

УДК 537.533.3

Комплекс программ "Дельта" для расчета транспортирующих систем заряженных частиц.
Огородников А.К. // Научное приборостроение. Электронно-ионная оптика. Л.: Наука,
1989, с. 107-111.

Описаны классы задач, решаемых с помощью комплекса программ, а также варианты модификаций комплекса. Рассмотрены основные численные методы, положенные в основу комплекса, и сервисные возможности, обеспечиваемые при решении задач расчета транспортирующих систем. Лит. - 4 назв.

А.К.Огородников (НТО АН СССР)

**КОМПЛЕКС ПРОГРАММ "ДЕЛЬТА"
ДЛЯ РАСЧЕТА ТРАНСПОРТИРУЮЩИХ СИСТЕМ
ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ**

Разработка и оптимизация современных ионно-оптических систем ставят задачу создания эффективных методов их расчета. Существующие аналитические методы, как правило, дают возможность рассчитывать только малую часть используемых на практике систем. Задачи, которые должны решаться с помощью ионно-оптических систем, шире и разнообразнее тех, которые поддаются аналитическим методам, в частности, методам параксиальной оптики [1].

Классической задачей с этой точки зрения является задача транспортировки пучка заряженных частиц. Практическая необходимость получать в современных ионно-оптических приборах высокую чувствительность при сохранении высокой разрешающей способности заставляет использовать широкие пучки с большим угловым и энергетическим разбросом, для расчета которых еще нет "рутинных" аналитических методов [2]. Учитывать множество подобных, зачастую противоречивых, требований к разрабатываемому прибору можно только при помощи численных расчетов на ЭВМ.

Комплекс программ "Дельта" предназначен для численного расчета и оптимизации характеристик ионно-оптических систем: статических масс-спектрометров, энергоанализаторов, электронных и ионных пушек, источников ионов и т.д. Расчет каждой из этих систем может рассматриваться как решение обобщенной задачи транспортировки пучка заряженных частиц, когда заданы начальные характеристики пучка и введен критерий качества выходных характеристик.

Комплекс программ "Дельта" реализует следующие функции:

расчет электростатического поля по заданной конфигурации электродов и заданных потенциалах (плоское, осесимметричное и трехмерное поле с электродами постоянного сечения);

расчет траекторий движения заряженных частиц в электростатическом поле (плоское, осесимметричное и трехмерное);

расчет ионно-оптических характеристик пучка заряженных частиц (эмиттанс, кроссовер и т.д.);

оптимизация ионно-оптической системы по выбранному критерию с вариацией геометрических характеристик электродов и их потенциалов.

В настоящее время имеются несколько версий пакета программ "Дельта", реализованных на ЭВМ разных типов. Первоначальная версия 10SN2.1 – для плоских и осесимметричных задач с постоянным шагом. Версия 10SN5.0 – для плоских и осесимметричных полей с переменным шагом сетки и 10SN6.0 – для трехмерных полей с переменным шагом сетки. Версия 10SN2.1 реализована на ЭВМ серии ЕС (операционные системы ОС ЕС и CBM), SYBER-172 (операционная система MOS1), версии 10SN5.0 и 10SN6.0 на персональных компьютерах IBM PC/AT (операционная система MS DOS3.20) и ЭВМ серии ЕС. Отметим, что так как практически все модули пакета написаны на алгоритмическом языке Фортран-4, пакет относительно легко переносится на любую машину, имеющую компилятор с Фортрана.

Для расчета электростатического поля используется сеточный метод с постоянным или переменным шагом сетки. Получаемая система линейных, разностных линейных уравнений, имеющая пятиленточную структуру, решается методом последовательной верхней релаксации [3]. При отсутствии ограничивающего систему контура с заданным потенциалом возможен расчет поля за счет искусственного замыкания системы электродов дополнительными линиями с краевым условием Неймана.

Вместо численного расчета поля могут использоваться готовые аналитические зависимости для потенциала или для напряженности электростатического поля. Для оценки точности расчетов предусмотрен режим сравнения аналитически вычисленных полей и рассчитываемых численно.

В процессе расчета поля для оценки сходимости разностной схемы и уменьшения числа арифметических операций проводятся последовательные итерации с шагами сетки $4H$, $2H$ и H (где H – шаг сетки, задаваемый пользователем). Также оценивается и выводится на печать предельная мелкость сетки, при которой рост погрешности вычислений, вызываемый ростом обусловленности матрицы системы линейных уравнений, начинает превышать выигрыш в точности за счет уменьшения шага сетки.

Расчет траекторий заряженных частиц ведется интегрированием уравнений движения, что позволяет анализировать возвратные траектории, по формулам Рунге-Кутты 2-го порядка. Расчет траекторий обрывается при пересечении с электродом или при выходе за границу области.

Точность расчета контролируется проверкой выполнения закона сохранения энергии. Для повышения точности расчета проверка закона сохранения энергии используется также для коррекции траекторий. Возможно использование готовых аналитически рассчитанных траекторий, а также сравнение аналитически рассчитанных траекторий с численным расчетом. Реализован кусочно-аналитический метод расчета траекторий с использованием кусочно-квадратичной аппроксимации потенциала электростатического поля. В случае необходимости возможно уточнение численного расчета электростатического поля в области расчета траекторий с использованием более мелкой сетки. При расчете траекторий может учитываться влияние магнитного поля при условии, что пользователем составлена программа, задающая напряженность поля.

При расчете траекторий могут дополнительно определяться следующие ионно-оптические характеристики:

эмиттансы, т.е. распределение частиц в фазовом пространстве в различных сечениях пучка;

размер и положение кроссовера пучка, где под кроссовером понимается самое узкое сечение пучка;

аксептанс ионно-оптической системы, т.е. множество начальных параметров, при которых частицы проходят сквозь систему.

Для наглядного вывода информации об эмиттансе пучка предусмотрен расчет двумерных гистограмм в плоскостях "угол-ордината", "угол-энергия", "ордината-энергия". При построении гистограмм возможен учет интенсивностей потока частиц, движущихся по соответствующим траекториям (режим "взвешенных гистограмм").

В пакете предусмотрен режим оптимизации ионно-оптической системы. Стандартно в качестве целевой функции процесса оптимизации используется среднеквадратичный критерий фокусировки пучка относительно заданной точки. В случае необходимости пользователь может составить и включить в расчет собственную подпрограмму,

определяющую целевую функцию. В качестве методов оптимизации используется метод покоординатного спуска, метод наискорейшего (градиентного) спуска, метод случайного поиска (ветвящийся адаптивный случайный поиск ВАСП [4]). В качестве варьируемых параметров могут выступать геометрические характеристики электродов и потенциалы на них.

Следует отметить, что в силу сложного вида зависимости оптимизируемой функции от варьируемых параметров применение методов спуска дает глобальный оптимум только если начальная точка расположена вблизи этого оптимума. Аналогично ведут себя и другие детерминированные алгоритмы оптимизации, чем и мотивируется включение в пакет алгоритма, основанного на случайном поиске.

Д о п о л н и т е л ь н ы е в о з м о ж н о с т и

Функции, осуществляемые пакетом программ "Дельта", распределены между программными блоками пакета. Управление вызовом программных блоков, а также ввод и вывод данных осуществляются управляющей программой. Возможно подключение только отдельных блоков пакета (только расчет поля или только расчет траекторий и т.д.) без подключения "лишних" модулей.

В соответствии с разбиением модулей пакета на программные блоки разбивается на группы и поток входных данных. Обязательной для ввода является первая группа данных — данные управляющей программы, — в зависимости от которой будут вводиться те или иные группы данных, необходимые для работы программных блоков пакета.

Входные данные подготавливаются в форматах языка Фортран и представляют собой набор цифр и символов без поясняющих идентификаторов. Рекомендуется для быстрой ориентировки в потоке данных размещать вне форматных полей поясняющие примечания. Отдельные группы данных могут вводиться с магнитного диска во внутреннем представлении (это определяется данными управляющей программы). Для некоторых входных параметров предусмотрены стандартные значения. Для ввода входных данных и вывода данных на печать пользователь может задавать свою систему единиц.

Геометрические элементы ионно-оптической системы (электроды, дополнительные границы, сечения для расчета эмиттансов и т.д.) задаются в виде кусочно-гладких кривых, каждый отрезок которых представляет собой или отрезок прямой, или часть центральной кривой второго порядка (окружности, эллипса, гиперболы). В качестве краевых условий на границе при расчете поля могут задаваться краевые условия Дирихле или Неймана. Предусмотрен учет симметрии системы электродов и начальных условий. Эта возможность сильно сокращает объем вычислений и затраты оперативной памяти.

В пакете предусмотрена возможность проведения расчетов в несколько этапов с записью промежуточных результатов на магнитном диске. Возможен режим стыковки нескольких каскадов ионно-оптической системы в единое целое, когда результаты расчетов пучка на выходе одного каскада используются в качестве входных данных при расчете следующего каскада, будучи записанными на магнитный диск в качестве промежуточного результата. Следует отметить, что при стыковке каскадов необходимо предварительное согласование электростатических полей в каскадах с использованием условия равенства потенциала на границе каскадов. Согласование достигается за счет нескольких итераций расчета поля.

Как исключительный случай возможна стыковка осесимметричной и плоской ионно-оптической системы. Практика расчетов показывает, что, несмотря на заведомую оши-

точность такой стыковки с точки зрения теории метода, результаты качественно соответствуют реальной системе. Как правило, несоответствие между реальной и рассчитанной системой в этом случае находится в пределах, когда оно может быть устранено вариацией потенциалов на электродах ионно-оптической системы. Правильность стыковки плоской и осесимметричной задач показана также при расчете общей системы, рассматриваемой как трехмерная задача.

Программы пакета предусматривают гибкий и наглядный вывод информации. Широко используется графическое представление информации на АЦПУ: изображение геометрии системы и траекторий, графический вывод двумерных гистограмм и т.д. При наличии в составе ЭВМ графопостроителя возможен вывод геометрии и траекторий в графическом виде. При реализации пакета для ЭВМ типа IBM PC производится адаптация пакета с использованием графических и диалоговых возможностей машины.

В настоящий момент ведется активная разработка следующих версий комплекса программ "Дельта". Среди новых возможностей, включаемых в разрабатываемые версии, можно отметить следующие:

- автоматическую адаптацию шага неравномерной сетки при расчете электростатического поля;

- решение трехмерных задач электростатики методом конечных элементов и расчет трехмерных траекторий на основе представления электростатического поля базисными функциями метода конечных элементов;

- разработку алгоритмического и программного обеспечения для корректной стыковки каскадов с разной симметрией геометрий, например, осесимметричной и плоской геометрий, с использованием расчета трехмерного поля в переходной области;

- решение задач транспортировки заряженных частиц с учетом объемного заряда;

- расчет эволюции разреженной плазмы в электростатическом и магнитостатическом поле для источников ионов с электронным ударом методом больших частиц с учетом объемного заряда.

Исследование различных явлений с помощью моделирования на ЭВМ давно стало признанным и быстроразвивающимся направлением в науке и технике. Использование численных расчетов в проектировании ионно-оптических приборов позволяет избежать дорогостоящего экспериментального перебора конструкций. При этом по сравнению с традиционными экспериментальными методами экономятся средства и сокращается время разработок. Применение численных расчетов позволяет вести поиск оптимальной конструкции на более широком множестве исследуемых вариантов и, как следствие, находить лучшие значения оптимума. В ряде случаев без численного моделирования невозможна разработка новых установок, основанных на новых принципах и использующих новые полевые структуры.

Разработанный с целевой ориентацией на расчет конкретных приборов пакет программ "Дельта" включает в себя наиболее надежные и хорошо зарекомендовавшие себя на практике алгоритмы и численные методы. Пакет программ является специализированным для расчета научных ионно-оптических приборов, в большой степени учитывает их специфику.

Пакет программ "Дельта" (как блоки расчета поля, так и блоки расчета траекторий) проверен и отлажен с использованием эталонных тестовых задач, имеющих известные аналитические решения. Результаты расчетов, проведенных с помощью пакета, неоднократно подтверждались на макетах ионно-оптических систем и реальных ионно-оптических приборах. Расчеты с использованием пакета программ "Дельта" неоднократно используются при решении задач научного приборостроения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Рустерхольц А. Электронная оптика. М.: Ин.лит., 1952.
2. Галль Л.Н., Голиков Ю.К.//Научное приборостроение. Приборы и средства автоматизации для научных исследований. Л.: Наука, 1987.- С.11-16.
3. Хейгеман Л., Янг Д. Прикладные итерационные методы. М.: Мир, 1988.
4. Туртия С.Б.//АСУ и приборы автоматизации. 1988, № 77.