



Правительство РФ
Федеральное государственное
бюджетное образовательное
учреждение высшего
профессионального образования

**САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ**

Иванов Андрей Николаевич

Программный комплекс моделирования длительной эволюции заряженных частиц в электростатических полях

*научн. рук.:
проф. Андрианов С.Н.*

Санкт-Петербург, 2012



Актуальность

- длительная эволюция заряженных частиц в накопительном кольце как метод поиска ЭДМ (электрический дипольный момент)
- наличие ЭДМ может либо свидетельствовать о нарушении Т-симметрии, либо о существовании какого-то, до сих пор неизвестного, взаимодействия.



Цель работы

**разработка инструментария для
компьютерного моделирования длительной
эволюции заряженных частиц**

- ✓ **производительность вычислений**
- ✓ **согласованность с физическими свойствами рассматриваемых систем**

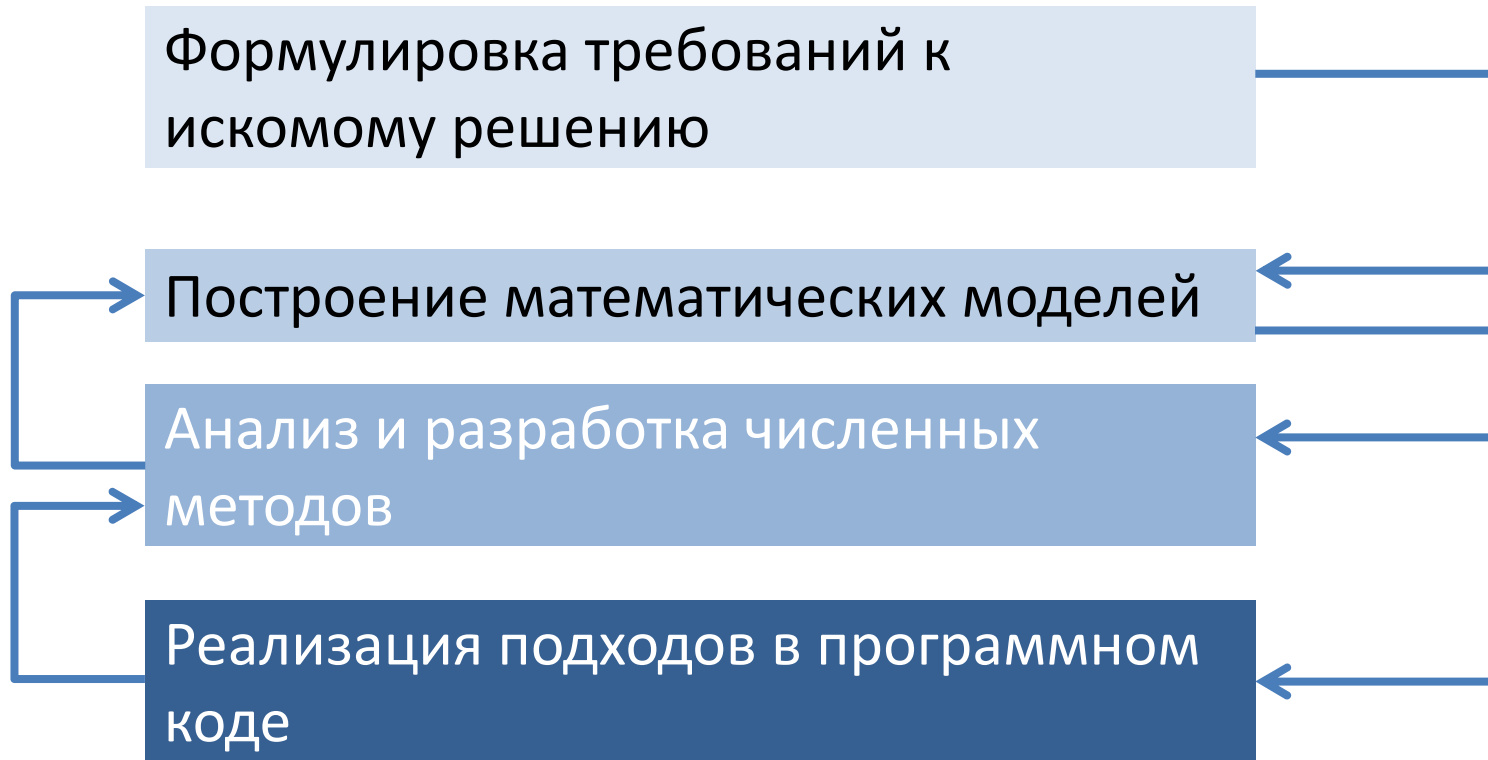
Задачи

Формулировка требований к
искомому решению

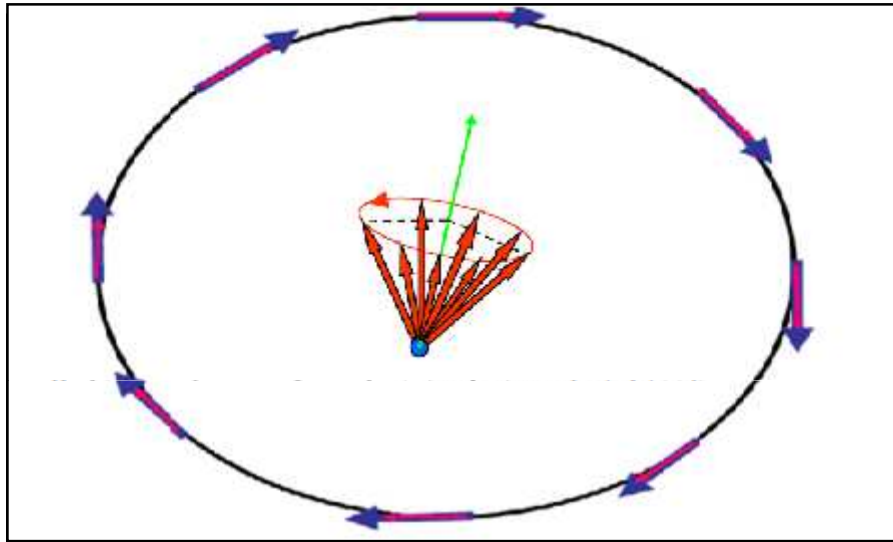
Построение математических моделей

Анализ и разработка численных
методов

Реализация подходов в программном
коде



Формализация задачи



- траекторные уравнения:

$$\frac{dp}{dt} = Q(E + v \times B),$$

$$p = mv = \frac{m_0 v}{(1 - v^2/c^2)^{1/2}},$$

- динамика спина:

$$\frac{dS}{dt} = \omega \times S, \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}},$$

$$\omega = \frac{Q}{m_0^2 c^2} \frac{1}{\gamma} \left(G + \frac{1}{1 + \gamma} \right) p \times E,$$

- движение вдоль прямой ($h = 1$) • движение вдоль дуги окружности ($h = x/R$)

$$\frac{dp_i}{dt} + \left(\frac{\dot{q}_i}{h_{i+1}} \frac{\partial h_i}{\partial q_{i+1}} - \frac{\dot{q}_{i+1}}{h_i} \frac{\partial h_{i+1}}{\partial q_i} \right) p_{i+1} + \left(\frac{\dot{q}_i}{h_{i+2}} \frac{\partial h_i}{\partial q_{i+2}} - \frac{\dot{q}_{i+2}}{h_i} \frac{\partial h_{i+2}}{\partial q_i} \right) p_{i+2} =$$

$$= Q(E_i + h_{i+1} \dot{q}_{i+1} B_{i+2} - h_{i+2} \dot{q}_{i+2} B_{i+1}), i = 1, 2, 3,$$

Численные методы

Пошаговое интегрирование

$$\mathbf{X}_{k+1} = \mathbf{F}(k, \mathbf{X}_k)$$



Построение отображения

$$\mathbf{X} = \mathbf{M} \circ \mathbf{X}_0$$



Симплектичность и сохранение энергии

модификации

наложение условий

симплектичность



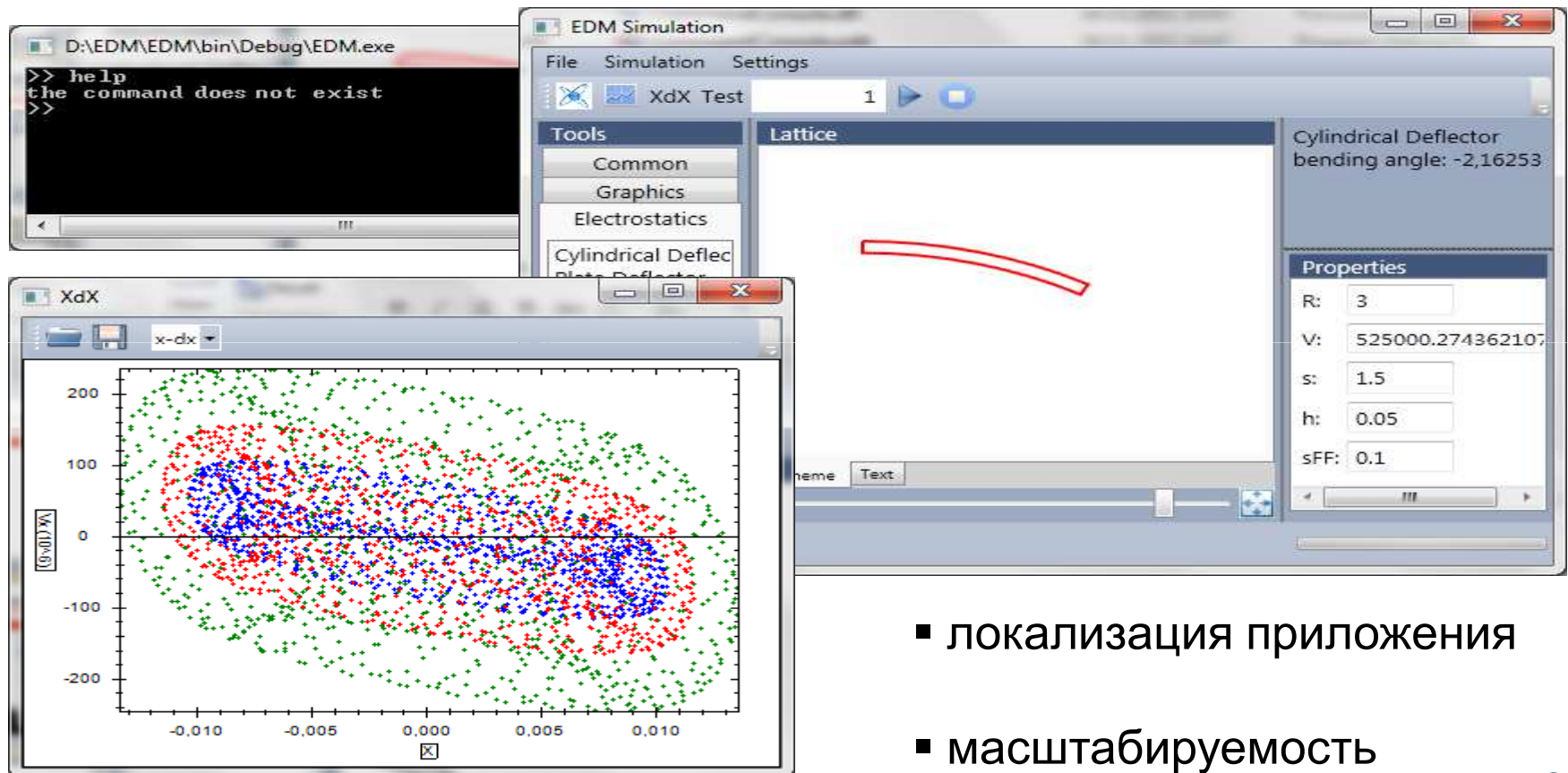
$$\left(\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{X}_0} \right)^* \mathbb{J} \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{X}_0} = \mathbb{J}, \forall \mathbf{X}_0$$

сохранение
энергии



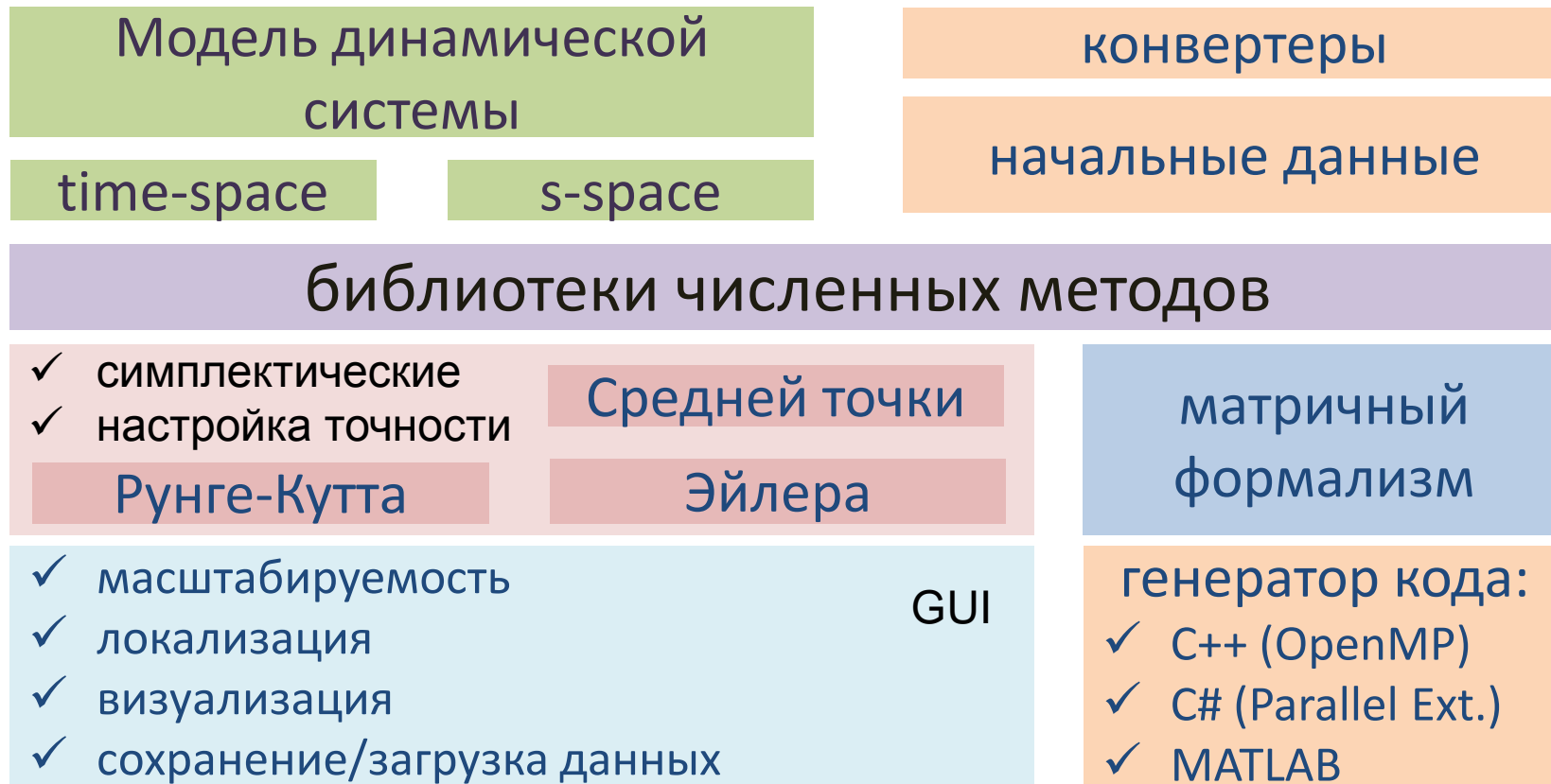
$$W_{kin} + W_{pot} = const$$

GUI



- локализация приложения
- масштабируемость

Общая архитектура решения



Матричный формализм

$$\frac{d\mathbf{X}(t)}{dt} = \mathbf{F}(t, \mathbf{X})$$

$$\mathbf{P}^{1k}(t) = \frac{1}{(k)!} \frac{\partial^k \mathbf{F}(t, \mathbf{X}_0)}{\partial (\mathbf{X}^{[k]})^T}$$

$$\frac{d\mathbf{X}(t)}{dt} = \sum_{k=1}^{\infty} \mathbf{P}^{1k}(t) \mathbf{X}^{[k]}$$

$$\mathbf{X}(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \mathbf{R}^{1k}(t) \mathbf{X}_0^{[k]}$$

Численная реализация

$$\frac{d\mathbf{X}(t)}{dt} = \sum_{k=1}^{\infty} \mathbf{P}^{1k}(t) \mathbf{X}^{[k]}$$

$$\mathbf{X}(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \mathbf{R}^{1k}(t) \mathbf{X}_0^{[k]}$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{d\mathbf{R}^{1k}(t)}{dt} \mathbf{X}_0^{[k]} = \sum_{k=1}^{\infty} \mathbf{P}^{1k}(t) \mathbf{X}^{[k]}$$

$$\frac{d\mathbf{R}^{1k}(t)}{dt} = \mathbf{P}^{1k}(t) \frac{\partial \mathbf{X}^{[k]}}{\partial (\mathbf{X}_0^{[k]})^T}$$

Матричный формализм

Кронекеровские операции

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}^{[2]} = \begin{pmatrix} x^2 \\ xy \\ yx \\ y^2 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{редуцирование}} \begin{pmatrix} x^2 \\ xy \\ y^2 \end{pmatrix}$$

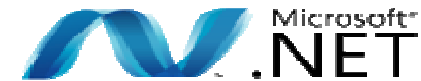
$$(\mathbf{A} \mathbf{X})^{[k]} = \mathbf{A}^{[k]} \mathbf{X}^{[k]}$$

$$(x + y)^2 = x^2 + 2xy + y^2$$

Символьные вычисления

**Структура данных – символьный полином,
операции выполняются до
заданного порядка
нелинейности**

Матричный формализм



- unsafe code
- MVC

Подсистема символьных вычислений

Кронекеровские операции

Модуль пошагового интегрирования

GUI

Интерпретатор

Графическая оболочка

Матричный формализм

Matrix Formalism Solver

File Settings Help

Name	Type	Value
a	Double	5
tmp	Numerica	$5*x-20,83333333333333*x*x*x+26,04166666666667*x*x*x*x*x$
f1	Numerica	$0-1*x1-1'$
f2	Numerica	$1*x0*x1+$
ans	MatrixSys	states: 2,

Command Window

```
>> a = 5;  
>> tmp = sin(a*x)  
5*x-20,83333333333333*x*x*x+26,04166666666667*x*x*x*x*x  
>> f1=-x1-x0*x1;  
>> f2=x0+x0*x1;  
>> system(array(f1, f2),1)  
order 1:  
0 -1  
1 0  
  
>> help|
```

Command History

```
tmp = sin(a*x)  
f1=-x1-x0*x1;  
f2=x0+x0*x1;  
system(array(f1, f2),1)
```



Вычислительный эксперимент

Структура накопительного
кольца:

136 элементов, 190 метров

моделирование динамики на
протяжении 3 млрд оборотов

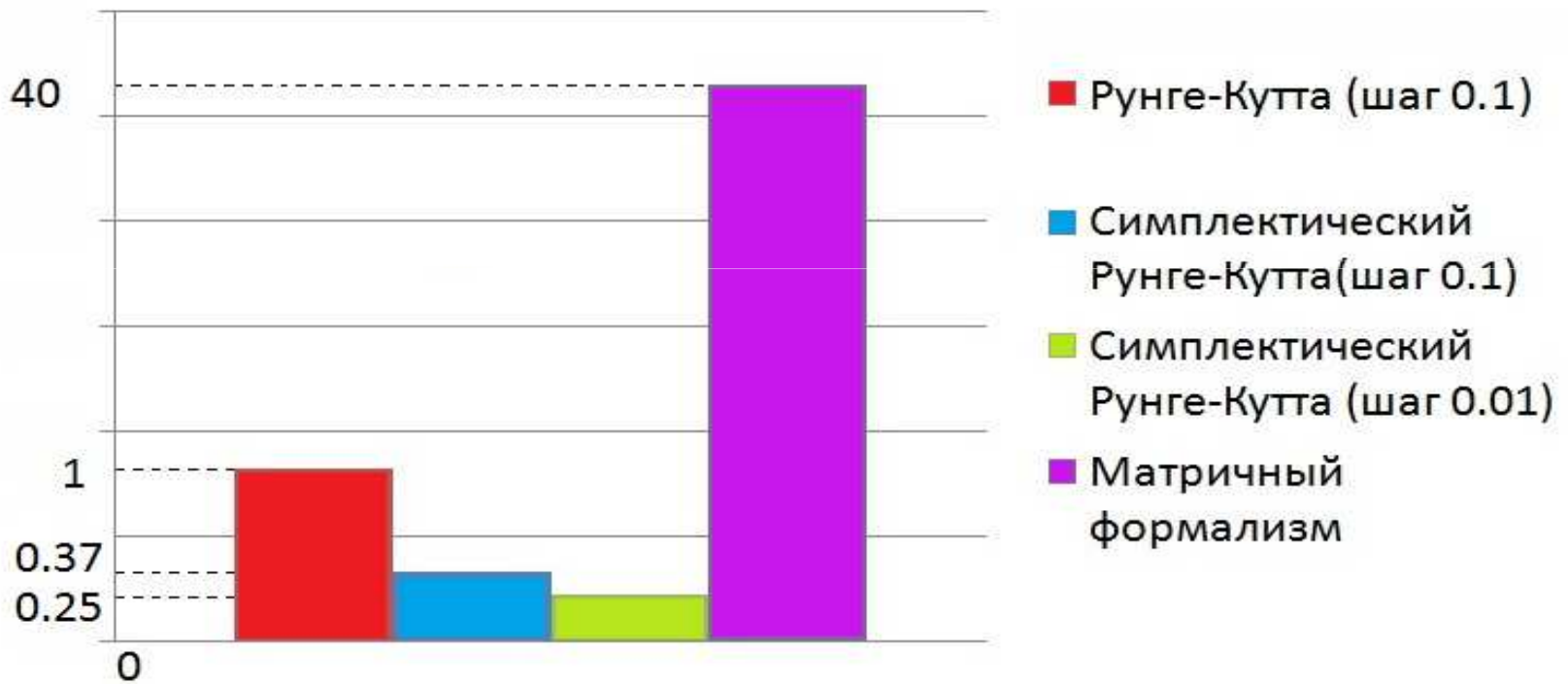


10^{12} итераций
при пошаговом
интегрировании

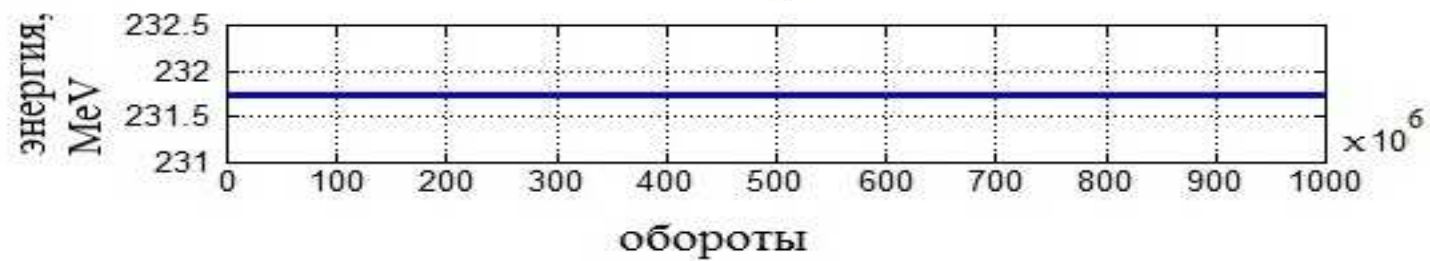
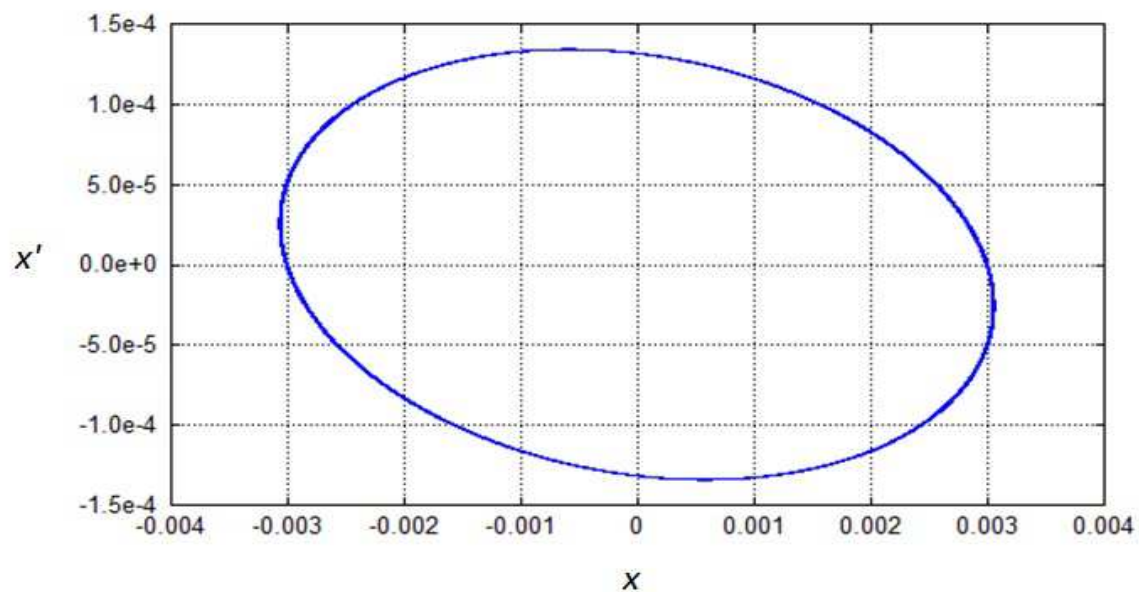
Пошаговое интегрирование: итеративное прохождение
всех элементов для каждой частицы

Матричный формализм: построение отображения и
повторное его использования для разных частиц

Вычислительный эксперимент



Вычислительный эксперимент





Выводы и дальнейшее развитие

Выводы

- разработаны математические модели;
- разработаны и реализованы библиотеки численных методов;
- разработана подсистема символьных вычислений;
- построен комплекс программных средств;
- получены результаты численного моделирования.

Дальнейшее развитие

- интеграция в программный комплекс «Виртуальный ускоритель»;
- реализация численных алгоритмов на GPGPU.



Научный задел

- участие в конференции **CPS10-12**, СПб;
- участие на конференции **ICALEPCS'11**, Гренобль, Франция;
- выступление с докладом в **Юлихе** по приглашению немецкой стороны, октябрь 2012;
- результаты исследования представлены на конференции **IPAC'12**, Новый Орлеан, США;
- приглашён на **workshop on "EDM searches at storage rings"** , Trento, Italy, October 1 - 5, 2012)



Спасибо за внимание

T-инвариантность: замена t на $-t$ не меняет вида уравнений движения. Это означает, что для любого возможного движения системы может осуществляться обращённое во времени движение, когда система последовательно проходит в обратном порядке состояния, симметричные состояниям, проходившим в «прямом» движении.

T-инвариантность приводит к определённым соотношениям между вероятностями прямых и обратных реакций, к запрету некоторых состояний поляризации частиц в реакциях, к равенству нулю электрического дипольного момента элементарных частиц



Пошаговое интегрирование

$$\mathbf{X}_{k+1} = \mathbf{F}(k, \mathbf{X}_k)$$



Построение отображения

$$\mathbf{X} = \mathbf{M} \circ \mathbf{X}_0$$



Симплектичность и сохранение энергии

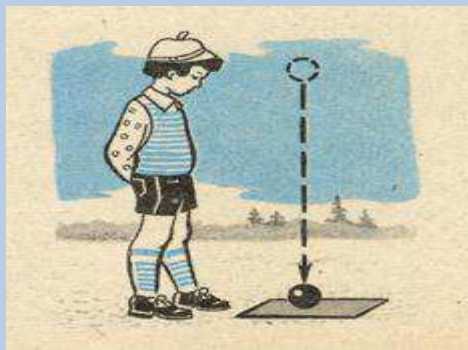
модификации

```
for (int i=0; i<n; ++i)
{
    if (нарушено_условие)
        произвести_корректировку;
}
```

наложение условий
(корректировка отображения)

- высокая производительность по сравнению с пошаговым интегрированием
- требует контроля точности

Физические объекты



Компьютерная модель



Математическая
модель
 $y = g$

Численные
методы



||

+

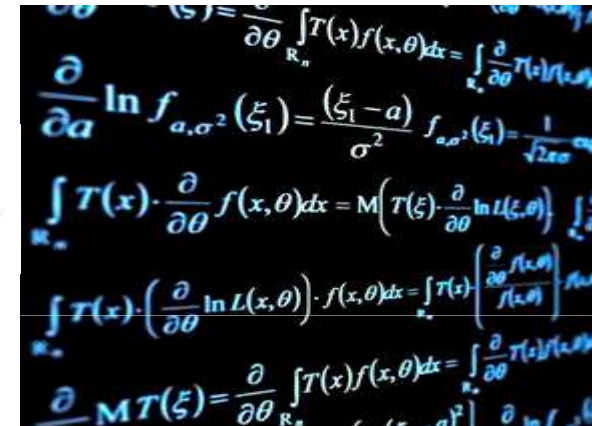


Обеспечение физических свойств

$$W_{kin} = m_0 c^2 \left((1 - v^2/c^2)^{1/2} - 1 \right), W_{pot} = Q\Phi.$$

$$v = c \sqrt{1 - \left((1 - v_0^2/c^2)^{-1/2} - \frac{Q}{m_0 c^2} (\Phi - \Phi_0) \right)^{-2}}.$$

$$\begin{aligned} X' &= F(s, X), \\ v_0' &= 0, \end{aligned} \iff \frac{d\bar{X}}{ds} = \bar{F}(\bar{X}),$$



Симплектичность

выбор численного метода

Сохранение энергии

обеспечивается математической моделью

Реализация численных алгоритмов

Пошаговое интегрирование

Неявная симплектическая схема Рунге-Кутты 4-го порядка 2 стадии

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y),$$

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^s b_j f(t_n + c_j h, y^{(j)})$$

$$y^{(i)} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_n + c_j h, y^{(j)})$$

$b_1 + \tilde{c}_1$	$\frac{b_1}{2}$	$\frac{b_1}{2} + \tilde{c}_1$
$b_1 - \tilde{c}_1$	$\frac{b_1}{2} - \tilde{c}_1$	$\frac{b_1}{2}$
	b_1	b_1

$b_1 = 1/2$ $2b_1\tilde{c}_1^2 = 1/12$

▪ постоянный шаг

▪ заданная точность
решения неявной схемы

Описание структурных элементов

$$\Phi(x, y) = -V + \frac{2V}{\ln \frac{R_2}{R_1}} \ln \frac{r}{R_1}$$

Пример задания
потенциала внутри элемента



Инструментарий матричного формализма

- представление элементарных функций в виде разложений в ряды Тейлора;
- представление в матричном виде до нужного порядка нелинейности;
- численное решение

База данных структурных элементов

Квадруполи, конденсаторы,
RF-поля...



$$\begin{pmatrix} x \\ x' \\ y \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.66 & 14.57 & 0 & 0 \\ -0.02 & -0.9 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -0.96 & 63.59 \\ 0 & 0 & -0.01 & -0.28 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ x'_0 \\ y_0 \\ y'_0 \end{pmatrix} +$$

$$+ \begin{pmatrix} 0.01 & -1.93 & 0 & 0 & -19.77 & 0 & 0 & 0 & -0.07 & -21.48 \\ 0 & 0.04 & 0 & 0 & -0.68 & 0 & 0 & 0 & 0.01 & -0.57 \\ 0 & 0 & 0.04 & -6.81 & 0 & 0.60 & -84.90 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.05 & 0 & -0.02 & -1.04 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0^2 \\ x_0 x'_0 \\ x_0 y_0 \\ x_0 y'_0 \\ x_0'^2 \\ x'_0 y_0 \\ x'_0 y'_0 \\ y_0^2 \\ y_0 y'_0 \\ y_0'^2 \end{pmatrix}$$



CosyInf

Разраб. методы

RF = OFF

$$\Delta x = \pm 3 \text{ mm}$$

3292

3658

$$\Delta k/k = 0$$

$$\Delta x = 0 \text{ mm}$$

323

349

$$\Delta k/k = 10^{-4}$$

RF = ON

$$\Delta x = 0 \text{ mm}$$

7316

9869

$$\Delta k/k = 10^{-4}$$

$$\Delta x = 0 \text{ mm}$$

774

1030

$$\Delta k/k = 3 \cdot 10^{-4}$$



```

1 %code generation
2 %mapping function
3 function X = mfmap(X0, n)
4     X=[X0];
5     for i=1:n
6         X=[X mfcalc(X(:,i))];
7     end
8 end
9 %one-tune solution
10 function X = mfcalc(X0)
11 %initial state:
12     x0=X0(1);x1=X0(2);x2=X0(3);x3=X0(4);x4=X0(5);x5=X0(6);x6=X0(7);
13 %calculation of kronecker pows:
14     X1=[x0*x0;x0*x1;x0*x2;x0*x3;x0*x4;x0*x5;x0*x6;x1*x1;x1*x2;x1*x3;x1*x4;x1*x5;x1*x6;x2*x2;x2*x3;x
15 %map generation:
16     R0=[-0.659157291208227 14.5107466192084 0 0 0 0 0;
17         -0.0279225726382601 -0.902398610200403 0 0 0 0 0;
18         0 0 -0.963857678275053 63.126519681891 0 0 0;
19         0 0 -0.0115489598037349 -0.281114492057654 0 0 0;
20         0 0 0 0 1 0 0;
21         0 0 0 0 0 1 0;
22         0 0 0 0 0 0 1;];
23     R1=[0.00655455698004801 -1.9246569341564 0 0 0 0 0 -19.8288540978227 0 0 0 0 0 -0.0006827355639
24         0.0014849640430069 0.0406432354731453 0 0 0 0 0 -0.674219037930754 0 0 0 0 0 -3.59816405616
25         0 0 0.0368972967812634 -6.78227206544694 0 0 0 0 0.600118236281679 -85.1382970640124 0 0 0
26         0 0 -2.34878291978778E-05 0.0506704824802186 0 0 0 0 -0.017021806539866 -1.04741174449508 0
27         0 0 0 0 0.0110384297662895 0 -0.0197963221306671 0 0 0 0.0114192634042709 0 -0.971125699221
28         0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 -0.0652568088868134 0 -0.0115022039117275 0 2.01153276132153
29         0 0 0 0 -0.0147900471086301 0 5.15219192833605E-11 0 0 0 -0.195458079308002 0 1.61324691716
30 %solution:
31     X=R0*X0+R1*X1;
32 end

```