сравниваются по точности и эффективности вычислений на классических тестовых задачах в двумерной и трехмерной постановках в нерелятивистском пределе. В каждом случае рассматривались варианты аналитически заданных электрического и магнитного полей. Разработанная нами новая модификация метода Бориса позволяет точнее вычислять траекторию и скорость заряженной частицы без значительного увеличения количества арифметических операций.

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

$$\mathbf{F} = q\mathbf{E} + \frac{q}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}], \quad (1)$$

где \mathbf{E} — вектор напряженности электрического поля, \mathbf{B} — вектор индукции магнитного поля, c — скорость света. В рамках метода частиц движение заряженной частицы удовлетворяет законам механики, поэтому его можно описать при $t \in [t_0, T]$ следующей задачей Коши:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt} \mathbf{x}(t) = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t), \\ m \frac{d}{dt} \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \gamma(\mathbf{v}) = q \left(\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}(\mathbf{x}, t)] \right), \\ \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}^0, \\ \mathbf{v}(t_0) = \mathbf{v}^0, \end{array} \right. \quad (2)$$

где $\gamma(\mathbf{v}) = 1/\sqrt{1 - (v/c)^2}$ — релятивистский фактор. В данной работе рассматривается нерелятивистское движение частицы ($\gamma = 1$). В общем случае задачу (2) невозможно решить аналитически, из-за чего возникает необходимость в использовании численных методов решения задачи.

3. Численные методы решения задачи.

3.1. Метод Бориса. Для вычисления траектории и скорости частицы обычно используется метод Бориса [3]. Основная идея метода состоит в замене системы ОДУ (2) системой конечно-разностных уравнений и ее решении с помощью расщепления по физическим процессам.

Введем расчетную сетку $\{t_k = t_0 + k\Delta t, k = 1, \dots, n_t\}$, где Δt — шаг по времени. Приближенные значения координаты частицы $\mathbf{x}(t_k) \approx \mathbf{x}_k$, векторов скорости $\mathbf{v}(t_k) \approx \mathbf{v}_k$, магнитной индукции $\mathbf{B}(\mathbf{x}_k, t_k) \approx$

\mathbf{B}_k и напряженности электрического поля $\mathbf{E}(\mathbf{x}_k, t_k) \approx \mathbf{E}_k$ вычисляются последовательно в узлах сетки. Для повышения точности используется сдвинутая на полшага сетка, то есть вводится приближенный вектор скорости $\mathbf{v}(t_{k+1/2}) \approx \mathbf{v}_{k+1/2}$, который вычисляется в узлах сетки $\{t_{k+1/2} = t_0 + (k + 1/2)\Delta t, k = 0, \dots, n_t - 1\}$.

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k}{\Delta t} = \mathbf{v}_{k+1/2}, \\ \frac{\mathbf{v}_{k+1/2} - \mathbf{v}_{k-1/2}}{\Delta t} = \frac{q}{m} \left(\mathbf{E}_k + \frac{1}{2c} [(\mathbf{v}_{k+1/2} + \mathbf{v}_{k-1/2}) \times \mathbf{B}_k] \right), \\ \mathbf{x}_0 = \mathbf{x}^0, \\ \mathbf{v}_0 = \mathbf{v}^0. \end{array} \right. \quad (3)$$

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) необходимо задать дополнительное начальное условие для скорости. Вводится значение $\mathbf{v}_{-1/2}$ в момент времени $t_{-1/2}$, и во втором уравнении системы (3) в момент времени t_0 производная скорости заменяется односторонней конечной разностью:

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

Тогда искомое дополнительное условие имеет вид:

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

На следующем этапе влияние силы Лоренца (1) расщепляется на вклад электрического поля на полушаге (4), (6) и вклад магнитного поля (5):

$$\mathbf{v}^- = \mathbf{v}_{k-1/2} + \frac{q}{m} \mathbf{E}_k \frac{\Delta t}{2}, \quad (4)$$

$$\frac{\mathbf{v}^+ - \mathbf{v}^-}{\Delta t} = \frac{q}{2mc} (\mathbf{v}^+ + \mathbf{v}^-) \times \mathbf{B}_k, \quad (5)$$

$$\mathbf{v}_{k+1/2} = \mathbf{v}^+ + \frac{q}{m} \mathbf{E}_k \frac{\Delta t}{2}. \quad (6)$$

Векторное уравнение (5) отражает поворот вектора \mathbf{v}^- до \mathbf{v}^+ за шаг по времени под влиянием вектора \mathbf{B} . На рис. 1 изображен геометрический процесс преобразования вектора скорости на шаге по времени.

Решение уравнения (5) сводится к простой процедуре решения СЛАУ размерности 3×3 методом Гаусса. Однако при работе программы решение СЛАУ может вызываться тысячи раз и суммарно существенно увеличивать время расчетов.

3.2. Модификации метода Бориса. Модификации метода Бориса направлены на упрощение вычислений или уменьшение погрешности численного решения задачи (2). Используется замена СЛАУ (5) на более простые вычисления или переход от трехступенчатого алгоритма к менее громоздким методам.

§ 3.2.1. Модификация А. На идее отказа от решения СЛАУ основана модификация, предложенная Борисом в 1970 году [3]. Вводятся дополнительные векторы \mathbf{p} и \mathbf{v}' , благодаря которым можно найти \mathbf{v}^+ явным образом:

$$\mathbf{p} = \operatorname{tg} \left(\frac{\theta}{2} \right) \mathbf{b}, \quad \mathbf{b} = \frac{\mathbf{B}_k}{|\mathbf{B}_k|},$$

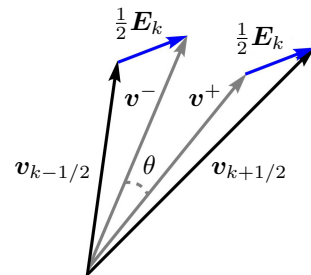


Рис. 1. Преобразование вектора скорости на шаге по времени

Fig. 1. Velocity vector transformation at a time step



$$\mathbf{v}' = \mathbf{v}^- + [\mathbf{v}^- \times \mathbf{p}],$$

$$\mathbf{v}^+ = \mathbf{v}^- + \frac{2}{1+p^2}[\mathbf{v}' \times \mathbf{p}],$$

где $\theta = \frac{q\Delta t}{m} |\mathbf{B}_k|$ — угол поворота вектора скорости за шаг по времени.

§ 3.2.2. *Модификация В.* Предложенный в работе Бэдсела и Ленгдона [4] алгоритм отличается от алгоритма А способом представления вектора \mathbf{p} :

$$\mathbf{p} = \frac{\theta}{2} \mathbf{b}.$$

Такое представление вектора \mathbf{p} позволяет уменьшить время работы программы, но может привести к увеличению погрешности (рис. 2). Черным линиям соответствует поворот на угол θ вектора \mathbf{v}^- до \mathbf{v}_A^+ в модификации А без промежуточных шагов; серые линии — преобразования в модификации В вектора \mathbf{v}^- до \mathbf{v}_B^+ . Разницу между векторами \mathbf{v}_A^+ и \mathbf{v}_B^+ можно охарактеризовать величиной $\delta\theta$ — разницей между углами поворота вектора скорости в приведенных модификациях.

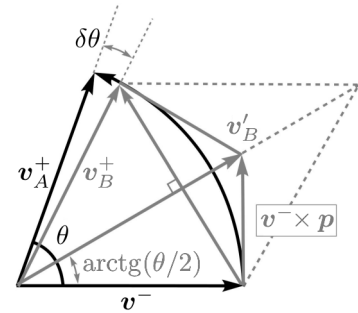


Рис. 2. Модификация В

Fig. 2. Modification B

§ 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 \mathbf{v}^- :

$$\mathbf{v}_{||}^- = (\mathbf{v}^- \cdot \mathbf{b}) \cdot \mathbf{b}.$$

Тогда

$$\mathbf{v}^+ = \mathbf{v}_{||}^- + (\mathbf{v}^- - \mathbf{v}_{||}^-) \cos \theta + [\mathbf{v}^- \times \mathbf{b}] \sin \theta.$$

Как и модификация А, она позволяет точно повернуть вектор скорости за шаг по времени, но увеличивает время работы программы за счет наличия тригонометрических функций.

3.3. **Тестовая задача.** Для проверки свойств рассмотренных алгоритмов использовалась тестовая задача движения заряженной частицы, когда магнитное поле \mathbf{B} и потенциальное электрическое поле \mathbf{E} зависят от положения частицы в пространстве и вычисляются по формулам [4]:

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

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

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi = 0.01 \left(\frac{x}{(x^2 + y^2)^{3/2}}, \frac{y}{(x^2 + y^2)^{3/2}}, 0 \right),$$

где ϕ — потенциал электрического поля. Начальные данные для решения уравнений движения: $\mathbf{x}_0 = (0.9, 0, 0)$, $\mathbf{v}_0 = (0.1, 0, 0)$. В тестовой задаче все величины приведены в безразмерном виде.

В данной постановке задачи частица будет двигаться в плоскости $z = 0$. Вращение частицы под действием магнитного поля происходит с дрейфом вдоль изолиний электрического поля, что соответствует траектории на рис. 3, полученной на основе метода Бориса. На рис. 3 пунктирной линией изображены изолинии потенциала электрического поля $\phi = \text{const}$, вдоль которых происходит вращение частицы, цветовая шкала отражает значения потенциала. С течением времени траектория замкнется и частица будет продолжать движение без изменения радиусов вращения. Аналогичные результаты были получены с использованием всех рассмотренных алгоритмов. Подчеркнем, что метод Бориса и его известные модификации сохраняют кинетическую энергию частицы.

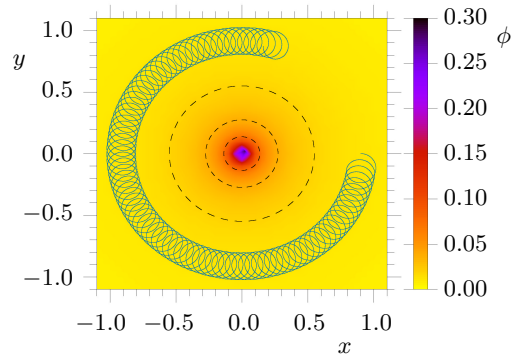


Рис. 3. Траектория заряженной частицы в электромагнитном поле на временном интервале $[0, 600]$, $\Delta t = 0.05$

Fig. 3. Trajectory of a charged particle in an electromagnetic field on the time interval $[0, 600]$, $\Delta t = 0.05$

4. Новая схема расчета движения заряженной частицы.

4.1. Двумерный случай. Рассмотрим новую модификацию D метода Бориса. Введем расчетную сетку $\{t_k = t_0 + k\Delta t, k = 1, \dots, n_t\}$ и приближенные значения координаты частицы $\mathbf{x}(t_k) \approx \mathbf{x}_k$, скорости $\mathbf{v}(t_k) \approx \mathbf{v}_k$, векторов магнитной индукции $\mathbf{B}(\mathbf{x}_k, t_k) = \mathbf{B}_k$ и электрической напряженности $\mathbf{E}(\mathbf{x}_k, t_k) = \mathbf{E}_k$. Система уравнений движения заряженной частицы последовательно рассматривается на каждом шаге по времени $t \in [t_k, t_k + \Delta t]$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt}\mathbf{x}(t) = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t), \\ m \frac{d}{dt}\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = q \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] \right), \\ \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_k, \\ \mathbf{v}(0) = \mathbf{v}_{k-1/2}, \end{array} \right. \quad (7)$$

где $t_{k-1/2} = t_0 + (k - 1/2)\Delta t$; здесь учитывается предположение, что на таком временном промежутке электромагнитное поле постоянно

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) &= \mathbf{E}(\mathbf{x}^k, t_k) = \mathbf{E}, \\ \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) &= \mathbf{B}(\mathbf{x}^k, t_k) = \mathbf{B}. \end{aligned}$$

В таком случае возможно найти аналитическое решение системы ОДУ (7).

Рассмотрим аналитическое решение второго уравнения системы (7) в двумерном случае, когда $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$, $\mathbf{E} = (E_x, E_y, 0)$. Тогда второе уравнение системы (7) выглядит следующим образом:

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

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

Решение системы в момент времени $t_{k+1/2}$ можно записать следующим образом:

$$\left\{ \begin{array}{l} u_{k+1/2} = S_y c + (v_{k-1/2} + S_x c) \sin \omega \Delta t + (u_{k-1/2} - S_y c) \cos \omega \Delta t, \\ v_{k+1/2} = -S_x c + (v_{k-1/2} + S_x c) \cos \omega \Delta t - (u_{k-1/2} - S_y c) \sin \omega \Delta t, \end{array} \right. \quad (8)$$

где $S_y = E_y/B_z$, $S_x = E_x/B_z$. Здесь вектор $\mathbf{S} = (S_y, -S_x)$ — скорость дрейфа частицы в скрещенных полях; $\mathbf{v}_D = c[\mathbf{E} \times \mathbf{B}]/|\mathbf{B}|^2$, $\omega = q|\mathbf{B}|/(mc)$ — циклотронная частота.

После нахождения вектора скорости в промежуточный момент времени $t_{k+1/2}$ с помощью первого уравнения системы (3) можно явным образом найти координаты частицы:

$$\frac{\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k}{\Delta t} = \mathbf{v}_{k+1/2}. \quad (9)$$

Таким образом, на каждом шаге по времени вычисляются значения электромагнитного поля в текущей \mathbf{x}_k точке пространства, затем вычисляется новый вектор скорости по формулам (8), по которому находится положение частицы \mathbf{x}_{k+1} из соотношения (9).

Свойства нового алгоритма D исследовались и сравнивались с другими модификациями при решении тестовой задачи раздела 3.3.

Погрешности в определении координаты и скорости частицы для различных методов вычислялись по правилу Рунге [15] на последовательности шагов по времени $\Delta t = \left\{ \Delta t_n = \frac{\Delta t_0}{2^n} \mid n = 0, \dots, 5, \Delta t_0 = 0.1 \right\}$ (рис. 4). Погрешность вычисления траектории каждым методом убывает как $C\Delta t^2$, где $C = 0.565$ — для метода Бориса и модификации B , $C = 0.160$ — для A и C , $C = 0.117$ — для модификации D . Значение константы фактически определяет точность метода.



Наименьшая погрешность в определении траектории частиц получена с применением разработанной новой схемы D — она в 4.8 раз меньше погрешности, которую дает схема Бориса. В то же время различие в погрешностях метода Бориса и модификации B наблюдается лишь в 6-й значащей цифре. Отметим также, что модификации A и C , предложенные в работах [3] и [9] соответственно, дают абсолютно одинаковые погрешности, поскольку они являются фактически одинаковыми схемами.

В разделе 3 было указано, что схема Бориса и ее модификации A и B точно отображают явление сохранения энергии в рассматриваемой задаче. Расчеты также показали, что при решении тестовой задачи с помощью схемы D энергия также сохраняется.

4.2. Алгоритм D для трехмерного случая. В трехмерном случае $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$, $\mathbf{E} = (E_x, E_y, E_z)$ и исходная система ОДУ для нахождения компонент вектора скорости $\mathbf{v} = (u, v, w)$ заряженной частицы выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = \frac{q}{m} E_x + \frac{q}{mc} B_z v - \frac{q}{mc} B_y w, \\ \frac{dv}{dt} = \frac{q}{m} E_y + \frac{q}{mc} B_x w - \frac{q}{mc} B_z u, \\ \frac{dw}{dt} = \frac{q}{m} E_z + \frac{q}{mc} B_y u - \frac{q}{mc} B_x v. \end{cases} \quad (10)$$

Аналогично двумерному случаю, необходимо найти точное решение системы ОДУ на шаге по времени $t \in [t_k, t_k + \Delta t]$. В качестве начального условия использовалось значение скорости на предыдущем дробном шаге $\mathbf{v}_{k-1/2}$. Сначала было получено точное решение для случая, когда $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$, $\mathbf{E} = (E_x, E_y, E_z)$. Тогда система (10) имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = \frac{q}{m} E_x + \omega v, \\ \frac{dv}{dt} = \frac{q}{m} E_y - \omega u, \\ \frac{dw}{dt} = \frac{q}{m} E_z, \end{cases} \quad (11)$$

где $\omega = qB_z/(mc)$. Уравнение для w не связано с остальными уравнениями и имеет решение:

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

Для решения оставшихся двух уравнений представим их в виде:

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

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

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

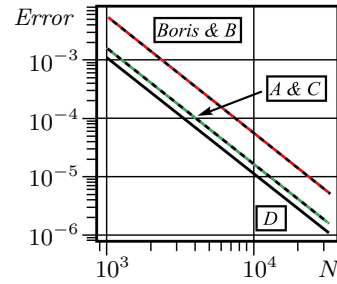


Рис. 4. Погрешность определения координаты и скорости частицы для метода Бориса и его модификаций A, B, C и D

Fig. 4. Error in determining the coordinate and velocity of a particle for the Boris method and its modifications A, B, C and D

Для нахождения решения неоднородной системы уравнений (11) будем считать, что коэффициенты C_1 , C_2 зависят от t : $C_1(t)$, $C_2(t)$. Подставив в систему (11), получим:

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

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

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

Подставив полученные решения в систему (11), найдем:

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

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

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

Таким образом, решение системы (11) будет иметь вид:

$$\begin{cases} u(t) = c \frac{E_y}{B_z} + \left(u_{k-1/2} - c \frac{E_y}{B_z} \right) \cos \omega t + \left(v_{k-1/2} + c \frac{E_x}{B_z} \right) \sin \omega t, \\ v(t) = -c \frac{E_x}{B_z} + \left(v_{k-1/2} + c \frac{E_x}{B_z} \right) \cos \omega t - \left(u_{k-1/2} - c \frac{E_y}{B_z} \right) \sin \omega t, \\ w(t) = w_{k-1/2} + \frac{q}{m} E_z t. \end{cases} \quad (12)$$

Заметим, что если B_z мало или равно нулю, то формулы (12) должны быть преобразованы. Для этого тригонометрические функции разлагаются в ряд Тейлора с сохранением первого не равного нулю члена. Формулы принимают вид:

$$\begin{cases} u(t) = u_{k-1/2} \cos \omega t + \frac{q}{m} E_x t + v_{k-1/2} \sin \omega t + \frac{q}{2m} E_y \omega t^2, \\ v(t) = v_{k-1/2} \cos \omega t + \frac{q}{m} E_y t - u_{k-1/2} \sin \omega t - \frac{q}{2m} E_x \omega t^2. \end{cases} \quad (13)$$

Для нахождения точного решения системы (11) в общем случае использовались формулы (12) и разложение вектора скорости на компоненты, параллельные и перпендикулярные вектору магнитной индукции. Продольные компоненты векторов скорости и напряженности электрического поля вычисляются по формулам:

$$\mathbf{v}_{\parallel} = (\mathbf{v} \cdot \mathbf{b}) \mathbf{b},$$

$$\mathbf{E}_{\parallel} = (\mathbf{E} \cdot \mathbf{b}) \mathbf{b},$$

$$\mathbf{b} = \frac{\mathbf{B}_k}{|\mathbf{B}_k|}.$$



Продольная скорость изменяется по формуле:

$$\mathbf{v}_{||}(t) = \mathbf{v}_{||}(0) + \mathbf{E}_{||}t.$$

Поперечные компоненты предстают в виде:

$$\mathbf{v}_{\perp} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_{||}, \quad \mathbf{E}_{\perp} = \mathbf{E} - \mathbf{E}_{||}.$$

С помощью перехода к произвольным координатам в системе (12) можно найти решение для перпендикулярной компоненты скорости:

$$\left\{ \begin{array}{l} u_{\perp}(t) = E'_y b_z - E'_z b_y + [u_{\perp}(0) - E'_y b_z + E'_z b_y] \cos \omega t + \\ \quad + [v_{\perp}(0) b_z - w_{\perp}(0) b_y + E'_x] \sin \omega t, \\ v_{\perp}(t) = E'_z b_x - E'_x b_z + [v_{\perp}(0) - E'_z b_x + E'_x b_z] \cos \omega t + \\ \quad + [w_{\perp}(0) b_x - u_{\perp}(0) b_z + E'_y] \sin \omega t, \\ w_{\perp}(t) = E'_x b_y - E'_y b_x + [w_{\perp}(0) - E'_x b_y + E'_y b_x] \cos \omega t + \\ \quad + [u_{\perp}(0) b_y - v_{\perp}(0) b_x + E'_z] \sin \omega t, \end{array} \right. \quad (14)$$

где $\mathbf{E}' = c\mathbf{E}_{\perp}/|\mathbf{B}|$. С добавлением продольной компоненты скорости, а также с учетом 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 (14) выглядит следующим образом:

$$\left\{ \begin{array}{l} u_{k+1/2} = E'_y b_z - E'_z b_y + [u_{k-1/2}^{\perp} - E'_y b_z + E'_z b_y] \cos \omega \Delta t + \\ \quad + [v_{k-1/2}^{\perp} b_z - w_{k-1/2}^{\perp} b_y + E'_x] \sin \omega \Delta t + u_{||}, \\ v_{k+1/2} = E'_z b_x - E'_x b_z + [v_{k-1/2}^{\perp} - E'_z b_x + E'_x b_z] \cos \omega \Delta t + \\ \quad + [w_{k-1/2}^{\perp} b_x - u_{k-1/2}^{\perp} b_z + E'_y] \sin \omega \Delta t + v_{||}, \\ w_{k+1/2} = E'_x b_y - E'_y b_x + [w_{k-1/2}^{\perp} - E'_x b_y + E'_y b_x] \cos \omega \Delta t + \\ \quad + [u_{k-1/2}^{\perp} b_y - v_{k-1/2}^{\perp} b_x + E'_z] \sin \omega \Delta t + w_{||}. \end{array} \right.$$

Возможен случай, когда магнитное поле в процессе решения задачи станет нулевым или очень маленьким. В этом случае следует использовать разностный аналог уравнений (13) для общего трехмерного случая:

$$\left\{ \begin{array}{l} u_{k+1/2} = u_{k-1/2}^{\perp} \cos \omega \Delta t + \frac{E_x^{\perp} q \Delta t}{m} + (E_y^{\perp} b_z - E_z^{\perp} b_y) \frac{q}{2m} \omega \Delta t^2 + \\ \quad + [v_{k-1/2}^{\perp} b_z - w_{k-1/2}^{\perp} b_y] \sin \omega \Delta t + u_{||}, \\ v_{k+1/2} = v_{k-1/2}^{\perp} \cos \omega \Delta t + \frac{E_y^{\perp} q \Delta t}{m} + (E_z^{\perp} b_x - E_x^{\perp} b_z) \frac{q}{2m} \omega \Delta t^2 + \\ \quad + [w_{k-1/2}^{\perp} b_x - u_{k-1/2}^{\perp} b_z] \sin \omega \Delta t + v_{||}, \\ w_{k+1/2} = w_{k-1/2}^{\perp} \cos \omega \Delta t + \frac{E_z^{\perp} q \Delta t}{m} + (E_x^{\perp} b_y - E_y^{\perp} b_x) \frac{q}{2m} \omega \Delta t^2 + \\ \quad + [u_{k-1/2}^{\perp} b_y - v_{k-1/2}^{\perp} b_x] \sin \omega \Delta t + w_{||}. \end{array} \right. \quad (15)$$

В качестве критерия для замены основных формул на формулы (15) можно использовать условие $|\mathbf{E}|/|\mathbf{B}| > 10^{-5}$.

4.3. Трехмерная тестовая задача. В качестве задачи для тестирования схемы D была использована модернизированная тестовая задача из раздела 3.3. В тестовой задаче все величины представлены в безразмерном виде. Пусть в некоторой системе координат x', y', z' с базисными векторами e'_x, e'_y, e'_z и с началом координат в точке O векторы магнитной индукции и напряженности электрического поля совпадают с заданными в тестовой задаче:

$$\mathbf{B}'(\mathbf{x}') = \mathbf{B}'(x', y', z') = (x'^2 + y'^2)^{1/2} \mathbf{e}'_z, \tag{16}$$

$$\mathbf{E}'(\mathbf{x}') = \mathbf{E}'(x', y', z') = -\nabla\phi = 0.01 \left(\frac{x'}{(x'^2 + y'^2)^{3/2}}, \frac{y'}{(x'^2 + y'^2)^{3/2}}, 0 \right), \tag{17}$$

$$\phi(\mathbf{x}') = 0.01(x'^2 + y'^2)^{-1/2}. \tag{18}$$

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

Текущая система координат $\{x, y, z\}$ получается из $\{x', y', z'\}$ поворотом вокруг оси z на угол $\alpha = 30^\circ$, который характеризует матрица перехода

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3}/2 & 1/2 \\ 0 & -1/2 & \sqrt{3}/2 \end{pmatrix}.$$

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

$$\mathbf{x} = M\mathbf{x}', \quad \mathbf{v} = M\mathbf{v}'.$$

Зависимость электромагнитного поля от координат в текущей системе координат определяется следующим образом:

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}) = M\mathbf{B}'(\mathbf{x}') = M\mathbf{B}'(M^{-1}\mathbf{x}), \tag{19}$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = M\mathbf{E}'(\mathbf{x}') = M\mathbf{E}'(M^{-1}\mathbf{x}). \tag{20}$$

Таким образом, сформулирована постановка трехмерной задачи (2) с электромагнитным полем, задаваемым формулами (16)–(20). Ее решение можно сравнить с решением плоской задачи путем поворота уже известных результатов вокруг оси Ox на 30° . Траектория движения частицы в электромагнитном поле представлена на рис. 5.

Из рис. 5 видно, что полученная траектория совпадает с траекторией, полученной в решении двумерной задачи (рис. 3) в повернутой на угол $\alpha = 30^\circ$ системе координат. Численный анализ показал, что трехмерный вариант задачи также обладает свойством сохранения кинетической энергии, что демонстрируют все четыре рассматриваемые алгоритма. Выводы, сделанные в разделе 4.1 для двумерного аналога метода, справедливы и для трехмерной схемы.

5. Сравнение модификаций метода Бориса по быстрдействию. 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 и время работы программного кода. Поэтому, чтобы провести сравнение модификаций метода Бориса по скорости работы, была выполнена серия расчетов 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 с величиной шага $\Delta t = 0.0125$.

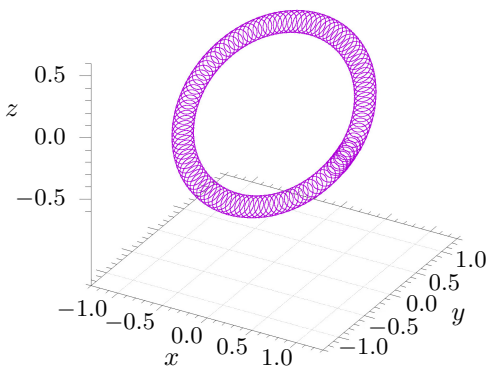


Рис. 5. Траектория движения частицы в электромагнитном поле

Fig. 5. The trajectory of a particle in an electromagnetic field



Таблица 1. Медианные значения времени работы модификаций метода Бориса в двумерной и трехмерной постановках

Table 1. Median values of the running time of method modifications Boris in two- and three-dimensional cases

	Метод Бориса Boris method	Схема A Scheme A	Схема B Scheme B	Схема D Scheme D
Плоская задача Two-dimensional problem	2.013	2.127	2.070	2.108
Трехмерная задача Three-dimensional problem	2.708	2.432	2.324	2.577

На рис. 6 изображено распределение процессорного времени, затраченного на работу каждого метода в трехмерном случае.

Из рис. 6 видно, что полученные статистические распределения времени работы модификаций метода Бориса далеки от нормального, а наиболее близким к нему оказывается распределение времени, затраченное на метод Бориса. Поэтому в качестве сравнительной характеристики будет использоваться медианное время, указанное в табл. 1.

Таким образом, времена, затраченные на метод Бориса и модификации A, B, D, соотносятся как:

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

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

6. Заключение. В настоящей работе предложена новая модификация метода Бориса для решения уравнений движения заряженных частиц, основанная на идее использования точного решения дифференциального уравнения для скорости заряженной частицы на шаге по времени. Выполнен сравнительный анализ метода Бориса и его модификаций с новой схемой в двумерной и трехмерной постановках. Показано, что новая модификация обладает наименьшей погрешностью.

Для дискретно заданных электрического и магнитного полей их значения получают путем интерполяции в местоположение частицы. Даже в случае линейной интерполяции время интерполяции значительно превосходит время, затрачиваемое на расчет движения частицы. Результаты проведенных расчетов показали, что в общем случае не всегда целесообразно обосновывать выбор конкретной модификации метода Бориса ее быстродействием. При выборе модификации метода Бориса для решения конкретной задачи в первую очередь следует обращать внимание на точность, так как более простая и быстрая схема может не дать выигрыша по времени.

Список литературы

1. Харлоу Ф.Х. Численный метод частиц в ячейках для задач гидродинамики // Вычислительные методы в гидродинамике. М.: Мир, 1967. 316–342.
2. Березин Ю.А., Вшивков В.А. Метод частиц в динамике разреженной плазмы. Новосибирск: Наука, 1980.

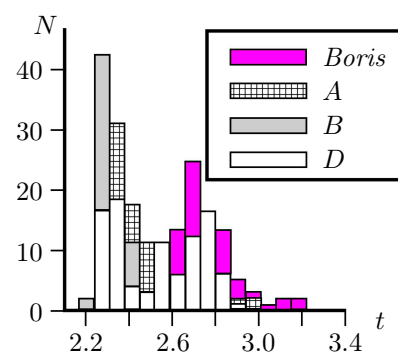


Рис. 6. Распределение процессорного времени, затраченного на работу каждого метода в трехмерном случае

Fig. 6. Distribution of processor time spent on the operation of each method in the three-dimensional case

3. *Boris J.P.* Relativistic plasma simulation—optimization of a hybrid code // Proc. of 4th Conf. on Numerical Simulation of Plasmas. Washington, DC: Naval Res. Lab., 1971. 3–67.
4. *Бэдсел Ч., Ленгдон А.* Физика плазмы и численное моделирование. М.: Энергоатомиздат, 1989.
5. *Qin H., Zhang S., Xiao J., et al.* Why is Boris algorithm so good? // Physics of Plasmas. 2013. **20**, N 8. doi 10.1063/1.4818428.
6. *Umeda T.* A three-step Boris integrator for Lorentz force equation of charged particles // Comput. Phys. Commun. 2018. **228**. 1–4. doi 10.1016/j.cpc.2018.03.019.
7. *Umeda T.* Multi-step Boris rotation schemes for Lorentz force equation of charged particles // Comput. Phys. Commun. 2019. **237**. 37–41. doi 10.1016/j.cpc.2018.11.001.
8. *Zenitani S., Kato T.N.* Multiple Boris integrators for particle-in-cell simulation // Comput. Phys. Commun. 2020. **247**. doi 10.1016/j.cpc.2019.106954.
9. *Zenitani S., Umeda T.* On the Boris solver in particle-in-cell simulation // Phys. of Plasmas. 2018. **25**, N 11. doi 10.1063/1.5051077.
10. *Ripperda B., Bacchini F., Teunissen J., et al.* A comprehensive comparison of relativistic particle integrators // The Astrophysical Journal Supplement Series. 2018. **235**, N 1. doi 10.3847/1538-4365/aab114.
11. *Winkel M., Speck R., Ruprecht D.* A high-order Boris integrator // Journal of Computational Physics. 2015. **295**. 456–474. doi 10.1016/j.jcp.2015.04.022.
12. *Qiang J.* High order numerical integrators for relativistic charged particle tracking // arXiv:1702.04486v1 [physics.acc-ph]. 2017.
13. *Кролл Н., Трайвеллис А.* Основы физики плазмы. М.: Мир, 1975.
14. *Поттер Д.* Вычислительные методы в физике. М.: Мир, 1975.
15. *Березин И.С., Жидков Н.П.* Методы вычислений. М.: Физматгиз, 1962.

Поступила в редакцию
14 сентября 2021

Принята к публикации
24 октября 2021

Информация об авторах

Екатерина Сергеевна Воропаева — студент магистратуры, Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова, д. 1, 630090, Новосибирск, Российская Федерация.

Константин Витальевич Вишивков — Ph.D., научный сотрудник, Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, просп. ак. Лаврентьева, д. 6,, 630090, Новосибирск, Российская Федерация.

Людмила Витальевна Вишивкова — к.ф.-м.н., ученый секретарь ИВМ и МГ СО РАН, Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, просп. ак. Лаврентьева, д. 6,, 630090, Новосибирск, Российская Федерация.

Галина Ильинична Дудникова — д.ф.-м.н., главный научный сотрудник, Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, просп. ак. Лаврентьева, д. 6,, 630090, Новосибирск, Российская Федерация.

Анна Анатольевна Ефимова — младший научный сотрудник, Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, просп. ак. Лаврентьева, д. 6,, 630090, Новосибирск, Российская Федерация.

References

1. F. N. Harlow, “The Particle-in-Cell Computing Method for Fluid Dynamics,” in *Methods in Computational Physics: Advances in Research and Applications* (Academic Press, New York, 1964), Vol. 3, pp. 319–345.
2. Yu. A. Berezin and V. A. Vshivkov, *The Particle-in-Cell Method in Rarefied Plasma Dynamics* (Nauka, Novosibirsk, 1980) [in Russian].
3. J. P. Boris, “Relativistic Plasma Simulation—Optimization of a Hybrid Code,” in *Proc. 4th Conf. on Numerical Simulation of Plasmas, Washington, DC, USA, November 2–3, 1970* (Naval Res. Lab., Washington, DC, 1971), pp. 3–67.



4. C. K. Birdsall and A. B. Langdon, *Plasma Physics via Computer Simulation* (McGraw-Hill, New York, 1985; Energoatomizdat, Moscow, 1989).
5. H. Qin, S. Zhang, J. Xiao, et al., “Why is Boris Algorithm so Good?” *Phys. Plasmas* **20** (2013). doi 10.1063/1.4818428.
6. T. Umeda, “A Three-Step Boris Integrator for Lorentz Force Equation of Charged Particles,” *Comput. Phys. Commun.* **228**, 1–4 (2018). doi 10.1016/j.cpc.2018.03.019.
7. T. Umeda, “Multi-Step Boris Rotation Schemes for Lorentz Force Equation of Charged Particles,” *Comput. Phys. Commun.* **237**, 37–41 (2019). doi 10.1016/j.cpc.2018.11.001.
8. S. Zenitani and T. N. Kato, “Multiple Boris Integrators for Particle-in-Cell Simulation,” *Comput. Phys. Commun.* **247** (2019). doi 10.1016/j.cpc.2019.106954.
9. S. Zenitani and T. Umeda, “On the Boris Solver in Particle-in-Cell Simulation,” *Phys. Plasmas* **25** (2018). doi 10.1063/1.5051077.
10. B. Ripperda, F. Bacchini, J. Teunissen, et al., “A Comprehensive Comparison of Relativistic Particle Integrators,” *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **235** (2018). doi 10.3847/1538-4365/aab114.
11. M. Winkel, R. Speck, and D. Ruprecht, “A High-Order Boris Integrator,” *J. Comput. Phys.* **295**, 456–474 (2015). doi 10.1016/j.jcp.2015.04.022.
12. J. Qiang, “High Order Numerical Integrators for Relativistic Charged Particle Tracking,” arXiv:1702.04486v1 [physics.acc-ph] (2017).
13. N. A. Krall and A. W. Trivelpiece, *Principles of Plasma Physics* (McGraw-Hill, New York, 1973; Mir, Moscow, 1975).
14. D. Potter, *Computational Methods in Physics* (Wiley, New York, 1973; Mir, Moscow, 1975).
15. I. S. Berezin and N. P. Zhidkov, *Computational Methods* (Fizmatgiz, Moscow, 1962; Pergamon, Oxford, 1965).

Received
September 14, 2021

Accepted for publication
October 24, 2021

Information about the authors

Ekaterina S. Voropaeva — Master Student, Novosibirsk State University, ulitsa Pirogova, 1, 630090, Novosibirsk, Russia.

Konstantin V. Vshivkov — Ph.D., Scientist, Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, prospekt Lavrentyeva 6, 630090, Novosibirsk, Russia.

Lyudmila V. Vshivkova — Ph.D., Scientific Secretary, Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, prospekt Lavrentyeva 6, 630090, Novosibirsk, Russia.

Galina I. Dudnikova — Dr. Sci., Principal Scientist, Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, prospekt Lavrentyeva 6, 630090, Novosibirsk, Russia.

Anna A. Efimova — Junior Scientist, Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, prospekt Lavrentyeva 6, 630090, Novosibirsk, Russia.