

01

Быстрый алгоритм численного интегрирования уравнений движения крупных частиц в приборах СВЧ

© А.А. Кураев,^{1,2} А.О. Рак,¹ С.В. Колосов,¹ А.А. Короновский,^{2,3} А.Е. Храмов^{2,3}

¹ Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, 220013 Минск, Белоруссия

² Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, 410012 Саратов, Россия
e-mail: hramovae@gmail.com

³ Саратовский государственный технический университет им. Ю.А. Гагарина, 410054 Саратов, Россия

(Поступило в Редакцию 23 апреля 2013 г.)

Сформулирован алгоритм численного интегрирования уравнений движения крупных частиц. Алгоритм представлен в трех формах: явной, предсказания-коррекции и модифицированной, предназначенной для моделирования движения крупных релятивистских частиц в электромагнитном поле. Проведен анализ порядка точности предложенного алгоритма. Представлены результаты сравнения со стандартными алгоритмами. Показана эффективность сформулированного алгоритма на тестовом примере (гармонический осциллятор) и при численном моделировании диода Пирса в режиме формирования виртуального катода.

Введение

В современной электронике и физике плазмы все большую роль играют современные методы численного моделирования и анализа процессов, происходящих при взаимодействии электронных и ионных потоков с электромагнитными полями [1–7]. Одним из наиболее перспективных и широко используемых подходов при моделировании пучково-плазменных систем являются различные модификации метода частиц, которые позволяют достаточно эффективно решать данный круг задач [1,7]. Следует отметить, что при моделировании электронных потоков, взаимодействующих с электромагнитными полями, любыми разновидностями методом частиц необходимо численно решать уравнения движения крупных частиц.

Особо важную роль скорость и точность этих вычислений играют при использовании методов „частица в ячейке“ (PIC-методов), когда требуется многократно вычислять траектории и скорости миллионов частиц. В настоящей работе представлен эффективный метод численного интегрирования уравнений движения, основанный на принципах, описанных в [8].

Движение крупной частицы в нерелятивистском случае описывается в соответствии со вторым законом Ньютона:

$$a = \frac{F}{m}.$$

Основные параметры, описывающие состояние частицы: $x(t)$ — координата частицы, $v(t)$, $a(t)$ — соответственно ее скорость и ускорение.

Эти величины связаны следующим образом:

$$\dot{x} = v,$$

$$\dot{v} = a.$$

1. Формулировка алгоритма

Значение функции, ее четных производных и ее нечетных производных определим на разных временных слоях [1], как это показано на рисунке. На основании этого

$$\frac{x_{t+\Delta t} - x_t}{\Delta t} = v_{t+\frac{1}{2}\Delta t}, \quad (1)$$

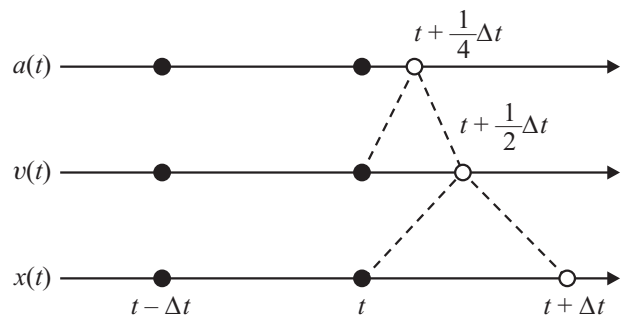
$$x_{t+\Delta t} = x_t + v_{t+\frac{1}{2}\Delta t}\Delta t, \quad (2)$$

$$\frac{v_{t+\frac{1}{2}\Delta t} - v_t}{\frac{1}{2}\Delta t} = a_{t+\frac{1}{4}\Delta t},$$

$$v_{t+\frac{1}{2}\Delta t} = v_t + \frac{1}{2} a_{t+\frac{1}{4}\Delta t}\Delta t. \quad (3)$$

Значение $a_{t+\frac{1}{4}\Delta t}$ экстраполируем по значениям ускорения с двух предыдущих временных шагов ($a_{t-\Delta t}$ и a_t):

$$a_{t+\frac{1}{4}\Delta t} = \frac{1}{4}(5a_t - a_{t-\Delta t}). \quad (4)$$



Расположение временных шагов, используемое в рассматриваемой конечно-разностной схеме.

Таблица 1. Основные соотношения для предложенного алгоритма и алгоритма Бимана

Предложенный алгоритм	Алгоритм Бимана
Форма предсказания-коррекции	
Предсказание $x_{t+\Delta t} = x_t + v_t \Delta t + \frac{1}{8}(5a_t - a_{t-\Delta t})\Delta t^2 + O(\Delta t^3)$ Коррекция $x_{t+\Delta t} = x_t + v_t \Delta t + \frac{1}{8}(a_t + 3a_t)\Delta t^2 + O(\Delta t^3)$ $v_{t+\Delta t} = \frac{x_{t+\Delta t} - x_t}{\Delta t} + \frac{1}{8}(3a_{t+\Delta t} + a_t)\Delta t + O(\Delta t^2)$	Предсказание $x_{t+\Delta t} = x_t + v_t \Delta t + \frac{1}{6}(4a_t - a_{t-\Delta t})\Delta t^2 + O(\Delta t^4)$ Коррекция $x_{t+\Delta t} = x_t + v_t \Delta t + \frac{1}{6}(a_t + 2a_t)\Delta t^2 + O(\Delta t^4)$ $v_{t+\Delta t} = \frac{x_{t+\Delta t} - x_t}{\Delta t} + \frac{1}{6}(2a_{t+\Delta t} + a_t)\Delta t + O(\Delta t^3)$
Явная форма	
$x_{t+\Delta t} = x_t + v_t \Delta t + \frac{1}{8}(5a_t - a_{t-\Delta t})\Delta t^2 + O(\Delta t^3)$ $v_{t+\Delta t} = v_t + \frac{1}{8}(3a_{t+\Delta t} + 6a_t - a_{t-\Delta t})\Delta t + O(\Delta t^3)$	$x_{t+\Delta t} = x_t + v_t \Delta t + \frac{1}{6}(4a_t - a_{t-\Delta t})\Delta t^2 + O(\Delta t^4)$ $v_{t+\Delta t} = v_t + \frac{1}{6}(2a_{t+\Delta t} + 5a_t - a_{t-\Delta t})\Delta t + O(\Delta t^3)$
Модифицированная форма предсказания-коррекции	
Предсказание $x_{t+\Delta t} = x_t + v_t \Delta t + \frac{1}{8}(5a_t - a_{t-\Delta t})\Delta t^2 + O(\Delta t^3)$ $v_{t+\Delta t} = v_t + \frac{1}{2}(3a_t - a_{t-\Delta t})\Delta t + O(\Delta t^3)$ Коррекция $x_{t+\Delta t} = x_t + v_t \Delta t + \frac{1}{8}(a_{t+\Delta t} + 3a_t)\Delta t^2 + O(\Delta t^3)$ $v_{t+\Delta t} = v_t + \frac{1}{8}(3a_{t+\Delta t} + 6a_t - a_{t-\Delta t})\Delta t + O(\Delta t^3)$	Предсказание $x_{t+\Delta t} = x_t + v_t \Delta t + \frac{1}{6}(4a_t - a_{t-\Delta t})\Delta t^2 + O(\Delta t^4)$ $v_{t+\Delta t} = v_t + \frac{1}{2}(3a_t - a_{t-\Delta t})\Delta t + O(\Delta t^3)$ Коррекция $x_{t+\Delta t} = x_t + v_t \Delta t + \frac{1}{6}(a_{t+\Delta t} + 2a_t)\Delta t^2 + O(\Delta t^4)$ $v_{t+\Delta t} = v_t + \frac{1}{6}(2a_{t+\Delta t} + 5a_t - a_{t-\Delta t})\Delta t + O(\Delta t^3)$

Подставив (4), (3) в (2), получим выражение для $x_{t+\Delta t}$:

$$x_{t+\Delta t} = x_t + v_t \Delta t + \frac{1}{8}(5a_t - a_{t-\Delta t})\Delta t^2.$$

Для уточнения значения $x_{t+\Delta t}$ интерполируем $a_{t+\frac{1}{4}\Delta t}$ по значениям a_t и $a_{t+\Delta t}(x_{t+\Delta t})$:

$$a_{t+\frac{1}{4}\Delta t} = \frac{1}{4}(a_{t+\Delta t} + 3a_t). \tag{5}$$

Подставив (5), (3) в (2), получим следующее выражение для коррекции координаты:

$$x_{t+\Delta t} = x_t + v_t \Delta t + \frac{1}{8}(a_{t+\Delta t} + 3a_t)\Delta t^2. \tag{6}$$

Теперь найдем выражение для $v_{t+\Delta t}$ с использованием $a_{t+\Delta t}(x_{t+\Delta t})$:

$$\frac{v_{t+\Delta t} - v_{t+\frac{1}{2}\Delta t}}{\frac{1}{2}\Delta t} a_{t+\frac{3}{4}\Delta t}, \tag{7}$$

$$a_{t+\frac{3}{4}\Delta t} = \frac{1}{4}(3a_{t+\Delta t} + a_t). \tag{8}$$

Используя (1) и (8), приведем (7) к следующему виду:

$$v_{t+\Delta t} \Delta t = x_{t+\Delta t} - x_t + \frac{1}{8}(3a_{t+\Delta t} + a_t)\Delta t^2. \tag{9}$$

Окончательно алгоритм в форме предсказания-коррекции формулируется следующим образом.

Предсказание

$$x_{t+\Delta t} = x_t + v_t \Delta t + \frac{1}{8}(5a_t - a_{t-\Delta t})\Delta t^2. \tag{10}$$

Коррекция

$$x_{t+\Delta t} = x_t + v_t \Delta t + \frac{1}{8}(a_{t+\Delta t} + 3a_t)\Delta t^2, \tag{11}$$

$$v_{t+\Delta t} \Delta t = x_{t+\Delta t} - x_t + \frac{1}{8}(3a_{t+\Delta t} + a_t)\Delta t^2. \tag{12}$$

Количество итераций коррекции может контролироваться по разности между значениями $x_{t+\Delta t}$ на разных шагах коррекции.

Используя (10) для определения координаты и подставив (10) в (12), приведем алгоритм к явной форме:

$$x_{t+\Delta t} = x_t + v_t \Delta t + \frac{1}{8}(5a_t - a_{t-\Delta t})\Delta t^2, \tag{13}$$

$$v_{t+\Delta t} = v_t + \frac{1}{8}(3a_{t+\Delta t} + 6a_t - a_{t-\Delta t})\Delta t. \tag{14}$$

Алгоритмы (10)–(14) могут быть использованы только в том случае, когда a_t не является функцией от v_t . При движении электронов в магнитном поле, либо с релятивистскими скоростями это условие не выполняется. В таких случаях необходимо также предсказывать значение $v_{t+\Delta t}$:

$$\frac{v_{t+\Delta t} - v_t}{\Delta t} = a_{t+\frac{1}{2}\Delta t} = \frac{1}{2}(3a_t - a_{t-\Delta t}),$$

$$v_{t+\Delta t} = v_t + \frac{1}{2}(3a_t - a_{t-\Delta t})\Delta t. \tag{15}$$

Для коррекции значения (15) может быть использовано выражение (14).

Полученный алгоритм весьма близок к алгоритму Бимана (Бимана–Шофилда). Для удобства сравнения оба алгоритма представлены в табл. 1.

2. Определение порядка точности алгоритма

Определим порядок точности предложенного алгоритма. Для этого выразим с помощью ряда Тейлора основные выражения. Для выражения (2) представим $x_{t+\Delta t}$ и x_t в следующем виде:

$$x_{t+\Delta} = x_{t+\frac{1}{2}\Delta t - \frac{1}{2}\Delta t} = x_{t+\frac{1}{2}\Delta t} + \frac{1}{2}v_{t+\frac{1}{2}\Delta t}\Delta t + \frac{1}{8}a_{t+\frac{1}{2}\Delta t}\Delta t^2 + \frac{1}{48}b_{t+\frac{1}{2}\Delta t}\Delta t^3 + O(\Delta t^4), \quad (16)$$

$$x_t = x_{t+\frac{1}{2}\Delta t - \frac{1}{2}\Delta t} = x_{t+\frac{1}{2}\Delta t} - \frac{1}{2}v_{t+\frac{1}{2}\Delta t}\Delta t + \frac{1}{8}a_{t+\frac{1}{2}\Delta t}\Delta t^2 - \frac{1}{48}b_{t+\frac{1}{2}\Delta t}\Delta t^3 + O(\Delta t^4), \quad (17)$$

Вычтем (17) из (16)

$$x_{t+\Delta t} = x_t + v_{t+\frac{1}{2}\Delta t}\Delta t + \frac{1}{24}b_{t+\frac{1}{2}\Delta t}\Delta t^3 + O(\Delta t^4). \quad (18)$$

Выполним аналогичные операции для выражения (3)

$$v_{t+\frac{1}{2}\Delta t} = v_{t+\frac{1}{4}\Delta t + \frac{1}{4}\Delta t} = v_{t+\frac{1}{4}\Delta t} + \frac{1}{4}a_{t+\frac{1}{4}\Delta t}\Delta t + \frac{1}{32}b_{t+\frac{1}{4}\Delta t}\Delta t^2 + O(\Delta t^3),$$

$$v_t = v_{t+\frac{1}{4}\Delta t - \frac{1}{4}\Delta t} = v_{t+\frac{1}{4}\Delta t} - \frac{1}{4}a_{t+\frac{1}{4}\Delta t}\Delta t + \frac{1}{32}b_{t+\frac{1}{4}\Delta t}\Delta t^2 + O(\Delta t^3).$$

После вычитания получим

$$v_{t+\frac{1}{2}\Delta t} = v_t + \frac{1}{2}a_{t+\frac{1}{4}\Delta t}\Delta t + O(\Delta t^3). \quad (19)$$

Для (4) имеем:

$$a_{t+\frac{1}{4}\Delta t} = a_t + \frac{1}{4}b_t\Delta t + O(\Delta t^2), \quad (20)$$

$$a_{t-\Delta t} = a_t - b_t\Delta t + O(\Delta t^2). \quad (21)$$

Используя представления (20) и (21), выразим $a_{t+\Delta t}$ двумя способами: первый — умножим (20) на 4 и прибавим (21); второй — умножим (20) на 3 и прибавим (21). В результате получим следующие выражения:

$$a_{t=\frac{1}{4}\Delta t} = \frac{1}{4}(5a_t - a_{t-\Delta t}) + O(\Delta t^2), \quad (22)$$

$$a_{t+\frac{1}{4}\Delta t} = \frac{1}{3}(4a_t - a_{t-\Delta t}) - \frac{1}{21}b_t\Delta t + O(\Delta t^2). \quad (23)$$

Подставляя поочередно (22), (23) в (19), а результат в (18), получим выражения для предсказания координаты частицы в следующем виде:

$$x_{t+\Delta t} = x_t v_1 \Delta t + \frac{1}{8}(5a_t - a_{t-\Delta t})\Delta t^2 + \frac{1}{24}b_t\Delta t^3 + O(\Delta t^4) = x_t + v_1\Delta t + \frac{1}{8}(5a_t - a_{t-\Delta t})\Delta t^2 + O(\Delta t^3), \quad (24)$$

$$x_{t+\Delta t} = x_t + v_1\Delta t + \frac{1}{6}(4a_t - a_{t-\Delta t})\Delta t^2 + O(\Delta t^4). \quad (25)$$

Выражение (25) соответствует алгоритму Бимана [8]. Как видно из (24), предложенный алгоритм определяет позицию с третьим порядком точности, однако, при малых значениях Δt и b_t (зависит от характера движения) слагаемое $\frac{1}{24}b_t\Delta t^3$ может стремиться к нулю (например, при равноускоренном движении). Также следует отметить, что в (24) используется коэффициент $1/8 = 0.125$, являющийся конечной десятичной дробью, в отличие от коэффициента $1/6$ в алгоритме Бимана, приводящего к появлению ошибки округления из-за замены бесконечной десятичной дроби конечной.

Аналогичным образом можно определить порядок точности для оставшихся выражений.

Для соотношений (6) и (9):

$$x_{t+\Delta t} = x_t + v_t\Delta t + \frac{1}{8}(a_{t+\Delta t} + 3a_t)\Delta t^2 + \frac{1}{24}b_t\Delta t^3 + O(\Delta t^4), \quad (26)$$

$$v_{t+\Delta t}\Delta t = x_{t+\Delta t} - x_t + \frac{1}{8}(3a_{t+\Delta t} + a_t)\Delta t^2 - \frac{1}{24}b_t\Delta t^3 + O(\Delta t^4), \quad (27)$$

После подстановки (26) в выражение (27) (которое имеет второй порядок точности) получим выражение для (14), обеспечивающее третий порядок точности:

$$v_{t+\Delta t} = v_t + \frac{1}{8}(3a_{t+\Delta t} + 6a_t - a_{t-\Delta t})\Delta t + O(\Delta t^3).$$

Результаты оценки порядка точности для всех форм алгоритма представлены в табл. 1.

Как видно из табл. 1, алгоритм Бимана определяет координату с четвертым порядком точности, а скорость — с третьим, таким образом, алгоритм имеет общую погрешность третьего порядка. Предложенный нами метод имеет второй порядок точности в форме предсказания-коррекции и третий порядок в явной форме и модифицированной форме предсказания-коррекции. При этом, как было показано ранее, предложенный алгоритм более устойчив к ошибкам округления за счет использования коэффициента $1/8$ вместо $1/6$. Также отметим, что достоинством алгоритма Бимана является хорошее сохранение энергии и низкая чувствительность к ошибкам округления благодаря тому, что в алгоритме вычисляется разность значительно отличающихся чисел $(4a_t - a_{t-\Delta t})$. В предложенном алгоритме вычисляется разность между числами, которые еще сильнее (по сравнению с алгоритмом Бимана) отличаются по значению $(5a_t - a_{t-\Delta t})$.

Таблица 2. Время выполнения, ms

Алгоритм	Количество точек				
	10 ³	10 ⁴	10 ⁵	10 ⁶	10 ⁷
Верле	0.67	6.82	57	552	5 585
Бимана	0.63	6.07	59	610	6 102
РК4	34.4	351	3 544	35 203	351 758
Предложенный	0.63	5.95	58	601	6 001

3. Численное сравнение с другими алгоритмами

Для практической оценки характеристик алгоритма и сравнения с другими методами выполним численное моделирование гармонического осциллятора. Его движение в одномерном пространстве описывается следующим уравнением:

$$a = -\omega^2 x. \tag{28}$$

Аналитическое решение этого уравнения

$$x = C_1 \cos(\omega t) + C_2 \sin(\omega t).$$

Константы C_1 и C_2 зависят от начальных условий.

Вычисления выполнялись с использованием следующих методов:

- Верле (в скоростной форме),
- Бимана (в явной форме),
- Рунге–Кутты 4-го порядка (уравнение второго порядка (28) приводилось к системе уравнений первого порядка),
- предложенный алгоритм (в явной форме).

Скоростной алгоритм Верле — численный метод, предназначенный для решения уравнений движения. Алгоритм Бимана считается его вариацией, лучше сохраняющей энергию.

Записывается скоростной алгоритм Верле в следующем виде:

$$x_{t+\Delta t} = x_t + v_t \Delta t + \frac{1}{2} a_t \Delta t^2,$$

$$v_{t+\Delta t} = v_t + \frac{1}{2} (a_{t+\Delta t} + a_t) \Delta t.$$

Алгоритмы Верле, Бимана и предложенный алгоритм являются специальными алгоритмами для интегрирования дифференциальных уравнений второго порядка.

Основным их преимуществом относительно алгоритмов для уравнений первого порядка является скорость вычислений. В методе Рунге–Кутты вычисление силы (или ускорения) на каждом временном шаге выполняется 4 раза, в приведенных алгоритмах — только 1 раз. Поэтому когда основное время затрачивается на вычисление силы, специальные алгоритмы оказываются в 4 раза быстрее. Если же для определения силы требуется меньше вычислений, чем для самого алгоритма, то специальные алгоритмы оказываются в десятки раз быстрее. Так, для рассматриваемого примера специальные алгоритмы более чем в 60 раз быстрее метода Рунге–Кутты (табл. 2).

В рассмотренных методах по-разному проявляется погрешность вычисления координаты: в методе Рунге–Кутты ошибка накапливается, и при больших значениях шага и расчетного интервала решение вырождается; в специальных методах погрешность вычисления координаты приводит к изменению частоты колебаний, но амплитуда и энергия остаются практически неизменными, позволяя выполнять расчеты с крупным шагом и на сколь угодно протяженных расчетных интервалах.

Важным параметром при моделировании движения частицы является сохранение энергии. Специальные методы имеют погрешность определения энергии, не выходящую за определенные границы на всем интервале вычислений. Метод Рунге–Кутты имеет накапливающуюся погрешность, из-за чего на больших интервалах вычислений он хуже сохраняет энергию.

В табл. 3, 4 представлены погрешности определения энергии в зависимости от шага и интервала интегрирования соответственно. Из представленных данных видно, что предложенный алгоритм значительно лучше сохраняет энергию по сравнению с другими специальными алгоритмами. Следует отметить, что метод Рунге–Кутты при значительном увеличении шага или интервала интегрирования уступает предложенному алгоритму.

4. Численное моделирование нестационарной динамики в диоде Пирса в режиме формирования виртуального катода

Рассмотрим теперь пример, который является классическим примером системы СВЧ-электроники со сложной нестационарной хаотической динамикой — диод

Таблица 3. Максимальная погрешность определения энергии при $t = 1000, \%$

Метод	dt, s					
	0.001	0.01	0.02	0.08	0.1	0.3
Верле	$2.5 \cdot 10^{-5}$	$2.5 \cdot 10^{-3}$	0.01	0.15	0.25	2.3
Бимана	$8 \cdot 10^{-6}$	$8.5 \cdot 10^{-4}$	$3.3 \cdot 10^{-3}$	0.05	0.08	0.65
РК4	$6 \cdot 10^{-12}$	$1.5 \cdot 10^{-7}$	$4.5 \cdot 10^{-6}$	$4.5 \cdot 10^{-3}$	0.015	3.3
Предложенный	$6 \cdot 10^{-9}$	$6.5 \cdot 10^{-6}$	$4.8 \cdot 10^{-5}$	$3.8 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-3}$	0.3

Таблица 4. Максимальная погрешность определения энергии при $dt = 0.04, \%$

Метод	t, s			
	10^2	10^3	10^4	10^5
Верле	$4 \cdot 10^{-2}$	$4 \cdot 10^{-2}$	$4 \cdot 10^{-2}$	$4 \cdot 10^{-2}$
Бимана	$1.4 \cdot 10^{-2}$	$1.4 \cdot 10^{-2}$	$1.4 \cdot 10^{-2}$	$1.4 \cdot 10^{-2}$
РК4	$1.4 \cdot 10^{-5}$	$1.4 \cdot 10^{-4}$	$1.4 \cdot 10^{-3}$	$1.4 \cdot 10^{-2}$
Предложенный	$4.5 \cdot 10^{-4}$	$4.5 \cdot 10^{-4}$	$4.5 \cdot 10^{-4}$	$4.5 \cdot 10^{-4}$

Пирса [7,9]. Диод Пирса представляет собой две бесконечных плоских параллельных сетки, пронизываемых моноэнергетическим бесконечно широким электронным потоком. Плотность заряда ρ_0 и скорость v_0 потока на входе в диодный промежуток поддерживаются постоянными. Пространство между сетками заполнено нейтрализующим фоном неподвижных ионов с плотностью ρ_i . Плотность нейтрализующего заряда равна невозмущенной плотности заряда в электронном потоке ($\rho_0 = -\rho_i$).

В такой системе при определенных условиях возможно развитие неизлучательной неустойчивости, которая носит название неустойчивости Пирса [9,10]. Она связана с существованием внешней обратной связи через цепь, соединяющую сетки, поскольку они заземлены [10]. Условием развития неустойчивости Пирса является условие $\alpha = \omega_p L / v_0 > \pi$, которое приводит к формированию виртуального катода — области в пространстве взаимодействия, отражающей часть электронов к плоскости инжекции и совершающей колебаний в пространстве и времени [7]. В работах [11–13] было показано, что в такой системе в режиме формирования виртуального катода возможны различные режимы колебаний, включая хаотическую динамику.

Для анализа нестационарной нелинейной динамики виртуального катода необходимо использовать численное моделирование методом „частиц в ячейке“ (PIC-метод) [1]. В плоской геометрии электронный поток представляется в виде совокупности крупных частиц (заряженных листов), инжектируемых через равные промежутки времени с постоянной скоростью в пространство взаимодействия. Для решения задачи использовались безразмерные переменные $\rho = \rho' / |\rho_0|$, $v = v' / v_0$, $t = t' v_0 / L$, $x = x' / L$, $E = E' / \omega_p v_0$.

Для каждого листа решаются нерелятивистские безразмерные уравнения движения

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = -E(x_i), \quad (29)$$

где x_i — координата i -го заряженного листа, $E(x_i)$ — напряженность поля пространственного заряда в точке с координатой x_i .

Для вычисления напряженности и потенциала поля пространственного заряда, а также плотности заряда вводится равномерная пространственная сетка с ша-

гом Δx_i . Потенциал поля пространственного заряда в электростатическом приближении определялся из уравнения Пуассона, которое в одномерном приближении имеет вид

$$\frac{\partial^2 \varphi}{dx^2} = -\alpha^2 (\rho(x) - 1) \quad (30)$$

и решается при следующих граничных условиях: $\varphi(0) = \varphi(L) = 0$. Напряженность поля пространственного заряда определялась численным дифференцированием полученных значений потенциала.

Для вычисления плотности пространственного заряда использовалась процедура линейного взвешивания частиц (листов) на пространственной сетке. В этом методе плотность пространственного заряда в j -м узле пространственной сетки, т.е. в точке с координатой x_j , выражается как

$$\rho(x_j) = \frac{1}{n_0} \sum_{i=1}^N \Theta(x_i - x_j), \quad (31)$$

где x_i — координата i -й частицы, N — полное число крупных частиц, n_0 — параметр вычислительной схемы, равный числу частиц на ячейку в невозмущенном состоянии,

$$\Theta(\eta) = \begin{cases} 1 - |\eta / \Delta x|, & |\eta| < \Delta x, \\ 0, & |\eta| > \Delta x \end{cases}$$

— функция „формы“, определяющая процедуру „взвешивания“ крупной частицы на пространственной сетке с шагом Δx .

Задача решалась при следующих параметрах численной схемы: $n_0 = 8$, $\Delta x = 8.3 \cdot 10^{-4}$, что соответствует числу узлов пространственной сетки $N_x = 1200$ и числу частиц в невозмущенном состоянии $N = 19\,200$.

Были рассмотрены схемы решения уравнений движения (29) с использованием простейшего и наиболее часто используемого для анализа подобных задач метода с перешагиваниями [1], метода Верле и нового предложенного здесь алгоритма. В рамках тестовых расчетов рассматривались два значения параметра Пирса $\alpha_1 = 1.3\pi$ и $\alpha_2 = 1.2\pi$, соответствующие близкому к простому

Таблица 5. Относительная точность выполнения закона энергии и длительность T выполнения программы при безразмерном $\Delta t = 1.04 \cdot 10^{-4}$, длительность расчета 200 характерных периодов колебаний

Метод	Параметр Пирса, α			
	1.3 π (близкий к периодическому режиму)		1.2 π (хаотический режим)	
	$\delta, \%$	T, s	$\delta, \%$	T, s
Метод с перешагиваниями	1.16	3.62	2.61	3.59
Верле	0.21	4.25	0.39	4.19
Предложенный	0.12	5.32	0.13	5.28

периодическому и сложному хаотическому режимам колебаний в пространственно-распределенной пучково-плазменной системе [11–14]. В табл. 5 представлены результаты анализа режимов колебаний при фиксированном шаге по безразмерному времени $\Delta t = 1.04 \cdot 10^{-4}$. В табл. 5 представлены результаты оценки относительной точности $\delta = \Delta \epsilon / W_E$ выполнения закона сохранения энергии, а именно, следуя монографии [1], макроскопическое изменение полной энергии $\Delta \epsilon$ по сравнению с энергией поля W_E .

Хорошо видно, что предложенный метод для решения задачи о диоде Пирса дает существенно лучшую точность, чем традиционный метод с перешагиваниями, и примерно в 2 раза лучшую точность, чем метод Верле. Вместе с тем метод с перешагиваниями является менее требовательным с точки зрения затрат машинного времени, хотя и намного менее точным. Следует отметить еще один положительный аспект предложенного метода. В случае периодического и хаотического режимов колебаний данный метод дает примерно одну и ту же точность выполнения законов сохранения энергии, решения практически не зависят от режима колебаний в системе в отличие от других методов, с которыми приводится сравнение и для которых точность выполнения закона сохранения падает при переходе к хаотическому режиму пространственно-временных колебаний. Это связано с тем, что в предложенном методе координата и скорость, а следовательно, и энергия частиц, совершающих несколько колебаний в пространстве взаимодействия (метастабильные частицы, появляющиеся в хаотическом режиме в области виртуального катода), определяются с весьма малой погрешностью на протяженных расчетных интервалах.

Заключение

Представленные в работе результаты указывают на целесообразность использования предложенного алгоритма в качестве замены алгоритмов Бимана и Верле, а при необходимости большого количества расчетов за ограниченное время и в качестве альтернативы другим распространенным методам. Представляется также целесообразным использование нового алгоритма для решения задач, связанных с анализом сложного хаотического поведения систем с частицами, так как в этом случае точность решения практически не зависит от режима колебаний в системе в отличие от других методов.

Работа поддержана Министерством образования и науки РФ (Соглашение 14.В37.21.0903) и проектами РФФИ (12–02–90022 и 12–02–33071), а также проектом Совета по грантам Президента РФ по поддержке молодых российских ученых-докторов наук (проект МД-345.2013.2).

Список литературы

- [1] *Birdsall C.K., Langdon A.B.* Plasma physics, via computer simulation. NY: McGraw-Hill. 1985. 479 p.
- [2] *Antonsen T.M., Mondelli A.A., Levush B., Verboncoeur J.P., Birdsall C.K.* // Proceedings IEEE. Vol. 87 N 5. P. 804–839.
- [3] *Роваль А.С.* Моделирование заряженных пучков. М.: Атомиздат, 1979. 224 с.
- [4] *Батура М.П., Кураев А.А., Попкова Т.Д.* Нерегулярные электродинамические структуры. Теория и методы расчета. Минск: Бестпринт, 2011. 250 с.
- [5] *Кураев А.А., Трубецков Д.И.* Методы нелинейной динамики и теории хаоса в задачах электроники сверхвысоких частот. Т. 1: Стационарные процессы. М.: Физматлит, 2009. 288 с.
- [6] *Короновский А.А., Трубецков Д.И., Храмов А.Е.* Методы нелинейной динамики и хаоса в задачах электроники сверхвысоких частот. Т. 2. Нестационарные и хаотические процессы. М.: Физматлит, 2009. 392 с.
- [7] *Трубецков Д.И., Храмов А.Е.* Лекции по сверхвысоко-частотной электронике для физиков. В 2-х томах. М.: Физматлит, 2003. 492 с. +648 с.
- [8] *Гулд Х., Тобочник Я.* Компьютерное моделирование в физике. Том 1. М.: Мир. 1990. 350 с.
- [9] *Pierce J.R.* // J. Appl. Phys. 1944. Vol. 15. P. 721.
- [10] *Кузелев М.В., Рухадзе А.А., Стрелков П.С.* Плазменная релятивистская СВЧ-электроника. М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2002. 544 с.
- [11] *Анфиногентов В.Г., Храмов А.Е.* // Изв. РАН, Сер. физ. 1997. Т. 61, № 12. С. 2391–2401.
- [12] *Matsumoto H., Yokoyama H., Summers D.* // Phys. Plasmas. 1996. Vol. 3. N 1. P. 177.
- [13] *Анфиногентов В.Г.* // Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика. 1994. Т. 2, № 5. С. 69.
- [14] *Hramov A.E., Koronovskii A.A., Rempen I.S.* // CHAOS. 2006. Vol. 16. P. 013 123.