

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



СЗ45А1
жс-696

3/II-75

P11 - 8356

418/2-75

Е.П.Жидков, Х.Семерджиев

ПРОГРАММА ДЛЯ РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ
СТАЦИОНАРНОГО САМОСОГЛАСОВАННОГО ПУЧКА
РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЭЛЕКТРОНОВ

1974

ЛАБОРАТОРИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ
ТЕХНИКИ И АВТОМАТИЗАЦИИ

P11 - 8356

Е.П.Жидков, Х.Семерджиев

ПРОГРАММА ДЛЯ РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ
СТАЦИОНАРНОГО САМОСОГЛАСОВАННОГО ПУЧКА
РЕЛЯТИВИСТИЧЕСКИХ ЭЛЕКТРОНОВ

Объединенный институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

Жидков Е.П., Семерджиев Х.

P11 - 8356

Программа для расчета параметров стационарного самосогласованного пучка релятивистских электронов

Дается краткое описание пакета подпрограмм, предназначенных для расчета параметров стационарного самосогласованного пучка релятивистских электронов.

Приведена блок-схема программы.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований
Дубна, 1974

Zhidkov E.P., Semerdzhiev Kh.

P11 - 8356

The Program for Calculating the Parameters of the Stationary Self-Consistent Beam of Relativistic Electrons

A brief description is given of a subprogram package intended for calculation of parameters of a stationary self-consistent beam of relativistic electrons.

The block-diagram of the program is presented.

Communications of the Joint Institute for Nuclear Research.
Dubna, 1974

1. Постановка задачи

Уравнения для определения самосогласованного поля в цилиндрических координатах r, z имеют вид [1]

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = -4\pi \rho, \quad (1)$$

$$\frac{\partial^2 A}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial A}{\partial r} + \frac{\partial^2 A}{\partial z^2} - \frac{A}{r^2} = -\frac{4\pi}{c} j, \quad (2)$$

$$\rho = \frac{\pi}{4\pi e r} (H_0 - e\varphi) \sigma(\Phi), \quad (3)$$

$$j = \frac{\mathcal{K} c^2}{4\pi e r} \left[\frac{M_0}{r} - \frac{e}{c} (A + A^0) \right] \sigma(\Phi), \quad (4)$$

$$\Phi(\varphi, A) = (H_0 - e\varphi)^2 - m^2 c^4 - \frac{c^2}{r^2} \left[M_0 - \frac{e}{c} r (A + A^0) \right]^2, \quad (5)$$

$$\sigma(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0, \\ 1, & x > 0. \end{cases} \quad (6)$$

Здесь φ - неизвестный скалярный потенциал, A - неизвестная θ -овая компонента векторного потенциала, ρ - неизвестная плотность заряда, A^0 - заданная функция, характеризующая внешнее магнитное поле, \mathcal{K} - заданная нормировочная константа (от нее зависит число частиц в пучке), H_0, M_0 - заданные константы интегралов движения, соответствующие полной энергии и θ -вой компоненте импульса в одно-частичной задаче, m - масса электрона, e - заряд электрона, c -

- скорость света, m , e , c - известные константы. Система уравнений (I)-(6) рассматривается в прямоугольнике Δ ($0 \leq z \leq a$, $-b \leq x \leq b$). На контуре прямоугольника Δ заданы следующие граничные условия:

$$A(z, x) \Big|_{x=\pm b} = 0, \quad A(z, z) \Big|_{z=0, z=a} = 0, \quad \varphi(z, x) \Big|_{x=\pm b} = 0, \quad (7)$$

$$\varphi(z, z) \Big|_{z=a} = 0, \quad \frac{\partial \varphi(z, z)}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0.$$

Внешнее магнитное поле создается двумя симметрично расположенными относительно плоскости $z=0$ витками с радиусом R , расстояния между ними $-2Z$. R и Z заданы.

Функция $A^0(z, z)$ задается следующим функциональным рядом:

$$\frac{4S}{6c} \sum_{n=0}^{\infty} \cos(\alpha_{2n+1} z) \cos(\alpha_{2n+1} Z) \times \begin{cases} f_n(z), & 0 \leq z \leq R, \\ g_n(z), & R \leq z \leq a, \end{cases} \quad (8)$$

где

$$f_n(z) = I_1(\alpha_{2n+1} z) K_1(\alpha_{2n+1} R) - h_n(z),$$

$$g_n(z) = K_1(\alpha_{2n+1} z) I_1(\alpha_{2n+1} R) - h_n(z),$$

$$h_n(z) = I_1(\alpha_{2n+1} z) I_1(\alpha_{2n+1} R) K_1(\alpha_{2n+1} a) / I_1(\alpha_{2n+1} a),$$

$$\alpha_{2n+1} = \pi(2n+1) / 2b,$$

I_1 , K_1 - функции Бесселя от мнимого аргумента.

S характеризует величину внешнего магнитного поля (заданная константа).

В силу симметрии задачи по z ищется такая симметричная относительно оси Oz область Ω внутри прямоугольника Δ , чтобы найденные φ и A из (I)-(7) при такой Ω удовлетворяли соотношению

$$\Phi(\varphi(P), A(P)) \Big|_P = 0$$

- любая точка \in границе области Ω .

Такая область Ω и такие функции φ и A являются самосогласованным решением задачи (I)-(7). Отметим, что при некоторых значениях входных параметров задача может и не иметь решения.

2. Метод решения задачи

Краевая задача (I)-(7) решается методом Галеркина [2]. В качестве координатных функций, удовлетворяющих (7), выбраны

$$\varphi_{me} = \cos \frac{m\pi z}{2a} \cos \frac{\ell\pi z}{2b}, \quad (9)$$

$$\varphi_{ij} = \sin \frac{i\pi z}{a} \cos \frac{j\pi z}{2b}, \quad (10)$$

$$k, \ell, j = 1, 3, 5, \dots; \quad i = 1, 2, 3, \dots$$

Область (сечения пучка электронов) ищется в виде симметричного относительно оси Oz $2K$ -угольника

- а) либо методом последовательных приближений;
- б) либо методом введения непрерывного параметра (непрерывным аналогом метода Ньютона).

Для некоторых из подпрограмм ниже, помимо краткого описания, будут приведены и заложенные в них алгоритмы. Метод и алгоритмы, реализованные в других подпрограммах, подробно изложены в [1].

3. Программа решения задачи

Алгоритм решения задачи (I)-(7) реализован в программе (см. блок-схему), состоящей из 27 подпрограмм, написанных на языке ФОРТРАН для ЭВМ БЭСМ-6 и СДС-6200 /3,4/. Длина программы на СДС-6200 4380₁₀ слов (число 4380 написано в десятичной системе счисления). Программа имеет относительную самостоятельность: она обслуживается только несколькими библиотечными стандартными подпрограммами, вычисляющими некоторые элементарные функции и функции Бесселя от многого аргумента.

Ниже дается краткое описание основных подпрограмм и указывается их назначение. Более подробно рассматриваются те подпрограммы, которые имеют и самостоятельное значение. Неописанные подпрограммы в блок-схеме являются вспомогательными.

4. Программа USER и подпрограмма RORERE

Основную вызывающую программу, которую нужно составить пользователю, назовем USER.

Подпрограмма RORERE является основной в этом пакете подпрограмм. Она управляет всеми вычислениями. В ней заложены два метода согласования области, указанные в п.2. На блок-схеме цифрами указан порядок вызова отдельных подпрограмм в RORERE. Режим работы RORERE задается в USER. Именно:

I. Указывается, какой из методов в 2 будет использоваться для самосогласования решения, т.е. нахождения такой области Ω , на контуре которой после решения задачи (I)-(7) функция $\Phi(\varphi, A)$ из (5) обращается в нуль.

2. Задается геометрия камеры, т.е. размеры a, b прямоугольника Δ , радиус R витков и расстояние Z между ними.

3. Указывается максимальное число допустимых итераций для решения задачи любым из методов. Кроме того, задается допустимая абсолютная величина максимальной разности результатов двух соседних итераций.

4. Задаются все физические параметры задачи - x, M_0, H_0, S (вычисляются по формулам), см. /I/.

5. Задаются максимальные значения параметров i, j, m, ℓ в формулах (9) и (10). Таким образом определяется число координатных функций в методе Галеркина для нахождения φ и A из (I)-(7).

В USER задаются и другие важные параметры задачи, о которых будет сказано ниже.

В том случае, когда самосогласование решения проводится непрерывным аналогом метода Ньютона, шаг по непрерывному параметру t задается внутри подпрограммы RORERE на каждой итерации равным единице. Если такое значение шага после соответствующей итерации не приводит к выпуклому многоугольнику (начальный многоугольник задается выпуклым в USER координатами его вершины), то происходит дробление шага до тех пор, пока вновь полученный многоугольник окажется выпуклым.

5. Подпрограммы MATA, MATFI, SOLVEA, SOLVEF

Из формул для элементов матриц систем линейных алгебраических уравнений, получаемых применением метода Галеркина при решении соответствующих краевых задач для функций A и φ из /I/, видно, что каждый элемент этих матриц состоит из двух частей. Одна часть зависит только от размеров камеры и, следовательно, постоянная, а другая

часть существенно зависит от области. Поэтому естественно хранить в памяти ЭВМ (или во внешней памяти) две постоянные матрицы, которые заполняются (подпрограммами MATA и MATFI) в начале работы программы, и затем с их помощью формируются (подпрограммами SOLVEA и SOLVEF) рабочие массивы с учетом изменения области.

6. Подпрограммы SOLIT и LINROT

Оказывается, что рабочие матрицы, о которых шла речь в 5, плохо обусловлены, особенно при возрастании числа \mathcal{K} и порядка матриц. Поэтому для нахождения коэффициентов в разложениях функций φ и A по координатным функциям составлены две подпрограммы: SOLIT и LINROT. В USER указывается, какая из этих двух подпрограмм будет использоваться для решения соответствующих систем линейных алгебраических уравнений. В SOLIT реализован следующий алгоритм.

Пусть нужно решить систему

$$Bx = y, \quad (II)$$

где B - $m \times n$ - матрица ($m > n$), x - n - вектор, y - m - вектор. Решение системы (II) ищется модифицированным регуляризованным итерационным методом Гаусса-Ньютона для линейных систем

$$x_{n+1} = x_n - (B^T B + \alpha I)^{-1} B^T (B x_n - y), \quad (I2)$$

где I - единичная матрица, значок T означает транспонирование и $\alpha > 0$ - параметр регуляризации. Перед обращением матрица $B^T B$ нормируется таким образом, что ее элементы c_{ij} заменяются на

$$c'_{ij} = c_{ij} / \sqrt{c_{ii} c_{jj}}.$$

Эта нормировка оказывается весьма целесообразной. Известно, что она уменьшает число обусловленности матрицы. Параметр α выбирается

постоянным в течение итерационного процесса. В этой подпрограмме находится $\beta_\mu = \|x_\mu - x_{\mu-1}\|$ и $\gamma_\mu = \|B x_\mu - y\|$, где $\|\cdot\|$ означает евклидову норму и M - число проведенных итераций по формуле (I2). Процесс итерирования останавливается, если $\beta_\mu < \varepsilon$. Подпрограмма используется для случая $m = n$. Параметры α , ε и максимальное число допустимых итераций задаются в USER.

Подпрограмма SOLIT является упрощенным вариантом более общей программы, составленной С.Аврамовым для решения систем нелинейных алгебраических и трансцендентных уравнений методом, аналогичным (I2).

В подпрограмме LINROT запрограммирован метод вращения^{/6/}. Именно, используются элементарные матрицы вращения в качестве управляющих комбинированием строк в процессе исключения для преобразования данной матрицы к треугольному виду. Затем для нахождения решения системы проводится обычный обратный ход. Этот метод требует приблизительно в 4 раза больше арифметических операций, чем схема единственного деления, но он более устойчив и зарекомендовал себя, как один из лучших.

7. Подпрограммы FAL, FAR, FFIL, FFIR, GAUSS

Если для нахождения φ и A выбраны L и L_1 координатных функций соответственно, то метод Галеркина требует вычисления $L^2 + L_1^2 + L + L_1$ двойных интегралов по области Ω . По этой причине искомая область была аппроксимирована многоугольником, так как в этом случае все интегралы можно вычислить точно в аналитическом виде.

В четырех подпрограммах, FAL, FAR, FFIL, FFIR, запрограммированы полученные аналитические выражения соответственно для двойных интегралов

$$\iint_{\Omega} r \Psi_{k\ell} \Psi_{k'\ell'} dr dz, \quad \iint_{\Omega} \Psi_{k\ell} dr dz,$$

$$\iint_{\Omega} \Psi_{k\ell} \Psi_{k'\ell'} dr dz, \quad \iint_{\Omega} \Psi_{k\ell} dr dz,$$

где $\Psi_{k\ell}$, $\Psi_{k'\ell'}$ - координатные функции (9) и (10). Интегралы в виде

$$\iint_{\Omega} r \Psi_{k\ell} A^{\circ}(r, z) dr dz$$

берутся аналитически один раз по z . Интегрирование по r проводится в подпрограмме GAUSS численно, с использованием 16-точечной формулы Лежандра-Гаусса [7].

8. Подпрограммы CURVE, FIBIG и AZERO

В подпрограмме CURVE находится N точек кривой Γ :

$\Gamma: \Phi(\varphi, A) = 0$, где φ и A определены из (1)-(7). Именно, строится прямоугольная равномерная сетка в плоскости (r, z) с шагами h_r и h_z и ищется перемена знака функции (5) в узлах сетки, находящихся внутри Δ . Параметры N , h_r , h_z задаются в USER.

Подпрограммой FIBIG вычисляется значение функции

$$\Phi(\varphi(r, z), A(r, z)) \text{ по формуле (5) в любой точке } (r, z).$$

В этой подпрограмме предусмотрена регуляризация задачи суммирования тригонометрических сумм, так как функции φ и A представлены в виде двойных тригонометрических сумм и коэффициенты этих сумм найдены с погрешностями. Когда число слагаемых велико, начнет проявляться некорректность задачи суммирования тригонометрических рядов.

В подпрограмме заложен следующий метод регуляризации. Вместо того, чтобы суммировать прямым образом ряды, например типа

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} a_{km} \cos \frac{k\pi r}{a} \sin \frac{m\pi z}{2b},$$

вводится регуляризирующий параметр β , имеющий тот же порядок малости, как погрешность в коэффициентах a_{km} в норме пространства l^2 , и коэффициенты a_{km} заменяются на

$$a_{km} \left[1 + \left(\frac{k\pi}{a}\right)^2 \beta\right]^{-1} \left[1 + \left(\frac{m\pi}{2b}\right)^2 \beta\right]^{-1}.$$

Нами доказано, что такой метод регуляризации является устойчивым методом суммирования двойных тригонометрических рядов. Прямое суммирование получается при $\beta = 0$. В качестве регуляризирующего параметра β можно использовать норму $\beta_M = \|x_M - x_{M-1}\|$, получаемую в SOLIT. Другая возможность состоит в задании β в USER.

В подпрограмме AZERO вычисляется значение функции $A^{\circ}(r, z)$ по формуле (8). Из быстро сходящегося ряда (8) обычно берутся 4-5 членов. Число используемых членов в ряде (8) задается в USER.

9. Подпрограммы SQUARE и TRISIM

В подпрограмме SQUARE из всех N точек $P_i(r_i, z_i)$ кривой Γ , найденных в подпрограмме CURVE, эвристическим подходом находится K точек $P_{i_s}(r_{i_s}, z_{i_s})$ с таким расчетом, чтобы кривая Γ наименее уклонялась от ломаной (P_1, P_2, \dots, P_K) . Расстояние между Γ и ломаной берется в следующем смысле. Пусть точки пересечения прямых, проходящих через P_2, P_3, \dots, P_{N-1} параллельно оси Oz , с отрезками $P_1, P_2, P_3, \dots, P_{K-1}, P_K$ есть Q_2, Q_3, \dots, Q_{N-1} . Расстояние определяется формулой

$$\Sigma = \sum_{i=2}^{N-1} |P_i Q_i|^2. \quad (13)$$

Подбор $P_{i_1}, P_{i_2}, \dots, P_{i_K}$ возможен, так как число вписанных в кривую Γ ломаных, состоящих из $K-1$ звеньев с вершинами в точках P_1, P_2, \dots, P_N , конечно. На этом заканчивается первый этап аппроксимации кривой Γ ломаной. Второй этап состоит в уточнении аппроксимации, полученной на первом этапе. Именно, первые координаты $z_{i_2}, z_{i_3}, \dots, z_{i_{(K-1)}}$ точек $P_{i_2}, P_{i_3}, \dots, P_{i_{(K-1)}}$ фиксируются и изменяются только $z_{i_2}, z_{i_3}, \dots, z_{i_{(K-1)}}$, чтобы минимизировать сумму (13). В координатной записи (13) выглядит так:

$$\begin{aligned} \sum = & \sum_{i=2}^{i_2} \left[z_i - x_{i_2} \frac{z_i - z_1}{z_{i_2} - z_1} \right]^2 + \sum_{\ell=3}^{K-1} \sum_{i=i_{(\ell-1)}+1}^{i_\ell} \left[z_i - x_{i_{(\ell-1)}} - \right. \\ & \left. - (z_i - z_{i_{(\ell-1)}}) \frac{x_{i_\ell} - x_{i_{(\ell-1)}}}{z_\ell - z_{\ell-1}} \right]^2 + \sum_{i=i_{(K-1)}+1}^{N-1} \left[z_i - x_{i_{(K-1)}} + \right. \\ & \left. + (z_i - z_{i_{(K-1)}}) \frac{x_{i_N} - x_{i_{(K-1)}}}{z_N - z_{i_{(K-1)}}} \right]^2, \end{aligned} \quad (14)$$

где неизвестные новые значения $z_{i_2}, z_{i_3}, \dots, z_{i_{(K-1)}}$ обозначены через $x_{i_2}, x_{i_3}, \dots, x_{i_{(K-1)}}$ и учтено, что в нашем случае $z_1 = z_N = z_{i_1} = z_{i_K} = 0$. За счет этой упрощенной схемы аппроксимации получили \sum в виде квадратичной функции от переменных $x_{i_2}, x_{i_3}, \dots, x_{i_{(K-1)}}$, и, следовательно, для нахождения ее минимума нужно решить только систему линейных алгебраических уравнений. Выпишем эту систему в компактном виде. Дифференцируя (14) последовательно относительно $x_{i_2}, x_{i_3}, \dots, x_{i_{(K-1)}}$ и приравнявая нулю производные, получаем:

$$\begin{aligned} & \left[\sum_{i=i_{(\ell-1)}+1}^{i_\ell} \left(1 - \frac{z_i - z_{i_{(\ell-1)}}}{z_\ell - z_{i_{(\ell-1)}}} \right) \frac{z_i - z_{i_{(\ell-1)}}}{z_\ell - z_{i_{(\ell-1)}}} \right] x_{i_{(\ell-1)}} + \\ & + \left[\sum_{i=i_{(\ell-1)}+1}^{i_\ell} \left(\frac{z_i - z_{i_{(\ell-1)}}}{z_\ell - z_{i_{(\ell-1)}}} \right)^2 - \sum_{i=i_\ell+1}^{i_{(\ell+1)}} \left(1 - \frac{z_i - z_{i_\ell}}{z_{i_{(\ell+1)}} - z_{i_\ell}} \right)^2 \right] x_{i_\ell} + \\ & + \left[\sum_{i=i_\ell+1}^{i_{(\ell+1)}} \left(1 - \frac{z_i - z_{i_\ell}}{z_{i_{(\ell+1)}} - z_{i_\ell}} \right) \frac{z_i - z_{i_\ell}}{z_{i_{(\ell+1)}} - z_{i_\ell}} \right] x_{i_{(\ell+1)}} = \end{aligned} \quad (15)$$

$$= \sum_{i=i_{(\ell-1)}+1}^{i_\ell} z_i \frac{z_i - z_{i_{(\ell-1)}}}{z_\ell - z_{i_{(\ell-1)}}} + \sum_{i=i_\ell+1}^{i_{(\ell+1)}} z_i \left(1 - \frac{z_i - z_{i_\ell}}{z_{i_{(\ell+1)}} - z_{i_\ell}} \right).$$

$\ell = 2, 3, \dots, K-1.$

Параметр K задается в USER.

Матрица коэффициентов системы (15) трехдиагональная и симметричная. Элементы ее главной диагонали, а также ее первой наддиагонали получаются из формул одинаковой структуры.

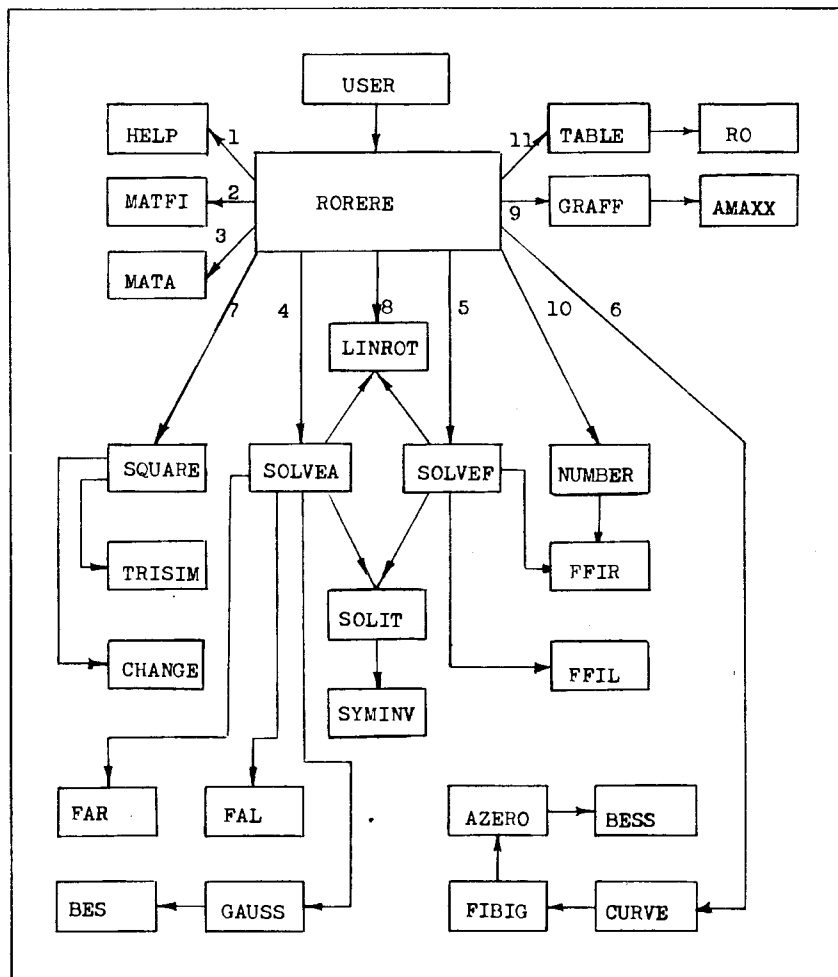
Для решения системы (15) составлена программа TRISIM, которая имеет и самостоятельное значение, так как, пользуясь ею, можно решить произвольную систему линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной симметричной невырожденной матрицей коэффициентов. В TRISIM реализован один из алгоритмов работы /5/.

10. Подпрограммы GRAFF, NUMBER и TABLE

При надобности границу области можно вычерчивать подпрограммой GRAFF. При этом используются точки $P_i(z_i, z_i)$, $i=1, 2, \dots, N$, найденные подпрограммой CURVE.

В случаях, когда самосогласованное решение найдено, в подпрограмме NUMBER вычисляется полное число частиц в пучке.

БЛОК-СХЕМА ПРОГРАММЫ



В подпрограмме TABLE печатается таблица плотностей частиц в точках области Ω , являющихся узлами прямоугольной сетки в плоскости (x, z) .

В заключение авторы выражают глубокую благодарность С.Б.Рубину за физическую постановку задачи и полезные обсуждения, С.Аврамову за предоставление составленной им подпрограммы SOLIT и внимание к работе, а также И.П.Илиеву, принявшему участие в составлении одного из первых вариантов программы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Е.П.Жидков, И.П.Илиев, С.Б.Рубин, Х.И.Семерджиев. ОИЯИ, P5-7394, Дубна, 1973.
2. С.Г.Михлин. Численная реализация вариационных методов, "Наука", М., 1966.
3. Язык ФОРТРАН, под редакцией В.П.Шурикова. ОИЯИ, II-4818, Дубна, 1968.
4. FORTRAN Extended reference manual CDC - publ. No 60329100.
5. Б.Бухбергер, Г.А.Емельяненко. ОИЯИ, PII-5686, Дубна, 1971.
6. Д.К.Фаддеев, В.Н.Фаддеева. Вычислительные методы линейной алгебры. Физматгиз, М., 1960.
7. В.И.Крылов. Приближенное вычисление интегралов, "Наука", М., 1967.

Рукопись поступила в издательский отдел
30 октября 1974 г.