

УДК 621.385.6

## Некоторые особенности расчета траекторий заряженных частиц на сетке потенциалов метода конечных элементов

С. О. Семенов

*Рассмотрены особенности применения метода конечных элементов для расчета траекторий частиц в сильноточных электронных пучках с учетом их пространственного заряда. Показаны возникающие на нерегулярной сетке конечных элементов нефизические эффекты, связанные с вычислением напряженности электрического поля с использованием функции формы, и предложены пути их устранения.*

PACS: 41.85.-p

*Ключевые слова:* частица, траектория, пространственный заряд, электронный пучок, электрическое поле, расчет.

### Введение

Метод конечных элементов (МКЭ) — один из наиболее мощных и широко используемых методов численного моделирования задач физики и техники [1]. Для решения задач электронной оптики МКЭ стал использоваться позже других численных методов: метода конечных разностей и метода интегральных уравнений (МИУ).

На основе МКЭ были созданы комплексы программ для решения уравнений Пуассона и расчета характеристик двух- и трехмерных электронно-оптических систем (ЭОС) СВЧ-приборов [2—4].

Во всех численных методах за счет дискретизации расчетной области дифференциальное уравнение Пуассона заменяется аналогом, и его решение сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений с постоянными коэффициентами, неизвестными в которых являются потенциалы в узлах сетки или заряды на границе области.

Методы отличаются также получаемыми матрицами коэффициентов, способами учета гранич-

ных условий и вычисления напряженности электрического поля. Эти и другие особенности решения приводят к различной эффективности использования этих методов в задачах электронной оптики с сильноточными пучками, причем изучение применения МКЭ к задачам расчета характеристик ЭОС—задачам, в которых помимо решения полевой задачи рассчитываются траектории движения заряженных частиц с учетом их пространственного заряда. Сравнение МКЭ с другими методами не проводилось.

### Метод расчета

Исследование особенностей МКЭ проведено на примере осесимметричной задачи, при этом расчетная область разбивалась на треугольные элементы (рис. 1) с линейной функцией формы [5]. Значение потенциала внутри треугольного элемента с номером  $n$  связано со значениями потенциала в его вершинах соотношением

$$U_n = \xi_{n1} U_{n1} + \xi_{n2} U_{n2} + \xi_{n3} U_{n3};$$

$$\xi_{ni} = \frac{1}{2A_n} (a_{ni} + b_{ni} R + c_{ni} Z); \quad (1)$$

$$\sum_{i=1}^3 \xi_{ni} = 1;$$

Семенов Сергей Олегович, ведущий научный сотрудник. ФГУП «НПП "Алмаз"».

Россия, 410033, г. Саратов, ул. Панфилова, 1. Тел. (8452) 47-97-03. E-mail: almaz@overta.ru

Статья поступила в редакцию 18 ноября 2009 г.

$$\begin{aligned} a_{n1} &= R_{n2} Z_{n3} - R_{n3} Z_{n2}; \\ b_{n1} &= Z_{n2} - Z_{n3}; \\ c_{n1} &= R_{n3} - R_{n2}, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $R_n, Z_n$  — координаты вершин в цилиндрической системе координат;  
 $A_n$  — площадь треугольника;  
 $R, Z$  — координаты точки внутри треугольника.

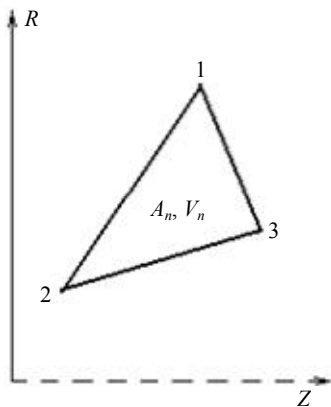


Рис. 1. Треугольный конечный элемент

Для вершин с номерами 2 и 3 вычисление коэффициентов  $a, b, c$  осуществлялось циклической перестановкой номеров. Минимизация функционала, полученного из уравнения Пуассона, позволяет получить систему линейных алгебраических уравнений. Вклад каждого узла каждого треугольника в формирование матрицы коэффициентов системы уравнений выражается как

$$\begin{aligned} S_{i,i+1-j} &= \frac{1}{8A_n} (R_{n1}^2 + R_{n2}^2 + R_{n3}^2 + R_{n1}R_{n2} + R_{n1}R_{n3} + \\ &+ R_{n2}R_{n3}) (b_{ni}b_{nj} + c_{ni}c_{nj}) \varepsilon_n, \end{aligned}$$

где  $n$  — номер треугольника, в который входят узлы  $i = 1, 2, 3$  и  $j = 1, 2, 3$ ;

$\varepsilon_n$  — относительная диэлектрическая проницаемость материала конечного элемента.

Аналогично вклад от каждого элемента в плотность пространственного заряда в узле для формирования столбца  $\rho$  равен:

$$\begin{aligned} \rho &= \alpha_{vol.ch} \frac{Q_n A_n}{5V_n} \times \\ &\times (3R_{ni}^2 + R_{ni+1}^2 + R_{ni+2}^2 + 2R_{ni}R_{ni+1} + 2R_{ni}R_{ni+2} + \\ &+ R_{ni+1}R_{ni+2}), \end{aligned}$$

где  $i = 1, 2, 3$ ;  $Q_n$  — заряд в  $n$ -м элементе;  
 $\alpha_{vol.ch}$  — коэффициент ввода пространственного заряда по итерациям;  
 $V_n$  — объем тора с треугольным сечением.

Матрица коэффициентов представляет собой разреженную ленточную матрицу, где ширина ленты равна  $[2 \max(i - j) + 1]$ , где  $\max(i - j)$  — максимальная разность номеров узлов, входящих в один элемент. Ненулевые элементы матрицы, симметричные относительно главной диагонали, равны между собой, т. е.  $S_{ij} = S_{ji}$ .

Это свойство матрицы позволяет вычислять только элементы матрицы, лежащие выше главной диагонали, т. е. для  $j \geq i$ , и хранить в памяти только верхнюю половину матрицы, включая главную диагональ.

Решение системы линейных уравнений было проведено итерационным методом последовательной верхней релаксации [6]. Распределение потенциала в расчетной области при использовании линейной функции формы представляет поверхность, состоящую из плоских треугольников.

Для расчета траекторий движения крупных частиц необходимо решить уравнения движения, в которые входят напряженности электрического поля, действующие на частицу. Величины полей  $E_r$  и  $E_z$  могут быть найдены путем дифференцирования аналитического выражения для потенциала (1):

$$\begin{aligned} E_r &= \frac{\partial U}{\partial R} = \frac{D}{2A_n} \left( \sum_{i=1}^3 U_{ni} b_{ni} \right); \\ E_z &= \frac{\partial U}{\partial Z} = \frac{1}{2A_n} \left( \sum_{i=1}^3 U_{ni} c_{ni} \right), \end{aligned} \quad (2)$$

т. е. величины  $E_r$  и  $E_z$  для каждого треугольника являются постоянными и при переходе от элемента к элементу изменяются скачком. В формуле для  $E_r$  в числителе единицу заменили на  $D$ .

Для уменьшения времени счета для каждого элемента вычисляются и запоминаются следующие значения:  $a_{n1}, b_{n1}, c_{n1}, a_{n2}, b_{n2}, c_{n2}, a_{n3}, b_{n3}, c_{n3}, A_n, V_n, \varepsilon_n$  которые затем многократно используются в процессе расчетов, а также массивы координат узлов  $R_i, Z_i$  и номеров узлов, входящих в каждый треугольный элемент.

### Результаты расчетов

Рассмотрим движение частиц от катода к аноду в плоском триоде с двумя вариантами разбиения области на элементы. На рис. 2, а треугольные элементы, расположенные около перемычек управляющей сетки, несимметричны относительно линии симметрии ячейки этой сетки, на рис. 2, б примыкающие к перемычкам элементы расположены симметрично.

Несимметрия в расположении элементов приводит к несимметрии эквипотенциальных линий в области ячеек сетки (см. рис. 2, б) и нарушению

симметрии пучка при прохождении ячеек сетки, хотя точки старта частиц относительно этих ячеек расположены симметрично, и вычисленные при решении уравнения Пуассона значения потенциалов узлов для двух вариантов разбиений (области I и II) имеют практически одинаковые значения.

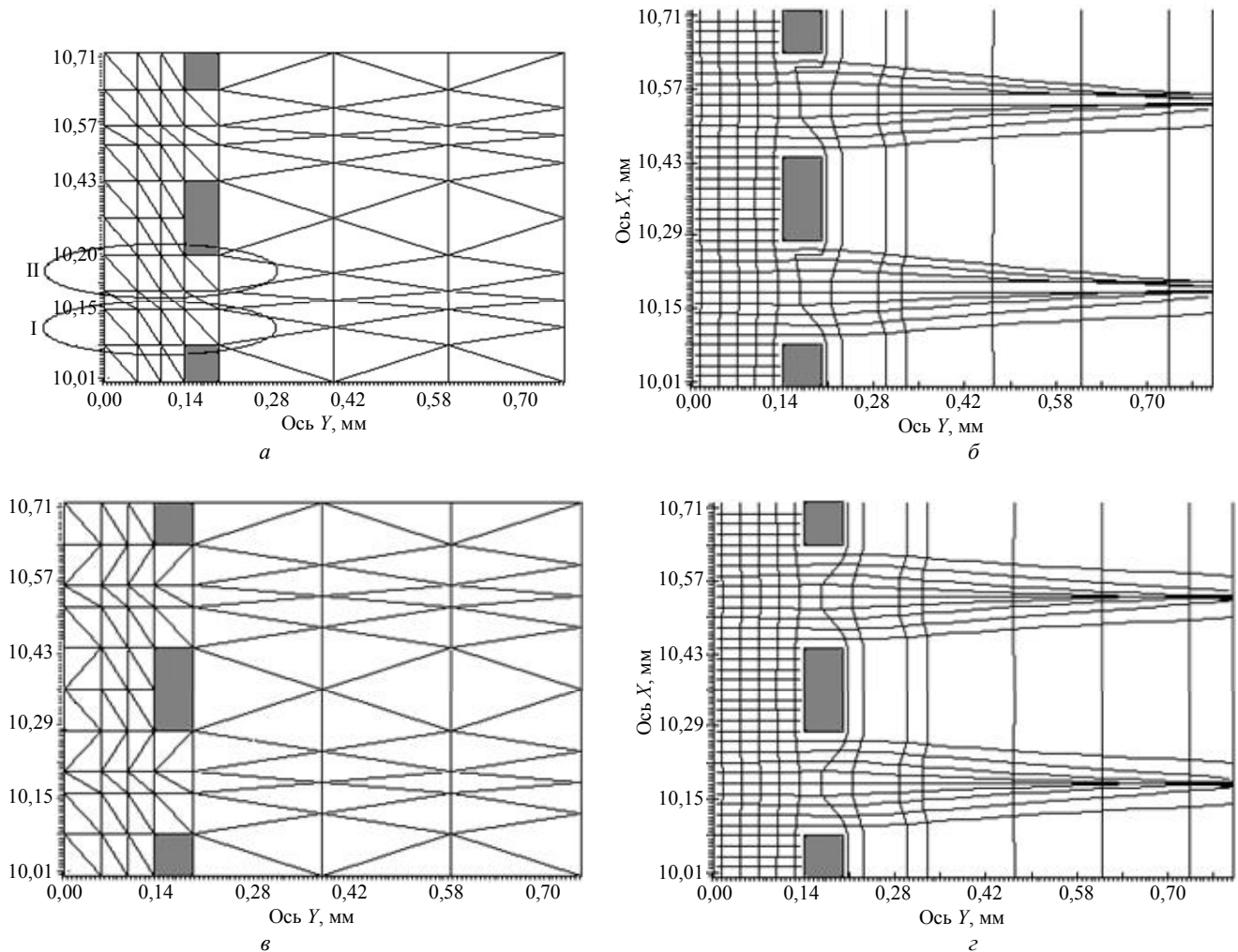


Рис. 2. Варианты разбиения расчетной области триода на конечные элементы (а, в) и эквипотенциали и траектории крупных частиц (б, г)

При симметричном расположении элементов распределение потенциала и траектории частиц симметрично относительно линии симметрии задачи, проходящей через центры ячеек параллельно оси  $Y$  (см. рис. 2, г).

Из приведенного примера ясно, что несимметричное расположение элементов относительно оси или плоскости симметрии, обычное при использовании методов автоматического разбиения расчетной области на конечные элементы, должно приводить к появлению несимметрии в траекториях частиц электронного пучка, поэтому в таких случаях на сетку элементов необходимо накладывать дополнительные условия симметрии сетки, учитывающие симметрию в физической постановке задачи.

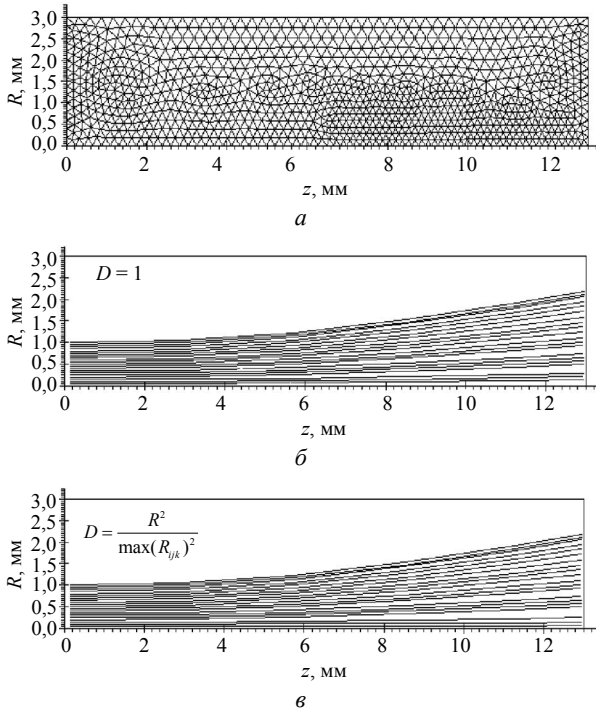
Проведем анализ расплывания цилиндрического пучка под действием собственного пространственного заряда, когда частицы ламинарного пучка движутся упорядоченно.

При использовании конечных элементов первого порядка в приосевой области осесимметричной

задачи возникает нефизический эффект, связанный с особенностью МКЭ. В силу осевой симметрии задачи радиальное поле на оси пучка должно быть равно нулю, а так как вычисленная по (2) радиальная напряженность поля в треугольных элементах имеет постоянное значение, то для элементов, хотя бы одна из вершин которых лежит на оси,  $E_r$  на оси отлична от нуля.

Наличие радиальной силы на оси пучка приводит к отклонению частиц от оси и превращению сплошного пучка в трубчатый (рис. 3, а, б). Этот эффект проявляется и при расчете плоскосимметричных или осесимметричных пучков и по трехмерным программам, когда в МКЭ используется линейная функция формы, а узлы элементов лежат на оси или плоскости симметрии пучка. Уменьше-

ние размеров элементов в приосевой области или около плоскости симметрии хотя и снижает влияние этого нефизического эффекта, но не устраняет его. Применение функций формы высших порядков также не гарантирует равенства нулю напряженности электрического поля на оси или плоскости симметрии.



**Рис. 3.** Сетка конечных элементов в расчетной области (а), траектории крупных частиц при вычислении  $E_r$  в приосевых элементах по формуле (2) (б) и с поправкой  $D$  по формуле (3) (в)

Для устранения этого эффекта было предложено в элементах, хотя бы один узел которых лежит на оси, использовать коэффициент  $D$  в формуле (2) не равным тождественно единице, а в виде [7]

$$D = \frac{R^2}{R_m^2}, \quad (3)$$

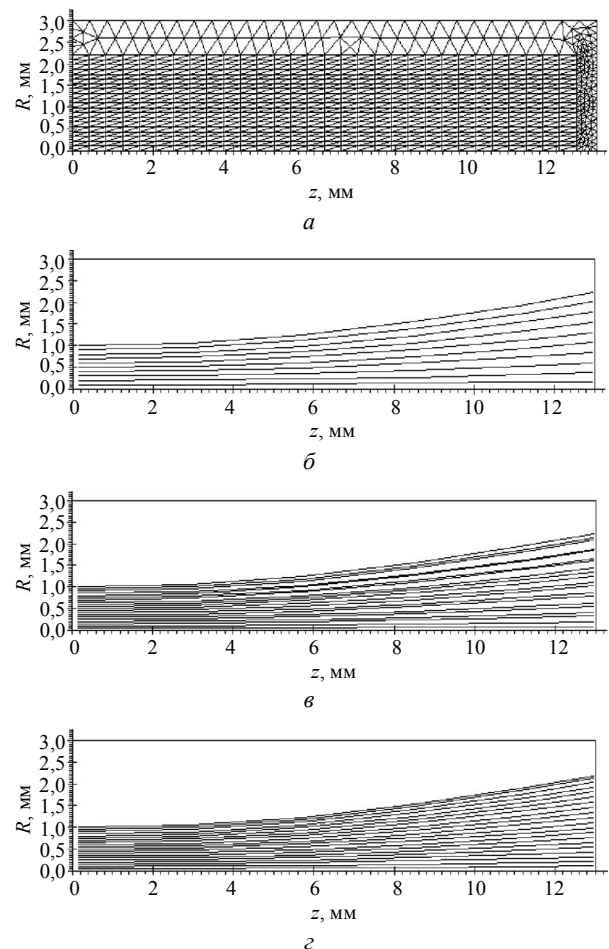
где  $R$  — координата частицы;

$R_m = \max(R_{ijk})$  — максимальный радиус узла приосевого элемента, что позволило полностью устранить рассмотренный эффект (см. рис. 3, в).

При автоматической триангуляции расчетной области треугольные элементы могут располагаться произвольным образом (см. рис. 3, а). Продольное электрическое поле при распылении пучка мало и его рассматривать не будем. В радиальном направлении поле пространственного заряда имеет вид набора отрезков с постоянным  $E_r$  на каждом отрезке, т. е. при движении по радиусу и переходе от элемента к элементу значение поля изменяется скачком, что эквивалентно проявлению эффекта

"самодействия" частиц [8]. За счет отличий в величине радиальной силы, действующей на частицы, имеющие близкие радиальные координаты, но находящиеся в соседних элементах, их траектории расходятся (см. рис. 3, б). Уменьшение размеров элементов, изменение числа частиц дает возможность количественно уменьшить описанный эффект, но полностью его не устраняет.

Почти полностью устранить рассмотренные возмущения траекторий пучка при скачкообразном изменении  $E_r$  позволил предложенный в работе [7] подход к построению сетки элементов: в области движения пучка использовать сетку конечных элементов с регулярным расположением элементов. В области движения пучка сначала строится прямоугольная сетка, аналогичная, например, сеткам в [9], а затем каждая прямоугольная ячейка разбивается диагональю на два треугольных элемента (рис. 4, а). При этом необходимо соответствие числа частиц в радиальном направлении с числом элементов упорядоченной сетки (см. рис. 4, б), и траектории частиц имеют подобный вид.



**Рис. 4.** Регулярная сетка конечных элементов (а) и траектории крупных частиц:

б — число частиц по радиусу равно числу элементов; в — число частиц в два раза превышает число элементов; г — составляющие электрического поля, вычисленные по 12-точечной схеме на прямоугольной сетке

При увеличении общего числа частиц в каждом элементе будет находиться уже несколько частиц, некоторые из них будут располагаться около границ элементов, и эффект их разбегания вновь будет проявляться (см. рис. 4, в). Особенно заметен эффект возмущения траекторий частиц за счет влияния нерегулярной сетки конечных элементов в областях ЭОС, где моделирующие электронный пучок крупные частицы движутся упорядоченно — в электронной пушке, в пролетном канале — и эти нефизические возмущения траекторий могут существенно исказить результаты расчетов.

Минимизировать рассматриваемые возмущения можно, как и в примере расплывания пучка, за счет применения регулярной сетки конечных элементов, подобной, например, криволинейной сетке, описанном в [10].

Создание упорядоченной сетки МКЭ при ее автоматической генерации потребует усложнения алгоритма. Применение элементов с функцией формы второго или третьего порядка позволяет уменьшить, но не устранить полностью скачки электрического поля при переходе от элемента к элементу, так как МКЭ обеспечивает непрерывность распределения потенциала и существование первой производной, но не ее непрерывность и гладкость.

Одним из способов уменьшения скачков напряженности электрического поля при переходе из одного элемента в другой может быть применение различных алгоритмов сглаживания. Например, в случае упорядоченной прямоугольной сетки элементов (см. рис. 4, а) можно отказаться от использования формулы (2) для вычисления производных потенциала и использовать центрально-разностные формулы [8] численного дифференцирования для нахождения  $E_R$  и  $E_Z$  по значениям потенциалов в узлах прямоугольной сетки. Проведенные расчеты показали, что при применении 12-точечной схемы вычисления напряженности электрического поля эффект разбегания частиц полностью устраняется (см. рис. 4, з).

Отметим, что в случае вычисления  $E_r$  по центрально-разностным формулам на прямоугольной сетке и рассмотренный выше нефизический эффект отклонения частиц от оси симметрии ЭОС отсутствует (см. рис. 4, з).

Сравнительные расчеты по двум программам (с МИУ и МКЭ) проводились на ЭВМ с небольшим быстродействием, и интересно рассматривать лишь относительное время расчетов. Обе программы полностью использовали оперативную память, причем для МИУ часть памяти отводилась для решения системы линейных уравнений прямым методом, а для МКЭ — решение осуществлялось итерационным методом, не требующим до-

полнительной памяти, при этом хранились новые массивы со служебными параметрами элементов. Решались задачи, имеющие точное аналитическое решение, и рассчитывались характеристики реального коллектора ЛБВ.

Проведенное сравнение показало примерно одинаковую точность расчета потенциала и траекторий частиц по программам с использованием МКЭ и МИУ.

Далее анализировались характеристики одноступенчатого коллектора ЛБВ (рис. 5). Пучок моделировался 75 крупными частицами. При использовании МИУ на границе области задавалось 90 зарядов, сетка потенциалов имела 1420 узлов, для МКЭ число узлов сетки равнялось 110, число треугольников — 168.

В табл. 1 приведено суммарное по шести итерациям время решения уравнения Пуассона и расчета траекторий частиц для двух методов.

Таблица 1

Метод	Расчет, с		Общее время, с
	потенциала	траекторий	
МИУ	2105	56	2161
МКЭ	12	1754	1766

С увеличением в МИУ числа зарядов на границе до 180, числа узлов сетки до 2400 и числа крупных частиц до 150, а в МКЭ — числа узлов до 334 и числа треугольников до 150 время расчета потенциала для МКЭ возрастает примерно в 3,5 раза (табл. 2).

Таблица 2

Метод	Расчет, с		Общее время, с
	потенциала	траекторий	
МИУ	5607	123	5730
МКЭ	43	5316	5359

Уменьшить время расчета можно путем замены итерационного метода решения системы линейных уравнений прямым методом, но уменьшение общего времени расчета будет незначительным, так как более 99 % счетного времени занимает процесс расчета траекторий.

В двух программах используются одинаковые уравнения движения и схема их решения. Отличия во времени вычисления аксиальной и радиальной напряженностей электрического поля (в МИУ, определяемых путем численного дифференцирования потенциала на прямоугольной сетке, а в МКЭ — по аналитическим формулам) и во времени вычисления новых значений координат и компонент скорости частицы невелики.

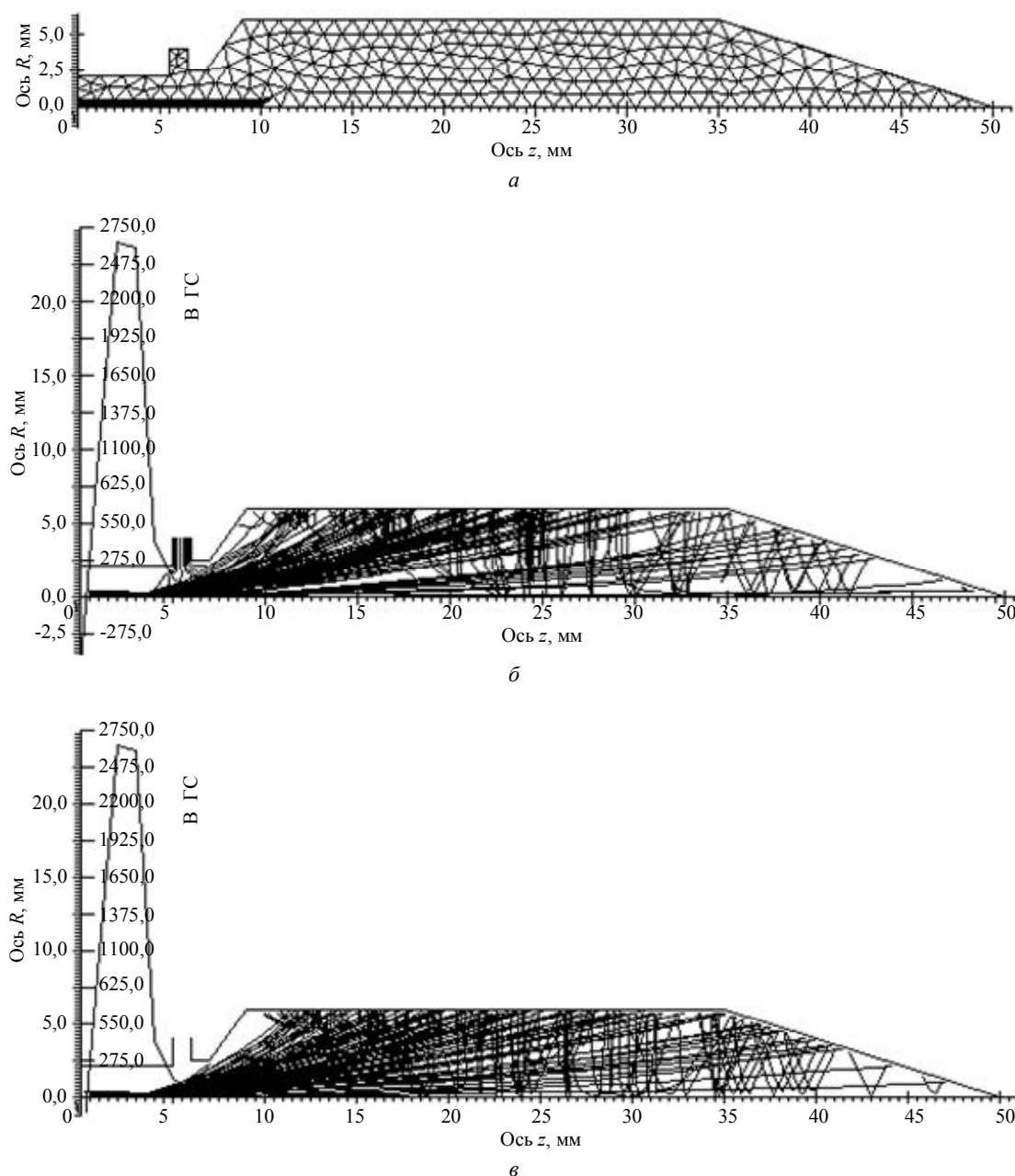


Рис. 5. Сетка конечных элементов в области одноступенчатого коллектора (а) и траектории первичных и вторичных крупных частиц, рассчитанные по программам с МКЭ (б) и МИУ (в)

В МИУ определение ячейки прямоугольной сетки, в которой находится частица, не представляет трудностей и осуществляется с использованием простых формул. Основное время при расчете траекторий частиц в МКЭ затрачивается на поиск номера элемента нерегулярной сетки, в котором находится частица. Во всех рассмотренных примерах на каждом шаге расчета траектории частицы перебор треугольников начинался с первого. Изменение алгоритма поиска номера элемента таким образом, чтобы сначала анализировалось выполнение условия (1) для локальных координат  $\xi$  для элемента, в котором частица находилась на предыдущем шаге, позволило уменьшить время расчета траекторий в МКЭ примерно в 1,6 раза.

Время расчета траекторий в МКЭ уменьшилось до 1078 с по сравнению с данными табл. 1 в работе [9] и до 3275 с по сравнению с данными в табл. 1 [10], и, соответственно, общее время расчета уменьшилось до 1090 и 3318 с.

Для уменьшения времени расчета могут применяться различные методы поиска элемента, в котором находится частица. Например, перед началом расчетов для каждого элемента МКЭ можно установить соответствие между стороной элемента и номером соседнего элемента, и при вычислении траектории частицы определять сторону, через которую частица покидает элемент, и сразу знать номер нового элемента. Однако при выходе частицы из элемента через один из узлов будет

необходим просмотр элементов, включающих этот узел, и в результате общее время расчета траекторий будет превышать время для МИУ.

### Заключение

Рассмотрены особенности применения метода конечных элементов для расчета траекторий частиц в сильноточных электронных пучках с учетом их пространственного заряда. Показаны нефизические эффекты, возникающие на нерегулярной сетке конечных элементов, проявляющиеся в нарушении симметрии, разбегании и отклонении от оси траекторий крупных частиц и связанные с вычислением напряженности электрического поля с использованием функции формы. Предложены пути их устранения.

### Литература

1. Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов: Пер. с англ. — М.: Мир, 1979.

2. Petillo J., DeFord J., Nelson E. et al. // Proc. Seven International Vacuum Electronic Conference IVEC 2006, 25—27 April 2006, Monterey, USA, 2006. P. 83, 84.

3. Salvatore C., Francesco E., Antonio L. et al. // IEEE Trans. on ED. 2001. V. ED-48. No. 1. P. 24—31.

4. Ives L., Bui T., Vogler W. et al.: Proc. Fourth IEEE International Vacuum Electronics Conference IVEC 2003. Proceedings. Seoul, Korea, May 28—30, 2003. P. 118, 119.

5. Сильвестер П., Феррари Р. Метод конечных элементов для радиоинженеров и инженеров-электриков: Пер. с англ. — М.: Мир, 1986. — 229 с.

6. Ильин В. П. Численные методы решения задач электрооптики. — г. Новосибирск.: Наука, Сибирское отд., 1974. — 202 с.

7. Журавлева В. Д., Семенов С. О.: Матер. междунар. науч.-техн. конф. "Актуальные проблемы электронного приборостроения АПЭП 1998". — г. Саратов: Изд-во СГТУ, 1998. С. 189—193.

8. Семенов С. О.: Матер. междунар. науч.-техн. конф. "Актуальные проблемы электронного приборостроения АПЭП 2006". — г. Саратов: Изд-во СГТУ, 2006. С. 57—65.

9. Журавлева В. Д., Пензяков В. В., Роговин В. И. // Электронная техника. Сер. 1. Электроника СВЧ. 1977. Вып. 1. С. 123.

10. Григорьев Ю. А., Журавлева В. Д., Морев С. П. и др. // Там же. 1988. Вып. 1. С. 70.

## Some features of charge particle trajectory calculation on potential mesh of finite element method

S. O. Semenov

FSUE "Almaz", 1 Panfilov str., Saratov, 410033, Russia

E-mail: almaz@overta.ru

*The features of finite element method for charge particle trajectory calculation in intense electron beams with space charge are considered. The nonphysical effect on irregular finite element mesh, connected with the calculation of electric field tension using form function, are shown and the ways of their elimination are proposed.*

PACS: 41.85.-p

*Keywords:* particle, trajectory, volume charge, electron beam, electric field, calculation.

Bibliography — 10 references.

Received 18 November 2009