Министерство образования и науки Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО

Кафедра дискретной математики и
информационных технологий

РАЗРАБОТКА ПРИЛОЖЕНИЯ НА ЯЗЫКЕ PYTHON ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ РОЖДЕНИЯ ЭЛЕКТРОН-ПОЗИТРОННОЙ ПЛАЗМЫ В СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ И ПРОВЕРКА МОДЕЛИ НА ПРИМЕРЕ АНАЛИТИЧЕСКОГО РЕШЕНИЯ ДЛЯ "ПИКОВОГО" ПОЛЯ

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

Студента 4 курса 421 группы
направления 09.03.01 – Информатика и вычислительная техника
факультета КНиИТ
Иванова Александра Дмитриевича

Научный руководитель ______________ А.Д. Панферов
доцент, к.ф.-м.н., доцент

Заведующий кафедрой ______________ Л.Б. Тяпаев
доцент, к.ф.-м.н., доцент

Саратов 2017

ВВЕДЕНИЕ

Информатика и вычислительная техника в настоящее время во многом определяют характер развития технологий в различных областях человеческой деятельности. Не является исключением и современная наука. Если относительно недавно именно потребности научных расчётов стимулировали появление первых ЭВМ, то сейчас доступность вычислительных ресурсов и наличие наработанных библиотек алгоритмов в значительной мере облегчает поиск новых явлений и закономерностей. Конечно, практика и эксперимент остаются конечным критерием истины. Но эффективное моделирование, например, сложных физических процессов, позволяет продвигаться в тех направлениях, где экспериментальные исследования в лабораторных условиях пока или вообще невозможны.

Примером эффективного использования численного моделирования является область исследования процессов квантово-полевого рождения пар частица-античастица в сильных электрических полях. Сложность теории таких процессов делает возможным оценивать их закономерности только путём сложного численного моделирования. Тем не менее, недавно было получено точное аналитическое решение, описывающее процессы рождения пар для случая электрического поля со специальной «пиковой» формой зависимости от времени. Проверка соответствия этого решения результатам численного моделирования является важной и актуальной задачей.

Передо мной была поставлена задача разработать программу для численного моделирования процесса на основе метода кинетического уравнения. Сама математическая модель в этом подходе представляет собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений со сложной нелинейной зависимостью коэффициентов от ряда параметров.

В качестве языка программирования был определён Python. Подбор библиотек для собственно математического моделирования, оформления интерфейса и визуализации результатов был предоставлен на моё усмотрение.

Необходимо было разработать удобный в обращении инструмент для быстрого определения параметров процесса в зависимости от конкретных характеристик электрического поля в рамках заданной формы его зависимости от времени.

Структурно работа состоит из введения, пяти глав, заключения, списка использованных источников и одного приложения. Названия глав:

1 Постановка задачи;

2 Понятие ОДУ. Методы решения ОДУ;

3 Обзор программных инструментов для решения задачи;

4 Разработка приложения моделирования физического процесса;

5 Исследование поведения функции с помощью разработанного приложения.

Научная новизна работы: разработано приложение для моделирования процесса зарождения электрон-позитронной плазмы в сильном электромагнитном поле, содержащие возможности исследования зависимости вероятности зарождения от времени или импульса при различных начальных параметрах. Приложение было реализовано на высокоуровневом языке программирования Python, который отвечает всем современным требованиям как в быстродействии, так и в простоте взаимодействия пользователя с приложением.

Разработанное приложение предназначено для научных исследований в области взаимодействия сильных электромагнитных полей с вакуумом, которые на данный момент невозможно смоделировать физически.

Основное содержание работы

1 Постановка задачи

Основное уравнение физического процесса можно представить в виде системы ОДУ, которая и будет решаться в данной работе:

$$\begin{cases} f' = \frac{1}{2}\lambda u, \\ u' = \lambda(1-2f) - 2\omega v, \\ v' = 2\omega u. \end{cases}$$

В данной системе функция f имеет тот же смысл, что и в исходном интегро-дифференциальном уравнении, а u и v представляют собой вспомогательные функции. Данная система уравнений справедлива при любой зависимости электрического поля от времени, но она получена при условии, что поле не меняет своего направления в течении времени и однородно в пространстве.

Исследуемое переменное электрическое поле задается следующей зависимостью напряженности от времени:

$$E(t) = \begin{cases} E_0 * \exp\left(\frac{t}{\tau}\right), \ t \geq 0 \\ E_0 * \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right), \ t < 0 \end{cases}$$

где τ – характерное время процесса, E_0 – амплитуда напряженности электрического поля.

2 Понятие ОДУ. Методы решения ОДУ

Обыкновенным дифференциальным уравнением n–го порядка называется уравнение вида

$$F\left(x, y(x), y'(x), y''(x), \ \dots, y^{(n)}(x)\right) = 0, \qquad (2.1)$$

где F– известная функция $(n+2)-$х переменных, x – независимая переменная из интервала (a, b), $y(x)$– неизвестная функция. Числоnназывается порядком уравнения.

Функция $y(x)$ называется решением ОДУ на промежутке (a, b), если она n раз дифференцируема на (a, b) и при подстановке в уравнение обращает его в тождество.

Обыкновенные дифференциальные уравнения, разрешенные относительно старшей производной, называют уравнениями в *нормальной форме:*

$$y^{(n)} = f(x, y, y', y'', \dots, y^{(n-1)}). \quad (2.2)$$

Дифференциальное уравнение, как правило, имеет бесконечное множество решений. Чтобы выделить нужное решение, используют дополнительные условия.

Чтобы выделить единственное решение уравнения n–го порядка

$$y(x_0) = y_0, y'(x_0) = y_1, y''(x_0) = y_2, \dots, y^{(n-1)}(x_0) = y_{n-1} \quad (2.3)$$

Задачей Коши (или начальной задачей) называется задача отыскания решения $y = y(x)$ уравнения (2.1) удовлетворяющего условиям (2.3)

Условия (2.3)называются начальными данными, начальными условиями или данными Коши.

Любое конкретное решение $y = \varphi(x)$уравненияn–го порядка $F\left(x, y(x), y'(x), y''(x), \dots, y^{(n)}(x)\right) = 0$, называетсячастным решением.

Общим решением дифференциального уравнения

$$y^{(n)} = f(x, y, y', y'', \dots, y^{(n-1)}) \quad (2.4)$$

называется функция

$$y = \Phi(x, C_1, C_2, \dots, C_n), \quad (2.5)$$

содержащая некоторые константы$C_1, C_2, \dots, C_n$, и обладающая следующими свойствами:

1. $\Phi(x, C_1, C_2, \dots, C_n)$ является решением уравнения при любых допустимых значениях $C_1, C_2, \dots, C_n$;
2. для любых начальных данных$y(x_0) = y_0, y'(x_0) = y_1, y''(x_0) = y_2, \dots, y^{(n-1)}(x_0) = y_{n-1}$, для которых задача Коши имеет единственное решение, существуют значения постоянных$C_1 = A_1, C_1 = A_1, \dots, C_n = A_n$такие что решению$y = \Phi(x, A_1, A_2, \dots, A_n)$удовлетворяет заданным начальным условиям.

Иногда частное или общее решение уравнения удается найти только в неявной форме $f(x,\ y) =\ 0$ или $G(x,\ y,\ \text{С}_1,\ \text{С}_2,\ \dots\ ,\text{С}_n)\ =\ 0$

Такие решения называют частным интегралом уравнения.

Нормальной системой дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами n-го порядка называется система дифференциальных уравнений вида:

$$\frac{dx_i}{dt} = \sum_{k=1}^{n} a_{ik}x_k(t) + f_i(t), i = 1, 2, \dots, n, \tag{2.6}$$

где$x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$– неизвестные функции переменной t, которая часто имеет смысл времени, a_{ij}– заданные постоянные коэффициенты, $f_i\ (t)$ − заданные функции переменной t.

$$\begin{cases} X(t)=\begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ \dots \\ x_n(t) \end{pmatrix}, \\ X'(t)=\begin{pmatrix} x'_1(t) \\ x'_2(t) \\ \dots \\ x'_n(t) \end{pmatrix}, \\ A=\begin{pmatrix} a_{11}\, a_{12} \dots a_{1n} \\ a_{21}\, a_{22} \dots a_{2n} \\ \dots \\ a_{n1}\, a_{n2} \cdots a_{nn} \end{pmatrix}, \\ f(t)=\begin{pmatrix} f_1(t) \\ f_2(t) \\ \dots \\ f_n(t) \end{pmatrix}. \end{cases} \tag{2.7}$$

Полагая (2.7), систему ОДУ можно переписать в матричной форме:

$$X'(t) = AX(t) + f(t) \tag{2.8}$$

Если вектор $f(t)$ тождественно равен нулю, то система называется однородной.

Задача решения обыкновенных дифференциальных уравнений сложнее задачи вычисления однократных интегралов, и доля задач, интегрируемых в явном виде, здесь существенно меньше.

Когда говорят об интегрируемости, имеют в виду, что решение может быть вычислено при помощи конечного числа «элементарных» операций: сложения, вычитания, умножения, деления, возведения в степень, логарифмирования, потенцирования, вычисления синуса и косинуса и т. п. Уже в период, предшествовавший появлению ЭВМ, понятия «элементарной» операции претерпели изменение. Решения некоторых частных задач настолько часто встречаются в приложениях, что пришлось составить таблицы их значений, в частности таблицы интегралов Френеля, функций Бесселя и ряда других, так называемых специальных функций. При наличии таких таблиц исчезает принципиальная разница между вычислением тригонометрических функций и специальных функций. В том и другом случаях можно вычислять значения этих функций при помощи таблицы, и те, и другие функции можно вычислять, приближая их многочленами, рациональными дробями и т.д. Таким образом, в класс задач, интегрируемых в явном виде, включались задачи, решения которых выражаются через специальные функции. Однако и этот, более широкий, класс составляет относительно малую долю задач, предъявляемых к решению. Существенное расширение класса реально решаемых дифференциальных уравнений, а, следовательно, и расширение сферы применения математики произошло с разработкой численных методов и активным повсеместным использованием ЭВМ.

В настоящее время затраты человеческого труда при решении на ЭВМ задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений сравнимы с затратами на то, чтобы просто переписать заново формулировку этой задачи. При желании можно получить график решения или его изображение на экране. В результате этого для многих категорий научных работников существенно уменьшился интерес к изучению частных способов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений в явном виде.

3 Обзор программных инструментов для решения задачи

Для решения поставленной задачи был выбран язык Python версии 3.6. Python – это простой в освоении язык программирования. Он имеет структуры данных высокого уровня, а также эффективный подход к объектно-ориентированному программированию. Удобный синтаксис и динамическая типизация Python вместе с его интерпретируемой природой делают его идеальным языком для написания сценариев и быстрой разработки приложений во многих областях на большинстве платформ.

Mpmath – это свободная библиотека Python, для арифметических вычислений с плавающей запятой с произвольной точностью. Она была разработана Фредриком Йохансоном в 2007 году, при участии других разработчиков.

С помощью mpmath почти любой расчет для действительных и комплексных чисел может быть выполнен с одинаковой точностью независимо от количества знаков после запятой (будь то 10 или 1000).

Mpmath содержит огромное количество специальных функций с произвольной точностью и полной поддержкой комплексных чисел.

NumPy – это библиотека с открытым исходным кодом для научных вычислений на Python. Библиотека была разработана в 1995 году Джимом Хаганином.

Помимо очевидных научных применений, NumPy может также использоваться как эффективный многомерный контейнер общих данных. Могут быть определены произвольные типы данных. Это позволяет NumPy легко и быстро интегрироваться с широким спектром баз данных.

SciPy — библиотека для языка программирования Python с открытым исходным кодом, предназначенная для выполнения научных и инженерных расчётов.

Пакет SciPy базируется на пакете NumPy и расширяет его возможности. Например, включает модули для численного интегрирования, статистического анализа, решения обыкновенных дифференциальных уравнений, обработки сигналов и изображений и многие другие.

Модуль Tkinter («Интерфейс Tk») является стандартным интерфейсом Python из набора инструментов TK GUI. Tk и Tkinter доступны на большинстве платформ Unix, а также в системах Windows. (Tk сам по себе не является частью Python, он поддерживается в ActiveState).

Matplotlib – это библиотека для построения 2D-графики Python, которая позволяет получать качественные показатели изображения как в печатном виде, так и в интерактивных средах на различных платформах. Matplotlib можно использовать в скриптах Python, оболочке Python и IPython, серверах вебприложений и в четырех графических инструментах пользовательского интерфейса.

4 Разработка приложения моделирования физического процесса

В соответствии с поставленными задачами была произведена разработка приложения моделирования вакуумного зарождения частиц в электромагнитных полях.

Приложение работает по следующему алгоритму:

1. Выбирается модель исследований
2. На открывшемся окне в поля ввода записываются параметры эксперимента
3. Введенные параметры проходят проверку на корректность
4. Происходит решение системы дифференциальных уравнений в соответствии с введенными параметрами
5. Результаты выводятся на информационное поле
6. Если необходимо, строится график

5 Исследования поведения функции с помощью разработанного приложения

Первым этапом было исследование, направленное на поиск необходимого временного коэффициента, определяющего начальное и конечное значение времени для системы ОДУ, а также задающего область определения исследуемой функции. Размер области определения прямо пропорционально влияет на время работы программы, следовательно, необходимо подобрать минимальный временной коэффициент, при котором не нарушается адекватность моделирования физического процесса.

Функция имеет адекватно установившееся конечное значение уже при K = 5, однако, чем выше K, тем ближе к $-\infty$ находится начальное значение времени для системы дифференциальных уравнений, а следовательно выше точность. Наиболее оптимальным между точностью и временем работы, с учетом специфики дальнейших исследований, было выбрано K = 7.

Далее было необходимо проверить соответствие численного решения и аналитического.

При значении точности tol = 0,001 численное решение имеет небольшие погрешности в значениях относительно аналитического, но в целом тенденции сохраняются на протяжении всей эволюции функции и погрешность остается минимальной при K = 7. Дальнейшее увеличение K не имеет смысла, так как оно не значительно влияет на погрешность.

Следующим этапом было исследование функции в достаточно большом объёме импульсного пространства. Такое численное моделирование поведения исследуемой системы позволит выявить области импульсного пространства, подлежащие более тщательному рассмотрению (с точки зрения максимальной вероятности обнаружения частиц), адекватно оценить характер поведения функции, скорректировать различные параметры системы для достижения наилучшего результата с точки зрения поставленных задач.

При фиксированном нулевом значении pp зависимость функции распределения от pl по своему характеру напоминает Гауссово распределение с максимумом в нуле. Диапазон значений функции при заданных параметрах лежит в интервале от 0 до $2{,}8 \cdot 10^{-3}$. Значения функции падают более чем на 3 порядка в интервале pl [0;2]. Данный результат указывает на целесообразность дальнейших исследований в рамках значений pl = [-2; 2].

Аналогичный эксперимент был проведен и для перпендикулярной составляющей импульса при фиксированной параллельной.

Из данного эксперимента видно, что функция зависит от перпендикулярной составляющей импульса схожим образом и так же имеет наиболее значимые для исследования значения в промежутке [-2;2].

Далее был построен трехмерный график функции распределения вероятности от импульса для более наглядной демонстрации зависимости.

Следующим шагом является исследование функции распределения вероятности обнаружения частиц в зависимости от действующего электрического поля. В частности, рассматривается влияние на конечный результат различных значений амплитуды электрического поля E(t). Это максимально достижимое абсолютное значение напряженности электрического поля в рассматриваемой задаче.

Общее характерное поведение функции сохраняется, так как во всех трех рассмотренных случаях можно выделить изменение величины максимума вероятности обнаружения частиц. для значения амплитуды = 0.35 максимальное значение функции составляет примерно $1{,}3*10^{-3}$, для амплитуды = 0.4 оно оказывается равным уже близко к $1{,}9*10^{-3}$, а для амплитуды = 0.45 составляет $2{,}8*10^{-3}$. Таким образом становится ясно, что чем выше величина максимального значения напряженности поля, тем выше вероятность зарождения частиц.

Другим физическим параметром исследуемой системы является характерное время процесса – τ. Он определяет, за какое время значение напряженности поля изменится в e раз. Этот параметр присутствует в формуле задания электрического поля.

Чем выше значение характерного времени процесса, тем выше амплитуда колебаний значений функции распределения и дольше время, необходимое ей чтобы прекратить значительную часть колебаний. В данном случае при увеличении τ с 2 до 5 необходимое время для прекращения колебаний увеличилось с 7 до 15. Также из графиков зависимости функции от импульса видно, что при увеличении характерного времени уменьшается вероятность возникновения частицы в исследуемом импульсном пространстве. В данном случае при $\tau = 2$ максимальное значение вероятности составляло около $5*10^{-3}$ в то время как при $\tau = 5$ максимальное значение составляло уже $2{,}4*10^{-3}$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В представленной работе мною была решена задача разработки приложения для численного моделирования процесса рождения электрон позитронных пар в электрическом поле со специальной «пиковой» зависимостью от времени на основе метода кинетического уравнения. Разработка программы оказалась актуальной в связи с появлением точных аналитических характеристик модели данного процесса, полученных альтернативным методом прямого решения полевых уравнений.

Для разработки приложения использованы средства свободной математической библиотеки языка Python MpMath, а также графические библиотеки Tkinter и Matplotlib.

В ходе выполнения работы были решены следующие промежуточные задачи:

- изучены основные численные методы решения ОДУ;
- изучен инструментарий языка Python для численного решения систем дифференциальных уравнений;
- выбран инструментарий языка Python для создания графического интерфейса.

В практической части работы описываются модули разработанного приложения, и приводятся результаты численных экспериментов, демонстрирующих влияние различных параметров действующего электрического поля на исследуемый процесс. Представлено сопоставление результатов моделирования с использованием разработанного приложения и точного аналитического решения. Исследована зависимость точности их соответствия от параметров моделирования. Показано точное воспроизведение результатов аналитического решения.