ЭЛЕКТРОННЫЕ, ИОННЫЕ И ЛАЗЕРНЫЕ ПУЧКИ

УДК 519.63 PACS: 52.59.-f

Численные алгоритмы расчета объемного заряда, создаваемого интенсивными пучками заряженных частиц

А. Н. Козырев, В. М. Свешников

Точность решения самосогласованных нелинейных задач сильноточной электроники существенно зависит от того насколько точно распределяется заряд, вносимый пучком заряженных частиц, по узлам сетки, на которой проводится дискретизация задачи. В статье предлагаются, теоретически и экспериментально обосновываются численные алгоритмы распределения объемного заряда, вносимого заряженными частицами, по узлам сеточных элементов различных форм. Рассматриваются параллелепипедальные и тетраэдральные элементы в трехмерном случае, треугольные и четырехугольные элементы в двумерном случае. Теоретически показано, что предлагаемые алгоритмы обеспечивают второй порядок точности расчета потенциала электрического поля. Приводятся результаты численных экспериментов, подтверждающие теоретическую оценку.

Ключевые слова: интенсивные пучки, объемный заряд, заряженные частицы, сетка.

Введение

Численное моделирование интенсивных пучков заряженных частиц является важной составляющей в исследовании процессов, происходящих в различных электрофизических приборах научного и технического приложений. Данной проблеме посвящены работы многих авторов [1–6]. 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. Пучок заряженных частиц моделируется методом трубок тока или нитей, что является экономичной модификацией широко известного метода больших частиц [7] для стационарных пучков.

Важной проблемой является распределение объемного заряда, вносимого пучком, по узлам сетки, покрывающим расчетную область. Обычно применяемые методы отнесения заряда к ближайшему узлу имеют только *первый порядок точности*, что требует дальнейшего совершенствования методов моделирования. Этому и посвящена данная работа, которая фактически является развитием работы [8] одного из авторов.

Козырев Александр Николаевич, младший научный сотрудник.
Свешников Виктор Митрофанович, заведующий лабораторией, д.ф.-м.н.
Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН.
Россия, 630090, Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 6.
E-mail: kozyrev@inbox.ru; victor@lapasrv.sscc.ru

Статья поступила в редакцию 21 декабря 2017 г.

Постановка работы

Мы предлагаем, теоретически и экспериментально доказываем методы *второго порядка точности*. Они основываются на методе Р. Хокни и Дж. Иствуда по распределению точечного заряда [9]. В нашем случае рассмотрен не точечный заряд, а отрезок траектории заряженной частицы. Важным достоинством предложенного подхода является то, что доказано повышение порядка точности не только для объемного заряда, но и для расчета потенциала электрического поля, создаваемого объемным зарядом. Таким образом, более точно рассчитывается сила, действующая на частицу, а, следовательно, и ее траектория. Рассмотрены двумерные и трехмерные сеточные элементы. Разработаны алгоритмы распределения объемного заряда, вносимого отрезком траектории, принадлежащим в двумерном случае треугольным или четырехугольным сеточным элементам, а в трехмерном случае – тетраэдральным или параллелепипедальным сеточным элементам. Доказаны утверждения о том, что разработанные алгоритмы имеют второй порядок точности. Теоретические утверждения подкреплены результатами численных экспериментов.

Постановка задачи

Рассмотрим следующую постановку задачи расчета стационарных пучков заряженных частиц. В замкнутой области с границей $\Gamma = \Gamma_1 \bigcup \Gamma_2$ требуется найти решение системы дифференциальных уравнений, включающей в себя уравнение Пуассона для потенциала электрического поля φ

$$\Delta\varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}$$

с граничными условиями

$$\varphi\big|_{\Gamma_1} = g(\vec{r}), \frac{\partial\varphi}{\partial\vec{n}}\bigg|_{\Gamma_2} = 0,$$

а также уравнения движения заряженных частиц

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v},\ \frac{d\vec{v}}{dt} = \eta\left(\vec{E} + \mu_0\left[\vec{v}\times\vec{H}\right]\right),\ \vec{E} = -\mathrm{grad}\varphi$$

с начальными условиями

$$\vec{r}\big|_{t=0} = \vec{r}^{\,0},\ \vec{v}\big|_{t=0} = \vec{v}^{\,0}$$

и уравнение неразрывности потока зарядов

$$\mathrm{div}\,\vec{j} = 0,\ \vec{j} = \rho\vec{v}.$$

Здесь Δ – оператор Лапласа, ρ – плотность объемного заряда, ε_0, μ_0 – электрическая и магнитная постоянные (система СИ), $\vec{r} = (x, y, z)$ – радиус-вектор заряженных частиц, причем в двумерном случае координата z отсутствует, $\vec{v}$ – ее скорость, η – отношение заряда к массе, t – время, $\vec{E}$ – напряженность электрического поля, $\vec{H}$ – напряженность магнитного поля, $\vec{j}$ – плотность тока.

Распределение объемного заряда

При моделировании пучка заряженных частиц проводится его дискретизация на заданное число N_T трубок тока или нитей, каждая из которых в процессе расчета изображается своей траекторией. Траектория с номером k (k = 1, 2, …, N_T) на каждом временном шаге τ_k^n (n = 1, 2, … – номер временного шага) пересекает $N_q \geq 1$ элементов e_i (i = 1, 2, …, N_q) сетки Ω, на которой проводится моделирование. Известно несколько способов распределения заряда с данного отрезка в сеточные узлы. Например, один из них заключается в том, что он разбивается на подынтервалы в предположении равноускоренного движения, и заряд с каждого такого подынтервала относится к узлу, ближайшему к его центру [3]. Другой способ состоит в том, что отрезок траектории разбивается на такие подынтервалы, каждый из которых полностью лежит внутри сеточной ячейки, а заряд с него относится к центральному узлу ячейки [10]. Данные алгоритмы имеют первый порядок точности. Предлагаемые нами алгоритмы, приведенные ниже, на порядок точнее, что в свою очередь обеспечивает более точное моделирование интенсивных пучков заряженных частиц.

Пусть e-сеточный элемент, которому принадлежит отрезок k-й траектории δ_k^n. Данный отрезок траектории вносит заряд $q = q_k^n = I_k\tau_k^n$, где I_k – ток k-й траектории (в дальнейшем индексы k, n будем опускать).

Требуется рассчитать распределение заряда q по узлам сетки Ω, которые являются вершинами e. В основу решения данной задачи положен алгоритм распределения единичного точечного заряда, изложенный в монографии Р. Хокни и Дж. Иствуда [9]. Его суть заключается в следующем.

Обозначим через W_p долю единичного заряда, находящегося в точке r, которая относится к точке r_p – вершине e. Точный потенциал в точке $r' \in e$ есть

$$\overline{\varphi}(r') = G(r' - r),$$

а приближенный потенциал равен

$$\varphi(r') = \sum_p W_p G(r' - r_p),$$

где $G(r)$ – функция Грина, причем суммирование проводится по всем узлам, которые являются вершинами e. Разлагая $G(r' - r_p) = G((r' - r) + \Delta_p)$ в ряд Тейлора по параметру $\Delta_p = r - r_p$, получим

$$\varphi(r') = \sum\nolimits_p W_p G(r' - r) + \\ + \sum\nolimits_p W_p \sum\nolimits_{n=1}^{\infty} \frac{\Delta_p^n d^n G(r' - r)}{dr^n}. \qquad (1)$$

Потребуем, чтобы точный потенциал совпадал с приближенным с точностью $O(h^2)$, где h – шаг сетки, на которой проводится дискретизация задачи. В результате получим уравнения для определения W_p. Ниже рассматриваются алгоритмы распределения объемного заряда в двумерном случае для треугольных и четырехугольных сеточных элементов и в трехмерном случае для тетраэдральных и параллелепипедальных сеточных элементов.

Пусть $e = e_t$ – треугольный элемент с вершинами, которые обозначим цифрами 1, 2, 3. Здесь $\Delta_p = \left(\Delta_p^x, \Delta_p^y\right)$. В этом случае, взяв в (1) три первых члена, получим следующую систему уравнений:

$$\sum_{p=1}^{3} W_p = 1,\ \sum_{p=1}^{3} W_p \Delta_p^x = 0,\ \sum_{p=1}^{3} W_p \Delta_p^x = 0. \quad (2)$$

Её решение можно выразить следующим образом:

$$W_1 = A_1\Delta_3^x - B_1\Delta_3^y,\ W_2 = A_2\Delta_1^x - B_2\Delta_1^y,$$
$$W_3 = A_3\Delta_2^x - B_3\Delta_2^y,$$

где $A_i = \dfrac{l_{i'i''}^y}{z_i}$, $B_i = \dfrac{l_{i'i''}^x}{z_i}$, $z_i = l_{ii'}^x l_{i'i''}^y - l_{i'i''}^x l_{ii'}^y$,
$i = 1, 2, 3;\ i' = 2, 3, 1;\ i'' = 3, 1, 2.$

Здесь $l_{ij}^x = x_i - x_j$, $l_{ij}^y = y_i - y_j$, где x_i, y_i – координаты i-го узла сетки.

Перейдем теперь к решению задачи о распределении заряда q, вносимого отрезком $\delta \in e_t$ между (n)-й и (n+1)-й точками траекторий. Разобьем δ на n_q подынтервалов равной длины

$$d\lambda = \frac{l}{n_q},\ l = \left|\vec{l}\right| = \sqrt{l_x^2 + l_y^2}.$$

Здесь $\vec{l} = \left(l_x, l_y\right)$, где $l_x = x^{n+1} - x^n$, $l_y = y^{n+1} - y^n$. Координаты центров этих подынтервалов $\vec{r}_i$ определяются по формуле

$$\vec{r}_i = \vec{r}^{\,n} + \frac{(2i-1)\vec{l}}{2n_q},\ i = 1, 2, ..., n_q,$$

а заряд, вносимый каждым подынтервалом, равен $\bar{q} = q/n_q$. Сосредоточим заряд $\bar{q}$ в центре i-го подынтервала. Его вклад q_p^i в узлы сетки, являющиеся вершинами e_t, выражается как

$$q_p^i = W_p^i \frac{q}{n_q},$$

где W_p^i – доля единичного заряда, находящегося в точке $\vec{r}_i$, отнесенного к p-му узлу.

Для W_p^i справедливы уравнения, аналогичные уравнениям (2). Их решение можно записать в виде

$$W_p^i = A_p\Delta_{p'i}^x - B_p\Delta_{p'i}^y,\quad p, p' = 1, 2, 3,$$
$$i = 1, 2, ..., n_q,\quad p \neq p'.$$

Заряд $\tilde{q}_p$, отнесенный к p-му узлу, со всего участка δ равен сумме зарядов с каждого подынтервала, т. е.

$$\tilde{q}_p = \sum_i q_p^i = \frac{q}{l}\sum_i W_p^i d\lambda.$$

Окончательно заряд в p-м узле определим как

$$q_p = \lim_{d\lambda \to 0} \tilde{q}_p = \overline{W}_p q,$$

где $$\overline{W}_p = \frac{1}{l}\int_0^l W_p^i d\lambda. \quad (3)$$

Так как по определению

$$\Delta_{p'i}^x = x_i - x_{p'},\ \Delta_{p'i}^y = y_i - y_{p'},$$

а из геометрических соображений

$$x_i = x^n + \lambda\cos\alpha,\ y_i = y^n + \lambda\sin\alpha,$$

где α – угол наклона рассматриваемого отрезка траектории к оси x, а λ – длина отрезка траектории, ограниченного точками $\vec{r}^{\,n}$ и $\vec{r}_i$, то формулу (3) можно записать в следующем виде:

$$\overline{W}_p = \frac{A_p}{l}\int_0^l \left(x^n - x_{p'} + \lambda\cos\alpha\right)d\lambda -$$
$$-\frac{B_p}{l}\int_0^l \left(y^n - y_{p'} + \lambda\sin\alpha\right)d\lambda.$$

Проводя интегрирование и преобразование для $\overline{W}_p$, получим окончательное выражение:

$$\overline{W}_p = A_p\left(x^{n+1/2} - x_{p'}\right) - B_p\left(y^{n+1/2} - y_{p'}\right),$$

где $x^{n+1/2}$, $y^{n+1/2}$ – координаты центра отрезка траектории, определяемые по формуле:

$$\vec{r}^{\,n+1/2} = \frac{\vec{r}^{\,n+1} + \vec{r}^{\,n}}{2}.$$

Таким образом, доказано следующее

Утверждение 1. Вклад объемного заряда q, вносимого отрезком траектории δ, принадлежащим треугольному элементу e_t, в его вершины, равен вкладу точечного заряда q, сосредоточенного в центре $\left(x^{n+1/2},\ y^{n+1/2}\right)$ *отрезка δ.*

Из построения q_p следует, что при данном распределении заряда погрешность ε расчета потенциала имеет второй порядок точности.

Приводимые ниже *утверждения* доказываются аналогично. Во всех *утверждениях* обеспечивается второй порядок точности.

Утверждение 2. Вклад объемного заряда q, вносимого отрезком траектории δ, принадлежащим четырехугольному элементу e_q, в его вершины, определяется по формулам

$$q_p = \left(\bar{W}_p + \psi_p\right) q, \; p = 1, 2, 3, 4,$$

где $\bar{W}_p$ – вклад от единичного заряда, находящегося в центре δ.

Здесь $\psi_p = 0$ для прямоугольного элемента, а для произвольного четырехугольного элемента отлично от 0 (более подробно см. [8]).

Утверждение 3. Вклад объемного заряда q, вносимого отрезком траектории δ, принадлежащим тетраэдральному элементу e_s, в его вершины, равен вкладу точечного заряда q, сосредоточенного в центре $\left(x^{n+1/2},\; y^{n+1/2},\; z^{n+1/2}\right)$ отрезка δ.

Утверждение 4. Вклад объемного заряда q, вносимого отрезком траектории δ, принадлежащим параллелепипедальному элементу e_p, в его вершины, равен вкладу точечного заряда q, сосредоточенного в центре $\left(x^{n+1/2},\; y^{n+1/2},\; z^{n+1/2}\right)$ отрезка δ.

Численные эксперименты

Рассматривалась задача о движении пучка заряженных частиц с заданной плотностью тока j в единичном кубе $R = \{0 \le x \le 1, 0 \le y \le 1, 0 \le z \le 1\}$. На верхней грани задается потенциал $\varphi|_{z=1} = 1$, на нижней $-\varphi|_{z=0} = 0$, а на боковых гранях ставилось условие $\left.\frac{\partial\varphi}{\partial\vec{n}}\right|_{\Gamma} = 0$. Величина j выбиралась так, чтобы удовлетворялся известный закон «3/2» для плоского диода. Аналитическое решение данной задачи для потенциала и плотности объемного заряда выражаются формулами

$$\varphi = \left(\frac{j}{c_j}\right)^{2/3} z^{4/3}, \quad \rho = -\frac{4}{9}\varepsilon_0 \left(\frac{j}{c_j}\right)^{2/3} z^{-2/3},$$

$$c_j = \frac{4}{9}\varepsilon_0\sqrt{2\eta}.$$

В области R строились равномерные параллелепипедальные сетки Ω с числом узлов, увеличивающимся в 2 раза по каждому направлению. С нижней грани запускался электронный пучок с нулевой начальной скоростью. Дискретизация пучка проводилась так, что каждая трубка тока стартовала из центра сеточного элемента. Рассчитывался объемный заряд по приведенным выше алгоритмам, а затем решалась система обычных семиточечных уравнений, аппроксимирующих уравнение Пуассона с граничными условиями [11]. За один временной шаг τ_k^n пучок проходил один шаг сетки Ω. Вычислялись относительные погрешности ε_φ% расчета потенциала и объемного заряда ε_ρ% в процентах в узлах сетки, которые приведены в нижеследующих таблицах, причем в табл. 1 приведены максимальные погрешности во всей области, а в табл. 2 и 3 – погрешности в плоскостях, перпендикулярных z (по другим координатам погрешность не менялась).

Таблица 1

Максимальная относительная погрешность расчета потенциала

Ω	8×8×8	16×16×16	32×32×32	64×64×64
ε_φ%	0,3707	$9{,}74\times10^{-2}$	$2{,}533\times10^{-2}$	$5{,}086\times10^{-3}$

Таблица 2

Погрешность расчета потенциала ε_φ% в узлах сетки

Ω	8×8×8	16×16×16	32×32×32	64×64×64
z = 0,25	0,3707	$9{,}746\times10^{-2}$	$2{,}413\times10^{-2}$	$5{,}056\times10^{-3}$
z = 0,5	0,1593	$4{,}073\times10^{-2}$	$1{,}029\times10^{-2}$	$2{,}485\times10^{-3}$
z = 0,875	$2{,}258\times10^{-2}$	$5{,}756\times10^{-3}$	$1{,}455\times10^{-3}$	$3{,}721\times10^{-4}$

Таблица 3

Погрешность расчета объемного заряда ε_ρ% в узлах сетки

Ω	8×8×8	16×16×16	32×32×32	64×64×64
z = 0,25	5,3041	1,1942	0,2915	$7{,}247\times10^{-2}$
z = 0,5	1,1942	0,2915	$7{,}248\times10^{-2}$	$1{,}809\times10^{-2}$
z = 0,875	0,3817	$9{,}472\times10^{-2}$	$2{,}364\times10^{-2}$	$5{,}912\times10^{-3}$

Из приведенных таблиц можно сделать вывод о том, что в численных экспериментах подтверждается второй порядок точности. Действительно, с дроблением шага сетки в два раза погрешность уменьшается приблизительно в четыре раза.

Заключение

В работе предложен, теоретически и экспериментально исследован метод повышенного порядка точности распределения объемного заряда, вносимого интенсивным пучком заряженных частиц, по узлам сетки, на которой проводится моделирование исходной самосогласованной задачи. Рассмотрены трехмерный и двумерный случаи. Доказаны утверждения о порядке точности при распределении заряда по узлам тетраэдральных, параллелепипедальных, треугольных и четырехугольных сеточных элементов. Приводятся результаты численных экспериментов, подтверждающие теоретические выводы.

Теоретическая часть работы поддержана грантом РНФ (проект 14–11–00485), экспериментальная часть работы поддержана грантом РФФИ (проект 16–01–00168).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Сыровой В. А.* Введение в теорию интенсивных пучков заряженных частиц. – М.: Энергоатомиздат, 2004.
2. *Ильин В. П.* Численные методы решения задач электрофизики. – М.: Наука, 1985.
3. *Молоковский С. И., Сушков А. Д.* Интенсивные электронные и ионные пучки. – М.: Энергоатомидат, 1991.
4. *Zhu X., Munro E.* // J. Vac. Sci. Technol. 1989. Vol. 7. P. 1862.
5. *Rouse J., Munro E.* // J. Vac. Sci. Technol. 1989. Vol. 7. P. 1891.
6. *Westerman T.* // Int. J. of Numerical Modeling Electronic Networks, Devices and Fields. 1994. Vol. 7. P. 43.
7. *Григорьев Ю. Н., Вшивков В. А., Федорук М. П.* Численное моделирование частиц в ячейках. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2004.
8. *Свешников В. М.* // Вычислительные технологии. 2004. Т. 9. № 3. С. 90.
9. *Хокни Р., Иствуд Дж.* Численное моделирование методом частиц. – М.: Мир, 1987. [R. W. Hockney, J. W. Eastwood, Computer Simulation Using Particles (McGraw-Hill Book Company, New York, 1981)]
10. *Свешников В. М.* // Препринт. Новосибирск: РАН, Сиб. Отделение. № 1109. 1997.
11. *Ильин В. П.* Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений. – Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ (ВЦ) СО РАН, 2001.

PACS: 52.59.-f

Numerical algorithms for calculating the volume charge generated by intense charged particles beams

A. N. Kozyrev and V. M. Sveshnikov

Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, SB RAS
6 Akademika Lavrent'eva av., Novosibirsk, 630090, Russia
E-mail: kozyrev@inbox.ru, victor@lapasrv.sscc.ru

Received December 21, 2017

The accuracy of the solution of self-consistent nonlinear problems in high-current electronics essentially depends on how accurately the charge generated by the charged particle beam through the grid nodes on which the discretization of the problem is carried out is accurately distributed. The numerical algorithms for the distribution of the space charge introduced by charged particles are proposed and

theoretically and experimentally substantiated for various shapes of grid elements. Parallelepipedal and tetrahedral elements in the three-dimensional case, triangular and quadrilateral elements in the two-dimensional case is considered. It is shown theoretically, that the proposed algorithms provide a second order of accuracy in calculating the potential of the electric field. The results of numerical experiments confirming the theoretical basis are presented.

Keywords: intense beams, volume charge, charged particles, grid.

REFERENCES

1. V. A. Syrovoy, *Introduction to the theory of intense beams of charged particles*. (Energoatomizdat, Moscow, 2004) [in Russian].
2. V. P. Ilyin, *Numerical methods for solving problems in electrophysics* (Nauka, Moscow, 1985) [in Russian].
3. S. I. Molokovskiy and A. D. Sushkov, *Intensive electron and ion beams* (Energoatomizdat, Moscow, 1991) [in Russian].
4. X. Zhu and E. Munro, J. Vac. Sci. Technol. **7**, 1862 (1989).
5. J. Rouse and E. Munro, J. Vac. Sci. Technol. **7**, 1891 (1989).
6. T. Westerman, Int. J. of Numerical Modeling Electronic Networks, Devices and Fields. **7**, 43 (1994).
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. V. M. Sveshnikov, Computational Technologies **9** (3), 90 (2004).
9. R. W. Hockney and J. W. Eastwood, *Computer Simulation Using Particles* (McGraw-Hill Book Company, New York, 1981; Mir, Moscow, 1987).
10. V. M. Sveshnikov, Preprint. Novosibirsk: RAS SB. No. 1109 (1997).
11. V. P. Ilyin, *Methods of finite differences and finite volumes for elliptic equations* (Publishing house of ICMMG SB RAS, Novosibirsk, 2001) [in Russian].