ОБЩАЯ ФИЗИКА

УДК 519.63 PACS: 52.59.-f

Численно-аналитические алгоритмы интегрирования уравнений движения заряженных частиц в электрических полях

В. М. Свешников, А. С. Третьяков

Предложены и экспериментально исследованы численно-аналитические алгоритмы интегрирования уравнений движения заряженных частиц в электрических полях. Необходимость в разработке таких алгоритмов возникла при моделировании интенсивных пучков заряженных частиц в протяженных системах. Характерной задачей при этом является по возможности точное определение расширения пучка и его угловой расходимости на значительном расстоянии от поверхности старта (эмиттера). Применение классических численных алгоритмов не давало адекватных результатов. Поэтому возникло предложение на каждом шаге численного интегрирования использовать аналитическое решение уравнений движения, сделав упрощающие предположения об электрических полях. Упрощающие предположения в пределах шага численного интегрирования, дающие достаточную точность и, в то же время, несложное решение, состояли в следующем: в продольном направлении поле предполагается постоянным, а в поперечном – линейным по координате, что характерно для интенсивных пучков. Дано экспериментальное сравнение численно-аналитических алгоритмов с численными алгоритмами, которое показало преимущество разработанного подхода.

Ключевые слова: интенсивные пучки, интегрирование уравнений движения, электронно-оптические приборы, протяженные системы, численно-аналитические алгоритмы, средняя точка, предиктор-корректор.

Ссылка: *Свешников В. М., Третьяков А. С.* // Прикладная физика. 2019. № 1. С. 5.
Reference: V. M. Sveshnikov and A. S. Tretyakov, Prikl. Fiz., No. 1, 5 (2019).

Введение

Математически проблема исследования интенсивных пучков заряженных частиц сводится к решению нелинейной самосогласованной задачи, включающей в себя в стационарном случае уравнения движения заряженных частиц, уравнение Пуассона для потенциала электрического поля, уравнение неразрывности потока зарядов и представляет из себя следующие вычислительные задачи: 1) интегрирование уравнений движения заряженных частиц; 2) вычисление потенциала и напряженности электрического поля; 3) расчет распределения объемного заряда [1].

Настоящая работа посвящена решению первой из приведенных задач, в рамках которой были разработаны численно-аналитические алгоритмы интегрирования уравнений движения заряженных частиц в двумерных электрических полях, дающие точное решение в случае линейно изменяющегося поля по одной координате и постоянного – по другой. В задачах электрофизики это означает, что движение по одной координате надо рассчитать более точно, чем по другой. Например, при расчете электронно-оптических приборов с интенсивными пучками заряженных частиц на малом временном интервале напряженность продольного поля можно приблизить константой, а поперечное поле, влияющее на расширение / сужение пучка, требуется приближать более точно, в нашем случае линейно. Такая ситуация складывается при расчетах протяженных пучков, где необходимо определить поперечные размеры пучка особенно точно. Для указанных приближений получены аналитические решения уравнений движения на одном временном шаге. Переход от одного временного шага к другому осуществляется при помощи численных схем второго порядка точности. Была проведена серия численных экспериментов,

Свешников Виктор Митрофанович[1], г.н.с., д.ф.-м.н.
Третьяков Александр Сергеевич[2], студент
[1] Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН.
Россия, 630090, г. Новосибирск, пр. Акад. Лаврентьева, 6.
E-mail: victor@lapasrv.sscc.ru
[2] Новосибирский государственный университет.
Россия, 630090, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 2.
E-mail: gradinos105@gmail.com

Статья поступила в редакцию 20 ноября 2018 г.

подтверждающая эффективность разработанного подхода.

Подобный численно-аналитический подход был рассмотрен в работах Ильина В. П. [2, 3] с тем отличием, что в этих источниках аналитическое интегрирование проводится в пределах одной ячейки разностной сетки, а в настоящей работе аналитическое интегрирование проводится на одном временном шаге, что позволяет не выполнять трудоемкую процедуру определения параметров выхода из ячейки сетки. Обзор численных алгоритмов решения обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) приведен, например, в работе [4]. Для получения общих представлений о движении частиц в электрических и магнитных полях были рассмотрены работы Арцимовича Л. А., Лукьянова С. Ю. [5], Сырового В. А. [6], Григорьева Ю. Н., Вшивкова В. А., Федорука М. П. [7], Молоковского С. И., Сушкова А. Д. [8], Алямовского И. В. [9], где изложены приближенные аналитические решения интенсивных пучков заряженных частиц, которые были использованы при построении численно-аналитического подхода. Толчком к разработке данного метода послужила статья Мануилова В. Н., Юсупова Э. Т. [10], где дается сравнение различных численных алгоритмов решения уравнений движения.

Постановка задачи

В замкнутой двумерной области $\overline{G}$ требуется найти траектории движения интенсивного пучка заряженных частиц, то есть найти решение уравнений движения частиц с зарядом e и массой m в электрическом поле с потенциалом φ и напряженностью $\vec{E}$:

$$\begin{cases} \dfrac{dx(t)}{dt} = v_x(t), \\ \dfrac{dy(t)}{dt} = v_y(t), \end{cases} \quad \begin{cases} \dfrac{dv_x(t)}{dt} = \dfrac{e}{m}E_x, \\ \dfrac{dv_y(t)}{dt} = \dfrac{e}{m}E_y, \end{cases} \quad \vec{E} = -\mathrm{grad}\varphi, \tag{1}$$

где (x, y) – координаты, (v_x, v_y) – скорости, t – время.

Уравнения (1) решаются с начальными условиями:

$$\begin{cases} x\big|_{t=0} = x_T^0, \\ y\big|_{t=0} = y_T^0, \end{cases} \quad \begin{cases} v_x\big|_{t=0} = v_x^0, \\ v_y\big|_{t=0} = v_y^0, \end{cases} \tag{2}$$

где x_T^0, y_T^0, v_x^0, v_y^0 – заданные величины, представляющие собой соответственно координаты и скорости частиц, входящих в расчетную область.

Методология расчетов

Пусть значения напряженности поля $\vec{E}$ известны (предварительно вычислены) в узлах сетки Ω, которую для простоты мы будем предполагать равномерной:

$$\Omega = \left\{ \begin{array}{c} x_i = x_0 + ih_x,\ y_j = y_0 + jh_y, \\ i = 0, \ldots, N_x,\ j = 0, \ldots, N_y, \\ h_x = \dfrac{x_{N_x} - x_0}{N_x},\ h_y = \dfrac{y_{N_y} - y_0}{N_y} \end{array} \right\},$$

где N_x, N_y, x_0, x_{N_x}, y_0, y_{N_y} – известные величины.

По координате x будем считать поле константой на каждом временном шаге, а по y – линейным:

$$E_x = c_1,\ E_y = a_2 x(t) + b_2 y(t) + c_2.$$

Данные соотношения выбраны исходя из того, что при движении пучка в электронно-оптических протяженных системах в продольном направлении поле на малом временном интервале электрическое поле можно считать постоянным, а в поперечном направлении необходимо проводить расчеты более тщательно, так как важно знать форму пучка на выходе.

Константа c_1 находится с помощью интерполяции по 4 узлам, а коэффициенты a_2, b_2, c_2 по 3 узлам ячейки сетки, которая содержит текущую точку (x^s, y^s).

Тогда уравнения (1) можно переписать в следующем виде

$$\begin{cases} \dfrac{dx(t)}{dt} = v_x(t), \\ \dfrac{dy(t)}{dt} = v_y(t), \end{cases} \quad \begin{cases} \dfrac{dv_x(t)}{dt} = c_1, \\ \dfrac{dv_y(t)}{dt} = a_2 x(t) + b_2 y(t) + c_2, \end{cases} \tag{3}$$

где величина $\dfrac{e}{m}$ внесена в коэффициенты c_1, a_2, b_2 и c_2.

Решив систему (3) с начальными условиями (2), получим формулы аналитического представления координат и скоростей частицы:

$$x(t) = \frac{1}{2}c_1 t^2 + v_x^0 t + x_T^0, \tag{4}$$

$$v_x(t) = c_1 t + v_x^0, \tag{5}$$

$$y(t) = \frac{1}{2}\frac{1}{b_2^2}\Big[e^{\sqrt{b_2}t} A_1 + e^{-\sqrt{b_2}t} A_2 - -2b_2\Big(a_2\Big(x_T^0 + v_x t\Big) + c_2\Big)\Big], \tag{6}$$

$$v_y(t) = \frac{1}{b_2}\left(\frac{1}{2}\frac{e^{\sqrt{b_2}t}A_1}{\sqrt{b_2}} - \frac{1}{2}\frac{e^{-\sqrt{b_2}t}A_2}{\sqrt{b_2}} - a_2 v_x\right), \quad (7)$$

где

$$A_1 = \sqrt{b_2}B_1 + b_2\left(B_2 + c_2\right),\ A_2 = -\sqrt{b_2}B_1 + b_2\left(B_2 + c_2\right),$$

$$B_1 = a_2 v_x^0 + b_2 v_y^0,\ B_2 = a_2 x_T^0 + b_2 y_T^0.$$

Отметим, что здесь предполагается $b_2 > 0$. Если это не так, то справедливо аналогичное представление решения, которое не вносит принципиальных изменений в дальнейшее изложение. С помощью равенств (4)–(7) строится аналитическое решение уравнений движения на каждом временном шаге.

Для перехода от s-го временного шага к (s + 1)-му (s = 0, 1, …) используются два алгоритма из семейства методов Рунге–Кутта второго порядка точности.

В первом из них (условно назовем его средняя точка) находится точка ($x^{s+1/2}$, $y^{s+1/2}$) по формулам:

$$\begin{cases} x^{s+1/2} = x^s + \dfrac{\tau}{2}v_x^s, \\ y^{s+1/2} = y^s + \dfrac{\tau}{2}v_y^s, \end{cases} \quad (8)$$

где τ – шаг по времени. В этой точке вычисляются коэффициенты c_1, a_2, b_2, c_2 и по формулам (4)–(7) рассчитывается (s + 1)-я точка.

Во втором, который назовем предиктор-корректор, выполняются два полушага. На первом полушаге (предиктор) в точке (x^s, y^s) находятся коэффициенты c_1, a_2, c_2 и, используя их в аналитическом представлении решения, по формулам (4)–(7) при $t = \tau$ рассчитывается точка ($x^{s+1/2}$, $y^{s+1/2}$). В этой точке аналогично предыдущему находятся коэффициенты c_1^*, a_2^*, b_2^*, c_2^* и берется полусумма рассчитанных коэффициентов:

$$c_1^{**} = \frac{c_1 + c_1^*}{2},\ a_2^{**} = \frac{a_2 + a_2^*}{2},$$

$$b_2^{**} = \frac{b_2 + b_2^*}{2},\ c_2^{**} = \frac{c_2 + c_2^*}{2},$$

которые используются в аналитическом представлении решения (корректор), что дает точку (s + 1).

Расчеты проводятся до тех пор, пока текущая точка не выйдет за границу исходной области.

Для сравнения с разработанными численно-аналитическими методами были рассмотрены обычные численные методы второго порядка, представляющие собой, по сути дела, те же методы средней точки и предиктор-корректор, но без использования аналитического представления.

В первом из них в средней точке (8) вычисляется напряженность поля $E_x^{s+1/2}$, $E_y^{s+1/2}$ интерполяцией по 4 узлам ячейки сетки. Расчеты (s + 1)-й точки проводятся по следующим формулам:

$$\begin{cases} v_x^{s+1} = v_x^s + \tau\dfrac{e}{m}E_x^{s+1/2}, \\ v_y^{s+1} = v_y^s + \tau\dfrac{e}{m}E_y^{s+1/2}, \end{cases}$$
$$\begin{cases} x^{s+1} = x^s + \tau\dfrac{v_x^s + v_x^{s+1}}{2}, \\ y^{s+1} = y^s + \tau\dfrac{v_y^s + v_y^{s+1}}{2}. \end{cases} \quad (9)$$

Во втором методе (предиктор-корректор) средняя точка вычисляется по формулам, аналогичным (8), но с шагом τ. В ней рассчитывается напряженность поля $E_x^{s,*}$ $E_y^{s,*}$ и берется полусумма

$$\begin{cases} E_x^{s+1/2} = \dfrac{E_x^s + E_x^{s,*}}{2}, \\ E_y^{s+1/2} = \dfrac{E_y^s + E_y^{s,*}}{2}, \end{cases}$$

которая используется в расчетах по формулам (9).

Численные эксперименты

Было проведено три различных численных эксперимента, преследующие различные цели. Первый из них проводился в электрическом поле, наиболее полно отражающем влияние объемного заряда, создаваемого интенсивным пучком, второй – для верификации результатов и третий – показывающий расчет траектории в сложном поле. В таблицах 1–3, приводимых ниже, даны результаты расчетов по методу средняя точка в численно-аналитических и в численных алгоритмах. Результаты расчетов по методу предиктор-корректор отличаются незначительно.

Численный эксперимент 1

Расчетная область представляла собой прямоугольник $0 \le x \le 50$, $0 \le y \le 3$. Потенциал электрического поля φ выбирался равным

$$\varphi = \frac{y^2}{100} + \left(0{,}1\right)^{\frac{2}{3}} x^{\frac{4}{3}}, \quad (10)$$

что отражает основные особенности движения интенсивных пучков, так как, во-первых, напряженность электрического поля E_y линейно возрастает с координатой и, во-вторых, по координате x напряженность электрического поля определяется из известного закона «3/2» для интенсивных пучков [9] (фрагмент плоского диода с потенциалом φ(100) = 100). Рассчитывалась траектория частицы, выходящей из точки $x_T^0 = 0$, $y_T^0 = 0,25$, с начальной скоростью $v_x^0 = 0,025$, $v_y^0 = 0$, которую можно считать огибающей пучка. Из (10) следует, что напряженность электрического поля равна

$$\begin{cases} E_x = -(0,1)^{\frac{2}{3}} \dfrac{4}{3} x^{\frac{1}{3}}, \\ E_y = -\dfrac{y}{50}. \end{cases}$$

В расчетах численно-аналитическими (ЧА) и численными методами (ЧМ) на каждом временном шаге определялась относительная ошибка δ в процентах по координате y, так как важно знать расширение пучка на выходе

$$\delta = \frac{|y_a - y_s|}{y_a} 100,$$

где y_a – точное аналитическое решение при данном t; y_s – приближенное решение при этом же t. Шаг численного интегрирования выбирался равным τ = 1,3. При этом в расчетную области попадало $N_\tau = 25$ точек траектории. В табл. 1 приведена ошибка δ в сечениях $\bar{x}$ = 10, 20, 30, 40, 50. Так как точки траектории не будут попадать точно на эти сечения, ошибка в требуемой точке вычислялась при помощи линейной интерполяции, состоящей в следующем. Пусть x^1 и x^2 – координаты точек траектории, ближайших к сечению $\bar{x}$ и лежащих по разные стороны от него, а δ^1 и δ^2 – ошибки в этих точках. Тогда ошибка $\bar{\delta}$ в сечении $\bar{x}$ выражается как

$$\bar{\delta} = \delta^1 + \frac{\bar{x} - x^1}{x^2 - x^1}\left(\delta^2 - \delta^1\right).$$

Из табл. 1 следует, что в случае численно-аналитического метода ошибка представляет собой лишь ошибку округления порядка 10^{-13} %, в то время как относительная ошибка в численном методе составляет 4–6 %.

Таблица 1

Относительная ошибка $\bar{\delta}$ в процентах расчета траектории частицы в поле (10)

$\bar{x}$	10	20	30	40	50
ЧА	7,79E-014	6,47E-014	1,34E-013	1,47E-013	1,56E-013
ЧМ	3,64	4,78	5,57	5,92	6,19

Численный эксперимент 2

Расчетная область – прямоугольник $0 \le x \le 250$, $0 \le y \le 3$. Потенциал электрического поля определяется как:

$$\varphi = \frac{y^2}{100} + x. \qquad (11)$$

Стартовые данные для траектории те же, что и в предыдущем примере. Шаг численного интегрирования выбирался равным τ = 1,25. При этом в расчетной области было $N_\tau = 25$ точек траектории.

В табл. 2 приведена относительная ошибка расчета траектории в заданных сечениях по оси x. Ошибка вычислена по тем же формулам, что и в первом эксперименте.

Таблица 2

Относительная ошибка $\bar{\delta}$ в процентах расчета траектории частицы в поле (11)

$\bar{x}$	50	100	150	200	250
ЧА	6,38E-014	4,94E-014	2,26E-015	3,51E-015	1,76E-014
ЧМ	1,38	2,79	3,98	5,00	5,64

Из табл. 2 также следует, что численно-аналитический метод дает почти нулевую ошибку, а численный дает ошибку, превышающую 5 % даже в случае простого поля.

Кроме того, контролировалось выполнение закона сохранения, согласно которому должно выполняться равенство

$$v = \sqrt{2\left|\frac{e}{m}\varphi\right|}.$$

Проведенные эксперименты показали, что в численно-аналитическом подходе каждая рассчитанная ошибка состоит лишь из ошибок округления.

Численный эксперимент 3

Был проведен эксперимент с более сложным полем, чем в первых двух случаях. Потенциал электрического поля выглядит следующим образом:

$$\varphi = \frac{1}{2}\frac{ch2y - \cos 2x}{ch2y + \cos 2x}. \tag{12}$$

Расчетная область – прямоугольник $-\frac{\pi}{2} \le x \le \frac{\pi}{2}$, $0 \le y \le 2$. Начальные координаты: $x_T^0 = -\frac{\pi}{2}$, $y_T^0 = 1$ и начальные скорости:

$$\begin{cases} v_x^0 = \dfrac{sh2y_T^0}{ch2y_T^0 + \cos 2x_T^0} \\ v_y^0 = \dfrac{\sin 2x_T^0}{ch2y_T^0 + \cos 2x_T^0} \end{cases}.$$

Траектория движения частицы определяется выражением [6]:

$$ch2y + \cos 2x = const,$$

где *const* вычисляется по начальным данным.

Расчеты проводились с переменным шагом по времени τ, который выбирался таким образом, чтобы в каждой ячейке сетки было не менее 2-х точек траектории.

Относительная ошибка вычислялась по формуле:

$$\delta = \frac{\left|const - \left(ch2y_s + \cos 2x_s\right)\right|}{const}.$$

Ниже приведена табл. 3, в которой указаны относительные ошибки в зависимости от размеров сетки Ω.

Здесь $N = N_x = N_y$. Результаты табл. 3 показывают, во-первых, сходимость численно-аналитического алгоритма со вторым порядком точности при дроблении шага сетки в два раза и, во-вторых, что в данном поле численно-аналитический метод значительно (до 30 раз) точнее численного.

Таблица 3

Относительная ошибка δ расчета траектории частицы в поле (12)

N	16	32	64	128	256
ЧА	1,44E-01	3,31E-02	8,44E-03	2,02E-03	5,06E-04
ЧМ	3,93E-01	1,67E-01	7,35E-02	3,39E-02	1,63E-02

Заключение

Разработаны численно-аналитические алгоритмы интегрирования уравнений движения заряженных частиц, составляющих интенсивные пучки. Проведенные численные эксперименты показали, что численно-аналитические алгоритмы более точны в ряде конкретных задач, причем ошибка в данном случае состоит лишь из формальной ошибки округления, в то время как рассмотренные численные алгоритмы дают существенную ошибку. Основное применение численно-аналитических алгоритмов видится в моделировании протяженных электронно-оптических систем, в которых необходимо точно знать параметры пучка на выходе. В дальнейшем планируется распространить численно-аналитические алгоритмы на расчет траекторий движения заряженных частиц в осесимметричных и трехмерных задачах при наличии не только электрических, но и магнитных полей.

Работа поддержана Сибирским отделением РАН, программа фундаментальных исследований, интеграционный проект № 10.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Свешников В. М.* // Вычислительные технологии. 2004. Т. 9. № 3. С. 90.
2. *Ильин В. П.* Численные методы решения задач электрооптики. – Новосибирск, Наука, Сиб. отд-ние, 1974.
3. *Ильин В. П.* Численные методы решения задач электрофизики. – М.: Наука, 1985.
4. *Ильин В. П.* Методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. – Новосибирск: Изд-во НГУ, 2017.
5. *Арцимович Л. А., Лукьянов С. Ю.* Движение заряженных частиц в электрических и магнитных полях. – М.: Наука, 1978.
6. *Сыровой В. А.* Введение в теорию интенсивных пучков заряженных частиц. – М.: Энергоатомиздат, 2004.

7. *Григорьев Ю. Н., Вшивков В. А., Федорук М. П.* Численное моделирование методами частиц-в-ячейках. – Новосибирск, Изд-во СО РАН, 2004.
8. *Молоковский С. И., Сушков А. Д.* Интенсивные электронные и ионные пучки. – М.: Энергоатомиздат, 1991.
9. *Алямовский И. В.* Электронные пучки и электронные пушки. – М.: Советское радио, 1966.
10. *Мануилов В. Н., Юсупов Э. Т.* // Прикладная физика. 2012. № 5. С. 72.

PACS: 52.59.-f

Numerical-analytical algorithms for integrating the equations of motion of charged particles in electric fields

V. M. Sveshnikov[1] *and A. S. Tretyakov*[2]

[1] Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, SB RAS
6 Akademika Lavrentjeva av., Novosibirsk, 630090, Russia
E-mail: victor@lapasrv.sscc.ru

[2] Novosibirsk State University
2 Pirogova str., Novosibirsk, 630090, Russia
E-mail: gradinos105@gmail.com

Received November 20, 2018

Numerical-analytical algorithms for integrating the equations of motion of charged particles in electric fields are proposed and experimentally investigated. The need to develop such algorithms arose in the simulation of intense beams of charged particles in extended systems. A characteristic task is to determine, as far as possible, the beam expansion and its angular divergence at a considerable distance from the start (emitter) surface. The use of classical numerical algorithms did not give adequate results. Therefore, a proposal arose at each step of numerical integration to use an analytical solution of the equations of motion, making simplifying assumptions about electric fields. Simplifying assumptions within the numerical integration step, which provide sufficient accuracy and, at the same time, a simple solution, were as follows: in the longitudinal direction the field is assumed to be constant, and in the transverse direction – linear in the coordinate, which is characteristic of intense beams. An experimental comparison of numerical-analytical algorithms with numerical algorithms is given, which showed the advantage of the developed approach.

Keywords: intensive beams, integration of equations of motion, electron-optical devices, extended systems, numerical-analytical algorithms, midpoint, predictor-corrector.

REFERENCES

1. V. M. Sveshnikov, Computational Technologies **9** (3), 90 (2004).
2. V. P. Ilyin, *Numerical methods for solving problems in electro-optics* (Nauka, Novosibirsk, 1974) [in Russian].
3. V. P. Ilyin, *Numerical methods for solving problems in electrophysics* (Nauka, Moscow, 1985) [in Russian].
4. V. P. Ilyin, *Methods for solving ordinary differential equations* (Novosibirsk State University, 2017) [in Russian].
5. L. A. Artsimovich and S. Yu. Lukyanov, *The movement of charged particles in electric and magnetic fields* (Nauka, Moscow, 1978) [in Russian].
6. V. M. Syrovoy, *Introduction to the theory of intense beams of charged particles*. (Energoatomizdat, Moscow, 2004) [in Russian].
7. Yu. N. Grigoryev, V. A. Vshivkov, and M. P. Fedoruk, *Numerical modeling of particles in cells* (Publishing house of SB RAS, Novosibirsk, 2004) [in Russian].
8. S. I. Molokovskiy and A. D. Sushkov, *Intensive electron and ion beams* (Energoatomizdat, Moscow, 1991) [in Russian].
9. I. V. Alyamovsky, *Electron beams and electron guns* (Soviet Radio, Moscow, 1966) [in Russian].
10. V. N. Manuilov and E. T. Yusupov, Prikl. Fiz., No. 5, 72 (2012).