

Пакет прикладных программ Эра - 2В для
моделирования интенсивных пучков
заряженных частиц на
квазиструктурированных сетках*

Д.О. БЕЛЯЕВ
А.Н. КОЗЫРЕВ
В.М. СВЕШНИКОВ

*Институт вычислительной математики и
математической геофизики СО РАН*
e-mail: victor@lapasrv.sccc.ru

Аннотация

Разработан пакет прикладных программ Эра - 2В для моделирования интенсивных пучков заряженных частиц на адаптивных несогласованных квазиструктурированных сетках, которые позволяют увеличивать плотность узлов в подобластях сильных неоднородностей пучка и учесть сложную конфигурацию границы. Излагаются алгоритмы решения нелинейной самосогласованной задачи моделирования интенсивных пучков, структура данных и структура пакета.

1. Введение

Интенсивные пучки заряженных частиц являются рабочим элементом в электронно-оптических системах различного практического назначения [1]. Основным отличием пакета прикладных программ ЭРА-2В, рассматриваемого в настоящей работе и ориентированного на решение плоских или осесимметричных задач в двумерной постановке, от существующих аналогов (см., например, [2-4]), является то, что решение нелинейной самосогласованной задачи по расчету интенсивных пучков проводится на адаптивных квазиструктурированных сетках. Такие сетки за счет увеличения числа узлов в подобластях, на которые разбивается расчетная область, позволяют отследить неоднородности пучка и разномасштабность геометрии,

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №10-01-90009) и СО РАН (проект ИП 26)

а за счет локальной модификации узлов учесть сложную конфигурацию внешней границы.

Пакет состоит из трех частей: графического интерфейса, процессора и сервисной системы. При помощи графического интерфейса осуществляется ввод исходных данных о геометрии расчетной области, граничных условиях, квазиструктурированной сетке, пучке заряженных частиц. Процессор пакета проводит расчет потенциала электрического поля, интегрирование уравнений движения, вычисление объемного заряда, вносимого частицами, решение нелинейной самосогласованной задачи. При этом применяется итерационный метод декомпозиции, построенный на основе подхода, предложенного в работе [5], поэлементная технология расчета пучка заряженных частиц [6] и экономичный вариант метода спуска для решения нелинейной задачи [7]. Сервисная система пакета осуществляет вывод в наглядной форме результатов расчета таких как, например, эквипотенциальные линии, траектории движения заряженных частиц, фазовые портреты пучка и другие.

Разработанный в настоящей работе пакет прикладных программ является развитием пакета Эра - DD для решения краевых задач, рассмотренного в работе [8].

2. Постановка задачи и краткое описание алгоритмов ее решения

Рассматривается задача расчета интенсивного стационарного пучка заряженных частиц в замкнутой двумерной (плоской или осесимметричной) области $\bar{G} = G \cup \Gamma$, где Γ – граница области G . Математически данная проблема сводится к нелинейной самосогласованной задаче, постановка которой приведена, например, в работе [9]. Ее решение осуществляется каким-либо итерационным методом, который можно записать в виде

$$\rho^{(n+1)} = \Phi(\rho^{(n)}), \quad (1)$$

где ρ – плотность объемного заряда, вносимого частицами, Φ – функция, определяющая конкретный метод, $n = 0, 1, \dots$ – номер итерации. В задачах с ограничением тока эмиссии объемным зарядом в (1) вместо ρ фигурирует j – плотность тока пучка. На каждой итерации (1) мы имеем следующие вычислительные задачи: 1) расчет потенциала и напряженности электрического поля, 2) вычисление траекторий движения заряженных частиц, 3) расчет объемного заряда.

Для их решения построим в расчетной области \bar{G} квазиструктурированную сетку Ω следующего вида. Сначала введем в прямоугольнике $\bar{R} = \{0 \leq x \leq D_x, 0 \leq y \leq D_y\}$, где D_x, D_y – заданы ($\bar{G} \subset \bar{R}$) равномерную макросетку

$$\bar{\Omega}_H = \left\{ X_I = IH_x, Y_J = JH_y, \quad I = \overline{0, N_x}, J = \overline{0, N_y}, \quad H_x = \frac{D_x}{N_x}, H_y = \frac{D_y}{N_y} \right\},$$

где N_x, N_y – заданные целые числа, с шагами $H_x, H_y \gg h$ (h – максимальный шаг сетки, на которой аппроксимируется рассматриваемая задача). При этом область G разбивается на подобласти G_k , иными словами проводится декомпозиция G . Среди G_k будем различать внутренние $G_k^{(1)}$, граничные $G_k^{(2)}$ и внешние подобласти. Замыкание $\bar{G}_k^{(1)}$ внутренних подобластей состоит только из точек G , граничных $\bar{G}_k^{(2)}$ – из точек G и Γ , а внешние подобласти исключаются из расчетов. Граница сопряжения подобластей, которую мы обозначим через γ , состоит из отрезков координатных линий макросетки Ω_H . Точки пересечения ее координатных линий назовем макроузлами.

Затем в подобластях G_k построим равномерные прямоугольные подсетки

$$\bar{\Omega}_{h,k} = \{x_{i_k} = X_I + i_k h_{x,k}, y_{j_k} = Y_J + j_k h_{y,k}, \quad i_k = \overline{0, n_{x,k}}, j_k = \overline{0, n_{y,k}}\}$$

с шагами $h_{x,k} = \frac{X_{I+1} - X_I}{n_{x,k}}$, $h_{y,k} = \frac{Y_{J+1} - Y_J}{n_{y,k}}$, причем будем предполагать без существенного ограничения общности, что $n_{x,k} = 2^{m_{x,k}}$, $n_{y,k} = 2^{m_{y,k}}$, где $m_{x,k}, m_{y,k} > 0$ – целые числа. В целях адаптации в граничных подобластях проведем локальную модификацию подсеток, состоящую в сдвиге приграничных узлов, отстоящих от границы на расстояние, меньшее половины шага сетки, в ближайшие точки границы. Объединение подсеток образует результирующую квазиструктурированную сетку $\bar{\Omega}_h$.

Потенциал электрического поля φ находится из решения линейаризованной краевой задачи

$$\Delta \varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}, \quad l\varphi|_{\Gamma} = g, \quad (2)$$

где Δ – оператор Лапласа, l – оператор граничных условий, ε_0 – диэлектрическая постоянная, ρ, g – известные функции координат. Рассматриваются граничные условия Дирихле, Неймана, а также смешанные краевые условия. Краевая задача (2) методом конечных объемов [10] заменяется на $\bar{\Omega}_h$ приближенной задачей

$$\Delta_h \varphi_h = -\frac{\rho_h}{\varepsilon_0}, \quad l_h \varphi_h|_{\Gamma} = g_h, \quad \varphi_h|_{\gamma} = v_h, \quad (3)$$

где $\varphi_h, \rho_h, v_h, g_h$ – приближенные значения функций, а Δ_h, l_h – аппроксимации оператора Лапласа и оператора граничных условий. Так как подсетки $\bar{\Omega}_{h,k}$ могут быть несогласованными, то решение задачи (3) находится итерационным методом декомпозиции. Для этого на границе сопряжения γ определяется сетка ω_h , состоящая из узлов подсеток $\bar{\Omega}_h^{(k)}$ и не содержащая макроузлов. На ней вводится система линейных алгебраических уравнений, аппроксимирующих условия сопряжения, которая совместно с системой линейных алгебраических уравнений, аппроксимирующих уравнение Пуассона в макроузлах, решается градиентными итерационными методами [5]. Перед расчетом траекторий движения заряженных частиц в узлах

квазиструктурированной сетки путем численного дифференцирования потенциала вычисляются компоненты E_x, E_y напряженности электрического поля $\vec{E} = -grad \varphi$. Во внутренних узлах подсеток для этого используются трехточечные схемы. В околограничных узлах проводится аппроксимация потенциала на треугольных или четырехугольных сеточных элементах при помощи приближающей функции вида

$$\Phi(\lambda, \eta) = a_0 + a_1\lambda + a_2\eta + a_3\lambda\eta + a_4\lambda^2 + a_5\eta^2. \quad (4)$$

Здесь предполагается, что в рассматриваемых элементах введена локальная прямоугольная система координат (λ, η) , а неизвестные коэффициенты a_0, \dots, a_5 определяются по методу наименьших квадратов с использованием граничных условий, аналогично тому, как это сделано в работе [11]. Искомые компоненты напряженности находятся путем дифференцирования выражения (4).

Расчет траекторий движения заряженных частиц проводится с применением поэлементной технологии [6]. Ее суть заключается в том, что рассчитываемый отрезок траектории должен принадлежать только одному сеточному элементу, а при расчете очередной точки траектории автоматически определяется элемент, в который переходит данная частица. Проведена адаптация поэлементной технологии к квазиструктурированной сетке.

Объемный заряд, вносимый заряженными частицами, распределяется по узлам сетки, являющимися вершинами треугольного или четырехугольного элемента по схемам второго порядка точности [6].

Решение нелинейной самосогласованной задачи осуществляется с выделением прикатодной особенности путем декомпозиции расчетной области на прикатодную G_c основную G_b подобласти [12]. На границе сопряжения подобластей Γ_{cb} определяется нелинейное уравнение Пуанкаре-Стеклова относительно потенциала электрического поля u . Это уравнение аппроксимируется на Γ_{cb} на специальной сетке системой нелинейных операторных уравнений, которая решается методом спуска [7]

$$u^{n+1} = u^n + \tau_n s^n, \quad (5)$$

где s^n – направление спуска, а τ^n – его величина. Для нахождения τ^n используется экономичный подход, требующий на каждой итерации (5), решения всего одной вспомогательной самосогласованной задачи.

3. Структура данных и структура пакета

Структура данных (СД) представляет собой важное звено в решении рассматриваемой задачи, от которого существенно зависит эффективность работы вычислительных алгоритмов. Она делится на два основных раздела: 1) СД для решения краевой задачи, которая изложена в работе [8], 2) СД для расчета пучка. Данные о расчете пучка включают информацию о геометрии катода, сорте заряженных частиц (отношение заряда к массе),

энергии влета, угловых и энергетических группах, плотности тока на катоде, типе пучка (релятивистский, нерелятивистский), счетных параметрах. К последним относятся следующие данные: число трубок тока, запускаемых с катода, ширина прикатодной подобласти, начальный временной шаг и точность расчета траекторий (если вычисления ведутся без применения поэлементной технологии), максимальное число итераций по решению самосогласованной задачи.

Пакет состоит из трех основных частей: 1) графического интерфейса, 2) процессора, 3) сервисной системы.

Основным назначением графического интерфейса является удобное задание и редактирование геометрической и функциональной информации о расчетной области, граничных условиях, квазиструктурированной сетке и пучке заряженных частиц. В состав интерфейса входят следующие компоненты: графическое окно визуализации, меню, панель инструментов с кнопками управления, диалоговые окна, при помощи которых оперативно вводятся данные.

Процессор пакета состоит из модулей для решения краевой задачи [8] и модулей расчета пучка. К последним относятся модули предварительной обработки исходных данных, расчета напряженности электрического поля, интегрирования уравнений движения, расчета объемного заряда, реализации метода спуска для решения самосогласованной задачи.

Сервисная система по запросу пользователя выводит в графическом и/или числовом виде характеристики электрического поля и пучка заряженных частиц. К ним относятся картины расчетной области, эквипотенциальные линии и траектории движения заряженных частиц в ней, фазовые портреты пучка и графики плотности тока в заданных сечениях, графики распределения напряженности электрического поля вдоль заданных линий.

Список литературы

- [1] Алямовский И.В. Электронные пучки и электронные пушки. М.: Советское радио, 1966.
- [2] Астрелин В.Т., Иванов В.Я. Пакет программ для расчета характеристик интенсивных пучков релятивистских заряженных частиц // Автометрия. 1980. №3. С. 5-12.
- [3] FOMEL V.M., TIUNOV V.P., YAKOVLEV V.P. SAM – An interactive code for evaluation of electron guns. Новосибирск, 1996 (Препр. РАН. Сиб. отд. ине. ИЯФ. №96-11).
- [4] XIEQING ZHU AND ERIC MUNRO. A computer program for electron gun design using second-order finite elements // J. Vac. Sci. Technol. 1989. В 7. P.1862-1875.
- [5] Свешников В.М. Построение прямых и итерационных методов декомпозиции // СибЖИМ. 2009. Т.12, №3(39). С. 99-109.

- [6] Свешников В.М. Поэлементная технология расчета интенсивных пучков заряженных частиц // Вычислительные технологии. 2004. Т. 9, №3. С.90-103. 14.
- [7] Свешников В.М. Некоторые вопросы численного моделирования интенсивных пучков заряженных частиц. // Вестник Херсонского национального технического университета. 2010. Т.3, вып.39. С. 425-429.
- [8] Беляев Д.О., Козырев А.Н., Свешников В.М. Пакет прикладных программ ЭРА-DD для решения двумерных краевых задач на квазиструктурированных сетках. // Вестник НГУ. Серия: информационные технологии. 2010. Т.8, вып.1. С. 3-11.
- [9] Свешников В.М. Повышение точности расчета интенсивных пучков заряженных частиц // Прикладная физика. 2004. №1. С. 55-65.
- [10] Ильин В.П. Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений. Новосибирск. ИВМиМГ (ВЦ) СО РАН. 2001.
- [11] Свешников В.М. Численный расчет пучков заряженных частиц на локально-модифицированных сетках. Новосибирск, 1997 (Препр. РАН. Сиб. отд-ние. ИВМиМГ. №1109).
- [12] Свешников В.М. Решение самосогласованных задач электронной оптики методом итераций по подобластям без налегания и смены типа граничного условия // Вычислительные технологии. 2006. Т.11, №5. С. 77-91.