

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

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

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
кандидат физико-математических наук

П.И. Пронин

Москва — 2026

Оглавление

Введение	4
1 Теория ЛСЭ	15
1.1 Лазеры на свободных электронах	15
1.1.1 Траектория движения электронов	15
1.1.2 Взаимодействие с излучением	18
1.1.3 Уравнения ЛСЭ	20
1.1.4 Уравнение ЛСЭ с низким коэффициентом усиления и теорема Мейди	24
1.1.5 Уравнения поля	28
1.1.6 Квантовые эффекты в ЛСЭ	32
1.2 Вывод к главе 1	33
2 Программа численного моделирования излучения ЛСЭ	34
2.1 Теория	34
2.1.1 Создание фазового пространства пучка электронов	35
2.1.2 Решение уравнений движения	38
2.1.3 Решение полевых уравнений	40
2.1.4 Учет высших гармоник поля излучения	43
2.1.5 Примеры работы программы	45
2.1.6 Сравнение моделирования программ численного моделирова- ния генерации гармоник ЛСЭ	47
2.1.7 Анализ сходимости	49
2.2 Вывод к главе 2	51
3 Бетатронные колебания в различных конфигурациях магнитных полей ондулятора	53
3.1 Общий случай бетатронных колебаний в плоском одночастотном он- дуляторе	53
3.2 Моделирование экспериментов	58
3.2.1 Моделирование эксперимента LCLS в режиме мягкого рентгена	59
3.3 Генерация второй гармоники в ЛСЭ со спиральным ондулятором . .	64

3.4	Выводы к главе 3	68
4	Тейперинг	69
4.1	Схема тейперинга	69
4.2	Проверка использования модели на эксперименте PAL-XFEL	72
4.3	Влияние сдвига фаз электронов относительно фотонов	73
4.3.1	Постоянный сдвиг фаз	74
4.3.2	Модификация фазового сдвига	76
4.4	Выводы к главе 4	79
5	Применение нейронных сетей	81
5.1	Введение	81
5.2	Архитектура нейронной сети	82
5.3	Обучение нейронной сети	84
5.4	Применение нейронной сети	88
5.5	Выводы к главе 5	92
	Заключение	93
	Список условных обозначений	95
	Литература	97

Введение

Актуальность темы исследования

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 (ЛСЭ). 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 [1, 2], предсказанное Лиенаром в 1898 году [3]. Возникновение излучения в синхротронах было предсказано Д.Д. Иваненко и И.Я. Померанчуком в 1944 г. [4]. Впоследствии теория синхротронного излучения была развита А.А. Соколовым, И.М. Терновым [5, 6] и другими. Синхротронное излучение было обнаружено в 1947 году случайно американским инженером Ф. Хабером при проведении профилактических работ на синхротроне «Дженерал Электрик» [7]. Это излучение назвали синхротронным, хотя оно может наблюдаться не только в синхротроне. Оно наблюдалось в Крабовидной туманности, пульсарах и других небесных объектах.

Изначально синхротронное излучение считалось побочным продуктом, снижающим КПД установок. Первые источники СИ относят к источникам света первого поколения, см. [8]. Для синхротрона, специально предназначенного для выработки СИ, а не для ускорения заряженных частиц, наоборот – стремятся к генерации СИ большой интенсивности, изменив конструкцию синхротрона. Такие источники СИ относятся ко второму поколению. Каждое новое поколение характеризуется возрастанием мощности излучения на несколько порядков в связи с изменениями в конструкции.

Внедрение ондуляторов (от фр. *onduler* – волноваться, колебаться) и вигглеров (от англ. *wiggle* – вилять, изгибаться) в накопительные кольца привели к изменению структуры излучения, эти установки стали именоваться источниками света третьего поколения. В качестве источников ондуляторного излучения широко распространены плоские двухчелюстные горизонтальные ондуляторы. Ондулятор – это устройство для генерации электромагнитного излучения, в котором заряды совершают небольшие поперечные колебания в пространственно-периодическом магнитном поле [9–16]. Физическая концепция ондулятора была предложена В.Л. Гинзбургом [17] в 1947 году, который также отметил возможность получения когерентного излучения от электронных сгустков (банчей), разделенных длиной волны излучения [18]. Этот принцип заложен в современном лазере на свободных электронах. Первый прибор для генерации ОИ был создан Х. Мотцем в 1951 году [19]. 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 [20]. 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 [21]. Экспериментальная проверка теории была проведена в 1976 году [22].

Поле магнитов ондуляторов составляет порядка 1 Тл, для их изготовления применяют сильные ферромагнетики, обычно сплав неодим-железо-бор (Nd-Fe-B). Однако в последнее время проектируются ондуляторы на сверхпроводниках. Следует провести границу между вигглером и ондулятором, которые характеризуются параметром отклонения K . Вигглер, в отличие от ондулятора, имеет малое количество периодически расположенных магнитов с сильным магнитным полем с $K > 10$. Бла-

годаря сильному магнитному полю интенсивность высших гармоник велика. Излучение в вигглере сильно коллимировано (угол расхождения порядка K/γ). Угловое распределение излучения из вигглера не зависит от числа магнитных периодов N в нем. Для ондулятора параметр $K < 10$.

Первые лазеры появились в 1960-х годах и работали в инфракрасном диапазоне. Нижний предел длины волны излучения обычных лазеров, основанных на переходах между дискретными уровнями энергии в атомах, молекулах и ионах или межзонных переходах в кристаллах, составляет 126 нм (экимерный лазер на Ar_2 [23]). Это ограничение и послужило отправной точкой для развития ЛСЭ.

Теоретически заряженные частицы можно отклонять электрическим полем, при котором также возможно волнообразное движение, однако электрические потенциалы такой достаточной величины сложно создать в макромасштабах. Такие напряженности электрических полей можно наблюдать вблизи ядер атомов в конденсированной среде (порядка 10^9 В/м). Такое вещество можно рассматривать как естественный ондулятор или вигглер. Принцип генерации в естественных ондуляторах такой же как в обычных магнитных.

Накопительные кольца имеют некоторые ограничения, связанные с эмиттансом и его независимостью от параметров при инжекции в накопительное кольцо. Поэтому в качестве альтернативы был предложен новый источник ОИ – лазер на свободных электронах – источник света четвертого поколения с яркостью в миллиард раз выше яркости излучения, которое получают в источниках предыдущего поколения. Европейский рентгеновский ЛСЭ (EuXFEL) [24] и американский проект LCLS [25] являются первыми рентгеновскими ЛСЭ в мире. В отличие от источников третьего поколения, они обладают более высокой интенсивностью излучения, а их излучение характеризуется высокой степенью монохроматичности и когерентности, сравнимую с излучением оптических лазеров. Кроме того, длительность их импульсов чрезвычайно мала и составляет порядка 10^{-15} секунды.

В отличие от синхротрона в ондуляторе пучок имеет слабую фокусировку и нуждается в установке магнитных линз – структуры FODO (система фокусировки-расфокусировки). В XXI веке лазер на свободных электронах становится все более популярным инструментом физических исследований и является одним из показателей развитости страны. Физический принцип работы ЛСЭ основан на взаимодействии ОИ с электронами в ондуляторе и в настоящее время хорошо изучен.

ЛСЭ можно разделить на три группы: 1) усилитель, 2) осциллятор, 3) ЛСЭ в режиме суперлюминесценции (режим спонтанного самоусиленного излучения). Первая группа ЛСЭ самая простая, она усиливает затравочный когерентный источник. Если ондулятор поставить между двумя зеркалами, получится многопроходный ЛСЭ (осциллятор), конструкция которого напоминает обычные лазеры, основанные на переходах между дискретными уровнями энергии в атомах, молекулах и ионах, только в качестве лазерной среды служат релятивистские электроны, движущиеся в ондуляторе. ЛСЭ с низким коэффициентом усиления целесообразно использовать в качестве осциллятора. Такой оптический резонатор использует отражающие элементы, которые задают оптические моды, однако материал зеркал налагает естественные физические ограничения на их использование в рентгеновском диапазоне, где обнаружены лишь редкие пики отражательной способности отдельных материалов (13,51 нм и 11,43 нм) [26, 27]. ЛСЭ в режиме суперлюминесценции усиливают начальные шумы, и обычно такие лазеры имеют высокий коэффициент усиления. Идея однопроходного лазера в режиме самоусиления спонтанного излучения впервые предложена Е.Л. Салдиным [28]. Однопроходные лазеры на свободных электронах с высоким коэффициентом усиления не требуют оптических резонаторов, поэтому их спектр не ограничен отражательными свойствами зеркал.

Помимо доминирующей основной гармоники в ЛСЭ присутствуют более слабые высшие гармоники $\lambda_n = \lambda_1/n$, $n = 2, 3$, и т.д. Симметрия плоских ондуляторов запрещает осевое излучение на четных гармониках. Однако из-за конечного размера электронного пучка и бетатронных колебаний четные гармоники могут давать вклад в излучение ЛСЭ, как это наблюдалось в экспериментах [29, 30]. Излучение ЛСЭ зарождается из начального шума или из слабого затравочного когерентного излучения. В ЛСЭ излучение взаимодействует с электронами в ондуляторе, группируя электроны в микробанчи (микросгустки) на расстоянии длины волны излучения друг от друга. Таким образом, формируется когерентное ОИ, интенсивность которого экспоненциально растет вдоль ондулятора до насыщения. Мощность пиков излучения рентгеновского ЛСЭ превышает мощность СИ в рентгеновском диапазоне [31]. Излучение такого ЛСЭ представляет собой последовательность коротких мощных импульсов. Без затравочного источника импульсы однопроходного ЛСЭ имеют хорошую пространственную когерентность, но плохую временную когерентность из-за случайного характера начальных флуктуаций шума, из которого зарождается излу-

чение. Поэтому в настоящее время используют схему с самозатравкой [32]. Эта схема состоит из трех частей: 1) ЛСЭ с самоусилением спонтанного излучения (ССИ), 2) монохроматора и 3) усилителя.

Генерация излучения в однопроходном ЛСЭ начинается либо из начального шума в ЛСЭ с самоусилением спонтанного излучения, либо ЛСЭ усиливает слабое когерентное затравочное излучение. Создание когерентного затравочного излучения в рентгеновском диапазоне представляет сложность с технической стороны. ЛСЭ с генерацией и усилением высших гармоник были предложены в работах [33, 34]; некоторые эксперименты с ними описаны также в [31, 35]. К тому же современные рентгеновские лазеры имеют огромные размеры, по сравнению с обычными лазерами, и немалую стоимость. Например, рентгеновский лазер на свободных электронах LCLS в национальной ускорительной лаборатории SLAC имеет мощность насыщения 10 ГВт. Для такого лазера необходима электростанция, которая могла бы обеспечить электричеством маленький город. Длина объекта составляет 3 километра. В настоящее время установка работает на рентгеновских длинах волн от 22 до 0,5 Å. LCLS позволяет изучить вирусные инфекции, деление клеток и фотосинтез в новых деталях.

Из вышесказанного видно, что для осуществления генерации излучения в рентгеновских ЛСЭ требуется огромный расход количества электроэнергии. В связи с этим были предложены ускорители-рекуператоры с возвратом электрической мощности. Технология ускорителей-рекуператоров уже продемонстрирована на примере инфракрасных ЛСЭ в лаборатории Джеферсона (the Jefferson Lab IR-FEL) и в Новосибирске [36].

Есть еще одна технология увеличения эффективности ЛСЭ – тейперинг. При излучении электрон теряет энергию и его резонансные линии смещаются. Можно изменить параметры ондуляторов K , чтобы подстроить пучок электронов под новую резонансную линию, тем самым увеличить извлекаемую энергию. Такой метод называется тейперинг (англ. taper – суживать к концу) – уменьшение (сужение) магнитного поля ондуляторов к концу ЛСЭ. Показано, что методом тейперинга можно извлекать на порядок большую энергию, чем в ЛСЭ без тейперинга. Эффективность извлекаемой энергии из пучка электронов можно оценить параметром ρ – параметром Пирса. Для современных ЛСЭ этот параметр составляет порядка 10^{-3} , тейперинг же увеличивает извлекаемую энергию на порядок. Одним из минусов тейпе-

ринга является замедление скорости увеличения мощности после первоначального насыщения мощности и увеличение длины ЛСЭ в несколько раз.

Для анализа и расчета излучения в ЛСЭ с высоким коэффициентом усиления обычно используются численные программы, которые дают одномерное и трехмерное описание динамики ЛСЭ [37, 38], 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. Феноменологические модели не утрачивают своей ценности с появлением численных программ. Они важны на первоначальном этапе изучения физики ЛСЭ, применимы для оценки мощности и длины насыщения излучения гармоник в ЛСЭ, так как численный расчет предполагает большие временные затраты. Движение электронного пучка в ЛСЭ остается за рамками феноменологической модели. Для оптимизации пучка можно использовать как аналитические формулы [38, 39], так и компьютерные программы. Феноменологическое описание однопроходного ЛСЭ с использованием логистического уравнения в предположении оптимизированного пучка было предложено Д. Даттоли [40, 41], эта феноменологическая модель была развита К.В. Жуковским, см., например, [42, 43]. Есть и другая основанная на решении уравнений Максвелла феноменологическая теория М. Кси [44]. Также машинное обучение (*machine learning*) стало новым методом научного исследования, оно уже применяется для оптимизации пучков в лазерах на свободных электронах [45–47].

Уровень сложности программ возрастает с более утонченной и реалистичной моделью ЛСЭ, которая включает такие эффекты, как аксиальную асимметрию пучка электронов, энергетический разброс электронов, бетатронные колебания, изначальное шумовое излучение, кулоновское отталкивание, сдвиг поля по отношению к частицам, фокусировка пучка электронов, сдвиг фаз между секциями ондуляторов, начальное излучение в ЛСЭ. Даже численные программы используют модельные упрощения: введение макрочастиц, метод медленно меняющихся амплитуд, пренебрежение формой пучка электронов, периодические граничные условия, ограниче-

ние шага интегрирования и т.д.

Модельные упрощения в численных кодах снимаются с развитием вычислительных мощностей персональных компьютеров. Используя распределенную память кластерных компьютеров, вся информация о поле и распределении электронов могут быть сохранены в памяти для каждого отдельного электрона. Учитывая, что в импульсе ЛСЭ содержится около 10 миллиардов электронов, для хранения всего распределения потребуется 500 ГБ оперативной памяти. Информация о поле имеет примерно один и тот же порядок для ангстремных и оптических ЛСЭ. Учет всех электронов в ЛСЭ может быть осуществлен кластером размером 500 узлов и более, который не считается большим из-за современных размеров суперкомпьютеров. В одномерном моделировании множество алгоритмов может быть упрощено до тривиального уровня, например, генератор случайных чисел может быть использован для генерации распределения частиц, обеспечивая при этом правильный коэффициент группировки на любой длине волны, включая когерентное усиление за счет формы сгустка на большей длине волны. Также упрощается сортировка частиц. Однако использование численных кодов требует обученного и подготовленного персонала, соответствующей вычислительной среды, компьютерных средств и большого количества исходных данных. Использование суперкомпьютеров для моделирования излучения в ЛСЭ не совсем оправдано вследствие неточности определения параметров ондулятора (погрешности измерения), невозможности точной стабильности параметров пучка и других случайных эффектов. Современные ЛСЭ хорошо описываются классической электродинамикой, квантовые эффекты имеют слабое влияние на формирование излучения.

В настоящей диссертации рассматривается генерация гармоник в однопроходных лазерах на свободных электронах, влияние бетатронных колебаний и сдвига фаз электронов относительно фотонов на характеристики излучения в ЛСЭ. Основные результаты диссертации опубликованы автором в работах [48–52].

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

Научная новизна заключается в расчете новых аналитических выражений, полученных в рамках диссертационной работы. Среди которых важнейшими 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.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Получены аналитические формулы для коэффициентов связи между электронами и излучением с учетом бетатронных колебаний для ЛСЭ с плоским одночастотным ондулятором. Проведено исследование генерации гармоник в ЛСЭ с плоским одночастотным ондулятором.
2. Найдены аналитические формулы коэффициентов связи между электронами и излучением для второй гармоники излучения в спиральном ондуляторе. Проведено исследование генерации гармоник в ЛСЭ со спиральным ондулятором. Проведенные исследования указали на необходимость учета второй гармоники излучения в ЛСЭ со спиральным ондулятором в экспериментах по генерации гармоник в нелинейной оптике.
3. Исследована генерация гармоник в однопроходных ЛСЭ с применением тейперинга. Исследовано развитие высших гармоник в таких системах, а также их подавление для экспериментов по исследованию материалов.
4. Предложен новый формализм описания работы ЛСЭ. Построена и обучена нейронная сеть, рассмотрены ансамблевые методы классического машинного обучения. Построенная нейронная сеть позволяет ускорить анализ конфигураций ЛСЭ на порядки.

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.

Список основных публикаций автора:

1. Kalitenko A.M. Numerical study of the second harmonic generation in FELs / A.M. Kalitenko // *Journal of Synchrotron Radiation*. — 2021. — Vol. 28, no. 3. — P. 681–687.
2. Kalitenko A.M. Numerical modeling of even harmonic generation in XFELs with planar and helical undulators / A.M. Kalitenko // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. — 2022. — Vol. 1033. — P. 166718.
3. Kalitenko A.M. Studies of self-design taper algorithms for free-electron lasers with planar and helical undulators / A.M. Kalitenko // *Results in Optics*. — 2022. — Vol. 9. — P. 100305.
4. Kalitenko A.M. Analysis of the higher-harmonics radiation suppression in tapered free-electron lasers with phase shifters / A.M. Kalitenko // *Europhysics Letters*. — 2023. — Vol. 143, no. 5. — P. 55001.
5. Kalitenko A.M. Phenomenological model of a free-electron laser using machine learning / A.M. Kalitenko // *Physica Scripta*. — 2023. — Vol. 98, no. 10. — P. 106003.

Личный вклад автора

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 излучением 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.

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.

Объем, структура и содержание работы

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.

Глава 1

Теория ЛСЭ

В этом разделе будут рассматриваться теоретические аспекты ЛСЭ [53, 54].

1.1 Лазеры на свободных электронах

Принцип работы ЛСЭ заключается в преобразовании кинетической энергии электронов в интенсивное когерентное излучение в ондуляторе, который состоит из последовательности коротких дипольных магнитов, при этом полярность каждого следующего магнита противоположна предыдущему. Магнитное поле заставляет электроны двигаться по криволинейной траектории, при движении электроны также взаимодействуют с излучением. Интенсивность излучения в ЛСЭ возрастает экспоненциально по длине лазера, в конечном счете достигая насыщения. Если электромагнитная волна затухает и ускоряет электронный пучок, устройство называется обратным ЛСЭ. В случае, когда исходное излучение создается внешним источником, применяется термин «усилитель ЛСЭ», а внешний источник называется затравочным. В другом подходе излучение возникает из начальной группировки электронов – режим самоусиления спонтанного излучения, или режим суперлюминесценции. Длина волны излучения определяется периодом ондулятора, отклоняющей силой магнитного поля и энергией электронного пучка. Излучение ЛСЭ отличается от некогерентного ондуляторного излучения, поскольку оно возникает от микросгустков, разделенных резонансной длиной волны ЛСЭ. Это является следствием действия силы Лоренца на пучок электронов. Термин «микрोगруппировка», или микробанчинг, описывает тот факт, что электроны перераспределяются в продольном направлении в процессе взаимодействия с излучением. Их излучение конструктивно взаимодействует и создает когерентное излучение высокой интенсивности, которое делает ЛСЭ мощным источником излучения.

1.1.1 Траектория движения электронов

При движении в ондуляторе релятивистские электроны отклоняются периодическим магнитным полем. В этом разделе мы найдем траекторию движения электрона для случая плоского одночастотного ондулятора.

В зависимости от распределения магнитного поля поляризация ондулятора может быть линейной, круговой или эллиптической. Магниты расположены попарно, напротив друг друга, и разделены зазором. В плоском ондуляторе плоскость зазора фиксирована. В спиральном ондуляторе магниты расположены по кругу вдоль главной оси. В этой главе уравнения ЛСЭ будут выведены для случая плоского ондулятора. Излучение высших гармоник на оси ондулятора является следствием траектории движения электрона в плоском ондуляторе. Легко показать, что решения для уравнений ЛСЭ аналогичны в случае спирального ондулятора.

Рассмотрим геометрию магнита, в которой электроны движутся через ондулятор по оси z . Электроны будут отклоняться ондуляторным магнитным полем. Если периодичность ондулятора задана периодом ондулятора λ_u или, что эквивалентно, волновым числом $k_u = 2\pi/\lambda_u$, то вектор магнитной индукции ондуляторного поля \vec{B} может быть записан как

$$\vec{B} = B_0 \begin{pmatrix} 0 \\ \sin(k_u z) \operatorname{ch}(k_u y) \\ \cos(k_u z) \operatorname{sh}(k_u y) \end{pmatrix}. \quad (1.1)$$

Выражение для поля на оси ондулятора $x = y = 0$ значительно упрощается. Это приближение достаточно точное, так как размер пучка мал и соблюдается соотношение $k_u y \ll 1$

$$\vec{B} = \vec{e}_y B_0 \sin(k_u z). \quad (1.2)$$

Электроны будут отклоняться магнитным полем ондулятора в соответствии с формулой Лоренца

$$\vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B}, \quad (1.3)$$

где v – вектор скорости электрона, а $q = -e$ – заряд электрона. Уравнение движения для электрона

$$\gamma m_e \frac{d\vec{v}}{dt} = -e\vec{v} \times \vec{B}, \quad (1.4)$$

где m_e – масса электрона.

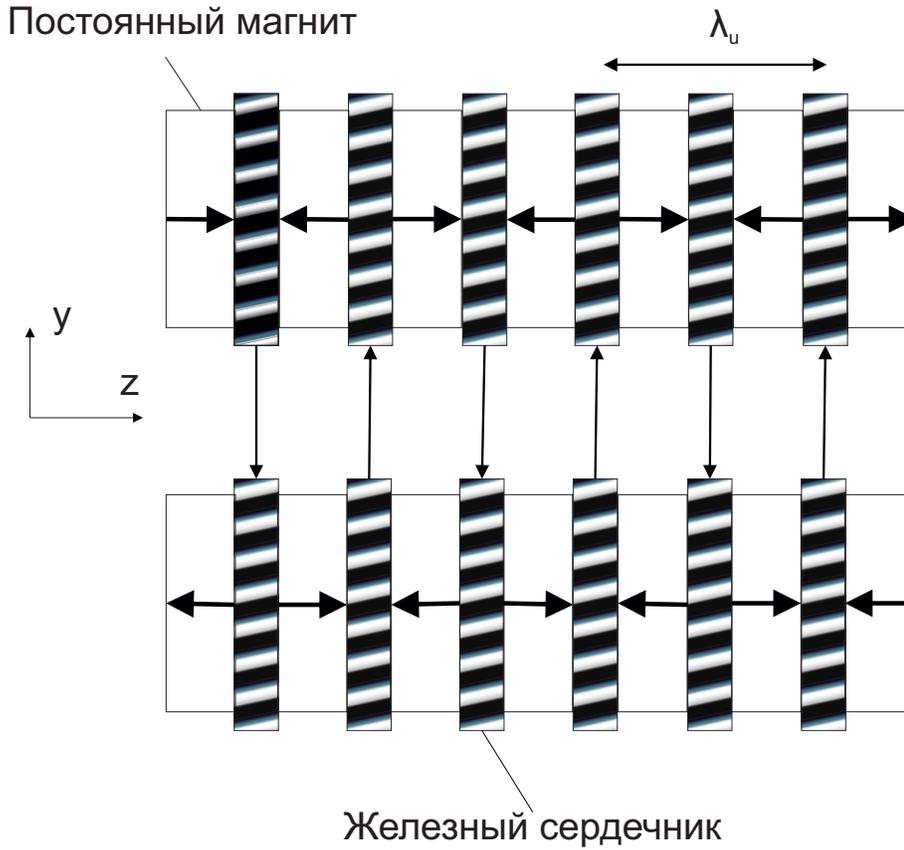


Рисунок 1.1: Схема плоского ондулятора.

Для движения электрона по оси x мы получим следующее уравнение

$$\gamma m_e \frac{d^2 x}{dt^2} = e v_z B_y. \quad (1.5)$$

Для удобства выразим время через координату z , которая обозначает расстояние по оси ондулятора. Используя $dt = dz/v_z$, мы получим

$$\frac{d^2 x}{dz^2} = \frac{e B_y}{\gamma m_e v_z}. \quad (1.6)$$

Используя формулу (1.2) и предполагая, что v_z равен c , после интегрирования мы приходим к выражению для скорости электрона по x

$$v_x = -\frac{e}{\gamma k_u m_e c} B_0 \cos(k_u z). \quad (1.7)$$

Из уравнения (1.7) безразмерный параметр K ондулятора определяется как мера отклоняющей силы ондулятора. Параметр ондулятора

$$K = \frac{eB_0}{k_u m_e c}. \quad (1.8)$$

Тогда уравнение (1.7) можно записать как

$$v_x = -\frac{K}{\gamma} \cos(k_u z). \quad (1.9)$$

В современных ЛСЭ электроны движутся со скоростью v , близкой к скорости света c . В ультррелятивистском случае (релятивистский фактор $\gamma \gg 1$) скорость электрона может быть записана как $v = \beta c$, где β определяется как

$$\beta = \sqrt{1 - 1/\gamma^2} \approx 1 - \frac{1}{2\gamma^2}. \quad (1.10)$$

Используя соотношения $v_x^2 + v_y^2 + v_z^2 = (\beta c)^2$ и $v_y = 0$,

$$v_z = c \left[1 - \frac{1}{2\gamma^2} \left(1 + \frac{K^2}{2} \right) \right] - \frac{cK^2}{4\gamma^2} \cos(2k_u z). \quad (1.11)$$

Введем среднюю скорость по оси z

$$\bar{v}_z = c \left[1 - \frac{1}{2\gamma^2} \left(1 + \frac{K^2}{2} \right) \right]. \quad (1.12)$$

Выражение для средней скорости (1.12) может служить хорошим приближением для скорости распространения электронов по оси ондулятора. Изменение координаты электрона z задается

$$z = \bar{z} + \frac{K^2}{8k_u \gamma^2} \sin(2k_u z). \quad (1.13)$$

1.1.2 Взаимодействие с излучением

В этом разделе мы рассмотрим взаимодействие излучения с электронами. Источником излучения в ЛСЭ может быть как внешнее поле когерентного лазера, так

и спонтанное излучение, создаваемое самим электронным пучком. Итак, изменение вектора напряжённости \vec{E} электрического поля плоской электромагнитной волны определяется следующим выражением

$$\vec{E} = \vec{e}_x E_0 \cos(k_\lambda z - \omega t + \phi_0), \quad (1.14)$$

$k_\lambda = 2\pi/\lambda$ – волновое число, $\omega = k_\lambda c$ – частота волны, λ – длина волны излучения, ϕ_0 – начальная фаза. Как известно, магнитная составляющая поля не совершает работы, электрическая же составляющая изменяет энергию E

$$\frac{dE}{dt} = -e(\vec{E}\vec{v}). \quad (1.15)$$

Подставляем выражение для энергии $E = \gamma m_e c^2$

$$\frac{d\gamma}{dt} = \frac{eE_0 K}{2\gamma m_e c} [\cos((k_\lambda - k_u)z - \omega t + \phi_0) + \cos((k_\lambda + k_u)z - \omega t + \phi_0)]. \quad (1.16)$$

Вблизи резонансов ондулятора член с множителем $\cos((k_\lambda - k_u)z - \omega t + \phi_0)$ быстро осциллирует и поэтому не дает вклада

$$\frac{d\gamma}{dt} = \frac{eE_0 K}{2\gamma m_e c} \cos \theta, \quad (1.17)$$

$\theta = (k_\lambda + k_u)z - \omega t + \phi_0 = (k_\lambda + k_u)z - k_\lambda z + \phi_0$ – пондеромоторная фаза. Это мера продольного положения электрона в ондуляторе относительно фазы электромагнитной волны. Для устойчивого взаимодействия необходимо постоянство этой фазы, что приводит к

$$\frac{d\theta}{dt} = 0 = (k_\lambda + k_u) \frac{dz}{dt} - k_\lambda c. \quad (1.18)$$

В первом приближении можно подставить среднюю скорость по оси z , изменение фазы

$$\frac{d\theta}{dt} = ck_\lambda \left(\frac{k_u}{k_\lambda} - \frac{1 + K^2/2}{2\gamma^2} \right). \quad (1.19)$$

Приравнявая (1.19) к нулю, получаем резонансное условие

$$\lambda = \frac{\lambda_u}{2\gamma^2} \left(1 + \frac{K^2}{2} \right), \quad (1.20)$$

где λ_u – длина периода ондулятора, K – параметр ондулятора, γ – релятивистский фактор и λ – длина волны излучения. Это условие (1.20) означает, что электрон, проходящий через ондулятор, находится в резонансе с электромагнитной волной, если его энергия удовлетворяет уравнению

$$\gamma_{res} = \sqrt{\frac{\lambda_u}{2\lambda} \left(1 + \frac{K^2}{2}\right)}. \quad (1.21)$$

1.1.3 Уравнения ЛСЭ

Для удобства введем переменную, которая обозначает относительное отклонение энергии от резонансной энергии γ_{res} , так что

$$\eta = \frac{\gamma - \gamma_{res}}{\gamma_{res}}. \quad (1.22)$$

Тогда изменение относительной энергии

$$\frac{d\eta}{dt} = \frac{d\gamma}{dt} \frac{1}{\gamma_{res}}. \quad (1.23)$$

Изменение пондеромоторной фазы теперь можно записать как

$$\frac{d\theta}{dt} = ck_\lambda(1 + K^2/2) \left[\frac{1}{2\gamma_{res}^2} - \frac{1}{2\gamma^2} \right]. \quad (1.24)$$

Используя асимптотическую формулу $1 - \frac{1}{(1+\eta)^2} \approx 2\eta$ для $\eta \ll 1$, упрощаем выражение

$$\frac{d\theta}{dt} = 2ck_u\eta. \quad (1.25)$$

Изменение энергии электронов теперь дается следующим выражением

$$\frac{d\eta}{dt} = \frac{eE_0K}{2m_e c \gamma \gamma_{res}} \cos \theta. \quad (1.26)$$

Уравнения (1.25) и (1.26) определяют эволюцию фазы электронов и энергии в зависимости от времени. Они связаны друг с другом и называются уравнениями маятника ЛСЭ [55]. Название происходит от того факта, что движение электрона напо-

минает движение математического маятника при рассмотрении электрона в фазовом пространстве (θ, γ) . Преобразуем dt в продольную переменную dz с использованием $dz/dt \approx c$, $\gamma\gamma_{res} \approx \gamma_{res}^2$, уравнения представляются в виде

$$\frac{d\theta}{dz} = 2k_u\eta, \quad (1.27)$$

$$\frac{d\eta}{dz} = \kappa_1 \cos \theta, \quad \kappa_1 = \frac{eE_0K}{2m_e c^2 \gamma_{res}^2}, \quad (1.28)$$

$$\frac{d\gamma}{dt} = \frac{eE_0K}{4m_e c \gamma} [\exp(i((k_u + k_\lambda)z - \omega t + \phi_0)) + c.c.]. \quad (1.29)$$

Учтем осциллирующий член в последнем выражении

$$\begin{aligned} & \frac{d\gamma}{dt} = \\ & = \frac{eE_0K}{4m_e c \gamma} \left[\exp \left(i \left((k_u + k_\lambda)z - (k_u + k_\lambda) \frac{K^2}{8\gamma^2 k_u} \sin(2k_u z) - \omega t + \phi_0 \right) \right) + c.c. \right]. \end{aligned} \quad (1.30)$$

Здесь $c.c.$ обозначает комплексное сопряжение, связанное с отрицательным показателем степени. Используем функции Бесселя первого рода

$$\begin{aligned} \exp(ix \sin \theta) &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(x) \exp(im\theta), \\ k_\lambda + k_u &\approx k_\lambda, \end{aligned} \quad (1.31)$$

$$\frac{d\gamma}{dt} = \frac{eE_0K}{4m_e c \gamma} \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m \left(\frac{k_\lambda K^2}{8\gamma^2 k_u} \right) \exp(im2k_u z) \exp(i((k_u + k_\lambda)z - \omega t + \phi_0)) + c.c. \quad (1.32)$$

Ненулевые выражения будут только для нечетных гармоник $n = 2m + 1$ и $m = \frac{n-1}{2}$

$$\exp(im2k_u z) \exp(i((k_u + k_\lambda)z - \omega t + \phi_0)) = \exp(i((2mk_u + k_u + k_\lambda)z - \omega t + \phi_0)). \quad (1.33)$$

Аналогично для другого слагаемого, получаем

$$\frac{d\gamma}{dt} = \frac{eE_0K}{2m_e c \gamma} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[J_{\frac{n-1}{2}} \left(\frac{k_\lambda K^2}{8\gamma^2 k_u} \right) - J_{\frac{n+1}{2}} \left(\frac{k_\lambda K^2}{8\gamma^2 k_u} \right) \right] \cos(n\theta). \quad (1.34)$$

Тогда уравнения ЛСЭ с учетом осциллирующего слагаемого в z

$$\frac{d\theta}{dz} = 2k_u\eta, \quad (1.35)$$

$$\frac{d\eta}{dz} = \frac{eE_0K f_1}{2m_e c^2 \gamma_{res}^2} \cos \theta, \quad (1.36)$$

$$f_1 = J_0 \left(\frac{K^2}{4 + 2K^2} \right) - J_1 \left(\frac{K^2}{4 + 2K^2} \right). \quad (1.37)$$

Уравнение (1.36) показывает, что продольные колебания электрона в поле плоского ондулятора приводят к уменьшению взаимодействия электронов и излучения. Это можно объяснить тем, что электрон не остается на оптимальной фазе взаимодействия в течение одного полного периода ондулятора. В спиральном ондуляторе продольные колебания электрона отсутствуют, и коэффициент Бесселя $f_1 = 1$.

Во время взаимодействия с излучением электроны движутся в фазовом пространстве (θ, η) . Пространство, в котором отображаются динамические переменные, называется фазовым пространством, а линии, которые показывают постоянную энергию, – фазовыми линиями. Для исследования этого фазового пространства мы объединим (1.25) и (1.26). Подставляя (1.25) в (1.26) получаем

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} = \Omega^2 \cos \theta, \quad \Omega^2 = \frac{k_u e E_0 K}{m_e \gamma_{res}^2}. \quad (1.38)$$

Это уравнение описывает движение электронов в фазовом пространстве, подобно тому, как маятник совершает колебания или вращение в зависимости от величины углового момента. Анализ поведения решений этих уравнений можно провести с помощью механической аналогии (математического маятника).

Домножив (1.38) на $2\frac{d\theta}{dt}$ и используя $\frac{d}{dt} \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 = \frac{d^2\theta}{dt^2} \cdot 2\frac{d\theta}{dt}$,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 = \Omega^2 \cos \theta \cdot 2\frac{d\theta}{dt}. \quad (1.39)$$

Используем (1.38) и интегрируем (1.39)

$$\left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 = 2\Omega^2 \sin \theta + const, \quad (1.40)$$

$$\eta^2 = \frac{\Omega^2}{2c^2 k_u^2} \sin \theta + const. \quad (1.41)$$

Тогда фаза η

$$\eta = \pm \sqrt{\alpha \sin \theta + const}, \quad \alpha = \frac{\Omega^2}{2c^2 k_u^2}. \quad (1.42)$$

С помощью этого выражения можно выделить два случая:

1. $const > \alpha$: аргумент квадратного корня в формуле (1.42) всегда положительный и все фазы θ возможны.
2. $const < \alpha$: синус может принимать значения между -1 и $+1$. Так как подкоренное выражение не может быть отрицательным, только определенные фазы приведут к вещественным решениям для η .

Первый случай соответствует неограниченному движению, аналогичному вращению маятника. Второй случай соответствует электронным колебаниям в фазовом пространстве, аналогичным колебанию маятника. Граница между двумя случаями определяется условием $const = \alpha$ и называется сепаратрисой.

Сепаратриса соответствует движению маятника, который останавливается в верхнем положении. Уравнение сепаратрисы выглядит следующим образом

$$\eta = \pm \sqrt{\alpha(\sin \theta + 1)}. \quad (1.43)$$

На рисунке 1.2 приводится изображение сепаратрисы и траекторий электронов в фазовом пространстве. Фазовая линия в форме овала соответствует колебательному движению, а волнистые линии – вращению.

Рисунок 1.2 позволяет продемонстрировать важные моменты динамики ЛСЭ. Перпендикулярные линии $\eta = 0$ и $\theta = 0$ делят фазовое пространство на четыре части. В левой части фазового пространства все электроны движутся вверх в направлении увеличения энергии, в то время как на правой половине энергия электронов уменьшается. В зависимости от разности фаз между электроном и электромагнитной волной, электрон будет либо получать энергию от волны (левая половина), либо усиливать волну (правая половина). Пример развития фазового пространства показан ниже на Рис. 1.3.

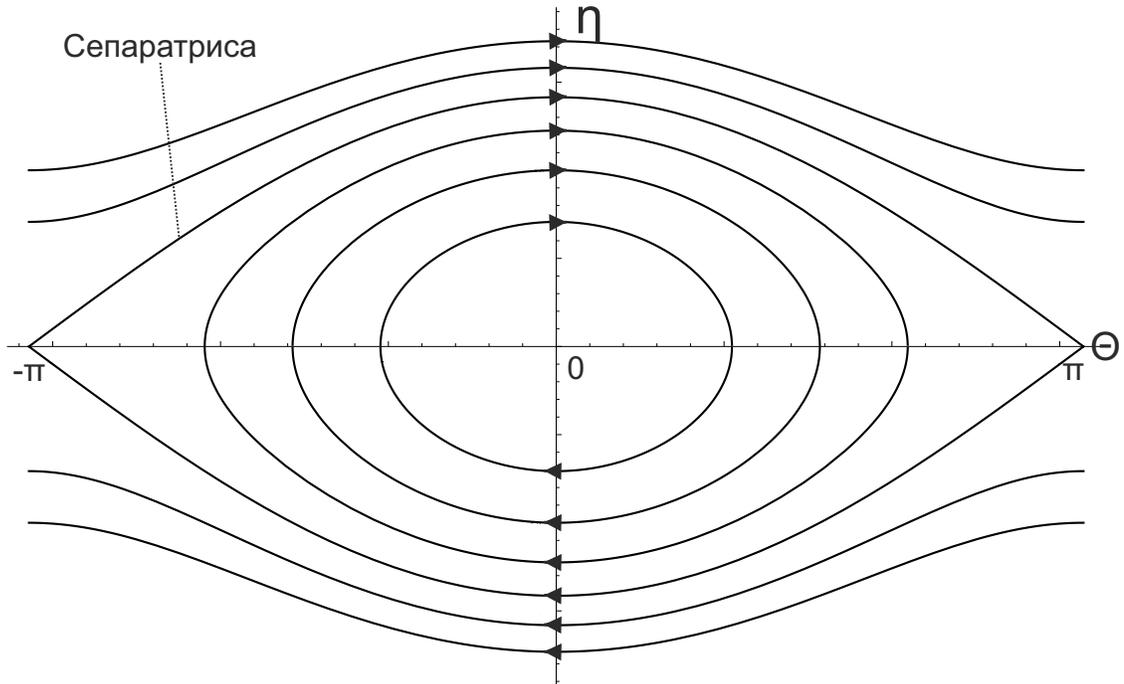


Рисунок 1.2: Фазовые траектории электронов. Направления движения вдоль фазовых траекторий показаны стрелками.

На рисунках 1.3 видно, как двигаются электроны в фазовом пространстве. Первый рисунок относится к инжектируемому пучку – энергетический разброс появляется в ускорителе, а пондеромоторная фаза распределена по определенному алгоритму с начальным статистическим шумом. На втором и третьем рисунках электроны передают энергию излучению, а на четвертом рисунке большинство электронов расположено в левой части – излучение опережает пучок и разгоняет электроны, тем самым отдавая энергию. В действительности после процесса насыщения наблюдаются осцилляции мощности излучения ЛСЭ.

1.1.4 Уравнение ЛСЭ с низким коэффициентом усиления и теорема Мейди

В режиме с низким коэффициентом усиления мы можем считать, что амплитуда нашего излучения за один проход не изменяется. Тогда к переменным η и θ применима пертурбативная теория (приближение). Предполагая κ_1 малым парамет-

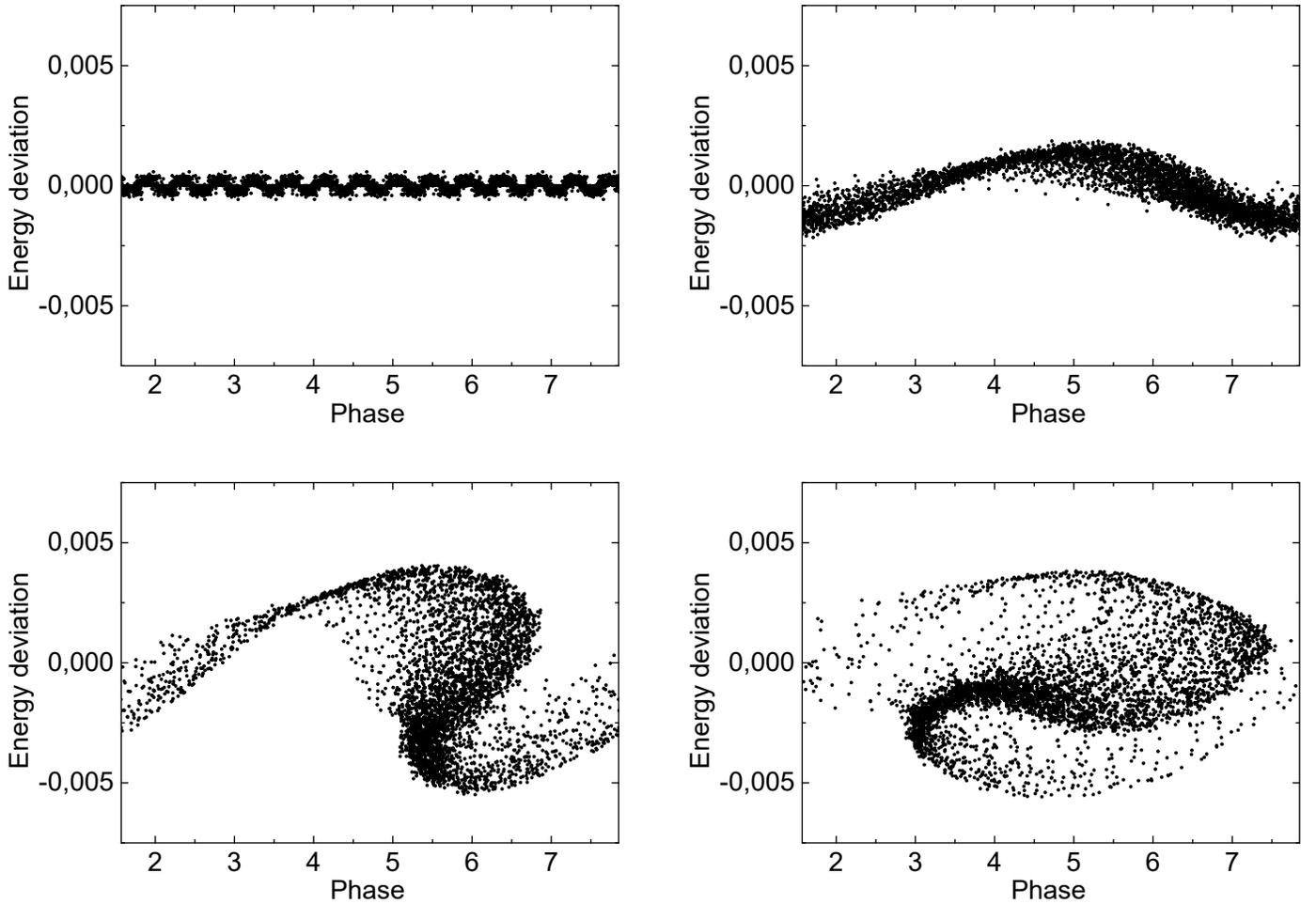


Рисунок 1.3: Изменение фазового пространства электронов при взаимодействии пучка электронов с излучением в начале ЛСЭ и после насыщения в режиме самоусиления спонтанного излучения. Рисунки построены авторской программой моделирования (см. подробнее ниже).

ром,

$$\begin{aligned}\eta &= \eta_0(z) + \kappa_1 \eta_1(z) + \kappa_1^2 \eta_2(z) + \dots \\ \theta &= \theta_0(z) + \kappa_1 \theta_1(z) + \kappa_1^2 \theta_2(z) + \dots\end{aligned}\tag{1.44}$$

такие, что уравнения (1.25) и (1.26) переходят в

$$\frac{d\eta_0}{dz} + \kappa_1 \frac{d\eta_1}{dz} + \kappa_1^2 \frac{d\eta_2}{dz} = \kappa_1 \cos \theta_0 - \kappa_1^2 \theta_1 \sin \theta_0,\tag{1.45}$$

$$\frac{d\theta_0}{dz} + \kappa_1 \frac{d\theta_1}{dz} + \kappa_1^2 \frac{d\theta_2}{dz} = 2k_u(\eta_0 + \kappa_1 \eta_1 + \kappa_1^2 \eta_2).\tag{1.46}$$

Решая уравнения, выделяя члены одного порядка, получаем

$$\begin{aligned}\eta_0(z) &= \text{const}, \\ \theta_0(z) &= 2k_u\eta_0 z + \varphi_0,\end{aligned}\tag{1.47}$$

$$\begin{aligned}\eta_1(z) &= \frac{\sin \theta_0 - \sin \varphi_0}{2k_u\eta_0}, \\ \theta_1(z) &= \frac{1}{\eta_0} \left[\frac{-\cos \theta_0 + \cos \varphi_0}{2k_u\eta_0} - z \sin \varphi_0 \right].\end{aligned}\tag{1.48}$$

Изменение энергии должно быть независимым от начальных фаз электрона φ_0 . Это означает, что $\eta(z)$ необходимо усреднить по φ_0 , чтобы оценить усиление ЛСЭ. $\langle \eta_1(z) \rangle_{\varphi_0} = 0$, усиление в первом порядке отсутствует. Для второго порядка после интегрирования по длине ондулятора L_u (см., например, [54, 56])

$$\langle \eta_2 \rangle = \frac{1}{2\eta_0} \left[\frac{2 \cos(2k_u\eta_0 L_u)}{(2k_u\eta_0)^2} + \frac{L_u \sin(2k_u\eta_0 L_u)}{2k_u\eta_0} - \frac{2}{(2k_u\eta_0)^2} \right].\tag{1.49}$$

Сделаем замену $x = k_u\eta_0 L_u$, и тогда выражение (1.49) примет вид

$$\langle \eta_2 \rangle = \frac{k_u L_u^3}{4} \left[\frac{\cos(2x)}{x^3} + \frac{\sin(2x)}{x^2} - \frac{1}{x^3} \right].\tag{1.50}$$

Можно перейти к понятию функции усиления $g(x)$ в режиме с низким коэффициентом усиления

$$\langle \eta_2 \rangle = \frac{k_u L_u^3}{4} \left[\frac{2x \sin x \cos x - 2 \sin^2 x}{x^3} \right] = \frac{k_u L_u^3}{4} g(x),\tag{1.51}$$

$$g(x) = \frac{2x \sin x \cos x - 2 \sin^2 x}{x^3} = \frac{d}{dx} \left(\frac{\sin x}{x} \right)^2.\tag{1.52}$$

Таким образом, функцию усиления можно рассматривать как производную от функции спектрального распределения интенсивности спонтанного ондуляторного излучения. Это выражается в виде теоремы Мейди.

Функция $g(x)$ описывает зависимость среднего изменения энергии электронов от их начальной энергии. Из рисунка 1.4 видно, что при $x = 0$ изменение энергии не происходит, то есть усиление при резонансной частоте отсутствует.

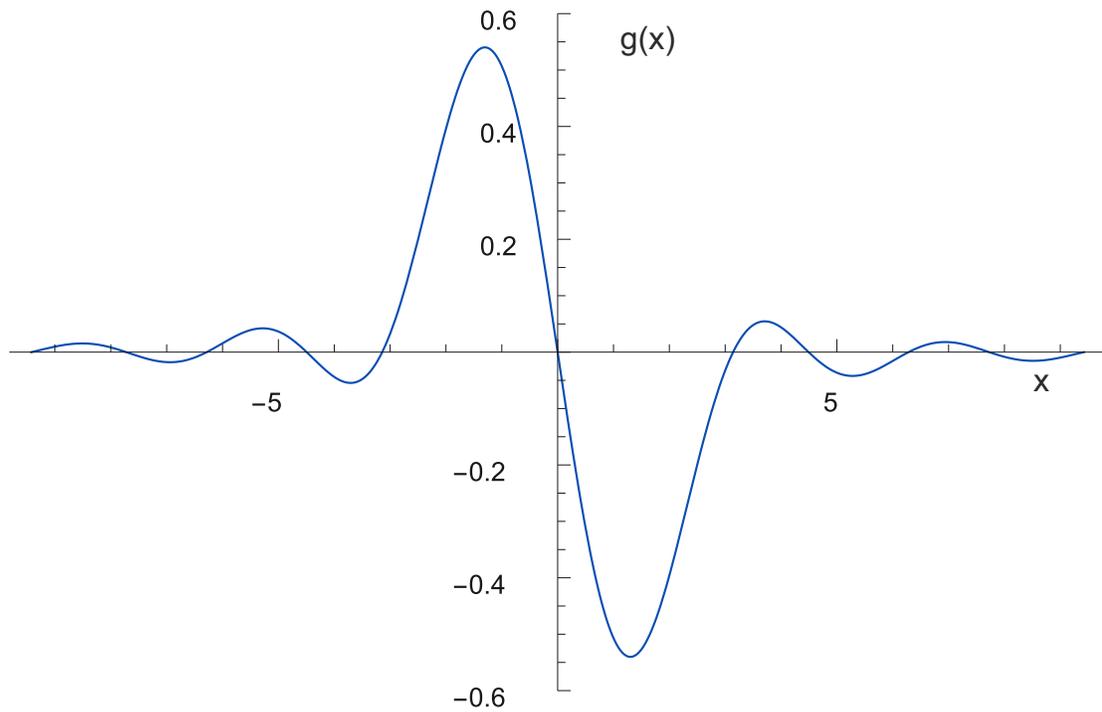
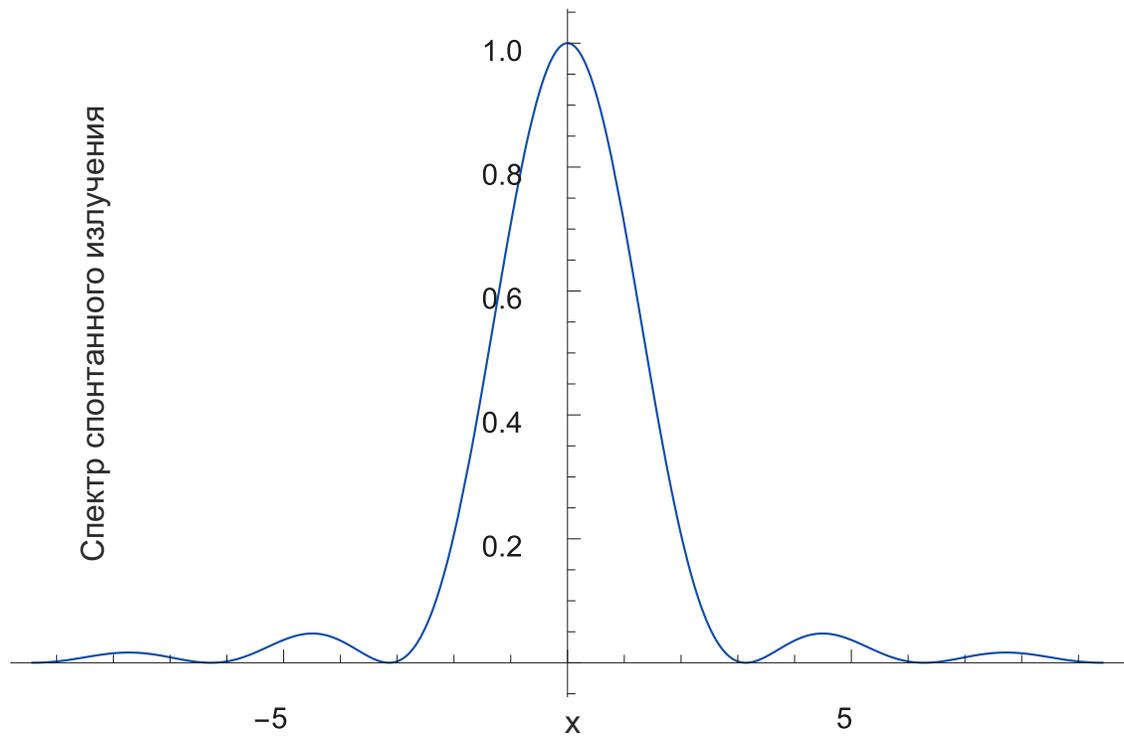


Рисунок 1.4: Спектр спонтанного излучения и функция усиления ЛСЭ в режиме с низким коэффициентом усиления.

При отрицательных x электроны, в среднем, приобретают энергию, а при по-

ложительных – теряют. Чтобы получить максимальное извлечение энергии из пучка электронов, надо выбрать $x = 1,3$, которое соответствует минимуму функции.

1.1.5 Уравнения поля

Теперь перейдем к рассмотрению уравнений поля. Так как работа ЛСЭ связана с движением заряженных частиц, то, конечно, основой являются уравнения Максвелла:

$$\left[\vec{\nabla}^2 - \frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} \right] \vec{A} = -\mu_0 \vec{J}, \quad (1.53)$$

$$\left[\vec{\nabla}^2 - \frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} \right] \varphi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (1.54)$$

где плотность тока и заряда определяются следующими выражениями

$$\begin{aligned} \vec{J} &= ec \sum_j \vec{\beta}_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j), \\ \rho &= e \sum_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j). \end{aligned} \quad (1.55)$$

Решением первого уравнения является

$$(A_r)_x = \frac{1}{ck_\lambda} \sin(k_\lambda(z - ct) + \Psi) E_0. \quad (1.56)$$

Остальные компоненты равны нулю. Работаем в калибровке Лоренца $\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}_r}{\partial t}$, отсюда сразу получаем наше поле волны излучения $\vec{E} = E_0 \cos(k_\lambda(z - ct) + \Psi)$. Для предполагаемой длительности импульса $L \gg \lambda$ зависимость амплитуды E_0 , а также фазы Ψ от времени пренебрежимо мала, и A_r является действительным векторным потенциалом для поля излучения. Сделаем параксиальное приближение, так как излучение направлено в основном вперед $k_{\lambda z} \gg k_{\lambda x}, k_{\lambda y}$, амплитуда излучения вдоль ондулятора меняется медленнее, чем $e^{ik(z-ct)}$, тогда комплексный векторный потенциал запишется следующим образом

$$A_r = \frac{m_e c}{e} u e^{ik(z-ct)}. \quad (1.57)$$

Изменением плотности заряда к изменению плотности тока в уравнениях Макс-

велла пренебрегают, так как $\sqrt{\rho_{Pierce}} \ll 1$, где $\rho_{Pierce} = \frac{1}{2\gamma} \left(\frac{J}{4\pi I_A} (\lambda_u K f_1)^2 \right)^{1/3}$ – параметр Пирса, J – плотность тока, $I_A = 17045$ А – ток Альфвена, f_1 – коэффициент Бесселя (см., например, [57]). Тогда уравнения Максвелла преобразуются к следующему виду [58]

$$\left[\nabla_{\perp}^2 + 2ik_{\lambda} \left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{c\partial t} \right) \right] u = \frac{ie^2\mu_0}{m_e} \sum_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \frac{f_c K}{\sqrt{2}\gamma_j} e^{-i\theta_j}, \quad (1.58)$$

$$\left[\nabla_{\perp}^2 - \frac{l^2 k_{\lambda}^2 (1 + K^2/2)}{\gamma_{res}^2} \right] \tilde{E}_l = i \frac{ec^2\mu_0 l k_{\lambda} (1 + K^2/2)}{\gamma_{res}^2} \sum_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) e^{-il\theta_j}, \quad (1.59)$$

где

$$\begin{aligned} \gamma_{res} &= \sqrt{k_{\lambda} (1 + K_0^2/2) / 2k_u}, \\ K &= K_0 (1 + k_x^2 x^2 / 2 + k_y^2 y^2 / 2), \\ k_x^2 + k_y^2 &= k_u^2. \end{aligned} \quad (1.60)$$

$\nabla_{\perp}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$, f_c – коэффициент взаимодействия первой гармоники с электронами, γ_{res} – резонансная энергия, $k_{\lambda} = \frac{2\pi}{\lambda}$, K_0 – параметр ондулятора на оси, \tilde{E}_l – моды продольного электростатического поля.

Снова вернемся к амплитуде электрического поля E . Чтобы получить хоть какое-то аналитическое выражение для поля, будем рассматривать одномерный случай уравнения Максвелла (так как в плоском ондуляторе f_1 близко к единице, мы положили $f_1 = 1$)

$$\frac{\partial E}{\partial z} = -c_1 \langle \exp(-i\theta_j) \rangle \quad (1.61)$$

$$c_1 = \frac{eK n_e}{4\epsilon_0 \gamma}.$$

Уравнения ЛСЭ (1.35), (1.36) можно упростить с помощью

$$\kappa_2 = \frac{eK}{2m_e c^2 \gamma_{res}^2}, \quad (1.62)$$

вводя параметр масштабирования ρ через

$$\bar{z} = 2k_u z \rho, \quad (1.63)$$

$$\bar{\eta} = \frac{\eta}{\rho}, \quad (1.64)$$

$$\bar{E} = \frac{\kappa_2}{2k_u \rho^2} E. \quad (1.65)$$

Введем новые переменные

$$\begin{aligned} b &= \langle \exp(-i\theta) \rangle, \\ m &= \langle \bar{\eta} \exp(-i\theta) \rangle. \end{aligned} \quad (1.66)$$

Тогда одномерные уравнения ЛСЭ можно записать как

$$\frac{d\bar{E}}{d\bar{z}} = -b, \quad (1.67)$$

$$\frac{db}{d\bar{z}} = -im, \quad (1.68)$$

$$\frac{dm}{d\bar{z}} = \bar{E}. \quad (1.69)$$

Решение для одномерной модели можно найти, преобразовав (1.67), (1.68) и (1.69) к уравнению

$$\frac{d^3}{d\bar{z}^3} \bar{E} = i\bar{E}. \quad (1.70)$$

Предполагая экспоненциальное поведение $E \sim \exp(-i\alpha\bar{z})$, получаем

$$\frac{d^3}{d\bar{z}^3} \bar{E} = (-i\alpha)^3 \bar{E} = i\bar{E}. \quad (1.71)$$

Решение $\alpha^3 = 1$ задается тремя кубическими корнями

$$\alpha_1 = 1, \quad \alpha_2 = \frac{-1 - \sqrt{3}i}{2}, \quad \alpha_3 = \frac{-1 + \sqrt{3}i}{2} \quad (1.72)$$

1) Первый корень соответствует первоначальной осциллирующей части поля излучения.

2) Второй корень соответствует затухающей моде.

3) Третий корень соответствует усиливающей моде, демонстрирует усиление исходного внешнего сигнала. Это соответствует идее усилителя ЛСЭ.

$$\bar{E} = \sum_{n=1}^3 C_n \exp(-i\alpha_n \bar{z}) \quad (1.73)$$

Используя начальные условия и уравнения (1.67), (1.68) и (1.69), получаем следующее решение

$$\bar{E}(\bar{z}) = \frac{1}{3} \sum_{n=1}^3 \left(\bar{E}(0) - i \frac{b(0)}{\alpha_n} - im(0)\alpha_n \right) \exp(-i\alpha_n \bar{z}) \quad (1.74)$$

В пределах больших z нужно учитывать только растущий, превалирующий член

$$\bar{E}(\bar{z}) = \frac{1}{3} \left(\bar{E}(0) - i \frac{b(0)}{\alpha_3} - im(0)\alpha_3 \right) \exp \left(\left(\frac{i}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \bar{z} \right) \quad (1.75)$$

Выражения $ib(0)/\alpha_3$ и $im(0)\alpha_3$ говорят о том, что излучение может генерироваться из начальных шумов, как это происходит в ЛСЭ в режиме спонтанного самоусиления излучения. Для усилителя получаем интенсивность

$$I(z) = \frac{I_0}{9} \exp \left(\frac{4\pi\sqrt{3}\rho z}{\lambda_u} \right). \quad (1.76)$$

Отсюда можно ввести еще одну важную характеристику ЛСЭ – длину усиления

$$L_g = \frac{\lambda_u}{4\pi\sqrt{3}\rho}. \quad (1.77)$$

Для написания уравнения (1.67) мы должны определить параметр масштабирования ρ как

$$\rho = \left[\frac{c_1 \kappa_2}{(2k_u)^2} \right]^{1/3}. \quad (1.78)$$

По-другому это выражение можно записать как

$$\rho = \left[\frac{I\gamma\lambda^2}{16\pi^2 I_A \sigma_x \sigma_y} \left(\frac{K f_1}{1 + K^2/2} \right)^2 \right]^{1/3}, \quad (1.79)$$

где $I_A = ec/r_e = 17045$ А – ток Альфвена.

1.1.6 Квантовые эффекты в ЛСЭ

Несмотря на то, что первая теория ЛСЭ основана на квантовой механике [20], 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.

Рассмотрим первый случай. Электроны излучают фотоны с определенным импульсом $\hbar k$. В электронном пучке присутствует распределение электронов по импульсам Δp и энергии $\Delta \gamma$. Если изменение энергии из-за квантовой отдачи превышает ширину полосы усиления на порядок или больше, первая может значительно ухудшить коэффициент усиления. Тогда вводя квантовый параметр ЛСЭ

$$\bar{\rho} = \frac{\Delta p}{\hbar k} = \frac{m_e c \Delta \gamma}{\hbar k} = \frac{m_e c \gamma}{\hbar k} \rho, \quad (1.80)$$

где $\Delta \gamma / \gamma \approx \rho$. Это выражение можно переписать в виде

$$\bar{\rho} = \frac{\gamma \lambda}{\lambda_c} \rho, \quad (1.81)$$

где λ_c – комптоновская длина волны электрона $\frac{h}{m_e c} \approx 2,4 \cdot 10^{-12}$ м. Условие классичности можно выразить в виде

$$\bar{\rho} = \frac{\gamma \lambda}{\lambda_c} \rho \gg 1. \quad (1.82)$$

Второе условие отражается в волновой структуре электрона. Электроны могут также интерферировать. Квантовые эффекты ощутимы, когда длина когерентности электронов соразмерна с длиной волны излучения

$$L_c = \frac{\lambda_e^2}{\Delta \lambda_e} > \lambda, \quad (1.83)$$

где λ_e – длина волны де Бройля. Это условие можно переписать в виде $\hbar k > \Delta p$, что приводит к первому случаю.

Итак, условие применимости классического решения выражается условием

$$\bar{\rho} = \frac{\gamma\lambda}{\lambda_c} \rho \gg 1. \quad (1.84)$$

Например, для современного рентгеновского лазера $\gamma \approx 3 \cdot 10^4$, $\rho \approx 5 \cdot 10^{-4}$, $\lambda/\lambda_c \approx 20$ квантовый параметр ЛСЭ

$$\bar{\rho} = \frac{\gamma\lambda}{\lambda_c} \rho \approx 300 \gg 1. \quad (1.85)$$

1.2 Вывод к главе 1

В этой главе были рассмотрены теоретические аспекты теории ЛСЭ. Были обоснованы методы и выведены формулы, необходимые для расчета 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 применение классической электродинамики обосновано.

Глава 2

Программа численного моделирования излучения ЛСЭ

2.1 Теория

Как известно, пучок электронов в ЛСЭ сложно описать аналитически, так как в нем содержится большое количество частиц, порядка 10^{10} . Для этих целей создают программы численного моделирования. Существуют одномерные, двухмерные и трехмерные программы расчета мощности излучения ЛСЭ, например, GENESIS 1.3 [59], GINGER [60], FAST [61], RON [62], SIMPLEX [63], FALCON [64] и др. Все программы имеют схожую математическую модель, но отличаются алгоритмами и приближениями. К примеру, программа FALCON была создана для очень быстрых вычислений, но не отличается большой точностью. Для сокращения времени вычислений были разработаны некоторые одномерные (1D) коды моделирования (PERSEO [65] и AURORA [66]).

Для работы с различными конфигурациями ондуляторов необходимо иметь развитый комплекс программ с доступом к коду. В настоящей 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 (time-dependent simulation), 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 (time-dependent simulation), так и без учета данного эффекта (time-independent simulation). 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 упро-

щение можно использовать для быстрой оценки работы ЛСЭ, а затем использовать нестационарное уравнение.

Данная программа поддерживает параллельные вычисления. Потоки создаются средствами языка C++, которые доступны начиная со стандарта C++11. Ниже будут описаны основные этапы, необходимые при написании программы (подробности см., например, в [58]). Программу можно разделить на потоки на следующих этапах:

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

Начнем с 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 t и z .

Задачу можно решить на обычных компьютерах, если сделать следующие приближения:

- 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)
- макроскопический объемный заряд, изменения формы сгустка не моделируются
- узкая полоса частот вблизи резонансной, малый разброс по энергии электронов

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

2.1.1 Создание фазового пространства пучка электронов

Программа начинает вычисления с создания фазового пространства пучка электронов. Для пространственного заполнения макрочастицами можно обратиться к

случайным числам. К сожалению, данный рецепт имеет тягу к формированию кластеров, а нам нужно достаточно равномерное и несамопересекающееся распределение. Воспользуемся последовательностями Хаммерсли, или Гальтона [67]: возьмем последовательность натуральных чисел, переводим каждое число в систему счисления с основанием b

$$n = \sum_{j=0}^{\infty} a_j(n)b^j. \quad (2.1)$$

После этого инвертируем число по правилу

$$f_n^b = \sum_{j=0}^{\infty} a_j(n)b^{-(j+1)}. \quad (2.2)$$

Оптимально брать в качестве оснований простые числа, например, 2 и 3. Чтобы сделать распределение частиц по Гауссу, используют преобразования Бокса–Мюллера:

$$\begin{aligned} y_1 &= \sqrt{-2 \ln x_1} \cos(2\pi x_2), \\ y_2 &= \sqrt{-2 \ln x_1} \sin(2\pi x_2), \\ p(y_1, y_2) &= \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-y_1^2/2} \right] \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-y_2^2/2} \right]. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Распределения по импульсам можно также задавать по этому алгоритму. Нужно отметить, что вид распределения частиц в пространстве (распределение Гаусса, параболическое и однородное распределения) существенно не влияет на развитие мощности излучения в ЛСЭ.

Чтобы создать распределение энергии электронов γ по Гауссу со стандартным отклонением σ_γ , можно также использовать преобразование Бокса–Мюллера. Это намного эффективнее, чем создание распределения Гаусса с помощью центральной предельной теоремы. Случайные числа мы получаем с помощью вихря Мерсенна, а именно генератора псевдослучайных чисел (ГСПЧ) [68] с периодом $2^{19937} - 1$. Данный ГСПЧ доступен в C++ начиная со стандарта C++ 11. Комбинация ГСПЧ вихря Мерсенна вместе с преобразованием Бокса–Мюллера позволяет создать множество качественных случайных величин, распределенных по Гауссу, с минимальной корреляцией.

Современные ЛСЭ с высоким коэффициентом усиления обычно работают в

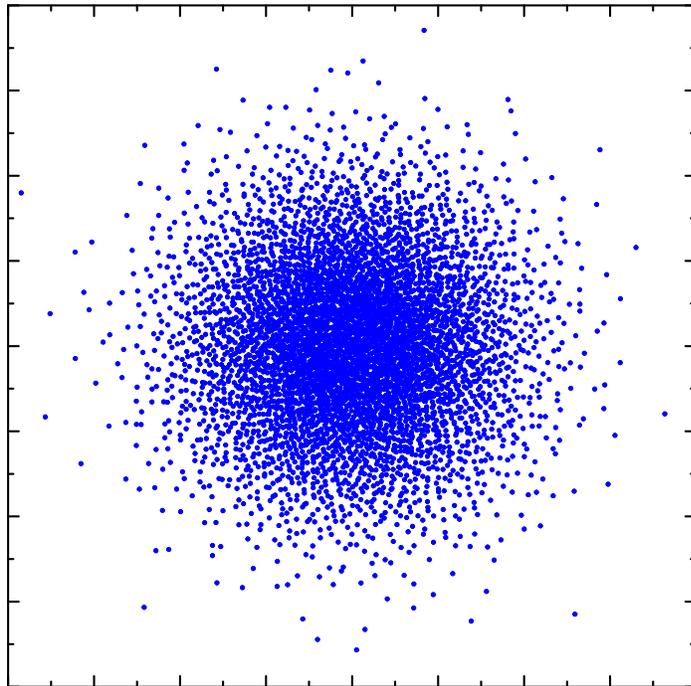


Рисунок 2.1: Распределение частиц по Гауссу с использованием последовательности Гальтона и преобразования Бокса–Мюллера.

режиме ССИ, поэтому при моделировании необходимо создать начальный пучок с некоторым заданным коэффициентом группировки (банчинга), иначе излучение не будет зарождаться и усиливаться в лазере.

Существует несколько алгоритмов создания случайных шумов в ЛСЭ. Рассмотрим для начала алгоритм Пенмана [69]. Пусть фаза частиц θ сначала равномерно распределена с учетом зеркального отражения, которое делается, чтобы коэффициент группировки равнялся нулю. Затем к фазе каждой частицы прибавляется случайная величина в интервале $\delta\theta$ от 0 до $\sqrt{3n/N}$, где n – число макрочастиц, N – число всех частиц в срезе пучка, $n \ll N$. Этот алгоритм прост в реализации, но имеет недостаток – он предоставляет неправильный коэффициент группировки для высших гармоник. Для ЛСЭ со слабыми высшими гармониками это существенно не влияет на конечный результат. Верную реализацию банчинга для высших гармоник осуществляет, например, алгоритм Фоули [70].

Метод Фоули заключается в следующем, число макрочастиц n делится на число бимлетов n_b (желательно брать больше 256 бимлетов, но 64 бимлета достаточ-

но). Бимлет – это группа $2M$ макрочастиц с одинаковыми физическими величинами (x, y, p_x, p_y, γ) . Число макрочастиц в каждом бимлете $N_b = N/n_b \geq 2M$, где M – число рассматриваемых гармоник. В каждом бимлете k мы заполняем частицы равномерно по фазе

$$\theta_{j,k} = \theta_{0,k} + (j - 1) \frac{\pi}{M}, \quad (2.4)$$

$\theta_{0,k}$ берется с равномерным распределением по $[0, \frac{\pi}{M}]$. Далее к каждой фазе добавляется случайная фаза, которая генерируется следующим способом

$$\delta\theta_{j,k} = \sum_{m=1}^{m=M} a_{m,k} \cos(m\theta_{j,k}) + b_{m,k} \sin(m\theta_{j,k}), \quad (2.5)$$

где $a_{m,k}, b_{m,k}$ берутся независимо для каждого бимлета из одномерного распределения Гаусса с $\sigma_m^2 = \frac{2}{m^2 N_b}$. Более детальный анализ показывает, что для последней гармоники $m = M$, $\sigma_m^2 = \frac{1}{m^2 N_b}$. Тогда для каждой гармоники коэффициент банчинга будет равен $b_m = \frac{1}{\sqrt{N}}$.

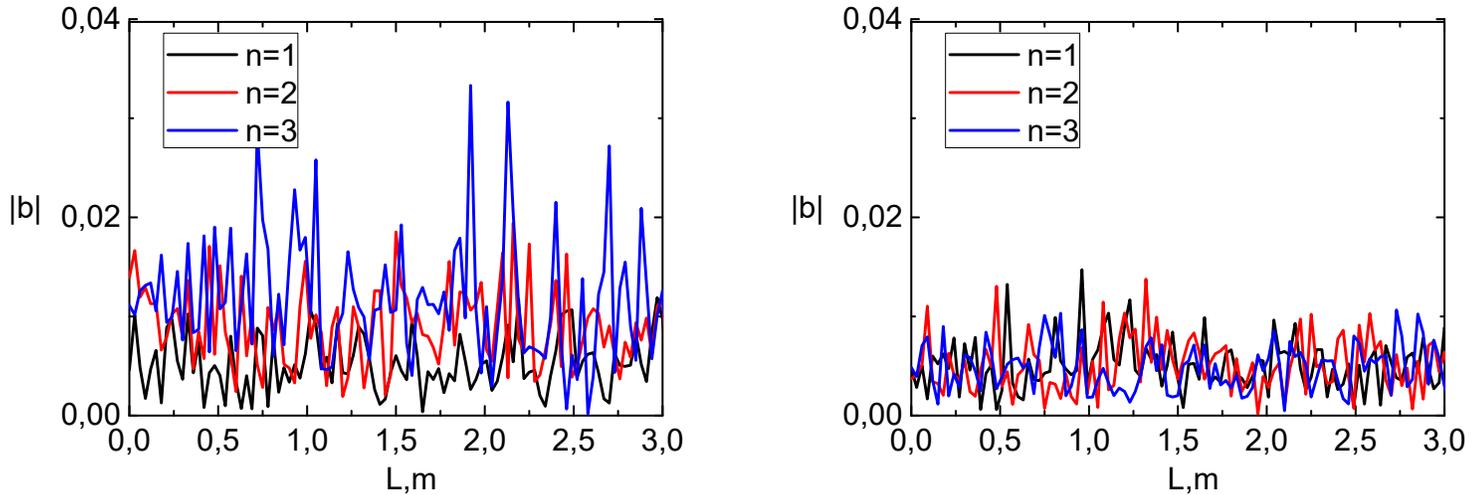


Рисунок 2.2: Развитие коэффициента банчинга гармоник излучения вдоль ЛСЭ в режиме ССИ с $N = 31566$, $b_m = 5,6 \cdot 10^{-3}$. Слева представлен алгоритм Пенмана, справа – Фоули: $n = 1$ – сплошная черная линия, $n = 2$ – красная линия, $n = 3$ – синяя линия.

2.1.2 Решение уравнений движения

Дальше запускается процесс вычисления динамики каждой макрочастицы и

поля излучения гармоник. Причем уравнения динамики и полевые уравнения решаются в различных точках – скаковой алгоритм (*leapfrog scheme*). Для каждой частицы имеем следующие уравнения движения:

$$\theta' = \frac{k_u}{\beta_0} - k_\lambda \frac{1 + p_x^2 + p_y^2 + K^2/2 - if_c K (ue^{i\theta} - c.c.)/\sqrt{2}}{2\beta_0\gamma^2}, \quad (2.6)$$

$$\gamma' = -k_\lambda \frac{f_c K}{2\sqrt{2}\beta_0\gamma} (ue^{i\theta} + c.c.) + \frac{e}{m_e c^2} \sum_{l=1}^{\infty} [\tilde{E}_l e^{il\theta} + c.c.], \quad (2.7)$$

$$x' = \frac{p_x}{\gamma}, \quad (2.8)$$

$$y' = \frac{p_y}{\gamma}, \quad (2.9)$$

$$p'_x = - \left(\frac{k_x^2 K^2}{2\gamma} + \frac{eg}{m_e c} \right) x, \quad (2.10)$$

$$p'_y = - \left(\frac{k_y^2 K^2}{2\gamma} - \frac{eg}{m_e c} \right) y. \quad (2.11)$$

$\theta = (k_\lambda + k_u)z - ck_\lambda t$ — пондеромоторная фаза, k_λ — волновое число для длины волны λ , p_x и p_y — бетатронные поперечные импульсы, x и y — координаты частицы, γ — лоренц-фактор электрона, K — параметр ондулятора, u — поле излучения, \tilde{E}_l — мода электростатического поля, β_0 — средняя скорость электронов в ондуляторе, c — скорость света в вакууме, m_e — масса электрона, g — квадрупольный параметр, f_c — коэффициент Бесселя, $k_x^2 + k_y^2 = k_U^2$. $k_x^2 = k_y^2$ в случае спирального ондулятора; эти параметры можно приравнять нулю, чтобы не учитывать слабую фокусировку. К этому случаю нужно стремиться для улучшения качества пучка. В плоских ондуляторах можно изменить форму поверхностей магнита на параболическую, чтобы получить равную по x, y слабую фокусировку.

Если последние четыре уравнения можно решить аналитически, то первые два обычно решаются методом Рунге–Кутты четвертого порядка

$$\frac{df}{dz} = f(y, z), \quad (2.12)$$

$$y_{n+1} = y_n + \left(\frac{k_1}{3} + \frac{k_2}{6} + \frac{k_3}{6} + \frac{k_4}{3} \right) \Delta z, \quad (2.13)$$

где

$$\begin{aligned} k_1 &= f(y_n, z_n), \\ k_2 &= f(y_n + k_1 \Delta z / 2, z_n + \Delta z / 2), \\ k_3 &= f(y_n + k_2 \Delta z / 2, z_n + \Delta z / 2), \\ k_4 &= f(y_n + k_3 \Delta z, z_n + \Delta z). \end{aligned} \quad (2.14)$$

2.1.3 Решение полевых уравнений

Уравнения поля для амплитуды поля излучения u и гармоник электростатического поля E_l

$$\left[\nabla_{\perp}^2 + 2ik_{\lambda} \left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{c \partial t} \right) \right] u = \frac{ie^2 \mu_0}{m_e} \sum_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \frac{f_c K}{\sqrt{2} \gamma_j} e^{-i\theta_j}, \quad (2.15)$$

$$\left[\nabla_{\perp}^2 - \frac{l^2 k_{\lambda}^2 (1 + K^2 / 2)}{\gamma_{res}^2} \right] \tilde{E}_l = i \frac{ec^2 \mu_0 l k_{\lambda} (1 + K^2 / 2)}{\gamma_{res}^2} \sum_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) e^{-i l \theta_j}, \quad (2.16)$$

где

$$\begin{aligned} \gamma_{res} &= \sqrt{k_{\lambda} (1 + K_0^2 / 2) / 2k_u}, \\ K &= K_0 (1 + k_x^2 x^2 / 2 + k_y^2 y^2 / 2). \end{aligned} \quad (2.17)$$

В отличие от обыкновенных дифференциальных уравнений (2.15) и (2.16) — уравнения в частных производных, возникает проблема определения параметров в точках сетки, т.к. расположение частиц не совпадает с узлами сетки. Тогда прибегают к условной аппроксимации: выбирают ближайший к частице узел решетки. Это оправданное с точки зрения статистики приближение. Данные уравнения решаются методом конечных разностей. В программе установлены граничные условия Дирихле. В целом тип граничных условий (Неймана, идеально согласованные слои (PML)) не сильно влияет на итоговое излучение, т.к. концентрация частиц к границам уменьшается до нуля.

Напишем соотношение между полем излучения E и u

$$u(x, y, z, t) = \frac{e\hat{E}(x, y, z, t)}{im_e c^2 k_\lambda} e^{i\Psi(x, y, z, t)}, \quad (2.18)$$

где \hat{E} – среднеквадратичное значение электрического поля.

Тогда уравнение можно записать как

$$\left[\nabla_\perp^2 + 2ik_\lambda \left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{c\partial t} \right) \right] u = S. \quad (2.19)$$

Отложим пока эволюцию по времени и рассмотрим параболическое уравнение (стационарное уравнение поля излучения)

$$\left[\nabla_\perp^2 + 2ik_\lambda \frac{\partial}{\partial z} \right] u = S. \quad (2.20)$$

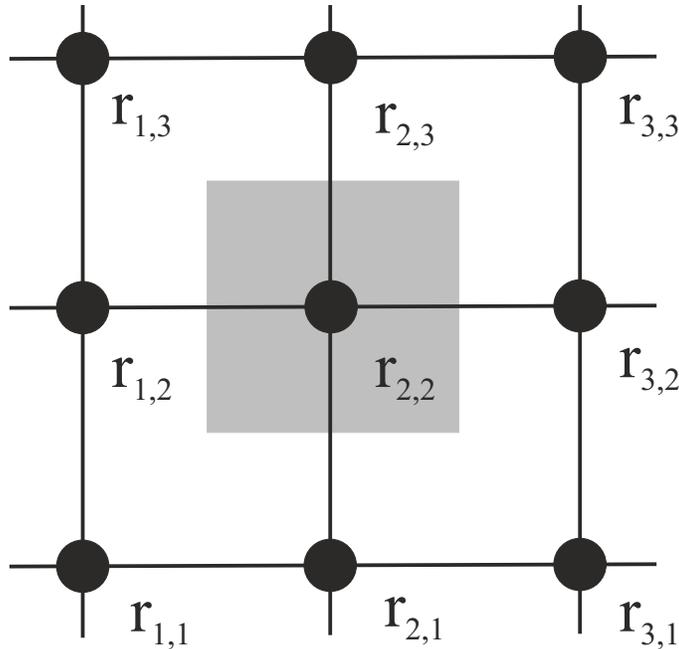


Рисунок 2.3: Дискретизация на декартовой сетке $u_{i,j} = u(r_{i,j})$.

В квантовой механике распространен такой вид уравнения – нестационарное двухмерное уравнение Шредингера с источником, зависящим от времени. Произво-

дим дискретизацию пространства (Декартова сетка)

$$u(x, y, z) \rightarrow u_{i,j}^m \equiv u^m. \quad (2.21)$$

Вводим разностные операторы

$$\frac{\partial}{\partial z} u \rightarrow \frac{u_{i,j}^{m+1} - u_{i,j}^m}{\Delta z}, \quad (2.22)$$

$$\nabla_{\perp}^2 u \rightarrow \frac{u_{i+1,j}^m + u_{i-1,j}^m + u_{i,j+1}^m + u_{i,j-1}^m - 4u_{i,j}^m}{h^2}. \quad (2.23)$$

Получаем

$$u^{n+1} = u^n + i \frac{\Delta z}{4k_{\lambda}} L [u^{n+1} + u^n] + s^{n+1/2} \Delta z, \quad (2.24)$$

где L – оператор Лапласа, а источник имеет следующий вид

$$s = \frac{e^2 \mu_0}{2\sqrt{2} k_{\lambda} m_e} \sum_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \frac{f_c K}{\gamma_j} e^{-i\theta_j}. \quad (2.25)$$

Эта схема Кранка–Николсона, она неявная и устойчива [58]. Она еще хороша тем, что имеет порядок точности $O(\Delta z^2)$. Но при инвертировании матриц возникает проблема памяти, т.к. матрицы не трехдиагональны. Последнее можно осуществить, используя метод переменных направлений

$$\begin{aligned} u^{n+1/2} &= u^n + i \frac{\Delta z}{4k_{\lambda}} \left[L_x u^{n+1/2} + L_y u^n \right] + s^{n+1/2} \frac{\Delta z}{2}, \\ u^{n+1} &= u^{n+1/2} + i \frac{\Delta z}{4k_{\lambda}} \left[L_x u^{n+1/2} + L_y u^{n+1} \right] + s^{n+1/2} \frac{\Delta z}{2}. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Оператор Лапласа L делится на две подматрицы L_x и L_y , где каждая подматрица действует только в одном направлении. Интеграция делится на одинаковое количество подэтапов, схема безусловно устойчива. СЛАУ решается методом Гаусса–Зейделя.

Для решения нестационарного уравнения

$$u^{n+1,m-1} = u^{n,m} + i \frac{\Delta z}{4k_\lambda} L [u^{n+1,m-1} + u^{n,m}] + s^{n,m} \Delta z, \quad (2.27)$$

делается следующее приближение. В этой форме программа должна сохранять все срезы пучка — дискретизацию по t в памяти одновременно, сталкиваясь с проблемой памяти, описанной выше. Эта проблема устраняется благодаря предположению о том, что для небольшого шага интегрирования время взаимодействия между электронным пучком и полем излучения слишком короткое, чтобы создать значительную коллективную неустойчивость, прежде чем поле будет продвигаться дальше. Начиная с последнего среза и пропускаем частицы этого среза через ондулятор; излучаемое электромагнитное поле сохраняется. Затем мы пропускаем следующий срез в поле предыдущих.

2.1.4 Учет высших гармоник поля излучения

Высшие гармоники поля $n = 2, 3, ..$ излучения могут возникать в ондуляторах за счет продольных колебаний электронов в пучке. Конечно, есть и ондуляторы, в которых не возникают высшие гармоники — спиральный ондулятор в идеальном приближении. Первая гармоника излучения группирует электроны, увеличивая коэффициент банчинга не только для первой гармоники, но и для высших.

Уравнение поля для высших гармоник выглядит следующим образом

$$\left[\nabla_{\perp}^2 + 2ik_{n\lambda} \left(\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{c\partial t} \right) \right] u_n = \frac{ie^2\mu_0}{m_e} \sum_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \frac{f_n K}{\sqrt{2}\gamma_j} e^{-in\theta_j}, \quad (2.28)$$

$\nabla_{\perp}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$, f_n — коэффициент связи высшей гармоники n с электронами, $k_{n\lambda} = \frac{2\pi n}{\lambda}$, u_n — поле гармоники n .

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 $\langle \exp(-in\theta_j) \rangle$.

Высшие гармоники поля излучения имеют больший разброс в результатах, чем основная гармоника. Мощность основной гармоники зависит от числа макрочастиц, размера сетки, шага интегрирования, оптимизации длины волны и других нефизических параметров симуляции (влияние на мощность излучения основной гармоники и длины насыщения остается в пределах $\approx 20\%$). Так как в большинстве конструкций ЛСЭ преобладает основная гармоника, то она дает основной вклад в группировку электронов. Поэтому высшие гармоники сильно зависят от первой гармоники, что объясняет их «хаотичность».

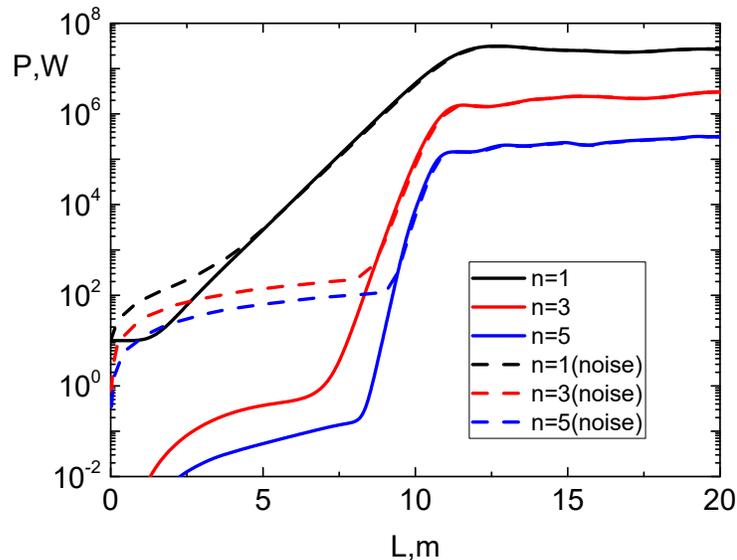


Рисунок 2.4: Нелинейная генерация гармоник без шума (прямые линии) и с шумом (пунктирные линии). Параметры примера: $K = 2,13$, $\lambda_u = 2,8$ см, $I = 56$ А, $\gamma = 300$, $\sigma_\gamma = 0,02\%$, $P_0 = 10$ Вт, $\varepsilon = 2,7$ мкм·рад, $\beta = 1,5$ м.

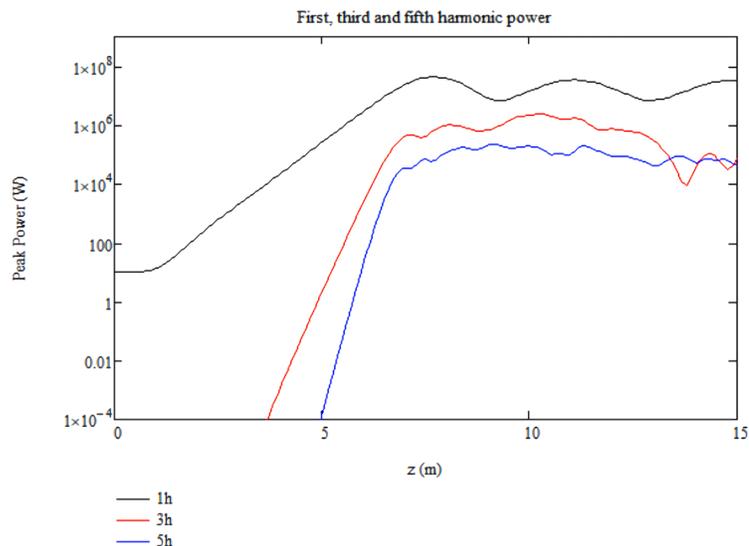


Рисунок 2.5: Нелинейная генерация гармоник в программе PERSEO. Параметры примера: $K = 2,13$, $\lambda_u = 2,8$ см, $I = 56$ А, $\gamma = 300$, $\sigma_\gamma = 0,02\%$, $P_0 = 10$ Вт, $\varepsilon = 2,7$ мкм·рад, $\beta = 1,5$ м.

2.1.5 Примеры работы программы

Ниже приведены примеры работы программы с обычными плоскими ондуляторами. Стоит отметить, что эти графики получены без регулировки сдвига фаз между ондуляторными секциями. Например, в эксперименте типа LCLS на длине 60 м мощность достигает значения 12 ГВт и медленно растет дальше, что наблюдается и в симуляции GENESIS. В [25] как раз указано, что без юстировки измеренная мощность равна 8 ГВт. Максимальная мощность после юстировки равна 12 ГВт. В начале графиков эволюции мощности видны некоторые шероховатости, неровности. Они не связаны с численными методами, как можно наблюдать на рисунке 2.4, где представлен режим усиления без начального шума. Именно алгоритм генерации начального шума создает различное положение макрочастиц в программе, что влияет на гладкость линий графиков. Мощность третьей гармоники продолжает расти, хотя в эксперименте [29] мощность третьей гармоники сильно зависит от настройки лазера, так как дифракционное соотношение уже плохо выполняется и малейшие отклонения центра пучка электронов приводит к уменьшению мощности третьей гармоники и прекращению осцилляции основной гармоники. Наше оценочное моделирование дает хорошее представление о диапазонах гармоник.

Также нужно отметить, что резонансная длина волны не является оптималь-

ной, то есть при ней не достигается максимум мощности насыщения и минимума длины усиления. Длина усиления также зависит и от выбранного участка лазера. Поэтому была написана функция (подпрограмма) в численной программе моделирования излучения в ЛСЭ, которая анализирует несколько вариантов моделирований с разными длинами волн излучения. На рисунке 2.6 представлено развитие мощности первой гармоники в эксперименте типа SPARC в режиме ССИ с различными длинами волн, остальные параметры пучка, ондулятора и симуляции оставались неизменными. Резонансная длина волны равна $\lambda_{res} = 508,4$ нм и представлена красной линией. $\lambda = 509,4$ нм является оптимальной длиной волны, как видно на Рис. 2.6, с такой длиной волны достигнутая мощность больше таковой при резонансной. Синяя и светло-синяя линии представляют длины волн с $\lambda = 514$ нм и $\lambda = 506$ нм соответственно, мощность при них достигается значительно ниже, чем при оптимальной, увеличение мощности также происходит медленнее.

Нужно отметить, что для каждой гармоники поля излучения существует своя оптимальная частота, на которой характеристики излучения достигают наилучших показателей. Несоответствие между резонансной и оптимальной длинами волн лежит в потерях энергии пучка электронов на излучение, лоренц-фактор уменьшается, а длина излучения $\lambda_{res} = \lambda_u(1 + K^2/2)/2\gamma^2$ изменяется в большую сторону. Относительные потери энергии пучка электронов отличаются для разных участков пучка электронов. В центре пучка электронов относительные потери будут больше, чем по краям. Как будет видно ниже, для второй гармоники центральная часть электронного пучка не вносит основной вклад в генерацию мощности излучения, поэтому оптимальная длина излучения четных гармоник будет меньше. Для более точной оптимизации в программе создается параллельный пучок в фазовом пространстве (θ, γ) , для него применяются те же уравнения движения, но основная длина волны будет другой, что влияет на коэффициент банчинга и лоренц-факторы электронов (макрочастиц) в пучке. В целом, для нечетных гармоник одинаковые оптимальные длины волн остаются приемлемым ограничением, однако и для них можно ввести отдельные оптимальные длины волн, но это усложняет процесс моделирования гармоник.

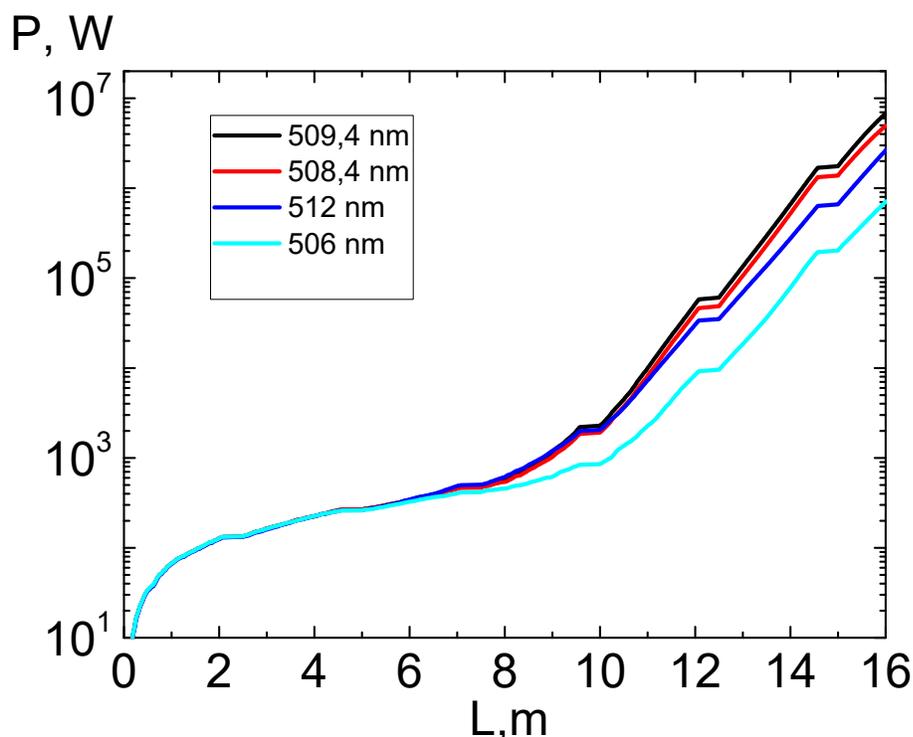


Рисунок 2.6: Развитие мощности первой гармоники в эксперименте типа SPARC (неоптимизированный пучок электронов) в режиме ССИ с различными длинами волн, остальные параметры пучка, ондулятора и симуляции оставались неизменными. Резонансная длина волны равна $\lambda_{res} = 508,4$ нм.

2.1.6 Сравнение моделирования программ численного моделирования генерации гармоник ЛСЭ

Проведен сравнительный анализ авторской программы с программой GENESIS с параметрами LCLS в эксперименте в режиме мягкого рентгеновского излучения. Для наглядности проведено сравнение гармоник в режиме усилителя. Как видно на Рис. 2.9, основные гармоники излучения, полученные в программе GENESIS и авторской программе, почти одинаковы; вторые гармоники отличаются на порядок. Численная программа автора оценивает мощность второй гармоники в $P_2 = 2,9$ МВт, оценка GENESIS составляет 0,55 МВт, для первой гармоники P_1 приблизительно 8 ГВт. Автор также сравнил результаты в режиме ССИ, величины и соотношения мощности аналогичны Рис. 2.9.

Ниже приведен график поведения мощности основной гармоники в программах численного моделирования PERSEO [71], GENESIS и авторской. Во всех про-

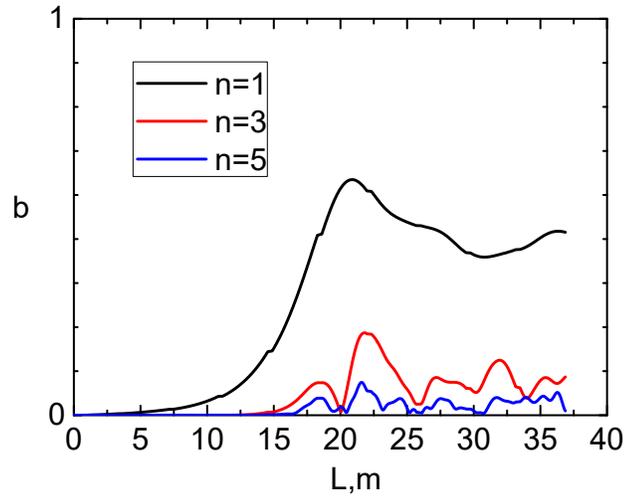
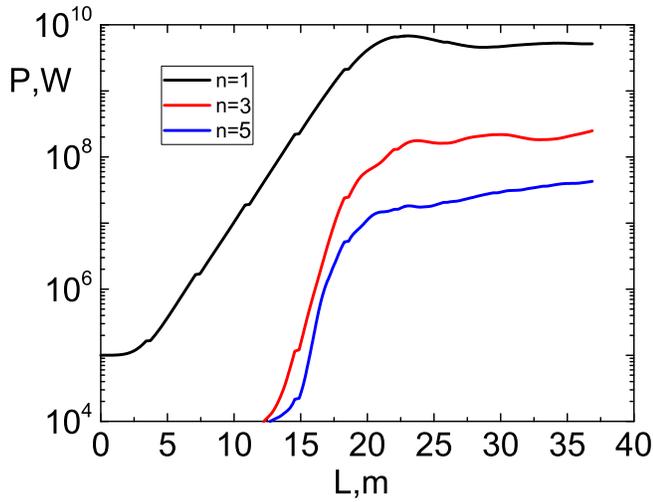


Рисунок 2.7: Эволюция мощности гармоник (слева) и коэффициента банчинга (справа) в эксперименте LCLS $\lambda_1 = 1,5$ нм в режиме усилителя: $n = 1$ – сплошная черная линия, $n = 3$ – красная линия, $n = 5$ – синяя. Результаты получены авторской программой.

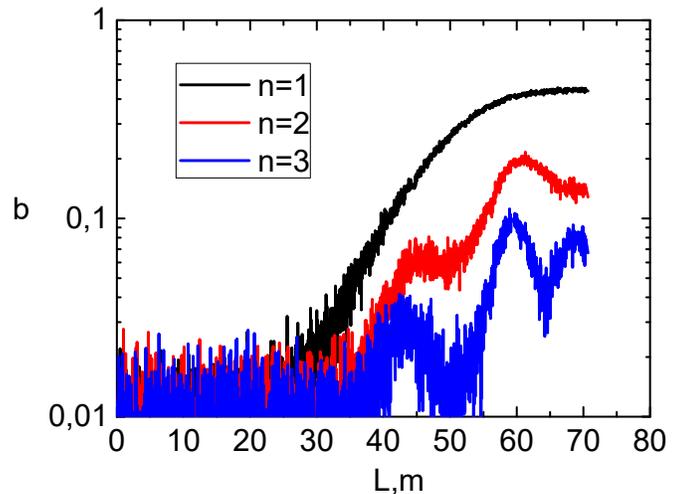
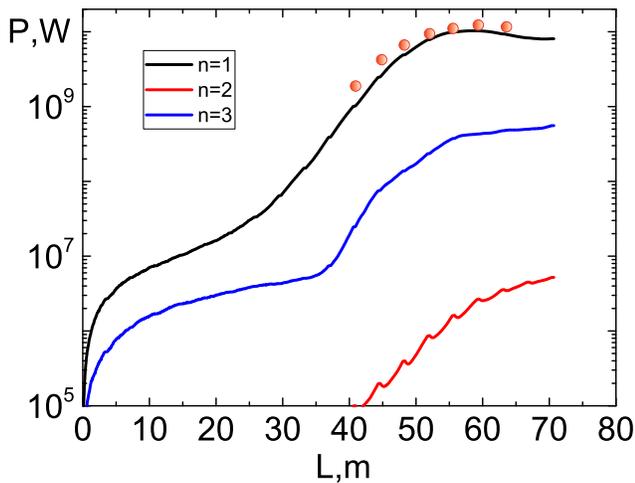


Рисунок 2.8: Эволюция мощности гармоник (слева) и коэффициента банчинга (справа) в эксперименте LCLS с $\lambda_1 = 0,15$ нм, $\gamma = 26600$, $\sigma_\gamma = 10^{-4}$ в режиме ССИ (SASE): $n = 1$ – черная линия, $n = 3$ – красная линия, $n = 5$ – синяя линия. Результаты получены авторской программой.

граммах рассматривался стационарный режим усилителя без начальных шумов. Как видно мощность насыщения в трех программах приблизительно одинаковая. Развитие основной гармоники практически совпадает в авторской программе и GENESIS. Длина насыщения в программе PERSEO заметно меньше, чем в программах GENESIS

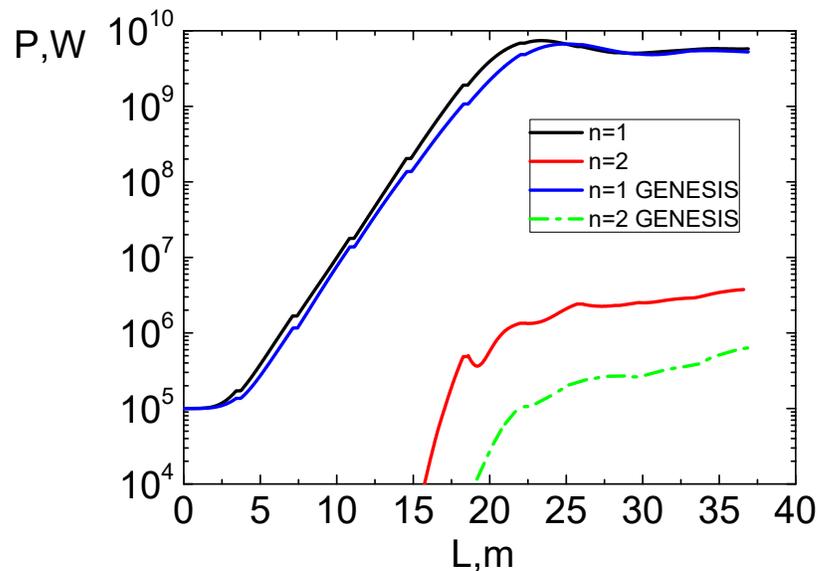


Рисунок 2.9: Сравнение численной программы GENESIS и программы автора для усилителя ЛСЭ с экспериментальными параметрами LCLS в режиме мягкого рентгеновского излучения. Гармоники в авторской программе (сплошные линии): $n = 1$ – черная линия; $n = 2$ – красная линия. Гармоники в GENESIS (пунктирные линии): $n = 1$ – синяя линия; $n = 2$ – зеленая линия.

и автора, так как PERSEO является одномерной программой, не учитывающей дифракцию пучка фотонов, хотя уширение пучков учитывается через аналитические коэффициенты. Также необходимо отметить сильную осцилляцию мощности излучения в программе PERSEO после насыщения, которая выражена слабее в других программах. Так как программа PERSEO одномерная, она не может учитывать бета-тронные колебания частиц в ондуляторе и влияние сильной фокусировки на генерацию четных гармоник.

2.1.7 Анализ сходимости

Благодаря лежащим в основе модели самосогласованным уравнениям поля полная энергия поля излучения и электронного пучка сохраняется. Это должно быть воспроизведено кодом моделирования, но могут возникать небольшие численные ошибки, которые могут суммироваться и изменять результаты. Функция ошибки задается

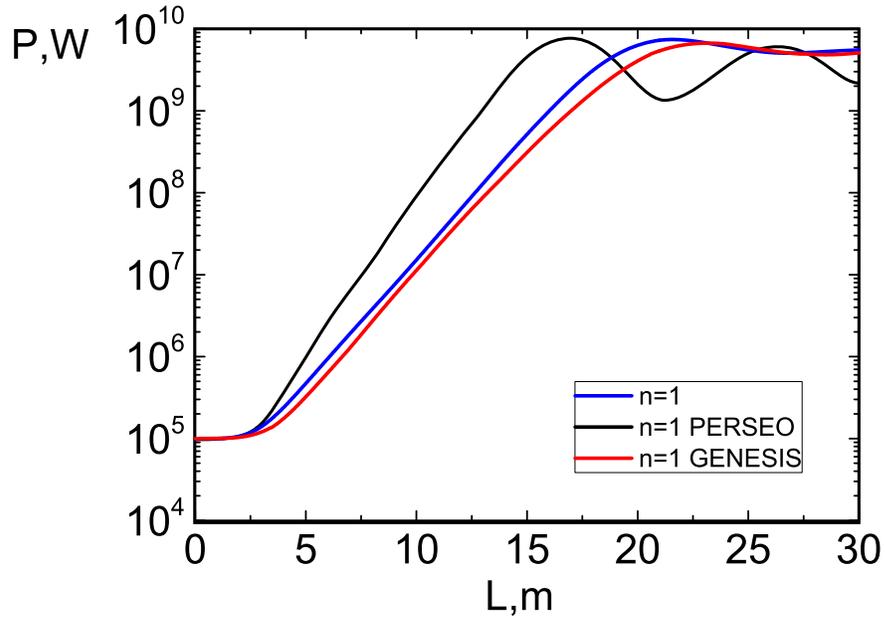


Рисунок 2.10: Сравнение развития мощности первой гармоники по оси лазера в программе PERSEO (черная линия), авторской программе (синяя) и GENESIS (красная) в режиме усилителя без начального шумового излучения.

$$Error = \frac{[P_{rad}(z) + P_{beam}(z)] - [P_{rad}(0) + P_{beam}(0)]}{P_{rad}(z)}, \quad (2.29)$$

где P_{rad} – мощность излучения, $P_{beam} = \langle \gamma \rangle I m c^2 / e$ – мощность пучка электронов, $\langle \gamma \rangle$ – средний лоренц-фактор электронов и I – ток пучка электронов. Как видно из рисунка 2.11, в начале лазерной установки относительная ошибка может достигать больших значений из-за модельных ограничений, но после развития мощности излучения относительная ошибка уменьшается и к концу насыщения становится меньше 1%. Это значит, что сходимость между энергией излучения и энергией пучка электронов, которые связаны только через взаимодействие, хорошо согласуется.

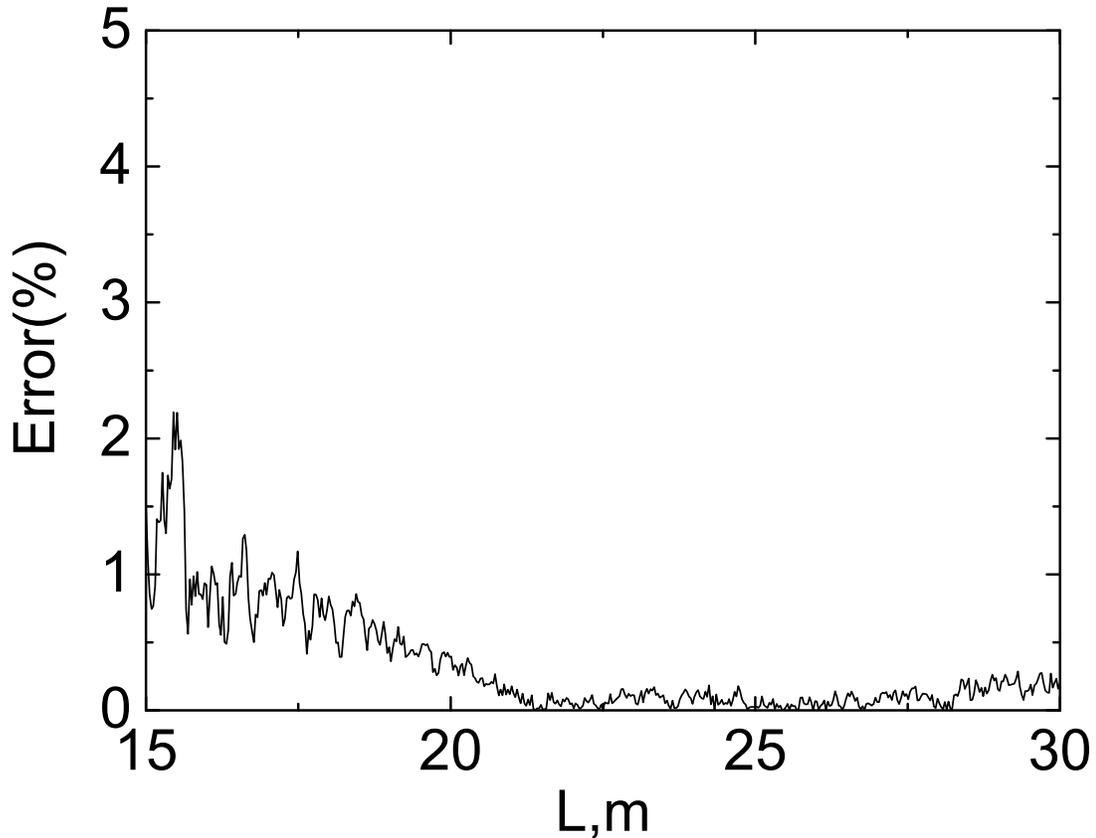


Рисунок 2.11: Относительная ошибка в сохранении энергии между излучением и пучком электронов в зависимости от длины активной части ЛСЭ на примере эксперимента LCLS в мягком рентгене, см. Рис. 2.10. Шаг интегрирования $\Delta z = \lambda_u$.

2.2 Вывод к главе 2

Рентгеновский лазер на свободных электронах является уникальным источником рентгеновского излучения, который используют при изучении структур и динамики атомных и молекулярных систем в фемтосекундных временных масштабах. Он получил широкое распространение в областях физики, химии и биологии благодаря своей большой интенсивности и сверхбыстрой временной структуре.

С конца 1990-х годов увеличивалось число программ численного моделирования излучения ЛСЭ. Первые программы имели множество упрощений и простые модели, так как вычислительные мощности были ограничены. В настоящее время вычислительные мощности персональных компьютеров позволяют проводить исследование различных конфигураций ЛСЭ с учетом высших гармоник поля излу-

чения.

В этой главе 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. Проведено сравнение работы авторской программы с программами GENESIS и PERSEO.

Глава 3

Бетатронные колебания в различных конфигурациях магнитных полей ондулятора

Синусоидальное поле ондулятора не удовлетворяет уравнениям Максвелла вне оси ондулятора. Для того, чтобы поле удовлетворяло им, необходимы дополнительные множители и слагаемые, которые вызывают бетатронные колебания заряженных частиц относительно оси равновесия (слабая фокусировка) — $x = 0, y = 0$. Поперечное движение электронов может также задаваться сильной фокусировкой (квадрупольными секциями и др.). Бетатронные колебания играют важную роль в фокусировке пучка. Вместе с тем они могут изменять спектр излучения. Автором получены аналитические выражения для различных конфигураций магнитных полей ондулятора с учетом бетатронных колебаний. Расчет коэффициентов для плоского ондулятора с третьей гармоникой магнитного поля уже был рассмотрен в [72].

3.1 Общий случай бетатронных колебаний в плоском одночастотном ондуляторе

Рассмотрим периодическое поле в зазоре плоского одночастотного ондулятора

$$\vec{H} = H_0(0, \sin(k_u z) \operatorname{ch}(k_u y), \cos(k_u z) \operatorname{sh}(k_u y)) . \quad (3.1)$$

Для такого поля уравнение бетатронных колебаний в приближении малых отклонений ($k_u y \ll 1$) имеет вид

$$y'' + \frac{K^2 k_u^2}{\gamma^2} \cos^2(k_u z) y = 0, \quad (3.2)$$

где $' - \frac{d}{dz}$ — производная по координате z .

Такого рода уравнения решаются численными методами, например, Рунге–Кутта. Используем усредненные бетатронные колебания, т.е. заменим уравнение (3.2) на

$$y'' + \frac{K^2 k_u^2}{2\gamma^2} y = 0. \quad (3.3)$$

Полезно рассмотреть различия в траекториях движения электронов между (3.2)

и (3.3) при различных лоренц-факторах, для конкретизации возьмем реалистичные параметры ондулятора $K = 3,5$, $\lambda_u = 3$. Для решения уравнения (3.2) используется метод Рунге–Кутты 4-го порядка. Уравнение (3.3) имеет очевидное аналитическое решение в виде синусов и косинусов.

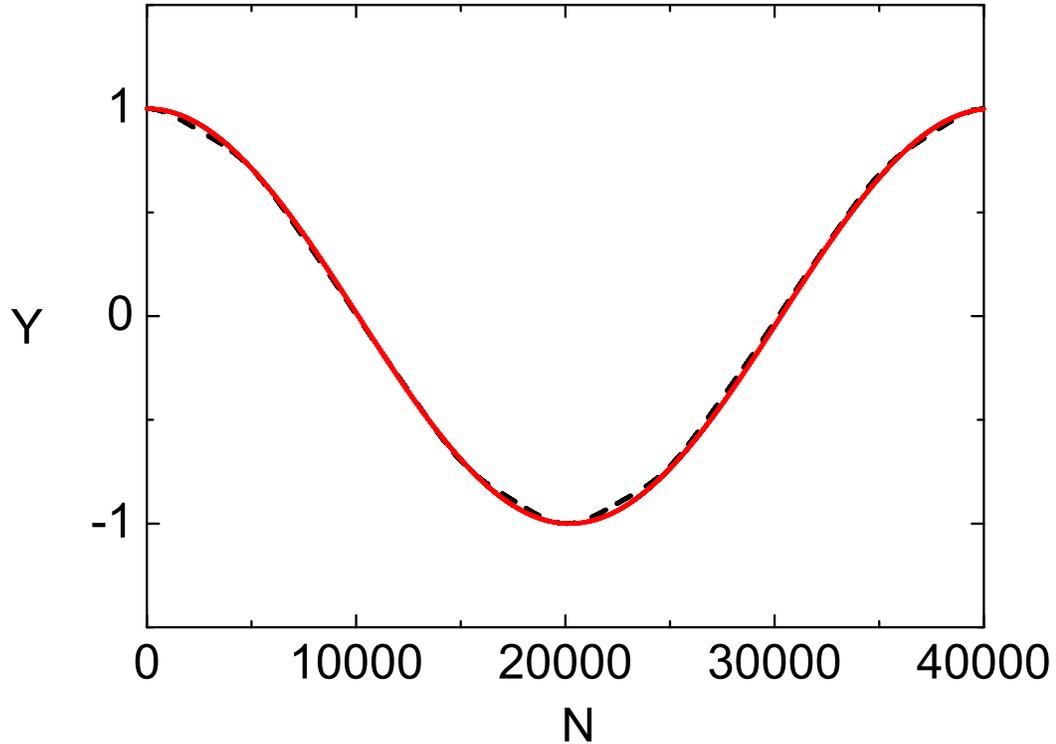


Рисунок 3.1: Численное и аппроксимированное решение уравнений бетатронных колебаний для $\gamma = 10$, шаг $10^{-5} \lambda_u$: красная линия – (3.3), черная линия – (3.2), $K = 3,5$, $\lambda_u = 3$ см.

Как видно из рисунка 3.1 траектории, которые задаются уравнениями (3.2) и (3.3), близки друг к другу. Для случая $\gamma \gg 1$ коэффициент ряда Фурье при $\cos(\Omega_{\beta}t)$ приблизительно равен 1. Это означает, что аппроксимация усредненных бетатронных колебаний достаточно точно описывает движение электронов при $\gamma \gg 1$, что верно для всех ЛСЭ. Математически это связано с тем, что с увеличением лоренц-фактора косинус становится быстро осциллирующей функцией и может быть заменен средним значением.

Выпишем законы движения электрона в поле данного ондулятора

$$x(t) = -\frac{Kc}{\gamma\Omega_u} \sin \Omega_u t + \hat{\beta}_x ct, \quad (3.4)$$

$$y(t) = y(0) \cos \Omega_\beta t + \frac{\dot{y}(0)}{\Omega_\beta} \sin \Omega_\beta t, \quad (3.5)$$

где введены обозначения

$$\Omega_u = ck_u \bar{\beta}_z, \quad (3.6)$$

$$\bar{\beta}_z = 1 - \frac{1}{2\gamma^2} \left(1 + \frac{K^2}{2} \right) - \frac{\hat{\beta}_x^2}{2} - \frac{y^2(0)}{4c^2} \Omega_\beta^2 - \frac{\dot{y}^2(0)}{4c^2}, \quad (3.7)$$

$$\Omega_\beta = \frac{K\Omega_u}{\sqrt{2}\gamma}, \quad (3.8)$$

$\hat{\beta}_x$ – скорость по x .

Энергия, излучаемая в единичном интервале частот в единицу телесного угла, имеет вид (в системе СГС) [73]

$$\frac{d^2 I}{d\omega d\Omega} = \frac{e^2 \omega^2}{4\pi^2 c} \left| \int_0^\infty [\vec{n} \times (\vec{n} \times \vec{\beta})] \exp \left[i\omega \left(t - \frac{\vec{n}\vec{r}}{c} \right) \right] dt \right|^2, \quad (3.9)$$

где e – заряд электрона, c – скорость света в вакууме, ω – частота излучения, \vec{r} – радиус-вектор электрона, β – приведенная скорость электрона и \vec{n} – единичный вектор наблюдения, который мы можем записать как

$$\vec{n} = (\theta \cos \varphi, \theta \sin \varphi, 1 - \frac{1}{2}\theta^2), \quad (3.10)$$

где θ – угол наблюдения, φ – азимутальный угол.

Резонансные частоты даются следующим выражением

$$\omega_{res} = \frac{2\gamma^2(n\Omega_u + m\Omega_\beta)}{1 + \frac{K^2}{2} + (\gamma\theta)^2 - 2\gamma^2\theta\hat{\beta}_x \cos \varphi + (\gamma\hat{\beta}_x)^2 + \frac{y^2(0)\gamma^2}{2c^2}\Omega_\beta^2 + \frac{\dot{y}^2(0)\gamma^2}{2c^2}}. \quad (3.11)$$

Для удобства введены функции

$$J_h(\omega, \xi_{1,2}, \tilde{\xi}_1) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha \exp[i(h\alpha + \xi_1 \sin \alpha + \xi_2 \sin 2\alpha + \tilde{\xi}_1 \sin \alpha)], \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} \tilde{J}_m(\omega, \xi_{3,4,5,6,7}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\beta \exp[& i(m\beta + \xi_3 \cos \beta + \xi_4 \sin \beta + \\ & + (\xi_5 + \xi_6) \sin 2\beta + \xi_7 \cos 2\beta)], \end{aligned} \quad (3.13)$$

со следующими аргументами

$$\begin{aligned}\xi_1 &= \frac{K\omega}{\Omega_u\gamma}\theta \cos \varphi, \quad \xi_2 = \frac{K^2\omega}{8\gamma^2\Omega_u}, \quad \tilde{\xi}_1 = -\frac{K\hat{\beta}_x}{\gamma\Omega_u}\omega, \\ \xi_3 &= -\theta\omega \sin \varphi \frac{y(0)}{c}, \quad \xi_4 = -\theta\omega \sin \varphi \frac{\dot{y}(0)}{c\Omega_\beta}, \quad \xi_5 = -\frac{y^2(0)\omega}{8c^2}\Omega_\beta, \\ \xi_6 &= \frac{\dot{y}^2(0)\omega}{8\Omega_\beta c^2}, \quad \xi_7 = \frac{\dot{y}(0)y(0)\omega}{4c^2}.\end{aligned}\quad (3.14)$$

В нашем случае резонансные частоты расщепляются вследствие бетатронных колебаний, n – номер гармоники излучения, m – номер гармоники бетатронных колебаний. Бетатронные колебания в то же время дают вклад в генерацию четных гармоник $n = 2, 4, \dots$, причем расщепление присуще им изначально. Теоретический анализ поляризации излучения второй гармоники в XFEL представлен в [74].

Можно легко показать, что спектральная интенсивность может быть выражена как

$$\frac{d^2 I}{d\omega d\Omega} = \frac{e^2 \omega^2 T^2}{4\pi^2 c} \left[\text{sinc} \left(\frac{\nu}{2} \right) \right]^2 \sum_{n,m=-\infty}^{\infty} [|T_{n,m;x}|^2 + |T_{n,m;y}|^2], \quad (3.15)$$

$$\nu = 2\pi N \left(\frac{\omega}{\omega_{res}(n,m)} - 1 \right), \quad T = \frac{N\lambda_u}{c}, \quad (3.16)$$

$$T_{n,m;x} = J_n \times \tilde{J}_m \theta \cos \varphi + \frac{K}{2\gamma} (J_{n+1} + J_{n-1}) \times \tilde{J}_m - J_n \times \tilde{J}_m \hat{\beta}_x; \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned}T_{n,m;y} &= J_n \times \tilde{J}_m \theta \sin \varphi + \frac{iy(0)}{2c} \Omega_\beta (\tilde{J}_{m-1} - \tilde{J}_{m+1}) \times J_n - \\ &\quad - \frac{\dot{y}(0)}{2c} (\tilde{J}_{m-1} + \tilde{J}_{m+1}) \times J_n.\end{aligned}\quad (3.18)$$

Основной вклад в генерацию четных гармоник дает слагаемое $\frac{K}{2\gamma}(J_{n+1} + J_{n-1}) \times \tilde{J}_m$. Аналогичный аргумент в другом формализме с расширением рядов был получен в [75], коэффициенты связи для второй гармоники в [75] соответствует слагаемому $\frac{K}{2\gamma}(J_{n+1} + J_{n-1}) \times \tilde{J}_m$. Однако слагаемое $J_n \times \tilde{J}_m \hat{\beta}_x$ также вносит свой вклад. Для эксперимента LCLS этот вклад увеличивает коэффициент примерно на 30 %, а квадрат этого коэффициента – на 70%. Для нечетных гармоник членом $J_n \times \tilde{J}_m \hat{\beta}_x$ можно

пренебречь, но для четных гармоник мы не можем этого сделать. Вклад в генерацию четных гармоник, вызванных слабой фокусировкой, на порядки меньше, чем вклад от сильной фокусировки. Вторая гармоника в плоских одночастотных ондуляторах является результатом смещения вигглеровских колебаний с бетатронными, вызванных сильной фокусировкой. Ниже приведены графики соотношения $(f_n/\tilde{f}_n)^2$ коэффициентов связи в зависимости от параметров ондулятора K для второй и четвертой гармоник

$$f_n = (J_{n+1}|_{\theta=0} + J_{n-1}|_{\theta=0}) - \frac{2\gamma\hat{\beta}_x}{K} J_n|_{\theta=0}, \quad (3.19)$$

$$\tilde{f}_n = (J_{n+1}|_{\theta=0} + J_{n-1}|_{\theta=0}). \quad (3.20)$$

В частности, коэффициенты связи для четных гармоник из [75] совпадают с \tilde{f} :

$$J J_n = (-1)^{\frac{n-2}{2}} \frac{\chi}{2} [J_{\frac{n-2}{2}}(\xi_2) - J_{\frac{n+2}{2}}(\xi_2)], \quad (3.21)$$

где $J_i(x)$ – функция Бесселя, $\chi = n\omega_1\hat{\beta}_x K / \gamma\Omega_u$, $\chi \ll 1$.

Как мы видим, с увеличением значения K квадрат отношения коэффициентов увеличивается, и для второй гармоники квадраты коэффициентов $(f_n/\tilde{f}_n)^2$ отличаются больше, чем для четвертой.

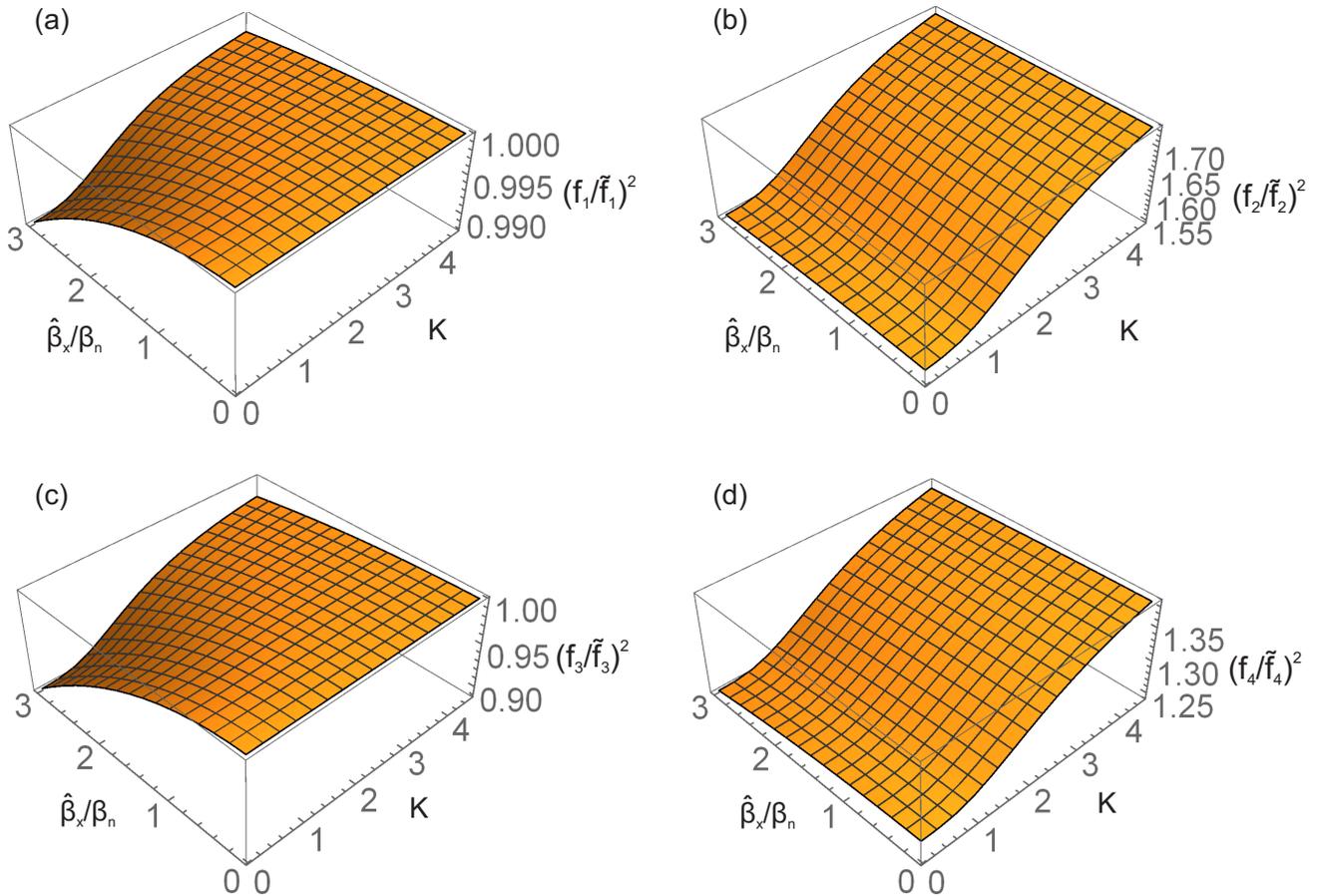


Рисунок 3.2: Отношения коэффициентов связи для первой (а), второй (б), третьей (с) и четвертой (д) гармоник как функция K и скорости $\hat{\beta}_x$ с параметрами эксперимента LCLS в мягком рентгене; скорость β_x нормирована на $\beta_n = \sqrt{\varepsilon_x/\gamma\beta_{Twiss}}$. Коэффициенты связи соответствующие статье [75] обозначены как \tilde{f} .

3.2 Моделирование экспериментов

Вторая гармоника излучения ЛСЭ была зарегистрирована в нескольких экспериментах, например, APS (Advanced Photon Source) [76], LCLS (Источник когерентного света Linac) в режиме мягкого рентгеновского излучения [29]. Оценка генерации второй гармоники была выполнена в модификации численного кода GENESIS 1.3 [75], но коэффициенты связи GENESIS имеют форму, отличную от приведенных выше формул, и не учитывают Y-поляризацию.

Автором диссертации была разработана численная программа для моделирования ЛСЭ с учетом второй гармоники на современной версии языка программирования C++ с использованием параллельных вычислений. Трехмерный численный

код имеет схожую математическую модель, которая также используется в таких кодах, как GENESIS [58] и GINGER [60]. В случае четных гармоник коэффициент связи между электронами и излучением различен для каждой частицы. Он зависит от положения и импульса каждого электрона, поэтому разработанный численный код присваивает каждой частице свой собственный коэффициент связи.

Для Y-поляризованного излучения наблюдается расщепление второй гармоники на бетатронной частоте. На Рис. 3.3 показано расщепление Y-поляризованной второй гармоники на субгармоники $m = 0, \pm 1, \dots$. Для X-поляризованного излучения первой гармоники также происходит расщепление, см. Рис. 3.4. Однако мощность излучения гармоник пропорциональна квадрату коэффициента связи $|T_n|^2$, кроме того, электронный пучок имеет гауссово распределение, и, следовательно, вклад в основном дают электроны в центре пучка.

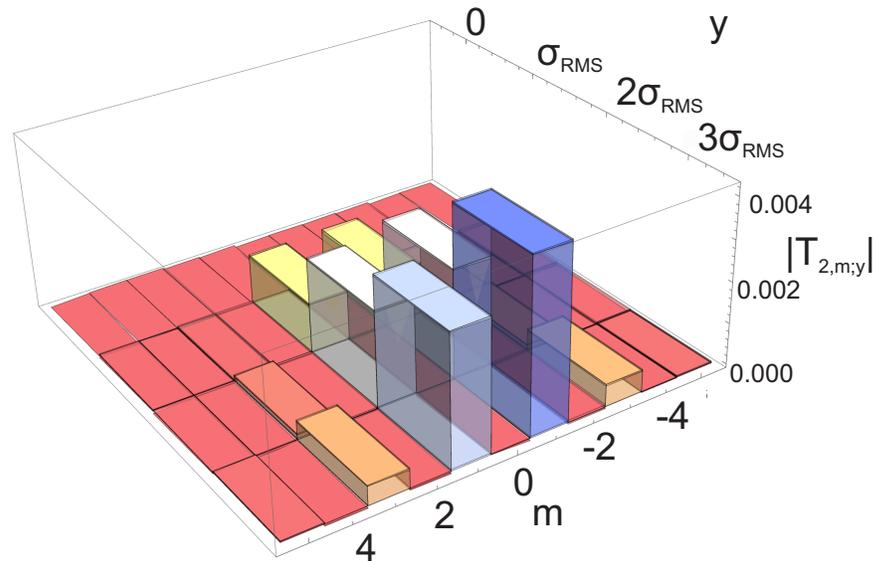


Рисунок 3.3: Расщепление второй гармоники (Y-поляризация) в эксперименте LCLS в режиме мягкого рентгеновского излучения в зависимости от расстояния y от оси лазера в единицах среднеквадратичного размера пучка электронов σ_{RMS} .

3.2.1 Моделирование эксперимента LCLS в режиме мягкого рентгена

Вторая гармоника была экспериментально обнаружена во многих экспериментах, например, [29, 30, 76], а также с усилителем ЛСЭ [77]. Так как вторая гармоника регистрируется в экспериментах, необходимо оценить ее мощность и вклад в

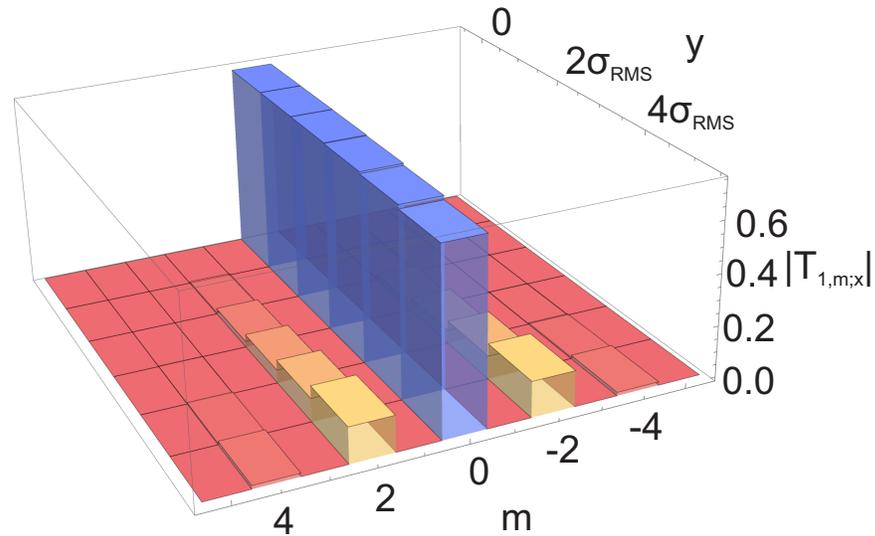


Рисунок 3.4: Расщепление первой гармоники (X-поляризация) в эксперименте LCLS в режиме мягкого рентгеновского излучения в зависимости от расстояния от оси лазера в единицах среднеквадратичного размера пучка электронов σ_{RMS} .

генерацию излучения перед проведением экспериментов. Более того, как видно из аналитических выражений, излучение второй гармоники имеет незначительную Y-поляризацию.

Вторая и третья гармоники были задокументированы в эксперименте [29] с рентгеновским ЛСЭ LCLS. Также получена двойная структура интенсивности второй гармоники. Длина волны первой гармоники составляет 1,5 нм.

Для оценки мощности гармоник были внедрены полученные аналитические выражения для коэффициентов связи между электронами и излучением. Y-поляризация второй гармоники вызвана слабой фокусировкой в ондуляторе, и для эксперимента оценили ее в 3,3% от мощности второй гармоники. Результаты численного моделирования дают 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 [29] упоминалось, что 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.

Эволюция мощности для четвертой гармоники не представлена, так как ее мощность на порядок меньше мощности второй гармоники. Кроме того, качество пучка в этом случае недостаточно для выполнения дифракционного предела, что приводит к ослаблению четвертой гармоники. На Рис. 3.5 справа представлена эволюция коэффициента банчинга четвертой гармоники. Оценим соотношение мощностей P_4/P_2 . Соответствующие коэффициенты банчинга составляют $b_2 = 0,3$ и $b_4 = 0,11$:

$$\frac{P_4}{P_2} = \left(\frac{f_4 b_4}{f_2 b_2} \right)^2 < 0,14. \quad (3.22)$$

На Рис. 3.5 показана эволюция мощности излучения гармоник и банчинга электронов в режиме ССИ. Первая гармоника $n = 1$ представлена черной линией, $n = 2$ – красной линией, $n = 3$ – синей линией. Высшие нечетные гармоники подчиняются принципам нелинейного роста [78]. Вторая гармоника также имеет нелинейный рост, но ее генерация также зависит от динамики и положения каждого электрона в пучке.

Пространственное распределение интенсивности первой гармоники представлено на Рис. 3.6. Пространственное распределение интенсивности второй гармоники показано ниже на Рис. 3.7. Распределение имеет двойную структуру, но поляризации X и Y имеют разную ориентацию. На левом рисунке 3.7 показана X-поляризация, которая дает преобладающий вклад. Мы предполагаем, что электроны в пучке имеют распределение Гаусса во всех симуляциях.

Параметр ондулятора	Значение
K	3,5
Период ондулятора λ_u	3 см
Число периодов в секции N	114
Параметры пучка	Значение
Лоренц-фактор электронов γ	8400
Разброс по энергии σ_γ	0,03%
Эмиттанс ε_x	0,4 мкм·рад
Эмиттанс ε_y	0,4 мкм·рад
$\langle\beta_x\rangle$	10 м
$\langle\beta_y\rangle$	10 м
Параметр фокусировки g	40 Т/м
Ток I_0	1000 А

Таблица 3.1: Параметры моделирования в эксперименте LCLS в режиме мягкого рентгеновского излучения, используемые в численной программе излучения ЛСЭ. Длина волны первой гармоники $\lambda_1 = 1,5$ нм.

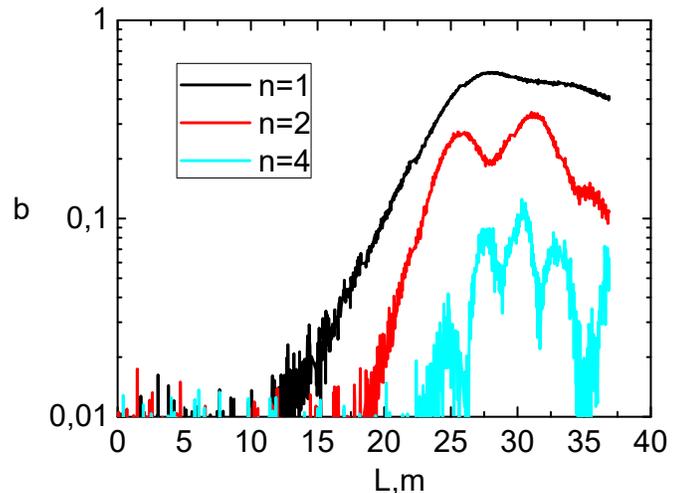
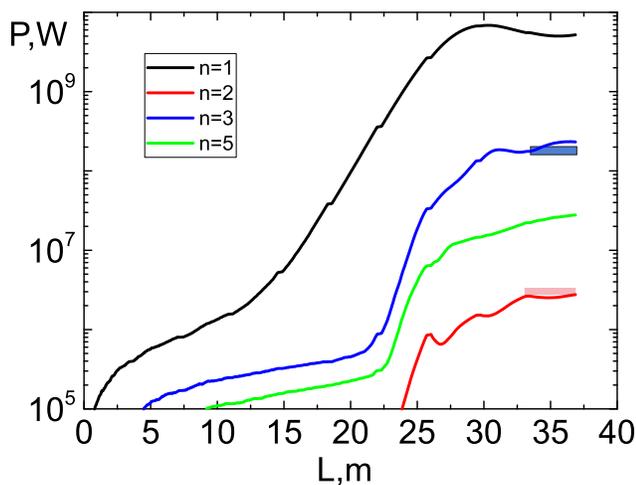


Рисунок 3.5: Моделирование эксперимента LCLS в режиме мягкого рентгеновского излучения с использованием авторской программы. Эволюция мощности гармоники показана слева, а коэффициент банчинга электронов показан справа. Гармоники: $n = 1$ – черная линия, $n = 2$ – красная, $n = 3$ – синяя, $n = 4$ – голубая. Цветной областью выделены экспериментальные значения.

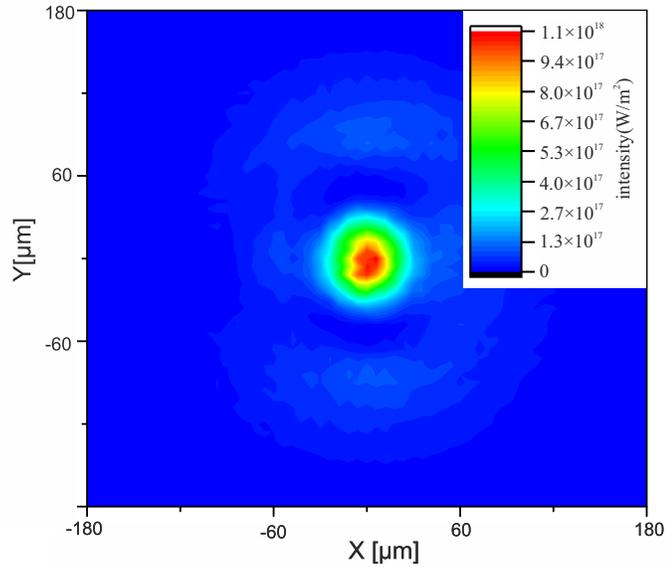


Рисунок 3.6: Пространственное распределение интенсивности излучения первой гармоники на выходе из LCLS в эксперименте с мягким рентгеновским излучением.

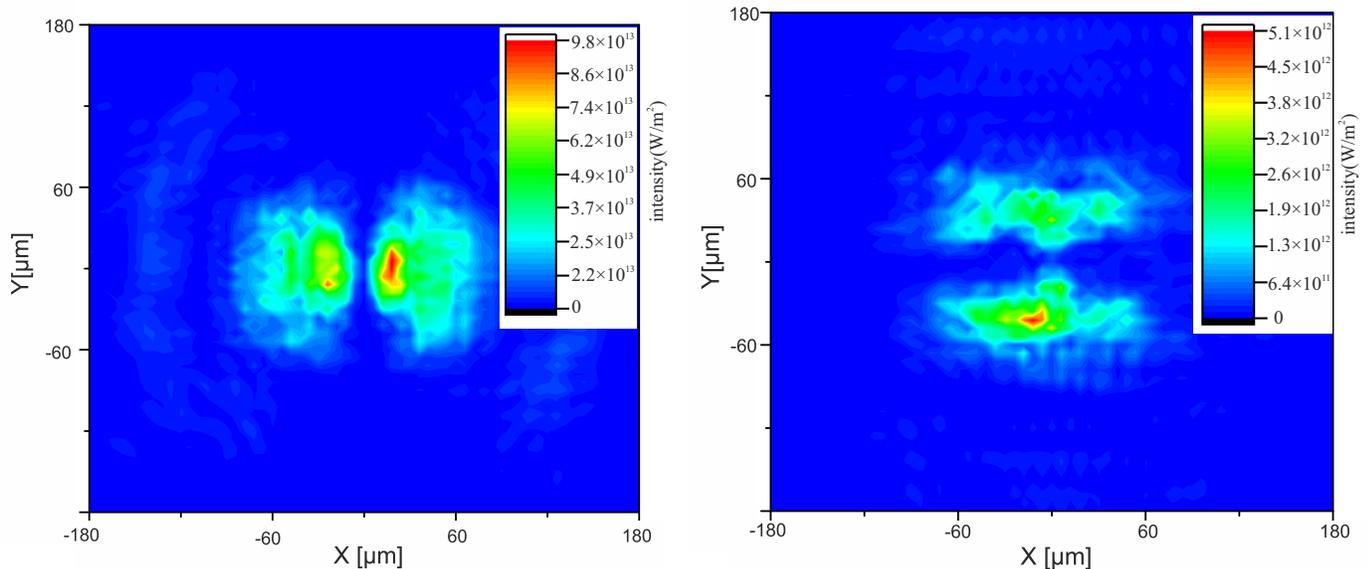


Рисунок 3.7: Пространственное распределение интенсивности X- и Y-поляризованного (слева и справа соответственно) излучения второй гармоники на выходе из LCLS в эксперименте с мягким рентгеновским излучением.

3.3 Генерация второй гармоники в ЛСЭ со спиральным ондулятором

Спиральные ондуляторы используются для создания мощного когерентного излучения. Они имеют некоторые преимущества по сравнению с плоскими ондуляторами, одним из преимуществ является отсутствие излучения высших гармоник, точнее говоря, высшие гармоники не отсутствуют полностью, как мы увидим ниже.

Рассмотрим магнитное поле спирального ондулятора

$$\vec{H} = H_0(\sin(k_u z), \cos(k_u z), 0). \quad (3.23)$$

Как и в случае с плоскими ондуляторами мы получили коэффициенты связи между излучением и электронным пучком:

$$f_{n;x} = i(J_{n+1} - J_{n-1}) - \frac{2\gamma}{K} J_n \hat{\beta}_x, \quad (3.24)$$

$$f_{n;y} = (J_{n+1} + J_{n-1}) + \frac{2\gamma}{K} J_n \hat{\beta}_y, \quad (3.25)$$

с резонансными частотами

$$\omega_{res} = \frac{2\gamma^2 n \Omega_u}{1 + K^2 + (\gamma \hat{\beta}_x)^2 + (\gamma \hat{\beta}_y)^2}. \quad (3.26)$$

Для удобства вводятся следующие функции

$$J_h(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha \exp[i(h\alpha + \xi_x \cos \alpha + \xi_y \sin \alpha)], \quad (3.27)$$

с аргументами

$$\xi_x = -\frac{K \hat{\beta}_x}{\gamma \Omega_u} \omega, \quad \xi_y = \frac{K \hat{\beta}_y}{\gamma \Omega_u} \omega. \quad (3.28)$$

Основной вклад в излучение вносит первая гармоника поля излучения. Вторая гармоника является следующей по мощности, мощность третьей гармоники на порядок меньше, чем второй. Чтобы упростить компьютерные вычисления, можно аппроксимировать эти формулы. Для основной гармоники мы имеем $f_{1;x} \approx 1$ $f_{1;y} \approx 1$ при условии $\xi_{x,y} \ll 1$, что согласуется с экспериментальными пучками. Для второй

гармоники мы получаем

$$f_{2;x} \approx \frac{\xi_x}{2} + i\frac{\xi_y}{2}, \quad (3.29)$$

$$f_{2;y} \approx i\frac{\xi_x}{2} - \frac{\xi_y}{2}. \quad (3.30)$$

Приведем пример моделирования численной программы с пучком электронов (одной из версий пучка) и геометрией ондуляторных секций установки Европейского рентгеновского лазера на свободных электронах (EuXFEL) [79].

Смоделировано излучение в спиральном ондуляторе с параметрами пучка с представленными ниже в таблице параметрами. Мощность первой гармоники составляет около 100 ГВт, см. Рис. 3.8, длина волны излучения $\lambda = 2,8 \text{ \AA}$, мощность второй гармоники в зависимости от скорости бетатронных колебаний варьируется в пределах 5 – 20 МВт. Пространственное распределение интенсивности первой и второй гармоник представлены на Рис. 3.9 и 3.10. Пространственное распределение интенсивности первой гармоники имеет несимметричную круговую форму, вторая гармоника не имеет замкнутую кольцевидную форму, как можно было бы предположить. Более того, пространственное распределение интенсивности второй гармоники имеет «вихревое» движение [80], так как между секциями ондулятора стоят фокусирующие и дефокусирующие секции (FODO), которые изменяют направление скорости бетатронных колебаний, тем самым меняя знак коэффициентов связи второй гармоники на противоположные.

Пространственное распределение интенсивности второй гармоники необходимо учитывать, когда проводят эксперименты с генерацией второй гармоники в кристаллах [79]. Можно разрабатывать схемы лазера с подавлением второй гармоники.

Кроме того в ондуляторном поле могут присутствовать высшие гармоники магнитного поля, излучение в ЛСЭ с такими ондуляторами были рассмотрены автором в [18,81], но не вошли в диссертационную работу. Учет вклада отклонения электронного пучка от оси лазера в генерацию четных гармоник без учета вклада сильной фокусировки был проведен в [82].

Параметр ондулятора	Значение
K	1,7
Период λ_u	4 см
Число периодов в секции N	125
Параметр пучка	Значение
Лоренц-фактор электронов γ	16634
Энергетический разброс σ_γ	0,03%
Эмиттанс ε_x	0,39 мкм·рад
Эмиттанс ε_y	0,39 мкм·рад
Ток I_0	5000 А
Параметр Твисса $\langle\beta_x\rangle$	7,5 м
Параметр Твисса $\langle\beta_y\rangle$	7,5 м

Таблица 3.2: Параметры симуляции с пучком EuXFEL со спиральным ондулятором. Длина волны излучения первой гармоники $\lambda = 2,8 \text{ \AA}$.

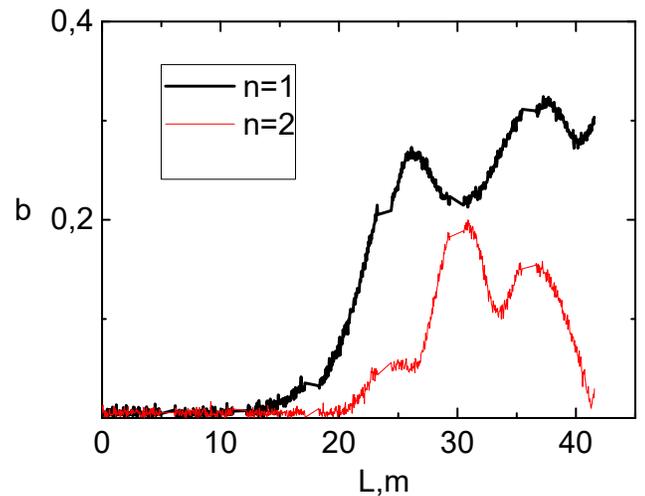
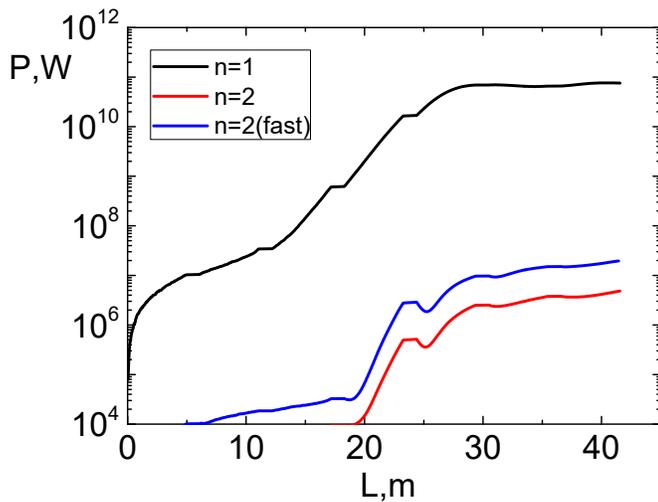


Рисунок 3.8: Моделирование эксперимента с пучком EuXFEL. Эволюция мощности гармоник показана слева, а коэффициент банчинга электронов показан справа. Гармоники: $n = 1$ – черная линия, $n = 2$ – красная, $n = 2$ с удвоенной скоростью бетатронных колебаний – синяя.

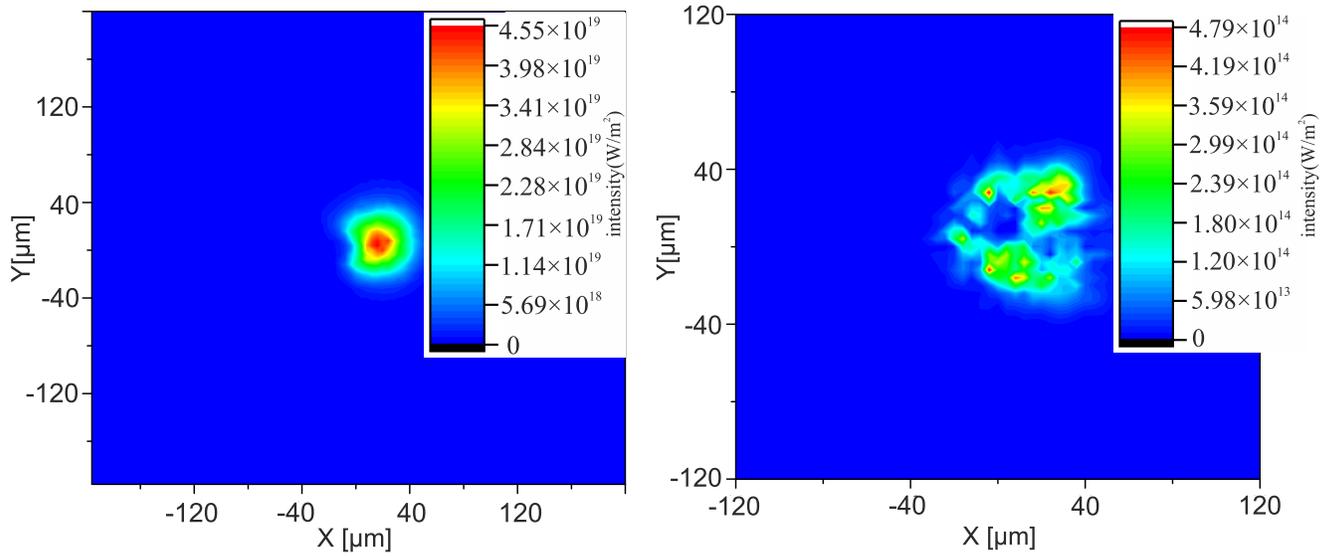


Рисунок 3.9: Пространственное распределение интенсивности излучения после пятой секции первой гармоники (слева) и второй гармоники (справа).

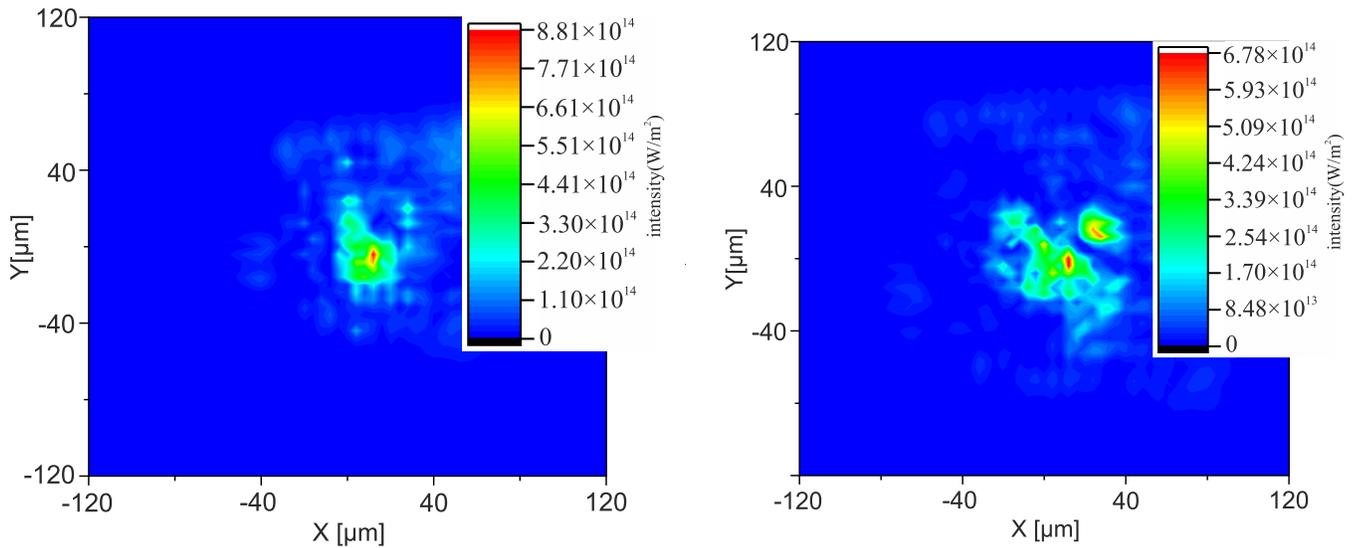


Рисунок 3.10: Пространственное распределение интенсивности излучения второй гармоники после шестой (слева) и седьмой (справа) секций.

3.4 Выводы к главе 3

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

Смоделирован эксперимент LCLS в мягком рентгене [29], где была обнаружена вторая гармоника излучения. Результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментом. Для моделирования второй гармоники были выведены новые коэффициенты связи, которые отличаются от коэффициентов, используемых в программе GENESIS [59]. 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.

Для моделирования второй гармоники в спиральном ондуляторе были выведены упрощенные коэффициенты связи для второй гармоники. Это сделано для того, чтобы не перегружать оперативную память компьютера. Например, для подбора точных коэффициентов необходимо 2 матрицы 10000×10000 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 численного кода, согласуются с экспериментами. Представленное исследование позволяет проводить более точные текущие и планируемые эксперименты на рентгеновских ЛСЭ (см., например, SHINE XFEL [83, 84]) по изучению свойств новых материалов, наноструктур, а также генерации второй, третьей и четвертой гармоник в кристаллах [85].

Глава 4

Тейперинг

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 ρ ; 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 (обычно уменьшают параметр K , но существует и обратный тейперинг [86]), тем самым поддерживается состояние резонанса, поскольку электроны теряют энергию при излучении. Возможность применения тейперинга была продемонстрирована экспериментально [87, 88]. Тейперинг позволяет увеличить мощность рентгеновского ЛСЭ до нескольких тераватт. Мотивация для достижения тераваттных импульсов в жестком рентгене исходит от сообщества биоимиджинга, см., например, [89].

Существует несколько способов оптимизации профиля тейперинга, например, метод многомерного сканирования [90], алгоритм самопроектирования GINGER [91], который основан на модели Кролла–Мортон–Розенблюта (КМР) [92]. Модификация метода КМР была описана в [93, 94], различные законы тейперинга были изучены в [95]. Множество программ, включая GENESIS [59], FAST [61] и др., позволяют предварительно задать $K(z)$.

В работе [50] были изучены методы оптимизации профиля тейперинга в процессе исполнения программы, без итераций. Метод протестирован на объектах MAX IV [94] и PAL-XFEL [96]. Случай с MAX IV был изучен в [94] с использованием итераций, поэтому проведено сравнение модифицированных моделей КМР в программе без итераций. Во всех симуляциях использовано трехмерное стационарное моделирование, за исключением случая в режиме ССИ.

4.1 Схема тейперинга

Лазер на свободных электронах использует резонансное условие, которое гарантирует стабильное взаимодействие между электронным пучком и излучением.

Для плоского ондулятора с периодом ондулятора λ_u и параметром ондулятора K основная резонансная длина волны равна

$$\lambda = \frac{\lambda_u}{2\gamma^2} \left(1 + \frac{K^2}{2} \right), \quad (4.1)$$

где λ – резонансная длина волны излучения, γ – 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 γ электронов уменьшается из-за излучения. В ондуляторе с тейперингом резонансная энергия, которая исходит из уравнения (4.1), определяется как

$$\frac{1 + K^2(z)/2}{2\gamma_{res}^2(z)} = \frac{\lambda}{\lambda_u} = const. \quad (4.2)$$

Для резонансной энергии тогда

$$\gamma_{res} = \sqrt{\frac{\lambda_u}{2\lambda} (1 + K^2(z)/2)}. \quad (4.3)$$

Профиль тейперинга $K(z)$ определяется уравнением

$$\frac{d\gamma_{res}}{dz} = -\frac{e}{2m_e c^2} \frac{K(z) f_b(z) E_0(z)}{\gamma_{res}(z)} \sin[\Psi_{res}(z)], \quad (4.4)$$

где Ψ_{res} – фаза, e – заряд электрона, c – скорость света, E_0 – амплитуда поля излучения и f_b – коэффициент Бесселя для плоских ондуляторов

$$f_b(z) = J_0(\xi) - J_1(\xi), \quad (4.5)$$

где $\xi = K^2/(4 + 2K^2)$ и $J_n(x)$ – функция Бесселя. Для спиральных ондуляторов $f_b = 1$ и K нужно заменить на $K_{eff} = \sqrt{2}K$.

Чтобы вычислить $K(z_{i+1})$, мы подставляем выражение (4.3) в выражение (4.4) и делаем аппроксимацию $dz \approx \Delta z$ так, что

$$K(z + \Delta z) = K(z) - \frac{2e}{m_e c^2} \frac{f_b(z) E_0(z) \lambda}{\lambda_u} \sin[\Psi_{res}(z)] \Delta z. \quad (4.6)$$

Как указано в [94], эволюция E_0 может быть аппроксимирована как

$$\frac{dE_0}{dz} \sim N_\Lambda \frac{d\gamma}{dz}, \quad (4.7)$$

где N_Λ – количество захваченных частиц. По мере увеличения Ψ значение $\frac{d\gamma}{dz}$ увеличивается, см. (4.4), но N_Λ уменьшается. Это два противоборствующих фактора. Нам нужно оптимизировать Ψ .

Метод КМР предлагает постоянную фазу вдоль ЛСЭ

$$\Psi_{res}(z) = \Psi_{res}(0) = const. \quad (4.8)$$

В то время как модифицированный метод КМР [94] предлагает непостоянную фазу

$$\Psi_{res}(z) = gz^d, \quad (4.9)$$

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

В [94] авторы выполнили множество итераций для оптимизации профиля тейперинга, в настоящей работе исследовано внедрение модифицированного метода КМР в компьютерную программу. В работе выбрали $\Delta z = \lambda_u$ и рассчитали $K(z)$ на каждом шаге.

Существует предел извлечения энергии, который вытекает из условия

$$\frac{1 + K^2(0)/2}{\gamma_{res}^2(0)} = \frac{1}{\gamma_{res}^2(z_{final})}. \quad (4.10)$$

Это приводит к выражению для максимального коэффициента полезного действия

$$\eta_{max} = 1 - \sqrt{\frac{1}{1 + K^2(0)/2}}. \quad (4.11)$$

Существуют и другие методы оптимизации профиля тейперинга, например, [97], [90] и др. В принципе, произвольные профили тейперинга могут быть оптими-

зированы с помощью многомерной оптимизации:

$$K(z) = \begin{cases} K_0, & \text{if } z < z_0 \\ K_0 - b \times (z - z_0)^2, & \text{otherwise} \end{cases}$$

где b и z_0 – параметры, подлежащие оптимизации. В этом методе необходимо оптимизировать как минимум два параметра, что делается с помощью многомерного сканирования. Структура функции может быть усложнена путем добавления новых параметров, см., например, [98]. Как указано в статье [97], модифицированный метод КМР ничем не хуже, а иногда и превосходит предлагаемую функцию. В модифицированной модели КМР с фиксированным значением $d = 1$ необходимо оптимизировать только один параметр, что ускоряет поиск профиля тейперинга. Однако остается вероятность того, что прямая оптимизация произвольного профиля тейперинга все еще была бы полезной. Это может быть выполнено с помощью машинного обучения во время работы лазера [99].

4.2 Проверка использования модели на эксперименте PAL-XFEL

На рентгеновском лазере на свободных электронах в ускорительной лаборатории Поханга (PAL-XFEL) в Республике Корея достигнуто насыщение пучка лазера на свободных электронах на длине волны $0,85 \text{ \AA}$ [96]. Эксперимент с использованием тейперинга был проведен в конце 2017 года, использовалась схема с самозатравкой. Эта схема состоит из трех частей: работающего в линейном режиме ЛСЭ с самоусилением спонтанного излучения (ССИ), монохроматора и усилителя. В этом разделе выполнено зависящее от времени моделирование эксперимента с усилителем и проведено сравнение результатов с экспериментальными [96]. Параметры моделирования: $K(z = 0) = 1,87$, $\lambda_u = 2,6 \text{ см}$, $I = 2200 \text{ А}$, $\gamma = 20548$, $\sigma_\gamma = 0,014\%$, $\varepsilon_{x,y} = 0,42 \text{ мкм}\cdot\text{рад}$, $\langle\beta_{x,y}\rangle = 40 \text{ м}$ и $P_0 = 5 \text{ МВт}$. Оптимизирован параметр $g = 0,02 \text{ рад/м}$ для $\Psi_{res}(z) = gz$. В эксперименте была достигнута мощность 20 ГВт , что в 4 раза больше, чем без тейперинга. Это означает, что моделирование в авторской программе хорошо согласуется с экспериментом, см. Рис. 4.1.

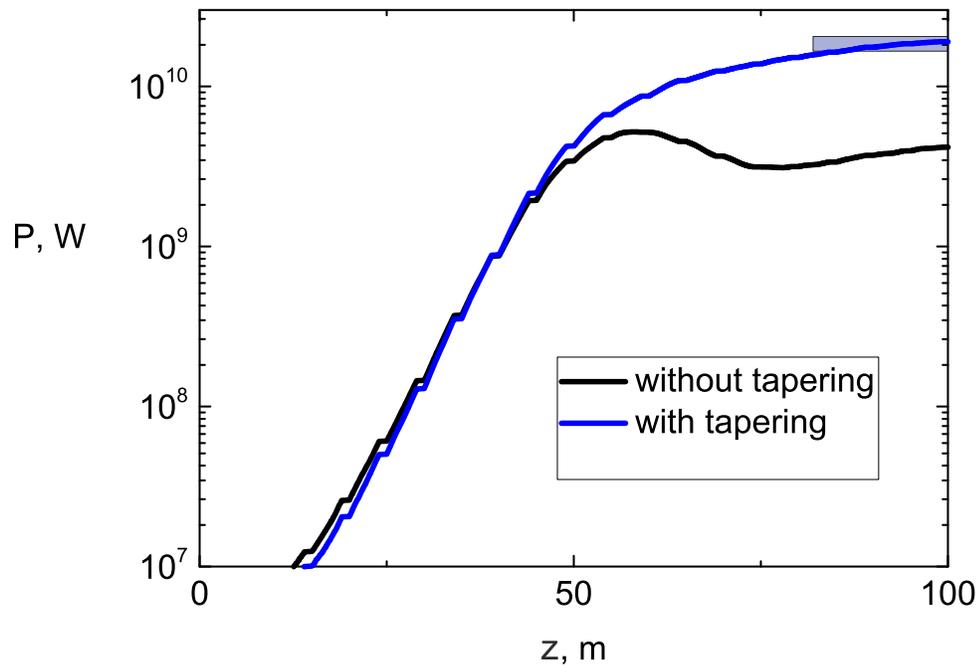


Рисунок 4.1: Моделирование эксперимента PAL-XFEL с тейперингом (синяя линия) и без тейперинга (черная линия). Экспериментальное значение мощности излучения показано цветной областью.

4.3 Влияние сдвига фаз электронов относительно фотонов

ЛСЭ используются для изучения различных материалов [89], в том числе тех, в которых наблюдаются нелинейно-оптические эффекты, такие как генерация второй, третьей и четвертой гармоник [100, 101]. Генерация высших гармоник также используется для изучения оптических свойств новых материалов [34]. 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.

В работе [51] предложены методы подавления высших гармоник в ЛСЭ с тейперингом с помощью ранее разработанной программы [50].

В [102] было продемонстрировано, что сдвиг фазы электронного сгустка относительно излучения эквивалентен уменьшению параметра ондулятора. Было обнаружено, что 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

$$b_n = \frac{1}{N} \left| \sum_{j=1}^N e^{-in\theta_j} \right|, \quad (4.12)$$

где N – количество частиц в пучке, θ_j – фаза частицы, n – номер гармоники.

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

$$\theta_j \rightarrow \theta_j - 2\pi/k, \quad (4.13)$$

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 2π .

Ниже будет представлена модификация метода, основанная на анализе результатов с постоянными фазовыми сдвигами между секциями ондулятора.

4.3.1 Постоянный сдвиг фаз

В [94] были изучены методы тейперинга для увеличения мощности установки MAX IV. Рассматривалось 200 метров активной части лазера; в [89] недостаточно информации о параметрах пучка, в нашем моделировании структура FODO имеет размер 10 м. В [94] при использовании метода КМР мощность излучения достигает 1,5 ТВт на 200 м; с модифицированным КМР – 3,25 ТВт на 200 м. Следует отметить, что при моделировании использовалось не зависящее от времени моделирование, а результаты были получены путем итераций с использованием программы GENESIS.

Используя нашу программу, мы изучили различные сдвиги фаз электронов относительно фотонов [51], см. Рис. 4.2(a). Параметры моделирования: $K(z = 0) = 1,7$, $\lambda_u = 2$ см, $I = 4000$ А, $\gamma = 7828$, $\sigma_\gamma = 0,001\%$, $\varepsilon_{x,y} = 0,2$ мкм·рад, $\langle \beta_{x,y} \rangle = 20$ м, $P_0 = 100$ кВт и $\lambda = 4$ Å. Мощность излучения увеличивается экспоненциально до 200 м, после чего усиление мощности излучения замедляется. Для трех случаев мы получили следующие результаты: без сдвигов фаз $P_3/P_1 \approx 3,4 \cdot 10^{-2}$, при $k = 50$ $P_3/P_1 \approx 2,2 \cdot 10^{-2}$, при $k = 35$ $P_3/P_1 \approx 9,8 \cdot 10^{-3}$. Как можно видеть на Рис. 4.2(b) и (c), коэффициент банчинга прерывается при использовании фазового сдвига. Ко-

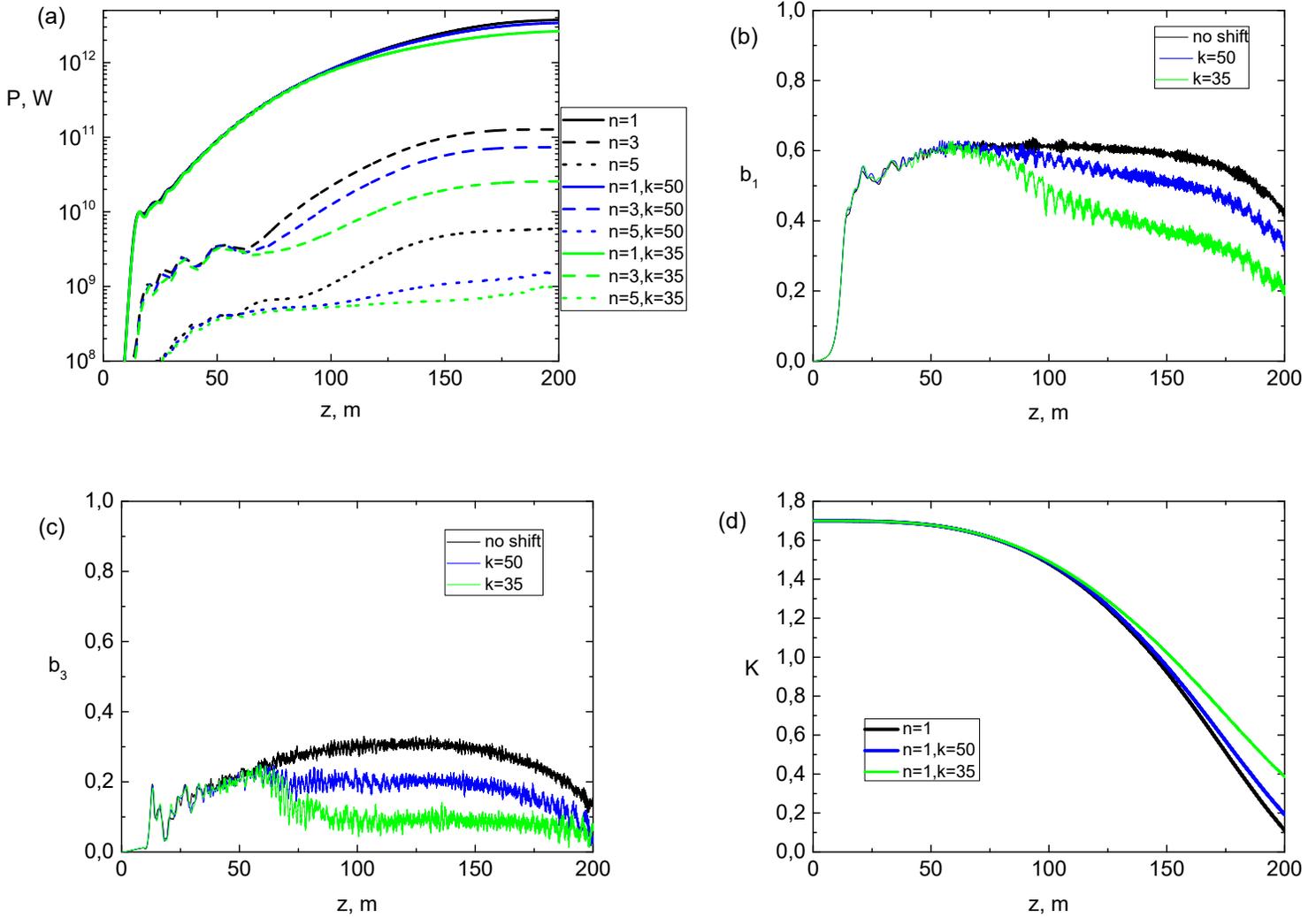


Рисунок 4.2: Эволюция мощности гармоник показана на верхнем левом рисунке (а), эволюция коэффициента банчинга для основной гармоники — на правом верхнем (b), эволюция коэффициента банчинга для третьей гармоники — на нижнем левом (с), эволюция параметра K — на нижнем правом рисунке (d). Длина волны излучения составляет 4 \AA , $d = 1$, $g = 2,6$ мрад/м.

эффицент банчинга для третьей гармоники с $k = 35$ вместо увеличения значения k в середине установки (как это было без сдвигов фаз) уменьшается, что влечет за собой ослабление мощности. В случае $k = 35$ мощность основной гармоники уменьшилась на 29 процентов, мощность третьей гармоники уменьшилась на 80 процентов, мощность пятой гармоники уменьшилась на 82 процента. Мощность пятой гармоники в плоских ондуляторах всегда меньше мощности третьей гармоники, поскольку коэффициент Бесселя и коэффициент банчинга для пятой гармоники меньше, чем

для третьей гармоники. Поскольку пятая гармоника на порядок меньше третьей, мы не будем принимать ее во внимание далее.

Мы также изучили другой случай, см. Рис. 4.3, поскольку в некоторых экспериментах необходимо использовать излучение в нанометровой области. Параметры моделирования: $K(z = 0) = 3,32$, $\lambda_u = 3$ 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 и $\lambda = 1,6$ нм. Излучение увеличивается экспоненциально до 200 м, после чего усиление излучения замедляется. Для трех случаев мы получили следующие результаты: без сдвигов фаз $P_3/P_1 \approx 8,5 \cdot 10^{-2}$, при $k = 60$ $P_3/P_1 \approx 7,2 \cdot 10^{-2}$, при $k = 30$ $P_3/P_1 \approx 2,4 \cdot 10^{-2}$. Как видно из результатов моделирования, вклад третьей гармоники увеличивался по мере увеличения параметра K ондулятора. Мощность третьей гармоники в этом случае явно повлияет на обнаружение генерации третьей гармоники в веществах. В случае $k = 30$ мощность основной гармоники уменьшилась на 47 процентов, мощность третьей гармоники уменьшилась на 85 процентов. Ниже представлено моделирование этого случая с модифицированным фазовым сдвигом.

Параметр ондулятора	Значение
$K(z = 0)$	1,7 или 3,32
Период ондулятора λ_u	2 см или 3 см
Параметр d	1
Параметр g	2,6 мрад/м
Параметр пучка	Значение
Лоренц-фактор электронов γ	7828
Энергетический разброс σ_γ	10^{-5}
Эмиттанс $\varepsilon_{x,y}$	0,2 мкм·рад
Параметр Твисса $\langle\beta_{x,y}\rangle$	20 м
Ток I_0	4 кА
Начальная мощность P_0	100 кВт или 1 МВт

Таблица 4.1: Параметры моделирования в эксперименте MAX IV, используемые в численной программе излучения ЛСЭ. Длины волн излучения составляют 4 Å и 1,6 нм соответственно.

4.3.2 Модификация фазового сдвига

Основываясь на анализе предыдущего раздела, предложена модификация фа-

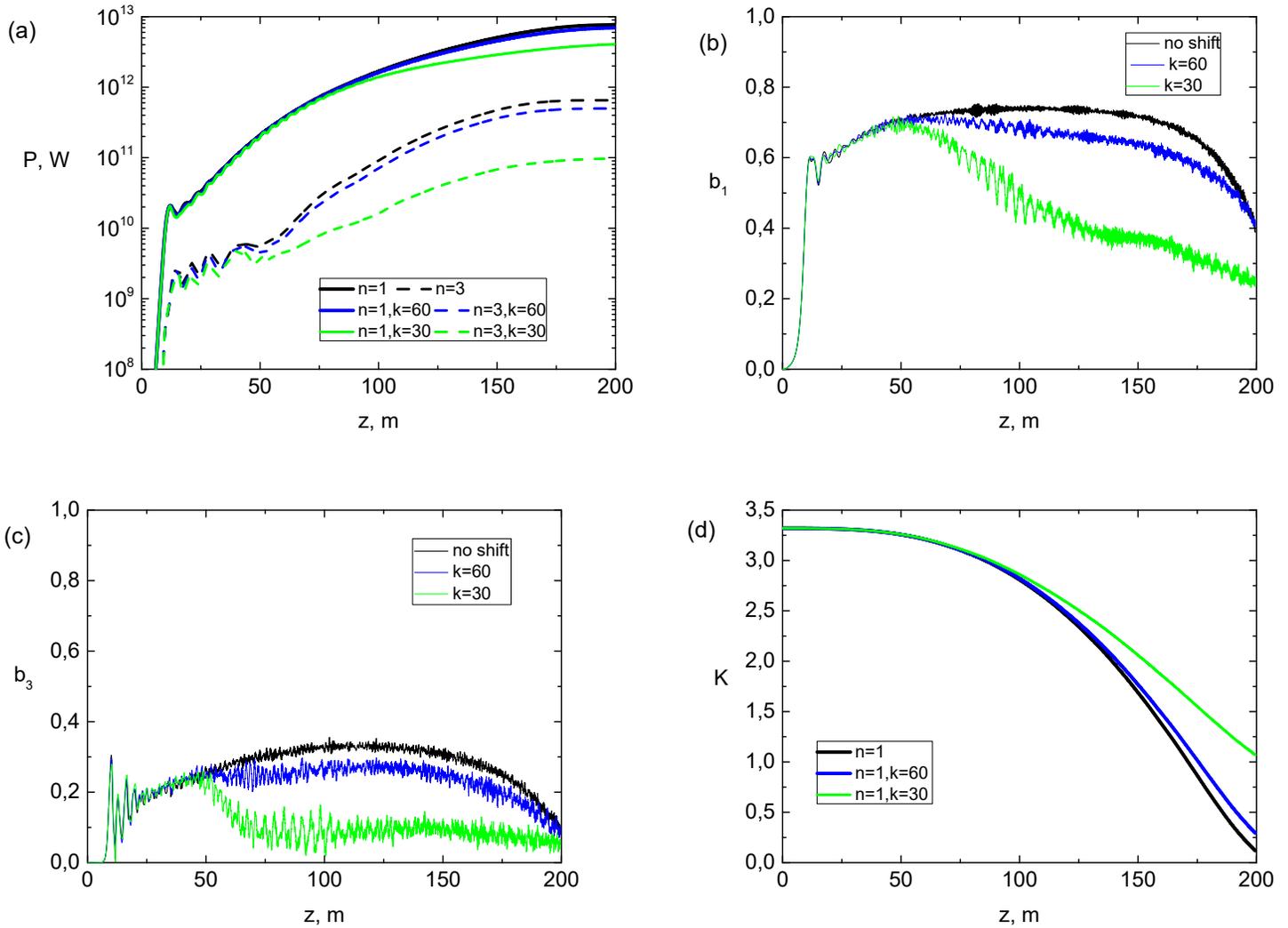


Рисунок 4.3: Эволюция мощности гармоник показана на верхнем левом рисунке (a), эволюция коэффициента банчинга для основной гармоники — на правом верхнем (b), эволюция коэффициента банчинга для третьей гармоники — на нижнем левом (c), эволюция K — на нижнем правом рисунке (d). Длина волны излучения составляет 1,6 нм, $d = 1$, $g = 2,6$ мрад/м.

зовых сдвигов. Вместо постоянного фазового сдвига предложено сделать переменный фазовый сдвиг так, чтобы уменьшать сдвиг фаз по длине лазера. Эта модификация подавляет генерацию третьей гармоники в начале, но сохраняет мощность основной гармоники в конце. Мы модифицировали наш метод следующим образом

$$\theta_j \rightarrow \theta_j - \frac{2\pi}{k + \alpha G}, \quad (4.14)$$

где G — номер ондуляторной секции, α — параметр, подлежащий оптимизации. В этой

модификации необходимо оптимизировать два параметра, что усложняет поиск, но улучшает подавление высших гармоник.

В случае излучения с длиной волны $\lambda = 1,6$ нм мы получили следующие соотношения между мощностями гармоник: при $k = 12$, $\alpha = 1$ $P_3/P_1 \approx 1,5 \cdot 10^{-2}$, см. Рис. 4.4. Таким образом, соотношение P_3/P_1 уменьшилось в 5,7 раза, с 8,5% до 1,5%.

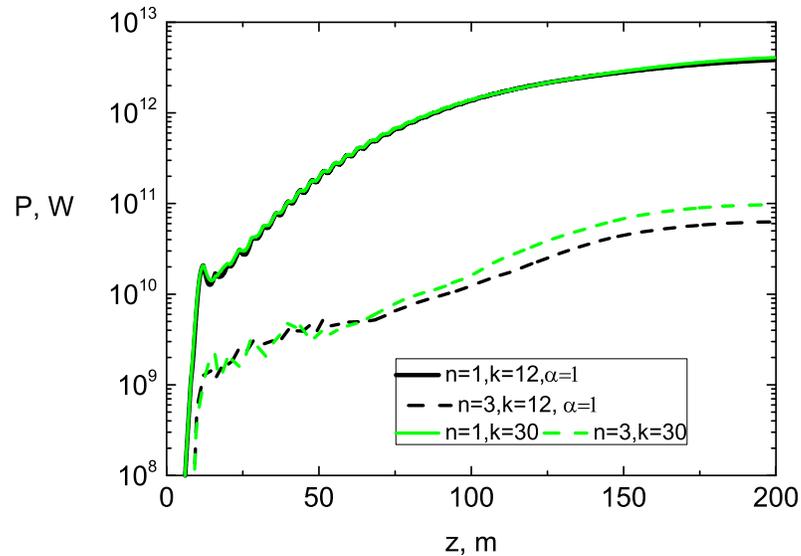


Рисунок 4.4: Развитие мощности гармоник с постоянным сдвигом фаз электронов относительно фотонов (зеленые линии) и модифицированным сдвигом фаз (черные линии) $\lambda = 1,6$ нм.

Мы исследовали влияние параметра d на подавление гармоник, см. Рис. 4.5. Как видно из рисунка, мощность основной гармоники в начале увеличивается быстрее при меньшем d , чем при большем. Мы получили почти одинаковые уровни подавления третьей гармоники для всех d .

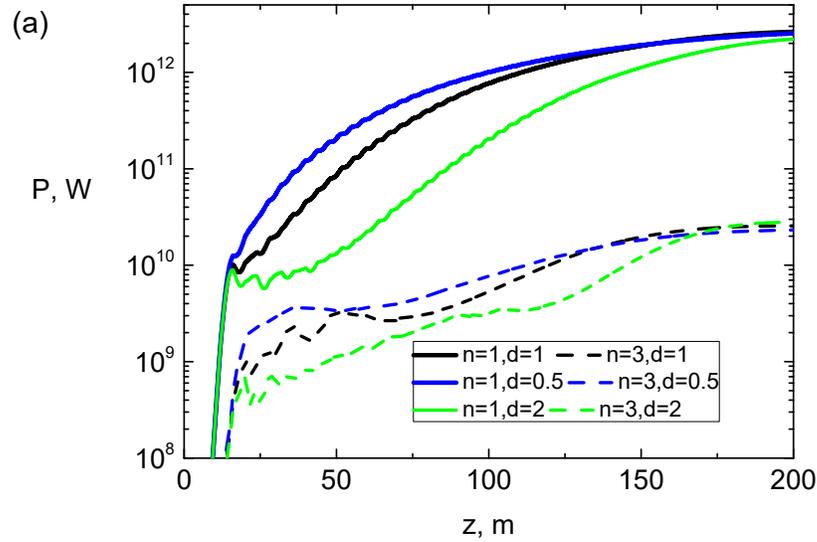


Рисунок 4.5: Эволюция мощности гармоник при $\lambda = 4 \text{ \AA}$ с различным d : $d = 0,5$ – синяя линия, $d = 1$ – черная линия, $d = 2$ – зеленая линия.

4.4 Выводы к главе 4

В этом разделе был проведен анализ подавления излучения высших гармоник в ЛСЭ с тейперингом с помощью написанной автором программы. Анализ проводился с использованием модифицированных моделей Кролла–Мортон–Розенблюта [93]. Было показано, что применение фазового сдвига между электронным пучком и излучением после каждой секции ондулятора уменьшает относительный вклад излучения высших гармоник. Мотивация для подавления высших гармоник исходит от нелинейной оптики. Для проведения исследования генерации второй, третьей и четвертой гармоник в веществе необходимо подавлять эти гармоники в излучении ЛСЭ. Однако подбор аттенюаторов является сложной задачей. В работе [51] предложено уменьшать вклад высших гармоник путем фазового сдвига, при сохранении достаточно мощной первой гармоники удалось подавить третью гармонику примерно на порядок. Также предложена модификация постоянного фазового сдвига – уменьшающийся фазовый сдвиг. 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 $K(z=0) = 3,32$, $\lambda_u = 3 \text{ см}$, $I = 4000 \text{ А}$, $\gamma = 7828$, $\sigma_\gamma = 0,001\%$, $\varepsilon_{x,y} = 0,2 \text{ мкм}\cdot\text{рад}$, $\langle\beta_{x,y}\rangle = 20 \text{ м}$, $P_0 = 1 \text{ МВт}$, $\lambda = 1,6 \text{ нм}$ 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.

Глава 5

Применение нейронных сетей

Современные технологии искусственного интеллекта (ИИ) позволяют создавать «умные» системы, которые могут контролировать производственные процессы, решать различные задачи и выявлять закономерности. Идея нейронных сетей пришла из биологии, модель из математики, а реализуются нейронные сети с помощью компьютерных технологий на различных языках программирования (Python, R, C++ и др.). Искусственные нейронные сети применяют для расчета функционального интеграла [103], для анализа столкновения частиц [104] и т.д.

Лазеры на свободных электронах (ЛСЭ) используются в различных областях научных исследований. Для их проектирования и калибровки создаются различные программы и методы. Развитие машинного обучения открыло возможности для новых методов исследования и анализа данных. В данной главе представлена методика построения нейронной сети для анализа параметров ЛСЭ. Мы собрали данные численного моделирования примерно 2000 конфигураций, нашли оптимальную архитектуру и обучили нейронную сеть, которая может за короткое время проанализировать несколько конфигураций ЛСЭ в зависимости от параметров ондулятора и параметров электронного пучка. Этот метод может быть перенесен на более сложные системы (ЛСЭ со спиральными ондуляторами и т.д.), а также может быть применен к экспериментальным установкам для их оптимизации.

5.1 Введение

Моделирование лазеров на свободных электронах требует сложных программ и квалифицированного персонала для настройки численных параметров. Численное моделирование не всегда близко к экспериментам, и многие программы недоступны для публичного использования. Чтобы спроектировать новые установки, необходимо оценить размер, стоимость лазера, а также характеристики излучения. Следовательно, необходимо рассмотреть множество конфигураций ЛСЭ, прежде чем приступать к строительству или модернизации существующих систем. В дополнение к известным параметрам установок существуют неизвестные параметры – точная форма электронного пучка в установке, магнитное поле Земли и т.д. Системы ма-

шинного обучения могут анализировать информацию и прогнозировать мощность, длину насыщения и спектр излучения. В физике ЛСЭ есть много примеров создания нейронных сетей на основе результатов численных программ, см., например, [45,46]. В [47] была разработана оптимизация импульса рентгеновского лазера на свободных электронах с использованием байесовской оптимизации, основанной на экспериментальных данных взаимодействия пучка с материалами и данных моделирования динамики ионизации.

В работе [52] построена и обучена нейронная сеть для анализа конфигураций ЛСЭ. Обучение проходило на данных трехмерного численного моделирования излучения в усилителе ЛСЭ, моделирование проводилось без начального шума. В результате подготовки данных и обучения нейронной сети были разработаны оптимальные преобразования данных (физические нормировки, логарифмирование данных, шкалирование и т.д.) и архитектура нейронной сети. Параметр ондулятора K , период ондулятора λ_u , начальная мощность P_0 , лоренц-фактор электронов γ , разброс электронов по энергии σ_γ , пиковый ток I , средний размер электронного пучка r были выбраны в качестве параметров моделей (фичей). На выходе модель выдает мощность насыщения P_{sat} , длину насыщения L_{sat} и оптимальную длину излучения λ_{opt} .

5.2 Архитектура нейронной сети

Для того чтобы получить основные параметры объектов ЛСЭ (L_{sat} , P_{sat} , λ_{opt}), необходимо решить сложную систему дифференциальных уравнений. Аналитических решений для такой системы уравнений нет, но зависимость между (L_{sat} , P_{sat} , λ_{opt}) и (K , I , r , P_0 , γ , λ_u , σ_γ) очевидна. Эта взаимосвязь может быть описана с помощью некоторой 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) [105, 106] с функцией потерь MSE в качестве архитектуры нейронной сети:

$$MSELoss = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2, \quad (5.1)$$

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 λ_u , мощность начального источника P_0 , лоренц-фактор электронов γ , энергетический разброс электронов σ_γ , 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 λ_{opt} , см. Рис. 5.1. Нейронная сеть состоит из двух полносвязных (FC) общих скрытых слоев с (300, 100) узлами и двух полносвязных специфических слоев с (100, 30) узлами для каждой переменной, см. Рис. 5.2. 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:

$$\text{Tanh}(z) = \frac{e^z - e^{-z}}{e^z + e^{-z}}. \quad (5.2)$$

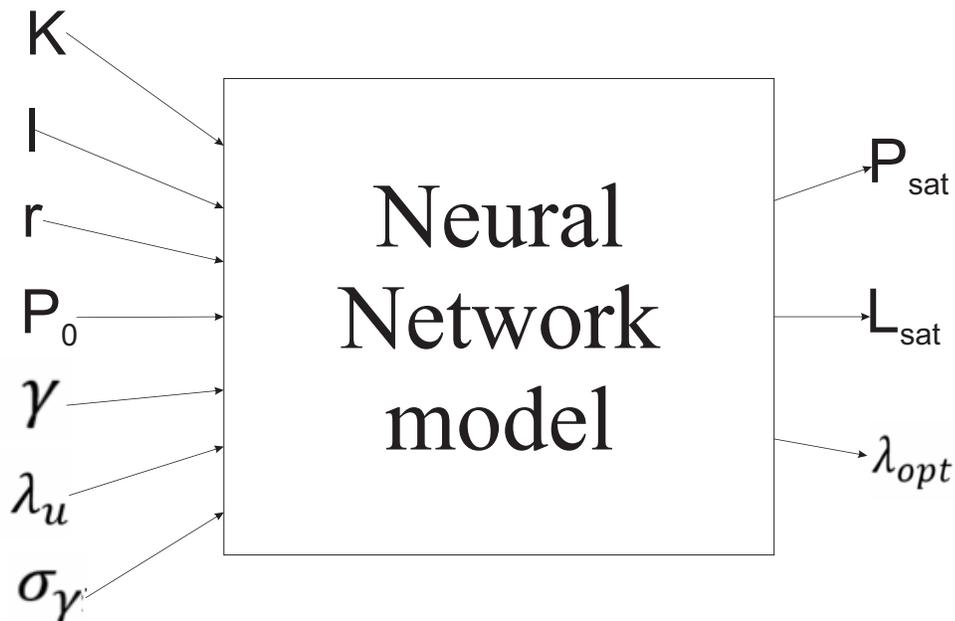


Рисунок 5.1: Схема модели.

В численном моделировании существует один параметр, который не может быть вычислен с помощью численных методов и аналитических уравнений – оптимальная длина волны излучения. Лазер на свободных электронах эффективно излучает на определенной длине волны. Лоренц-фактор электронов должен удовлетворять условию резонанса, это условие нарушается, так как электроны в пучке теряют энергию во время излучения. Данный эффект приводит к изменению длины волны излучения [107], это следует учитывать при численном моделировании. Оптимальная длина волны выбирается вручную после выполнения нескольких симуляций с различными длинами волн. Эта работа может быть предоставлена нейронной сети.

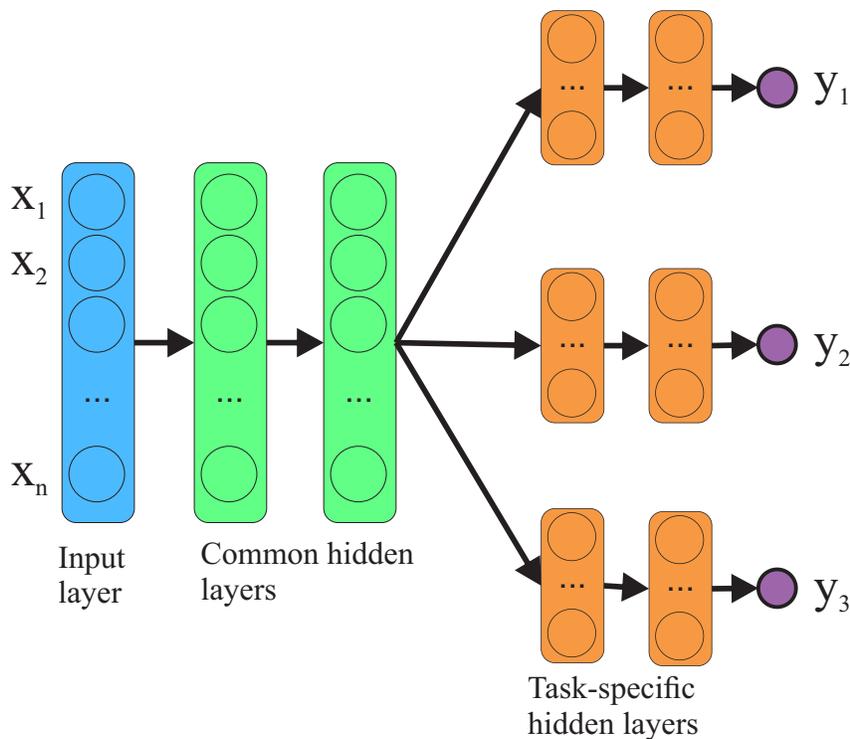


Рисунок 5.2: Архитектура нейронной сети

5.3 Обучение нейронной сети

Обучающие данные были сгенерированы с помощью программы численного моделирования. Диапазон параметров указан в таблице 5.1.

Была выполнена предварительная предобработка данных – логарифмирование некоторых переменных, чтобы распределения данных выглядели похожими на рас-

Параметр	Диапазон	Единица измерения
K	1 – 3,99	–
λ_u	1 – 3,99	см
γ	31,6 – 40000	–
σ_γ	0 – 10^{-3}	–
I	50 – 9900	А
r	10^{-5} – $7 \cdot 10^{-4}$	м

Таблица 5.1: Таблица с диапазонами параметров.

пределение Гаусса, поскольку нейронные сети лучше обучаются на таком распределении. Также были выбраны нормировки для физических величин:

$$\begin{aligned}
 x_1 &= K, \quad x_2 = \lambda_u, \\
 x_3 &= P_0/P_{all}, \quad x_4 = I, \\
 x_5 &= \gamma, \quad x_6 = \sigma_\gamma, \\
 x_7 &= r, \\
 y_1 &= P_{sat}/P_{all}, \\
 y_2 &= L_{sat}/\lambda_u, \\
 y_3 &= (\lambda_{opt}/\lambda_{res} - 1)/\rho,
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

где $P_{all} = \gamma I m_e c^2$ – мощность электронного пучка, c – скорость света в вакууме, m_e – масса электрона, $\lambda_{res} = \lambda_u(1 + K^2/2)/2\gamma^2$ – резонансная длина волны излучения, $\rho = (J(K\lambda_u f_0)^2/4\pi I_A)^{1/3}/2\gamma$ – параметр Пирса, $f_0 = J_0(\xi) - J_1(\xi)$ – коэффициент Бесселя для основной гармоники, $J(x)$ – функция Бесселя, $\xi = K^2/(4 + 2K^2)$, $I_A = 17$ кА – ток Альфвена, J – плотность тока.

Обучение проводилось на основе данных, полученных с помощью численного моделирования; данные были разделены на обучающую, валидационную и тестовую выборки в отношении 80/10/10 соответственно, приблизительно 1700 конфигураций. В качестве оптимизатора был выбран AdamW с планировщиком (снижение темпа обучения), размер батча составляет 64 конфигурации. Уменьшение функции потерь на обучающей и валидационной выборках показано на Рис. 5.3. В качестве метрики использовалась относительная средняя абсолютная ошибка (RMAE)

Модель	RMAE для P_{sat}	RMAE для L_{sat}	RMAE для λ_{opt}
XGBoost (5 folds)	$12,3 \pm 0,8\%$	$11,1 \pm 0,6\%$	$20,6 \pm 3,0\%$
Neural network (MTL, 5 folds)	$9,2 \pm 0,5\%$	$6,7 \pm 0,5\%$	$14,2 \pm 0,7\%$
Neural network (MTL, 2 folds)	$9,8 \pm 0,0\%$	$7,0 \pm 0,2\%$	$15,0 \pm 0,2\%$
Neural network (FC, 5 folds)	$11,0 \pm 0,8\%$	$7,8 \pm 0,5\%$	$14,4 \pm 1,0\%$

Таблица 5.2: Таблица со сравнением точности различных моделей на кросс-валидации.

$$RMAE = \frac{|Y_{pred} - Y_{true}|}{Y_{true}}. \quad (5.4)$$

Эта безразмерная величина устраняет влияние разброса мощности, что позволяет сравнивать характеристики различных конфигураций пучков и длин ондуляторов.

В дополнение к нейронным сетям мы обучили модели Random Forest и XGBoost, поскольку ансамблевые методы могут лучше работать с небольшим объемом данных и простыми шаблонами. Метрики для XGBoost на кросс-валидации следующие 0,12/0,11/0,21 для мощности, длины насыщения и оптимальной длины волны соответственно. С помощью модуля Optuna была выбрана лучшая модель XGBoost. Метрики нейронной сети на кросс-валидации равны 0,09/0,07/0,14 соответственно; следует отметить, что нейронная сеть дает в целом результат, который больше соответствует физике ЛСЭ. Мы использовали 5 фолдов (Fold) для кросс-валидации.

Мы протестировали нашу модель на половине данных – кросс-валидация с 2 фолдами. Точность модели остается на хорошем уровне даже при меньшем объеме данных, см. таблицу 5.2. Мы также создали обычную полносвязную нейронную сеть и оптимизировали параметры. Нулевой ошибки практически невозможно достичь. Причина, по которой нейронные сети не могут точно воспроизвести данные моделирования, может заключаться в числовых и методологических ошибках данных, которые неизбежны.

model

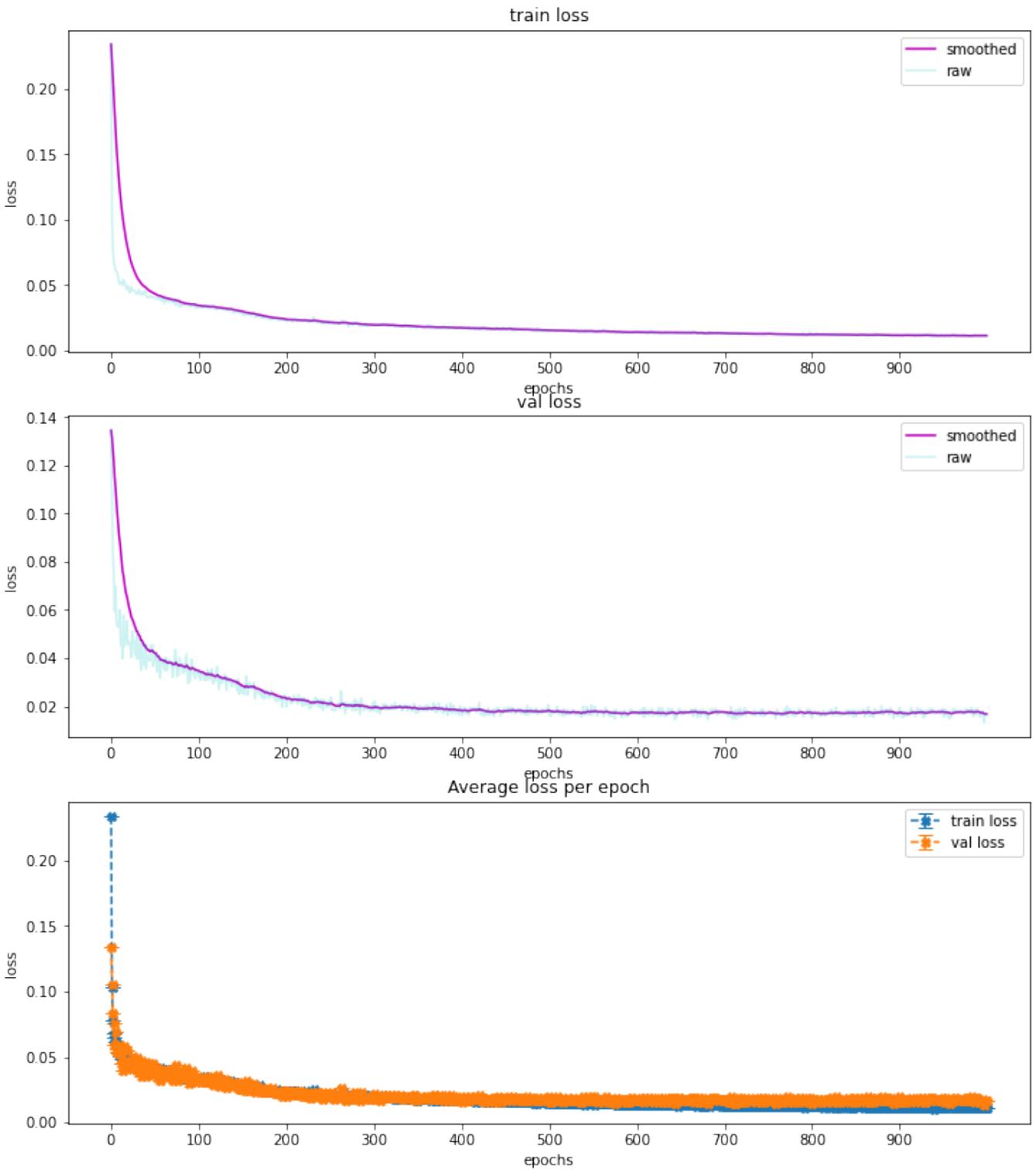


Рисунок 5.3: Значение функции потерь на тренировочных и валидационных данных.

5.4 Применение нейронной сети

В этом разделе приводится сравнение результатов, полученных с помощью нейронной сети, и результатов, полученных с помощью программы численного моделирования. Визуализация результатов работы нейронной сети выполнена с использованием модификации формул, полученных Дж. Даттоли [40]:

$$A(z) = \frac{1}{9}(3 + 2 \operatorname{ch}(z/L_{gain}) + 4 \cos(\sqrt{3}z/2L_{gain}) \operatorname{ch}(z/(2L_{gain}))), \quad (5.5)$$

$$L_{sat} \approx 1.1L_{gain} \ln(9P_{sat}/P_0), \quad (5.6)$$

$$P(z) = P_0 \frac{A(z) \exp(0.233z/L_{sat})}{1 + \frac{P_0}{P_{sat}}(A(z) - 1)}. \quad (5.7)$$

Мы проанализировали и проверили физичность результатов работы обученной нейронной сети в различных диапазонах электромагнитного излучения. На рисунке 5.4 представлено сравнение результатов численного моделирования и нейронной сети в жестком рентгене. В начале работы лазера электроны не сгруппированы, затем под воздействием излучения электроны начинают группироваться и начинают когерентно излучать до насыщения. Следует отметить, что нейронная сеть достаточно хорошо определяет оптимальную длину волны излучения, ее неточность не сильно влияет на рост гармоник в численном моделировании. Результаты численного моделирования следующие: $P_{sat} \approx 2,1 \cdot 10^{10}$ Вт, $L_{sat} \approx 44$ м; результаты нейронной сети: $P_{sat} \approx 2,5 \cdot 10^{10}$ Вт, $L_{sat} \approx 38,4$ м. Как результаты численной модели зависят от параметров сетки, количества макрочастиц и т.д., так и значения нейронной сети зависят от разделения данных, размера батчей и случайных начальных значений (seed), см. Рис. 5.5.

На Рис. 5.6 результаты численного моделирования и нейронной сети сравниваются на примере эксперимента SPARC [108]. Излучение происходило в оптическом диапазоне. Результаты численного моделирования: $P_{sat} \approx 2,4 \cdot 10^7$ Вт, $L_{sat} \approx 12,5$ м; результаты нейронной сети: $P_{sat} \approx 2,0 \cdot 10^7$ Вт, $L_{sat} \approx 13,3$ м. Разница между работой нейронной сети и численным моделированием имеет ту же степень различия, что и разные программы, см., например, [107]. Следует также отметить, что даже одна и

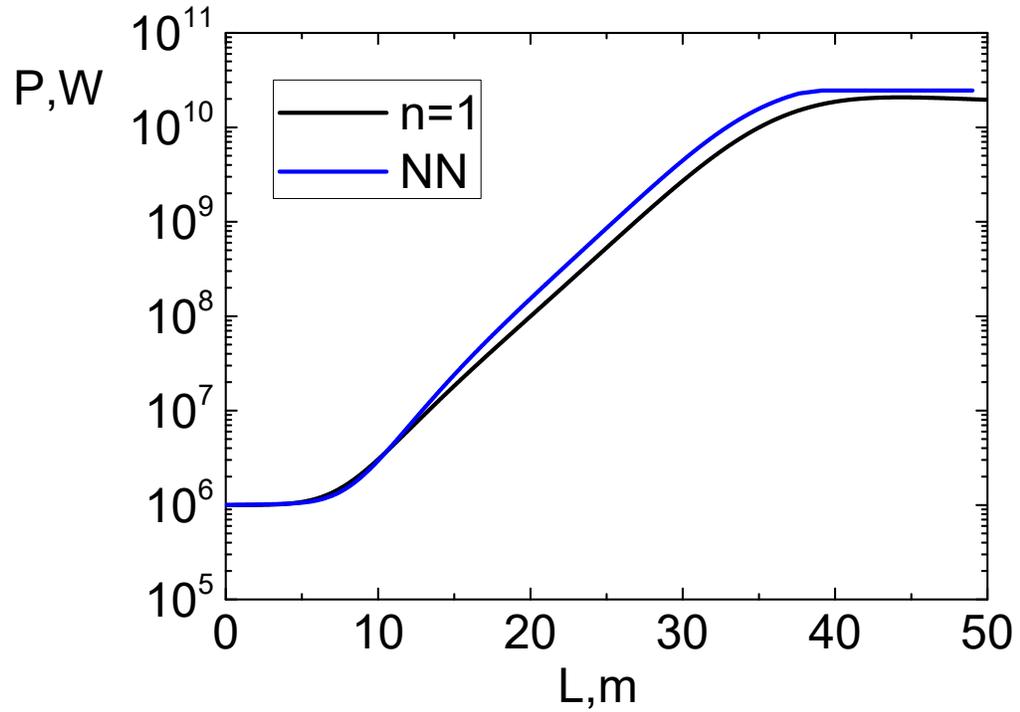


Рисунок 5.4: Изменение мощности основной гармоники в усилителе в режиме жесткого рентгеновского излучения. Параметры системы следующие: $K = 3,5$, $\lambda = 3$ см, $\gamma = 30000$, $\sigma_\gamma = 0,01\%$, $r = 2 \cdot 10^{-5}$ м, $I = 3000$ А, $P_0 = 10^6$ Вт, $\lambda_{opt} = 1,1882$ Å.

та же численная программа с разными параметрами моделирования может дать 20-процентную вариацию, см., например, [58]. Расхождение между нейронной сетью и численными значениями зависит от репрезентативности данных.

Обученная нейронная сеть позволяет мгновенно анализировать множество конфигураций, и учет стоимости конфигураций также может быть добавлен в программный код. Это значительно ускоряет поиск оптимальной конфигурации лазера, см. Рис. 5.7. Как видно на Рис. 5.7 (а), мощность насыщения увеличивается с увеличением параметра K , так как $P_{sat} \sim \rho \sim (f_0 K)^{2/3}$. Мощность насыщения также увеличивается с увеличением параметра λ_u , так как $P_{sat} \sim \rho \sim (\lambda_u)^{2/3}$. Как видно на Рис. 5.7 (b), длина насыщения пропорциональна $L_{gain} = \frac{\lambda_u}{4\sqrt{3}\pi\rho}$, что очевидно с точки зрения физики; но рост скорости функции уменьшается с увеличением K , что может быть связано с увеличением параметра Пирса ρ .

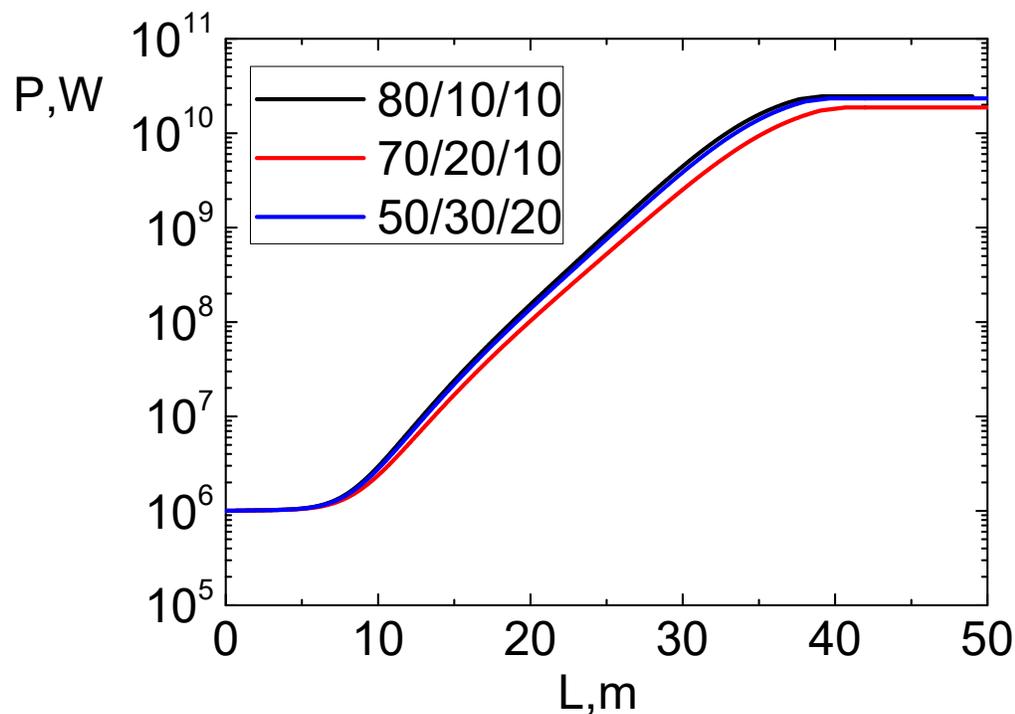


Рисунок 5.5: Изменение мощности основной гармоники в усилителе в режиме жесткого рентгеновского излучения с различным разбиением данных. Параметры системы следующие: $K = 3,5$, $\lambda = 3$ см, $\gamma = 30000$, $\sigma_\gamma = 0,01\%$, $r = 2 \cdot 10^{-5}$ м, $I = 3000$ А, $P_0 = 10^6$ Вт, $\lambda_{opt} = 1,1882$ Å.

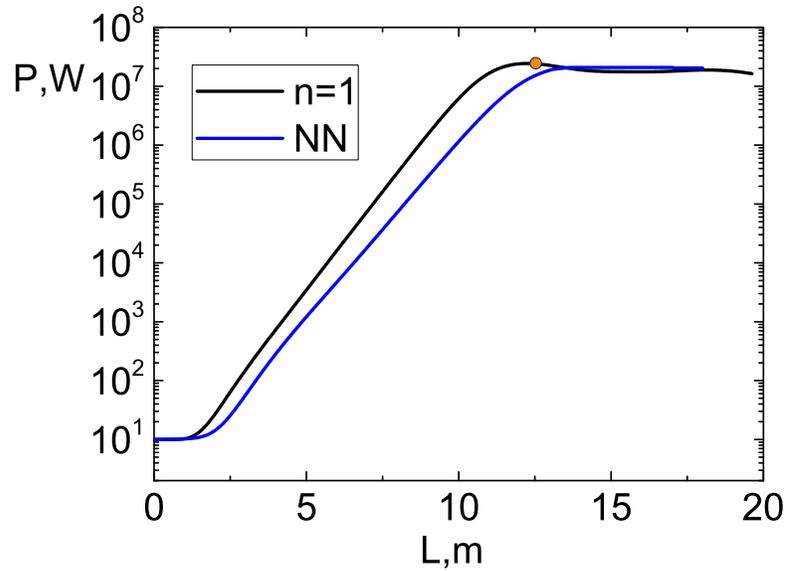


Рисунок 5.6: Изменение мощности основной гармоники в усилителе с параметрами эксперимента SPARC [108]. Лазерное излучение находится в оптическом диапазоне. Параметры системы следующие: $K = 2,13$, $\lambda = 2,8$ см, $\gamma = 300$, $\sigma_\gamma = 0,02\%$, $r = 1,2 \cdot 10^{-4}$ м, $I = 53$ А, $P_0 = 10$ Вт, $\lambda_{opt} = 510,4$ нм. Экспериментальное значение мощности после оптимизации отмечено оранжевой точкой.

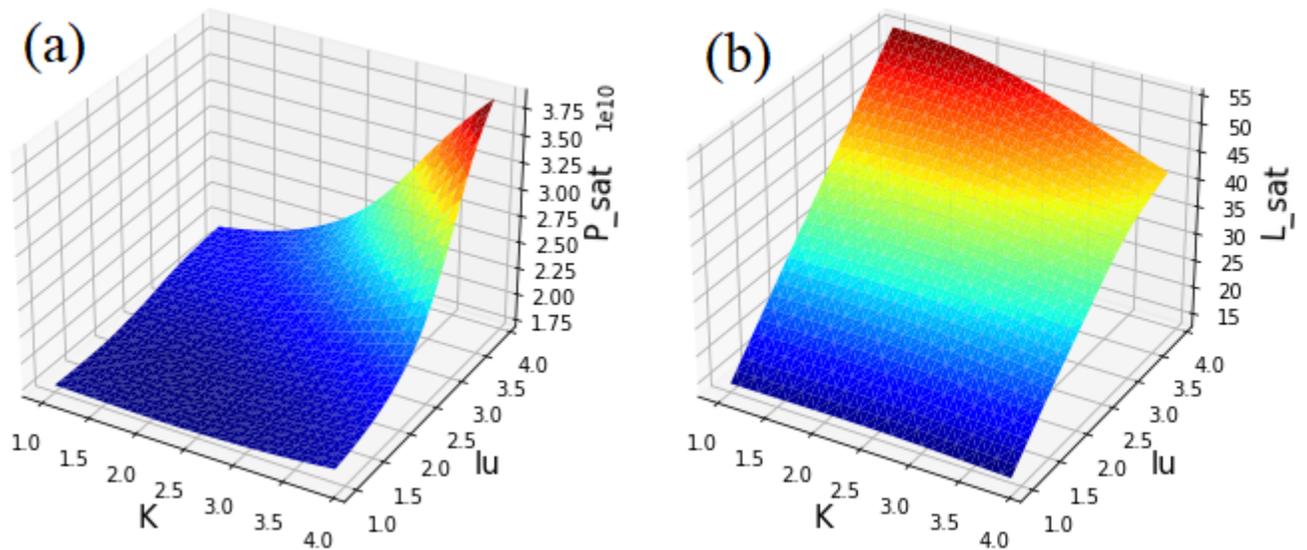


Рисунок 5.7: Анализ мощности лазера и длины насыщения с параметрами пучка $\gamma = 30000$, $\sigma_\gamma = 0,01\%$, $r = 2 \cdot 10^{-5}$ м, $I = 3000$ А, $P_0 = 10^6$ Вт в зависимости от K и λ_u .

5.5 Выводы к главе 5

В этой главе представлен новый математический подход к решению уравнений ЛСЭ, основанный на машинном обучении [52]. 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. 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 и 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

В данном диссертационном исследовании рассматривается генерация гармоник в однопроходных лазерах на свободных электронах с учетом бетатронных колебаний и фазовых сдвигов между электронами и фотонами. Для этих целей были выведены новые аналитические выражения, написан комплекс программ, построена и обучена нейронная сеть [48–52]. Основные результаты работы заключаются в следующем:

1. Проведено исследование генерации гармоник в ЛСЭ с плоским одночастотным 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 [109, 110].
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.

Подводя итог, полученные автором диссертации аналитические выражения и решения задач моделирования устройств ЛСЭ позволяет существенно расширить поиск новых оптимальных конфигураций ЛСЭ и снизить затраты материальных ресурсов. Полученные результаты позволяют проводить более точные текущие и планируемые эксперименты по изучению свойств новых веществ, наноструктур и т.д.

Список условных обозначений

Символ	Значение
\vec{A}	Векторный потенциал
b_n	Коэффициент банчинга (группировки) n -й гармоники
\vec{B}	Магнитная индукция
β	Параметр Твисса
β	Скорость (в единицах скорости света)
$\bar{\beta}$	Средняя скорость (в единицах скорости света)
c	Скорость света в вакууме
$\Delta\gamma$	Модуляция энергии электронного пучка
e	Элементарный заряд
E	Энергия
\vec{E}	Вектор напряженности электрического поля
E_0	Амплитуда электрического поля
ε	Эмиттанс
ε_0	Электрическая постоянная
η	Относительное отклонение энергии
f_n	Коэффициент Бесселя/ коэффициент связи между электронами и излучением
φ	Азимутальный угол
g	Параметр фокусировки квадрупольных секций
γ	Лоренц-фактор
I	Ток
I	Интенсивность
i	Мнимая единица
I_A	Ток Альфвена
J	Плотность тока
J_n	Функция Бесселя
h	Постоянная Планка
\hbar	Редуцированная постоянная Планка

Символ	Значение
K	Параметр ондулятора
k_λ	Волновое число излучения
k_u	Волновое число ондулятора
λ_u	Период ондулятора
λ_n	Длина волны n -й гармоники
λ_c	Комптоновская длина волны
λ_e	Длина волны де Бройля для электрона
L_g	Длина усиления
m_e	Масса покоя электрона
μ_0	Магнитная постоянная
n	Номер гармоники
\vec{n}	Направляющий единичный вектор
n_e	Концентрация электронов
N	Число периодов в секции ондулятора
ν	Параметр расстройки
ω	Частота излучения
Ω	Телесный угол
Ω_u	ck_u
Ω_β	Частота бетатронных колебаний
p	Импульс частицы
P_n	Мощность n -й гармоники
P_E	Мощность пучка электронов
Ψ	Начальная фаза волны излучения
\vec{r}	Радиус-вектор
r	Средний радиус пучка электронов
ρ	Параметр Пирса
rms	Среднеквадратичное значение
σ_γ	Энергетический разброс электронов
$\sigma_{x,y}$	Поперечный размер пучка
θ	Угол между направлением излучения и осью ондулятора/лазера

Символ	Значение
θ	Пондеромоторная фаза – фаза между электроном и относительной фазой электромагнитной волны
u	Масштабированная амплитуда поля
v	Скорость

Литература

- [1] Schott G.A. Über die Strahlung von Elektronengruppen / G.A. Schott // Ann. der Phys. — 1907. — Vol. 24. — P. 635.
- [2] Schott G.A. Electromagnetic Radiation and the Mechanical Reactions, Arising From It / G.A. Schott. — Cambridge : Cambridge University Press, 1912.—330 p.
- [3] Lienard A. Champ électrique et Magnétique / A. Lienard // L'éclairage électrique. — 1898. — Vol. 16, no. 27-29. — P. 5–14.
- [4] Iwanenko D., Pomeranchuk I. On the maximal energy attainable in betatron / D. Iwanenko, I. Pomeranchuk // Physical Review. — 1944. — Vol. 65. — P. 343.
- [5] Соколов А.А., Тернов И.М. Релятивистский электрон / А.А. Соколов, И.М. Тернов. — Москва : Главная редакция физико-математической литературы : Издательство «Наука», 1974 г.—392 с.
- [6] Соколов А.А., Тернов И.М. О поляризационных и спиновых эффектах в теории синхротронного излучения / А.А. Соколов, И.М. Тернов // Доклады Академии Наук СССР. — 1963. — Т. 153. — С. 1053.
- [7] Science News Letter. — 1947. — Vol. 51. — P. 339.
- [8] Багров В.Г., Бисноватый-Коган Г.С., Бордовицын В.А., Борисов А.В. и др. Теория излучения релятивистских частиц / В.Г. Багров, Г.С. Бисноватый-Коган, В.А. Бордовицын, А.В. Борисов и др.; под ред. В. А. Бордовицына. — Москва : Главная редакция физико-математической литературы : ФИЗМАТЛИТ, 2002 г.
- [9] Алферов Д.Ф., Башмаков Ю.А., Бессонов Е.Г. К теории ондуляторного излучения / Д.Ф. Алферов, Ю.А. Башмаков, Е.Г. Бессонов // ЖТФ. — 1973. — Т. 43, № 10. — С. 1336.
- [10] Алферов Д.Ф., Башмаков Ю.А., Черенков П.А. Излучение релятивистских электронов в магнитном ондуляторе / Д.Ф. Алферов, Ю.А. Башмаков, П.А. Черенков // УФН. — 1989. — Т. 157, № 3. — С. 389.

- [11] Bessonov E.G. PhIAS Preprint / E.G. Bessonov // Phys. Inst. Acad. Sci. USSR. — 1982. — no. 18.
- [12] Багров В.Г., Тернов И.М., Холомай Б.В. Излучение релятивистских электронов в продольном периодическом электрическом поле кристалла / В.Г. Багров, И.М. Тернов, Б.В. Холомай // ТФ СО АН СССР. — 1987. — № 13.
- [13] Винокуров Н.А., Левичев Е.Б. Ондуляторы и вигглеры для генерации излучения и других применений / Н.А. Винокуров, Е.Б. Левичев // УФН. — 2015. — Т. 58.
- [14] Арцимович Л.А., Померанчук И.Я. Излучение быстрых электронов в магнитном поле / Л.А. Арцимович, И.Я. Померанчук // ЖЭТФ. — 1946. — Т. 16. — С. 379.
- [15] Гинзбург Н.С., Кочаровская Е.Р., Сергеев А.С., Фильченков С. Е. Спектр генерации длиноимпульсных лазеров на свободных электронах терагерцового диапазона: квазилинейная теория / Н.С. Гинзбург, Е.Р. Кочаровская, А.С. Сергеев, С.Е. Фильченков // Письма в ЖЭТФ. — 2021. — Т. 113, № 10. — С. 655–660.
- [16] Аржанников А.В., Бак П.А., Белоусов В.И., Гинзбург Н.С. и др. Разработка мощных длинноимпульсных лазеров на свободных электронах субмиллиметрового диапазона на основе ускорительного комплекса ЛИУ / А.В. Аржанников, П.А. Бак, В.И. Белоусов, Н.С. Гинзбург, и др. // Изв. вузов. Радиофизика. — 2021. — Т. 64, № 11. — С. 905–916.
- [17] Гинзбург В.Л. Об излучении микрорадиоволн и их поглощении в воздухе / В.Л. Гинзбург // Изв. АН СССР. Сер. Физ. — 1947. — Т. 11, № 2. — С. 165–181.
- [18] Жуковский К.В., Калитенко А.М. Анализ генерации гармоник в плоских ондуляторах в однопроходных ЛСЭ / К.В. Жуковский, А.М. Калитенко // Известия высших учебных заведений. Физика. — 2019. — Т. 62, № 2. — С. 153–160.
- [19] Motz H., Thon W., Whitehurst R.N. Experiments on Radiation by Fast Electron Beams / H. Motz, W. Thon, R.N. Whitehurst // Journal of Applied Physics. — 2004. — Vol. 24, no. 7. — P. 826–833.

- [20] Madey J.M.J. Stimulated Emission of Bremsstrahlung in a Periodic Magnetic Field / J.M.J. Madey // *Journal of Applied Physics*. — 2003. — Vol. 42, no. 5. — P. 1906–1913.
- [21] Colson W.B. Theory of a free electron laser / W.B. Colson // *Physics Letters A*. — 1976. — Vol. 59, no. 3. — P. 187–190.
- [22] Elias L.R., Fairbank W.M., Madey J.M.J. et al. Observation of Stimulated Emission of Radiation by Relativistic Electrons in a Spatially Periodic Transverse Magnetic Field / L.R. Elias, W.M. Fairbank, J.M.J. Madey et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1976. — Vol. 36. — P. 717.
- [23] Uehara Y., Sasaki W., Saito Sh. et al. High-power argon excimer laser at 126 nm pumped by an electron beam / Y. Uehara, W. Sasaki, Sh. Saito et al. // *Opt. Lett.* — 1984. — Vol. 9, no. 12. — P. 539–541.
- [24] Mancuso A.P., Aquila A., Batchelor L. et al. The Single Particles, Clusters and Biomolecules and Serial Femtosecond Crystallography instrument of the European XFEL: initial installation / A.P. Mancuso, A. Aquila, L. Batchelor et al. // *Journal of Synchrotron Radiation*. — 2019. — Vol. 26, no. 3. — P. 660–676.
- [25] Emma P., Akre R., Arthur J. et al. First lasing and operation of an angstrom-wavelength free-electron laser / P. Emma, R. Akre, J. Arthur et al. // *Nature Photonics*. — 2010. — Vol. 4. — P. 641–647.
- [26] Bajt S.C., Wall M.A. PCT number PCT/US2000/013549. — 2000.
- [27] Bajt S.C., Wall M.A. Patent number EP 1198725A1. — 2002.
- [28] Kondratenko A.M., Saldin E.L. Generation of coherent radiation by a relativistic electron beam in an undulator / A.M. Kondratenko, E.L. Saldin // *Particle Accelerators*. — 1980. — Vol. 10. — P. 207–216.
- [29] Ratner D., Brachmann A., Decker F.J. et al. Second and third harmonic measurements at the linac coherent light source / D. Ratner, A. Brachmann, F.J. Decker et al. // *Phys. Rev. ST Accel. Beams*. — 2011. — Vol. 14. — P. 060701.

- [30] Tremaine A., Wang X.J., Babzien M. et al. Experimental Characterization of Non-linear Harmonic Radiation from a Visible Self-Amplified Spontaneous Emission Free-Electron Laser at Saturation / A. Tremaine, X.J. Wang, M. Babzien et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2002. — May. — Vol. 88. — P. 204801.
- [31] McNeil B. Free-electron lasers: a down-sized design / B. McNeil // *Nature Photonics.* — 2008. — Vol. 2. — P. 522–524.
- [32] Geloni G. Self-Seeded Free-Electron Lasers // *Synchrotron Light Sources and Free-Electron Lasers: Accelerator Physics, Instrumentation and Science Applications* / G. Geloni. — Cham : Springer International Publishing, 2016. — P. 161–193.
- [33] Yu L.-H., Babzien M., Ben-Zvi I. High-gain harmonic-generation free-electron laser / L.-H. Yu, M. Babzien, I. Ben-Zvi // *Science.* — 2000. — Vol. 289. — P. 932.
- [34] Saldin E.L., Schneidmiller E.A., Yurkov M.V. Study of a noise degradation of amplification process in a multistage HGHG FEL / E.L. Saldin, E.A. Schneidmiller, M.V. Yurkov // *Opt. Comm.* — 2002. — Vol. 202. — P. 169–187.
- [35] Shintake T. A compact free-electron laser for generating coherent radiation in the extreme ultraviolet region / T. Shintake // *Nature Photonics.* — 2008. — Vol. 2. — P. 555–559.
- [36] Шевченко О.А., Арбузов В.С., Винокуров Н.А. и др. Новосибирский лазер на свободных электронах: достижения и перспективы / О.А. Шевченко, В.С. Арбузов, Н.А. Винокуров и др. // *Изв. вузов. Радиофизика.* — 2016. — Т. 59, № 8. — С. 671.
- [37] Quattromini M., Artioli M., Di Palma E. et al. Focusing properties of linear undulators / M. Quattromini, M. Artioli, E. Di Palma et al. // *Phys. Rev. ST Accel. Beams.* — 2012. — Vol. 15. — P. 080704.
- [38] Onuki H., Elleaume P. Undulators, wigglers and their applications / H. Onuki, P. Elleaume. — New York : Taylor and Francis, 2003.
- [39] Walker R.P. Interference effects in undulator and wiggler radiation sources / R.P. Walker // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accel-*

- erators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. — 1993. — Vol. 335, no. 1. — P. 328–337.
- [40] Dattoli G. Logistic function and evolution of free-electron-laser oscillators / G. Dattoli // *Journal of Applied Physics*. — 1998. — Vol. 84, no. 5. — P. 2393–2398.
- [41] Dattoli G., Giannessi L., Ottaviani P. L., Ronsivalle C. Semi-analytical model of self-amplified spontaneous-emission free-electron lasers, including diffraction and pulse-propagation effects / G. Dattoli, L. Giannessi, P.L. Ottaviani, C. Ronsivalle // *Journal of Applied Physics*. — 2004. — Vol. 95, no. 6. — P. 3206–3210.
- [42] Zhukovsky K.V. Multicascade X-Ray Free-Electron Laser with Harmonic Multiplier and Two-Frequency Undulator / K.V. Zhukovsky // *Russ Phys J*. — 2018. — Vol. 61. — P. 278–286.
- [43] Zhukovsky K.V. High harmonic generation in the undulators for free electron lasers / K.V. Zhukovsky // *Opt. Comm*. — 2015. — Vol. 353. — P. 35.
- [44] Xie M. Exact and variational solutions of 3D eigenmodes in high gain FELs / M. Xie // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. — 2000. — Vol. 445, no. 1. — P. 59–66.
- [45] Edelen A., Biedron S., Milton S., van der Slot P. Using A Neural Network Control Policy For Rapid Switching Between Beam Parameters in an FEL / A. Edelen, S. Biedron, S. Milton, P. van der Slot // *38th International Free-Electron Laser Conference*. — 2018. — P. WEP031.
- [46] Ren X., Edelen A., Lutman A. et al. Temporal power reconstruction for an x-ray free-electron laser using convolutional neural networks / X. Ren, A. Edelen, A. Lutman et al. // *Phys. Rev. Accel. Beams*. — 2020. — Vol. 23. — P. 040701.
- [47] Breckwoldt N., Son S.-K., Mazza T. et al. Machine-learning calibration of intense x-ray free-electron-laser pulses using Bayesian optimization / N. Breckwoldt, S.-K. Son, T. Mazza et al. // *Phys. Rev. Res*. — 2023. — Vol. 5. — P. 023114.

- [48] Kalitenko A.M. Numerical study of the second harmonic generation in FELs / A.M. Kalitenko // *Journal of Synchrotron Radiation*. — 2021. — Vol. 28, no. 3. — P. 681–687.
- [49] Kalitenko A.M. Numerical modeling of even harmonic generation in XFELs with planar and helical undulators / A.M. Kalitenko // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. — 2022. — Vol. 1033. — P. 166718.
- [50] Kalitenko A.M. Studies of self-design taper algorithms for free-electron lasers with planar and helical undulators / A.M. Kalitenko // *Results in Optics*. — 2022. — Vol. 9. — P. 100305.
- [51] Kalitenko A.M. Analysis of the higher-harmonics radiation suppression in tapered free-electron lasers with phase shifters / A.M. Kalitenko // *Europhysics Letters*. — 2023. — Vol. 143, no. 5. — P. 55001.
- [52] Kalitenko A.M. Phenomenological model of a free-electron laser using machine learning / A.M. Kalitenko // *Physica Scripta*. — 2023. — Vol. 98, no. 10. — P. 106003.
- [53] Schmuser P., Dohlus M., Rossbach J., et al. Free-Electron Lasers in the Ultraviolet and X-Ray Regime : Physical Principles, Experimental Results, Technical Realization / P. Schmuser, M. Dohlus, J. Rossbach et al. — Cham : Springer Tracts in Modern Physics, 2014.—231 p. — Vol. 258.
- [54] Kim K., Huang Zh., Lindberg R. Synchrotron Radiation and Free-Electron Lasers: Principles of Coherent X-Ray Generation / K. Kim, Zh. Huang, R. Lindberg. — Cambridge University Press, 2017—284 p.
- [55] Colson W.B. One-body electron dynamics in a free electron laser / W.B. Colson // *Phys. Rev. Lett.* — 1976. — Vol. 59A. — P. 187.
- [56] Goldammer K. Studies of Harmonic Generation in Free Electron Lasers : doctoral dissertation / K. Goldammer. — Berlin. Germany, 2007. — 133 p.

- [57] Huang Zh., Kim K.-J. Review of x-ray free-electron laser theory / Zh. Huang, K.-J. Kim // *Phys. Rev. ST Accel. Beams.* — 2007. — Vol. 10. — P. 034801.
- [58] Reiche S. Numerical Studies for a Single Pass High Gain Free-Electron Laser : doctoral dissertation / S. Reiche. — Hamburg. Germany, 1999. — 182 p.
- [59] Reiche S. GENESIS 1.3: a fully 3D time-dependent FEL simulation code / S. Reiche // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment.* — 1999. — Vol. 429, no. 1. — P. 243–248.
- [60] Fawley W.M. An Informal Manual for GINGER and its post-processor XPLOTGIN. CBP Tech Note-104 1995, LBID-2141, UC-414.
- [61] Saldin E.L., Schneidmiller E.A., Yurkov M.V. FAST: a three-dimensional time-dependent FEL simulation code / E.L. Saldin, E.A. Schneidmiller, M.V. Yurkov // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment.* — 1999. — Vol. 429, no. 1. — P. 233–237.
- [62] Dejus R.J., Shevchenko O.A., Vinokurov N.A. An integral equation based computer code for high-gain free-electron lasers / R.J. Dejus, O.A. Shevchenko, N.A. Vinokurov // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment.* — 1999. — Vol. 429, no. 1. — P. 225–228.
- [63] Tanaka T. *SIMPLEX*: simulator and postprocessor for free-electron laser experiments / T. Tanaka // *Journal of Synchrotron Radiation.* — 2015. — Vol. 22, no. 5. — P. 1319–1326.
- [64] Zeng L., Feng Ch., Wang X. et al. A Super-Fast Free-Electron Laser Simulation Code for Online Optimization / L. Zeng, Ch. Feng, X. Wang // *Photonics.* — 2020. — Vol. 7, no. 4.
- [65] Giannessi L. Simulation codes for high brightness electron beam free-electron laser experiments / L. Giannessi // *Phys. Rev. ST Accel. Beams.* — 2003. — Vol. 6. — P. 114802.

- [66] Bajlekov S.I., Hooker S.M., Bartolini R. Simulating sub-wavelength temporal effects in a seeded FEL driven by laser-accelerated electrons / S.I. Bajlekov, S.M. Hooker, R. Bartolini // In Proceedings of the FEL2009, Liverpool, UK, 23–28 August 2009. — 2009. — P. 119–122.
- [67] Halton J.H. On the efficiency of certain quasi-random sequences of points in evaluating multi-dimensional integrals / J.H. Halton // Numerische Mathematik. — 1960. — Vol. 2. — P. 84.
- [68] Matsumoto M., Nishimura T. Mersenne Twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudorandom number generator / M. Matsumoto, T. Nishimura // ACM Trans. on Modeling and Computer Simulation. — 1998. — Vol. 8, no. 1. — P. 3–30.
- [69] Penman C., McNeil B.W.J. Simulation of input electron noise in the free-electron laser / C. Penman, B.W.J. McNeil // Opt. Comm. — 1992. — Vol. 90, no. 1. — P. 82–84.
- [70] Fawley W.M. Algorithm for loading shot noise microbunching in multidimensional, free-electron laser simulation codes / W.M. Fawley // Phys. Rev. ST Accel. Beams. — 2002. — Vol. 5. — P. 070701.
- [71] Giannessi L. FEL-CAD Library, <http://www.perseo.enea.it> [Электронный ресурс] / L. Giannessi.
- [72] Prakash B., Huse V., Gehlot M. et al. Analysis of spectral properties of harmonic undulator radiation of an electromagnet undulator / B. Prakash, V. Huse, M. Gehlot et al. // Optik. — 2016. — Vol. 127, no. 4. — P. 1639–1643.
- [73] Джексон Д.Д. Классическая электродинамика / Д.Д. Джексон. — Москва : Мир, 1965.—702 с.
- [74] Geloni G., Saldin E., Schneidmiller E., Yurkov M. Exact solution for second harmonic generation in XFELs / G. Geloni, E. Saldin, E. Schneidmiller, M. Yurkov // Opt. Comm. — 2007. — Vol. 271, no. 1. — P. 207–218.

- [75] Reiche S., Musumeci P., Goldammer K. RECENT UPGRADE TO THE FREE-ELECTRON LASER CODE GENESIS 1.3 / S. Reiche, P. Musumeci, K. Goldammer // Proceedings of PAC07 / IEEE. — Albuquerque, New Mexico, USA, 2007. — P. 1269–1271.
- [76] Biedron S.G., Dejus R.J., Huang Z. et al. Measurements of nonlinear harmonic generation at the Advanced Photon Source's SASE FEL / S.G. Biedron, R.J. Dejus, Z. Huang et al. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. — 2002. — Vol. 483, no. 1. — P. 94–100.
- [77] Ackermann S., Azima A., Bajt S. et al. Generation of Coherent 19- and 38-nm Radiation at a Free-Electron Laser Directly Seeded at 38 nm / S. Ackermann, A. Azima, S. Bajt et al. // Phys. Rev. Lett. — 2013. — Vol. 111. — P. 114801.
- [78] Vinokurov N.A., Levichev E.B. Undulators and wigglers for the production of radiation and other applications / N.A. Vinokurov, E.B. Levichev // Phys.Usp. — 2015. — Vol. 58, no. 9. — P. 917.
- [79] CONCEPTUAL DESIGN REPORT, Scientific Instrument SQS / M. Meyer, 2011.
- [80] Hemsing E., Dunning M., Hast C., Raubenheimer T., Dao X. First Characterization of Coherent Optical Vortices from Harmonic Undulator Radiation / E. Hemsing, M. Dunning, C. Hast, T. Raubenheimer, X. Dao // Phys. Rev. Lett. — 2014. — Vol. 113. — P. 134803.
- [81] Калитенко А.М., Жуковский К.В. Излучение эллиптических ондуляторов с гармониками магнитного поля / К.В. Жуковский, А.М. Калитенко // ЖЭТФ. — 2020. — Т. 157. — С. 327.
- [82] Zhukovsky K.V. Comparative Theoretical Analysis of Harmonic Generation in Free-Electron Lasers with Different Electron Beam Parameters / K.V. Zhukovsky // Russ Phys J. — 2023. — Vol. 65. — P. 1451–1460.
- [83] Kai L., Jiawei Y., Chao F., Meng Zh., Haixiao D. High brightness fully coherent x-ray amplifier seeded by a free-electron laser oscillator / L. Kai, Y. Jiawei, F.

- Chao, Zh. Meng, D. Haixiao // *Phys. Rev. Accel. Beams.* — 2018. — Vol. 21. — P. 040702.
- [84] Lv H., Yan Y., Wang H. The data storage system for SHINE / H. Lv, Y. Yan, H. Wang // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment.* — 2021. — Vol. 1002. — P. 165285.
- [85] Nakajima K., Kameshima T., Hatsui T. Development of a precise evaluation technique for the pre-sampled point spread function of X-ray imaging detectors with sub-micrometer resolution / K. Nakajima, T. Kameshima, T. Hatsui // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment.* — 2021. — Vol. 1003. — P. 165303.
- [86] Schneidmiller E., Dreimann M., Kuhlmann M. et al. Generation of Ultrashort Pulses in XUV and X-ray FELs via an Excessive Reverse Undulator Taper / E. Schneidmiller, M. Dreimann, M. Kuhlmann et al. // *Photonics.* — 2023. — Vol. 10, no. 6.
- [87] Orzechowski T.J., Anderson B.R., Clark J.C. et al. High-Efficiency Extraction of Microwave Radiation from a Tapered-Wiggler Free-Electron Laser / T.J. Orzechowski, B.R. Anderson, J.C. Clark et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1986. — Vol. 57. — P. 2172–2175.
- [88] DESY Report, 16-168. [Электронный ресурс] / A. Mak, F. Curbis, B. Faatz, S. Werin, 2016. <https://lup.lub.lu.se/record/b4dc86d4-e1a7-4bfa-86db-2b780ab84b7e>.
- [89] Gaffney K.J., Chapman H.N. Imaging Atomic Structure and Dynamics with Ultrafast X-ray Scattering / K.J Gaffney, H.N. Chapman // *Science.* — 2007. — Vol. 316, no. 5830. — P. 1444–1448.
- [90] Jiao Y., Wu J., Cai Y. et al. Modeling and multidimensional optimization of a tapered free electron laser / Y. Jiao, J. Wu, Y. Cai et al. // *Phys. Rev. ST Accel. Beams.* — 2012. — Vol. 15. — P. 050704.

- [91] Fawley W.M., Huang Zh., Kim K.-J., Vinokurov N.A. Tapered undulators for SASE FELs / W.M. Fawley, Zh. Huang, K.-J. Kim, N.A. Vinokurov // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. — 2002. — Vol. 483, no. 1. — P. 537–541.
- [92] Kroll N., Morton P., Rosenbluth M. Free-electron lasers with variable parameter wigglers / N. Kroll, P. Morton, M. Rosenbluth // IEEE Journal of Quantum Electronics. — 1981. — Vol. 17, no. 8. — P. 1436–1468.
- [93] Mak A., Curbis F., Werin S. STUDIES OF UNDULATOR TAPERING FOR THE CLARA FEL / A. Mak, F. Curbis, S. Werin // Proceedings of the 5th International Particle Accelerator Conference, Dresden (JACoW, Geneva, 2014). — 2014. — P. 2909–2911.
- [94] Mak A., Curbis F., Werin S. Model-based optimization of tapered free-electron lasers / A. Mak, F. Curbis, S. Werin // Phys. Rev. ST Accel. Beams. — 2015. — Vol. 18. — P. 040702.
- [95] Emma C., Fang K., Wu J., Pellegrini C. High efficiency, multiterawatt x-ray free electron lasers / C. Emma, K. Fang, J. Wu, C. Pellegrini // Phys. Rev. Accel. Beams. — 2016. — Vol. 19. — P. 020705.
- [96] Yang H., Kim G., Kang H.-S. First saturation of 14.5 keV free electron laser at PAL-XFEL / H. Yang, G. Kim, H.-S. Kang // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. — 2018. — Vol. 911. — P. 51–54.
- [97] Martin I.P.S., Bartolini R., Dunning D., Thompson N. STUDIES OF UNDULATOR TAPERING FOR THE CLARA FEL / I.P.S. Martin, R. Bartolini, D. Dunning, N. Thompson // in Proceedings of FEL2015, Daejeon, Korea. — 2015. — P. 412–416.
- [98] Margaritondo G., Ribic P.R. A simplified description of x-ray free-electron lasers / G. Margaritondo, P.R. Ribic // Journal of Synchrotron Radiation. — 2008. — Vol. 18. — P. 101–108.

- [99] Wu J., Huang X., Raubenheimer T.O. et al. RECENT ON-LINE TAPER OPTIMIZATION ON LCLS / J. Wu, X. Huang, T.O. Raubenheimer et al. // in Proceedings of the International Free Electron Laser Conference(FEL'17), Santa Fe, New Mexico, No.38 (JACoW,Geneva, Switzerland, 2018). — 2017. — P. 229–234.
- [100] Kajzar F., Messier J. Third-harmonic generation in liquids / F. Kajzar, J. Messier // Phys. Rev. A. — 1985. — Vol. 32. — P. 2352–2363.
- [101] Kojima T., Konno S., Fujikawa Sh. et al. 20-W ultraviolet-beam generation by fourth-harmonic generation of an all-solid-state laser / T. Kojima, S. Konno, Sh. Fujikawa et al. // Opt. Lett. — 2000. — Vol. 25, no. 1. — P. 58–60.
- [102] Ratner D. Chao A. Huang Zh. ENHANCING FEL POWER WITH PHASE SHIFTERS // D. Ratner, A. Chao, Zh. Huang, Proceedings of FEL 2007, Novosibirsk, Russia. — 2007. — P. 69–72.
- [103] Alexandru A., Bedaque P.F., Lamm H., Lawrence S. Deep learning beyond Lefschetz thimbles / A. Alexandru, P.F. Bedaque, H. Lamm, S. Lawrence // Phys. Rev. D. — 2017. — Vol. 96. — P. 094505.
- [104] Amrouche S., Basara L., Calafiura P. et al. The Tracking Machine Learning Challenge: Accuracy Phase / S. Amrouche, L. Basara, P. Calafiura et al. // The NeurIPS '18 Competition. — Cham : Springer International Publishing, 2020. — P. 231–264.
- [105] Michelucci U., Venturini F. Multi-Task Learning for Multi-Dimensional Regression: Application to Luminescence Sensing / U. Michelucci, F. Venturini // Applied Sciences. — 2019. — Vol. 9, no. 22.
- [106] Thrun S. Is Learning The n-th Thing Any Easier Than Learning The First? // Advances in Neural Information Processing Systems / S. Thrun; Ed. by D. Touretzky, M.C. Mozer, M. Hasselmo. — Vol. 8. — MIT Press, 1995.
- [107] Biedron S.G., Chae Y.C., Dejus R.J. et al. Multi-dimensional free-electron laser simulation codes: a comparison study / S.G. Biedron, Y.C. Chae, R.J. Dejus et

- al. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. — 2000. — Vol. 445, no. 1. — P. 110–115.
- [108] Alesini D., Bertolucci S., Biagini M.E. et al. Status of the SPARC project / D. Alesini, S. Bertolucci, M.E. Biagini et al. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. — 2004. — Vol. 528, no. 1. — P. 586–590.
- [109] Kleinman D.A. Nonlinear Dielectric Polarization in Optical Media / D.A. Kleinman // Phys. Rev. Lett. — 1962. — Vol. 126, no. 6. — P. 1977–1979.
- [110] Boursier E., Segonds P., Debray J. et al. Angle noncritical phase-matched second-harmonic generation in the monoclinic crystal BaGa₄Se₇ / E. Boursier, P. Segonds, J. Debray et al. // Opt. Lett. — 2015. — Vol. 40, no. 20. — P. 4591–4594.