

УДК 537.291

ВЕРИФИКАЦИЯ КОМПЬЮТЕРНОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ РАСЧЕТА УСКОРИТЕЛЕЙ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

Дикалюк А.С.^{1,2,3}

¹ *Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики имени Н. Л. Духова»*

Москва, 127055, Суцеская ул., д.22

² *Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва, 119526, проспект Вернадского 101-1*

³ – *Московский физико-технический институт (государственный университет), Московская область, г. Долгопрудный, 141700, Институтский пер., 9*
aleks.dikalyuk@gmail.com

Аннотация

В работе на примере нескольких тестовых задач выполнена верификация методики расчета движения заряженных частиц в заданных электрических полях. Выполнено сопоставление результатов, полученных с помощью разработанных компьютерных кодов с результатами полученными с помощью коммерческих программ SIMION и CPO.

Ключевые слова: электростатика, движение заряженных частиц, метод конечного объема, неструктурированные сетки, метод Бориса, тестирование вычислительной модели.

VERIFICATION OF THE COMPUTER MODEL FOR THE SIMULATION OF THE CHARGED PARTICLE ACCLERATORS

Dikaljuk A.S.^{1,2,3}

¹ *Federal state unitary enterprise All-Russia research institute of automatics (VNIAA), Russia, Moscow, 127055*

² *Ishlinskyi Institute for problem in mechanics RAS, Russia, Moscow, 119526*

³ *Moscow Institute of Physics and Technology (State University), Russia, Dolgoprudny, Moscow Region, 1417009*

In the work, verification of the numerical technique of calculation of charged particle motion in the electric field of electrodes is performed based on several test problems. Comparison of the results obtained using developed computed codes with the results obtained using commercial products CPO and SIMION is presented.

Keywords: finite volume method, movement of charged particles, the Boris method, verification of numerical simulation models.

1. Введение

Задача расчета движения нерелятивистских заряженных частиц в электростатических полях носит комплексный характер. Она включает в себя расчет самих электростатических полей, создаваемых системой электродов, возможно, сложной геометрии, а так же расчет движения заряженных частиц в этих полях под действием соответствующих сил. Причем для правильного решения этих задач в связке необходимо корректно выполнять интерполяцию электростатических полей из расчетных точек сетки к текущему местоположению частиц. Данный подход можно считать составной частью более общего метода частиц-ячеек (PIC-метод), который долгое время разрабатывался как в нашей стране, так и за рубежом [1–4]. Отличие от PIC-метода состоит в отсутствии влияния пространственного за-

ряда, создаваемого движущимися частицами, на распределение электростатических полей в системе и, как следствие, на движение самих этих частиц.

Ввиду комплексности указанной задачи, необходимо проведение тестовых расчетов, которые позволят верифицировать расчетные методики, положенные в основу компьютерной программы, реализующей ее решение.

2. Описание расчетной методики

2.1. Расчет электростатических полей

Будем рассматривать задачи с осевой симметрией. Для расчета электростатических полей в системе электродов заданной геометрии необходимо решить уравнение Пуассона с нулевой правой частью:

$$\Delta\varphi = \frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial\varphi}{\partial r} = 0; \left(\alpha_1\varphi + \alpha_2 \frac{\partial\varphi}{\partial \vec{n}} \right) \Big|_{\partial D} = f(r, z) \quad (1)$$

Здесь r – радиальная координата; z – осевая координата; φ – потенциал электростатического поля; ∂D – граница расчетной области; $\vec{n}$ – вектор нормали к границе расчетной области.

Для решения данного стационарного уравнения используется метод установления. Таким образом, решаемое уравнение приобретает вид:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \Delta\varphi; \left(\alpha_1\varphi + \alpha_2 \frac{\partial\varphi}{\partial \vec{n}} \right) \Big|_{\partial D} = f(r, z) \quad (2)$$

Для численного решения (2) используется метод конечного объема, реализованный на неструктурированной треугольной сетке. Значения потенциала при этом относятся к барицентрам треугольников. Используется методика, изложенная в [5].

Проинтегрируем (2) по «объему» k -го треугольника:

$$\iint_{\Delta_k} \frac{\partial\varphi}{\partial t} drdz = \iint_{\Delta_k} \left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} \right) drdz + \iint_{\Delta_k} \frac{1}{r} \frac{\partial\varphi}{\partial r} drdz \quad (3)$$

Теперь воспользуемся формулой Грина для преобразования первого интеграла (треугольники по умолчанию ориентированы против часовой стрелки), стоящего в правой части (3), получим

$$S_k \frac{\partial\overline{\varphi_k}}{\partial t} = \int_{\partial\Delta_k} \left(\frac{\partial\varphi}{\partial z} dr - \frac{\partial\varphi}{\partial r} dz \right) + S_k \left(\frac{1}{r} \frac{\partial\varphi}{\partial r} \right)_k, \quad (4)$$

здесь S_k – площадь k -го треугольника, горизонтальная линия над величиной означает ее усредненное значение по «объему» k -ого треугольника. Далее учитываем, что треугольник состоит из трех граней, т.е. интеграл в (4) заменяется суммой

$$\frac{\partial\overline{\varphi_k}}{\partial t} = \frac{1}{S_k} \sum_{n=1}^3 \left(\left(\frac{\partial\varphi}{\partial z} \right)_{n,k} \Delta r_{n,k} - \left(\frac{\partial\varphi}{\partial r} \right)_{n,k} \Delta z_{n,k} \right) + \frac{1}{r_k} \left(\frac{\partial\varphi}{\partial r} \right)_k \quad (5)$$

здесь r_k – радиальная координата барицентра k -го треугольника. Теперь необходимо определить процедуру вычисления величин $(\partial\varphi/\partial z)_{n,k}$ и $(\partial\varphi/\partial r)_{n,k}$ через центр n -й грани k -го треугольника, а так же величины $\overline{(\partial\varphi/\partial r)}_k$ в точке, соответствующей барицентру треугольника. Для вычисления всех указанных величин используется метод наименьших квадратов. Шаблон для вычисления величины $\overline{(\partial\varphi/\partial r)}_k$ – все треугольники имеющие общую грань с

k -м. Шаблон для вычисления величин $(\partial\varphi/\partial z)_{n,k}$ и $(\partial\varphi/\partial r)_{n,k}$ – все треугольники, содержащие хотя бы одну из точек n -й грани k -го треугольника. Для дискретизации временной производной используется явный метод Рунге – Кутты второго порядка точности. Для ускорения процедуры установления в каждом элементе сетки используется собственный шаг по времени, так как нам не требуется вычислять эволюцию решения во времени, а необходимо получить только установившееся решение.

После того, как процедура установления завершена (индикатором этого служит величина $\max_k |\varphi_k^{i+1} - \varphi_k^i / \tau_k|$. Здесь i – номер фиктивного временного шага; k – номер треугольника) и в системе вычислено распределение потенциала, необходимо рассчитать проекции электрических полей. Для этого используется метод наименьших квадратов, шаблон – сам треугольник и его соседи.

2.2. Решение уравнений движения для заряженных частиц

Для решения уравнений движения заряженных частиц используется нерелятивистский вариант метода Бориса [1–2, 6]. Не будем приводить здесь расчетные формулы метода, так как их можно найти, например, в приведенных выше источниках. Отметим лишь, что суть метода на качественном уровне состоит в том, что движение заряженной частицы под действием электромагнитного поля расщепляется на движение под действием только электрического поля и только магнитного поля.

Отметим далее две особенности. Первая связана со спецификой интегрирования уравнений движения в цилиндрической системе координат. Суть проблемы состоит в том, что если перейти при записи уравнений движения от декартовых координат к цилиндрическим, то в получившуюся систему войдут слагаемые пропорциональные $1/r$, что означает наличие особенности в случае, когда частица проходит через ось. С численной точки зрения это будет приводить к потере точности при $r \rightarrow 0$, необходимости существенно уменьшать шаг интегрирования уравнений движения при приближении частицы к оси. Для преодоления этой трудности используется подход [1, 6], также предложенный Борисом. На первом этапе уравнения движения решаются в декартовых координатах без учета инерциальных сил, а затем с использованием вычисленных значений рассчитываются координаты и скорости частицы в цилиндрической системе координат.

Вторая проблема связана с тем, что с помощью метода Бориса, как и всех методов с перешагиванием, можно рассчитывать скорости частиц в момент времени $t + 0.5\Delta t$, а координаты в момент времени $t + \Delta t$. При этом на самом первом шаге по времени начальные положения и скорости известны в один и тот же момент времени t_0 . То есть для выполнения корректных расчетов со вторым порядком точности необходимо вычислить скорости в момент времени $t_0 - 0.5\Delta t$. В [6] приведены выражения, которые позволяют правильно вычислить значения скорости в момент времени $t_0 - 0.5\Delta t$ в случае цилиндрической геометрии и результаты тестовых расчетов, демонстрирующих ошибку, которая получается, если $\vec{v}_{t_0-0.5\Delta t}$ определены неверно.

2.3. Интерполяция электрического поля к текущему положению частицы и процедура поиска частицы на сетке

На треугольном элементе сетки для интерполяции электрических полей к текущему местоположению частицы удобно использовать линейные базисные функции. Обозначим $N_n^k(z, r)$ – локальную базисную функцию, определенную для k -го треугольного элемента и n -й вершины (n – номер локально пронумерованной вершины, меняется от 1 до 3), тогда если известны значения некоторой функции f в узлах расчетной сетки и частица с коорди-

натами (z_j, r_j) находится внутри элемента k , то для значения функции в точке (z_j, r_j) имеем [2]:

$$f(z_j, r_j) = \sum_{n=1}^3 N_n^k(z_j, r_j) f(z_n^k, r_n^k), \quad (6)$$

где (z_n^k, r_n^k) – координаты вершин треугольника.

Проблема в данном случае состоит в том, что при решении уравнения Пуассона и расчете проекций электрического поля E_r и E_z они известны в барицентрах треугольников, а для использования (6) необходимо знать эти функции в узлах сетки, то есть в вершинах треугольников. Для того, чтобы перенести необходимые значения из барицентров треугольников в узлы расчетной сетки можно использовать методику, представленную в [7]. С помощью нее можно, зная топологию сетки, вычислить веса, а затем, используя известные значения функций в барицентрах треугольников, получить значения функций в узлах расчетной сетки. Потом для каждой частицы, применяя формулу (6), можно быстро рассчитывать значения силы.

Стоит отметить, что процедуру интерполяции можно так же выполнять с помощью метода наименьших квадратов, где шаблоном будут являться треугольники, соседние с тем, в котором в данный момент находится частица. Однако, этот подход пока еще не был исследован.

Так же стоит обратить внимание на метод поиска частиц на неструктурированной сетке. Вариант с использованием линейных базисных функций предложен в [2]. Чтобы частица находилась внутри элемента, необходимо, чтобы значения всех трех линейных базисных функций, рассчитанные по координатам частицы, были положительными. Если хотя бы одна отрицательная, то частица находится вне данного треугольника, причем ее следует продолжить искать за гранью противоположащей той вершине, которой соответствует линейная базисная функция с отрицательным значением.

3. Результаты тестовых расчетов

3.1 Тестовая задача 1

Рассмотрим первую тестовую задачу. Геометрия расчетной области и расчетная сетка представлены на рис. 1. На правой и левой границах расчетной области размещены электроды. Форма электродов – цилиндрическая поверхность закрытая кругом с одного конца (стаканообразные электроды). Левый находится под напряжением 30 кВ, правый под напряжением 0 кВ. Рассматривается движение двух протонов в такой системе. Изначально протоны задаются вблизи поверхности левого электрода с начальной энергией 1 эВ. Направление начальной скорости соответствует направлению стрелки, изображенной на рис. 1. Начальная радиальная координата протонов: $r_1 = 2$ см, $r_2 = 2.1$ см.

Рассмотрим варианты граничных условий, которые можно поставить на внешней границе области. Во-первых, это могут быть условия Неймана (будем называть эти граничные условия «тип 1»):

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial n} \right|_{\partial D_g} = 0 \quad (7)$$

Так же на этой части границы расчетной области можно поставить асимптотические граничные условия, которые описывают случай $\varphi \rightarrow 0$ при $r, z \rightarrow \infty$. Вывод указанных граничных условий из уравнения Лапласа для случая прямоугольных расчетных областей в осесимметричной геометрии приведен в [8].

Рассмотрим сначала результат решения тестовой задачи методами, изложенными в настоящей работе, для двух случаев указанных выше граничных условий. Соответствующую-

щие графики приведены на рис. 2 и 3. Цветными линиями на рисунках показаны траектории двух частиц. Так же на этих рисунках приведено распределение электрического потенциала в [В]. На рис. 2 приведенное распределение потенциала соответствует случаю граничных условий Неймана, на рис. 3 приведенное распределение потенциала соответствует случаю асимптотических граничных условий. Видно, что изменение граничных условий приводит к существенному изменению формы распределения электрического потенциала, и, как следствие, к измененным траекториям полета заряженных частиц.

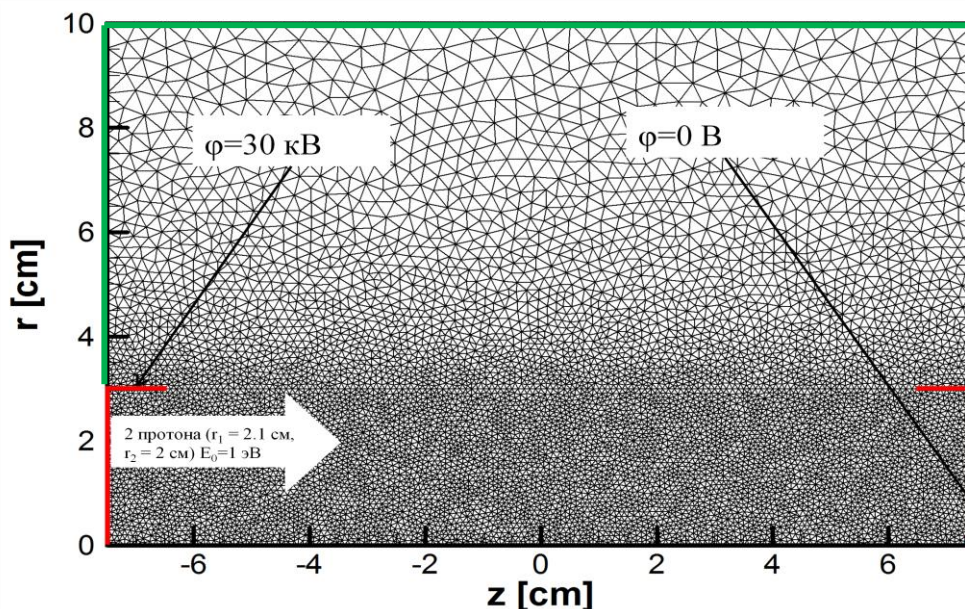


Рис. 1. Параметры тестовой задачи №1. Местоположение и форма электродов отмечены красным цветом. У поверхности левого электрода задаются 2 протона, траектории которых рассчитываются

Далее представим результат сравнения некоторых параметров траекторий частиц. Сопоставление результатов, полученных с помощью подходов, описанных выше с результатами, полученными с помощью программы СРО, представлены в табл. 1 и 2. Среди сравниваемых параметров: радиальная координата точки вылета частицы из расчетной области; радиальная и осевая компонента скорости частицы в этот момент времени; время нахождения частицы в расчетной области (от момента начала движения до момента вылета). Данные табл. 1 соответствуют расчетам для граничных условий Неймана (рис. 2). Данные табл. 2 соответствуют расчетам для асимптотических граничных условий (рис. 3). Как видно из приведенных данных, оба метода дают достаточно близкие результаты по всем параметрам. Из двух наборов данных максимальная относительная разница между ними составляет $\varepsilon_{\max} \sim 8.5\%$. Это разница получается для радиальной скорости в точке вылета в случае асимптотических граничных условий, частица с начальной координатой $r = 2$ см (табл. 2).

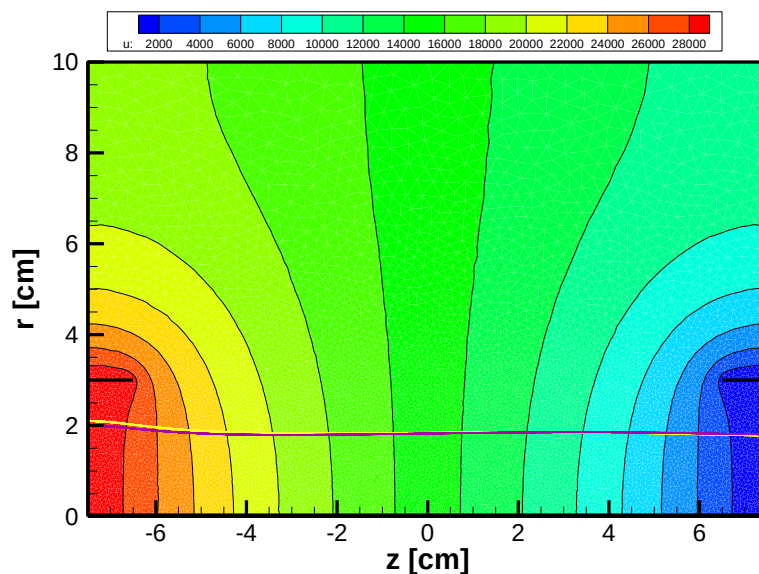


Рис. 2. Результат решения тестовой задачи №1. Электрический потенциал [В] рассчитан для случая граничных условий Неймана на внешней границе расчетной области

Таблица 1

Сопоставление результатов расчетов по представленным в работе подходам и коммерческой программе СРО. Тестовая задача №1. Граничные условия Неймана (рис. 2)

	$r = 2.0$ см		$r = 2.1$ см	
	данная работа	СРО	данная работа	СРО
V_z [см/с]	2.397E+08	2.397E+08	2.397E+08	2.397E+08
V_r [см/с]	-2.818E+06	-2.691E+06	-4.005E+06	-3.901E+06
r [см]	1.805	1.864	1.778	1.836
t [с]	1.190E-07	1.180E-07	1.197E-07	1.187E-07

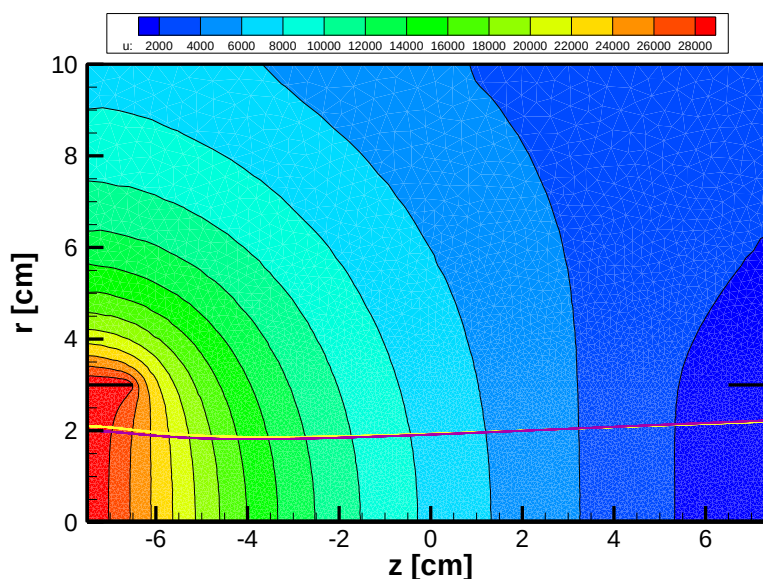


Рис. 3. Результат решения тестовой задачи №1. Электрический потенциал [В] рассчитан для случая асимптотических граничных условий на внешней границе расчетной области

Таблица 2

Сопоставление результатов расчетов по представленным в работе подходам и коммерческой программе СРО. Тестовая задача №1. Асимптотические граничные условия (рис. 3)

	$r = 2.0$ см		$r = 2.1$ см	
	данная работа	СРО	данная работа	СРО
V_z [см/с]	2.395E+08	2.395E+08	2.396E+08	2.395E+08
V_r [см/с]	1.051E+07	1.140E+07	9.068E+06	9.596E+06
r [см]	2.232	2.320	2.203	2.264
t [с]	9.694E-08	9.648E-08	9.740E-08	9.693E-08

3.2 Тестовая задача 2

Вторая тестовая задача – пример из коммерческой программы SIMION. В ней рассматривается движение частиц в системе, которая в западной литературе носит название einzel lens (EL). Она представляет собой три соосных цилиндра, разделенных небольшими промежутками (в рассматриваемом случае 2 мм), на центральный цилиндр прикладывается напряжение 110 В, два оставшихся заземлены. Эта система приводит к фокусировке пучка частиц без изменения его кинетической энергии. В тестовом случае рассматривается движение 5 положительно заряженных частиц (однократно ионизованных) массой 100 а.е.м., начальная энергия 200 эВ. Начальная скорость частиц параллельна оси симметрии системы.

На рис. 4 представлен результат решения этой задачи с использованием методов, описанных во второй части работы. На рисунке изображено распределение потенциала и траектории движения частиц в расчетной области (черные линии). Наблюдается некоторое расхождение пучка в области, где находятся линзы и последующая фокусировка пучка в конце расчетной области. Выполним количественное сопоставление полученных расчетных данных с результатами расчетов, выполненных с помощью программы SIMION.

В табл. 3 представлены результаты сопоставления некоторых траекторных параметров, которые фиксируются относительно точки выхода частицы из расчетной области: радиальная координата точки вылета, радиальная и осевая проекции скорости в этой точке, время полета частицы, а так же кинетическая энергия частицы. Нетрудно видеть, что представленные к сравнению данные удовлетворительно согласуются друг с другом. Особо обратим внимание (напомним, что данная система электродов должна сохранять кинетическую энергию частиц) на последнюю строку табл. 3. Начальная энергия частиц составляла 200 эВ. Метод, изложенный в данной работе, лучше сохраняет энергию частиц, чем программа SIMION.

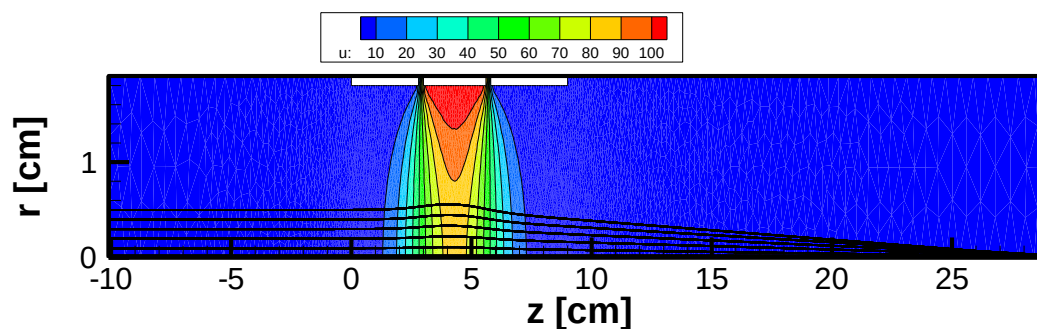


Рис. 4. Результат решения тестовой задачи №2. Представлено распределение электрического потенциала [В], черными линиями обозначены траектории движения заряженных частиц.

Таблица 3

Сопоставление результатов расчетов по представленным в работе подходам и коммерческой программе SIMION. Тестовая задача №2.

	$r = 0.1$ см		$r = 0.2$ см		$r = 0.3$ см		$r = 0.4$ см		$r = 0.5$ см	
	данная работа	SIMION	данная работа	SIMION	данная работа	SIMION	данная работа	SIMION	данная работа	SIMION
V_z [см/с]	1.966E+06	1.971E+06	1.967E+06	1.971E+06	1.967E+06	1.971E+06	1.966E+06	1.970E+06	1.966E+06	1.970E+06
$-V_r$ [см/с]	6.968E+03	6.879E+3	1.421E+04	1.393E+04	2.174E+04	2.136E+04	2.967E+04	2.935E+04	3.867E+04	3.817E+04
r [см]	1.191E-02	1.306E-02	2.043E-02	2.394E-02	2.515E-02	3.006E-02	2.486E-02	2.893E-02	1.091E-02	1.735E-02
t [с]	2.039E-05	2.033E-06	2.03E-05	2.034E-05	2.039E-05	2.034E-05	2.040E-05	2.035E-05	2.041E-05	2.036E-05
E [эВ]	200.406	201.362	200.426	201.329	200.423	201.279	200.404	201.215	200.423	201.135

Заключение

В данной работе дано описание методики расчета траекторий движения частиц в электростатических полях. Методика протестирована на ряде тестовых задач. Проведено сопоставление с результатами, полученными с помощью коммерческих программ СРО и SIMION. Получено удовлетворительное согласие между рассчитанными наборами данных.

Благодарности

Автор благодарит Суржикова С.Т., а так же весь коллектив лаборатории радиационной газовой динамики за обсуждение данной работы и ценные замечания. Автор выражает благодарность Куратову С.Е.

Литература

1. Березин Ю.А., Вшивков В.А. Метод частиц в динамике разреженной плазмы. – Новосибирск: Наука, 1980.
2. Григорьев Ю.Н., Вшивков В.А., Федорук М.П. Численное моделирование методами частиц в ячейках. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2004. – 360 с.
3. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц: Пер. с англ. – М.: Мир, 1987. – 640 с.
4. Бэдсел Ч., Ленгдон А. Физика плазмы и численное моделирование: Пер. с англ. – М.: Энергоатомиздат, 1989. – 452 с.
5. Котов Д.В. Вычислительные модели физико-химической кинетики при гиперзвуковом обтекании реальных тел // Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, 2010 г.
6. Delzanno G.L., Camporeale E. On particle movers in cylindrical geometry for Particle-In-Cell simulations // Journal Comput. Phys., vol. 253, 2013, Pp. 259–277.
7. Rausch R.D., Batina J.T., Yang H.T.Y. Spatial Adaptation of Unstructured Meshes for Unsteady Aerodynamics Flow Computation // AIAA Journal, vol. 30, no. 5, 1992, Pp. 1243–1251.
8. Qiushi C., Konrad A., Baronijan S. Asymptotic Boundary Conditions for Axisymmetric Finite Element Electrostatic Analysis // IEEE Trans. On Magnetics, vol. 30, no. 6, 1994, Pp. 4335–4337.
9. Суржиков С.Т. Бесстолкновительный разлет двухзарядного плазменного облака в разреженной замагниченной плазме // Физика плазмы, том 26, № 9, 2000, С. 811–823.
10. Котов Д.В., Суржиков С.Т. Расчет гиперзвукового течения химически реагирующего газа в ГПВРД методом конечного объема с использованием схемы AUSM // Физико-химическая кинетика в газовой динамике, том 11, 2011. <http://www.chemphys.edu.ru/media/files/2011-02-01-013.pdf>

Статья поступила в редакцию 20 ноября 2014 г.