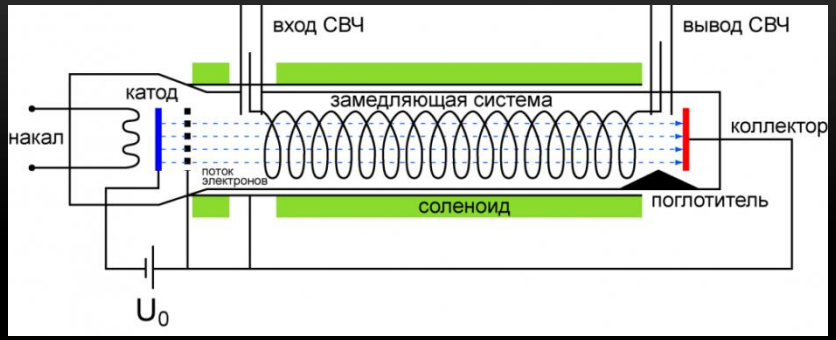
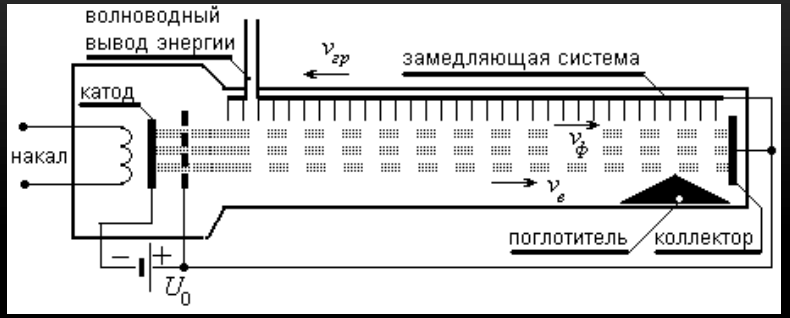
ПРОБЛЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ УСИЛИТЕЛЕЙ И ГЕНЕРАТОРОВ

С. Н. Сытова
Институт ядерных проблем Белгосуниверситета
sytova@inp.bsu.by

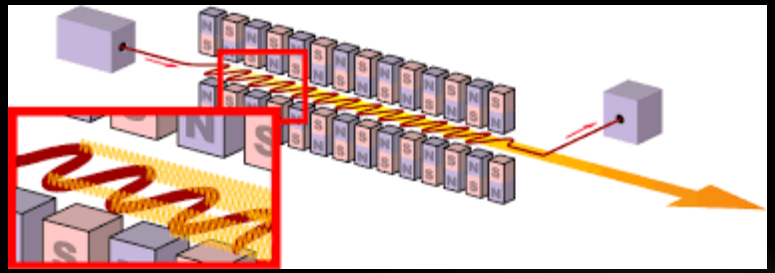
ВВЕДЕНИЕ. ЭЛЕКТРОННЫЕ УСИЛИТЕЛИ И ГЕНЕРАТОРЫ



R. Kompfner. The traveling wave tube. Wireless World LII. 1946. P. 369–372.



Patent FR1035379 (A) : B. Epsztein, "Backward flow travelling wave devices", 1959-03-31



Основной принцип работы заключается в генерации электромагнитного излучения электронами, сгруппированными в сгустки (банчи) и взаимодействующими в резонаторе (замедляющей системе) с замедленными электромагнитными волнами.

* Madey J. M. J. Stimulated Emission of Bremsstrahlung in a Periodic Magnetic Field. J/ Appl. Physics. 1971. Vol. 42. P. 1906–1913. Colson W.B. Theory of a Free Electron Laser. Physics Letters. 1976. Vol. 59A. P. 187–190.
** Deacon D. A. et al. First operation of a Free-Electron Laser. Phys. Rev. Let. 1977. Vol. 38. P. 892–894.

2

Мотивация



Информационный взрыв

Общая сумма человеческих знаний к 1800 г. удваивалась каждые 50 лет, к 1950 г, каждые 10 лет, к 1970 г, каждые 5 лет, к 1990 г, ежегодно.
Общий объем знаний - порядка 95 % - состоит из неструктурированных данных.
5 % общего объема знаний составляют различные базы данных — тем или иным образом структурированная информация.



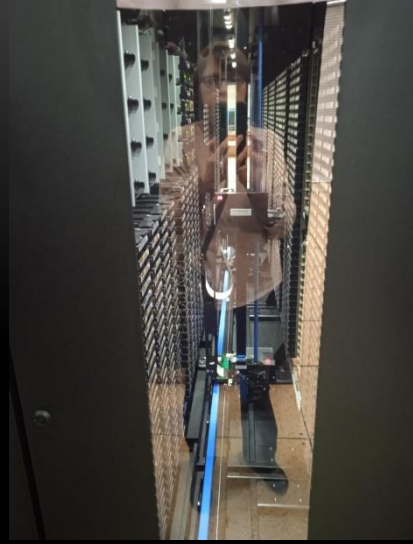
Мотивация

TOP500 LIST - NOVEMBER 2023

https://www.top500.org/lists/top500/2023/11/

1	**Frontier** - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	8,699,904	1,194.00	1,679.82	22,703
2	**Aurora** - HPE Cray EX - Intel Exascale Compute Blade, Xeon CPU Max 9470 52C 2.4GHz, Intel Data Center GPU Max, Slingshot-11, Intel DOE/SC/Argonne National Laboratory United States	4,742,808	585.34	1,059.33	24,687
3	**Eagle** - Microsoft NDv5, Xeon Platinum 8480C 48C 2GHz, NVIDIA H100, NVIDIA Infiniband NDR, Microsoft Microsoft Azure United States	1,123,200	561.20	846.84	
4	**Supercomputer Fugaku** - Supercomputer Fugaku, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D, Fujitsu RIKEN Center for Computational Science Japan	7,630,848	442.01	537.21	29,899
5	**LUMI** - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE EuroHPC/CSC Finland	2,752,704	379.70	531.51	7,107
6	**Leonardo** - BullSequana XH2000, Xeon Platinum 8358 32C 2.6GHz, NVIDIA A100 SXM4 64 GB, Quad-rail NVIDIA HDR100 Infiniband, EVIDEN EuroHPC/CINECA Italy	1,824,768		4.47	7,404





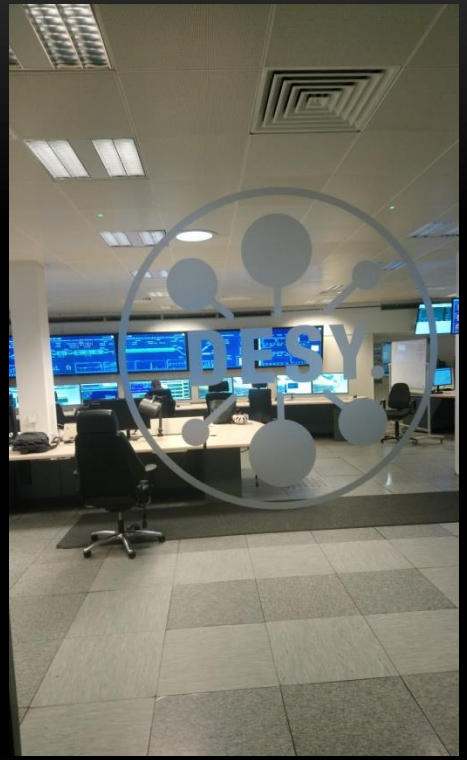
EUROPEAN XFEL (DESY)



Booster



Linear accelerator+XFEL



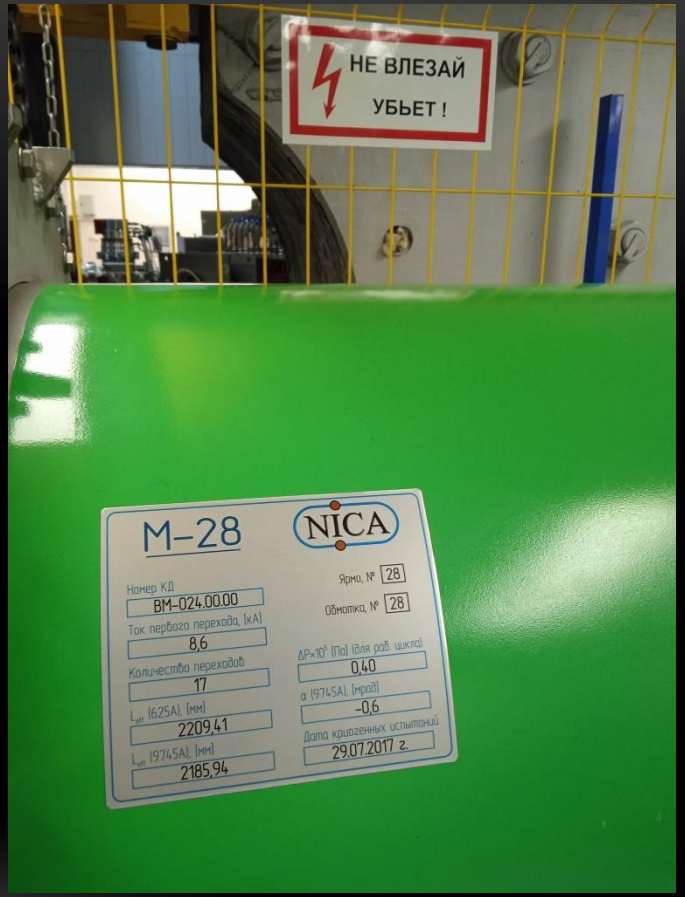
Control room

Длина 3,4 км, генерирует чрезвычайно интенсивные рентгеновские импульсы для определения атомной структуры вирусов, исследования химических реакций, изучения процессов внутри планет.

5

Ускорительные системы





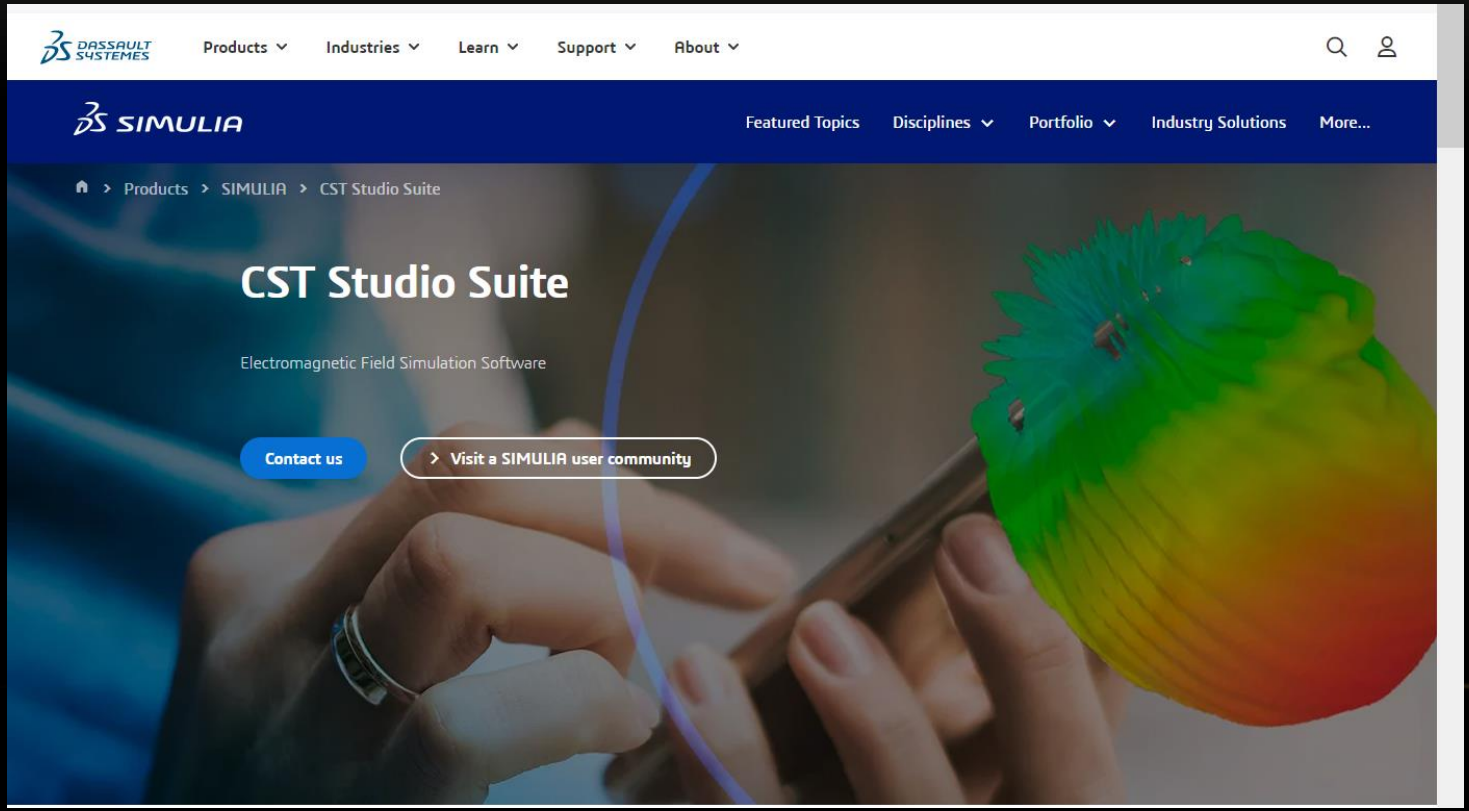
Программы моделирования электронных усилителей и генераторов

Code	Description	Platform	Parallel	Source
Parmela (UCLA)	Particle Tracking	Linux, Mac	no	yes
Homdyn	Particle Tracking	Linux, Mac	no	no
Tredi	Particle Tracking	Linux	yes	yes
QUINDI	Particle Tracking and Lienard-Weichert	Linux	yes	yes
Genesis 1.3	Particle Tracking	Linux, Mac	no	yes
Elegant	Particle Tracking	Linux, Mac, Win	no	no
Spur	Lienard-Weichert	Linux, Mac	yes	yes
fieldEye	Lienard-Weichert	Linux	yes	yes
Ampere	Maxwell Solver	Win	no	no
Poisson/Superfish	Maxwell Solver	Linux	no	yes
Gdfidl	Maxwell Solver	Linux	no	yes
Radia	Maxwell Solver	Mac, Win	no	no
HFSS	Maxwell Solver	Win	no	no
Magic	Plasma Dynamics	Win	no	no
OopicPro	Plasma Dynamics	Linux	yes	yes

https://en.wikipedia.org/wiki/Accelerator_physics_codes

Программы моделирования ускорительных систем

https://www.3ds.com/products/simulia/cst-studio-suite



Программы моделирования ускорительных систем

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ 2017 год, том 29, номер 7, стр. 109-122

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕУСТОЙЧИВОСТЕЙ В РЕЛЯТИВИСТСКОМ ЭЛЕКТРОННОМ ПОТОКЕ В СРЕДЕ CST PARTICLE STUDIO

© *2017 г.* ***С.А. Куркин, А.А. Бадарин, А.А. Короновский, Н.С Фролов, А.Е. Храмов****

*Саратовский государственный технический университет им. Гагарина, Саратов
Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Чернышевского, Саратов hramovae@gmail.com, badarin.a.a@mail.ru

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 17-52-04097), гранта Президента РФ для молодых российских ученых – кандидатов наук (МК-1163.2017.2) и Минобрнауки РФ (№ 3.6723.2017/БЧ).

Настоящая работа посвящена особенностям создания модели виркатора на пролетном токе в среде CST Particle Studio для исследования физических механизмов развития, сосуществования и взаимодействия бурсиановской/пирсовской и диокотронной неустойчивостей в релятивистском электронном потоке. Проведен численный анализ данной системы с использованием пакета CST Particle Studio. Обнаружено развитие численной неустойчивости, приводящей к дополнительной мелкомасштабной модуляции электронного потока по плотности при его движении в системе. Найден характерный временной масштаб неустойчивости и выявлена его связь с пространственным сеточным шагом. Проведено детальное исследование данной численной неустойчивости и предложен метод её подавления средствами среды CST Particle Studio. В работе также представлен ряд важных заме-

Примерная оценка затрат при моделировании ускорительных систем

Решение системы полных трехмерных уравнений Максвелла разностными методами на сетках и моделирование методом частиц пучка заряженных частиц, толкаемых в электромагнитном поле силой Лоренца:

- моделирование до 10^{10} частиц на примерно 500^3 ячейках разностной сетки за большое (как минимум несколько сотен) число шагов по времени;
- оперативная память порядка 0,5 ТБ;
- время выполнения даже на суперкомпьютере – от нескольких часов до месяцев работы;
- объем полученных численных данных – до 1 ТБ памяти.

Понятно, что для создания, например, многомиллионных ускорительных комплексов и установок и проведения экспериментальных исследований на них такое моделирование должно быть выполнено, невзирая на материальные затраты, но предварительно следует выполнить ***экспресс-расчеты по быстрым 1-D и 2-D программам*** с целью предварительного сужения и уточнения параметров для последующего эффективного полномерного моделирования.

MODELING AND SIMULATION – M&S
VERIFICATION AND VALIDATION – V&V

1. Department of Defense, Instruction number 5000.61: "Modeling and Simulation (M&S) Verification, Validation, and Accreditation", 1996, 15 p.
2. AIAA, "AIAA Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations," AIAA (American Institute of Aeronautics and Astronautics) Report G0771988, 1998.
3. IEEE Std 610.12-1990 - IEEE Standard Glossary of Software Engineering Terminology ISO/IEC/IEEE 24765:2010(E), Systems and software engineering – Vocabulary
4. 1012-2016 - IEEE Standard for System, Software, and Hardware Verification and Validation (1998, 2004, 2012)
5. Boehm, B.W. 1981 Software Engineering Economics, Prentice-Hall
6. Blottner, F. G. "Accurate Navier-Stokes results for the hypersonic flow over a spherical nosetip", AIAA Journal of Spacecraft and Rockets, Vol. 27, No. 2 (1990), pp. 113-122.
7. Mahaffy J. Verification and Validation of Codes and Results http://www.personal.psu.edu/users/j/h/jhm/ME540/lectures/VandV/VandV.html
8. Oberkampf, W. L. and Trucano, T. G., "Verification and validation in Computational Fluid Dynamics", Sandia National Laboratory Report SAND2002059, 2002. 122 p.
9. Roache, J., "Verification and Validation in Computational Science and Engineering," Hermosa Publishers, pp. 403412, 1998.
10. Sargent R.G., "Verification and validation of simulation models", Proc. 2011 Winter Simulation Conf. (Proc. IEEE), pp.183-198, 2011.
11. Carson J.S., II, "Model verification and validation", Proc. 2002 Winter Simulation Conf., pp.52-58, 2002.
12. C.K. Birdsall, A.B Langdon. Plasma Physics via Computer Simulation. CRC Press, 2004

МОДЕЛИРОВАНИЕ – M&S

Model. A physical, mathematical, or otherwise logical representation of a system, entity, phenomenon, or process.

Modeling and Simulation. The development and use of live, virtual, and constructive models including simulators, stimulators, emulators, and prototypes to investigate, understand, or provide experiential stimulus to either (1) conceptual systems that do not exist or (2) real life systems which cannot accept experimentation or observation because of resource, range, security, or safety limitations.

Simulation. A method for implementing a model over time.

Verification. The process of determining that a model implementation accurately represents the developer's conceptual description and specifications.

Validation. The process of determining the degree to which a model is an accurate representation of the real-world from the perspective of the intended uses of the model.

Department of Defense, Instruction number 5000.61: "Modeling and Simulation (M&S) Verification, Validation, and Accreditation", 1996, 15 p.

МОДЕЛИРОВАНИЕ – M&S

Steps in M&S*

1. Determine appropriate mathematical model
2. Classification of partial differential equation
3. Transformation of mathematical model
4. Select grid pattern
5. Formation of finite difference equations
6. Solution algorithm
7. Perform auxiliary calculations
8. Verification and Validation

Mahaffy J. Verification and Validation of Codes and Results
http://www.personal.psu.edu/users/j/h/jhm/ME540/lectures/VandV/VandV.html

ВЕРИФИКАЦИЯ И ВАЛИДАЦИИЯ – V&V

Software verification asks the question, "Are we building the product right?"; that is, does the software conform to its specification.

Software validation asks the question, "Are we building the right product?"; that is, is the software doing what the user really requires.

IEEE Std 610.12-1990 - IEEE Standard Glossary of Software Engineering Terminology
ISO/IEC/IEEE 24765:2010(E), Systems and software engineering -- Vocabulary

ВЕРИФИКАЦИЯ И ВАЛИДАЦИИЯ – V&V

2-9 ARE THE RESULTS CORRECT? TESTS

The simulator, in demonstrating correctness, has many of the problems of a theorist or experimenter. The latter two may be questioned, for example, on their approximations and on their instruments. The simulator uses an unpublished program, with a restricted set of physics (*e.g.* forced to be in one dimension, or to be electrostatic or lacking collisions, radiation, etc.), with carefully chosen initial conditions and a limited amount of output. How can he tell himself and the world that his work is to be believed?

He can compare his results with those obtained in theory and or in experiment, obtain the desired results for problems with known answers, show invariance of his results as the nonphysical computer parameters (Δt, Δx, NP, NG, etc.) are changed, and so on. Even so, he may leave some doubters. Problems that are fundamental may be checked by simulators at different computer centers, using separate programs; an example of such a problem is plasma diffusion across a magnetic field.

The simulator himself must have confidence in his program and know the bounds within which it should work. The confidence must be real.

**** C.K. Birdsall, A.B Langdon. Plasma Physics via Computer Simulation. CRC Press, 2004***

ОБЪЕМНЫЕ ЛАЗЕРЫ НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ (ОЛСЭ)

Новая закономерность* для инкремента ***G*** излучательной неустойчивости пучка релятивистских частиц, пролетающего через пространственно-периодическую мишень в условиях дифракции Брэгга вблизи области пересечения корней дисперсионного уравнения, **приводит к радикальному изменению пороговых условий генерации** (***s*** – число дополнительных волн, возникающих в системе благодаря дифракции) *:*

$$j_{start} \sim 1/(kL)^{3+2s}$$

**V.G.Baryshevsky, I.D.Feranchuk, Phys.Lett. 102A (1984) 141,*
В.Г.Барышевский, ДАН СССР, 299(1988), 1363

ОСНОВНЫЕ ПРИНЦИПЫ РАБОТЫ ОЛСЭ

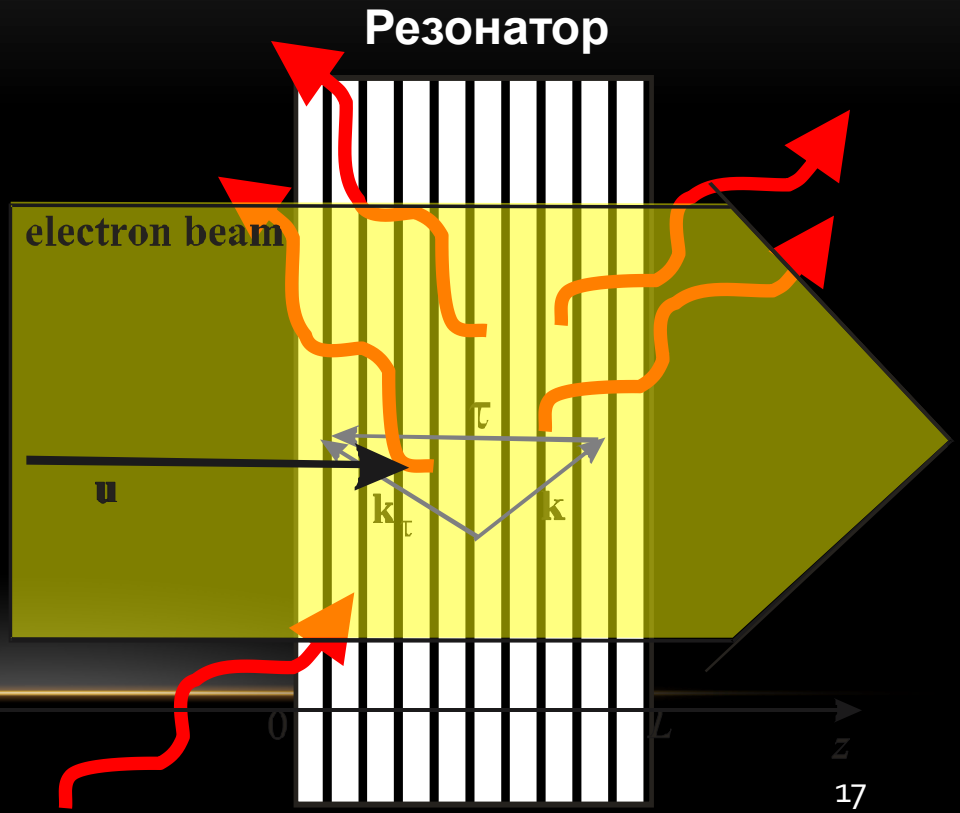
ОЛСЭ может использовать различные механизмы спонтанного излучения – дифракционное или черенковское, Смит-Парселл, ондуляторное, излучение в лазерной волне и т.д.

Условие дифракции:

$$2\mathbf{k}\boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau}^2 \approx 0$$

Условие синхронизма:

$$\left|\omega - \mathbf{k}\mathbf{u}\right| = \delta\omega \approx 0$$



СИСТЕМА ДЛЯ ДВУХВОЛНОВОГО ОЛСЭ*

$$\frac{\partial E}{\partial t}+\gamma_0 c\frac{\partial E}{\partial z}+0.5i\frac{\mathbf{k}^2c^2-\omega^2\varepsilon_0}{\omega}E-0.5i\omega\chi_\tau E_\tau=\Phi\int_0^{2\pi}\frac{2\pi-p}{8\pi^2}\left(e^{-i\theta(t,z,p)}+e^{-i\theta(t,z,-p)}\right)dp,$$

$$\frac{\partial E_\tau}{\partial t}+\gamma_1 c\frac{\partial E_\tau}{\partial z}-0.5i\omega\chi_{-\tau}E+0.5i\frac{\mathbf{k}_\tau^2c^2-\omega^2\varepsilon_0}{\omega}E_\tau=0,$$

$$E(t,0)=E_0,\quad E_\tau(t,L)=E_{\tau 0},\quad E(0,z)=0,\quad E_\tau(0,z)=0$$

$\gamma_{0,1}$ – направляющие косинусы,

$\varepsilon_0=1+\chi_0$, χ_0, $\chi_{\pm\tau}$ – Фурье-компоненты диэлектрической проницаемости среды

**Батраков К.Г., Сытова С.Н. ЖВМ и МФ 45: 4 (2005) 690-700*

УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА*

$$\frac{\partial^2\theta(t,z,p)}{\partial z^2} = \Psi\left(k - \frac{\partial\theta(t,z,p)}{\partial z}\right)^3 \mathrm{Re}\left(E(t - z/u, z)\right)\mathrm{e}^{i\theta(t,z,p)},$$

$$\frac{\partial\theta(t,0,p)}{\partial z} = k - \omega/u, \quad \theta(t,0,p) = p,$$

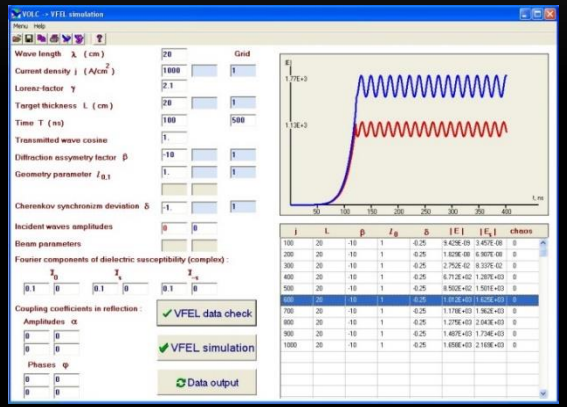
$$t > 0, \quad z \in [0,L], \quad p \in [-2\pi, 2\pi]$$

$\theta(t,z,p)$ – фаза электронов пучка по отношению к электромагнитной волне

Использован метод усреднения по фазам влета релятивистских электронов в область взаимодействия (по моменту и по поперечной координате влета электронов в область взаимодействия)

**Батраков К.Г., Сытова С.Н. ЖВМ и МФ 45: 4 (2005) 690-700*

Комплекс программ VOLC (“***VOL***ume ***C***ode”) для экспресс-моделирования ОЛСЭ

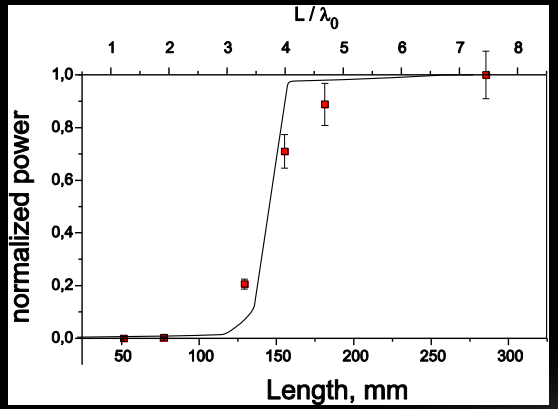


Использование различных коммерческих универсальных кодов не всегда подходит для решения поставленных задач, т. к. невозможно контролировать используемые в них алгоритмы и математические основы.



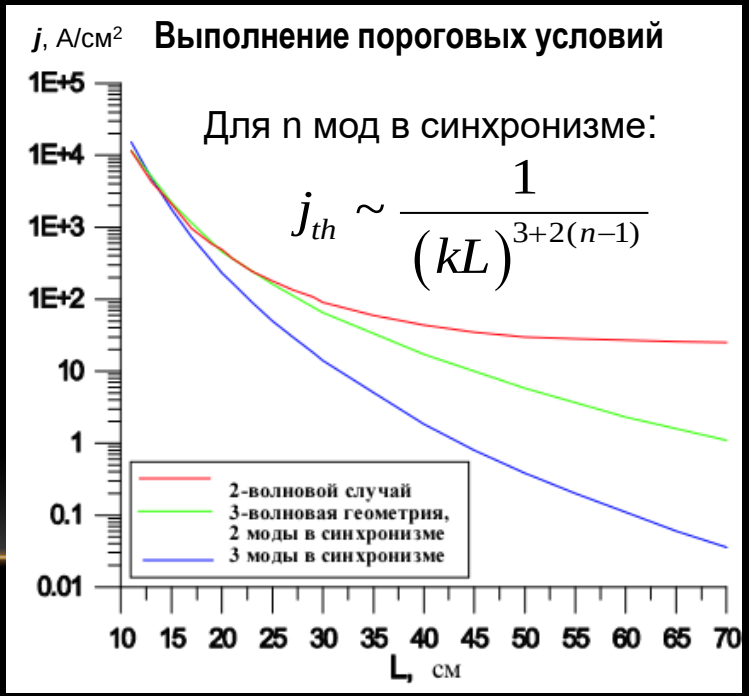
ЭТАПЫ ВЕРИФИКАЦИИ И ВАЛИДАЦИИ

- Сравнение аналитических решений системы в случае стационарных и некоторых периодических режимов работы ОЛСЭ с результатами численного моделирования
- Проверка основных закономерностей функционирования ОЛСЭ, в том числе порогов генерации и подавления паразитных мод при прохождении пучка электронов через резонатор
- Моделирование работы экспериментальных установок ОЛСЭ



Пороговые условия для установки ОЛСЭ-250

Baryshevsky V.G. et al., Proc. FEL2006, p.331



ПУБЛИКАЦИИ

K. Batrakov, S. Sytova. Mathematical Modelling and Analysis, 2004, vol. 9, No 1, 1–8.

K. Batrakov, S. Sytova. Mathematical Modelling and Analysis, 2005, vol. 10, No 1, 1–8.

К. Г. Батраков, С. Н. Сытова. Журнал выч. математики и мат. физики, 2005, т. 45, № 4, 690–700.

K. Batrakov, S. Sytova. Mathematical Modelling and Analysis, 2006, vol. 11, No 1, 13–22.

S. Sytova. Mathematical Modelling and Analysis, 2008, vol. 13, No 2, 263–274.

С. Н. Сытова. Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика, 2011, т. 19, № 2, С. 93–111.

С. Н. Сытова. Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика, 2012, т. 20, № 6, С. 124–135.

В. Г. Барышевский, С. Н. Сытова. Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика, 2013, т. 21, № 6, С. 25–48.

С. Н. Сытова. Журнал Белорусского государственного университета. Физика, 2021, №1, 62–72.

S. Sytova. Nonlinear Phenomena in Complex Systems, 2022, vol. 25, No 2, 168–176.

S. Sytova. Nonlinear Phenomena in Complex Systems, 2022, vol. 25, No 4, 359–367.

ВЫВОДЫ

Достоверность результатов должна обеспечиваться использованием принятых в науке исходных уравнений, корректностью приближений, адекватностью сформулированных математических моделей, применением проверенных численных методов.

Все разработанные математические модели и программы должны быть всесторонне протестированы.

Достоверность полученных численных результатов должна быть подтверждена их соответствием современным физическим представлениям и согласованностью с аналитическими оценками, а также хорошим соответствием с известными, в том числе с экспериментальными данными.

Данная информация важна для студентов физического и математического профилей, которые в будущем планируют связать свою деятельность с математическим моделированием разнообразных физических явлений и приборов.



СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ

sytova@inp.bsu.by