

УДК 519.63

Разработка программного обеспечения для моделирования динамики заряженных частиц*

Гарипова А.В.¹, Гарипов Д.Г.¹, Гудаев Ш.Д.¹, Наумова Д.Н.¹, Плужян К.Г.¹
ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»¹

Аннотация: В ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» разработано программное обеспечение (ПО) для трехмерного численного самосогласованного моделирования динамики сильноточного электронного пучка и распространения электромагнитных волн. Созданное ПО внедряется для расчетно-теоретического сопровождения разработки новых и модернизации уже имеющихся узлов сильноточной ускорительной техники. ПО позволяет моделировать электронные пучки с плотностью тока порядка единиц МА/м², а также протяженные структуры длиной порядка десяти метров. ПО состоит из модулей для подготовки исходных данных, проведения расчетов и обработки результатов расчета. Каждый модуль представляет собой подпрограмму, реализующую физическую модель или средство обработки данных. В работе представлены архитектура ПО и описаны наборы функциональных возможностей модулей. Приведены результаты тестирования функциональных модулей на примере моделирования выходного резонатора клистрона и моделирования транспортировки сильноточного пучка электронов в вакуумной области.

Ключевые слова: программное обеспечение, трехмерное численное самосогласованное моделирование, динамика сильноточного электронного пучка, метод конечных разностей во временной области, метод «частиц-в-ячейках».

Введение

На всех этапах работ по модернизации и проектированию узлов и систем ускорителей являются актуальными задачи моделирования процессов формирования и ускорения заряженных частиц (ЗЧ), их взаимодействия с элементами конструкции, собственными и внешними электромагнитными полями. В рамках научной программы НЦФМ ведется разработка программного обеспечения для трехмерного численного самосогласованного моделирования процессов формирования и ускорения сильноточных пучков электронов.

1. Функционал ПО и его архитектура

Программное обеспечение (ПО) предназначено для моделирования формирования и распространения электромагнитных волн, а также инжекции, ускорения, транспортировки и фокусировки сильноточного электронного пучка. На рис. 1 представлена принципиальная функциональная схема ПО (каждый блок является отдельным программным модулем).

*Работа выполнена в рамках научной программы национального центра физики и математики НЦФМ по направлению №6 «Ядерная и радиационная физика».



Рис. 1. Принципиальная функциональная схема ПО.

2. Подготовка исходных данных

Геометрия расчетной области задается в системе автоматизированного проектирования (САПР).

Заданная геометрия аппроксимируется структурированной конечно разностной сеткой, которая представляет собой объемные ячейки в форме параллелепипедов. Каждая ячейка описывается электрофизическими параметрами (ϵ , μ , σ) того объекта, к которому она относится. В разработанном модуле построения конечно-разностной сетки в качестве входных данных принимаются файлы с неструктурированной конечно-элементной сеткой. С помощью разработанного алгоритма геометрия расчетной области аппроксимируется конечно-разностной сеткой (рис. 2а). Формируется файл с расширением *.msh, который содержит информацию о количестве, порядковых номерах и координатах узлов сетки, о количестве элементов сетки, из каких узлов элементы состоят и к каким объектам данные элементы относятся. Пример неравномерной конечно разностной сетки для модели диода ускорителя представлен на рис. 2б.

Разработанный алгоритм деления расчетной области на ячейки и требования к нему подробно описаны в работе [1].

После построения геометрии модели и создания расчетной сетки, необходимо задать начальные и граничные условия (НУ и ГУ) распределения напряженностей электромагнитного поля. В ПО реализованы следующие типы ГУ: идеальный проводник (электрическая стенка); идеальный магнетик (условие полного отражения); абсорбционное граничное условие; условие излучения.

Затем необходимо определить источники электромагнитных волн и ЗЧ. Для реализации источника волн использована модель волнового порта. Возбуждение системы осуществляется электрическим полем, заданным в одной из граничных плоскостей расчетной области.

В качестве моделируемого источника ЗЧ использована модель инъекции с плоскости. Данная модель обеспечивает ввод в расчетную область пучков ЗЧ трех наиболее распространенных форм: цилиндрической, трубчатой, ленточной. Реализовано две модели временного распределения ЗЧ: модель импульсной инъекции и модель

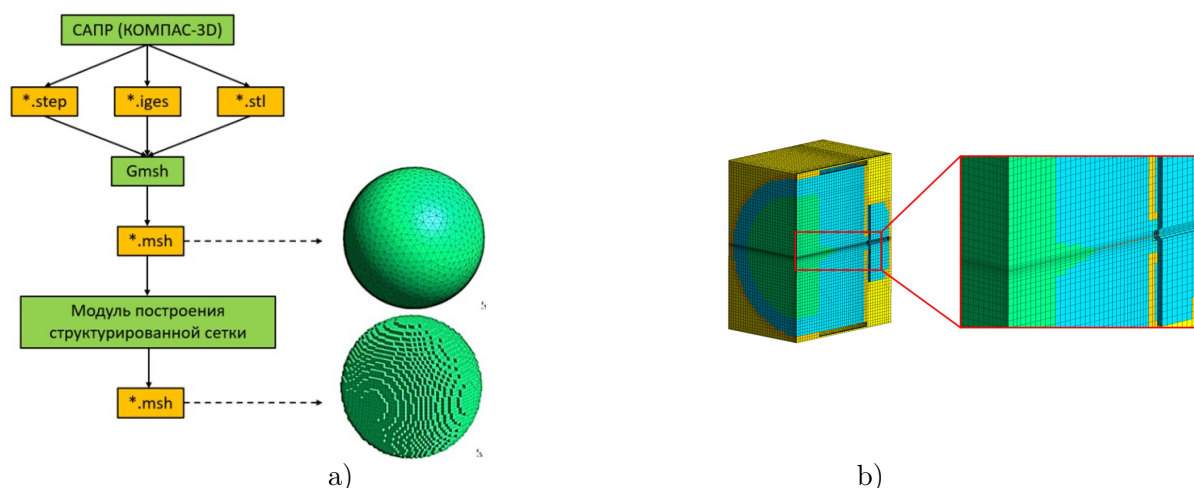


Рис. 2. Построение конечно-разностной сетки: а) блок-схема создания структурированной сетки; б) неравномерная сетка для модели диода ускорителя

заданного постоянного тока.

Для представления результатов расчета разработан модуль определения диагностик. К диагностикам, реализованным в ПО, относятся такие средства обработки данных, как монитор тока, объемный монитор поля, монитор мощности, баланс энергии и характеристики частиц.

В конце этапа подготовки данных пользователь получает полное описание условий задачи в цифровом представлении.

3. Проведение расчетов

Решение задачи динамики ЗЧ проводится в рамках метода «частиц в ячейках» и предполагает реализацию на каждом временном шаге следующего вычислительного цикла: инжекция ЗЧ → вычисление силы Лоренца → вычисление импульсов и координат ЗЧ → поглощение ЗЧ → вычисление плотностей заряда и тока ЗЧ → вычисление напряженностей поля → коррекция и фильтрация поля и тока ЗЧ.

Частицы вводятся в расчетную область с заданным пространственно временным распределением: на каждом временном шаге в расчетную область инжектируется сгусток новых частиц, каждая из которых обладает долей суммарного заряда, определяемой коэффициентом укрупнения.

Для вычисления напряженностей электромагнитного поля реализовано численное решение уравнений Максвелла с указанными НУ и ГУ методом КРВО [2].

Для вычисления силы Лоренца реализована численная схема интерполяции точных полей на положение частицы, для вычисления плотностей заряда и тока – интерполяции заряда в узлы сетки. В качестве схемы интерполяции выбрана схема первого порядка точности «облако в ячейке» [3].

Вычисление импульсов и координат частиц реализовано с помощью численного решения уравнения движения методом Бориса. Модуль реализован в многопоточном режиме вычислений с использованием стандарта OpenMP.

4. Обработка результатов расчета

На этапе обработки результатов расчета проводится диагностика расчетной области – полученные данные сохраняются в файлы стандартных форматов (*.txt, *.vtk, *.xlsx и т.д.), визуализация осуществляется с помощью сторонних приложений. Данный подход позволяет проводить мультифизическое моделирование сложных задач с использованием сторонних ПО.

5. Тестирование ПО

Тестирование выполнено на примере моделирования распространения сильно-точного пучка электронов (рис. 3а). Расчетная модель представляет собой цилиндрическую вакуумную область (1), окруженную идеальным проводником (2). Моделирование транспортировки пучка с амплитудой тока, превышающей предельную, показало, что в процессе транспортировки образуется виртуальный катод и часть пучка вылетает из расчетной области в обратном направлении. Амплитуда тока пучка, долетевшего до выходного сечения (данные с монитора тока CM1), соответствует аналитической оценке, приведенной в [4].

Проведен расчет выходного резонатора клистрона (рис. 3б), в котором появляется высокочастотное электрическое поле, взаимодействующее с потоком электронов. Расчетная область представляет собой резонатор (1) и ускорительный тракт (2), окруженные идеальным проводником.

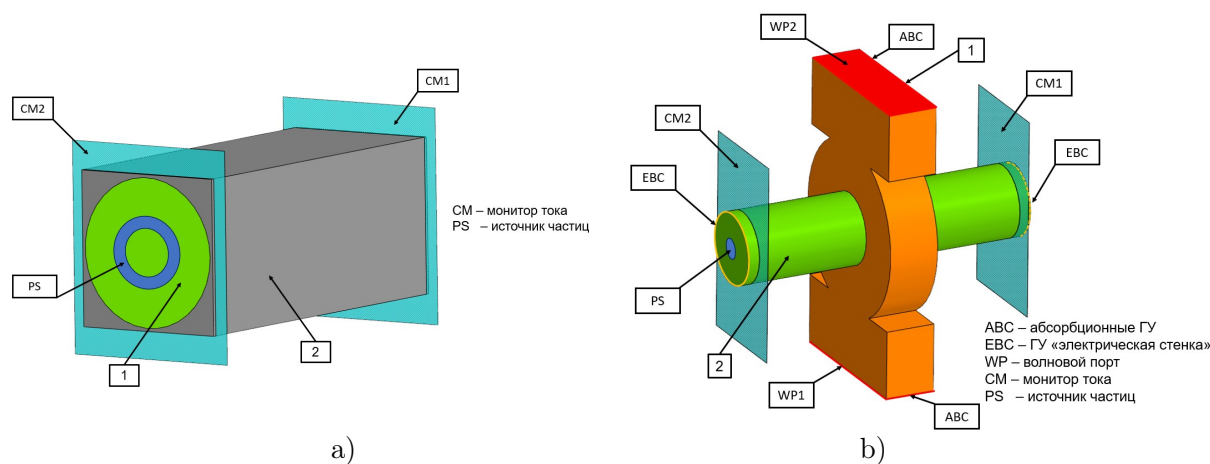


Рис. 3. Расчетная модель: а) цилиндрической вакуумной области, окруженной идеальным проводником; б) резонатора клистрона

На рис. 4а приведена визуализация движения сгустка ЗЧ, на рис. 4б – распределения z -компоненты электрического поля в ускорительном тракте.

В результате моделирования резонатора клистрона показано, что движение заряженных частиц индуцирует собственное электромагнитное поле, которое влияет на движение частиц, ускоряя или замедляя их.

Заключение

Разработано ПО для трехмерного численного моделирования формирования и распространения электромагнитных волн, а также инжекции, ускорения, транспортировки и фокусировки сильно-точного электронного пучка в самосогласованном при-

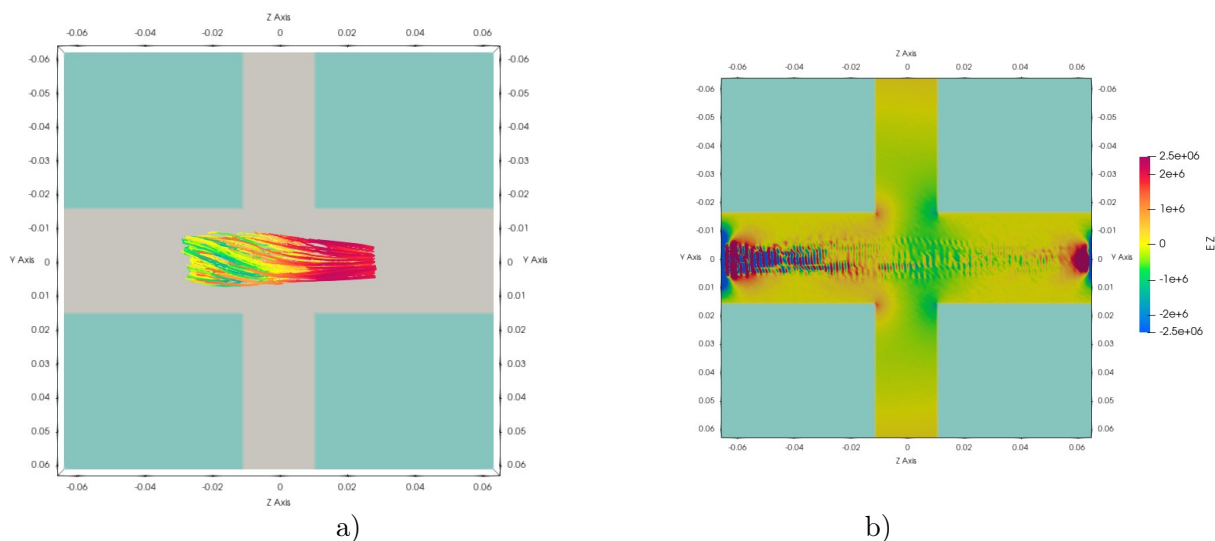


Рис. 4. Визуализация: а) движения сгустка ЗЧ; б) распределения z -компоненты напряженности электрического поля

ближении. ПО протестировано на основе задач, имеющих аналитическое решение. Получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ «Моделирование динамики заряженных частиц» № 2025688841 от 22.10.2025.

Литература

1. Гарипова А.В., Гарипов Д.Г., Гудаев Ш.Д., Наумова Д.Н., Плужан К.Г. Алгоритм построения неравномерной конечно-разностной сетки для трехмерного моделирования задач электродинамики // 23-я научно-техническая конференция «Молодежь в науке», 2025. Сборник тезисов докладов. Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 2025. 184 с.
2. Григорьев А.Д. Методы вычислительной электродинамики. Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2012. 432 с.
3. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. Москва: Мир, 1987. 640 с.
4. Аржанников А.В., Сеницкий С.Л. Мощные импульсные пучки. Новосибирск, 2012.

MSC 78M99

Development of Software for simulation of charged particle dynamics

A.V. Garipova¹, D.G. Garipov¹, Sh.D. Gudaev¹, D.N. Naumova¹, K.G. Pluzyan¹
FSUE "RFNC-VNIIEF"¹

Abstract: FSUE "RFNC-VNIIEF" has developed software for three-dimensional numerical self-consistent modeling of dynamics of a high-current electron beam and propagation of electromagnetic waves. The created software is implemented for computational theoretical support of the development of new and modernization of existing units of high-current acceleration equipment. The software allows simulation of electron beams with a current density of the order of units MA/m², as well as extended structures of the order of ten meters in length. The software consists of functional modules for preparing initial data, performing calculations and processing calculation results. A function module is a subroutine that implements a physical model or data processor. The paper presents software architecture and describes sets of module functionalities. Test results of function modules are given on the example of klystron output resonator simulation and simulation of high-current electron beam transportation in vacuum area.

Keywords: software, three-dimensional numerical self-consistent modeling, dynamics of a high-current electron beam, finite-difference time-domain method, the "particles in cells" method.