

任意形状束流相空间变换的样条函数表述

茅乃丰 李增海

(中国原子能科学研究院,北京)

摘 要

为了研究具有任意形状相空间的束流的传输,本文提出了束流相空间变换的样条函数表述.利用三次样条函数拟合相空间边界,将相空间变换化为样条函数的变换,并进而计算束流包络.给出了具有任意形状相空间的束流传输的实例.

一、引 言

在加速器束流输运系统、质谱计、带电粒子谱仪、离子注入机等束流传输理论中,通常都假定束流相空间为椭球^[1].但测量结果表明^[2],实际相空间在任一二维子空间上的投影往往不是椭圆,而是相当复杂的图形.近年来,已有一些作者^[3,4]对非椭球相空间(如多边形相空间、凸闭相空间等)束流的传输进行了研究.值得注意的是,他们所讨论的相空间都是以某种解析函数表示的,而实测相空间却是一系列离散值,难于用解析函数表示.为此本文提出了束流相空间的样条函数表述,用以讨论具有任意形状实测相空间的变换及束包络.

文章描述了相空间边界的样条函数拟合过程,推导了表述相空间变换的样条函数变换表达式,给出了具有任意形状相空间的束流包络的计算方法.最后还给出了典型实例.

二、相空间边界的样条函数表述

束流包络完全由束流相空间的边界在相空间中的变换所决定.设给定束流在某一二维相空间,如 (x, x') 相空间中初始相空间边界上的一组有序点列 $\{p_j(x_j(0), x'_j(0))\}$ ($j = 1, 2, \dots, n$) (图1).一般说,这 n 个点所构成的边界的形状是任意的.为了研究这类任意形状相空间的变换,我们利用样条函数来拟合其边界.在样条函数方法中,上述有序点列通称为型值点.必须指出,由于相空间边界是封闭曲线,具有多值性和存在垂直切线的特点,因此一般的样条函数并不适用.解决上述问题的途径之一是把通常在固定坐标 (x, x') 下的样条推广到局部坐标下的样条^[5].为此首先要建立局部坐标系,它们以相邻型值点 p_{j-1} 和 p_j 间的弦线 $\overline{p_{j-1}p_j}$ 为横坐标 u_j ,与之垂直的直线为纵坐标 v_j (图

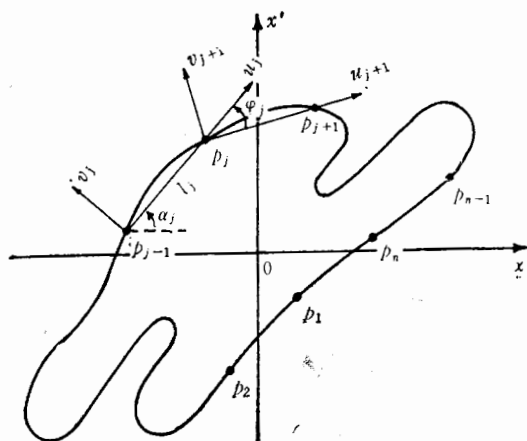


图1 任意形状相空间及坐标系

1). 然后, 在每个局部坐标系中建立曲线方程, 使曲线在型值点上具有一定的连续性, 即得局部坐标下的样条函数.

我们采用局部三次样条来拟合相空间边界, 它满足: (1) 在每个局部坐标系中, 曲线是以 u_j 为自变量的三次多项式, 且通过弦线 $\overline{p_{i-1}p_i}$ 的两个端点; (2) 整条曲线以及曲线上的切线和曲率均连续. 若进一步利用由曲线封闭所决定的周期性端点条件, 即可求出局部坐标下的三次样条函数.

设弦线 $\overline{p_{i-1}p_i}$ 长为 l_j , 局部坐标系 (u_j, v_j) 相对于相邻局部坐标系 (u_{j+1}, v_{j+1}) 的坐标转角为 ϕ_j , 则在 (u_j, v_j) 局部坐标系中, 曲线的三次样条函数可写为

$$v_j(u_j) = a_{0j} + a_{1j}u_j + a_{2j}u_j^2 + a_{3j}u_j^3, \quad (j = 1, 2, \dots, n; 0 \leq u_j < l_j) \quad (1)$$

其中

$$\begin{aligned} a_{0j} &= 0, \\ a_{1j} &= m_{j-1}, \\ a_{2j} &= \frac{-1}{l_j} \left(2m_{j-1} + \frac{m_j - \operatorname{tg} \phi_j}{1 + m_j \operatorname{tg} \phi_j} \right), \\ a_{3j} &= \frac{1}{l_j^2} \left(m_{j-1} + \frac{m_j - \operatorname{tg} \phi_j}{1 + m_j \operatorname{tg} \phi_j} \right), \end{aligned} \quad (2)$$

而 $m_j (j = 1, 2, \dots, n)$ 为曲线在局部坐标系 (u_{j+1}, v_{j+1}) 中, 在型值点 p_j 处的一阶导数, 满足下述非线性方程组

$$\begin{aligned} \lambda_j m_{j-1} + 2m_j + \mu_j m_{j+1} &= C_j + F_j, \\ (j = 1, 2, \dots, n) \end{aligned} \quad (3)$$

其中

$$\begin{aligned} \lambda_j &= \frac{l_{j+1}}{l_j + l_{j+1}}, & \mu_j &= \frac{l_j}{l_j + l_{j+1}} \\ C_j &= 2\lambda_j \operatorname{tg} \phi_j + \mu_j \operatorname{tg} \phi_{j+1}, \end{aligned}$$

$$F_j = F_{1j} + F_{2j} + F_{3j}$$

$$F_{1j} = \frac{\mu_j m_{j+1} (m_{j+1} - \operatorname{tg} \phi_{j+1}) \operatorname{tg} \phi_{j+1}}{1 + m_{j+1} \operatorname{tg} \phi_{j+1}},$$

$$F_{2j} = \frac{2\lambda_j m_j (m_j - \operatorname{tg} \phi_j) \operatorname{tg} \phi_j}{1 + m_j \operatorname{tg} \phi_j} (\cos \phi_j + m_j \sin \phi_j)^3,$$

$$F_{3j} = \lambda_j [m_{j-1} + 2(m_j - \operatorname{tg} \phi_j)] [1 - (\cos \phi_j + m_j \sin \phi_j)^3].$$

由于端点条件的周期性, 方程中各量随下标做周期循环, 周期为 n , 例如 $m_0 = m_n$, $m_{n+1} = m_1$ 等. 非线性方程组 (3) 的右端项包括两部分: 线性项 C_j 和非线性项 F_j . F_j 与转角 ϕ_j 有关, 当 ϕ_j 充分小时, F_j 与 C_j 之比是关于 ϕ_j 的二阶无穷小. 于是, 方程 (3) 可以采用迭代法, 如松弛迭代法求解. 将解得的 m_j 代入 (2) 式, 即得局部坐标下三次样条函数的系数.

通过坐标变换, 可进一步得到相空间边界曲线在固定坐标系 (x, x') 中以局部坐标 u_j 为参数的三次样条函数 x 和 x' .

$$x(0) = A_{0j}(0) + A_{1j}(0)u_j + A_{2j}(0)u_j^2 + A_{3j}(0)u_j^3,$$

$$x'(0) = A'_{0j}(0) + A'_{1j}(0)u_j + A'_{2j}(0)u_j^2 + A'_{3j}(0)u_j^3,$$

$$(j = 1, 2, \dots, n; 0 \leq u_j < l_j) \quad (4)$$

其中

$$A_{0j}(0) = x_{j-1}(0), \quad A'_{0j}(0) = x'_{j-1}(0)$$

$$A_{1j}(0) = \cos \alpha_j - a_{1j} \sin \alpha_j, \quad A'_{1j}(0) = \sin \alpha_j + a_{1j} \cos \alpha_j$$

$$A_{2j}(0) = -a_{2j} \sin \alpha_j, \quad A'_{2j}(0) = a_{2j} \cos \alpha_j$$

$$A_{3j}(0) = -a_{3j} \sin \alpha_j, \quad A'_{3j}(0) = a_{3j} \cos \alpha_j$$

而 α_j 是 u_j 轴与 x 轴之间的夹角; $x_0(0) = x_n(0)$, $x'_0(0) = x'_n(0)$. 此外, 为了表明这里所讨论的是初始相空间, 所以把 x 和 x' 记为 $x(0)$ 和 $x'(0)$, 把 A_{ij} 和 A'_{ij} 记为 $A_{ij}(0)$ 和 $A'_{ij}(0)$, $i = 0, 1, 2, 3$.

三、相空间变换的样条函数表述

在初始相空间边界用样条函数表示后, 束流传输过程中相空间的变换可以化为样条函数的变换. 将 (4) 式写成矩阵形式

$$x(0) = [1, u_j^2] \begin{bmatrix} A_{0j}(0) & A_{1j}(0) \\ A_{2j}(0) & A_{3j}(0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ u_j \end{bmatrix} = [1, u_j^2] S_j(0) \begin{bmatrix} 1 \\ u_j \end{bmatrix},$$

$$x'(0) = [1, u_j^2] \begin{bmatrix} A'_{0j}(0) & A'_{1j}(0) \\ A'_{2j}(0) & A'_{3j}(0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ u_j \end{bmatrix} = [1, u_j^2] S'_j(0) \begin{bmatrix} 1 \\ u_j \end{bmatrix},$$

$$(j = 1, 2, \dots, n; 0 \leq u_j < l_j) \quad (5)$$

其中 $S_j = \begin{bmatrix} A_{0j}(0) & A_{1j}(0) \\ A_{2j}(0) & A_{3j}(0) \end{bmatrix}$ 和 $S'_j = \begin{bmatrix} A'_{0j}(0) & A'_{1j}(0) \\ A'_{2j}(0) & A'_{3j}(0) \end{bmatrix}$ 称为初始相空间样条函数的系数矩阵.

当束通过传输距离为 z , 传输矩阵为

$$R = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{bmatrix}, \quad (6)$$

的输运段后,相空间变换为

$$\begin{bmatrix} x(z) \\ x'(z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x(0) \\ x'(0) \end{bmatrix}. \quad (7)$$

将(5)式代入(7)式,经过整理可得

$$\begin{aligned} x(z) &= [1, u_j^2] S_j(z) \begin{bmatrix} 1 \\ u_j \end{bmatrix}, \\ x'(z) &= [1, u_j^2] S'_j(z) \begin{bmatrix} 1 \\ u_j \end{bmatrix}, \\ (j &= 1, 2, \dots, n; 0 \leq u_j < l_j) \end{aligned} \quad (8)$$

其中

$$\begin{aligned} S_j(z) &= \begin{bmatrix} A_{0j}(z) & A_{1j}(z) \\ A_{2j}(z) & A_{3j}(z) \end{bmatrix} = R_{11} S_j(0) + R_{12} S'_j(0), \\ S'_j(z) &= \begin{bmatrix} A'_{0j}(z) & A'_{1j}(z) \\ A'_{2j}(z) & A'_{3j}(z) \end{bmatrix} = R_{21} S_j(0) + R_{22} S'_j(0), \end{aligned} \quad (9)$$

或写成一次超矩阵形式

$$\begin{bmatrix} S_j(z) \\ S'_j(z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_j(0) \\ S'_j(0) \end{bmatrix}. \quad (10)$$

(9)式或(10)式即样条函数系数矩阵的变换表达式,它们把束传输过程中相空间的变换化成了样条函数的变换.利用(8)–(10)式可以方便地计算相空间的变换.

四、束流包络

由于相空间的任意性,需要分别讨论束流两侧的包络方程.利用样条函数系数矩阵,束流左右两侧的包络可表示为

$$\begin{aligned} x_l(z) &= \min_{0 \leq u_j < l_j} \left([1, u_j^2] S_j(z) \begin{bmatrix} 1 \\ u_j \end{bmatrix} \right), \\ (j &= 1, 2, \dots, n) \\ x_r(z) &= \max_{0 \leq u_j < l_j} \left([1, u_j^2] S_j(z) \begin{bmatrix} 1 \\ u_j \end{bmatrix} \right), \\ (j &= 1, 2, \dots, n) \end{aligned} \quad (11)$$

需要指出,在 (x, x') 相空间边界曲线上 x 的极值一般都在两个以上,它们都满足极值条件 $\frac{dx}{dx'} = 0$.设在第 j 个局部坐标系中, $0 \leq u_j < l_j$ 范围内, x 有极值,则由(8)、(9)式

不难求出以 u_j 为参变量的极值条件为

$$\frac{dx(z)}{du_j} = 3A_{3j}(z)u_j^2 + 2A_{2j}(z)u_j + A_{1j}(z) = 0,$$

$$(j = 1, 2, \dots, n) \quad (12)$$

设由方程(12)一共解得 k 个极值点 $U_i (i = 1, 2, \dots, k)$, 则包络方程(11)就简化为

$$x_l(z) = \min_{i=1,2,\dots,k} \left([1, U_i^2] S_i(z) \begin{bmatrix} 1 \\ U_i \end{bmatrix} \right),$$

$$x_r(z) = \max_{i=1,2,\dots,k} \left([1, U_i^2] S_i(z) \begin{bmatrix} 1 \\ U_i \end{bmatrix} \right), \quad (13)$$

如果束流相空间是心对称的, 则 $x_l(z) = -x_r(z)$.

五、计算机程序和应用实例

根据上述任意形状相空间束流传输的样条函数方法, 编写了相应的计算机程序 TAPSC (Transformation of Arbitrary Phase Space Contours).

程序设置了任意形状相空间、椭圆相空间和多边形相空间等多个入口. 对于椭圆相空间, 由于是规则形状相空间, 只要求输入椭圆的长、短轴及其中某一轴对坐标轴 x 的转角, 然后由程序自动生成椭圆边界上的型值点. 多边形相空间是任意形状相空间的一个特例, 这时三次样条退化为一次样条.

TAPSC 程序既能进行与束在水平方向运动有关的 (x, x') 相空间的变换, 也能进行与束在垂直方向运动有关的 (y, y') 相空间的变换.

在 TAPSC 程序中组成束流传输系统的元件包括了 TRANSPORT 程序^[6]中的全部一级磁元件.

利用该程序进行了一系列数值实验, 结果是满意的. 例如, 对于椭圆形初始相空间束流在双聚焦质谱计中的传输问题, 利用本程序(样条函数方法, 取 $n = 16$)得到的束流包

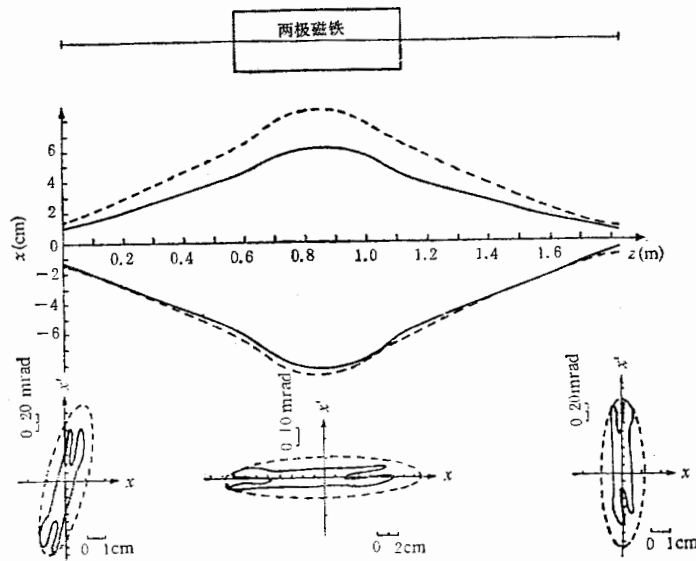


图 2 双聚焦磁分析系统中的束流包络和相空间变换
实线为任意形状相空间; 虚线为外接椭圆相空间.

络与利用 TRANSPORT 程序(传统的 σ 矩阵方法)的结果吻合得非常好, 相对偏差小于 1×10^{-4} . 在 CYBER-170/825 机上的计算时间前者为 2.96 秒, 后者为 2.51 秒.

图 2 给出了初始相空间形状极为复杂的束流在通过一磁分析器时的水平方向包络, 以及在几个位置上的相空间图形(实线). 图中同时给出了以实际相空间的心对称外接椭圆为初始相空间的束流的包络及相应的相空间图形(虚线), 以资比较. 心对称外接椭圆是 σ 矩阵方法不得不采取的简化相空间.

六、结 束 语

本文提出的束流相空间的样条函数表述能够逼真地描写实际相空间的变换, 精确地计算束流的包络. 这种方法为带电粒子光学系统的优化设计提供了一个新的手段, 而且容易程序化. 和传统的 σ 矩阵方法相比, 样条函数方法所要增加的计算机时间却很有限.

感谢谢羲、陈银宝同志热情和有意义的讨论.

参 考 文 献

- [1] A. P. Banford, *The Transport of Charged Particle Beams*, London, E. & F N. Spon Limited, 1966.
- [2] C. Lejeune, in "Applied Charged Particle Optics" (A. Septier ed.), Part C, Academic Press, New York, 1983, 207.
- [3] E. V. Shpak, *Nucl. Instr. and Meth.*, 213(1983), 171.
- [4] Chen Yinbao and Xie Xi, *Nucl. Instr. and Meth.*, 224(1984), 27.
- [5] 孙家昶, 样条函数与计算几何, 科学出版社, 北京, 1982, 240—260.
- [6] K. L. Brown, SLAC-91, 1977.

SPLINE FUNCTION REPRESENTATION FOR TRANSFORMATION OF PHASE SPACE WITH ARBITRARY CONTOURS

MAO NAIFENG LI ZENGHAI

(Institute of Atomic Energy, P. O. Box 275, Beijing)

ABSTRACT

In order to study the transport of beams with arbitrary phase space contours, the spline function representation of phase space contours is proposed in this paper. Having fitted the phase space contours with spline functions, phase space transformations are reduced to spline function transformations, and the envelopes of beams can be expressed by spline functions. Some typical examples are presented to illustrate the usefulness of this method.