doi: <https://doi.org/10.15407/emodel.42.01.073>
УДК 004.942

И.В. Мельник, д-р техн. наук
Национальный технический университет Украины
«Киевский политехнический институт им. Игоря Сикорского»,
(Украина, 03056, Киев, пр-т Победы, 37, кор. 12, 2203)
тел. (044) 406 82 92, (044) 204 95 05; e-mail: imelnik@phbme.kpi.ua),
А.В. Починок, канд. техн. наук
Учебно-научный институт информационных технологий
(Украина, 08201, Киевская обл., Ирпень, ул. Университетская, 31,
тел. (044) 499 93 62; e-mail: alina_pochynok@yahoo.com)

Использование матричных алгоритмов для расчета траекторий заряженных частиц и определения фокальных параметров электронного пучка

На основе анализа базовых положений теории матричного программирования и арифметико-логических выражений показано, что существующие методы матричного программирования, связанные с формированием рекуррентных матриц, могут быть эффективно использованы для компьютерной реализации алгоритмов высокого уровня сложности. Такие алгоритмы широко применяются при решении задач моделирования сложных физических процессов, протекающих в энергетических и технологических газоразрядных устройствах большой мощности. Получены арифметико-логические и рекуррентные матричные соотношения для расчета распределения потенциала методом конечных разностей и траекторий заряженных частиц с использованием метода Рунге – Кутты четвертого порядка. С использованием рекуррентных матричных соотношений предложен алгоритм определения положения фокуса электронного пучка и его фокальных параметров при дрейфе электронов в ионизированной квазинейтральной среде. На основе методов анализа особенностей рекуррентных матриц даны теоретические оценки возможности распараллеливания предлагаемых алгоритмов. Полученные аналитические соотношения успешно использованы для моделирования электродных систем технологических источников электронов на основе высоковольтного тлеющего разряда. Приведены результаты расчетов распределения электрического поля в моделируемой электродной системе и распределения плотности тока электронного пучка в его фокальной плоскости. Полученные аналитические соотношения, основанные на теории математической логики и алгоритмах матричного анализа, являются достаточно универсальными и могут быть использованы, без существенных изменений, для моделирования газоразрядных устройств другого типа как энергетических, так и технологических.

К л ю ч е в ы е с л о в а: рекуррентная матрица, арифметико-логическое выражение, вектор-функция, траекторный анализ, технологические источники электронов, высоковольтный тлеющий разряд.

© Мельник И.В., Починок А.В., 2020

В настоящее время для решения задач моделирования все шире используются арифметико-логические выражения и матричные алгоритмы. В частности, общие положения теории матричного программирования с соответствующими примерами, написанными на языке программирования системы научно-технических расчетов MatLab, сформулированы в работах [1, 2]. В работе [3] проанализированы основные вычислительные особенности матричных алгоритмов и приведен эффективный способ теоретической оценки возможности их распараллеливания, связанный с построением иерархических диаграмм. Кроме того, в работе [3] приведена классификация задач моделирования по уровням сложности, и на основе проведенного анализа сделан вывод о том, что предложенные способы реализации матричных алгоритмов наиболее эффективны для задач моделирования низкого и среднего уровней сложности. Там же рассмотрена возможность распараллеливания итерационных алгоритмов с использованием контейнерных схем, что также основано на базовых принципах теории матричного программирования и анализе иерархических диаграмм.

Эффективные средства матричного программирования в наибольшей степени развиты в системе научно-технических расчетов MatLab, имеющей свой язык программирования, и в системе программирования Anaconda, в основу которой положен язык IPython [4, 5]. Подход, связанный с матричным программированием, в значительной степени облегчает труд программистов и упрощает создание сложных программных комплексов, несмотря на то что обычно он требует использования значительных компьютерных ресурсов. Соответствующие оценки с примерами программ, написанных на языке программирования системы MatLab, приведены в работах [2, 3, 6].

Простота матричного подхода и его ориентация на профессиональных программистов, владеющих соответствующим математическим аппаратом, делает его все более популярным. Его достоинство состоит также в том, что форма записи арифметико-логических выражений во многом совпадает с лингвистическими конструкциями современных языков программирования, в частности с оператором присваивания. Это также в значительной степени упрощает создание сложных программных комплексов программистами-профессионалами, которые владеют соответствующим математическим аппаратом и хорошо знают развитые средства современных языков программирования [1, 4, 5].

Проблема состоит в том, что в работах [2, 3, 6] рассмотрены средства матричного программирования только для решения задач моделирования простого и среднего уровней сложности, а задачи высокого уровня сложности предлагается решать существующими стандартными средствами

структурного или функционального программирования. Поэтому целью данного исследования является теоретический анализ потенциальных возможностей использования средств матричного программирования для решения задач моделирования высокого уровня сложности. При этом в качестве тестовых рассматриваются две задачи: моделирование траекторий заряженных частиц в технологических источниках электронов и определение фокальных параметров электронного пучка с использованием методов минимаксного анализа.

Постановка задачи. В работе [6] рассмотрены возможности использования методов матричного программирования для решения практических задач, связанных с моделированием источников электронов высоковольтного тлеющего разряда. Приведенные в работе [6] результаты подтвердили теоретические положения работы [3] о том, что эффективность использования матричных алгоритмов и их распараллеливания достигается в основном для задач моделирования низкого и среднего уровней сложности. В частности, не была решена задача записи уравнений траекторного анализа через арифметико-логические выражения и матричные алгебраические соотношения.

В данном случае основной целью является описание методики формирования соответствующих алгебраических выражений для вычислительных методов траекторного анализа.

Основные положения теории матричного программирования. Одним из основных понятий в теории матричного программирования является понятие арифметико-логического выражения. Это понятие обобщает известное из теории структурного программирования понятие логического выражения и используется на практике для решения широкого круга задач моделирования разного уровня сложности, в которых описываются ветвящиеся процессы, связанные с решением задачи выбора одного из нескольких предлагаемых вариантов проведения вычислений [1, 2]. Например, арифметико-логические выражения могут быть эффективно использованы для аналитического описания функций, кусочно-заданных на заранее определенных интервалах.

В общем случае арифметико-логические выражения записываются в виде алгебраической суммы произведений арифметических и логических функций [1, 2]:

$$AL(x) = A_1(x) L_1(x) + A_2(x) L_2(x) + \dots \\ \dots + A_i(x) L_i(x) + \dots + A_n(x) L_n(x), \quad (1)$$

где $A_i(x)$ и $L_i(x)$ – арифметические и логические выражения. Для того чтобы арифметико-логическое выражение (1) было математически корректным, необходимо выполнение следующих условий:

Рис. 1. Принцип формирования арифметико-логического выражения вида (1)

1. Числовые интервалы, заданные логическими функциями $L_1(x)$, $L_2(x)$, ..., $L_i(x)$, ..., $L_n(x)$ не должны пересекаться.

2. Область определения аргумента x арифметико-логического выражения (1) должна полностью описываться совокупностью логических выражений $L_1(x)$, $L_2(x)$, ..., $L_i(x)$, ..., $L_n(x)$.

Следовательно, заданный набор арифметико-логических выражений $L_2(x)$, ..., $L_i(x)$, ..., $L_n(x)$ должен удовлетворять требованиям полноты и непротиворечивости [7]. Пример формирования арифметико-логического выражения на числовой координатной оси представлен на рис. 1.

В работах [1, 2] показано, что частным случаем арифметико-логического выражения является рекуррентное арифметико-логическое выражение. Суть рекуррентных арифметико-логических выражений состоит в том, что вычисления с использованием соотношения (1) проводятся рекуррентно для значений аргумента x_n . Примером рекуррентного арифметико-логического выражения может быть следующее:

$$\begin{aligned} \text{AL}(x_n) = & A_1(x_{n-1}) L_1(x_{n-1}) + \\ & + A_2(x_{n-1}) L_2(x_{n-1}) + \dots + A_k(x_{n-1}) L_k(x_{n-1}). \end{aligned} \quad (2)$$

Примеры использования арифметико-логических выражений типа (2) для решения прикладных задач программирования рассмотрены в [1, 2].

Для описания более сложных алгоритмов, которым в средствах структурного программирования соответствуют вложенные циклы, в [1, 2] введено понятие рекуррентной матрицы. В соответствии с приведенным в этих работах определением рекуррентной называется матрица, в которой изначально задана одна или несколько первых строк, а следующие строки вычисляются как функции векторов, заданных предыдущими строками. Следуя этому определению, рекуррентную матрицу можно записать в виде аналитического выражения:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{\langle 1 \rangle} = & v_1, \mathbf{M}_{\langle 2 \rangle} = v_2, \dots, \mathbf{M}_{\langle n \rangle} = v_n, \\ \mathbf{M}_{\langle i \rangle} = & \mathbf{F}(i, \mathbf{M}_{\langle i-1 \rangle}, \mathbf{M}_{\langle i-2 \rangle}, \dots, \mathbf{M}_{\langle i-n \rangle})|_{\forall (i-n)}, \end{aligned} \quad (3)$$

где $\mathbf{M}_{\langle i \rangle}$ — вектор всех элементов строки i матрицы $\mathbf{M}$; $\mathbf{F}_M$ — функция над векторами $\mathbf{M}_{\langle i-1 \rangle}, \mathbf{M}_{\langle i-2 \rangle}, \dots, \mathbf{M}_{\langle i-n \rangle}$, которые являются предыдущими

ми строками матрицы $\mathbf{M}$. Функции, аналогичные $\mathbf{F}_M$, в теории матричного программирования называются вектор-функциями. Следовательно, вектор-функцией называется многомерная функция, аргументами которой являются либо элементы предыдущих строк формируемой рекуррентной матрицы, либо предварительно вычисленные элементы текущей строки [1—3].

Как показано в работах [1—3], использование вектор-функций для записи математических выражений в значительной степени упрощает постановку и решение задач логического программирования и реализацию численных методов для алгоритмов низкого и среднего уровней сложности. Для анализа алгоритмических особенностей рекуррентных матриц, вычисляемых с помощью (3), используются иерархические диаграммы с указанием на них рекуррентных и последовательных связей между элементами матрицы [3].

Для оценки потенциально возможного коэффициента распараллеливания p решаемой задачи также используются иерархические диаграммы. При этом рассматриваются все связи между элементами строк. Они разбиваются на отдельные потоки F , в которых выделяются подпотоки C . Если после разделения на подпотоки проведена усредненная оценка времени выполнения каждого подпотока t_i , тогда можно вычислить коэффициент распараллеливания p потока F [6]:

$$p = \frac{1}{\max_{i=1-n} N(F_i) \tau_i} \cdot \frac{1}{\sum_{i=1}^n N(F_i) \tau_i}, \quad (4)$$

где общее число подпотоков n соответствует суммарному числу связей с элементом вычисляемой рекуррентной матрицы; N — число иерархических связей для рассматриваемого элемента.

В работе [6] описаны исследования возможности использования формулы (4) для алгоритмов низкого и среднего уровней сложности, однако для алгоритмов высокого уровня сложности соответствующие оценки проведены не были. Рассмотрим возможности использования соотношения (3) для записи алгоритмов траекторного анализа, которые можно отнести к алгоритмам высокого уровня сложности. Алгоритмы траекторного анализа потоков заряженных частиц широко применяются при моделировании технологических источников электронов и ионов различного назначения, работающих на основе разных физических принципов [6, 8—14]. Такие алгоритмы используются также для решения сложных задач, связанных с моделированием газоразрядных приборов энергетической электроники.

Постановка задачи траекторного анализа и электронно-оптическое уравнение траекторий. В общем случае уравнение траекторий заряженных частиц в электрических и магнитных полях является следствием известного уравнения движения Ньютона [9—13]:

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a} = \frac{d\mathbf{p}}{dt}, \quad (5)$$

где $\mathbf{F}$ — сила, действующая на заряженную частицу; m — ее масса; $\mathbf{a}$ — ускорение; $\mathbf{p}$ — импульс; t — время движения частицы. Существенным недостатком уравнения движения заряженных частиц в форме (5) при подборе эффективных численных методов его решения является необходимость при поиске координат движения частиц r и z на каждом шаге интегрирования сначала вычислять время t как явный параметр уравнения (5). Для того чтобы избежать этого недостатка, в оптике заряженных частиц уравнение движения (5) обычно рассматривают совместно с законом сохранения энергии при движении частицы в электрическом поле [9—13]:

$$\frac{mv^2}{2} = qU, \quad (6)$$

где q — заряд частицы; U — разность потенциалов между начальной и конечной точками пролета заряженной частицы; v — скорость частицы.

В результате совместного решения уравнений (5), (6) записываем известное электронно-оптическое уравнение траекторий заряженных частиц, в котором отсутствует время как явный параметр движения [9—12]:

$$\frac{d^2r}{dz^2} = \frac{\left(\frac{\partial U(r, z)}{\partial r} - \frac{\partial U(r, z)}{\partial z} \cdot \frac{dr}{dz} \right) \left(1 + \left(\frac{dr}{dz} \right)^2 \right)}{\left(\sqrt{\frac{q_s (U(r, z) - U_{\text{и}})}{2m_s}} + 2(U(r, z) - U_{\text{и}}) \right)}, \quad (7)$$

где q_s — заряд частицы данного вида в анализируемом потоке; m_s — ее масса; $U(r, z)$ — потенциал в рассматриваемой точке, которая меняется в процессе интегрирования уравнения (7); $U_{\text{и}}$ — потенциал источника заряженных частиц данного сорта.

Если в технологических источниках электронов с нагреваемыми катодами потенциал $U_{\text{и}}$ всегда равен потенциалу катода $U_{\text{к}}$, то в источниках ионов и в источниках электронов с плазменными эмиттерами заряженных частиц потенциал $U_{\text{и}}$ принимает разные значения в зависимости от сорта частиц в анализируемом потоке [9—12]. Например, при расчете траекторий электронов и ионов в источниках электронов на основе высоковольтного тлеющего разряда (ВТР) в качестве эмиттера электронов

рассматривается катод с потенциалом U_k , а в качестве эмиттера ионов – поверхность анодной плазмы с потенциалом U_n . Для уравнения траекторий (7) с использованием численных методов решения дифференциальных уравнений второго порядка решается задача Коши при заданных начальных условиях [15]:

$$\left(\frac{dr}{dz}\right)\bigg|_{z=0} = v_0, \quad r|_{z=0} = r_0, \quad (8)$$

где r_0 и z_0 — начальные координаты рассматриваемой заряженной частицы на эмиттере; v_0 — ее начальная скорость. Для решения уравнений (7), (8) предварительно, с использованием итерационных методов вычислительной математики, рассчитываем распределение потенциала в анализируемой области.

Рассмотрим, как можно записать соответствующие итерационные уравнения с использованием математического аппарата матричного анализа, рекуррентных арифметико-логических выражений и вектор-функции.

Расчет распределения электрического поля в анализируемой области может быть проведен с использованием метода конечных разностей [6, 15, 16]. Известно, что конечно-разностный вариант уравнения Пуассона, описывающего распределение электрического поля в замкнутой области с заданными граничными условиями, в цилиндрической системе координат записывается в следующем виде [13, 15, 16]:

$$m = \begin{cases} 1, & \text{если } l = 0; \\ l-1, & \text{если } l > 0, \end{cases}$$

$$C_m = 1 + \frac{1}{2m}, \quad D_m = 1 - \frac{1}{2m},$$

$$U_{k,l} = f_1(k, l) = \frac{\frac{U_{k-1,l} + U_{k+1,l}}{h_r^2} + \frac{D_m U_{k,m} + C_m U_{k,l+1}}{h_z^2}}{\frac{2}{h_r^2} + \frac{2}{h_z^2}}, \quad l > 0,$$

$$U_{k,l} = f_2(k, l) = \frac{\frac{U_{k-1,l} + U_{k+1,l}}{h_r^2} + \frac{D_m U_{k,m} + C_m U_{k,l+1}}{h_z^2}}{\frac{2}{h_r^2} + \frac{2}{h_z^2}}, \quad l = 0,$$

где $U_{k,l}$ — рассчитываемое значение потенциала; k, l — номера узлов

сетки соответственно по координатам z и r ; h_z и h_r — шаг дискретизации области расчета потенциала соответственно по координатам z и r .

Общеизвестно, что при условии заданных значений потенциалов U_{Γ_1} , U_{Γ_2} , ..., U_{Γ_n} на границах рассчитываемой области Γ_1 , Γ_2 , ..., Γ_n либо в виде задачи Дирихле, либо в виде задачи Неймана [8, 17], итерационная система уравнений (9) является полной и замкнутой.

Предположим, что граница моделируемой системы описывается следующим выражением:

$$G = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \dots \cup \Gamma_n, \quad (10)$$

где n — общее число границ, описывающих рассматриваемую замкнутую область. В этом случае арифметико-логическое выражение для решения уравнений (9), (10) можно записать в общем виде:

$$U_{k,l} = (P_{k,l} \notin G)((l > 0) f_1(k, l) + (l = 0) f_2(k, l)) + \sum_{i=1}^n (P_{k,l} \in \Gamma_i) U_{\Gamma_i}, \quad l = 0 \dots L, k = 0 \dots K, \quad (11)$$

где L — число точек отсчета по координате r ; K — число точек отсчета по координате z ; $P_{k,l}$ — точка P в рассматриваемой области с координатами ($z = kh_z$, $r = lh_r$).

В работе [6] приведено арифметико-логическое выражение для расчета распределения электрического поля в электродной системе источников электронов на основе ВТР, которое может быть получено из обобщенного выражения (11):

$$U_{k,l} = \left((l > 0) \frac{\frac{U_{k-1,l} + U_{k+1,l}}{h_r^2} + \frac{D_m U_{k,m} + C_m U_{k,l+1}}{h_z^2}}{\frac{2}{h_r^2} + \frac{2}{h_z^2}} + \right. \\ \left. + (l = 0) \frac{\frac{U_{k-1,l} + U_{k+1,l}}{h_r^2} + \frac{4U_{k,l+1}}{h_z^2}}{\frac{2}{h_r^2} + \frac{4}{h_z^2}} \right) (U_{\Pi} < U_{k,l} < U_{\gamma}) + \\ + (U = U_{\Pi}) U_{\Pi} + (U < U_{\Pi}) \left(\frac{kh_r(U_{\gamma} - U_{\Pi})}{r_{\Pi} - r_{\gamma}} \right) + (U \geq U_{\gamma}) U_{\gamma}, \quad (12)$$

Рис. 2 Моделирование распределения электрического поля в электродных системах ВТР с анодной диафрагмой (а) и без диафрагмы (б)

где U_y — ускоряющее напряжение; U_n — потенциал анодной плазмы; r_n и r_a — соответственно положение плазменной границы и основания анода относительно начала системы координат.

Результаты расчета распределения электрического поля в электродной системе источника электронов ВТР, полученные с использованием соотношения (12) для различных граничных условий, приведены на рис. 2.

Оценку возможности распараллеливания итерационного алгоритма, заданного выражением (12), можно провести с использованием соотношения (4). Поскольку все связи между элементами $U_{k,l}$ в выражении (12) являются итерационными, очевидно, что коэффициент распараллеливания в данном случае равен единице, т.е. вычисления потенциала методом конечных разностей не могут быть распараллелены.

Существующие в настоящее время методы распараллеливания сеточных алгоритмов основаны на выделении подобластей, лежащих вблизи электродов, в которых потенциал может быть рассчитан одновременно. После этого выполняется сшивка и сглаживание решений, полученных для различных подобластей. Соответствующие итерационные алгоритмы подробно описаны в работе [18]. Для таких итерационных методов могут быть также записаны арифметико-логические выражения с использованием общего соотношения (11).

Формирование рекуррентной матрицы и вектор-функции для итерационного расчета траекторий заряженных частиц. Исключив из уравнения (7) переменную v_s , с использованием соотношения (6) перепишем его с учетом начальных условий (8):

$$\frac{d^2}{dz^2} = f\left(\frac{dr}{dz}\right) = \frac{\left(\frac{\partial U(r, z)}{\partial r} - \frac{\partial U(r, z)}{\partial z} \frac{dr}{dz}\right) \left(1 + \left(\frac{dr}{dz}\right)^2\right)}{\left(\sqrt{\frac{q_s(U(r, z) - U_M)}{2m_s}} + 2(U(r, z) - U_M)\right)}, \quad \frac{d\left(\frac{dr}{dz}\right)}{dz} = \frac{d^2 r}{dz^2},$$

$$\left(\frac{dr}{dz}\right)\Big|_{z=0} = v_0, \quad r|_{z=0} = r_0. \quad (13)$$

Найдем решение системы уравнений (13) с использованием метода Рунге — Кутты четвертого порядка [3, 16, 17] и запишем его в виде вектор-функции через формирование рекуррентной матрицы. Известно, что итерационные формулы для метода Рунге—Кутты записываются в общем виде так [16, 17]:

$$k_1 = f\left(z_n, \left(\frac{dr}{dz}\right)_n\right), \quad k_2 = f\left(z_n + \frac{\Delta z}{2}, \left(\frac{dr}{dz}\right)_n + \frac{\Delta z k_1}{2}\right),$$

$$k_3 = f\left(z_n + \frac{\Delta z}{2}, \left(\frac{dr}{dz}\right)_n + \frac{\Delta z k_2}{2}\right), \quad k_4 = f\left(z_n + \Delta z, \left(\frac{dr}{dz}\right)_n + \Delta z k_3\right), \quad (14)$$

$$\left(\frac{dr}{dz}\right)_{n+1} = \left(\frac{dr}{dz}\right)_n + \frac{\Delta z (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)}{6}, \quad z_{n+1} = z_n + \Delta z,$$

где Δz — шаг интегрирования по координате z . Систему уравнений (14) можно переписать с использованием рекуррентной матрицы, заданной соотношением (3), в виде

$$\begin{bmatrix} \left(\frac{dr}{dz}\right)_0 & z_0 & k_{1,0} & k_{2,0} & k_{3,0} & k_{4,0} \\ \left(\frac{dr}{dz}\right)_1 & z_1 & k_{1,1} & k_{2,1} & k_{3,1} & k_{4,1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \left(\frac{dr}{dz}\right)_n & z_n & k_{1,n} & k_{2,n} & k_{3,n} & k_{4,n} \end{bmatrix}. \quad (15)$$

С учетом соотношений (14) вектор-функция для формирования рекуррентной матрицы (15) записывается в следующем виде:

$$\left(\left(\frac{dr}{dz}\right)_i \quad z_i \quad k_{1,i} \quad k_{2,i} \quad k_{3,i} \quad k_{4,i}\right) = (i=0) \left(\left(\frac{dr}{dz}\right)_0, z_0, f\left(z_0, \left(\frac{dr}{dz}\right)_0\right), \dots\right),$$

$$\begin{aligned}
& f\left(z_0 + \frac{\Delta z}{2}, \left(\frac{dr}{dz}\right)_0 + \frac{\Delta z k_{1,0}}{2}\right), f\left(z_0 + \frac{\Delta z}{2}, \left(\frac{dr}{dz}\right)_0 + \frac{\Delta z k_{2,0}}{2}\right), \\
& f\left(z_0 + \Delta z, \left(\frac{dr}{dz}\right)_0 + \Delta z k_{3,0}\right) + (i > 0) \left(\left(\frac{dr}{dz}\right)_{i-1} + \right. \\
& \left. + \frac{\Delta z (k_{1,i-1} + 2k_{2,i-1} + 2k_{3,i-1} + k_{4,i-1})}{6}, z_{i-1} + \Delta z, f\left(z_i, \left(\frac{dr}{dz}\right)_i\right), \right. \\
& f\left(z_i + \frac{\Delta z}{2}, \left(\frac{dr}{dz}\right)_i + \frac{\Delta z k_{1,i}}{2}\right), f\left(z_i + \frac{\Delta z}{2}, \left(\frac{dr}{dz}\right)_i + \frac{\Delta z k_{2,i}}{2}\right), \\
& \left. f\left(z_i + \Delta z, \left(\frac{dr}{dz}\right)_i + \Delta z k_{3,i}\right) \right). \quad (16)
\end{aligned}$$

Матричное соотношение (16) является рекуррентным и все связи в матрице последовательные, поэтому коэффициент распараллеливания алгоритма, вычисляемый с использованием соотношения (4), также равен единице. Соответствующие вычислительные схемы для метода Рунге – Кутта приведены в работе [3]. Там же показана возможность распараллеливания вычислений по методу Рунге – Кутта на контейнерных вычислительных схемах, однако реализация такой возможности требует использования процессоров со специальной архитектурой. Кроме того, общеизвестным недостатком контейнерных вычислительных схем является то, что ускорение времени выполнения вычислений существенно ограничено временем срабатывания каждого из последовательно соединенных вычислительных блоков.

Тем не менее, решение уравнения (13) с использованием матричных функций, заданных соотношениями (14), (15), может быть распараллелено для различных траекторий частиц. В тестовом примере для источника электронов на основе ВТР рассчитано 500 траекторий для ионов, эмитируемых с границы анодной плазмы, и для электронов, эмитируемых под действием электронной бомбардировки с поверхности холодного катода. Другие методы расчета траекторий заряженных частиц в электрических полях, которые также могут быть распараллелены, описаны в работе [13].

Матричные соотношения и арифметико-логические выражения для определения распределения плотности тока в фокусе формируемого электронного пучка. Алгоритм поиска положения фокуса элект-

тронного пучка, его фокального диаметра и распределения плотности тока пучка в его фокусе, основанный на решении задачи дрейфа потока электронов в квазинейтральной анодной плазме с помощью численных методов решения экстремальных задач [19], предложен в работе [20]. Этот алгоритм записывается в виде следующих итерационных соотношений [20]:

$$\begin{aligned}\Theta_{\min} &= 2\operatorname{atan}\left(\frac{10^{-4} z_a^{4/3}}{2\gamma\beta^2}\right); \quad \Theta_{\max} = 2\operatorname{atan}\left(\frac{e^2 z_a^{3/2}}{m_i v^2 r_{\Pi}(i)}\right); \quad v = \sqrt{\frac{2eU_y}{m_i}}; \\ dL &= h_z \sqrt{1 - \tan^2(\varphi)}; \quad d\theta = \frac{4z_a(z_a + 1) r_e^2 \gamma^2}{(\gamma^2 - 1)^2} n_0 dL \ln\left(\frac{\Theta_{\min}}{\Theta_{\max}}\right); \\ dz &= R_k - d_{\text{к.п}} + \sqrt{(R_k - d_{\text{к.п}})^2 - (r_0(k))^2}; \\ \varphi(i, k) &= \varphi(i, k - 1) + d\theta; \quad j_{\Pi}^{\max}(k) = \max_{i \in \Omega_i} [j_{\Pi}(i, k)];\end{aligned}$$

$$r_{\Pi}(k) = \arg [0, 7 j_{\Pi}^{\max}(k)]; \quad d_{\Pi} = 2 \min_{k \in \Omega_k} [r_{\Pi}(k)]; \quad F_{\Pi} = d_{\text{к.п}} + \arg \min_{k \in \Omega_k} [r_{\Pi}(k)] h_z,$$

где i и k — параметры дискретизации области дрейфа по координатам r и z ; r_{Π} — радиус формируемого электронного пучка в соответствующей плоскости по координате z ; γ — релятивистский фактор; v — скорость электронов; β — отношение скорости электронов к скорости света; R_k — радиус сферы катода; $d_{\text{к.п}}$ — расстояние от поверхности катода до границы анодной плазмы; r_e — радиус электрона в соответствии с моделью Бора; Z_a — заряд ядра атомов рабочего газа; n_0 — концентрация атомов газа; φ — входной угол электронов пучка; θ — угол рассеяния электронов. Входной угол траекторий электронов пучка φ определен в результате расчета траекторий электронов в электрическом поле катодного падения потенциала, соответствующий алгоритм расчета описан выше.

В соответствии с соотношениями (17) рекуррентную матрицу для поиска фокальных параметров формируемого электронного пучка можно записать в виде

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \Theta_{\max 0} & dL_0 & d\theta_0 & dz_0 & \varphi_0 & j_{\Pi 0} & r_{\Pi 0} & d_{\Pi 0} & F_{\Pi 0} \\ \Theta_{\max 1} & dL_1 & d\theta_1 & dz_1 & \varphi_1 & j_{\Pi 1} & r_{\Pi 1} & d_{\Pi 1} & F_{\Pi 1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Theta_{\max n} & dL_n & d\theta_n & dz_n & \varphi_n & j_{\Pi n} & r_{\Pi n} & d_{\Pi n} & F_{\Pi n} \end{bmatrix}. \quad (18)$$

Рис. 3. Графики распределения плотности тока в фокальной плоскости электронного пучка при ускоряющем напряжении: 1 — 20 кВ; 2 — 15 кВ; 3 — 10 кВ; давление в разрядной камере — 3,5 Па

Формулы, в соответствии с которыми вычисляются элементы рекуррентной матрицы (18), полностью соответствуют соотношениям (17). Постоянные величины $\Theta_{\min}$ и ν не входят в матрицу $\mathbf{M}$, определяемую формулой (18).

Строки рекуррентных матриц вычисляются с использованием соотношений (17), (18). Сначала вычисляется матрица $\mathbf{M}$ для одной траектории, потом для следующей и так далее. Эти вычисления могут проводиться независимо и параллельно. Более того, параллельно могут вычисляться все элементы каждой строки матрицы $\mathbf{M}$. Таким образом, массив значений $\mathbf{M}$ можно рассматривать как трехмерный массив размером $9 \times n \times i$.

Минимальный радиус электронного пучка и максимальную плотность тока (рис. 3) находят по страницам массива $\mathbf{M}$, номера которых определяются дискретной переменной $j - 2 \dots i$ с использованием стандартных методов поиска экстремума в заданной совокупности числовых данных [19]. В работах [1, 2] приведены следующие арифметико-логические выражения для поиска минимальных и максимальных величин $x_{\max}$ и $x_{\min}$, которые в данном случае можно использовать для обработки значений массива $\mathbf{M}$:

$$\begin{aligned} x_{\max}(1) &= x(1), \quad x_{\max}(j) = (x(j) \geq x_{\max}(j-1)) x(j) + \\ &+ (x(j) < x_{\max}(j-1)) x_{\max}(j-1), \quad j = 2 \dots i, \\ x_{\min}(1) &= x(1), \quad x_{\min}(j) = (x(j) \leq x_{\min}(j-1)) x(j) + \\ &+ (x(j) > x_{\min}(j-1)) x_{\min}(j-1), \quad j = 2 \dots i. \end{aligned} \quad (19)$$

Будем условно считать, что на вычисление всех элементов трехмерного массива $\mathbf{M}$ и на поиск максимальных и минимальных значений расходуется приблизительно одинаковое время. Тогда суммарный коэффициент распараллеливания рассматриваемого алгоритма является доста-

точно высоким и составляет

$$p \approx \frac{1}{1 - \frac{9i}{3 + 9i}} = \frac{1}{1 - \frac{3i}{1 + 3i}}.$$

Графики распределения плотности тока электронного пучка в фокусе $j(r)$, полученные с использованием арифметико-логических выражений и рекуррентных матричных соотношений (12)—(19) для моделируемой электродной системы ВТР, приведены на рис. 3.

Выводы

Проведенные теоретические исследования и вычислительные эксперименты показали, что при соответствующей систематизации входных, внутренних и выходных переменных, а также при правильном выборе способа построения матрицы рекуррентные матричные вычисления и арифметико-логические выражения могут быть целенаправленно использованы для записи алгоритмов высокого уровня сложности, которые применяются для решения сложных физических задач, связанных с компьютерным моделированием электронных процессов и устройств. Описанный подход является в достаточной степени универсальным и может быть использован для моделирования многих других типов энергетических и технологических электронных устройств с использованием стандартных методов траекторного анализа.

Предлагаемая методика расчета реализована с использованием стандартных и дополнительно разработанных средств программирования системы научно-технических расчетов MatLab [1—3]. Несомненным преимуществом рассмотренных методов матричного программирования является простота записи матричных выражений и их соответствие лингвистическим конструкциям многих современных языков программирования. Использование рекуррентных матриц и арифметико-логических выражений позволяет в ряде случаев избежать необходимости построения вложенных циклических структур и условных операторов, усложняющих написание, отладку и понимание сложных программных комплексов, создаваемых с использованием известных современных средств структурного, функционального и объектно-ориентированного программирования.

Предложенный универсальный подход к решению задачи траекторного анализа представляет большой практический интерес для широкого круга специалистов, занимающихся моделированием и проектированием высоковольтных и сильноточных вакуумных и газоразрядных устройств различного функционального назначения.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мельник *І.В.* Система науково-технічних розрахунків MatLab та її використання для розв'язання задач із електроніки. Навч. посіб. у 2-х томах. Т. 2. Основи програмування та розв'язання прикладних задач. Київ: Університет «Україна», 2009, 327 с.
2. Мельник *И.В.* Анализ возможностей использования матричных макроопераций системы MatLab при решении прикладных задач // Электрон. моделирование, 2009, **31**, № 3, с. 37—51.
3. Мельник *И.В.*, Шинкаренко *Н.В.* Анализ алгоритмических особенностей вычислительных матриц при решении задач программирования средствами матричных макроопераций. // Там же, 2011, **33**, № 2, с. 81—92.
4. Вандер Плас Дж. Python для сложных задач: наука о данных и машинное обучение. СПб.: Питер, 2016, 576 с.
5. Мюллер А., Ван Россум Г. Введение в машинное обучение с помощью Python. М.: Издательский дом «Вильямс», 2017, 480 с.
6. Мельник *И.В.*, Лунтовский *А.О.* Использование параллельных вычислений для моделирования технологических газоразрядных источников электронов // Электрон. моделирование, 2016, **38**, № 3, с. 5—21.
7. Бронштейн *И.Н.*, Семендяев *К.А.* Справочник по математике. Для инженеров и учащихся втузов. М.: «Наука», 1986, 723 с.
8. Шиллер З., Гайзиг У., Панцер З. Электронно-лучевая технология. М.: Энергия, 1980, 528 с.
9. Молоковский *С.И.*, Сушков *А.Д.* Интенсивные электронные и ионные пучки. М.: Энергоатомиздат, 1991, 304 с.
10. Силады М. Электронная и ионная оптика. М.: Мир, 1990, 639 с.
11. Хокс П., Каспер Э. Основы электронной оптики. Том 1: Основы геометрической оптики. М.: Мир, 1993, 552 с.
12. Хокс П., Каспер Э. Основы электронной оптики. Том 2: Прикладная геометрическая оптика. М.: Мир, 1993, 477 с.
13. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987, 640 с.
14. Завьялов *М.А.*, Крейндель *Ю.Е.*, Новиков *А.А.*, Шантурин *Л.П.* Плазменные процессы в технологических электронных пушках. М.: Атомиздат, 1989, 256 с.
15. Ильин *В.П.* Численные методы решения задач электрофизики. М.: Наука, 1985, 336 с.
16. Мэтьюз Д.Г., Финк К.Д. Численные методы. Использование MATLAB. М.: Вильямс, 2001, 720 с.
17. Самарский *А.А.*, Гулин *А. В.* Численные методы: Учеб. пособие для вузов. М.: Наука, 1989, 432 с.
18. Медведев *А.В.*, Свешников *В.М.*, Турчановский *И.Ю.* Распараллеливание решения краевых задач на квазиструктурированных сетках с использованием гибридных вычислений CPU+GPU // Вестник новосибирского государственного университета. Информационные технологии, 2014, **12**, № 1, с. 50—54.
19. Васильев *Ф.П.* Численные методы решения экстремальных задач. М.: Наука, 1988, 552 с.
20. Мельник *И.В.* Численное моделирование распределения электрического поля и траекторий частиц в источниках электронов на основе высоковольтного тлеющего разряда. // Изв. высших учебных заведений. Радиоэлектроника, 2005, **48**, № 6, с. 61—71.

Получена 08.11.19

REFERENCES

1. Melnyk, I.V., (2009), *Systema naukovo-technichnyh rozrahunkiv MatLab ta ii vykorystannnya dlya rozvyazannya zadach iz elektroniky: navchalnyy posibnyk u dvoh tomah. Tom 2. Osnovy programuvannya ta rozvyazannya prukladnyh zadach* [The System of Scientific and technical calculation MatLab and its using for solving the tasks if electronics: Tutorial Book in 2 volumes. Vol. 2. Fundamentals of Programming and Solving of Applied Tasks], University "Ukraine", Kyiv, Ukraine.
2. Melnyk, I.V., (2009), "Analyze of Using Matrix Macrooperation of MatLab System for Solving the Applied Tasks", *Elektronnoe Modelirovanie*, Vol. 31, no 1, pp. 37-51.
3. Melnyk, I.V. and Shinkarenko, N.V., (2011), "Analyze of Algorithmic Particularities of Calculated Matrixes for Solving the Programming Tasks by means of Matrix Macrooperation", *Elektronnoe Modelirovanie*, Vol. 33, no 2, pp. 81-92.
4. Plas, V.G. (2016), *Python dlya slozhnyh zadach i mashinnoe obuchenie* [Python for Complex Tasks and Computer Learning], Piter, St. Petersburg, Russia.
5. Muller, A. and Van Rossum, G. (2017), *Vvedenie v mashinnoe obuchenie s pomoschyu Python* [Introducing to Computer Learning with Helping of Python], Izdatelskiy Dom "Williams", Moscow, Russia.
6. Melnyk, I.V. and Luntovskiy, A.O. (2016), "Analyze of Algorithmic Particularities of Calculated Matrixes for Solving the Programming Tasks by means of Matrix Macrooperation", *Elektronnoe Modelirovanie*, Vol. 38, no 3, pp. 5-21.
7. Bronshtein, I.N. and Semendiaev, K.A. (1986), *Spravochnik po matematike. Dlia inzhenerov i uchashchihsya vuzov* [Reference Book on Mathematic. For Engineers and Students of Technical Institutions], Nauka, Moscow, Russia.
8. Shiller, Z., Geizig, U. and Pantser, Z. (1980), *Elektronno-luchevaia tehnologiia* [Electron-Beam Technology], Energiya, Moscow, Russia.
9. Molokovskiy, S.I. and Sushkov, A.D. (1991), *Intensivnye elektronnye i ionnye puchki* [Intensive Electron and Ion Beams], Energoatomizdat, Moscow, Russia.
10. Siladii, M. (1990), *Electronnaya i ionnaya optika* [Electronic and Ion Optics], Mir, Moscow, Russia.
11. Hocks, P. and Kasper, E. (1993), *Osnovy elektronnoi optiki. Tom 1. Osnovy geometricheskoy optiki* [Fundamentals of Electron Optics. Vol. 1. Fundamentals of Geometrical Optics], Mir, Moscow, Russia.
12. Hocks, P. and Kasper, E. (1993), *Osnovy elektronnoi optiki. Tom 2. Prikladnaia geometricheskaia optika* [Fundamentals of Electron Optics. Vol. 2. Applied Geometrical Optics], Mir, Moscow, Russia.
13. Hockney, R. and Eastwood, J. (1988), *Computer Simulation Using Particles*, London, CRC Press.
14. Zavialov, M.A., Kreindel, Yu. E., Novikov, A.A. and Shanturin L.P. (1989), *Plazmennye Protsessy v Technologicheskikh Electronnykh Pushkah* [Plasma Processec in Technological Electron Guns], Energoatomizdat, Moscow, Russia.
15. Illin, V.P. (1985), *Chislennye Metody Resheniya Zadach Elektrofiziki* [Numerical Methods for Solving Electrophysic Problems], Nauka, Moscow, Russia.
16. Mathius, D.G. and Fink, K.D., (2001), *Chislennye metody. Ispolzovanie MATLAB* [Numerical Methods. Using MATLAB], Izdatelskiy Dom "Williams", Moscow, Russia.
17. Samarskiy, A.A. and Gulin, A.V., (1989), *Cyslennye metody. Uchebnoe posobie dlia vuzov* [Numerical Methods. Tutorial Book for Students of Technical Institutions], Nauka, Moscow, Russia.

18. Medvedev, A.V., Sveshnikov, V.M. and Turchanovskiy, P.Yu. (2014), "Parallelization of solving the boundary tasks on the quasistucture meshes with using of hybrid calculations CPU+GPU", *Vestnik Novosibirskogo Gosudarstvennogo Universiteta. Vypusk: Informatsionnye tehnologii*, Vol. 12, no 1, pp. 50-54.
19. Vasiliev, F.P. (1988), *Cyslennyye metody resheniya ekstremal'nykh zadach* [Numerical Methods for Solving of Extremal Problems], Nauka, Moscow, Russia.
20. Melnyk, I.V., (2005), "Numerical simulation of electric fields distribution and trajectories of charged particles at the high voltage glow discharge electron sources", *Izvestiya Vysshikh uchebnykh zavedeniy. Radioelektronika*, Vol. 58, no 6, pp. 61-71.

Received 08.11.19

I.V. Мельник, А.В. Починок

ВИКОРИСТАННЯ МАТРИЧНИХ АЛГОРИТМІВ
ДЛЯ РОЗРАХУНКУ ТРАЄКТОРІЙ ЗАРЯЖЕНИХ ЧАСТОК
І ВИЗНАЧЕННЯ ФОКАЛЬНИХ ПАРАМЕТРІВ ЕЛЕКТРОННОГО ПУЧКА

На основі аналізу базових положень теорії матричного програмування і арифметико-логічних виразів показано, що існуючі методи матричного програмування, пов'язані з формуванням рекурентних матриць, можуть бути ефективно використані для комп'ютерної реалізації алгоритмів високого рівня складності. Такі алгоритми широко застосовуються для вирішення задач моделювання складних фізичних процесів, які відбуваються в енергетичних і технологічних газорозрядних пристроях великої потужності. Отримано арифметико-логічні та рекурентні матричні співвідношення для розрахунку розподілення потенціалу методом кінцевих різниць і траєкторій заряджених часток з використанням методу Рунге–Кутта четвертого порядку. З використанням рекурентних матричних співвідношень запропоновано алгоритм визначення положення фокусу електронного пучка в іонізованому квазінейтральному середовищі. На основі методів аналізу особливостей рекурентних матриць надано теоретичні оцінки можливості розпаралелювання запропонованих алгоритмів. Отримані аналітичні співвідношення успішно використовуються для моделювання електродних систем технологічних джерел електронів на основі високовольтного тліючого розряду. Наведено результати розрахунків розподілення електричного поля в електродній системі, яка моделювалася, та розподілу густини струму електронного пучка в його фокальній площині. Отримані аналітичні співвідношення, основані на теорії математичної логіки та алгоритмах матричного аналізу, є досить універсальними та можуть без суттєвих змін бути використані для моделювання газорозрядних пристроїв іншого типу як енергетичних, так і технологічних.

К л ю ч о в і с л о в а: рекурентна матриця, арифметико-логічний вираз, вектор-функція, траєкторний аналіз, технологічні джерела електронів, високовольтний тліючий розряд.

I.V. Melnyk, A.V. Pochynok

USING OF MATRIX ALGORITHMS FOR CALCULATION
OF TRAJECTORIES OF CHARGED PARTICLES
AND FOR DEFINING PARAMETERS OF ELECTRON BEAM

In the article, on the background of analyzing the basic definitions of matrix programming theory and the arithmetic-logic relations, is shown, that the corresponded methods of matrix programming, based on the forming of recurrent matrices, can be effectively used for computer realization of complex algorithms with high level of difficulty. Such algorithms are widely used for solving the tasks of simulation of complex physical processes, taking place in powerful energetic and technological gas-discharge devices. The arithmetic-logic and recurrent matrices relations for calculation of potential distribution with using finite-difference method and for calculation of the charged particles trajectories with using four order Runge – Kutt method have been obtained. Also, with using of recurrent matrices relations, the algorithm for defining the position of electron beam focus during moving of the electrons' in the ionized quasi-neutral medium have been written. Proposed analytical relations have been successfully used for simulation of electrodes' systems of high voltage glow discharge technological electron sources. The results of calculation of electric field distribution in the simulated electrodes' system and electron beam current density distribution at the beam focal plane are presented. Obtained analytical relations, based on the theory of mathematical logic and on the matrices analyze algorithm, is quite universal, and its can, without significant modification, be used for simulation other types of gas-discharge devices, including energetic and technological ones.

Key words: recurrent matrixes, arithmetic-logic relation, vector-function, field problem, trajectory analyze, technological electron sources, high voltage glow discharge

МЕЛЬНИК Игорь Витальевич, д-р тех. наук, профессор кафедры электронных приборов и устройств факультета электроники Национального технического университета Украины «Киевский политехнический институт им. Игоря Сикорского». В 1989 г. окончил Киевский политехнический ин-т. Область научных исследований — моделирование электронно-лучевых технологических устройств, теория газового разряда, программирование и теория алгоритмов.

ПОЧИНОК Алина Владимировна, канд. техн. наук, доцент кафедры информационных систем и технологий Учебно-научного института информационных технологий Университета государственной фискальной службы Украины. В 2007 г. закончила Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина. Область научных исследований — математическое моделирование и создание компьютерных программ для моделирования результатов научных измерений, развитие методов и программного обеспечения для математической обработки научных данных.