

УДК 621.385: 537.533

Численное моделирование интенсивных пучков заряженных частиц на квазиструктурированных прямоугольных сетках

В. М. Свешников

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН — Новосибирский государственный университет, г. Новосибирск, Россия

Предложен метод расчета интенсивных пучков заряженных частиц на прямоугольных квазиструктурированных сетках, которые строятся в два этапа: сначала расчетная область равномерной прямоугольной макросетки разбивается на подобласти, а затем в каждом макроэлементе строится своя равномерная прямоугольная локально-модифицированная подсетка. Основу метода составляют построение и решение системы линейных алгебраических уравнений относительно значений потенциала электрического поля в узлах сетки, покрывающей границу сопряжения подобластей. Предлагаемый метод является прямым, так как в нем отсутствуют итерации по подобластям. Даны оценки эффективности предлагаемого алгоритма и результаты численных экспериментов. Перечислены основные свойства рассмотренного подхода.

Важную роль в повышении точности численного расчета интенсивных пучков заряженных частиц, помимо выделения прикатодной особенности [1], играет качество разностной сетки. Она должна удовлетворять следующим противоречивым требованиям: с одной стороны, содержать узлы, сгущающиеся в подобластях неоднородности пучка и учитывать конфигурацию границы, а с другой стороны — иметь простую структуру. Первые требования призваны увеличить точность расчетов, вторые — уменьшить трудозатраты на его получение. Повышение точности расчетов заключается в повышении точности расчета потенциала электрического поля, состоящем в решении краевой задачи для уравнения Пуассона на каждом приближении итерационного процесса по решению самосогласованной задачи [1].

В настоящей работе для решения краевой задачи по вычислению потенциала строятся квазиструктурированные прямоугольные сетки, которые сочетают простоту прямоугольных сеток с адаптивными свойствами квазиструктурированных сеток [2]. Суть рассматриваемого подхода состоит в двухэтапном покрытии расчетной области G прямоугольными, равномерными по каждому направлению сетками.

На первом этапе в прямоугольнике, окружающем G , строится прямоугольная равномерная сетка Ω_H с шагами, по каждому направлению значительно превышающими шаг результирующей сетки Ω_h , на которой осуществляется дискретизация исходной задачи, т. е. фактически проводится декомпозиция G на подобласти G_k , принадлежащие равным прямоугольникам R_k ($k = \overline{1, K}$, K — число подобластей).

На втором этапе строятся прямоугольные равномерные подсетки $\Omega_{h,k}$. В прямоугольниках R_k , содержащих границу расчетной области Γ , осуществляется локальная модификация $\Omega_{h,k}$ путем сдвига приграничных узлов на Γ .

Решение краевой задачи проводится на сетке Ω_h , представляющей собой объединение подсеток $\Omega_{h,k}$, по алгоритму, содержащему три этапа.

На первом этапе на сетке ω_h , покрывающей границу γ сопряжения подобластей и состоящей из узлов сеток $\Omega_{h,k}$, принадлежащих γ , строится система линейных алгебраических уравнений относительно значений искомой функции в узлах ω_h . Для этого решается серия вспомогательных задач в подобластях.

Второй этап алгоритма — решение данной системы. Здесь необходимо подчеркнуть, что порядок системы уравнений намного меньше числа узлов результирующей сетки Ω_h .

На третьем этапе решаются краевые задачи в подобластях, причем в качестве граничных условий берутся значения функции в узлах ω_h , рассчитанные на предыдущем этапе данного алгоритма. Важным свойством этого этапа является то, что расчеты проводятся только в тех подобластях, через которые проходит пучок заряженных частиц.

Решение сеточных уравнений в подобластях осуществляется быстрыми решателями, включая оптимальный по быстродействию метод циклической редукции.

Предлагаемый алгоритм является, по сути дела, прямым методом декомпозиции в том смысле, что в нем отсутствуют итерации по подобластям. Кроме того, он является в большей части параллельным и поэтому применим для решения рас-

смаатриваемых задач на многопроцессорных суперкомпьютерах.

В статье приводятся оценки эффективности данного алгоритма, численные эксперименты, подтверждающие его работоспособность, и перечень его основных свойств.

Настоящий подход имеет черты, схожие с методом конечных суперэлементов Р. П. Федоренко [3], но в то же время имеет и ряд существенных отличий, из которых главным является то, что в предлагаемом подходе размер макроэлемента может без снижения точности расчетов значительно превышать шаг результирующей сетки.

Постановка задачи. Построение сеток

Пусть в замкнутой двухмерной области $\bar{G} = G \cup \Gamma$ с границей Γ требуется решить краевую задачу

$$\Delta u = g_1, \quad lu|_{\Gamma} = g_2, \quad (1)$$

где $u = u(T)$ – искомая функция;

$g_1 = g_1(T), g_2 = g_2(T)$ – заданные функции ($T = (x, y)$ — текущая точка, x, y — декартовы координаты);

Δ — оператор Лапласа;

l — оператор граничных условий.

Такая задача возникает на каждом шаге итерационного процесса по решению самосогласованной задачи расчета интенсивных пучков заряженных частиц. При этом $g_1 = -\frac{\rho}{\epsilon_0}$, где ρ — плотность

объемного заряда, вносимого частицами; ϵ_0 — электрическая проницаемость вакуума.

Опишем вокруг расчетной области прямоугольник $R = \{0 \leq x \leq D_x, 0 \leq y \leq D_y\}$, где D_x, D_y — заданы ($\bar{G} \subset R$). Построим в R прямоугольную равномерную макросетку

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

где N_x, N_y — заданные целые числа, H_x, H_y — шаги, намного превосходящие шаги сетки, на которой аппроксимируется задача (1).

Тем самым мы фактически проводим декомпозицию расчетной области G на непустые подобласти $G_k = G_{I,J} = G \cap R_{I,J} \neq \emptyset, k = \overline{1, K}, (I, J) \in M$, где $R_{I,J}$ — открытая подобласть, представляющая собой макроэлемент сетки Ω_H ; K — известное целое число, которое определяется геометрией \bar{G} ;

M — множество пар индексов (I, J) , для которых выполняется указанное неравенство (цифрой 0 в данном случае обозначена пустая подобласть).

Точки $T_p = T_{I,J} \in G, p = \overline{1, P}$ пересечения координатных линий $x = X_I, y = Y_J$ макросетки Ω_H назовем макроузлами. Граница сопряжения подобластей G_k , которую мы обозначим через γ , состоит из координатных линий макросетки Ω_H . Внешняя граница Γ разбивается на отрезки $\Gamma_k = \Gamma \cap \bar{R}_{I,J}$, где $\bar{R}_{I,J} = R_{I,J} \cup \gamma_k, \gamma_k = \gamma_{I,J}$ — граница $R_{I,J}$.

Среди G_k будем различать подобласти двух типов: внутренние $G_k^{(1)}$ и граничные $G_k^{(2)}$, определяемые равенством

$$G_k = G_{I,J} = \begin{cases} G_k^{(1)}, & (I, J) \notin M_{\Gamma}, \\ G_k^{(2)}, & (I, J) \in M_{\Gamma}, \end{cases}$$

где множество $M_{\Gamma} \subset M$ содержит (I, J) такие, что $\Gamma \cap R_{I,J} \neq \emptyset$.

В макроэлементах $R_k = R_{I,J} ((I, J) \in M)$ построим равномерные прямоугольные подсетки

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

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 без существенного ограничения общности будем предполагать, 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.

По аналогии с подобластями будем различать подсетки двух типов: внутренние $\bar{\Omega}_{h,k}^{(1)}$ и граничные $\bar{\Omega}_{h,k}^{(2)}$.

Подсетки $\bar{\Omega}_{h,k}^{(2)}$ в целях их адаптации к границе подвергнем локальной модификации [4] путем сдвига приграничных узлов в точки пересечения координатных линий с границей.

Отметим, что при сделанных предположениях $\bar{\Omega}_{h,k}$ являются квазисогласованными в том смысле, что на отрезках γ_k границы сопряжения все узлы редких сеток совпадают с рядом узлов густых.

Решение исходной задачи (1) будем искать на сетке

$$\bar{\Omega}_h = \bigcup_{k=1}^K \bar{\Omega}_{h,k}. \quad (2)$$

Кроме рассмотренных выше, введем сетку $\omega_h \subset \bar{\Omega}_h. \omega_h = \{(x_i, y_i) \in \gamma, (x_i, y_i) \neq T_p, i = \overline{1, n}\}$,

где (x_i, y_i) — узлы $\bar{\Omega}_h$ (2), а также подсетки $\omega_{h,k}$, состоящие из узлов ω_h , лежащих на γ_k (n — известно). Подчеркнем, что в ω_h , $\omega_{h,k}$ не входят макроузлы T_p .

Наряду с введенными, будем иметь дело с сеткой Ω_h и подсетками $\Omega_{h,k}$, которые определяются как

$$\Omega_h = \bar{\Omega}_h / \omega_h / \bigcup_{p=1}^P T_p, \quad \Omega_{h,k} = \bar{\Omega}_{h,k} / \omega_h / \bigcup_{p,k} T_{p,k},$$

где $T_{p,k}$ — макроузлы.

Алгоритм решения задачи

Основу алгоритма решения задачи (1) составляет ее редукция к решению:

подзадач во внутренних подобластях $G_k^{(1)}$

$$\Delta u^{(k)} = g_1; \quad u^{(k)}|_{\gamma_k} = v^{(k)}; \quad (3)$$

подзадач в граничных подобластях $G_k^{(2)}$

$$\Delta u^{(k)} = g_1; \quad l u^{(k)}|_{\Gamma_k} = g_2; \quad u^{(k)}|_{\gamma_k} = v^{(k)}, \quad (4)$$

где $u^{(k)}$ — искомая функция в подобласти G_k ;

$v^{(k)}$ — ее значения на границе сопряжения γ_k .

Основной проблемой, алгоритм решения которой излагается ниже, является отыскание функции v на границе сопряжения подобластей γ , а точнее, — функций $v^{(k)}$ на γ_k .

Подзадачи (3), (4) решаются приближенно на подсетках $\Omega_{h,k}$. Для этого они методом конечных разностей или конечных объемов [5] сводятся:

к дискретным подзадачам на подсетках $\Omega_{h,k}^{(1)}$

$$\Delta_h u_h^{(k)} = g_1; \quad u_h^{(k)}|_{\gamma_k} = v_h^{(k)} \quad (5)$$

к подзадачам на подсетках $\Omega_{h,k}^{(2)}$

$$\Delta_h u_h^{(k)} = g_1; \quad l_h u_h^{(k)}|_{\Gamma_k} = g_2; \quad u_h^{(k)}|_{\gamma_k} = v_h^{(k)}. \quad (6)$$

Здесь $u_h^{(k)}$, $v_h^{(k)}$ — приближенные значения функций $u^{(k)}$, $v^{(k)}$ в узлах подсеток $\Omega_{h,k}$, $\omega_{h,k}$; операторы Δ_h , l_h — аппроксимации оператора Лапласа и оператора граничных условий на данных подсетках. Исходная задача (1) при этом заменяется следующей приближенной задачей

$$\Delta_h u_h = g_1; \quad l_h u_h|_{\Gamma} = g_2; \quad u_h|_{\gamma} = v_h, \quad (7)$$

где $u_h = \bigcup_{k=1}^K u_h^{(k)}$; $v_h = \bigcup_{k=1}^K v_h^{(k)}$, которая решается на сетке Ω_h .

На границе γ должны выполняться условия сопряжения

$$v^{(+)} = v^{(-)}; \quad (8)$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial \bar{n}} \right)_{\gamma}^{(+)} = \left(\frac{\partial u}{\partial \bar{n}} \right)_{\gamma}^{(-)}, \quad (9)$$

где \bar{n} — нормаль к γ ; знаки \pm означают, что соответствующие величины относятся к подобластям, лежащим по разные стороны от нее; v — значения u на γ ($u|_{\gamma} = v$).

Рассмотрим разность

$$f_i = \left(\frac{\partial u}{\partial \bar{n}} \right)_i^{(+)} - \left(\frac{\partial u}{\partial \bar{n}} \right)_i^{(-)}, \quad i = \overline{1, n} \quad (10)$$

в узлах сетки ω_h . Пусть $\bar{\eta}$ — внутренняя нормаль к γ в подобластях, тогда (10) приобретет вид

$$f_i = \left(\frac{\partial u}{\partial \bar{\eta}} \right)_i^{(+)} + \left(\frac{\partial u}{\partial \bar{\eta}} \right)_i^{(-)}, \quad i = \overline{1, n}.$$

Заменим здесь производные конечно-разностными соотношениями

$$\left(\frac{\partial u}{\partial \bar{\eta}} \right)_h \approx d_h u_h, \quad (11)$$

где d_h — линейный оператор, определяющий конкретную схему, при этом величины f_i заменяются их разностными аналогами $f_{h,i}$, которые определяются как

$$f_{h,i} = \left(d_h^{(+)} u_h^{(+)} \right)_i + \left(d_h^{(-)} u_h^{(-)} \right)_i, \quad i = \overline{1, n}, \quad (12)$$

где $d_h^{(+)}$, $d_h^{(-)} = d_h$.

Величины $f_{h,i}$ являются функциями, зависящими от $v_{h,j}$, т. е. $f_{h,i} = f_{h,i}(v_{h,1}, v_{h,2}, \dots, v_{h,n})$. Более того, в силу линейности исходной задачи $f_{h,i}$ — линейные функции, поэтому их можно представить как

$$f_{h,i} = \sum_{j=1}^n a_{i,j} v_{h,j} + b_i, \quad (13)$$

где $a_{i,j}$, b_i — неизвестные пока коэффициенты.

Запишем (13) в матричном виде

$$f_h = A v_h + b, \quad (14)$$

где $A = \{a_{i,j}\}$ — квадратная матрица; $f_h = \{f_{h,i}\}$;

$v_h = \{v_{h,i}\}$, $b = \{b_i\}$ — векторы ($i, j = \overline{1, n}$).

Вычисление компонент вектора b проводится по следующему алгоритму:

1) дадим v_h пробное значение $v_h = e^{(0)} = 0$ и решим задачу (7), что фактически означает решение подзадач (5), (6) с соответствующими граничными условиями, т. е. при $v_h^{(k)} = 0$;

2) рассчитаем компоненты вектора $f_h = f_h^{(0)}$ согласно формуле (12) и положим $b = f_h^{(0)}$.

Расчет элементов матрицы A осуществляется по аналогичному алгоритму, который состоит в поочередном присваивании вектору v_h пробных значений $v_h = e^{(j)} = \{e_i^{(j)}\}$ таких, что

$$e_i^{(j)} = \delta_{i,j}, \delta_{i,j} = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j \end{cases}, i, j = \overline{1, n}.$$

Для каждого j должны решаться краевая задача (7) с соответствующими граничными условиями на γ и проводиться вычисления $f_h = f_h^{(j)}$ согласно (12), тогда

$$A^{(j)} = f_h^{(j)} - b,$$

где $A^{(j)}$ — j -й столбец матрицы A .

Исходя из алгоритмов расчета b , $f_h^{(j)}$ и линейности задачи (7), данную формулу можно привести к виду

$$A^{(j)} = \varphi_h^{(j)}. \tag{15}$$

Здесь $\varphi_h^{(j)} = \{\varphi_{h,i}^{(j)}\}$ — вектор (функция), компоненты которого определяются как

$$\varphi_{h,i}^{(j)} = a_{i,j} = \left(d_h^{(+)}\psi_h^{(j,+)}\right)_i + \left(d_h^{(-)}\psi_h^{(j,-)}\right)_i, i = \overline{1, n}. \tag{16}$$

В равенстве (16) $\psi_h^{(j,\pm)}$ — это решение $\psi_h^{(j)}$ задачи (7) по разные стороны от γ при $g_1 = g_2 = 0$ и $v_h = e^{(j)}$, т. е.

$$\Delta_h \psi_h^{(j)} = 0; \quad l_h u_h|_{\Gamma} = 0; \quad u_h|_{\gamma} = e^{(j)}. \tag{17}$$

Задача (17) также сводится к решению на подсетках $\Omega_{h,k}^{(1)}$ подзадач

$$\Delta_h \psi_h^{(j,k)} = 0; \quad \psi_h^{(j,k)}|_{\gamma_k} = e^{(j,k)} \tag{18}$$

и на подсетках $\Omega_{h,k}^{(2)}$ подзадач

$$\Delta_h \psi_h^{(j,k)} = 0; \quad l_h \psi_h^{(j,k)}|_{\Gamma_k} = 0; \quad \psi_h^{(j,k)}|_{\gamma_k} = e^{(j,k)} \tag{19}$$

относительно функций $\psi_h^{(j,k)}$.

Здесь $e^{(j,k)} = \{e_i^{(j,k)} = e^{(j)}(T_i), T_i \in \gamma_k\}$. Для вычисления всех столбцов $A^{(j)}$ ($j = \overline{1, n}$) по формулам (15), (16) необходимо решать n задач (17), каждая из которых сводится к решению K вспомогательных подзадач (18), (19), т. е. всего необходимо решить nK вспомогательных подзадач в подобластях. Это большое число вспомогательных задач значительно сокращается до приемлемой величины благодаря принятому способу построения квазиструктурированных сеток по двум основным причинам.

Пусть отличная от нуля компонента вектора $e^{(j)}$ соответствует узлу, лежащему на отрезке $\gamma' \in \gamma$, который ограничен двумя соседними координатными линиями макросетки Ω_H . Решение вспомогательных подзадач $\psi_h^{(j,k)}$ будет нулевым во всех подобластях, за исключением двух подобластей, имеющих отрезок γ' своей общей границей. Отсюда следует, что для определения ненулевых значений $\psi_h^{(j,k)}$ требуется решение только $2n$ подзадач — и это является первой причиной сокращения объема вычислений.

Рассмотрим две внутренние подобласти $G_k^{(1)}, G_{k'}^{(1)}$. Напомним, что они равны между собой. Пусть $T_j = (\bar{x}_j, \bar{y}_j) \in \gamma_k, T_{j'} = (\bar{x}_{j'}, \bar{y}_{j'}) \in \gamma_{k'}$ — узлы подсеток $\omega_{h,k}, \omega_{h,k'}$, определенных на границах $\gamma_k, \gamma_{k'}$ данных подобластей (здесь \bar{x}_j, \bar{y}_j — координаты j -го узла в локальной системе координат с центром в левом нижнем углу $G_k^{(1)}$, а $\bar{x}_{j'}, \bar{y}_{j'}$ — координаты узла j' в локальной системе, связанной с $G_{k'}^{(1)}$). Тогда в силу равенства подобластей для решений вспомогательных подзадач (18) справедливо равенство $\psi_h^{(j,k)} = \psi_h^{(j',k')}$ при $\bar{x}_j = \bar{x}_{j'}, \bar{y}_j = \bar{y}_{j'}$ и $\Omega_{h,k}^{(1)} = \Omega_{h,k'}^{(1)}$.

Если же $\Omega_{h,k}^{(1)} \neq \Omega_{h,k'}^{(1)}$, то все узлы редкой подсетки (допустим, что это будут узлы $T_{j'} \in \Omega_{h,k'}^{(1)}$) являются общими с узлами густой подсетки $T_i \in \Omega_{h,k}^{(1)}$. Тогда в совпадающих узлах $T_i = T_{j'}$ справедливо приближенное равенство $\psi_h^{(j,k)}(T_i) \approx \psi_h^{(j',k')}(T_{j'})$. Отсюда следует, что, решив подзадачу на густой подсетке $\Omega_{h,k}^{(1)}$ и вычислив компоненты вектора $\varphi_h^{(j)}$ в узлах густой подсетки $\omega_{h,k}$, мы без потери точности будем иметь вектор $\varphi_h^{(j')}$ на ред-

кой подсетке $\omega_{h,k'}$, для чего просто полагается $\phi_h^{(j')}(T_{i'}) = \phi_h^{(j)}(T_i)$. Применительно ко всем внутренним подобластям это означает, что для получения решения в них достаточно решить серию следующих базовых вспомогательных задач относительно функции, которую мы обозначим через $\sigma_h^{(v)}$ на самой густой подсетке $\Omega_{h,k}^{(1)} = \Omega_{h,0}^{(1)}$

$$\Delta_h \sigma_h^{(v)} = 0, \sigma_h^{(v)}(T_\mu) = \delta_{v,\mu}, T_\mu \in \gamma_0. \quad (20)$$

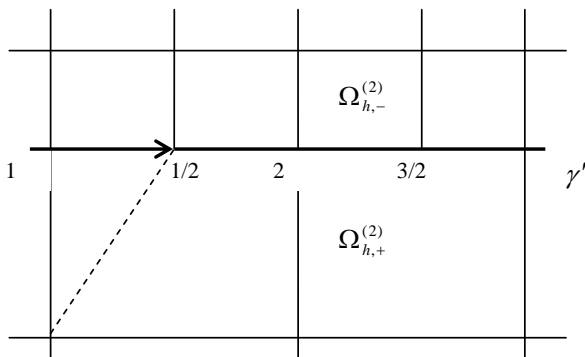
Здесь γ_0 — граница внутренней подобласти $G_0^{(1)} \in R_0$, в которой построена подсетка $\Omega_{h,0}^{(1)}$;

v, μ — номера узлов подсетки $\omega_{h,0}$ — проекции $\bar{\Omega}_{h,0}^{(1)}$ на γ_0 (без макроузлов).

Дальнейшее сокращение объема вычислений связано с тем, что нет необходимости решать вспомогательные подзадачи для всех узлов подсетки $\omega_{h,0}$: из соображений симметрии задачи и $\omega_{h,0}$ это достаточно выполнить для узлов, лежащих на двух половинах смежных сторон R_0 . Все эти соображения составляют вторую причину сокращения числа вспомогательных задач.

Если γ' — общая граница двух граничных подобластей $G_\pm^{(2)}$, то вспомогательные задачи (19) в общем случае необходимо решать для каждой из них.

Так как подсетки $\Omega_{h,\pm}^{(2)}$ являются квазисогласованными, может возникнуть ситуация, изображенная на рисунке. Если компонента $e_v^{(j)}$ пробного вектора $e^{(j)}$ отлична от нуля в каком-либо из узлов, обозначенных целыми числами, то решение задач на подсетках $\Omega_{h,+}^{(2)}$, $\Omega_{h,-}^{(2)}$ не вызывает затруднений.



К решению вспомогательных задач в граничных подобластях

Если $e_v^{(j)} \neq 0$ в одном из дробных узлов (например, в узле $1/2$ компонента $e_{1/2}^{(j)} = 1$), то для

решения вспомогательной задачи на редкой подсетке $\Omega_{h,+}^{(2)}$ предварительно проводится локальная модификация данной подсетки, состоящая в сдвиге ближайшего узла 1 в узел $1/2$.

Возвратимся теперь к задаче отыскания функции v на границе сопряжения подобластей. Будем решать ее приближенно относительно функции v_h исходя из того, что должны выполняться условия сопряжения для разностных аналогов нормальных производных. Данное требование на основании формул (8)—(14) означает, что вектор f_h , компоненты которого определяются по формуле (12), должен быть нулевым, т. е. должно выполняться равенство

$$Av_h + b = 0. \quad (21)$$

Выражение (21) представляет собой систему линейных алгебраических уравнений относительно вектора $v_h = \{v_{h,i}\}$, компоненты которого — суть значения v_h в узлах сетки ω_h . По определению, данная сетка не содержит макроузлы T_p , для отыскания в них значений искомой функции дополним (21) системой уравнений

$$(\bar{\Delta}_h \bar{v}_h)_p = g_1(T_p), p = \bar{1}, \bar{P}, \quad (22)$$

где $\bar{\Delta}_h$ — аппроксимация оператора Лапласа на сеточном шаблоне, включающем узлы сетки ω_h и один из узлов T_p ;

\bar{v}_h — значения искомой функции в них.

Если оператор Δ_h , определенный в подобластях, не содержит макроузлов, что соответствует, например, обычной пятиточечной схеме, то система уравнений (21), (22) является распадающейся, и тогда вычисления по формулам (22) проводятся после того, как получено решение системы (21).

Итак, предлагаемый алгоритм расчета интенсивных пучков заряженных частиц на введенных прямоугольных квазиструктурированных сетках состоит из следующих этапов.

1. До проведения итераций по решению самосогласованной задачи (назовем их внешними) формируется система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) относительно значений потенциала электрического поля на границе сопряжения подобластей, для чего решается серия вспомогательных задач в подобластях. Объемный заряд при этом полагается равным нулю.

2. На каждой внешней итерации выполняются следующие действия:

- рассчитываются траектории заряженных частиц и вносимый ими объемный заряд;
- пересчитываются компоненты вектора b , соответствующие подобластям, через которые про-

ходит пучок, для чего решаются вспомогательные задачи в этих подобластях с нулевыми значениями потенциала на границе сопряжения;

- решается СЛАУ с пересчитанной правой частью (матрица не пересчитывается!), в результате чего находится потенциал электрического поля на границе сопряжения. Порядок матрицы СЛАУ намного меньше порядка матрицы системы разностных уравнений, которая имеет место при расчетах без разбиения на подобласти.

3. Вычисляется электрическое поле только в тех подобластях, через которые проходит пучок.

Оценки эффективности алгоритма

Под эффективностью алгоритма будем понимать трудоемкость и объем запоминаемой информации, необходимые для его реализации.

Трудоемкость алгоритма

Оценки трудоемкости алгоритма проведем в соответствии с его разбиением на этапы.

Наибольший объем вычислений при формировании системы линейных алгебраических уравнений (21) с квадратной матрицей A порядка n занимает решение вспомогательных подзадач (19), (20) в подобластях G_k , на которые разделяется расчетная область G макросеткой Ω_H .

Обозначим через K_A число подзадач, решаемых при расчете элементов матрицы A , равное

$$K_A = K_A^{(1)} + K_A^{(2)},$$

где $K_A^{(1)}$, $K_A^{(2)}$ — число подзадач, решаемых, соответственно, во внутренних $G_k^{(1)}$ и граничных $G_k^{(2)}$ подобластях. Верны оценки

$$K_A^{(1)} = \frac{n_{x,m} + n_{y,m}}{4}; \quad K_A^{(2)} \leq 2K_2' (n_{x,m} + n_{y,m} - 2).$$

Здесь $n_{x,m} = \max_k n_{x,k}$, $n_{y,m} = \max_k n_{y,k}$, где $n_{x,k}$, $n_{y,k}$ — числа интервалов подсеток $\Omega_{h,k}$ в соответствующем направлении, а K_2' — число граничных подобластей, для которых решаются вспомогательные задачи, причем $K_2' \leq K_2$.

Знак неравенства здесь обусловлен следующими соображениями. Пусть Γ — отрезок границы G ; параллельный одной из координатных осей; $G_k^{(2)}$ — подобласти, внешняя граница которых содержат только куски Γ . По аналогии с внутренними подобластями в этом случае нет необходимости решать вспомогательные задачи для всех

$G_k^{(2)}$, а достаточно это сделать лишь для одной подобласти на самой густой сетке.

Пусть K_b — число подзадач (5), (6), в которых на границе γ сопряжения подобластей G_k ставятся однородные условия Дирихле, необходимые для вычисления вектора b . Ясно, что $K_b \leq K$, так как в данном случае решаются подзадачи в граничных подобластях и только в тех внутренних подобластях, в которых функция g_1 отлична от нуля. Например, если в (1) речь идет об уравнении Лапласа, то во всех внутренних подобластях решение подзадач (5) будет нулевым.

Общее число $K_{A,b}$ подзадач, решаемых для формирования системы (21), равно

$$K_{A,b} = K_A^{(1)} + K_A^{(2)} + K_b.$$

Подзадачи во внутренних подобластях решаются оптимальным по быстродействию прямым методом циклической редукции [5]. Его основу составляют прогонки вдоль координатных линий. Так как число узлов подсеток $\Omega_{h,k}$ сравнительно невелико, то прогоночные коэффициенты можно вычислить и запомнить один раз для всех подсеток. Подзадачи в граничных подобластях, видимо, быстрее всего решать итерационными методами, выбирая в качестве начального приближения для очередной подзадачи решение предыдущей, но обоснованный ответ на этот вопрос требует проведения дальнейших исследований. Решение и той и другой группы задач вследствие их малой размерности проводится с привлечением быстрой кэш-памяти компьютера, что также значительно ускоряет вычисления.

Упорядочим узлы сетки ω_h , определенной на γ , следующим образом: сначала пронумеруем слева направо, снизу вверх узлы, лежащие на координатных линиях, параллельных оси x (x -линиях), а затем наоборот — снизу вверх, слева направо — на y -линиях. В каждой строке матрицы A , имеющей диагональный элемент, соответствующий узлу x -линии, будут отличны от нуля в общем случае $q_x = 3(n_{x,m} - 1) + 4(n_{y,m} - 1)$ элементов, а для y -линии это число равно $q_y = 3(n_{y,m} - 1) + 4(n_{x,m} - 1)$.

Порядок n матрицы A равен числу узлов сетки ω_h и он намного меньше числа узлов результирующей сетки Ω_h .

На последнем этапе предлагаемого алгоритма находится окончательное решение в подобластях. При этом нет необходимости проводить решение подзадач во всех K подобластях, на которые разбивается расчетная область G , это достаточно выполнить лишь для подобластей, представляющих интерес для последующего анализа и обработки.

Конкретизируем полученные оценки на примере решения модельной задачи Дирихле для уравнения Пуассона в единичном квадрате. Будем считать граничными все подобласти, примыкающие к границе квадрата. Предположим, что:

а) $N_x = N_y = N$;

б) $n_{x,k} = n_{y,k} = m$;

в) вспомогательные подзадачи решаются для каждой граничной подобласти ($K'_2 = K_2 = 4(N-1)$) (N_x, N_y — числа интервалов макросетки Ω_H по x, y). Тогда имеем

$$K_{A,b} = \frac{m}{2} + 16(N-1)(m-1) + N^2.$$

Сравним эту величину с числом K_I подзадач в том случае, если бы решение во всей области искалось методом итераций по подобластям. Так как $K_I = N_I N^2$ и $K_{A,b} \leq 17N^2$ при $m \approx N$, то $N_I \leq 17$, т. е. формирование системы (21) требует решения меньшего числа подзадач, чем это делается при проведении 17 итераций по подобластям.

Отметим, что это число уменьшается при $m < N$, а также то, что вспомогательные подзадачи имеют специальный вид, позволяющий решать их по сверхбыстрым алгоритмам.

Порядок n матрицы A в данном случае равен

$$n = 2N(N-1)(m-1).$$

Сравним эту величину с числом внутренних узлов $Q_h = (N_h - 1)(N_h - 1)$ результирующей сетки Ω_h , где N_h — число интервалов данной сетки в одном направлении. Тогда $m = \frac{N_h}{N}$ и в предположении, что $N_h \gg N \gg 1$, получим

$$\frac{Q_h}{n} \approx \frac{N_h}{2N}.$$

Объем запоминаемой информации

Наибольший объем оперативной памяти компьютера отводится под хранение элементов $a_{i,j}$ матрицы A , вычисляемых по формуле (16) в узлах сетки ω_h . Способ хранения и доступа к коэффициентам зависит от вида подобластей, на границе сопряжения которых лежит рассматриваемый i -й узел.

Пусть γ'_x, γ'_y — смежные стороны внутренней подобласти G_0 (назовем их x -, y -сторонами). Для каждого узла T_i самой густой подсетки $\omega_{h,0}$, лежащего на одной из этих двух сторон, рассчитывается и запоминается q_x коэффициентов при $T_i \in \gamma'_x$ и

q_y коэффициентов при $T_i \in \gamma'_y$. Суммарно в этом случае хранится массив, состоящий из Q_1 элементов, где Q_1 выражается как

$$Q_1 = (n_{x,m} - 1) [3(n_{x,m} - 1) + 4(n_{y,m} - 1)] + (n_{y,m} - 1) [3(n_{y,m} - 1) + 4(n_{x,m} - 1)].$$

Выборка элементов для конкретной подсетки $\omega_{h,k}$ осуществляется из данного массива с шагом $\delta k_x = \frac{n_{x,m}}{n_{x,k}}$ — для x -сторон и $\delta k_y = \frac{n_{y,m}}{n_{y,k}}$ — для y -сторон.

Отметим, что $\delta k_x, \delta k_y$ — это фактически третий параметр фортрановского оператора цикла DO, который по умолчанию равен 1.

Пусть теперь γ' — отрезок границы сопряжения двух подобластей, из которых хотя бы одна является граничной. В этом случае рассчитываются и запоминаются коэффициенты для каждого узла $T_i \in \gamma'$ и для каждого отрезка γ' . Число хранимых коэффициентов Q_2 зависит от конфигурации границы расчетной области и удовлетворяет неравенству

$$Q_2 \leq K_2 k_\gamma^{(2)} (m-1)^2,$$

где $k_\gamma^{(2)}$ — число отрезков γ' в K_2 граничных под областях;

$$m = \max(n_{x,m}, n_{y,m}).$$

В общем случае $Q_2 \gg Q_1$. Так же, как и число вспомогательных задач, Q_2 может быть уменьшено за счет подобластей, примыкающих к отрезкам границы Γ , параллельным одной из координатных осей.

Приведем оценки величины Q_2 для модельной задачи. Число граничных подобластей в ней равно $4(N-3)$, а число отрезков γ' — $4(2N-3)$. Тогда справедливо равенство

$$Q_2 = 28(2N-3)(m-1)^2.$$

Сравнивая эту величину с числом внутренних узлов Q_h результирующей сетки Ω_h , получим

$$\frac{Q_2}{Q_h} \approx \frac{56}{N}.$$

Численные эксперименты

Численные эксперименты ставились с целью показать работоспособность предложенного подхода на примере решения тестовой задачи, которой служила задача Дирихле для уравнения Лапласа

$$\Delta u = 0, u|_\Gamma = g \quad (23)$$

в квадрате $\bar{G} = \{0, 1 \leq x \leq 0, 6, 0 \leq y \leq 0, 5\}$.

Данная задача представляла собой фрагмент более общей задачи о расчете электрического поля в цилиндрическом конденсаторе $G_R = \{R_1 \leq r \leq R_2\}$, где на электродах с радиусами $R_1 = 0,1$ и $R_2 = 1$ задавались потенциалы, равные, соответственно, 0,1. Последняя задача имеет точное решение

$$\bar{u} = \ln \frac{r}{R_1} / \ln \frac{R_2}{R_1}.$$

Функция g в (23) выбиралась как $g = \bar{u}|_\Gamma$, и тогда точное решение исходной задачи есть $u = \bar{u}$ в G .

Расчетная область покрывалась квадратной сеткой $\Omega_h = \{x_i = ih, y_j = jh, i, j = \overline{1, N_h - 1}\}$ с шагом $h = 1/N_h$ и разбивалась линиями $x = X_J, y = Y_J$ ($J = \overline{1, N - 1}$), совпадающими с линиями сетки Ω_h и представляющими собой линии макросетки Ω_H , на $N_G = N^2$ прямоугольных подобластей G_k , где $N_h, N > 1$ — заданны и представляют собой, соответственно, числа интервалов сеток Ω_h и Ω_H в одном направлении.

$4 \leq m \leq 64$, т. е. для некоторых сочетаний N_h, N расчеты не проводили. В таблице в верхней части строки приведены значения относительной погрешности ε (в процентах), рассчитанной по формуле

$$\varepsilon = \max_{i,j} \left| \frac{u_{i,j} - (u_h)_{i,j}}{u_{i,j}} \right| \cdot 100 \%,$$

где (i, j) — номера узлов сетки Ω_h .

Из данной таблицы видно, что при больших N_h :

- предложенный алгоритм при данных аппроксимациях имеет второй порядок точности;
- погрешность уменьшается с ростом N .

Кроме того, проводилось решение рассматриваемой задачи на сетках Ω_h по обычной пятиточечной схеме без разбиения на подобласти. Полученные значения погрешности ε % с принятой точностью совпали с результатами таблицы при $N = 2$. Приведенные факты свидетельствуют о том, что предложенный алгоритм на вносит дополнительных погрешностей в расчеты по сравнению с обычным подходом, а наоборот, даже уменьшает их.

Относительные погрешности расчетов

N	N _h					
	16	32	64	128	256	512
2	1,6·10 ⁻¹	8,5·10 ⁻²	2,9·10 ⁻²	8,1·10 ⁻³	—	—
4	2,0·10 ⁻¹	8,7·10 ⁻²	2,9·10 ⁻²	8,1·10 ⁻³	2,0·10 ⁻³	—
8		8,5·10 ⁻²	2,9·10 ⁻²	8,1·10 ⁻³	2,0·10 ⁻³	5,0·10 ⁻⁴
16			1,7·10 ⁻²	7,0·10 ⁻³	2,0·10 ⁻³	4,8·10 ⁻⁴
32				4,4·10 ⁻³	1,4·10 ⁻³	4,0·10 ⁻⁴
64					1,0·10 ⁻³	2,3·10 ⁻⁴

В качестве операторов $\Delta_h, \bar{\Delta}_h$ выбирались обычные пятиточечные разностные операторы Лапласа. Оператором d_h , аппроксимирующим нормальные производные, служила трехточечная схема второго порядка, которая для соседних узлов, обозначенных цифрами 0, 1, 2, выглядит как

$$(d_h u_h)_0 = \frac{-3(u_h)_0 + 4(u_h)_1 - (u_h)_2}{2h}.$$

Расчеты проводили при различных параметрах сеток Ω_h, Ω_H : $N_h = N_{h,k} = 2^{k+3}$; $N = N_k = 2^{k+1}$, $k = \overline{1, 6}$. Краевые подзадачи решали методом циклической редукции с предварительным расчетом прогоночных коэффициентов для числа интервалов $m = \frac{N_h}{N}$ подсеток, лежащих в пределах

Заключение

1. Проведенные оценки и численные эксперименты показали работоспособность предложенного алгоритма.

2. Расчет потенциала электрического поля проводится на адаптивных сетках: за счет локальной модификации они учитывают конфигурацию границы, а за счет изменения плотности сеточных узлов в подобластях — особенности распределения объемного заряда.

3. Решение краевых подзадач в подобластях проводится независимо друг от друга, т. е. в данной части алгоритм является параллельным.

4. Во внутренних подобластях вычисления осуществляются оптимальным по быстродействию методом циклической редукции с предварительным расчетом прогоночных коэффициентов для всех подобластей.

5. Блочный характер алгоритма позволяет эффективно использовать сверхбыструю кэш-память компьютера.

*Работа выполнена при финансовой поддержке
Российского фонда фундаментальных
исследований (грант № 05-01-00487).*

Л и т е р а т у р а

1. Свешников В. М. О расчете интенсивных пучков заряженных частиц методом итераций по подобластям без наложения// Прикладная физика. 2006. № 3. С. 49—57.
2. Ильин В. П., Свешников В. М., Сынах В. С.// Сиб. Ж. Индустр. Мат. 2000. Т. 3. № 1. С. 124.
3. Федоренко Р. П. Введение в вычислительную физику. — М.: МФТИ, 1996.
4. Мацюкин А. М. Автоматизация триангуляции областей с гладкой границей при решении уравнений эллиптического типа: Препринт. — Новосибирск: ВЦ СО АН СССР. 1975. № 15.
5. Самарский А. А. Теория разностных схем. — М.: Наука, 1977.

Статья поступила в редакцию 14 ноября 2007 г.

Numerical calculation of intensive charged particle beams on quasistructured rectangular grids

V. M. Sveshnikov

Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics SB RAS,
Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russia

The method of calculation of intensive charged particle beams on rectangular quasistructured grids is offered. The grids are constructed in two stages: first the calculated domain is broken by a uniform rectangular macrogrid into subdomains, and then in each macrocell is constructed uniform rectangular locally-modified subgrid. The basis of this method is made with construction and the solving of system of the linear algebraic equations concerning values of an electric field potential in nodes of the grid covering interface boundary of subdomains. The suggested method is direct as in it there are no iterations on subdomains. Estimations of the algorithm efficient and the results of numerical experiments are given. In the conclusion the basic properties of the considered approach are listed.

УДК 519.63+681.3

Программный комплекс для моделирования катодного микроузла с полупроводниковым автоэммиттером

С. В. Поляков

Институт математического моделирования РАН, Москва, Россия

В. А. Федирко

МГТУ "Станкин", Москва, Россия

Рассмотрена проблема решения задач электродинамики в современных полупроводниковых приборах вакуумной микроэлектроники (ВМ) со сложной субмикронной геометрией. Для описания процессов электронного транспорта в полупроводнике использована квазигидродинамическая модель, которая реализована в виде комплекса программ для многопроцессорных вычислительных систем с использованием оригинальных численных методов и алгоритмов на нерегулярных сетках. Разработанный программный комплекс позволяет моделировать функционирование полупроводникового автокатодного узла и его характеристики, рассчитывать распределения электрического поля, плотности и энергии носителей заряда, температуры кристаллической решетки.

Современный уровень микроэлектронной технологии позволяет реализовать в устройствах ВМ

ряд существенных преимуществ вакуумных приборов [1—3]. Базовым элементом ВМ служит массив