

УДК 517.925.4: 62 — 408.64

© С. И. Шевченко

О РАСЧЕТЕ ТРАЕКТОРИЙ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ ВБЛИЗИ КРИВОЛИНЕЙНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ

Предложен метод расчета траекторий вблизи криволинейных поверхностей, включающий в себя позиционирование, интерполяцию и собственно расчет. Выделены двенадцать видов пересечения границы расчетной области с ячейками прямоугольной сетки. Приведен алгоритм распознавания вида пересечения. Разработан алгоритм интерполяции функций электростатического поля на части ячейки сетки, которая получается в результате пересечения ячейки с границей расчетной области.

ВВЕДЕНИЕ

Задача расчета траекторий заряженных частиц вблизи криволинейных поверхностей возникает при расчете траекторий, производимом для целей разработки и численного исследования свойств разнообразных электронно- и ионно-оптических приборов. В качестве примера можно привести анализатор, описанный в работе [1], в котором некоторые траектории электронов проходят весьма близко от стенок.

Решение уравнений движения заряженных частиц, которые представляют собой систему дифференциальных уравнений второго порядка, состоит в нахождении правой части уравнения движения и непосредственно решения уравнения движения. Собственно решение уравнения движения трудностей не представляет. Методы этого решения можно найти в [2, 3].

Будем считать, что заряженная частица находится в пределах расчетной области (т. е. области, в которой траектории могут распространяться), если она стартовала с поверхности эмиттера (катода) и в процессе своего движения не пересекла ни одного электрода и не вышла за пределы расчетной сетки (о которой будет сказано ниже).

Совокупность действий по определению того, вышла или не вышла частица за пределы расчетной области, а также, принадлежит или не принадлежит она некоторой ячейке, ниже будем называть позиционированием частицы.

Нахождение правой части уравнения движения заключается в вычислении компонент напряженности (КН) электростатического поля (ЭСП) в требуемых для работы процедуры расчета траектории точках (ниже — точках наблюдения (ТН)). Задача вычисления КН ЭСП может быть реализована двумя методами.

1. Методом расчета этих КН ЭСП в требуемых точках непосредственно в процессе решения уравнения движения для каждой траектории, что тре-

бует расчета КН ЭСП во многих точках вдоль каждой траектории. Поэтому этот метод является довольно медленным и применяется для одной или нескольких (малого числа) траекторий, преимущественно когда требуется высокая точность расчетов. Расчет КН с высокой точностью в настоящее время возможен многими способами как вдали от поверхностей электродов, так и вблизи последних, причем как для прямолинейных, так и для криволинейных электродов [4–6]. Однако ответ на вопрос: вышла точка наблюдения из расчетной области — в этом методе пока не имеет удовлетворительного решения.

2. Методом построения функции, интерполирующей КН ЭСП. При этом расчетную область покрывают некоторой сеткой, чаще всего прямоугольной равномерной или неравномерной [7], и КН ЭСП предварительно рассчитываются в узлах сетки. Далее при расчете траекторий величины требуемых КН ЭСП в каждой точке траектории (ТН) вычисляются с помощью интерполяции. Этот метод применяется, когда требуется рассчитать большое число траекторий и когда особо высокая точность расчетов не является необходимой. В этом методе как проблема позиционирования, так и проблема вычисления правой части еще требуют своего решения.

Одна из реализаций второго метода описана в [8], где за счет выбора систем координат обеспечивалось совпадение координатных линий криволинейной системы ортогональных координат с криволинейными электродами. Понятно, что для аппроксимации поля в сложной системе электродов требуется построение нескольких ортогональных систем координат. Поэтому возникает проблема стыковки различных систем координат для расчетных областей со сложной формой границ, что делает эту реализацию весьма громоздкой и не очень гибкой.

В известных коммерческих пакетах "Simion7.0" [9] и "СРО-3D" [10] каких-либо особенностей ал-

горитмов, учитывающих близость траекторий к границе расчетной области, нам обнаружить не удалось.

Таким образом, для расчета траекторий заряженных частиц вблизи криволинейных поверхностей следует решить две основные проблемы.

1. Проблема позиционирования ТН, в которой в данный момент осуществляется расчет уравнения движения (соотнесение определенной ячейке сетки и расчетной области в целом).

2. Проблема интерполяции КН ЭСП в пределах этой ячейки.

В представленной работе приведено решение указанных проблем при выполнении упрощающих предположений:

— граница расчетной области (поверхность электродов) в пределах каждой ячейки заменяется прямой линией, а вся граничная поверхность заменяется совокупностью ломаных;

— внутри каждой ячейки осуществляется интерполяция КН ЭСП двумерным полиномом.

В качестве тестового примера используется сферический конденсатор.

РЕШЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ ПОЗИЦИОНИРОВАНИЯ ТН В РАСЧЕТНОЙ ОБЛАСТИ И В НЕКОТОРОЙ ЯЧЕЙКЕ

В данном разделе рассматриваются две задачи, возникающие при рассмотрении проблемы позиционирования:

— определение номера ячейки, в которой находится ТН, и определение конфигурации той части ячейки, которая принадлежит расчетной области;

— решение вопроса, вышла ли траектория за пределы расчетной области, а если вышла, то нахождение координат точки выхода (в которой траектория пересекает один из электродов или выходит за пределы сетки).

Для определения номера ячейки (по X и Y независимо) последовательно для всех i_x и i_y проверяется выполнение неравенств:

$$Fx[i_x] \leq x_0 < Fx[i_x + 1],$$

$$Fy[i_y] \leq y_0 < Fy[i_y + 1],$$

где $Fx[i_x]$ — x -координата линии сетки $x = Fx[i_x]$ с номером i_x , $Fy[i_y]$ — аналогично вдоль направления Y .

Для проверки принадлежности рассматриваемой ячейки к расчетной области используется тот факт, что каждая линия сетки $x = Fx[i_x]$ (или $y = Fy[i_y]$) или вовсе не имеет пересечений с границей расчетной области (электродами), которая может быть разрывной (или линия сетки находится в стороне от расчетной области, или линия сетки полностью находится в пределах расчетной области), или имеет одно или несколько пересечений с расчетной областью.

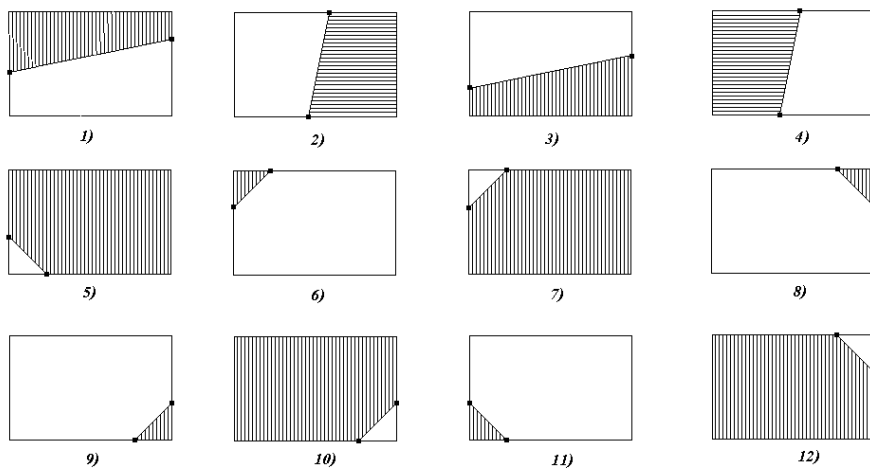


Рис. 1. Типы пересечения ячейки прямой линией. Заштрихованная область принадлежит расчетной области

Обозначим точки пересечения линии сетки $x = Fx[i_x]$ с границей расчетной области (одним из электродов) через $ySk[i_x]$ и $ySl[i_x]$ — соответственно верхнее и нижнее пересечение, если каждое из них существует (вместо каждого из этих пересечений может быть одна из границ сетки; о методе нахождения точек пересечения см. Приложение I).

Всего возможны двенадцать вариантов различных типов пересечений линии границы с ячейкой сетки (см. рис. 1).

Случаи, когда внутри одной ячейки оказываются части двух или большего числа электродов, или один электрод начинается в ней, или заканчивается, или испытывает внутри нее излом, очевидно, не вписываются в описанные выше 12 типов пересечений. Поэтому на стадии формирования сетки, для того чтобы ограничиться только двенадцатью типами пересечений ячеек граничной линией, следует придерживаться нескольких правил:

— в пределах каждой ячейки могут находиться (пересекать ее) части не более чем одного электрода;

— начало и конец каждого электрода должны быть расположены на линиях сетки, за исключением тех начал и концов, которые находятся вне пределов сетки;

— все изломы электродов, за исключением находящихся за пределами сетки, должны быть скругленными, а сетка в месте скругления должна иметь сгущение линий.

На рис. 2 показано, как вся расчетная область (пространство между обкладками) делится на внутренние и граничные ячейки и как с помощью приведенных на рис. 1 типов граничных ячеек интерполируется приграничная часть сферического конденсатора в двух случаях: а) расчетную область покрывает сетка 10×10 , б) расчетную область покрывает сетка 30×30 . Светло-серым цветом закрашены ячейки, полностью принадлежащие расчетной области, темно-серым — ячейки, пересекаемые граничной линией (граничные ячейки). Видно, что даже при весьма крупных ячейках сетки (10×10) ломаная, заменяющая точную границу, весьма точно приближает ее.

О порядке величины ошибки, возникающей при замене точной границы (дуга окружности) на приближающую ее ломаную, можно судить по относительной разности

$$\delta_R = \left| \frac{R_t - R_L}{R_t} \right|,$$

где R_t — радиус, отсчитываемый от центра сферического конденсатора в точке его пересечения с граничной линией; R_L — радиус в точке его пересечения с представляющей границу ломаной линией.

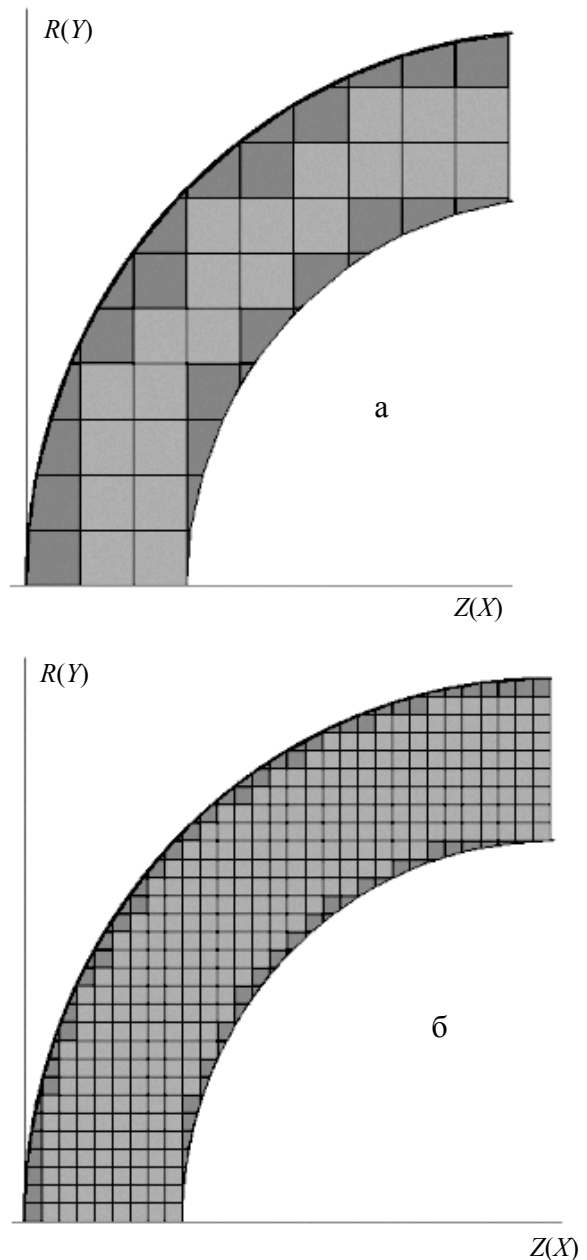


Рис. 2. Пример различных типов пересечения ячеек сетки и граничной линии для части сферического конденсатора: а — $N_z = N_r = 10$; б — $N_z = N_r = 30$

В пределах каждого сегмента граничной ломаной линии, заключенного между радиусами, опирающимися на отрезок граничной ломаной, относительная ошибка δ_R замены точной границы на ломаную кривую может быть выражена формулой

$$\delta_R = 1 - \frac{\cos(\Delta F/2)}{\cos(\Delta F/2 - \varphi)},$$

где ΔF — угол раствора сегмента, φ — текущее значение угла, изменяющегося от значения 0 на одном конце сегмента до значения $\varphi = \Delta F$ на другом конце сегмента.

Чтобы показать наибольшие значения относительной ошибки δ_R , для каждого отрезка граничной ломаной был найден соответствующий ему угол раствора опирающегося на него сегмента и с некоторым шагом $h_\varphi = \Delta F / N_\varphi$ (где $N_\varphi = 100$) были рассчитаны значения относительной ошибки. В результате для внешней обкладки конденсатора были получены максимальные значения относительной ошибки:

- 1) $\delta_R = 0.0027$ при $N_z = N_r = 10$,
- 2) $\delta_R = 0.00022$ при $N_z = N_r = 30$ и
- 3) $\delta_R = 0.000024$ при $N_z = N_r = 90$.

Видно, что с уменьшением шага сетки величина относительной ошибки δ_R быстро падает.

Будем считать, что некоторая точка наблюдения (ТН) находится внутри расчетной области пространства, если эта точка принадлежит некоторой ячейке сетки и если:

- 1) или эта ячейка полностью принадлежит расчетной области,
- 2) или ячейка частично принадлежит расчетной области.

Во втором случае требуется дополнительная проверка на принадлежность ТН расчетной области пространства, для чего выполняются следующие действия:

- определяется номер ячейки, к которой принадлежит ТН,
- определяется к какому типу пересечения принадлежит данная ячейка.

Для выполнения второго действия выпишем условия принадлежности ячейки к каждому из типов пересечения. Заметим, что т. к. отрезок границы, пересекающий рассматриваемую ячейку сетки, считается прямолинейным, то у этого отрезка может быть только два пересечения с ячейкой (см. Приложение II). Случай прохождения отрезка границы через узел сетки мы рассматривать не будем. Поэтому, если, например, граница ячейки имеет два пересечения с линиями сетки $Fx[i_x]$ и $Fx[i_x + 1]$, то она уже не может иметь пересечений с линиями сетки $Fy[i_y]$ и $Fy[i_y + 1]$, и проверять возможность таких пересечений уже не требуется.

После проверки условий принадлежности ячейки к каждому из типов пересечения и определения типа пересечения ячейки с границей расчет-

ной области можно переходить к следующему шагу — определению, принадлежит ли ТН расчетной области. Понятно, что предпринимаемые при этом действия должны зависеть от типа пересечения. Поэтому ниже мы укажем путь установления принадлежности ТН к расчетной области для каждого типа пересечения. Для этого запишем уравнение отрезка прямой линии, представляющего граничную линию в пределах рассматриваемой ячейки, в виде

$$Ax + By + C = 0.$$

Коэффициенты этого уравнения приведены в Приложении III.

Для треугольной граничной ячейки (типы 6, 8, 9, 11, рассмотрим в качестве примера тип 9), т. к. номер ячейки уже был установлен выше, правильность положения ТН относительно правой и нижней сторон (катетов) ячейки (полной) можно считать установленной. Остается проверить, что ТН находится правее и ниже граничной линии (гипотенузы). Выполнение неравенства $xSn[i_y] \leq x_0 \leq Fx[i_x + 1]$ означает, что проекция ТН на нижнюю сторону ячейки находится в пределах нижнего катета, поэтому можно определить точку пересечения гипотенузы с линией $x = x_0$. Если ТН находится ниже этой точки пересечения $y_0 \leq y_*$, то это значит, что ТН находится в пределах граничной ячейки.

Для четырехугольной граничной ячейки (типы 1–4, рассмотрим в качестве примера тип 2) можно считать установленной правильность положения ТН относительно всех четырех сторон полной ячейки. Находим точку пересечения линии $y = y_0$ с граничной линией. Выполнение неравенства $x_* \leq x_0$ означает, что ТН находится правее граничной линии и, стало быть, принадлежит расчетной области.

Для пятиугольной граничной ячейки (типы 5, 7, 10, 12; в качестве примера рассмотрим тип 7) можно считать установленной правильность положения ТН относительно всех четырех сторон полной ячейки. Если $xSn[i_y + 1] \leq x_0 \leq Fx[i_x + 1]$, то ТН находится правее области, отсекаемой от ячейки, и принадлежит расчетной области. Если $Fx[i_x] \leq x_0 \leq xSn[i_y + 1]$, то ТН может попасть в отсекаемую от полной ячейки область. Чтобы избежать этого, необходимо, чтобы точка пересечения линии $x = x_0$ с граничной линией была выше ТН ($y_* \geq y_0$), тогда ТН принадлежит расчетной области.

Каждую ячейку мы проверяем на принадлежность одному из двенадцати типов пересечения и далее для конкретного типа, к которому относится

данная ячейка, проверяем на принадлежность ТН расчетной области.

ИНТЕРПОЛЯЦИЯ КОМПОНЕНТ НАПРЯЖЕННОСТИ ЭСП

Вопросы интерполяции весьма подробно и разносторонне рассмотрены в литературе. Поэтому в данном разделе мы не будем строить новые оригинальные схемы интерполяции, а воспользуемся уже существующими и широко известными. Из множества возможных видов интерполяции КН ЭСП по их значениям в некоторых точках рассмотрим билинейную интерполяцию (и близкие к ней типы).

Для прямоугольной области (полная ячейка) можно воспользоваться формулой (в несколько преобразованном виде) двумерной интерполяции некоторой функции по четырем точкам, расположенным в узлах ячейки [11]:

$$f(x, y) = f_{n,n} \frac{x_k - x}{\Delta x} \frac{y_k - y}{\Delta y} + f_{k,n} \frac{x - x_n}{\Delta x} \frac{y_k - y}{\Delta y} + f_{n,k} \frac{x_k - x}{\Delta x} \frac{y - y_n}{\Delta y} + f_{k,k} \frac{x - x_n}{\Delta x} \frac{y - y_n}{\Delta y},$$

где $f_{i,j}$ — значения интерполируемой функции; $i, j = n, k$; n, k — индексы, указывающие на начало и конец отрезка интегрирования; $\Delta x = x_k - x_n$; $\Delta y = y_k - y_n$.

Для области в виде трапеции (типы пересечения 1–4) эта формула не подходит. Для общего вида области, имеющей четыре стороны, можно записать четыре условия (в каждом угле области):

$$E_{i,j} = A + Bx_i + Cy_j + Dx_i y_j, \\ i = 1 \div 2, j = 1 \div 2.$$

Если решить эту систему численно (например, методом исключения Гаусса) относительно коэффициентов $A \div D$, то в результате эти коэффициенты $A \div D$ будут вычислены и формула интерполяции будет определена однозначно.

Для треугольных расчетных областей (типы пересечения 6, 7, 9, 11) имеются только три точки, расположенные в углах треугольника, в которых определены КН ЭСП. Поэтому имеется возможность определить только три коэффициента, и интерполяционная формула может иметь вид

$$E_{i,j} = A + Bx_i + Cy_j, \quad i = 1 \div 2, j = 1 \div 2.$$

Можно повысить степень интерполяции до билинейной, если определить КН ЭСП в одной до-

полнительной точке, находящейся где-то внутри треугольника.

Для пятиугольной расчетной части ячейки (типы пересечения 5, 8, 10, 12) имеется пять точек определения КН ЭСП. Но билинейная интерполяционная функция имеет только четыре коэффициента, а с другой стороны, с пятью коэффициентами нельзя построить симметричного относительно двух переменных полинома. Для этого случая можно предложить множество выходов: деление пятиугольной области на две четырехугольные или на три треугольные, интерполяция для которых уже описана выше.

Ближайший, содержащий не менее пяти коэффициентов полином от двух переменных можно построить в виде

$$A + Bx_i + Cy_j + Dx_i y_j + Fx_i^2 + Gy_j^2, \\ i = 1 \div 2, j = 1 \div 2.$$

В этом полиноме содержатся шесть коэффициентов. Чтобы их определить, необходимо задать значения искомой КН ЭСП в шести точках, из которых в пяти точках мы ее уже определили. Т.е. следует ввести для рассматриваемой ячейки еще одну дополнительную точку определения (задания) значения КН ЭСП. При задании положения этой дополнительной точки в пределах ячейки следует руководствоваться следующими критериями: эта дополнительная точка не должна совпадать ни с одной из пяти уже определенных точек, чтобы детерминант получающейся для определения коэффициентов системы не оказался равным нулю, эта дополнительная точка должна находиться в пределах расчетной области.

Для удовлетворения этим двум критериям осуществим следующие действия: через два принадлежащих расчетной области узла ячейки проведем гипотенузу прямоугольного треугольника, который не содержит отрезанную от ячейки часть. Далее от прямого угла отсчитываем по 1/3 вдоль каждого катета и через полученные точки проводим линии, параллельные другому катету. На пересечении двух этих линий получаем точку, удовлетворяющую указанным выше критериям. Далее, как обычно, решая полученную систему уравнений относительно коэффициентов, получаем значения этих коэффициентов интерполяции.

Для демонстрации точности интерполяции в узлах сетки были заданы точные для сферического конденсатора значения компонент напряженности электростатического поля (E_z, E_r) и изучены получаемые с помощью этих значений интерполирующие их величины в ряде точек, находящихся как в пределах внутренних (полных), так и граничных ячеек.

В пространстве между обкладками, разделен-

ном вдоль радиуса на $N_R = 1000$ одинаковых шагов начиная от внутренней обкладки сферического конденсатора ($R_1 = 0.07$ м) до внешней обкладки ($R_2 = 0.1$ м), были рассчитаны максимальные значения относительной ошибки $dE_z = (E_{zi} - E_{zt}) / E_{zt}$, получаемой в результате интерполяции значений КН ЭСП E_z , где E_{zt} — теоретическое значение КН ЭСП E_z , E_{zi} — значение КН ЭСП E_z , полученное в результате интерполяции.

В результате были получены следующие величины относительной ошибки:

$$dE_z = 0.007 \text{ при } N_z = N_r = 10,$$

$$dE_z = 0.0008 \text{ при } N_z = N_r = 30 \text{ и}$$

$$dE_z = 0.00009 \text{ при } N_z = N_r = 90.$$

Видно, что с уменьшением шага сетки относительная точность интерполяции быстро возрастает (относительная ошибка убывает).

РАСЧЕТ ТРАЕКТОРИЙ

Расчет траекторий, состоящий в решении уравнений движения при условии полной определенности правых частей уравнений движения и при правильном функционировании алгоритма позиционирования, труда не представляет. Поэтому мы не будем уделять этому вопросу внимания, а лишь приведем результаты тестовых вычислений.

В качестве примера применения описанного выше алгоритма был проделан комплекс расчетов для сферического конденсатора (расчет точек пересечения граничной линии с линиями сетки, отнесение граничных ячеек к одному из указанных выше типов, вычисление коэффициентов интерполяции для внутренних и граничных ячеек, проверка точности интерполяции КН ЭСП и точности замены граничной линии на ломаную и расчет траекторий в сферическом конденсаторе) как при точном представлении КН ЭСП, так и при их интерполяционной замене.

Расчеты траекторий были проведены при трех вариантах шага сетки и для сравнения траекторий, для которых были взяты аналитически рассчитанные значения КН ЭСП и позиционирование проводилось относительно идеальных окружностей, представляющих собой обкладки сферического конденсатора. Разница между точными траекториями и траекториями, полученными с использованием интерполированных значений КН ЭСП, получилась столь малой, что на рисунке (или экране монитора) их графики практически слились. Поэтому графики траекторий не приводятся.

Решение уравнений движения производилось численным методом Рунге—Кутты четвертого порядка, который (как и другие приближенные ме-

тоды) вносит зависимость точности решения от шага по переменной, с которым это решение осуществляется. Поэтому точность вычисления траекторий должна зависеть как от шага сетки, так и от шага внутри каждой ячейки. В качестве точного значения конечной y -координаты были взяты значения, полученные при $N_z = N_r = 90$ и $ND = 1000$, где ND — оценочное число шагов в каждой ячейке сетки, через которую проходит траектория.

При расчете траекторий должны сказываться следующие факторы.

1. Замена точной границы на интерполирующую ее ломаную линию. При этом часть траекторий, которые при точных расчетах должны были проходить на коллектор (анод, конец расчетной области), пересекаются с ломаной границей и не попадают на коллектор.

2. Замена точных значений КН ЭСП на интерполирующие их значения приводит к появлению соответствующей погрешности вычислений.

При замене точной границы на приближенную (ломаную линию) диапазон углов старта траекторий, которые в результате этой замены перестают приходить на коллектор, весьма мал и на рисунке не заметен. Поэтому для демонстрации этого эффекта приведены значения абсолютного диапазона углов старта $\Delta\vartheta_0 = \vartheta_{ii} - \vartheta_{ii}$ в таблице, где ϑ_{ii} — предельное значение угла старта траекторий, проходящих на коллектор, при расчете траекторий с теоретическими значениями КН ЭСП и точной границей расчетной области, ϑ_{ii} — предельное значение угла старта траекторий, проходящих на коллектор, при расчете траекторий с интерполяционными значениями КН ЭСП и представлении границы расчетной области в виде ломаной.

Видно, что величина абсолютного диапазона углов старта $\Delta\vartheta$ при уменьшении шага сетки быстро убывает и уже при $N_z = N_r = 30$ достигает вполне приемлемой величины $\Delta\vartheta_0 \approx 5 \cdot 10^{-3}$ град.

Табл. Значения диапазона теряемых на коллекторе углов старта $\Delta\vartheta_0$ и относительной погрешности расчета траекторий δ_{tr} при разных значениях шага сетки

$N_z = N_r$	$\Delta\vartheta_0$ (град)	δ_{tr}
10	$3.8 \cdot 10^{-2}$	$2 \cdot 10^{-3}$
30	$4.8 \cdot 10^{-3}$	$3 \cdot 10^{-4}$
90	$4.9 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-5}$

Там же в таблице приведены результаты вычисления относительной погрешности расчета траекторий, определяемой как относительная разность между конечной y -координатой точной и конечной y -координатой приближенной траектории, каждая из которых доходит до коллектора:

$$\delta_{tr} = \frac{y_t - y_N}{y_t},$$

где y_t — точное значение конечной y -координаты, когда в качестве КН ЭСП используются теоретические значения, y_N — приближенное значение конечной y -координаты, когда в качестве КН ЭСП используются значения, полученные интерполяцией на сетке 10×10 , 30×30 или 90×90 .

Видно, что с уменьшением шага сетки точность расчета траекторий быстро растет, что можно наблюдать по разнице между точными и приближенными траекториями.

Из этого можно сделать вывод: уже при таком простейшем представлении границы (ломаной) и при простейшем законе интерполяции (билинейным полиномом) можно при достаточно малом шаге сетки получить весьма точную величину интерполированной КН ЭСП и весьма точные траектории.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В представленной работе описан алгоритм вычисления значений КН ЭСП для целей расчета траекторий, состоящий в алгоритме контроля за выходом зараженных частиц из расчетной области и алгоритме вычисления КН ЭСП в произвольной точке, в том числе находящейся в непосредственной близости от границы расчетной области.

Этот алгоритм состоит в следующем.

1. Вся расчетная область покрывается прямоугольной сеткой (равномерной или неравномерной) и определяются все точки пересечения линий сетки ($x = Fx[i_x]$ и $y = Fy[i_y]$) с граничной линией.

2. Все ячейки сетки анализируются на принадлежность расчетной области, и те ячейки, которые ей принадлежат, — на принадлежность или к множеству ячеек, не имеющих пересечения с электродами, или к одному из типов пересечения с граничной линией.

3. Во всех узлах сетки и в точках пересечения линий сетки с граничной линией вычисляются КН ЭСП.

4. Для каждой ячейки сетки, входящей в расчетную область, в зависимости от отсутствия или наличия пересечения этой ячейки с граничной линией и от типа этого пересечения строится функ-

ция, интерполирующая КН ЭСП.

Выполнение этих действий позволяет без проблем осуществить расчет значений КН ЭСП, что необходимо для расчета траекторий вблизи криволинейных электродов. Приведенные примеры различных этапов осуществления описанного выше алгоритма для сферического конденсатора показали, что алгоритм, реализованный в виде программы, работает устойчиво и довольно эффективно.

При рассмотрении граничной линии в рамках одной ячейки сетки используется утверждение, что поверхность электрода может пересекать ячейку не более одного раза. Чтобы это утверждение реализовывалось на практике, следует так выбирать сетку (линии сетки), чтобы все экстремумы поверхности электродов (как $y = f(x)$, так и $x = g(y)$) были расположены на линиях сетки. Это относится и к изломам, и к началам, и к концам сетки.

ПРИЛОЖЕНИЕ I. Нахождение координат точек пересечения линий $x = x_i$ и $y = y_j$ с линией границы

Проблема нахождения координат точки пересечения некоторого отрезка границы (отрезка электрода) с линиями $x = x_i$ и $y = y_j$ возникает при определении точек пересечения электродов с линиями сетки и при определении точек пересечения электродов с линиями $x = x_0$ и $y = y_0$ для целей позиционирования ТН относительно линии границы (вопрос выхода ТН из расчетной области и из рассматриваемой ячейки).

В общем случае граница расчетной области (совокупность электродов) может задаваться [4, 5] прямыми линиями, отрезками дуг окружностей и гладкими линиями, проходящими через определенную совокупность точек.

Если граница задана прямой линией, когда известны координаты крайних точек электрода (x_n, y_n) и (x_k, y_k) , то уравнение прямой линии, проходящей через эти крайние точки [11], записанное в виде

$$Ax + By + C = 0,$$

определяется коэффициентами $A = -(y_k - y_n)$, $B = (x_k - x_n)$ и $C = (x_n y_k - x_k y_n)$.

Координаты (x_*, y_*) точки пересечения этой прямой линии с прямой линией $x = x_i$ равны:

$$x_* = x_i, \quad y_* = -(Ax_i + C) / B,$$

а с прямой линией $y = y_j$:

$$y_* = y_j, \quad x_* = -(By_j + C) / A.$$

Заметим, что в первом рассматриваемом варианте пересечения $B \neq 0$, а во втором $A \neq 0$.

Если граница задана дугой окружности, то для нахождения координат точки пересечения дуги окружности с прямой линией $x = x_i$ определяем угол наклона к оси X радиуса, проходящего через искомую точку,

$$f = \arccos \frac{X_c - x_i}{R_c},$$

где X_c — x -координата центра дуги окружности, R_c — радиус дуги окружности.

Далее получаем координаты искомой точки пересечения:

$$x_* = x_i, \quad y_* = Y_c + R_c \sin(f),$$

где Y_c — y -координата центра дуги окружности.

Для нахождения координат точки пересечения дуги окружности с прямой линией $y = y_j$, действуя аналогично предыдущему, определяем угол наклона радиуса, проходящего через искомую точку, к оси Y

$$f = \arcsin \frac{Y_c - y_j}{R_c}$$

и получаем координаты искомой точки пересечения:

$$x_* = X_c + R_c \cos(f), \quad y_* = y_j.$$

Если граница представляет собой гладкую кривую, заданную сплайном третьего порядка в параметрическом виде [2, 11]:

$$\begin{aligned} x_i &= A_x l^3 + B_x l^2 + C_x l + D_x, \\ y_i &= A_y l^3 + B_y l^2 + C_y l + D_y, \end{aligned}$$

где параметром служит длина l этой гладкой кривой от начала до рассматриваемой точки, а функциями являются координаты $x(l)$ и $y(l)$, то для нахождения координат точки пересечения гладкой кривой с линией $x = x_i$ сперва находим l -координату точки пересечения, являющуюся решением уравнения

$$x_i = A_x l^3 + B_x l^2 + C_x l + D_x.$$

Для решения этого уравнения применяется численный метод половинного деления, который, с одной стороны, не является самым быстрым, но, с другой стороны, обладает хорошей устойчивостью [2, 11]. Ввиду его простоты мы не будем останавливаться на его описании. Деление отрезка пополам заканчивалось, когда длина отрезка уменьшалась в 10^{10} раз.

Зная l_i -координату точки пересечения, легко найти y -координату из известной формулы сплайн-интерполяции [2, 11]

$$y_i = A_y l_i^3 + B_y l_i^2 + C_y l_i + D_y.$$

Для нахождения координат точки пересечения гладкой кривой с линией $y = y_i$ все действия вполне аналогичны.

ПРИЛОЖЕНИЕ II. Условия принадлежности ячейки к одному из типов ее пересечения с граничной линией

Номер пересечения	Первое условие	Второе условие
1	$Fy[i_y] \leq ySn[i_x] \leq Fy[i_y + 1]$	$Fy[i_y] \leq ySn[i_x + 1] \leq Fy[i_y + 1]$
2	$Fy[i_y] \leq ySk[i_x] \leq Fy[i_y + 1]$	$Fy[i_y] \leq ySk[i_x + 1] \leq Fy[i_y + 1]$
3	$Fx[i_x] \leq xSn[i_y] \leq Fx[i_x + 1]$	$Fx[i_x] \leq xSn[i_y + 1] \leq Fx[i_x + 1]$
4	$Fx[i_x] \leq xSk[i_y] \leq Fx[i_x + 1]$	$Fx[i_x] \leq xSk[i_y + 1] \leq Fx[i_x + 1]$
5	$Fy[i_y] \leq ySn[i_x] \leq Fy[i_y + 1]$	$Fx[i_x] \leq xSn[i_y] \leq Fx[i_x + 1]$
6	$Fy[i_y] \leq ySk[i_x] \leq Fy[i_y + 1]$	$Fx[i_x] \leq xSk[i_y] \leq Fx[i_x + 1]$
7	$Fy[i_y] \leq ySn[i_x] \leq Fy[i_y + 1]$	$Fx[i_x] \leq xSk[i_y + 1] \leq Fx[i_x + 1]$

Продолжение

Номер пересечения	Первое условие	Второе условие
8	$Fy[i_y] \leq ySk[i_x] \leq Fy[i_y + 1]$	$Fx[i_x] \leq xSn[i_y + 1] \leq Fx[i_x + 1]$
9	$Fy[i_y] \leq ySn[i_x + 1] \leq Fy[i_y + 1]$	$Fx[i_x] \leq xSn[i_y + 1] \leq Fx[i_x + 1]$
10	$Fy[i_y] \leq ySn[i_x + 1] \leq Fy[i_y + 1]$	$Fx[i_x] \leq xSk[i_y + 1] \leq Fx[i_x + 1]$
11	$Fy[i_y] \leq ySk[i_x + 1] \leq Fy[i_y + 1]$	$Fx[i_x] \leq xSn[i_y] \leq Fx[i_x + 1]$
12	$Fy[i_y] \leq ySn[i_x + 1] \leq Fy[i_y + 1]$	$Fx[i_x] \leq xSk[i_y] \leq Fx[i_x + 1]$

ПРИЛОЖЕНИЕ III. Значения коэффициентов в уравнении прямой линии для всех возможных типов пересечения ячейки граничной прямой

№	A	B	C
1	$ySn[i_x + 1] - ySn[i_x]$	$-D_x$	$Fx[i_x + 1] \cdot ySn[i_x] - Fx[i_x] \cdot ySn[i_x + 1]$
2	D_y	$-xSn[i_y + 1] + xSn[i_y]$	$xSn[i_y + 1] \cdot Fy[i_y] - xSn[i_y] \cdot Fy[i_y + 1]$
3	$ySk[i_x + 1] - ySk[i_x]$	$-D_x$	$Fx[i_x + 1] \cdot ySk[i_x] - Fx[i_x] \cdot ySk[i_x + 1]$
4	D_y	$-xSk[i_y + 1] + xSk[i_y]$	$xSk[i_y + 1] \cdot Fy[i_y] - xSk[i_y] \cdot Fy[i_y + 1]$
5	$Fy[i_y] - ySn[i_x]$	$-xSn[i_y] + Fx[i_x]$	$xSn[i_y] \cdot ySn[i_x] - Fy[i_y] \cdot Fx[i_x]$
6	$Fy[i_y + 1] - ySn[i_x]$	$-xSk[i_y + 1] + Fx[i_x]$	$xSk[i_y] \cdot ySn[i_x] - Fy[i_y + 1] \cdot Fx[i_x]$
7	$Fy[i_y + 1] - ySk[i_x]$	$-xSn[i_y + 1] + Fx[i_x]$	$xSn[i_y + 1] \cdot ySk[i_x] - Fx[i_x] \cdot Fy[i_y + 1]$
8	$ySn[i_x + 1] - Fy[i_y + 1]$	$xSn[i_y + 1] - Fx[i_x + 1]$	$Fx[i_x + 1] \cdot Fy[i_y + 1] - ySk[i_x + 1] \cdot xSn[i_y + 1]$
9	$ySk[i_x + 1] - Fy[i_y]$	$-Fx[i_x + 1] + xSn[i_y]$	$Fy[i_y] \cdot Fx[i_x + 1] - xSn[i_y] \cdot ySk[i_x + 1]$
10	$ySn[i_x + 1] - Fy[i_y]$	$-Fx[i_x + 1] + xSk[i_y]$	$Fy[i_y] \cdot Fx[i_x + 1] - xSk[i_y] \cdot ySn[i_x + 1]$
11	$Fy[i_y] - ySk[i_x]$	$Fx[i_x + 1] - xSk[i_y]$	$xSk[i_y] \cdot ySk[i_x] - Fy[i_y] \cdot Fx[i_x]$
12	$ySk[i_x + 1] - Fy[i_y + 1]$	$xSk[i_y + 1] - Fx[i_x + 1]$	$Fy[i_y + 1] \cdot Fx[i_x + 1] - xSk[i_y + 1] \cdot ySn[i_x + 1]$

Здесь $D_x = Fx[i_x + 1] - Fx[i_x]$, $D_y = Fy[i_y + 1] - Fy[i_y]$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Siegbahn K., Kholin N., Golikov G. A high resolution and charge transmission electron spectrometer // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res., A. 1997. V. 384. P. 563–574.
2. Хемминг Р.В. Численные методы. М.: Наука, 1968. 400 с.
3. Ильин В.П. Численные методы решения задач электрофизики. М.: Наука, 1985. 334 с.
4. Шевченко С.И. Алгоритм получения предельной точности в электростатических расчетах

- элементов электронно- и ионно-оптических приборов, имеющих плоскую симметрию // Научное приборостроение. 1997. Т. 7, № 1–2. С. 45–53.
5. Шевченко С.И. Алгоритм получения высокой точности в расчетах аксиально-симметричных электростатических полей // Научное приборостроение. 2002. Т. 12, № 1. С. 40–45.
6. Гринфельд Д.Э., Монастырский М.А. Расчет трехмерных электростатических полей с универсальным алгоритмом выделения особенностей поверхностного заряда на основе метода

- Фикеры // Прикладная физика. 2002. № 3. С. 43–54.
7. Шевченко С.И. О некоторых вопросах проектирования неоднородных сеток для расчета траекторий заряженных частиц в электронно-ионно-оптических приборах // Научное приборостроение. 1998. Т. 8, № 1–2. С. 27–31.
8. Огородников А.К. Моделирование на ЭВМ транспортировки пучков заряженных частиц в электростатических полях. Автореф. дис. ... к.ф.-м.н. С.-Петербург, 1993. 21 с.
9. SIMION 7.0 User Guide. Idaho National Eng. and Envir. Lab., 2001.
10. Read F.H. CPO_3D User Guide. Available from <http://cpo.ph.man.ac.uk>
11. Корн Г. и Корн Т. Справочник по математике. М., 1970. 720 с.
- Институт аналитического приборостроения РАН,
Санкт-Петербург*
- Материал поступил в редакцию 11.11.2004.

ON THE CALCULATION OF CHARGED PARTICLE PATHS NEAR CURVILINEAR SURFACES

S. I. Shevchenko

Institute for Analytical Instrumentation RAS, Saint-Petersburg

The paper presents a method for calculating trajectories near curvilinear surfaces, which consists of positioning, interpolation and calculation proper stages. Twelve kinds of calculation region boundary intersections with the rectangular grid meshes were established. An algorithm has been developed for interpolating electrostatic field functions over the grid mesh portion formed by the calculation region boundary intersection with the grid mesh.