

ПАКЕТ ПРИКЛАДНЫХ ПРОГРАММ ЭРА - 2В ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННО-ОПТИЧЕСКИХ СИСТЕМ С РЕЗКИМИ НЕОДНОРОДНОСТЯМИ<sup>1</sup>

**Постановка проблемы. Анализ публикаций по теме исследования.**

Рассматривается задача расчета интенсивного стационарного пучка заряженных частиц в замкнутой двумерной (плоской или осесимметричной) области  $\bar{G} = G \cup \Gamma$ , где  $\Gamma$  – граница области  $G$ . Математически данная проблема сводится к нелинейной самосогласованной задаче, постановка которой приведена, например, в работе [1]. Ее решение осуществляется каким-либо итерационным методом, который можно записать в виде

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

где  $\rho$  – плотность объемного заряда, вносимого частицами,  $\Phi$  – функция, определяющая конкретный метод,  $n = 0, 1, \dots$  – номер итерации. В задачах с ограничением тока эмиссии объемным зарядом в (1) вместо  $\rho$  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.

Интенсивные пучки заряженных частиц являются рабочим элементом в электронно-оптических системах различного практического назначения [2]. 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, [3-5]), 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, 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 [6], поэтапная технология расчета пучка заряженных частиц [7] и экономичный вариант метода спуска для решения нелинейной задачи [8]. 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 [9].

**Целью работы** является создание пакета прикладных программ Эра - 2В для моделирования электронно-оптических систем на адаптивных несогласованных квазиструктурированных сетках, которые позволяют увеличивать плотность узлов в подобластях сильных неоднородностей пучка заряженных частиц и учесть сложную конфигурацию границы.

**Основная часть. Алгоритмы решения задачи.** Для решения упомянутых выше вычислительных задач построим в расчетной области  $\bar{G}$  квазиструктурированную сетку  $\Omega$  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

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

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 12-01-00076-а) и СО РАН (интеграционные проекты 104, 126, 130)

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  $\overline{G_k^{(1)}}$  внутренних подобластей состоит только из точек  $G$ , граничных  $\overline{G_k^{(2)}}$  – из точек  $G$  и  $\Gamma$ , а внешние подобласти исключаются из расчетов. Граница сопряжения подобластей (или интерфейс), которую мы обозначим через  $\gamma$ , состоит из отрезков координатных линий макросетки  $\Omega_H$ . Точки пересечения ее координатных линий назовем макроузлами.

Затем в подобластях  $G_k$  построим равномерные прямоугольные подсетки

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

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 пересечения координатных линий сетки с границей. Объединение подсеток образует результирующую квазиструктурированную сетку  $\overline{\Omega}_h$ .

Потенциал электрического поля  $\varphi$  находится из решения линеаризованной краевой задачи

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

где  $\Delta$  – оператор Лапласа,  $l$  – оператор граничных условий,  $\varepsilon_0$  – диэлектрическая постоянная,  $\rho, g$  – известные функции координат. Рассматриваются граничные условия Дирихле, Неймана, а также смешанные краевые условия. Краевая задача (2) методом конечных объемов [10] заменяется на  $\overline{\Omega}_h$  приближенной задачей

$$\Delta_h \varphi_h = -\frac{\rho_h}{\varepsilon_0}, \quad l_h \varphi_h|_{\Gamma} = g_2, \quad \varphi_h|_{\gamma} = v_h, \quad (3)$$

где  $\varphi_h, \rho_h, v_h$  – приближенные значения функций, а  $\Delta_h, l_h$  – аппроксимации оператора Лапласа и оператора граничных условий. Так как подсетки  $\overline{\Omega}_{h,k}$  могут быть несогласованными, то решение задачи (3) находится итерационным методом декомпозиции. Для этого на границе сопряжения  $\gamma$  определяется сетка  $\omega_h$ , состоящая из узлов подсеток  $\overline{\Omega}_h^{(k)}$  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 [10].

Перед расчетом траекторий движения заряженных частиц в узлах квазиструктурированной сетки путем численного дифференцирования потенциала вычисляются компоненты  $E_x, E_n$  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  $(\lambda, \eta)$ , 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 [7]. Ее суть заключается в том, что рассчитываемый отрезок траектории целиком принадлежит 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 [7].

Решение нелинейной самосогласованной задачи осуществляется с выделением прикатодной особенности путем декомпозиции расчетной области на прикатодную  $G_c$  и основную  $G_b$  подобласти [12]. На границе сопряжения подобластей  $\Gamma_{cb}$  определяется нелинейное уравнение Пуанкаре-Стеклова относительно потенциала электрического поля  $u$ . Это уравнение аппроксимируется на  $\Gamma_{cb}$  на специальной сетке системой нелинейных операторных уравнений, которая решается методом спуска [8]

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

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

#### **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 [9], 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 [9] 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.

**Выводы перспективы дальнейших исследований.** Разработан пакет прикладных программ ЭРА-2В, который ориентирован на моделирование электронно-оптических систем с резкими неоднородностями, Получение адекватного численного решения гарантируется, во-первых, за счет введения квазиструктурированной сетки, позволяющей с наименьшими вычислительными затратами отследить решение с неоднородностями пучка заряженных частиц и сложной конфигурацией внешней границы и, во-вторых, за счет выделения прикатодной особенности. В дальнейшем планируется развитие пакета для решения более широкого класса задач, включая задачи синтеза электронно-оптических систем.

#### **ЛИТЕРАТУРА**

1. Свешников В.М. Повышение точности расчета интенсивных пучков заряженных частиц. Прикладная физика, № 1, 2004, с. 55-65.
2. Алямовский И.В. Электронные пучки и электронные пушки. – М.: Советское радио, 1966.
3. Астрелин В.Т., Иванов В.Я. Пакет программ для расчета характеристик интенсивных пучков релятивистских заряженных частиц // Автметрия. – 1980. – № 3. – С. 5-12.
4. Fomel V.M., Tiunov V.P., Yakovlev V.P. SAM – An interactive code for evaluation of electron guns // Preprint. – Novosibirsk, Bodker Institute of Nuclear Physics, 1996. – № 96-11.

5. Xieqing Zhu and Eric Munro. A computer program for electron gun design using second-order finite elements. *J. Vac. Sci. Technol. B* 7. 1862. (1989).
6. Свешников В.М. Построение прямых и итерационных методов декомпозиции // СибЖИМ. 2009. Т.12, № 3(39). С. 99 – 109.
7. Свешников В.М. Поэлементная технология расчета интенсивных пучков заряженных частиц. *Вычислительные технологии*, Т. 9, № 3, 2004, с.90-103. 14.
8. Свешников В.М. Некоторые вопросы численного моделирования интенсивных пучков заряженных частиц. // Вестник Херсонского национального технического университета. Т.3, вып.39. 2010. С. 425 – 429.
9. 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. Т.8, вып.1. 2010. С. 3 – 11.
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 квазиструктурированных сетках // Препринт. – Новосибирск: ИВМиМГ СО РАН, 1997. – № 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.

КОЗЫРЕВ Александр Николаевич – младший научный сотрудник Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, г. Новосибирск.

Научные интересы:

- математическое моделирование, вычислительная математика, параллельные вычисления.

СВЕШНИКОВ Виктор Митрофанович – д.ф.-м.н., заведующий лабораторией вычислительной физики Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, г. Новосибирск.

Научные интересы:

- математическое моделирование, вычислительная математика, параллельные вычисления.