НАУЧНОЕ ПРИБОРОСТРОЕНИЕ, 1998 том 8, № 1-2 с. 21-26

ОРИГИНАЛЬНЫЕ СТАТЬИ

УДК 537.533.3+621.387

УЧЕТ ОСОБЕННОСТЕЙ ПЛОТНОСТИ ПОВЕРХНОСТНОГО ЗАРЯДА В АЛГОРИТМЕ ПОЛУЧЕНИЯ ПРЕДЕЛЬНОЙ ТОЧНОСТИ В РАСЧЕТАХ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ В ЭЛЕКТРОННО- И ИОННО-ОПТИЧЕСКИХ ПРИБОРАХ, ИМЕЮЩИХ ПЛОСКУЮ СИММЕТРИЮ.

© С.И.Шевченко

Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург.

Поступила в редакцию 23 декабря 1997г.

Анализируются причины, приводящие к потере точности в электростатических расчетах элементов электронно- и ионно-оптических приборов, имеющих плоскую симметрию. Формулируется алгоритм, позволяющий учесть эти причины и уменьшить их вклад в ошибку расчетов. Учитываются особенности плотности поверхностного заряда на концах и изломах электродов.

1. ВВЕДЕНИЕ

Данная работа представляет собой продолжение работы [1]. В ней рассматривается влияние особенностей плотности поверхностного заряда (ППЗ) на алгоритм вычисления электростатического поля.

Как показано в [2], плотность поверхностного заряда σ может иметь особенности на концах и изломах электродов. Поэтому при разбиении электродов на отрезки (участки), следует следить, чтобы все концы и изломы электродов являлись концами отрезков.

ППЗ σ на одном таком отрезке границы (ОГ) можно представить в виде [3]:

$$\sigma(\ell)=\frac{\tilde{\sigma}(\ell)}{\left(\frac{\ell}{d}\right)^{k1}\left(1-\frac{\ell}{d}\right)^{k2}}, \qquad (1)$$

где $\tilde{\sigma}(\ell)$ — некоторая гладкая функция от (ℓ), называемая иногда модифицированной функцией плотности поверхностного заряда (МФППЗ), κ_1 и κ_2 показатели сингулярности поверхностного заряда в точках концов и изломов электродов, определяемые по формуле:

$$\kappa=\frac{\pi-\omega}{2\pi-\omega},$$

где ω — угол в концевой точке отрезка, образуемый продолжением данного отрезка и продолжением следующего (или предыдущего).

Выражение для вклада в потенциал от одного отрезка границы с ППЗ в виде (1) имеет вид:

$$\varphi_p(\vec{r}_0)=\int_0^d \tilde{\sigma}(\ell)G(\vec{r},\vec{r}_0)\frac{d\ell}{\left(\frac{\ell}{d}\right)^{\kappa_1}\left(1-\frac{\ell}{d}\right)^{\kappa_2}}, \qquad (2)$$

где функция Грина в рассматриваемом случае плоской геометрии имеет вид:

$$G(\vec{r},\vec{r}_0)=-\ln\left|\vec{r}-\vec{r}_0\right|=-0{,}5\ln\left|(x-x_0)^2+(y-y_0)^2\right|. \qquad (3)$$

Стоящее в правой части (3) под знаком логарифма выражение ниже будем обозначать следующим образом

$$L^{(2)}=(x-x_0)^2+(y-y_0)^2. \qquad (4)$$

Как было показано ранее в [1], функция $L^{(2)}$ для ОГ в виде отрезка прямой линии имеет вид

$$L^{(2)}=(\ell-\ell_0)^2+\delta^2=d^2[(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2],$$

где d — длина ОГ, $\delta_1=\delta/d$, $\zeta=\ell/d$, $\zeta_0=\ell_0/d$.

Т.е. функция $L^{(2)}$ имеет два комплексно-сопряженных корня $\varsigma=\varsigma_0\pm i\delta_1$. Если в качестве ОГ используется некоторая гладкая линия, то, как показано в [1], во всех встретившихся нам на практике ОГ функция $L^{(2)}$ была представима в виде

$$L^{(2)}=[(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2]P(\varsigma), \qquad (5)$$

где $\varsigma=\varsigma_0\pm i\delta_1$ — ближайшие к отрезку $\zeta=[0,1]$ комплексно-сопряженные корни функции $L^{(2)}$, $P(\zeta)$ — гладкая на отрезке $\zeta=[0,1]$ функция, все корни которой лежат вдали от этого отрезка.

Поэтому ниже мы рассмотрим только случай, когда функция $L^{(2)}$ представима формулой (5). В этом случае ядро G принимает в вид

$$G(\vec{r},\vec{r}_0)=-0{,}5\ln|P(\varsigma)|-0{,}5\ln[(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2], \qquad (6)$$

причем, т.к. функция $P(\zeta)$ является гладкой вблизи отрезка $\zeta=[0,1]$ и значения ее не равны нулю, то и логарифм от этой функции можно считать вблизи этого отрезка гладкой функцией.

Если под знаком интеграла в (2) перейти к безразмерной переменной $\zeta=\ell/d$, то правую часть равенства (2) можно переписать в более удобном виде

$$\delta\varphi_p(\vec r_0) = -0{,}5d\int_0^1 \tilde\sigma(\varsigma)\ln\left|L^{(2)}(\vec r_0,\vec r)\right|\frac{d\varsigma}{\varsigma^{\kappa_1}(1-\varsigma)^{\kappa_2}}. \quad (7)$$

Сразу видно отличие рассматриваемого в данной работе случая от случая работы [1], в которой под знаком интеграла могла появляться только одно особая точка (логарифмическая сингулярность), связанная с ядром. Причем она появлялась только, если интегрирование велось вдоль ОГ, содержащего точку наблюдения, или вдоль ОГ, соседнего к ОГ, содержащему точку наблюдения. В данной работе под знаком интеграла в формуле (7) всегда содержатся две сингулярные точки, связанные с сингулярностью ППЗ на краях рассматриваемого ОГ, и может присутствовать или отсутствовать сингулярность функции Грина. Это вносит значительную сложность в алгоритм. Ниже мы рассмотрим обе эти возможности.

Дополнительные сингулярности, связанные с поведением ППЗ на концах и изломах электродов, были рассмотрены в [3, 4], где использовалась методика понижения особенности интегрируемой функции, подробности которой можно найти в [5]. При этом особенность переводились из интегрируемой функции в ее первую производную. Это, очевидно, не могло обеспечить хорошую точность вычислений. Кроме того, значительно замедляло вычисления.

В данной работе мы применим метод, описанный в [5]. В этом методе функции, стоящие в (2) в знаменателе, переводятся в "весовую функцию" правила численного интегрирования. Поэтому сингулярность остается только в ядре.

2. ПОД ИНТЕГРАЛОМ ПРИСУТСТВУЮТ ТОЛЬКО СИНГУЛЯРНОСТИ ППЗ

Рассматриваемый случай, очевидно, реализуется когда точка наблюдения находится достаточно далеко от рассматриваемого ОГ. Функцию Грина в этом случае можно считать достаточно гладкой. Функцию, несущую сингулярности ППЗ $\sigma(\zeta)$ на концах и изломах электродов, включим в весовую функцию "правила" численного интегрирования [5]

$$p(\varsigma) = \frac{1}{\varsigma^{\kappa_1}(1-\varsigma)^{\kappa_2}}. \quad (8)$$

В результате этого мы приходим к численному интегрированию в (7) гладкой функции по "правилу" типа Гаусса:

$$\delta\varphi_p(\vec r_0) = -0{,}5d\sum_{k=1}^{N_g} A_k\tilde\sigma(\varsigma_k)\ln\left|L^{(2)}(\varsigma_k)\right|, \quad (9)$$

где N_g — порядок численной квадратуры, A_k — коэффициенты и ζ_k — узлы численной квадратуры.

При нахождении коэффициентов матрицы, в выражении (9) собираем вместе все члены при каждом $\tilde\sigma(\varsigma_k)$. Это и будут коэффициенты матрицы. Они образуют квадратную плотную матрицу. Получившееся матричное уравнение решаем методом исключения Гаусса с выбором ведущего элемента. В результате получаем набор (массив) значений ФМППЗ $\tilde\sigma(\varsigma)$ в точках коллокации.

При вычислении потенциала φ (или $E^{(x)}$, $E^{(y)}$) известные значения МФППЗ $\tilde\sigma(\varsigma)$ подставляются в выражение (9) для вклада от одного ОГ, затем такие вклады вдоль всей границы суммируются, в результате чего получается искомый потенциал.

3. УЧЕТ ВСЕХ СИНГУЛЯРНОСТЕЙ ИНТЕГРИРУЕМОЙ ФУНКЦИИ

Когда точка наблюдения r_0 находится близко от отрезка интегрирования или непосредственно на нем, то функцию Грина уже нельзя считать достаточно гладкой для проведения численной квадратуры по "правилу" типа Гаусса. Для такого случая в [5] предложен общий подход — метод понижения степени многих особенностей интегрируемой функции.

Рассмотрим выражение для вклада в потенциал φ от одного ОГ (7) с ядром в виде (6)

$$\delta\varphi_p(\vec r_0) = -0.5d\int_0^1 \tilde\sigma(\varsigma)\ln[(\varsigma_k-\varsigma_0)^2+\delta_1^2]\frac{d\varsigma}{\varsigma^{\kappa_1}(1-\varsigma)^{\kappa_2}}$$

$$-0.5d\int_0^1 \tilde\sigma(\varsigma)\ln\left|P(\varsigma)\right|\frac{d\varsigma}{\varsigma^{\kappa_1}(1-\varsigma)^{\kappa_2}}. \quad (10)$$

Как и в п.2, функцию $\sigma(\zeta)$ (8) включаем в вес для "правила" численного интегрирования типа Гаусса. Поэтому в первом члене правой части (10) следует учитывать только одну (логарифмическую) сингулярность, а во втором члене рассматривать только гладкую функцию.

В первом члене правой части (10) для понижения степени сингулярности проводим преобразование подынтегральной функции

$$\delta\varphi_p(\vec r_0) = -0.5d\int_0^1[\tilde\sigma(\varsigma) - RT(\tilde\sigma(\varsigma))_{N_i}]\ln[(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2]\frac{d\varsigma}{\varsigma^{\kappa_1}(1-\varsigma)^{\kappa_2}} -$$

$$-0.5d\int_0^1 RT(\tilde\sigma(\varsigma))_{N_i}]\ln[(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2]\frac{d\varsigma}{\varsigma^{\kappa_1}(1-\varsigma)^{\kappa_2}} - 0.5d\int_0^1\tilde\sigma(\varsigma)\ln\left|P(\varsigma)\right|\frac{d\varsigma}{\varsigma^{\kappa_1}(1-\varsigma)^{\kappa_2}}, \quad (11)$$

где $RT(\tilde{\sigma}(\varsigma))_{N_i}$ — ряд Тэйлора от функции $\tilde{\sigma}(\varsigma)$, ограниченный (обрезанный) членами (N_i-1)-го порядка.

Под знаком первого интеграла стоит функция (N_i-1)-гладкая (член $1/(\varsigma^{\kappa_1}(1-\varsigma)^{\kappa_2}$ считаем включенным в вес), т.е. все производные до (N_i-1) порядка существуют и непрерывны [5]. Поэтому, хотя эта функция и не удовлетворяет полностью условию применимости "правила" численной квадратуры типа Гаусса, однако точность вычисления оказывается значительно выше, чем при непосредственном вычислении по формуле (2).

Используем далее показанную в [5] эквивалентность обрезанного ряда Тэйлора и интерполяционного полинома. Заменим в выражении (11) ряд Тэйлора $RT(\tilde{\sigma}(\varsigma))_{N_i}$ на интерполяционный полином $\{\tilde{\sigma}(\varsigma)\}_{N_i}$, который имеет вид

$$\{\tilde{\sigma}(\varsigma)\}_{N_i}=\sum_{i=1}^{N_i}\tilde{\sigma}(\varsigma_i)\sum_{j=1}^{N_i}\tau_{i,j}(\varsigma-\varsigma_0)^{j-1}, \tag{12}$$

где $\tilde{\sigma}(\varsigma)$ — значения МФППЗ в точках коллокации, принадлежащих шаблону интерполяции, N_i — число точек в шаблоне интерполирования, $\tau_{i,j}$ — коэффициенты.

Эти коэффициенты $\tau_{i,j}$ можно вычислять для всей геометрии один раз при обработке геометрической информации. Значения МФППЗ $\tilde{\sigma}(\varsigma)$ считаются неизвестными при нахождении коэффициентов матрицы и известными при вычислении параметров электростатического поля (φ, $E^{(x)}$, $E^{(y)}$).

Подставляем выражение (12) в (11) и после некоторых преобразований (подобных преобразованиям в [1]) для вклада в потенциал φ от одного ОГ получаем

$$\begin{aligned}\delta\varphi_p(\vec{r}_0)=&-0.5\sum_{k\neq L_1}^{N_g}A_k\tilde{\sigma}(\varsigma_k)\ln\left|L^{(2)}(\varsigma_k)\right|-0.5\sum_{k=L_1}^{N_g}A_k\tilde{\sigma}(\varsigma_k)\ln\left|P(\varsigma_k)\right|+0.5d\sum_{k\neq L_1}^{N_g}A_k\sum_{i=1}^{N_i}\tilde{\sigma}(\varsigma_i)\sum_{j=1}^{N_i}\tau_{i,j}(\varsigma_k-\varsigma_0)^{j-1}\ln[(\varsigma_k-\varsigma_0)^2+\delta_1^2]-\\&-0.5d\sum_{i=1}^{N_i}\tilde{\sigma}(\varsigma_i)\sum_{j=1}^{N_i}\tau_{i,j}\int_0^1(\varsigma-\varsigma_0)^{j-1}\ln\left[(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2\right]\frac{d\varsigma}{\varsigma^{\kappa_1}(1-\varsigma)^{\kappa_2}},\end{aligned} \tag{13}$$

где L_1 — массив номеров точек коллокации, принадлежащих шаблону интерполяции.

В выражении (13) функция $P(\zeta)$ считается известной, но пока не определена. Определим ее в виде

$$P(\varsigma)=\frac{L^{(2)}(\varsigma)}{(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2}$$

с учетом того, что в точке ($\zeta=\zeta_0$, $\delta_1=0$) $P(\zeta)=1$.

Последний интеграл в выражении (13) имеет три точки сингулярности ($\zeta=0,1,\zeta_0$), ("вес" учитываем) и не является аналитически интегрируемым. Применим к нему метод понижения степени многих особенностей интегрируемой функции [5]. Заметим, что функции, несущие сингулярности, заданы аналитически, поэтому их можно дифференцировать аналитически любое число раз и, соответственно, проводить разложение в ряд Тэйлора до любой степени.

Проводим преобразования с интегралом в правой части соотношения (13)

$$\begin{aligned}J(j)=&\int_0^1\frac{(\varsigma-\varsigma_0)^{j-1}}{\varsigma^{\kappa_1}(1-\varsigma)^{\kappa_2}}\ln\left[(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2\right]d\varsigma=\\=&\int_0^1(\varsigma-\varsigma_0)^{j-1}\left[\frac{\ln\left[(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2\right]}{\varsigma^{\kappa_1}(1-\varsigma)^{\kappa_2}}-\ln\left[(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2\right]RT\left(\frac{1}{\varsigma^{\kappa_1}(1-\varsigma)^{\kappa_2}}\right)_{\varsigma=\varsigma_0}-\right.\\&\left.-\frac{1}{\varsigma^{\kappa_1}}RT\left(\frac{\ln\left[(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2\right]}{(1-\varsigma)^{\kappa_2}}\right)_{\varsigma=0}-\frac{1}{(1-\varsigma)^{\kappa_2}}RT\left(\frac{\ln\left[(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2\right]}{\varsigma^{\kappa_1}}\right)_{\varsigma=1}\right]d\varsigma+\\&+\int_0^1(\varsigma-\varsigma_0)^{j-1}\left[\ln\left[(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2\right]RT\left(\frac{1}{\varsigma^{\kappa_1}(1-\varsigma)^{\kappa_2}}\right)_{\varsigma=\varsigma_0}+\frac{1}{\varsigma^{\kappa_1}}RT\left(\frac{\ln\left[(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2\right]}{(1-\varsigma)^{\kappa_2}}\right)_{\varsigma=0}+\right.\\&\left.+\frac{1}{(1-\varsigma)^{\kappa_2}}RT\left(\frac{\ln\left[(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2\right]}{\varsigma^{\kappa_1}}\varsigma^{\kappa_1}\right)_{\varsigma=1}\right]d\varsigma.\end{aligned} \tag{14}$$

Нахождение рядов Тэйлора, содержащихся в последнем выражении, не несет в себе принципиальных трудностей, но требует больших затрат времени.

Первый интеграл в выражении (14) содержит в квадратных скобках функцию, обладающую свойством ($N_i - 1$)-гладкости во всех трех точках сингулярности подынтегрального выражения. В этом легко убедиться используя описанную выше методику. Поэтому интеграл берем численно по правилу Гаусса (т.е. с весом $p(\zeta) = 1$). Второй интеграл в правой части (14) допускает аналитическое интегрирование. Он естественным способом разбивается на три интеграла.

Первый из этих интегралов допускает преобразование к виду

$$\sum_{l=1}^{N} c_l \int_0^1 (\varsigma - \varsigma_0)^{j+l-2} \ln\left[(\varsigma - \varsigma_0)^2 + \delta_1^2\right] d\varsigma.$$

Это уже табличный интеграл.

Второй из этих интегралов можно преобразовать к виду

$$\sum_{l=1}^{N} d_l \int_0^1 \varsigma^{l-1-\kappa_1} (\varsigma - \varsigma_0)^{j-1} d\varsigma.$$

Раскрываем стоящий под интегралом бином Ньютона [3]

$$(\varsigma - \varsigma_0)^{j-1} = \sum_{n=0}^{j-1} C_{j-1}^n \varsigma^{j-n-1} (-\varsigma_0)^n,$$

где $C_k^n = k!/n!(k-n)!$ — биномиальные коэффициенты. В результате интеграл сводится к табличному и взятие этого интеграла приводит к выражению

$$\sum_{l=1}^{N} d_l \sum_{n=0}^{j-1} C_{j-1}^n \frac{(-\varsigma_0)^n}{l + j - \kappa_1 - n - 1}.$$

Для третьего интеграла получаем

$$\sum_{l=1}^{N} e_l \int_0^1 \left[(1-\varsigma_0) - (1-\varsigma)\right]^{j-1} (1-\varsigma)^{l-\kappa_2-1} d\varsigma.$$

Раскрываем стоящий под интегралом бином

$$\left[(1-\varsigma_0) - (1-\varsigma)\right]^{j-1} = \sum_{n=0}^{j-1} C_n^{j-1} (1-\varsigma)^{l-1},$$

и после проведения интегрирования получаем для третьего интеграла выражение

$$\sum_{l=1}^{N} e_l C_n^{j-1} (1-\varsigma_0)^{j-n-1} (-1)^n \frac{1}{l + n - \kappa_1}.$$

Все получившееся собираем вместе в выражении (13). Дальнейшие действия зависят от того, вычисляем ли мы плотность поверхностного заряда или потенциал электростатического поля.

4. ВЫЧИСЛЕНИЕ КОМПОНЕНТ НАПРЯЖЕННОСТИ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ПОЛЯ E_X И E_Y

Отличие от случая вычисления потенциала $\varphi(\vec{r}_0)$ состоит в отличии используемого ядра, которое для вычисления компоненты E_x имеет вид

$$G^{(x)}(\vec{r}, \vec{r}_0) = \frac{x - x_0}{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2} = \frac{x - x_0}{L^{(2)}(x,y)}. \quad (15)$$

Для данного случая общий подход не изменяется, а изменяется лишь конкретные формулы его реализации. Как уже было показано выше функция $L^{(2)}$ имеет вид (5). И все сложности в вычислении компоненты E_x связаны с ближайшими к ОГ корнями этой функции $\zeta = \zeta_0 \pm i\delta_1$.

Вклад в компоненту E_x от одного ОГ имеет вид

$$\delta E_x(\vec{r}_0) =$$
$$= -d\int_0^1 \frac{D(\varsigma)}{\left[(\varsigma-\varsigma_0)^2 + \delta_1^2\right] P(\varsigma)} \tilde{\sigma}(\varsigma) \frac{d\varsigma}{\varsigma^{\kappa_1}(1-\varsigma)^{\kappa_2}}, \quad (16)$$

где для стоящей в числителе функции $x - x_0$ используется обозначение

$$D(x) = x - x_0$$

Очевидно, что одним из корней этой функции является $\zeta = \zeta_0$, а все остальные корни расположены вдали от ОГ. В противном случае функция $D(\zeta)$ имела бы несколько точек пересечения с данным ОГ или с малым его продолжением. Функцию $D(\zeta)$ можно представить в виде

$$D(x) = (\zeta - \zeta_0) P_1(\zeta)$$

где $P_1(\zeta)$ — функция, имеющая корни, расположенные далеко от ОГ, и, поэтому, достаточно гладкая.

Из (16) видно, что в подынтегральной функции существует неопределенность типа 0/0, связаная с выражением $(x - x_0)/L^{(2)}(\zeta)$.

Применим к правой части (16) процедуру понижения степени особенности подынтегральной функции [5]. При этом учтем, что функции $P_1(\zeta)$, $\tilde{\sigma}(\varsigma)$ и $P(\zeta)$ являются гладкими и функция $P(\zeta)$ не имеет корней, близких к ОГ. Поэтому при реализации процедуры понижения особенности интегрируемой функции можно интерполирующий полином строить для функции:

$$\left\{\frac{P_1(\varsigma)\tilde{\sigma}(\varsigma)}{P(\varsigma)}\right\}_{N_i} = \sum_{i=1}^{N_i} \frac{P_1(\varsigma_i)\tilde{\sigma}(\varsigma_i)}{P(\varsigma_i)} \sum_{j=1}^{N_i} \tau_{i,j} (\varsigma_i - \varsigma_0)^{j-1}.$$

В результате для вклада в компоненту напряженности электрического поля E_x получаем:

$$\delta E_x(\vec{r}_0) = -d\int_0^1 \left[\frac{P_1(\varsigma)\tilde{\sigma}(\varsigma)}{P(\varsigma)} - \left\{ \frac{P_1(\varsigma)\tilde{\sigma}(\varsigma)}{P(\varsigma)} \right\}_{N_i} \right] \frac{\varsigma-\varsigma_0}{(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2} \frac{d\varsigma}{\varsigma^{\kappa_1}(1-\varsigma)^{\kappa_2}}$$
$$- d\int_0^1 \left\{ \frac{P_1(\varsigma)\tilde{\sigma}(\varsigma)}{P(\varsigma)} \right\}_{N_i} \frac{\varsigma-\varsigma_0}{(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2} \frac{d\varsigma}{\varsigma^{\kappa_1}(1-\varsigma)^{\kappa_2}}. \quad (17)$$

Видно, что в квадратных скобках под знаком первого интеграла стоит N_i — гладкая функция, а ее произведение на член

$$(\varsigma-\varsigma_0)/\left[(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2\right]$$

при $\delta_1 \to 0$ имеет $(N_i - 1)$ порядок гладкости.

Используя это, можно интеграл в первом члене правой части соотношения (17) взять численно методом типа Гаусса:

$$-d\sum_{k\neq L_1}^{N_g} A_k \frac{x_k - x_0}{L^{(2)}(x_k, y_k)} \tilde{\sigma}(\varsigma_k) + d\sum_{k\neq L_1}^{N_g} A_k \frac{\varsigma_k-\varsigma_0}{(\varsigma_k-\varsigma_0)^2+\delta_1^2} \sum_{i=1}^{N_i} \frac{P_1(\varsigma_i)\tilde{\sigma}(\varsigma_i)}{P(\varsigma_i)} \sum_{j=1}^{N_i} \tau_{i,j}(\varsigma_k-\varsigma_0)^{j-1}. \quad (18)$$

В последнем члене правой части (17) после ряда преобразований получаем:

$$-d\sum_{i=1}^{N_i} \frac{P_1(\varsigma_i)\tilde{\sigma}(\varsigma_i)}{P(\varsigma_i)} \sum_{j=1}^{N_i} \tau_{i,j} \int_0^1 \frac{\varsigma-\varsigma_0}{(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2} \frac{d\varsigma}{\varsigma^{\kappa_1}(1-\varsigma)^{\kappa_2}} \quad (19)$$

Содержащийся в правой части последнего выражения интеграл имеет (при $\delta_1 \to 0$) три точки сингулярности $\zeta = 0, 1, \zeta_0$. Его можно взять численно, предварительно применив процедуру понижения степеней нескольких особенностей интегрируемой функции. Для этого проведем с подынтегральной функцией (19) тождественное преобразование:

$$f = \frac{(\varsigma-\varsigma_0)^i}{(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2} \frac{1}{\varsigma^{\kappa_1}(1-\varsigma)^{\kappa_2}} = f - \left(\frac{1}{(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2} f_1 + \frac{1}{\varsigma^{\kappa_1}} f_2 + \frac{1}{(1-\varsigma)^{\kappa_2}} f_3 \right) +$$
$$+ \left(\frac{1}{(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2} f_1 + \frac{1}{\varsigma^{\kappa_1}} f_2 + \frac{1}{(1-\varsigma)^{\kappa_2}} f_3) \right).$$

При этом в качестве функций f_1, f_2, f_3 возьмем следующие функции:

$$f_1 = (\varsigma-\varsigma_0)^i RT\left(\frac{1}{\varsigma^{\kappa_1}(1-\varsigma)^{\kappa_2}} \right)_{N_i} = (\varsigma-\varsigma_0)^i \sum_{j=1}^{N_i} e_i (\varsigma-\varsigma_0)^{j-1},$$

$$f_2 = (\varsigma-\varsigma_0)^i RT\left(\frac{1}{(1-\varsigma)^{\kappa_2}} \frac{1}{(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2} \right)_{N_i} = (\varsigma-\varsigma_0)^i \sum_{j=1}^{N_i} d_i \varsigma^{j-1},$$

$$f_3 = (\varsigma-\varsigma_0)^i RT\left(\frac{1}{\varsigma^{\kappa_1}} \frac{1}{(\varsigma-\varsigma_0)^2+\delta_1^2} \right)_{N_i} = (\varsigma-\varsigma_0)^i \sum_{j=1}^{N_i} h_i (1-\varsigma)^{j-1}{}_i\varsigma^{j-1}.$$

Взятие рядов Тэйлора от выписанных функций принципиального труда не представляет, но требует внимательности и кропотливых преобразований.

Стоящий в функциях f_2, f_3 бином $(\zeta - \zeta_0)^i$ следует разложить в окрестности точек $\zeta = 0$ и $\zeta = 1$ и далее, подставив выведенные выражения в (19) и (18), получим под знаком интеграла интегрируемые по "правилу" Гаусса (вес $p = 1$) выражения и сумму аналитически берущихся интегралов.

5. ОБСУЖДЕНИЕ ПОЛУЧЕННОГО АЛГОРИТМА

Т.о. мы получили алгоритм вычисления, в котором степени сингулярности подынтегральной функции понижаются методами, предложенными в [5]. В результате применения этого метода получается сумма двух интегралов, первый из которых содержит под интегралом (N_i – 1) — гладкую функцию, а второй далее может быть взят численно, или преобразован к сумме аналитически берущихся интегралов.

Степень гладкости (N_i – 1) выбирается пользователем на основании опыта и может быть своей для каждого ОГ. Очевидно там, где ожидается некоторая негладкость модифицированной ФППЗ $\tilde{\sigma}(\varsigma)$, следует выбирать большую степень интерполяционных полиномов (N_i – 1).

В предельном случае мы можем установить $N_i = N_g$. В этом случае первый из упоминавшихся интегралов будет равен нулю.

Заметим, что порядок точности ($2N_g$ – 1), гарантируемый методом численного интегрирования типа Гаусса, может быть достигнут только при соответствующей гладкости подынтегральной функции. Этот порядок гладкости при текущем развитии теории численных вычислений не достижим. Максимум чего удалось достичь — это порядок гладкости $N_i = N_g$.

ЛИТЕРАТУРА.

1. *Шевченко С.И.* //Научное приборостроение. 1997. Т. 7, № 1–2. С. 45–53.
2. *Антоненко О.Ф.* //Вычислительные системы. Новосибирск: Изд. ИМ СО АН СССР. 1964. № 12. С.39–47.
3. *Иванов В.Я.* Методы автоматизированного проектирования приборов электроники. 1986. Новосибирск: Изд. СО АН СССР. 193 с.
4. *Тиунов М.А., Фомель Б.М., Яковлев В.П.* SAM — интерактивная программа для расчета электронных пушек на мини-ЭВМ. Новосибирск. Препринт 87–35 Института ядерной физики СО АН СССР. 1987. 63 с.
5. *Крылов В.И., Шульгина Л.Т.* Справочная книга по численному интегрированию. 1976. М.: Наука. 370 с.
6. *Лаврентьев М.А., Шабат Б.В.* Методы теории функций комплексного переменного. 1973. М.: Наука. 736 с.
7. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике. 1970 М.: Наука. 720 с.

ALGORITHM TO IMPROVE THE ULTIMATE ACCURACY OF ELECTROSTATIC FIELD CALCULATIONS FOR PLANE-SYMMETRICAL ELECTRON- AND ION-OPTICAL INSTRUMENTS WITH CORRECTION FOR SURFACE CHARGE DENSITY EFFECTS

S.I.Shevchenko

Institute for Analytical Instrumentation RAS, Saint-Petersburg

The causes of accuracy losses in electrostatic calculations of electron- and ion-optical systems with plane symmetry are analyzed. An algorithm is offered, that takes into account these causes, reducing their contribution to the computational error. The peculiarities of the surface charge density at the electrode ends and bends are also considered.