

49  
И Н С Т И Т У Т  
ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СОАН СССР

ПРЕПРИНТ И Я Ф 76 - 80

В.В.Вечеславов

МЕТОД МАКРОЧАСТИЦ ПРИ ОГРАНИЧЕНИЯХ  
НА ДВИЖЕНИЕ МАКРОЧАСТИЦ

Новосибирск

1976



МЕТОД МАКРОЧАСТИЦ ПРИ ОГРАНИЧЕНИЯХ НА  
ДВИЖЕНИЕ МАКРОЧАСТИЦ

В.В.Вечеславов

А Н Н О Т А Ц И Я

Метод макрочастиц в сочетании с алгоритмом быстрого дискретного преобразования Фурье (БПФ) является эффективным способом численного моделирования поведения зарядов в трехмерной прямоугольной области. Рассмотрен случай, когда движение макрочастиц в направлении некоторых координатных осей отсутствует, т.е. число степеней свободы каждой макрочастицы  $\mathcal{N}_M < 3$ . Показано, что всю необходимую для расчета информацию можно получить используя БПФ размерности  $\mathcal{N}_M$ , действующее в подпространстве открытых для движения направлений. Распределение заряда макрочастицы вдоль закрытых направлений может быть задано произвольно.



При численном моделировании процессов в плазме и ускорителях с высокой интенсивностью пучка исследуется коллективное движение многих заряженных частиц в пространственной области  $G$ . Если  $G$  есть прямоугольный параллелепипед (часть или все вершины которого могут лежать в бесконечности), то одним из наиболее эффективных способов решения задачи является применение метода макрочастиц в сочетании с алгоритмом быстрого дискретного преобразования Фурье (БПФ) /1,2/.

Каждая макрочастица имеет заданные форму, размеры и распределение заряда. Как правило, геометрию макрочастицы назначают в соответствии с геометрией области и макрочастицы ".... в форме листов (одномерный случай), стержней (двумерный) или кубов (трехмерный) сейчас используют для моделирования плазмы по существу все плазменные лаборатории" (Ч.Бердсол и др., /1/). Для того, чтобы в процессе счета макрочастица проявляла себя как объект с неизменными свойствами её размеры и распределение заряда должны быть согласованы с параметрами алгоритма БПФ /3/. Обычно мгновенное положение макрочастицы в области  $G$  и действующие на неё силы определяются по координатам её центра тяжести.

Рассмотрим подробнее трехмерный случай, когда движение макрочастиц в направлении некоторых координатных осей отсутствует в силу принятых допущений или по сути дела. Такая ситуация возникает, например, при исследовании некоторых радиально-фазовых эффектов в ускорителях: слабая зависимость этих эффектов от вертикального движения позволяет считать, что центр тяжести всех макрочастиц расположен всегда в медианном сечении камеры.

Ниже показывается, что когда число степеней свободы макрочастицы  $N_m < 3$ , то всю необходимую для расчета информацию можно получить, используя БПФ размерности  $N_m$ , действующей в подпространстве, открытых для движения направлений. При этом распределение заряда макрочастицы вдоль закрытых направлений может быть задано произвольно.

Проще всего провести выяснение деталей на конкретном примере движения  $M$  макрочастиц в камере рис.1 при условии, что центры тяжести макрочастиц не покидают плоскости  $Z=0$ . Будем считать, что для интегрирования уравнений движения достаточно отыскать значения потенциала  $U$  и компонент напряженности поля  $E_x$ ,



$E_y$  только в этой плоскости (позже мы снимем это ограничение). Предполагается, что  $U=0$  на металлических стенках камеры  $y=0$ ,  $y=Ay/2$ ,  $z=Az/4$ ,  $z=-Az/4$ , а на границах  $x=0$  и  $x=Ax$  потенциал и его производные совпадают. Это означает, что распределения плотности заряда и потенциала описываются функциями с общей периодической зависимостью от  $x$ , нечетной от  $y$  и четной от  $z$ .

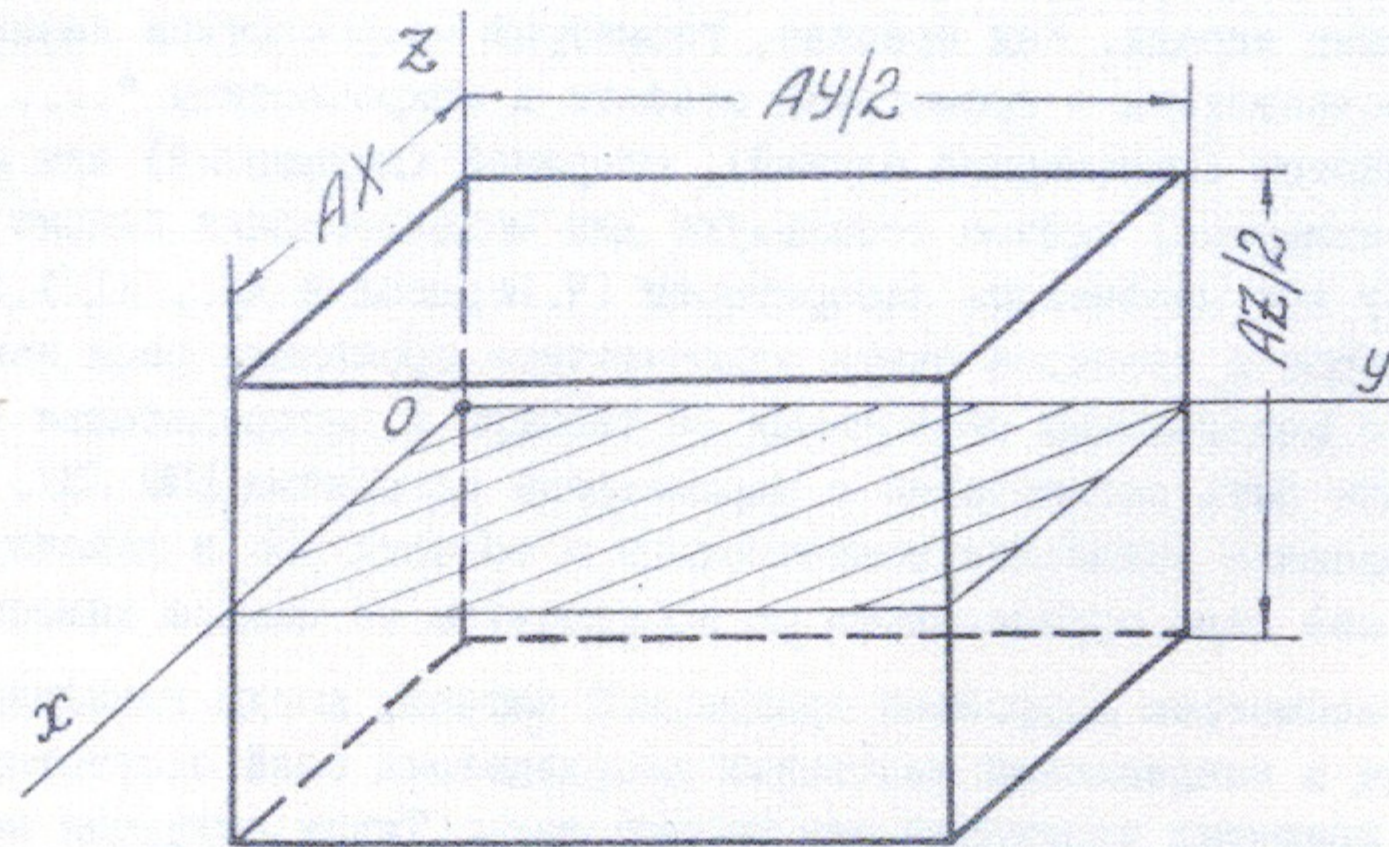


Рис. I

Пусть распределение плотности заряда в области  $G$ , созданное макрочастицей с номером  $i$ , имеет вид:

$$\rho_m^{(i)}(x, y, z) = \rho_{12}^{(i)}(x, y) \cdot \rho_3(z), \quad (I)$$

здесь  $\rho_{12}^{(i)}(x, y)$  - функция, согласованная с механизмом БФ, действующим в двумерной области  $g$  ( $0 \leq x < Ax$ ,  $0 \leq y < Ay/2$ ),

$\rho_3(z) = \sum_{k=0}^{\infty} F_k \cdot \cos\left(\frac{2\pi k z}{Az}\right)$  - произвольная заданная функция  $z$ .

Для мгновенного распределения плотности полного заряда, созданного в  $G$  всеми  $M$  макрочастицами с учетом (I) и ограничений на движение находим:

$$\begin{aligned} \rho(x, y, z) &= \sum_{i=1}^M \rho_{12}^{(i)}(x, y) \cdot \rho_3(z) = \rho_{12}(x, y) \cdot \rho_3(z) = \\ &= \sum_n \sum_m \left[ C_{mn} \cos\left(\frac{2\pi m x}{Ax}\right) + D_{mn} \sin\left(\frac{2\pi m x}{Ax}\right) \right] \sin\left(\frac{2\pi n y}{Ay}\right) \cdot \sum_k F_k \cdot \cos\left(\frac{2\pi k z}{Az}\right) = \\ &= \sum_n \sum_m \sum_k \left[ A_{mnk} \cos\left(\frac{2\pi m x}{Ax}\right) + B_{mnk} \sin\left(\frac{2\pi m x}{Ax}\right) \right] \sin\left(\frac{2\pi n y}{Ay}\right) \cdot \cos\left(\frac{2\pi k z}{Az}\right), \quad (2) \\ A_{mnk} &= C_{mn} \cdot F_k, \quad B_{mnk} = D_{mn} \cdot F_k. \quad (3) \end{aligned}$$

Матрица коэффициентов Фурье  $\{C_{mn}, D_{mn}\}$  плотности заряда на каждом шаге вычислений определяется в результате работы прямого БФ, действующего в  $g$ .

На основании (2) и граничных условий получаем общее выражение для трехмерного потенциала в области  $G$ :

$$U(x, y, z) = \sum_n \sum_m \sum_k \left[ \bar{A}_{mnk} \cos\left(\frac{2\pi m x}{Ax}\right) + \bar{B}_{mnk} \sin\left(\frac{2\pi m x}{Ax}\right) \right] \sin\left(\frac{2\pi n y}{Ay}\right) \cdot \cos\left(\frac{2\pi k z}{Az}\right), \quad (4)$$

$$\bar{A}_{mnk} = -A_{mnk} / \left[ \left(\frac{2\pi m}{Ax}\right)^2 + \left(\frac{2\pi n}{Ay}\right)^2 + \left(\frac{2\pi k}{Az}\right)^2 \right], \quad (5)$$

$$\bar{B}_{mnk} = -B_{mnk} / \left[ \left(\frac{2\pi m}{Ax}\right)^2 + \left(\frac{2\pi n}{Ay}\right)^2 + \left(\frac{2\pi k}{Az}\right)^2 \right]. \quad (6)$$

Используя соотношения (3)-(6) и производя суммирование по  $z$  при  $z=0$ , имеем:

$$U(x, y) \Big|_{z=0} = \sum_n \sum_m \left[ C_{mn}^{(0)} \cos\left(\frac{2\pi m x}{Ax}\right) + D_{mn}^{(0)} \sin\left(\frac{2\pi m x}{Ax}\right) \right] \sin\left(\frac{2\pi n y}{Ay}\right), \quad (7)$$

$$C_{mn}^{(0)} = q_{mn} \cdot C_{mn}, \quad D_{mn}^{(0)} = q_{mn} \cdot D_{mn}, \quad (8)$$

где

$$q_{mn} = - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{F_k}{\left(\frac{2\pi m}{Ax}\right)^2 + \left(\frac{2\pi n}{Ay}\right)^2 + \left(\frac{2\pi k}{Az}\right)^2}. \quad (9)$$

На этом этапе вычислений возможен и часто целесообразен прямой переход к Фурье-образам компонент напряженности поля  $E_x, E_y$



в плоскости  $z=0$  :

$$E_x(x,y) \Big|_{z=0} = \sum_n \sum_m \left[ C_{mn}^{(1)} \cos\left(\frac{2\pi mx}{AX}\right) + D_{mn}^{(1)} \sin\left(\frac{2\pi mx}{AX}\right) \right] \sin\left(\frac{2\pi ny}{AY}\right), \quad (10)$$

$$C_{mn}^{(1)} = -\frac{2\pi m}{AX} q_{mn} D_{mn}, \quad D_{mn}^{(1)} = \frac{2\pi m}{AX} q_{mn} C_{mn}, \quad (11)$$

$$E_y(x,y) \Big|_{z=0} = \sum_n \sum_m \left[ C_{mn}^{(2)} \cos\left(\frac{2\pi mx}{AX}\right) + D_{mn}^{(2)} \sin\left(\frac{2\pi mx}{AX}\right) \right] \cos\left(\frac{2\pi ny}{AY}\right), \quad (12)$$

$$C_{mn}^{(2)} = -\frac{2\pi n}{AY} q_{mn} C_{mn}, \quad D_{mn}^{(2)} = -\frac{2\pi n}{AY} q_{mn} D_{mn}. \quad (13)$$

Распределения  $U, E_x, E_y$  в плоскости  $z=0$  восстанавливаются по своим коэффициентам Фурье  $\{C_{mn}^{(0)}, D_{mn}^{(0)}\}, \{C_{mn}^{(1)}, D_{mn}^{(1)}\}$  и  $\{C_{mn}^{(2)}, D_{mn}^{(2)}\}$  соответственно с помощью обратного БФ, действующего в двумерной области  $g$ .

Отметим особую роль, которую играют коэффициенты  $\{q_{mn}\}$ , определяемые согласно (9). С их помощью осуществляется переход от распределения заряда к созданному этим зарядом распределению (трехмерного) электростатического поля в плоскости  $z=0$ ; по этой причине удобно называть  $\{q_{mn}\}$  коэффициентами перехода. Ясно, что можно переходить не только в медианную плоскость, но и в любую другую  $z=z_0$ , используя вместо (9) более общее выражение:

$$q_{mn}(z_0) = -\sum_{k=0}^{\infty} \frac{F_k \cdot \cos\left(\frac{2\pi k z_0}{AZ}\right)}{\left(\frac{2\pi m}{AX}\right)^2 + \left(\frac{2\pi n}{AY}\right)^2 + \left(\frac{2\pi k}{AZ}\right)^2}. \quad (14)$$

Если для расчета движения недостаточно знать поле в единственном сечении  $z=z_0$ , то с помощью (14) и описанной методики можно изучить ряд сечений  $z=z_1, z=z_2, \dots$ . Этот же способ оказывается полезен, когда имеется несколько "этажей", заселенных не покидающими их макрочастицами.

Коэффициенты  $\{q_{mn}\}$  вычисляются один раз на всю задачу. Их величины зависят как от координаты перехода  $z_0$ , так и от закона  $\{F_k\}$  распределения заряда макрочастицы по направлению  $z$ .

В Приложении I даны выражения  $q_{mn}$  для некоторых практически интересных  $z$ -распределений.

По аналогии с рассмотренным случаем  $N_m=2$  можно изучить одномерное движение трехмерных макрочастиц, например, вдоль оси  $x$  по линии  $y=y_0, z=z_0$ . Пусть заряд  $i^{oi}$  макрочастицы распределен по закону

$$\rho_m^{(i)} = \rho_1^{(i)}(x) \cdot \rho_2^{(i)}(y) \cdot \rho_3^{(i)}(z) \quad (15)$$

здесь  $\rho_1^{(i)}(x)$  - функция, согласованная с механизмом БФ, действующим на линии  $y=y_0, z=z_0$ ,

$\rho_2^{(i)}(y) = \sum_{n=1}^{\infty} G_n \sin\left(\frac{2\pi ny}{AY}\right)$  - произвольная заданная функция  $y$ ,

$\rho_3^{(i)}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} F_k \cdot \cos\left(\frac{2\pi kz}{AZ}\right)$  - произвольная заданная функция  $z$ .

Легко показать, что коэффициенты перехода и потенциал определяются выражениями:

$$q_m(y_0, z_0) = -\sum_n \sum_k \frac{G_n F_k \cdot \sin\left(\frac{2\pi ny_0}{AY}\right) \cdot \cos\left(\frac{2\pi kz_0}{AZ}\right)}{\left(\frac{2\pi m}{AX}\right)^2 + \left(\frac{2\pi n}{AY}\right)^2 + \left(\frac{2\pi k}{AZ}\right)^2}, \quad (16)$$

$$U(x) \Big|_{\substack{y=y_0 \\ z=z_0}} = \sum_m \left[ C_m^{(0)} \cos\left(\frac{2\pi mx}{AX}\right) + D_m^{(0)} \sin\left(\frac{2\pi mx}{AX}\right) \right], \quad (17)$$

$$C_m^{(0)} = q_m C_m, \quad D_m^{(0)} = q_m D_m. \quad (18)$$

Здесь  $\{C_m, D_m\}$  есть Фурье-образ мгновенного распределения заряда на линии  $y=y_0, z=z_0$ , полученный в результате одномерного прямого БФ. Как и выше, потенциал на линии восстанавливается по матрице  $\{C_m^{(0)}, D_m^{(0)}\}$  с помощью обратного БФ.

Возможны расчетные ситуации, когда размеры макрочастицы в каком-либо закрытом для движения координатном направлении конечны, а границы области отодвинуты бесконечно далеко. Это обстоятельство приводит к тому, что в выражениях для коэффициентов перехода вместо сумм появляются соответствующие интегралы Фурье. Один из примеров такого рода для случая одномерного движения макрочастиц рассмотрен в Приложении II.

Автор благодарен Б.В.Чирикову за обсуждения.



ПРИЛОЖЕНИЕ I

Коэффициенты перехода для некоторых  $z$ -распределений  
заряда макрочастицы

I. Распределение типа "палочка":  $\rho_3(z) = A$  при  $-b \leq z \leq b$  и равно нулю на остальной части полупериода (рис.2).

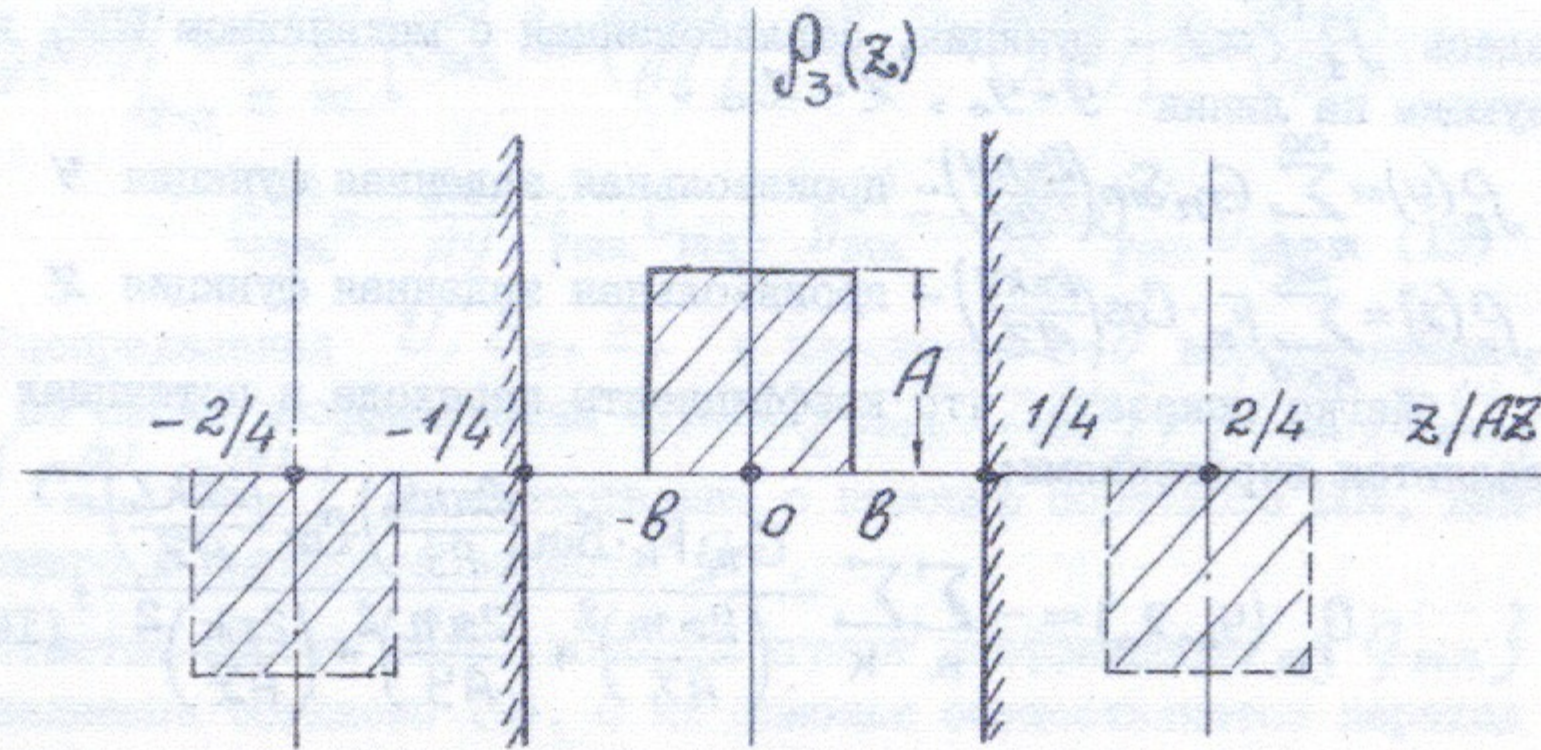


Рис.2

Для коэффициентов Фурье  $F_k$  имеем /4/:

$$F_k = \frac{4A}{\pi} \cdot \frac{1}{k} \cdot \sin^2\left(\frac{\pi k}{2}\right) \cdot \sin\left(\frac{2\pi k b}{Az}\right). \quad (\text{III})$$

Коэффициенты перехода в плоскость  $z = z_0$  согласно (I4):

$$q_{mn}(z_0) = -\frac{4A}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{1}{k} \sin^2\left(\frac{\pi k}{2}\right) \cdot \frac{\sin\left(\frac{2\pi k b}{Az}\right) \cdot \cos\left(\frac{2\pi k z_0}{Az}\right)}{\left(\frac{2\pi m}{Ax}\right)^2 + \left(\frac{2\pi n}{Ay}\right)^2 + \left(\frac{2\pi k}{Az}\right)^2} \cdot (\text{II2})$$

Здесь интересны два частных случая.

1) Пусть  $A=1$ ,  $b = Az/4$ ,  $Az \rightarrow \infty$ :

$$q_{mn} = \lim_{Az \rightarrow \infty} q_{mn}(z_0) = -\frac{1}{\left(\frac{2\pi m}{Ax}\right)^2 + \left(\frac{2\pi n}{Ay}\right)^2} \quad (\text{III})$$

и мы получаем коэффициенты для бесконечных двумерных стержней, т.е. обычную двумерную модель макрочастицы.

2) Пусть  $z_0 = 0$ ,  $A \cdot b = 1$ ,  $b \rightarrow 0$ :

$$q_{mn} = -\frac{8}{Az} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin^2\left(\frac{\pi k}{2}\right)}{\left(\frac{2\pi m}{Ax}\right)^2 + \left(\frac{2\pi n}{Ay}\right)^2 + \left(\frac{2\pi k}{Az}\right)^2} = -\frac{Az}{2\pi b} \cdot \text{th}\left(\frac{\pi b}{2}\right). \quad (\text{II4})$$

Здесь  $b^2 = (m \cdot Az / Ax)^2 + (n \cdot Az / Ay)^2$  и использовано представление гиперболического тангенса через простейшие дроби /5/. Формула (II4) относится к  $\delta$ -функциональному распределению заряда макрочастицы.

II. Гауссово распределение (Рис.3):

$$\rho_3(z) = +A \cdot \exp(-z^2/a^2). \quad (\text{II5})$$

Мы ограничим рассмотрение этого случая предположением, что  $a/Az \ll 1$ .

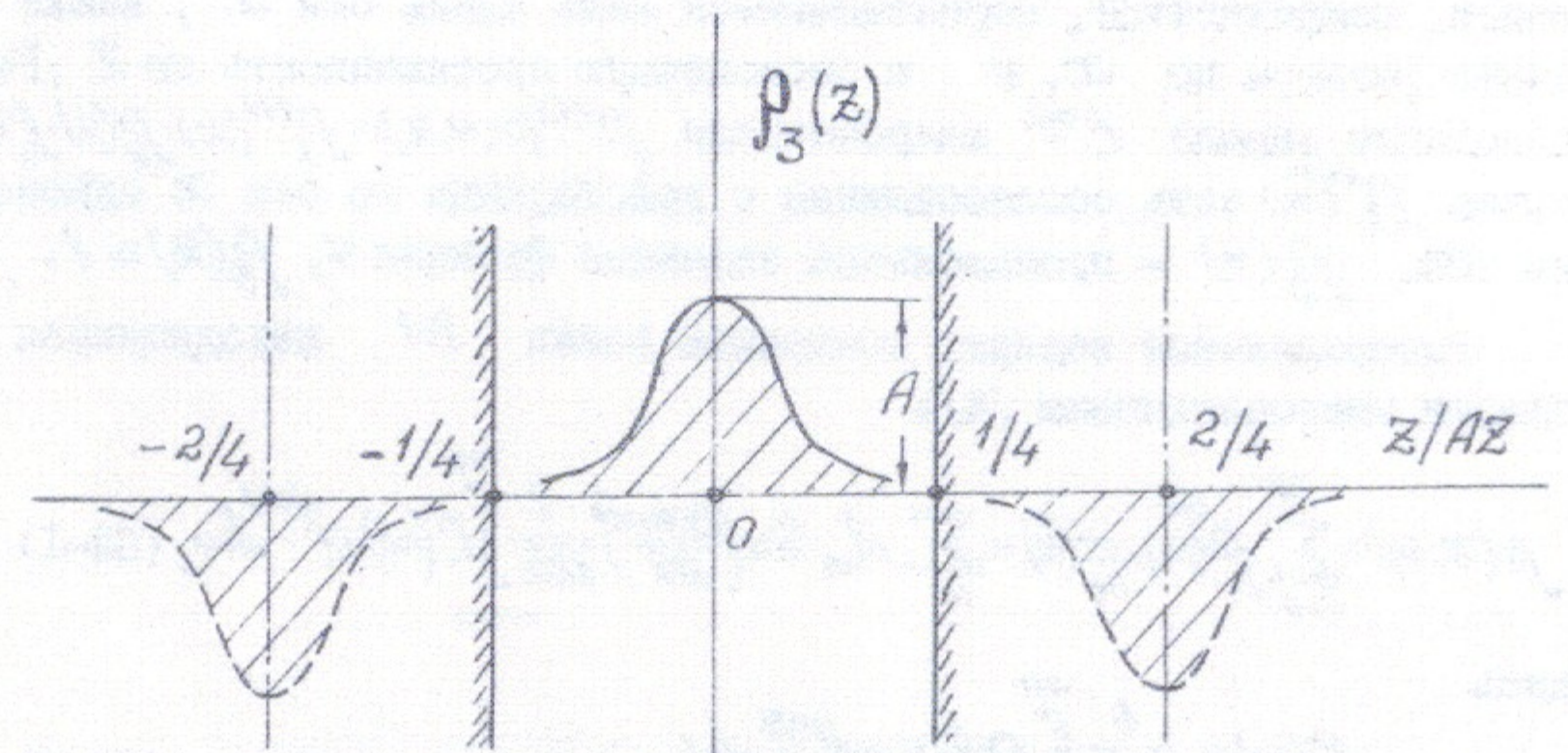


Рис.3

Найдем выражения для  $F_k$  :

$$F_k \simeq \frac{4A}{Az} \int_0^{Az/2} \cos\left(\frac{2\pi k z}{Az}\right) \cdot \left[ e^{-\frac{z^2}{a^2}} - e^{-\frac{(z-Az/2)^2}{a^2}} \right] \cdot dz \simeq \frac{4A}{Az} \cdot (1 - \cos \pi k) \cdot \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{2\pi k z}{Az}\right) \cdot e^{-\frac{z^2}{a^2}} \cdot dz = \quad (\text{II6})$$



$$= 2\sqrt{\pi} \cdot A \cdot \frac{a}{AZ} \cdot (1 - \cos \alpha k) \cdot \exp\left[-\left(\frac{\alpha k a}{AZ}\right)^2\right].$$

Для коэффициентов перехода в плоскость  $z = z_0$  получаем:

$$q_{mn}(z_0) = -2\sqrt{\pi} \cdot A \cdot \frac{a}{AZ} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(1 - \cos \alpha k) \cdot \exp\left[-\left(\frac{\alpha k a}{AZ}\right)^2\right] \cdot \cos\left(\frac{2\alpha k z_0}{AZ}\right)}{\left(\frac{2\pi m}{AX}\right)^2 + \left(\frac{2\pi n}{AY}\right)^2 + \left(\frac{2\alpha k}{AZ}\right)^2}. \quad (\text{П}7)$$

## ПРИЛОЖЕНИЕ II

### Одномерное движение трехмерных макрочастиц в бесконечной области

Область  $G$  образована двумя параллельными проводящими плоскостями  $x=0$  и  $x=AX/2$ , находящимися под нулевым потенциалом. Макрочастицы, перемещающиеся лишь вдоль оси  $x$ , имеют конечные размеры по  $x, y$  и бесконечную протяженность по  $z$ . Распределение заряда  $i$ -ой макрочастицы  $\rho^{(i)}(x, y, z) = \rho_1^{(i)}(x) \cdot \rho_2(y) \cdot \rho_3(z)$ , причем  $\rho_1^{(i)}(x)$  есть согласованная с действующим по оси  $x$  одномерным БПФ,  $\rho_2(y)$  — произвольная заданная функция  $y$ ,  $\rho_3(z) \equiv 1$ .

Распределение заряда, созданное всеми  $M$  находящимися в области макрочастицами /4/:

$$\rho(x, y) = \sum_{i=1}^M \rho_1^{(i)}(x) \cdot \rho_2(y) = \sum_m A_m \sin\left(\frac{2\pi m x}{AX}\right) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} C(\omega) e^{-j\omega y} d\omega. \quad (\text{П}2-1)$$

Здесь

$$C(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \rho_2(y) \cdot e^{j\omega y} dy. \quad (\text{П}2-2)$$

Для потенциала в произвольной точке  $x, y$  с учетом (П2-1) и граничных условий имеем:

$$U(x, y) = \sum_m q_m(y) \cdot A_m \cdot \sin\left(\frac{2\pi m x}{AX}\right), \quad (\text{П}2-3)$$

где 
$$q_m(y) = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{C(\omega) \cdot e^{-j\omega y} d\omega}{\left(\frac{2\pi m}{AX}\right)^2 + \omega^2}. \quad (\text{П}2-4)$$

10

Пусть, например,  $\rho_2(y) = \delta(y)$  есть дельта-функция: размер макрочастицы по оси  $y$  предельно мал и  $C(\omega) \equiv 1$ .

Для коэффициентов перехода в плоскость  $y_0$  находим /5/:

$$q_m(y_0) = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-j\omega y_0} \cdot d\omega}{\left(\frac{2\pi m}{AX}\right)^2 + \omega^2} = -\frac{AX}{2\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{m} \exp\left(-\frac{2\pi m y_0}{AX}\right). \quad (\text{П}2-5)$$



## Л и т е р а т у р а

1. Сборник "Вычислительные методы в физике плазмы", "Мир", М., 1974г.
2. Cochran W.T., "What is the fast Fourier transform", *Proc. IEEE*, 1967, v. 55, N10, p. 1664-1674.  
Iselin Ch., "An approach to fast Fourier transform", *CERN-Report 71-19*, 1971.
3. Вечеславов В.В. "Выбор характеристик отдельной макрочастицы в методе макрочастиц". Препринт 76-39 ИЯФ СО АН СССР, Новосибирск, 1976.
4. Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. "Справочник по математике", М., 1954.
5. Градштейн И.С., Рыжик И.М. "Таблицы сумм, рядов и произведений", М., 1962.

Работа поступила - 2 сентября 1976г.

---

Ответственный за выпуск - С.Г. ПОПОВ

Подписано к печати 8.IX-76г. МН 02931

Усл. 0,8 печ.л., тираж 150 экз. Бесплатно

Заказ № 80.

---

Отпечатано на ротапринте ИЯФ СО АН СССР