

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
имени М.В. ЛОМОНОСОВА

*На правах рукописи*

**Калитенко Александр Михайлович**

**Исследование влияния динамики пучка электронов на  
генерацию гармоник в однопроходных лазерах на  
свободных электронах**

Специальность 1.3.3. Теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Москва — 2026

Диссертация подготовлена на кафедре теоретической физики физического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

**Научный  
руководитель:**

**Пронин Петр Иванович**  
кандидат физико-математических наук

**Официальные  
оппоненты:**

**Гинзбург Наум Самуилович**  
доктор физико-математических наук, профессор,  
член-корреспондент РАН, заведующий отделом  
высокочастотной релятивистской электроники,  
«Федеральный исследовательский центр Институт  
прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова  
Российской академии наук»

**Ильин Вячеслав Анатольевич**  
доктор физико-математических наук, старший  
научный сотрудник (звание), главный научный  
сотрудник Курчатовского комплекса нано-, био-,  
инфо-, когнитивных и социогуманитарных наук и  
природоподобных технологий Национального  
исследовательского центра «Курчатовский  
институт»

**Бушуев Владимир Алексеевич**  
доктор физико-математических наук,  
профессор, профессор кафедры физики  
твердого тела физического факультета,  
«Московский государственный университет  
имени М.В. Ломоносова»

Защита диссертации состоится «02» апреля 2026 г. в 15 часов 30 минут на заседании диссертационного совета МГУ.011.2 Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова по адресу: 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, МГУ, дом 1, стр. 2, физический факультет, ауд. Н-16.

E-mail: [diss.sov.011.2@org.msu.ru](mailto:diss.sov.011.2@org.msu.ru)

С диссертацией можно ознакомиться в отделе диссертаций научной библиотеки МГУ имени М.В. Ломоносова (Ломоносовский просп., д. 27) и на портале: <https://dissovet.msu.ru/dissertation/3779>

Автореферат разослан «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2026 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета,  
доктор физико-математических наук  
профессор

П.А. Поляков

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы.** Исследование поведения систем большого числа частиц в различных электромагнитных полях остается одним из важных направлений теоретической физики. Лазер на свободных электронах (ЛСЭ) является одной из таких систем, которая находит большое практическое применение в качестве инструмента исследования в материаловедении, кристаллографии, биологии и медицине. Для анализа и расчета излучения в ЛСЭ с различными конфигурациями полей используются комплексы программ, которые дают одномерное и трехмерное описания динамики ЛСЭ. В современной физике широкое применение также нашло машинное обучение, внедрение которого совершенствуется с каждым годом.

**Степень разработанности темы исследования.** Синхротронное и ондуляторное излучения представляют для ученых большой интерес, последнее из них, ондуляторное излучение, имеет большое практическое применение в качестве лазеров на свободных электронах. Синхротронное излучение (СИ) представляет собой электромагнитное излучение, испускаемое релятивистскими заряженными частицами при движении в магнитном поле. Ондуляторное излучение (ОИ) имеет много общего с синхротронным, однако отличается от СИ по спектру излучения и траектории частиц. Основателем теории синхротронного излучения считается английский физик Дж.А. Шотт, который в 1912 году еще до появления квантовой физики в своих работах пытался объяснить излучение в атомах с точки зрения классической физики, предсказанное Лиенаром в 1898 году. Возникновение излучения в синхротронах было предсказано Д.Д. Иваненко и И.Я. Померанчуком в 1944 г. Впоследствии теория синхротронного излучения была развита А.А. Соколовым, И.М. Терновым и другими. Физическая концепция ондулятора была предложена В.Л. Гинзбургом в 1947 году. Первый прибор для генерации ОИ был создан Х. Мотцем в 1951 году. Хотя излучение ускоренных электронов отличается от излучения обычных лазеров, тормозное излучение электронов в периодическом магнитном поле может быть вызвано применением внешнего поля излучения, как указал Дж. Мейди в 1971 году. Так как электрон не был связан с атомами и молекулами, Мейди назвал это устройство **Free-Electron-Laser (FEL)**. Пять лет спустя В. Колсон опубликовал эквивалентное описание с использованием классической физики. Экспериментальная проверка теории была проведена в 1976 году. Для анализа и расчета излучения в ЛСЭ с высоким коэффициентом усиления обычно используются численные программы, которые

дают одномерное и трехмерное описания динамики ЛСЭ, а также промежуточный вариант – двумерное описание. Численные коды стали неотъемлемой частью для изучения и разработки лазеров на свободных электронах во всем мире. На каждой установке формируются теоретические научные группы исследователей излучения ЛСЭ. Основная теория довольно сложна и допускает аналитическое решение лишь в приближениях. Только в идеализированной и упрощенной модели ЛСЭ уравнения могут быть решены аналитически, а для более полного описания требуются численные методы. Поэтому численные методы и расчеты стали неотъемлемой частью исследования излучения ЛСЭ.

**Цели и задачи работы.** Целью работы является развитие теории ЛСЭ, поиск и учет новых эффектов в однопроходных ЛСЭ за счет включения поправок от высших гармоник, в особенности рентгеновских ЛСЭ, а также разработка новых методов описания ЛСЭ.

Для достижения данной цели были получены следующие результаты:

1. Получены новые аналитические выражения для коэффициентов связи между электронами и излучением (коэффициентов Бесселя) с учетом бетатронных колебаний для излучения в плоских и спиральных ондуляторах.
2. Для решения данных задач были разработаны новые программы исследования генерации гармоник ЛСЭ с новыми аналитическими выражениями.
3. Исследовано влияние бетатронных колебаний на генерацию гармоник в однопроходных ЛСЭ с плоским и спиральным ондуляторами. Четные гармоники излучения ЛСЭ (гармоники с четными номерами) возникают в экспериментах по изучению свойств веществ.
4. Исследована генерация гармоник в ЛСЭ с новыми моделями тейперинга (изменения параметра ондуляторности вдоль лазера), а также способы подавления высших гармоник в них.
5. Для полноценного изучения работы ЛСЭ были включены нейронные сети, так как применение нейронных сетей позволяет уменьшить время, необходимое на анализ конфигураций ЛСЭ, на несколько порядков (на 4 порядка) по сравнению с численными методами.

**Научная новизна** заключается в расчете новых аналитических выражений, полученных в рамках диссертационной работы. Среди которых важными являются коэффициенты связи между электронами и излучением с учетом бетатронных колебаний для ЛСЭ с плоским одночастотным ондулятором и спиральным ондулятором. Разработан новый формализм описания работы лазера на свободных электронах с использованием машинного обучения. Разработаны преобразования данных и архитектура нейронной сети для анализа конфигураций ЛСЭ. Нейронные сети ускоряют анализ конфигураций ЛСЭ на порядки, а также могут использоваться на экспериментальных установках для калибровки лазера. Также предложены способы подавления высших гармоник в ЛСЭ с тейперингом с помощью фазовых сдвигов электронов относительно фотонов.

**Теоретическая и практическая значимость работы.** Полученные результаты и решения задач моделирования устройств ЛСЭ позволяют уточнить поведение гармоник излучения в ЛСЭ и существенно расширить поиск новых оптимальных конфигураций ЛСЭ, снизить затраты материальных ресурсов. Практическая значимость проведенных соискателем ученой степени при исследовании заключается в возможности предсказать влияние бетатронных колебаний на генерацию высших гармоник в лазерах на свободных электронах с плоскими и спиральными ондуляторами. Показано, что применение фазового сдвига между фотонами и электронами приводит к подавлению высших гармоник в ЛСЭ с тейперингом, а также предложен способ автоматизации процессов вычисления с помощью нейронных сетей.

**Методы исследования.** Исследования проводились с использованием методов электродинамики, численных методов и машинного обучения. При создании программ применялись стандартные библиотеки языка C++, библиотека для распараллеливания вычислений, нейронные сети, библиотеки языка Python (numpy, pandas, scikit-learn, pytorch), а также некоторые хорошо известные алгоритмы (преобразование Бокса–Мюллера, вихрь Мерсенна и др.). Как известно, и это показано в данной работе, квантовые эффекты в ЛСЭ пока не играют существенной роли. Поэтому использование классической электродинамики оправдано.

**Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Решение задачи об явной и наиболее общей форме аналитических коэффициентов связи между электронами и излучением с учетом бетатронных колебаний для ЛСЭ с плоским одночастотным ондулятором позволяет уточнить эксперименты.
2. Полученные аналитические формулы коэффициентов связи между электронами и излучением для второй гармоники излучения в спиральном ондуляторе позволяют анализировать экспериментальные данные. Проведенные исследования указали на необходимость учета второй гармоники излучения в ЛСЭ со спиральным ондулятором в экспериментах по генерации гармоник в нелинейной оптике.
3. Разработанный алгоритм моделирования генерации гармоник в ЛСЭ с тейперингом дает возможность рассмотреть способы подавления высших гармоник в таких системах. Фазовые сдвиги электронов относительно фотонов подавляют высшие гармоники на этапе создания излучения в ЛСЭ с тейперингом.
4. Построенная и обученная нейронная сеть позволяет создать новый формализм описания работы ЛСЭ и ускорить анализ конфигураций ЛСЭ. Предложенные методы машинного обучения ориентированы на задачи изучения новых конфигураций ЛСЭ.

**Степень достоверности результатов и апробация работы.** Основные идеи и положения работы изложены в 5 публикациях автора в рецензируемых научных изданиях, рекомендуемых для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.3.3. Теоретическая физика. Полученные аналитические выражения были внедрены в написанную им программу численного моделирования излучения ЛСЭ, работа программы проверена на ряде экспериментов. Также проведено сравнение общих случаев с программами и результатами моделирования других авторов.

**Личный вклад.** Автор принимал активное участие в постановке задач, разработке методов их решения, осуществлении вычислений, анализе результатов и написании статей. Аналитические формулы были выведены и подготовлены к кодированию на ЭВМ самим соискателем. Все компьютерные программы моделирования и обработки данных были написаны лично Калитенко А.М. и являются продуктом его интеллектуальной деятельности. Калитенко А.М. были уточнены и выведены новые аналитические выражения для коэффициентов связи между электронами и излу-

нием для четных гармоник, а также предложена отдельная оптимизация их длин волн. Предложены методы подавления высших гармоник в ЛСЭ с тейперингом. Калитенко А.М. освоил методы машинного обучения и предложил новый подход к описанию физики ЛСЭ с помощью искусственных нейронных сетей.

**Структура и объем диссертации.** Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы. Полный объем диссертации — 110 страниц, диссертация содержит 59 рисунков, 5 таблиц, список условных обозначений, список литературы включает в себя 110 наименований.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав и заключения.

Во **введении** дан краткий обзор и анализ развития ЛСЭ и основных эффектов, возникающих в них.

В **главе 1** приведены основные теоретические аспекты изучения теории ЛСЭ. Обсуждаются основные методы и выведены необходимые для расчета формулы излучения релятивистского электрона в периодическом магнитном поле ондулятора. Показано, что квантовые эффекты не играют существенную роль даже в современных рентгеновских лазерах на свободных электронах и применимость классической электродинамики доказана.

В **главе 2** описаны основные методы и алгоритмы, которые использовались для построения авторских программ численного моделирования излучения гармоник в однопроходных ЛСЭ. Продемонстрирована работа программы на примере однопроходных ЛСЭ с плоским одночастотным ондулятором.

В **главе 3** были получены аналитические выражения и проведено исследование излучения ЛСЭ с различными типами ондуляторов с учетом бетатронных колебаний: плоским одночастотным и спиральным.

В **главе 4** был проведен анализ подавления излучения высших гармоник в ЛСЭ с тейперингом с помощью написанной автором программы. Анализ проводился с использованием модифицированных моделей Кролла–Мортона–Розенблюта.

В **главе 5** представлен новый математический подход к решению уравнений ЛСЭ, основанный на машинном обучении.

Более подробно рассмотрим содержание диссертационной работы.

**Глава 1** диссертационной работы рассматривает основы теории ЛСЭ. Выводится уравнение движения электрона в поле плоского ондулятора в самом простом приближении. В одномерном приближении получены выражения для усилителя ЛСЭ: развитие интенсивности, длина усиления и параметр Пирса. Для усилителя ЛСЭ выражение для интенсивности есть

$$I(z) = \frac{I_0}{9} \exp\left(\frac{4\pi\sqrt{3}\rho z}{\lambda_u}\right), \quad (1)$$

где  $\lambda_u$  – период ондулятора,  $I_0$  – начальная интенсивность излучения,  $\rho$  – параметр Пирса.

Отсюда можно ввести еще одну важную характеристику ЛСЭ – длину

усиления

$$L_g = \frac{\lambda_u}{4\pi\sqrt{3}\rho}. \quad (2)$$

Параметр Пирса (масштабирования) введен как

$$\rho = \left[ \frac{I\gamma\lambda^2}{16\pi^2 I_A \sigma_x \sigma_y} \left( \frac{K f_1}{1 + K^2/2} \right)^2 \right]^{1/3}, \quad (3)$$

где  $I_A = ec/r_e = 17045$  А – ток Альфвена,  $K$  – параметр ондулятора,  $\lambda$  – длина волны,  $f_1$  – коэффициент Бесселя для первой гармоники,  $\sigma_{x,y}$  – поперечные размеры пучка электронов,  $I$  – ток.

Несмотря на то, что первая теория ЛСЭ основана на квантовой механике, анализ показывает, что классическая теория описывает работу ЛСЭ с хорошей точностью. Квантовые эффекты проявляются в дискретности изменения импульса электронов вследствие излучения фотонов и корпускулярно-волновом дуализме самих электронов. Однако для современных ЛСЭ квантовые эффекты не существенны, что показано в **разделе 1.1.6**.

**Глава 2** описывает основные методы и алгоритмы, которые использовались для построения авторских программ численного моделирования излучения гармоник в однопроходных ЛСЭ. Продемонстрирована работа программы на примере однопроходных ЛСЭ с плоским одночастотным ондулятором. Проведено сравнение авторской программы с программами других авторов.

Для работы с различными конфигурациями ондуляторов необходимо иметь развитый комплекс программ с доступом к коду. В диссертационной работе автором была написана **трехмерная численная программа** на языке C++, которая учитывает следующие эффекты в ЛСЭ: аксиальную асимметрию пучка электронов, их разброс по энергии, бетатронные колебания, изначальное шумовое излучение, кулоновское взаимодействие, сдвиг поля по отношению к частицам, квадрупольные секции и сдвиг фаз между секциями ондуляторов. Программа имеет три режима:

- усилитель без шума
- усилитель с изначальным шумом
- самоусиленное спонтанное излучение (SASE mode)

Все расчеты могут производиться с учетом отставания электронов от фотонов, так и без учета данного эффекта. Последнее имеет свои недостатки и преимущества. К преимуществам можно отнести бóльшую скорость вычисления, меньшую требовательность к памяти; главный недостаток –

невозможно исследовать ЛСЭ в режиме ССИ. Такое упрощение можно использовать для быстрой оценки работы ЛСЭ, а затем использовать нестационарное уравнение.

Ускорение расчетов производится за счет разделения вычислений на потоки на следующих этапах:

- расчет гармоник поля
- разделение пучка на несколько массивов при решении уравнений движения

Отметим, что есть ряд указаний на выбор приближений, которые необходимы при решении задачи. Во-первых, в пучке  $10^9 - 10^{11}$  частиц, учет всех частиц является непосильной задачей для обычных компьютеров (для таких целей строят кластер компьютеров). Во-вторых, уравнения Максвелла для потенциала нелинейны по времени и координатам.

Подобную задачу можно реализовать на обычных компьютерах, а не на суперкомпьютерах, если допустить:

- моделируются не все частицы в пучке, а макрочастицы (совокупность электронов с одинаковыми физическими величинами)
- приближение медленно меняющейся огибающей (эйкональное приближение)
- периодические условия (уменьшает количество частиц при описании)
- изменения формы сгустка не моделируются
- малый разброс по энергии электронов

Второе и пятое условия могут быть заменены на малость параметра Пирса  $\rho \ll 1$ .

В **разделе 2.1.1** описано создание фазового пространства с помощью последовательности Хаммерсли и преобразования Бокса–Мюллера. В качестве генератора псевдослучайных чисел использовался вихрь Мерсенна. Для создания первоначального коэффициента банчинга использовались методы Пенмана и Фоули. В **разделе 2.1.2** описано решение уравнений движения электронов с помощью метода Рунге–Кутта 4-го порядка. В **разделе 2.1.3** описаны способы решения уравнения поля. В **разделе 2.1.4** описаны способы решения уравнений поля для высших гармоник.

Уравнение поля для высших гармоник есть

$$\left[ \nabla_{\perp}^2 + 2ik_{n\lambda} \left( \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{c\partial t} \right) \right] u_n = \frac{ie^2\mu_0}{m_e} \sum_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \frac{f_n K}{\sqrt{2}\gamma_j} e^{-in\theta_j}, \quad (4)$$

$\nabla_{\perp}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ ,  $f_n$  – коэффициент связи высшей гармоники  $n$  с электронами,  $k_{n\lambda} = \frac{2\pi n}{\lambda}$ ,  $u_n$  – поле гармоники  $n$ ,  $m_e$  – масса электрона,  $\mu_0$  – магнитная постоянная,  $\theta_j$  – фаза,  $\gamma_j$  – лоренц-фактор электрона,  $e$  – заряд электрона.

Уравнения для высших гармоник схожи с уравнением для первой гармоники. Основные отличия заключаются в следующем:

- волновое число  $k_{\lambda} = \frac{2\pi}{\lambda}$  заменяется на  $k_{n\lambda} = \frac{2\pi n}{\lambda}$ .
- коэффициент связи между электронами и излучением  $f_c$  заменяется на коэффициенты для высших гармоник  $f_n$ . Нужно учитывать то, что в результате бетатронных колебаний эти коэффициенты будут разными для каждого электрона. Для нечетных гармоник  $n = 1, 3, 5, \dots$  коэффициент слабо меняется от электрона к электрону и может быть заменен одним значением. Для четных гармоник  $n = 2, 4, \dots$  это не так, и нужно учитывать различие коэффициентов для каждого электрона. Эти коэффициенты рассчитываются численно.
- в уравнениях поля стоит коэффициент банчинга для высшей гармоники  $\langle \exp(-in\theta_j) \rangle$ .

В **разделах 2.1.5-2.1.7** проводится сравнение результатов программы с экспериментами и анализ сходимости программ.

В **главе 3** были получены аналитические выражения и проведено исследование излучения ЛСЭ с различными типами ондуляторов с учетом бетатронных колебаний: плоским одночастотным и спиральным.

В **разделе 3.1** рассмотрен общий случай бетатронных колебаний в плоском одночастотном ондуляторе.

Поле ондулятора выглядит следующим образом

$$\vec{H} = H_0(0, \sin(k_u z) \operatorname{ch}(k_u y), \cos(k_u z) \operatorname{sh}(k_u y)) . \quad (5)$$

Были выведены формулы для коэффициентов связи между электронами и излучением в таком поле ондулятора, были уточнены выражения для четных гармоник.

В **разделе 3.2** смоделирован эксперимент LCLS (Linac Coherent Light Source) в мягком рентгене, где была обнаружена вторая гармоника излучения. Результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментом.

Численное моделирование дает следующие соотношения между мощностями гармоник: для третьей гармоники  $P_3/P_1 \approx 3\%$ , для пятой гармоники  $P_5/P_1 \approx 0,3\%$ . В этом эксперименте пятая гармоника не была отделена от третьей из-за ее малого значения, что упростило исследование. Соотношение мощности для второй гармоники  $P_2/P_1$  составляет приблизительно  $0,04\%$ , что находится в пределах экспериментальных значений:  $P_3/P_1$  приблизительно  $2,0 - 2,5\%$ ,  $P_2/P_1$  приблизительно  $0,05 - 0,06\%$ . Более низкое значение мощности для третьей гармоники может быть следствием несоблюдения дифракционного предела  $\frac{\lambda_3}{4\pi} = 4 \cdot 10^{-11}$  м·рад, а эмиттанс  $\varepsilon = 4,8 \cdot 10^{-11}$  м·рад, к тому же пучок электронов мог увеличиться в размерах в конце лазера. Точная динамика каждого электрона в пучке неизвестна, эксперимент также показал увеличение эмиттанса, что может увеличить отклонение расчетных мощностей от измеренных. В авторской программе есть система автоматической регулировки сильной фокусировки, чтобы динамика пучка соответствовала экспериментальным значениям.

Для моделирования второй гармоники были выведены новые коэффициенты связи, которые отличаются от коэффициентов, используемых в программе GENESIS. Еще одним отличием авторской программы от других программ является использование другой оптимальной длины волны второй гармоники, которая может отличаться от оптимальной волны для первой гармоники.

В разделе 3.3 рассмотрено поле спирального ондулятора

$$\vec{H} = H_0(\sin(k_u z), \cos(k_u z), 0). \quad (6)$$

Для моделирования второй гармоники в спиральном ондуляторе были выведены коэффициенты связи между электронами и излучением для второй гармоники, см. главу 3.3. Для упрощения компьютерных вычислений, можно аппроксимировать эти выражения при условии  $\xi_{x,y} \ll 1$ . Это сделано для того, чтобы не перегружать оперативную память компьютера. Например, для подбора точных коэффициентов необходимо 2 матрицы  $10000 \times 10000$  типа float, которые занимали бы 800 МБ памяти. Отмечено «вихревое» поведение пространственного распределения интенсивности излучения второй гармоники.

Результаты, полученные с использованием разработанного автором теоретического формализма и компьютерного метода, согласуются с экспериментами. Представленное исследование позволяет проводить более точные текущие и планируемые эксперименты на рентгеновских ЛСЭ по изучению свойств новых материалов, наноструктур, а также генерации второй, третьей и четвертой гармоник в кристаллах.

**Глава 4** посвящена исследованию моделей тейперинга. Лазеры на свободных электронах способны генерировать излучение чрезвычайно высокой яркости в широком диапазоне длин волн. Рентгеновское излучение в ЛСЭ имеет множество применений при изучении кристаллов, веществ и т.д. Эффективность извлечения энергии из электронного пучка в обычных ЛСЭ характеризуется параметром Пирса  $\rho$ . Как правило, параметр Пирса не превышает значения 1%. Эффективность извлечения энергии может быть увеличена за счет тейперинга. Тейперинг – метод, который заключается в изменении параметра ондулятора  $K$  вдоль лазера, тем самым поддерживается состояние резонанса, поскольку электроны теряют энергию при излучении. Возможность применения тейперинга была продемонстрирована экспериментально. Тейперинг позволяет увеличить мощность рентгеновского ЛСЭ до нескольких тераватт. Необходимость достижения тераваттных импульсов в жестком рентгене обусловлены биологическими исследованиями.

Лазер на свободных электронах использует резонансное условие, которое гарантирует стабильное взаимодействие между электронным пучком и излучением. Для плоского ондулятора с периодом ондулятора  $\lambda_u$  и параметром ондулятора  $K$  основная резонансная длина волны равна

$$\lambda = \frac{\lambda_u}{2\gamma^2} \left( 1 + \frac{K^2}{2} \right), \quad (7)$$

где  $\lambda$  – резонансная длина волны излучения,  $\gamma$  – лоренц-фактор электрона.

Чтобы повысить эффективность извлечения энергии из электронного пучка, можно изменять параметр ондулятора  $K$  вдоль ЛСЭ, «подстраивая» резонансное состояние. Нам нужна «корректировка», потому что лоренц-фактор электронов уменьшается из-за излучения. В ондуляторе с тейперингом резонансная энергия, которая исходит из уравнения (7), определяется как

$$\frac{1 + K^2(z)/2}{2\gamma_{res}^2(z)} = \frac{\lambda}{\lambda_u} = const. \quad (8)$$

Профиль тейперинга  $K(z_{i+1})$  рассчитывается из

$$K(z + \Delta z) = K(z) - \frac{2e}{m_e c^2} \frac{f_b(z) E_0(z) \lambda}{\lambda_u} \sin[\Psi_{res}(z)] \Delta z. \quad (9)$$

Метод Кролла–Мортон–Розенблюта (КМР) предлагает постоянную фазу вдоль ЛСЭ

$$\Psi_{res}(z) = \Psi_{res}(0) = const. \quad (10)$$

В то время как модифицированный метод КМР предлагает непостоянную фазу

$$\Psi_{res}(z) = gz^d, \quad (11)$$

где  $z$  – расстояние,  $d$  и  $g$  – параметры, подлежащие оптимизации.

В разделе 4.3 предложен метод подавления высших гармоник в ЛСЭ с тейперингом с помощью сдвига фаз электронов относительно фотонов. ЛСЭ используются для изучения различных материалов, в том числе тех, в которых наблюдаются нелинейно-оптические эффекты, такие как генерация второй, третьей и четвертой гармоник. Генерация высших гармоник также используется для изучения оптических свойств новых материалов. Поэтому важно учитывать излучение высших гармоник перед началом эксперимента и найти способы их подавления. Атенюатор может отфильтровывать высшие гармоники, но его сложно сконструировать. Упростить задачу на этапе генерации излучения можно с помощью сдвига фаз электронов относительно фотонов.

Сдвиг фазы электронного сгустка относительно излучения эквивалентен уменьшению параметра ондулятора. Эффективность сдвига ниже для третьей гармоники, поскольку сдвиги фаз для третьей гармоники в таком случае больше, чем в случае с основной. Это следует из выражения для коэффициента банчинга

$$b_n = \frac{1}{N} \left| \sum_{j=1}^N e^{-in\theta_j} \right|, \quad (12)$$

где  $N$  – количество частиц в пучке,  $\theta_j$  – фаза частицы,  $n$  – номер гармоники.

Наш метод заключается в подавлении высших гармоник путем добавления фазового сдвига после каждой секции ондулятора

$$\theta_j \rightarrow \theta_j - 2\pi/k, \quad (13)$$

где  $k$  – параметр, подлежащий оптимизации. Параметр  $2\pi/k$  должен быть достаточно мал, чтобы основная гармоника не подавлялась сильно, а сумма фазовых сдвигов вдоль длины ЛСЭ должна быть примерно равна  $2\pi$ .

В разделе 4.3.2 предложена модификация фазового сдвига

$$\theta_j \rightarrow \theta_j - \frac{2\pi}{k + \alpha G}, \quad (14)$$

где  $G$  – номер ондуляторной секции,  $\alpha$  – параметр, подлежащий оптимизации. В этой модификации необходимо оптимизировать два параметра, что усложняет поиск, но улучшает подавление высших гармоник. Эта модификация оказалась более эффективной, но более трудоемкой. Как показано в разделе 4.3.2, соотношение  $P_3/P_1$  может быть улучшено. Например, при  $K(z=0) = 3,32$ ,  $\lambda_u = 3$  см,  $I = 4000$  А,  $\gamma = 7828$ ,  $\sigma_\gamma = 0,001\%$ ,  $\varepsilon_{x,y} = 0,2$  мкм·рад,  $\langle \beta_{x,y} \rangle = 20$  м,  $P_0 = 1$  МВт,  $\lambda = 1,6$  нм и  $k = 12$ ,  $\alpha = 1$  соотношение

$P_3/P_1$  снизилось с 8,5% до 1,5%. Также были рассмотрены случаи с другими параметрами:  $d = 0,5$  и  $d = 2$ . Во всех случаях мы получаем примерно одинаковый уровень подавления третьей гармоники.

В главе 5 представлен новый математический подход к решению уравнений ЛСЭ, основанный на машинном обучении. Для этой цели с помощью численного моделирования были собраны данные примерно 1700 различных конфигураций ЛСЭ.

Нейронная сеть работает быстрее, чем компьютерное моделирование, обладает той же точностью и позволяет анализировать тысячи конфигураций одновременно. Таким образом, разработанная методология демонстрирует большой потенциал в качестве инструмента быстрой оптимизации работы установок.

Мы протестировали различные модели машинного обучения: Random Forest, XGBoost, нейронную сеть с MTL и без нее; и произвели выбор модели.

Рассмотрим архитектуру и обучение нейронной сети подробнее. Для того чтобы получить основные параметры объектов ЛСЭ ( $L_{sat}$ ,  $P_{sat}$ ,  $\lambda_{opt}$ ), необходимо решить сложную систему дифференциальных уравнений. Аналитических решений для такой системы уравнений нет, но зависимость между ( $L_{sat}$ ,  $P_{sat}$ ,  $\lambda_{opt}$ ) и ( $K$ ,  $I$ ,  $r$ ,  $P_0$ ,  $\gamma$ ,  $\lambda_u$ ,  $\sigma_\gamma$ ) очевидна. Эта взаимосвязь может быть описана с помощью функции. Эта функция и представляет собой нейронную сеть.

Архитектура нейронной сети была выбрана путем перебора. Мы меняли количество слоев, количество узлов, чтобы получить наименьшую ошибку прогнозирования. Нейронная сеть была построена с использованием библиотеки *pytorch* на языке программирования Python. Мы выбрали многомерную регрессию (многозадачную нейронную сеть, MTL) с функцией потерь MSE в качестве архитектуры нейронной сети:

$$MSELoss = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2, \quad (15)$$

где  $y_i$  – прогнозируемый результат, а  $\hat{y}_i$  – истинный результат, мы обучили нейронную сеть для минимизации функции потерь. Это достигается с помощью градиентного спуска, в нашей задаче мы использовали оптимизатор AdamW с уменьшающимся темпом обучения  $lr = 0,998^n \cdot 0,001$ ,  $n = 0..999$ .

Были выбраны следующие входные параметры: параметр ондулятора  $K$ , период ондулятора  $\lambda_u$ , мощность начального источника  $P_0$ , лоренц-фактор электронов  $\gamma$ , энергетический разброс электронов  $\sigma_\gamma$ , пиковый ток  $I$ , средний размер электронного пучка  $r$ ; и количество параметров может

быть расширено. На выходе модель выдает мощность насыщения  $P_{sat}$ , длину насыщения  $L_{sat}$ , оптимальную длину излучения  $\lambda_{opt}$ . Нейронная сеть состоит из двух полносвязных общих скрытых слоев с (300, 100) узлами и двух полносвязных специфических слоев с (100, 30) узлами для каждой переменной. Гиперболический тангенс  $\text{Tanh}()$  выбран в качестве функции активации, механизм исключения (Dropout) вставлен между слоями с вероятностью  $p = 0,1$ , мы поместили Dropout после функции активации:

$$\text{Tanh}(z) = \frac{e^z - e^{-z}}{e^z + e^{-z}}. \quad (16)$$

Нейронная сеть показала хорошее соответствие с численной программой, однако для получения результатов требуется на порядки меньше времени. Более того, нейронная сеть уже выдает готовый результат в виде чисел для мощности насыщения, длины насыщения, что более удобно для анализа конфигураций. С помощью нейронной сети можно мгновенно создавать таблицы данных и графики. Мы также показали, что нейронная сеть может предсказать оптимальную длину волны излучения для численной программы, это также ускоряет работу с численными программами, по сути, оптимальная длина волны является аналогом спектрального параметра. Данный разработанный метод способен моделировать более сложные системы (ЛСЭ со спиральными ондуляторами и т.п.) и может быть использован непосредственно на установках для их оптимизации.

## Заключение

**Основные результаты** работы заключаются в следующем:

1. Проведено исследование генерации гармоник в ЛСЭ с плоским одностотным ондулятором с учетом бетатронных колебаний. Бетатронные колебания влияют на генерацию четных гармоник в ЛСЭ, поэтому необходимо учитывать мощность второй гармоники в экспериментах, где ЛСЭ выступает в качестве инструмента исследования.
2. Исследование показало, что моделирование генерации гармоник в программе с новыми аналитическими выражениями для коэффициентов связи между электронами и излучением и отдельной оптимизацией второй гармоники хорошо согласуется с экспериментальными данными и уточняет предыдущие выражения и результаты моделирования.
3. Проанализирована генерация второй гармоники в ЛСЭ со спиральным ондулятором с новыми коэффициентами связи. Проведенные исследования показали необходимость учета второй гармоники излучения в ЛСЭ со спиральным ондулятором в экспериментах по генерации гармоник в нелинейной оптике.
4. Создана методика изучения с использованием компьютерных методов для моделирования генерации гармоник в ЛСЭ с модифицированными моделями Кролла–Мортон–Розенблюта для профиля тейперинга – изменения параметра ондулятора  $K$  вдоль лазера для увеличения эффективности установок ЛСЭ.
5. Предложены новые методы подавления высших гармоник для более точных исследований генерации высших гармоник в материалах на этапе формирования излучения в ЛСЭ с тейперингом. Это позволит проводить более качественные эксперименты по изучению свойств веществ.
6. Разработан принципиально новый подход к описанию ЛСЭ на основе нейронных сетей. Новый подход позволяет уменьшить на порядки время анализа конфигураций ЛСЭ.

## Список работ, опубликованных автором по теме диссертации

**Статьи в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ им. М.В. Ломоносова по специальности и отрасли наук**

1. Kalitenko A.M. Numerical study of the second harmonic generation in FELs // Journal of Synchrotron Radiation. — 2021. — Vol. 28, no. 3. — P. 681–687. Импакт-фактор 3,0 (JIF), EDN: QTELYB [0,81 п.л.].
2. Kalitenko A.M. Numerical modeling of even harmonic generation in XFELs with planar and helical undulators // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. — 2022. — Vol. 1033. — P. 166718. Импакт-фактор 1,4 (JIF), EDN: PAPWZL [0,93 п.л.].
3. Kalitenko A.M. Studies of self-design taper algorithms for free-electron lasers with planar and helical undulators // Results in Optics. — 2022. — Vol. 9. — P. 100305. Импакт-фактор 0,449 (SJR), EDN: MITEQN [0,81 п.л.].
4. Kalitenko A.M. Analysis of the higher-harmonics radiation suppression in tapered free-electron lasers with phase shifters // Europhysics Letters. — 2023. — Vol. 143, no. 5. — P. 55001. Импакт-фактор 1,8 (JIF), EDN: YYDELF [0,58 п.л.].
5. Kalitenko A.M. Phenomenological model of a free-electron laser using machine learning // Physica Scripta. — 2023. — Vol. 98, no. 10. — P. 106003. Импакт-фактор 2,6 (JIF), EDN: NEDEWT [0,93 п.л.].