

УДК 537.533

НОВЫЙ ПОДХОД К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ С ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ПОЛЕМ

В. Я. Иванов

Институт математики СО РАН, г. Новосибирск, Россия

Описаны численные алгоритмы решения многомерных задач взаимодействия заряженных частиц с электромагнитным полем. Использован новый подход к генерации криволинейных сеток, согласованных с границей области. Разработаны пакеты для решения уравнений Пуассона и Максвелла, использующие методы конечных разностей и граничных элементов.

Задача взаимодействия как упорядоченных интенсивных потоков заряженных частиц — пучков, так и хаотических структур — плазмы с нестационарными, в общем случае, электромагнитными полями в областях сложной формы (и особенно в трехмерной постановке) решалась, как правило, с использованием метода конечных разностей для расчета полей и каким-либо из вариантов метода “крупных частиц”. Подавляющее число известных пакетов программ использует сетки с ячейками прямоугольной формы для расчета полей (таблица).

Наименование	Размерность	Метод	Сетка	Год	Источник
THREDE	3	FDM	Прямоуг.	1978	MRC, USA
CAV3B	3	"	"	1982	Munchen Univ.
BCI	2	"	"	1986	DESY, Germany
T-BCI	2,5	"	"	1986	SLAC, USA
SOS	3	"	"	1987	MRC, USA
IVORY	3	"	"	"	LANL, USA
ARGUS	3	"	"	1988	SAIC, USA
MAGIC	2	"	"	"	MRC, USA
MAFIA	3	"	"	1989	Germany — USA
QN3D	3	"	"	"	SAIC, USA
QuickSilver	2—3	"	"	1990	SNL, USA
KARAT	2—3	"	"	1991	IOPh AN, Rissia
3DPIC	3	FEM	Криволин.	1993	Culham Lab., UK
BFCPIC	2	FDM	"	1994	KFK, Germany
CEM	3	"	"	1995	RISC, USA

Характерными примерами реализации такого подхода являются программы MAGIC [1], KARAT [2], BCI [3], MAFIA [4], QN3D [5], QuickSilver [6] и OOPIC [7], использующие прямоугольную сетку. Именно это свойство сетки является принципиальным ограничением для получения приемлемой точности расчетов в областях сложной формы. Одним из удачных примеров использования криволинейной сетки, согласованной с границей двумерной области, для решения стационарных задач, является пакет BFCPIC, успешно примененный Т. Вестерманном [8] для расчета установки управляемого термоядерного синтеза. Другой подход, основанный на использовании метода конечных элементов для трехмерных нестационарных задач, развивается группой Иствуда [9] и другими авторами [10]. В настоящей работе предложены конечно-разностные алгоритмы, которые используют криволинейную сетку, позволяя получать высокую точность решения стационарных и нестационарных задач при сравнительно малом числе узлов. Их преимущества перед конечно-элементным подходом заключаются в том, что они генерируют ленточную матрицу с фиксированной и очень малой шириной ленты, в то время, как неструктурированная сетка в подходе Иствуда порождает разреженные матрицы, ширина полосы которых сильно зависит от формы области и способа нумерации узлов. Для матрицы высокой размерности в трехмерных задачах это обстоятельство приводит к увеличению общего времени счета в десятки раз. Принципиально новым на нашем подходе является алгоритм генерации сетки, разработанный под руководством С. К. Годунова [11], который позволяет гибко управлять качеством сетки, сгущая узлы в требуемых подобластях. Обычная схема, использованная Вестерманном, заключается в построении квазиконформного отображения произвольной области на единичный квадрат. Она дает неудовлетворительно качество сетки для сложных областей. В нашем случае предварительно раскроенная на криволинейные четырехугольники область отображается на блок, составленный из прямоугольников. В данной работе впервые строго показано существование регулярного отображения криволинейного четырехугольника с суммой углов, отличной от 360 град., на прямоугольник. Эффективность представленных численных алгоритмов иллюстрируется примерами расчета электронных пучков с высокой компрессией пучка.

ГЕНЕРАЦИЯ КВАЗИИЗОМЕТРИЧЕСКОЙ СЕТКИ

Представим двумерную область D сложной формы композицией криволинейных четырехугольников и построим кусочно-непрерывное отображение каждого из четырехугольников на единичный квадрат. Одни из сторон этих четырехугольников будут фрагментами реальной границы проводящих или диэлектрических тел, а другие — так называемые свободные Эйлеровы границы соединяют один четырехугольник с другим. Форма Эйлеровых границ будет определяться в ходе построения отображения из условий гладкости.

Таким образом, наша главная цель состоит в конструировании отображения

$$x = x(\xi, \eta), y = y(\xi, \eta) \quad (1)$$

физической подобласти D (криволинейного четырехугольника с углами ϕ_1, \dots, ϕ_4) на единичный квадрат $R = \{(\xi, \eta) : 0 \leq \xi \leq 1, 0 \leq \eta \leq 1\}$ путем минимизации функционала

$$\Phi = \int_0^1 \int_0^1 A(x_\xi^2 + y_\xi^2) - 2B(x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta) + C(x_\eta^2 + y_\eta^2) d\xi d\eta. \quad (2)$$

Мы используем обозначения $A(\xi, \eta, \rho) = g^{-1}g_{22}$, $B(\xi, \eta, \rho) = g^{-1}g_{12}$, $C(\xi, \eta, \rho) = g^{-1}g_{11}$. Здесь g_{ij} — компоненты метрического тензора. Предположим, что граница ∂D состоит из четырех кривых $\Gamma_1, \dots, \Gamma_4$ с углами между Γ_i и Γ_{i+1} равными ϕ_i , $0 < \phi_i < \pi$, $i = 1, \dots, 4$.

Будем использовать двухшаговый алгоритм для построения сетки. На первом шаге единичный квадрат R в плоскости (ξ, η) отображается на единичный квадрат K в плоскости (u, v) . Это отображение определяется формулами

$$\begin{aligned} u(\xi, \eta) &= w^{-1} \left\{ [1 - v_0(\eta)] u_0(\xi) + v_0(\eta) u_1(\xi) \right\}, \\ v(\xi, \eta) &= w^{-1} \left\{ [1 - u_0(\xi)] v_0(\eta) + u_0(\xi) v_1(\eta) \right\}, \end{aligned}$$

где $w(\xi, \eta) = 1 - [u_1(\xi) - u_0(\xi)] [v_1(\xi) - v_0(\xi)]$, $u_i(0) = v_j(0) = 0$, $u_i(1) = v_j(1) = 1$, $i, j = 0, 1$. Это отображение используется, чтобы фиксировать расстановку точек сетки на границе области.

Второй шаг отображает единичный квадрат K на физическую область D в плоскости (x, y) . В соответствии с работой [11], введем 5-параметрическое представление для метрики $g_{ij}(u, v)$:

$$\begin{aligned} g_{11}(u, v) &= a + \alpha v + \gamma v^2, & g_{22}(u, v) &= c + \beta u + \gamma u^2, \\ g_{12}(u, v) &= -b - \alpha u - \beta v - \gamma uv, & \gamma &= 2(1 - a - c - \alpha - \beta). \end{aligned}$$

Таким образом, нам следует определить функции u_i, v_j ($i = 0, 1$) и 5 параметров a, b, c, α, β , чтобы построить отображение.

Алгоритм построения отображения (1) формулируется как решение вариационной задачи для функционала (2), коэффициенты которого A, B и C будут определены в процессе оптимизации.

Пусть исходная область является прямоугольником R , на котором криволинейные координаты в узлах сетки ассоциированы с индексами $\xi = j$, $\eta = k$, где

$x_{jk} = x(j, k); y_{jk} = y(j, k), j = 1, \dots, J, k = 1, \dots, K$. Ячейка сетки с номером $(j - 1/2, k - 1/2)$ является образом единичного квадрата с углами $(j, k), (j - 1, k), (j - 1, k - 1), (j, k - 1), 2 \leq j \leq J, 2 \leq k \leq K$. Функции A, B, C предполагаются постоянными в каждой ячейке сетки и идентифицируются индексами

$$\left\{ A_{j-1/2, k-1/2}, B_{j-1/2, k-1/2}, C_{j-1/2, k-1/2}, j=2, \dots, J, k=2, \dots, K \right\}.$$

Конечно-разностная аппроксимация функционала дается выражением

$$\Phi = \sum_{j=2}^J \sum_{k=2}^K \left[A_{j-1/2, k-1/2} R_{j-1/2, k-1/2} - 2B_{j-1/2, k-1/2} M_{j-1/2, k-1/2} + C_{j-1/2, k-1/2} L_{j-1/2, k-1/2} \right],$$

где $R_{j-1/2, k-1/2}, M_{j-1/2, k-1/2}, L_{j-1/2, k-1/2}$ — стандартные представления для производных $x_{\xi}^2 + y_{\xi}^2, x_{\eta}^2 + y_{\eta}^2, x_{\xi} x_{\eta} + y_{\xi} y_{\eta}, x_{\eta}^2 + y_{\eta}^2$.

Можно представить процедуру построения сетки следующей последовательностью шагов, выполняемых итерационно для каждого четырехугольника.

1. Используя сетку, полученную на предыдущей итерации, решим уравнения

$$g_{12}(i, l) = \cos \phi_{il} \sqrt{g_{11}(i, l) g_{22}(i, l)}, \quad i, l = 0, 1;$$

$$g_{11}(\xi, \eta) (x_{\eta}^2 + y_{\eta}^2) = g_{22}(\xi, \eta) (x_{\xi}^2 + y_{\xi}^2), \quad \xi, \eta = \frac{1}{2}$$

относительно параметров a, b, c, α, β . Линеаризуя их

$$a = a_0 + \delta a, \quad b = b_0 + \delta b, \quad c = c_0 + \delta c, \quad \alpha = \alpha_0 + \delta \alpha, \quad \beta = \beta_0 + \delta \beta, \quad \gamma = \gamma_0 + \delta \gamma,$$

получим 4 линейных уравнения для $\delta a, \delta b, \delta c, \delta \alpha, \delta \beta, \delta \gamma$ и решим данную систему.

2. Вычислим набор коэффициентов $A_{j-1/2, k-1/2}, B_{j-1/2, k-1/2}, C_{j-1/2, k-1/2}$.

3. Применяя итерационный метод

$$z_{jk}^{\text{new}} = z_{jk}^{\text{old}} + d_{jk} \frac{\partial \Phi}{\partial z_{jk}}, \quad i=2, \dots, J-1, k=2, \dots, K-1,$$

где z — это x или y , получим новые координаты внутренних узлов сетки.

4. Затем получим координаты граничных узлов

$$x_{jk}^{\text{new}} = x_{jk}^{\text{old}} + s q, \quad y_{jk}^{\text{new}} = y_{jk}^{\text{old}} + s r,$$

где (q, r) — единичный касательный вектор в граничной точке, а

$$s = \left(\Delta x_{jk} q + \Delta y_{jk} r \right) d, \quad d > 0.$$

5. Такую же процедуру мы имеем для перемещения точек Эйлера границы.

Продemonстрируем результаты применения этой техники на примере построения сетки для электронной пушки с высокой компрессией. На рис. 1 показана исходная сетка, полученная линейной интерполяцией граничных точек. Как видно, эта сетка содержит наложения и пересечения отдельных ячеек. Рис. 2 показывает сетку, полученную после 14 итераций.

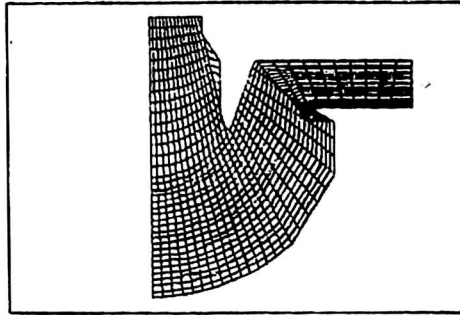


Рис. 1. Начальная сетка

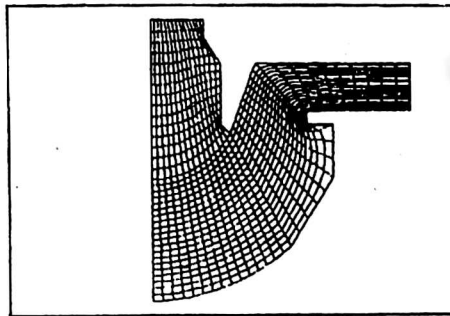


Рис. 2. Сетка после 14 итераций

ЗАДАЧИ СТАЦИОНАРНОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ОПТИКИ

Примером успешного использования двумерной криволинейной сетки для решения задач электронной оптики плотных пучков является работа [8]. Этот подход позволяет достаточно точно учесть краевые условия полевой задачи в области с криволинейными границами. К сожалению, качество сетки здесь не всегда удовлетворительно, поскольку автор отображает целиком всю сложную область на квадрат, не используя технику предварительного раскрытия области на множество криволинейных четырехугольников, используемую нами. Статья [12] описывает аналогичный метод генерации трехмерной ортогональной сетки, а [13] демонстрирует эффективность численного решения трехмерного уравнения Пуассона с использованием таких сеток.

Моделирование пучков заряженных частиц

Система уравнений стационарной электронной оптики включает уравнение поля

$$\Delta \phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}$$

с некоторыми граничными условиями, уравнение движения релятивистских заряженных частиц с массой M и зарядом q :

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = q \left(-\nabla\phi + \left[\vec{v}, \vec{B} \right] \right), \quad \vec{p} = \frac{M\vec{v}}{\sqrt{1-(v/c)^2}},$$

с начальными данными $\vec{p}|_{t=0} = \vec{p}_0$, $\vec{r}|_{t=0} = \vec{r}_0$, и законы сохранения полного заряда и энергии системы

$$div\vec{J} + \frac{d\rho}{dt} = 0, \quad \vec{J} = \rho\vec{v}, \quad \vec{J}|_{S_0} = \vec{J}_0(\vec{r}, \vec{v}, \phi).$$

Здесь ϕ — электростатический потенциал; ρ — объемная плотность заряда; ϵ_0 — диэлектрическая постоянная вакуума; S — поверхность границы; \vec{r} — координаты; \vec{v} — скорость; \vec{p} — импульс частиц; \vec{J} — плотность тока; S_0 — эмиттирующая поверхность; B — магнитная индукция; c — скорость света.

Магнитная индукция вычисляется интегрированием по объему катушек с заданными внешними токами J_{coil} и объему пучка

$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\mu_0} \int V_{coil} \frac{\left[\vec{J}_{coil}(\vec{r}) \left(\frac{\vec{r}-\vec{r}'}{|\vec{r}-\vec{r}'|^3} \right) \right]}{|\vec{r}-\vec{r}'|^3} d^3\vec{r}' +$$

$$+ \frac{1}{4\pi\mu_0} \int V_{beam} \frac{\left[\vec{J}_{beam}(\vec{r}) \left(\frac{\vec{r}-\vec{r}'}{|\vec{r}-\vec{r}'|^3} \right) \right]}{|\vec{r}-\vec{r}'|^3} d^3\vec{r}'.$$

Расчет поля

Рассмотрим уравнение Пуассона в криволинейных координатах (ξ^1, ξ^2, ξ^3) :

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi^i} \left(\epsilon \sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial \phi}{\partial \xi^j} \right) = -\frac{\rho}{\epsilon_0}$$

с граничными условиями общего вида

$$C_{1\phi} + C_{2n} (\epsilon \nabla \phi) = C_3.$$

Здесь метрический тензор $g^{ij} = \partial \xi^i / \partial x^i$, $g = \det |g^{ij}|$ и проницаемость среды ϵ .

Мы используем сетку с размерами ячейки $\Delta \xi_1 = \Delta \xi_2 = \Delta \xi_3 = 1$. Сеточные значения $\phi_{i,j,k}$ определены в центрах ячеек (i, j, k) . В общем случае используется 19-точечная формула для конечно-разностной аппроксимации уравнения Пуассона или 7-точечная для почти ортогональных сеток

$$A_6 \phi_{i,j,k-1} + A_4 \phi_{i,j-1,k} + A_2 \phi_{i-1,j,k} + A_0 \phi_{i,j,k} + \\ + A_1 \phi_{i+1,j,k} + A_3 \phi_{i,j+1,k} + A_5 \phi_{i,j,k+1} = R_{i,j,k}.$$

Выражения для величин $R_{i,j,k}$ и A_n приведены в работе [12].

Таким образом, мы имеем ленточную матрицу A с 19 или 7 диагоналями в трехмерном случае и с 5 или 9 диагоналями — в двухмерном. Система линейных уравнений решается методом верхней релаксации или методом сопряженных градиентов.

Ниже мы представляем результаты численного моделирования электронной пушки (рис. 3, 4).

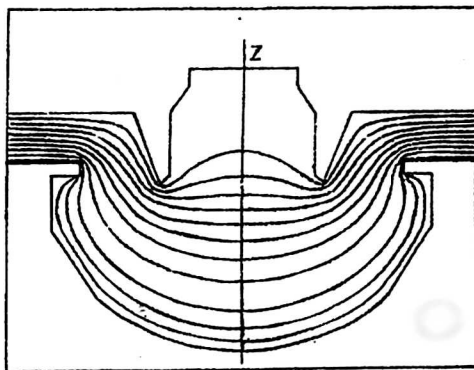


Рис. 3. Эквипотенциальные линии

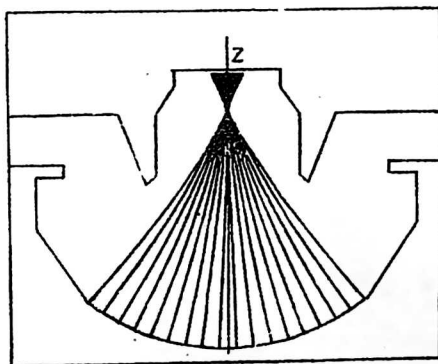


Рис. 4. Траектории пучка частиц

НЕСТАЦИОНАРНЫЕ ЗАДАЧИ

Мы используем глобальную декартову систему координат x_i и локальные криволинейные координаты в каждой подобласти криволинейного четырехугольника ξ^i , в которых уравнения Максвелла запишутся в форму

$$\frac{\partial V^k}{\partial t} + \frac{1}{\sqrt{g}} \varepsilon^{k\alpha\beta} \nabla_\alpha E_\beta = 0, \quad \frac{\partial D^k}{\partial t} - \frac{1}{\sqrt{g}} \varepsilon^{k\alpha\beta} \nabla_\alpha H_\beta + J^k = 0.$$

Мы будем описывать алгоритмы для двумерного случая плоской и осесимметричной геометрии области и введем якобиан преобразования координат

$$\frac{\partial r}{\partial \xi} = \alpha \cos \varphi, \quad \frac{\partial r}{\partial \eta} = -b \sin \psi, \quad \frac{\partial z}{\partial \xi} = \alpha \sin \varphi, \quad \frac{\partial z}{\partial \eta} = b \cos \psi,$$

где $g_{11} = a^2$, $g_{22} = r^2$, $g_{33} = b^2$, $g_{12} = 0$, $g_{13} = a b \sin \omega$, $g_{23} = 0$, $\omega = \varphi - \psi$.

Теперь выпишем двумерный вариант уравнений, в которых переменные не зависят от координаты θ . Далее мы будем писать r^α вместо r , чтобы учесть плоский случай, отвечающий величине $\alpha = 0$:

$$r^\alpha b \cos \omega \frac{\partial B^1}{\partial t} - \frac{\partial r E^2}{\partial \eta} = 0, \quad r^\alpha a \cos \omega \frac{\partial D^3}{\partial t} - \frac{\partial r H^2}{\partial \xi} + r^\alpha a \cos \omega J^3 = 0.$$

$$a b \cos \omega \frac{\partial B^2}{\partial t} + \frac{\partial a (E^1 + \sin \omega E^3)}{\partial \eta} - \frac{\partial b (E^3 + \sin \omega E^1)}{\partial \xi} = 0,$$

$$r^\alpha a \cos \omega \frac{\partial B^3}{\partial t} + \frac{\partial r E^2}{\partial \xi} = 0, \quad r^\alpha b \cos \omega \frac{\partial D^1}{\partial t} + \frac{\partial r H^2}{\partial \eta} + r^\alpha b \cos \omega J^1 = 0,$$

$$a b \cos \omega \frac{\partial D^2}{\partial t} - \frac{\partial a (H^1 + \sin \omega H^3)}{\partial \eta} + \frac{\partial b (H^3 + \sin \omega H^1)}{\partial \xi} + a b \cos \omega J^2 = 0.$$

Здесь $J^i = \sigma E^i + J^{0i}(t, \xi, \eta)$, и J^{0i} — внешние токи в криволинейной системе координат. Мы должны добавить уравнение непрерывности для вычисления объемного заряда от этих токов

$$\partial \rho_e / \partial t + \text{div } J_c = 0.$$

Для аппроксимации уравнений Максвелла мы используем схему Годунова. На рис. 5 и 6 представлены результаты моделирования поведения сгустков заряженных частиц в бипериодической ускоряющей структуре.

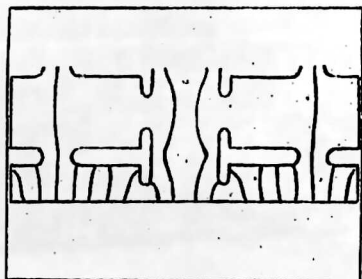


Рис. 5. Модуляция сгустков

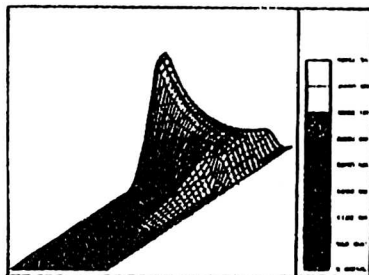


Рис. 6. Распределение магнитного поля

Литература

1. Goplen B., Ludeking L., McDonald J., Warrén G., Worl R. MAGIC user's manual//Mission Res. Corp. Nevington VA. Rep. MRC/WDC-R-184, Sept. 1988.
2. User's Manual for Code KARAT//V. P. Tarakanov and Berkley Research Associates, Inc. 1992-96.
3. Weiland T. RF Cavity Design and Codes//Report DESY M-86-07.
4. Ebeling F., Klatt R., Krawczyk F. et al. The 3-D MAFIA Group of Electromagnetic Codes//IEEE Trans. Magn., 1989. V. 25. № 4. P. 2962-2064.
5. Horowitz E. J., Shumaker D. E., Anderson D. V. QN3D: A Three-Dimensional Quasi-neutral Hybrid Particle-in-Cell Code with Applications to the Tilt Mode Instability in Field Reserved Configurations//J. Comput. Phys., 1989. V. 84. P. 279-310.
6. Seidel D. B., Kiefer M. L., Coats R. S., Pointon T. D., Quintenz J. P., Johnson V. A. The 3D Electromagnetic, Particle-In-Cell Code QuickSilver//CP90 Europhysics Conf. on Comput. Phys., Amsterdam, The Netherlands 10-13 Sept., 1990.
7. Verboncoeur J. P., Langdon A. B., Birsdail C. K. A macroscopic 2-D electromagnetic algorithm for particle-in-cell simulation//Rep. APS Nov. 1-5, 1993. Univ. of California, Berkeley.
8. Westermann T. Numerical modelling of the Stationary Maxwell-Lorentz System in Technical Devices//Int. J. of Numerical Modelling: Electronic networks, Devices and Fields, 1994. V. 7. P. 43-67.
9. Eastwood J. W., Arter W., Bradley N. J., Hockney R. W. Body-Fitted Electromagnetic PIC Software for Use on Parallel Computers//AEA Technology Culham Lab., Abington, Oxfordshire OX14 3DB, UK 1994.
10. Shankar V., Hall W. F., Mohammadian A., Rowel C. Development of a CFD-based Algorithm for Computational Electromagnetics (CEM)//In: Computational Fluid Dynamics Review 1995. John Wiley & Sons, NY, 1995. P. 821-836./Ed. Hafez M., Oshima K.
11. Godunov S. K., Gordienko V. M., Chumakov G. A. Variational principle for 2-D regular quasi-isometrical grid generation//Int. J. of Computational Fluid Dynamics, 1995. V. 5. № 1-2. P. 99-118.
12. Theodoropoulos T., Bergeles G. C. A Laplacian Equation Method for Numerical Generation of Boundary-Fitted 3D Orthogonal Grids//J. Comput. Phys., 1989, V. 82. P. 269-288.
13. Miki K., Takagi T. Numerical Solution of Poisson's Equation with Arbitrary Shaped Boundaries Using a Domain Decomposition and Overlapping Technique//J. Comput. Phys., 1986. V. 67. P. 263-278.

А НОВЫЙ ПОДХОД К СИМУЛЯЦИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЗАРЯДЧЕННОЙ ЧАСТИЦНОЙ ПЛОТИ С ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ПОЛЕМ И ПЛАЗМОЙ

V. Ya. Ivanov

Institute of Mathematics, Novosibirsk, Russia

The algorithms of numerical simulation of multi dimensional electromagnetic fields and PIC models for particles have been described. A new approach to generation a boundary-fitted curvilinear mesh based on five-parameters representation of mapping the complex shape physical domain to a set of rectangular blocks is used. The codes with Poisson and Maxwell solvers have been implemented, those use as finite-difference as boundary-element methods.