

# 基于PIC方法的二维束流动力学模拟程序 及其初步应用\*

杨建俊<sup>1,2;1)</sup> 张天爵<sup>1</sup> 安世忠<sup>1</sup> 贾先禄<sup>1</sup> 林郁正<sup>2</sup>

1 (中国原子能科学研究院 北京 102413)

2 (清华大学工程物理系 北京 100084)

**摘要** 为了深入研究强流负氢束在强流质子回旋加速器CYCIAE-100轴向注入线中的传输,利用split-operator方法分解外场和束流自身的空间电荷场的作用. 对外场利用单粒子跟踪技术,采用一阶线性近似;对空间电荷场采用PIC方法,利用快速傅里叶变换求解Poisson方程. 用FORTRAN95语言开发了一个基于面向对象技术的二维宏粒子传输计算程序CYCPIC2D,本程序可以计算任意分布的强流束在输运线上的传输. 最后给出了对CYCIAE-100注入线的模拟计算结果,并和程序ORBIT, TRACE 3-D的结果进行比对验证,结果表明:空间电荷效应在此注入线上有较大的影响,而且3个程序计算的不同中性化的结果基本上一致;束流强度达到几十毫安时,基于PIC方法的两个程序CYCPIC2D和ORBIT的计算结果完全吻合,而线性近似程序TRACE 3-D有明显差异.

**关键词** 束流动力学 空间电荷效应 PIC方法 split-operator方法 回旋加速器轴向注入线

## 1 引言

在现代加速器的发展中,强流是一个重要的研究方向. 随着带电粒子束流强度的增大,束流内部的空间电荷力变得越来越重要了,而传统的利用几何模型处理空间电荷效应的方法无法提供所需要的精度. 随着加速器束流动力学的深入发展和计算机运算能力的迅速提升,宏粒子准确模拟方法已成为研究加速器中带电粒子束行为特征的重要手段. 在宏粒子模拟中,关键的技术是对空间电荷效应的准确计算. PP (Particle-Particle)方法和PIC (Particle-In-Cell)是两种广泛采用的求解空间电荷效应的方法<sup>[1]</sup>. PP方法中,每个宏粒子感受到的力由它与其余的每个宏粒子的力叠加得到,这种方法计算量大,数据存储量大. 在PIC方法中,先将所有宏粒子电荷分配到场网格节点上,然后求解Poisson方程得到场网格节点上的场强,再利用插值的方法求得宏粒子感受到的空间电荷力. 然后把空间电荷力叠加到外场力上,再对束流进行跟

踪. PIC方法在强流束流动力学计算中有着广泛的应用<sup>[2-4]</sup>.

中国原子能科学研究院在建中的100MeV强流质子回旋加速器CYCIAE-100是串行加速器升级工程的一个重要部分,用于产生放射性核素等相关基础和应用科学研究. 本文介绍一个基于PIC方法的二维宏粒子模拟程序CYCPIC2D,并针对CYCIAE-100的轴向直流注入线进行了计算,并且与美国ORNL的程序ORBIT<sup>[2]</sup>和LANL的程序TRACE 3-D<sup>[5]</sup>所得到的结果进行了比对.

## 2 理论和算法介绍

### 2.1 Poisson方程的求解

束流产生的电场力通过在束流静止坐标系下求解Poisson方程来得到,然后通过洛伦兹变换得到实验室坐标系下的自电场和自磁场. 在多数情况下,束流尺寸远小于管道内径,可以忽略管道壁电荷作用,看作

2006-11-10 收稿

\* 国家自然科学基金(10125518)资助

1) E-mail: Yangjianjun00@mails.tsinghua.edu.cn

开放边界. 利用格林函数法快速求解束流坐标系下的 Poisson 方程. 二维自由空间中的格林函数:

$$G(x, x', y, y') = -\frac{1}{2} \ln[(x-x')^2 + (y-y')^2], \quad (1)$$

其中  $(x, y)$  为场点坐标,  $(x', y')$  为源点坐标. Poisson 方程一般形式的解为

$$\phi(x, y) = \frac{1}{2\pi\epsilon_0} \int G(x, x', y, y') \rho(x', y') dx' dy'. \quad (2)$$

假设在自由二维空间中有一个长方形区域, 在横向和纵向的  $N_x$  和  $N_y$  个节点处放置不同电量的点电荷,  $\Delta x$  和  $\Delta y$  分别为  $x$  和  $y$  方向的节点间隔, 则可以得到任意节点的电势.

$$\phi_D(x_i, y_j) = \frac{\Delta x \Delta y}{2\pi\epsilon_0} \sum_{m=1}^{N_x} \sum_{n=1}^{N_y} G_D(x_i, x_m, y_j, y_n) \times \rho_D(x_m, y_n), \quad (3)$$

其中, 对于奇异值点 ( $i=m, j=n$ ), 格林函数值取为 1. 利用卷积的快速傅里叶变换 (FFT) 算法可以迅速求解得到  $\phi(x, y)$ , 并由  $\mathbf{E} = -\nabla\phi$  得到节点的电场强度. 为了去除 FFT 变换固有的周期性特点, 满足开放边界条件, 利用“Hockney Trick”, 将计算域扩展为  $2N_x \times 2N_y$ , 格林函数和电荷密度也需要扩展到其余  $3N_x N_y$  个节点上<sup>[1]</sup>. 计算得到  $\phi_D$  后, 取左下角的实际物理场域  $N_x \times N_y$  的值即为空间电荷电势.

求解空间电荷力的具体步骤为:

1) 根据当前位置的束流分布范围和宏粒子总数, 确定网格尺寸参数.

2) 利用二维线性加权 CIC (Cloud-In-Cell) 电荷分配策略将所有粒子电荷密度  $\rho_i$  分配到邻近的 4 个网格点上, 得到  $\rho_D$ .

3) 对网格上的  $\rho_D$  和格林函数  $G_D$  作二维的 FFT, 得到  $\hat{\rho}_D$  和  $\hat{G}_D$ .

4) 求得网格上的  $\hat{\phi}_D$ .

5) 对  $\hat{\phi}_D$  作二维的 IFFT, 得到网格节点上的  $\phi_D$ , 取左下角区域值.

6) 利用数值微分方法计算  $\mathbf{E}_D = -\nabla\phi_D$ .

7) 利用和分配电荷量同样的策略将电场插值到每一个粒子所在的位置, 得到每个粒子位置处的电场强度  $\mathbf{E}_i$ , 进而得到空间电荷力  $\mathbf{F}_i = q\mathbf{E}_i$ .

这种算法的好处在于计算效率很高, 将  $N$  阶矩阵计算量从  $O(N^2)$  降到  $O(N \log_2 N)$ , 而且容易实现算法的并行化<sup>[6]</sup>.

## 2.2 split-operator 积分方法

电磁场中带电粒子的哈密顿量在直角坐标下的一

般表达式如下:

$$H = \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2} + q\phi, \quad (4)$$

其中  $m_0$ ,  $q$ ,  $\mathbf{p}$  分别为粒子静止质量、电荷量和动量,  $\mathbf{A}$  和  $\phi$  分别为粒子感受到的矢量势和标量势.

以下讨论二维情况, 即研究无限长束流的横向束流动力学问题. 正则变量  $\xi(x, p_x, y, p_y)$  从初始位置到末了位置的变化由哈密顿量  $H$  所对应的辛映射 (symplectic mapping)  $\mathcal{M}$  决定:

$$\xi_{\text{end}}(x, p_x, y, p_y) = \mathcal{M} \xi_{\text{start}}(x, p_x, y, p_y). \quad (5)$$

一般地, 对 (4) 式进行 Taylor 展开, 然后可以写成下面两部分之和:

$$H = H_{\text{ext}} + H_{\text{self}}, \quad (6)$$

其中,  $H_{\text{ext}}$  是外部场对应的哈密顿量, 对应的辛映射为  $\mathcal{M}_{\text{ext}}$ ,  $H_{\text{self}}$  是空间电荷场对应的哈密顿量, 对应的辛映射为  $\mathcal{M}_{\text{self}}$ , 由于空间电荷效应只跟粒子空间坐标位置有关, 由正则方程可知,  $\mathcal{M}_{\text{self}}$  只改变粒子动量. 这样就可以利用 symplectic split-operator 方法来计算<sup>[7]</sup>. 单步二阶精度的算法由下式给出:

$$\mathcal{M}(\tau) = \mathcal{M}_{\text{ext}}(\tau/2) \cdot \mathcal{M}_{\text{self}}(\tau) \cdot \mathcal{M}_{\text{ext}}(\tau/2) + O(\tau^3). \quad (7)$$

在每一步中首先在外部场中传输半步, 然后增加空间电荷效应的作用, 然后再传输半步, 到达这一步的终点. 上一步的末状态是下一步的起始状态.  $\tau$  代表时间步长, 或者坐标步长. 本程序采用纵向坐标为独立变量.

通常情况下, 外场的哈密顿量  $H_{\text{ext}}$  包含很多高次项, 根据需要进行截断. 本程序中进行旁轴近似, 哈密顿量只取二次项, 对应的  $\mathcal{M}_{\text{ext}}$  就是线性映射, 可写成传输矩阵的形式.

## 3 面向对象程序的开发

面向对象的程序设计方法已被广泛应用于大型复杂程序的开发, 是当前程序设计方法的主流方向. 当前的 Fortran 的主流语言 Fortran95 虽然本身并不是面向对象的语言, 但是已经可以模拟面向对象语言的大部分特性, 比如封装、继承、多态、重载和动态分配等, 可以间接的实现面向对象编程<sup>[8, 9]</sup>. 所以在宏粒子模拟中用 Fortran 95 进行面向对象的编程是很自然的选择.

我们对粒子在外部场和自场作用下的运动这一具体的物理问题进行分解和归类, 在此基础上抽象出不

同的模块(module, 即C++语言中的class). 每一个模块包括派生数据类型(type)和对它的调用(subroutine和function). 整个程序模块分为3层, 底层模块是一些功能性模块, 比如矩阵运算和处理模块, FFT模块等, 为中层模块提供功能性服务. 中层模块是物理模块, Beamline模块处理束流传输相关的信息, Particle模块处理和粒子有关的信息, ScField模块计算和处理空间电荷效应. 上层模块是应用性模块, Simulator模块调用不同物理模块的对象, 启动和控制整个模拟过程. Input/Output模块用于和用户的对话, 进行数据的输入和输出. 在调试中, 每个物理模块先单独调试和检验, 然后再整体组装起来, 以保证程序的正确性.

#### 4 对回旋加速器轴向注入线的模拟

中国原子能科学研究院串行加速器升级工程技术部于2003年研制了1台多峰负氢离子源并成功引出稳定束流. 这种结构的离子源的特点是在等等离子体外面布置永磁铁阵列, 过滤了部分快电子, 减小了 $e/H^-$ 值, 增大了负氢束流的输出流强. 该离子源的引出能量为28keV, 流强达到10.5mA时的归一化均方根发射度为 $0.17\pi\cdot\text{mm}\cdot\text{mrad}$ (包含86%束流).

正在设计中的CYCIAE-100采用多峰负氢离子源, 设计参数为: 引出能量为40keV, 流强为8mA. 在离子源出口近似成束腰, 发射度 $\varepsilon_{\text{rms},n}=0.17\pi\cdot\text{mm}\cdot\text{mrad}$ ,  $X_{\text{rms}}=Y_{\text{rms}}=2.10\text{mm}$ ,  $X'_{\text{rms}}=Y'_{\text{rms}}=8.77\text{mrad}$ , 束团横向分布近似成高斯分布.

从离子源引出的直流束沿轴向注入到加速器中心区. 注入线采用O-BS-O-D-O-F-O方案(BS为螺线管, D和F分别为散焦和聚焦四极透镜, O为漂移节). 各个传输元件的参数由束流线设计程序TRACE 3-D来确定.

在基于PIC方法的CYCPIC2D的执行中, 空间电荷场的求解是最消耗时间和计算机资源的部分. 所需时间和资源的大小取决于网格密度和宏粒子的数目. 在离子源出口取20万个宏粒子, 选择不同的网格数, 计算得到的初始的径向电场对比见图1. 网格数为 $64\times 64$ 时, 在电场变化较快的区域, 网格间隔过大引起局部平均化效果, 导致计算误差. 网格数 $256\times 256$ 时的结果达到较高的计算精度. 在后面的计算中均采用 $256\times 256$ 的网格.

为了详细研究计算空间电荷效应在注入过程中的影响, 我们利用CYCPIC2D模拟不同流强下(对应于不同中性化率)束流从离子源出口到偏转板入口

这一段传输节的束流输运, 并与ORBIT和TRACE 3-D程序进行比较验证. ORBIT程序是环形加速器中强流束动力学宏粒子模拟程序, 算法基于PIC方法. TRACE 3-D也具有计算空间电荷效应的功能, 但其假设束流在实空间中为均匀分布, 而且在传输过程中束流的分布保持不变, 这样利用解析表达式近似处理空间电荷效应, 只考虑线性力对束流包络的影响, 而忽略了高阶非线性力的作用, 对一般的分布情况, 计算结果与基于PIC的包含非线性空间电荷效应的程序之间存在差异. 由3个程序计算的在不同中性化率下注入线中束流RMS包络见图2所示.

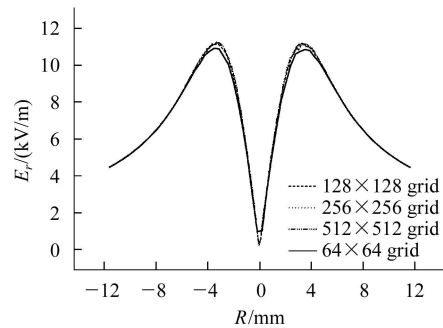


图1 初始束流的径向电场比较

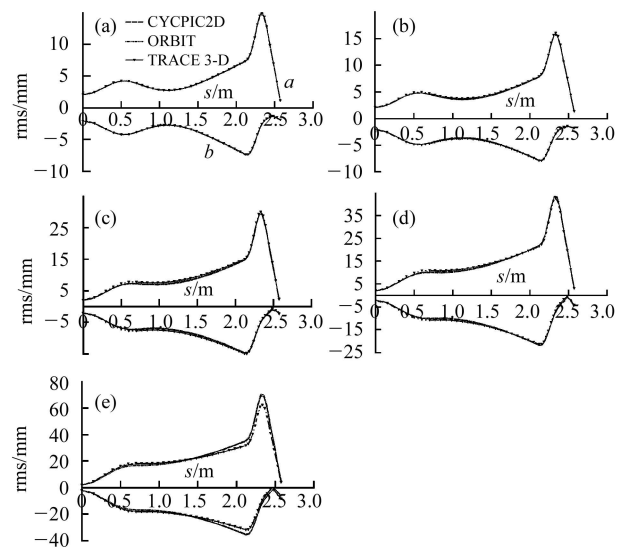


图2 CYCPIC2D, ORBIT和TRACE 3-D的rms半包络比较

(a) — (d) 8mA束流中性化率分别为100%, 90%, 50%和0%, (e) 束流流强为20mA, 没有中性化. a为x方向, b为y方向.

从图2(a)和(b)可以得出结论, 在高中性化率的情况下, 即负氢束流的空间电荷场和残余气体电离生成的正离子的空间电荷场相当时, 3个程序rms包络曲线吻合得很好, 表明在弱流下的计算精度相当. 而

从图2(c)和(d)可以看到基于PIC宏粒子模拟的CYCPIC2D与ORBIT程序的结果完全吻合,而TRACE 3-D的计算结果与前两个所得到的结果基本接近,但存在一定的差异.图2(e)说明当束流流强为20mA时,CYCPIC2D与ORBIT程序的结果依然吻合,而和TRACE 3-D的差异已经非常明显了.这说明对束流空间电荷效应的线性近似处理带来的误差随着束流强度的增加而增大.

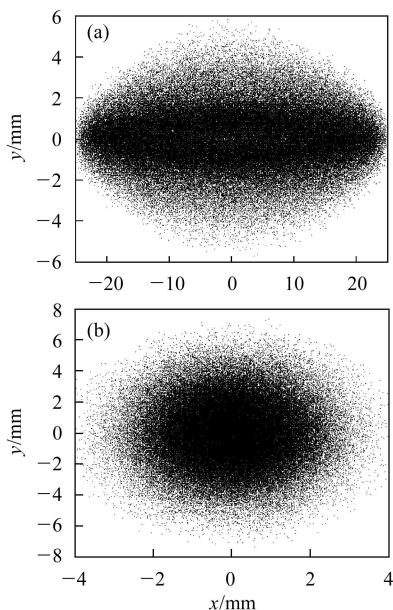


图3 中心化率为0%(a)和100%(b)下8mA束流在注入线末端位置横向分布比较

另外,图2中,对于不同中性化率的8mA束流,在 $x$ 方向rms半包络尺寸最大值分别为1.47, 1.57, 2.94和4.35cm,而由于加速器中心轴向注入空间有限,注入线管道半径只有2.5cm,这说明必须要有足够高的中性化程度来降低空间电荷效应引起的束流损失.

图3显示了8mA束流在没有采取中性化措施(a)和完全中性化(b)时在注入线末端位置的束流横向分布.可以看到,在空间电荷效应的影响下,束流发射度显著增大,束团分布也已经发生了很大的变化,在距束流中心较远的位置有更多的粒子分布.

## 5 总结

本文介绍了一个基于PIC方法的二维束流动力学模拟程序,模拟C++语言的面向对象功能,在FORTRAN 95中实现了面向对象的设计和编程.然后对一段传输线进行了宏粒子模拟,并和现有程序进行对比验证.

进一步的工作包括增加更多的传输和加速元件,考虑边缘场效应;开发并行的三维程序,模拟脉冲束团在注入线、偏转板以及回旋加速器内部的运动.

感谢美国伯克利LBNL的Ji Qiang博士所给予的指导和帮助,感谢和清华大学邢庆子博士的有益讨论及对文稿的修改建议.

## 参考文献(References)

- Hockney R W, Eastwood J W. Computer Simulation Using Particles. New York: Hilger, 1988
- Galambos J, Danilov S, Jeon D et al. ORBIT — a Ring Injection Code with Space Charge. In: Proc. of the 1999 Particle Accelerator Conference. New York: U.S. Government Printing Office, 1999. 3143—3145
- Qiang J, Ryne R D, Habib S et al. J. Comput. Phys., 2000, **163**: 434—451
- Adelmann A. 3D Simulations of Space Charge Effects in Particle Beams. PhD Thesis No.14545, ETH Zurich, 2002. <http://people.web.psi.ch/adelmann/>
- Crandall K R, Rusthoi D P. TRACE 3-D Documentation (3rd Edition), LA-UR-97-886. Los Alamos, 1997
- CHEN Guo-Liang et al. Implement of Parallel Algorithm, Beijing: Higher Education Press, 2004. 581—584 (in Chinese) (陈国良等. 并行算法实践. 北京: 高等教育出版社, 2004. 581—584)
- Forest E et al. Phys. Lett., 1991, **A158**: 99
- Decyk V K et al. Scientific Programming, 1997, **6**: 363—390
- ZHOU Zhen-Hong et al. Engineering Journal of Wuhan University, 2006, **39**(2): 42—46 (in Chinese) (周振红等. 武汉大学学报(工学版), 2006, **39**(2): 42—46)

# A Two-Dimension Beam Dynamics Simulation Code Base on PIC Method \*

YANG Jian-Jun<sup>1,2,1)</sup> ZHANG Tian-Jue<sup>1</sup> AN Shi-Zhong<sup>1</sup> JIA Xian-Lu<sup>1</sup> LIN Yu-Zheng<sup>2</sup>

<sup>1</sup> (China Institute of Atomic Energy, Beijing 102413, China)

<sup>2</sup> (Department of Engineering Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

**Abstract** In order to carry out an in-depth study on the negative hydrogen DC beam transport in the axial injection line of CYCIAE-100, a high intensity cyclotron under design at CIAE, the split-operator method is adopted in this paper for macro-particle dynamics simulation. In this method, the Hamiltonian is divided into two parts: external applied field and space-charge field. The former is dealt with single particle tracking and adopts first order approximation; the latter is dealt with PIC method, and FFT technique is used to solve the Poisson equation. Moreover, we developed an object-oriented code of two-dimension macro particle dynamics (CYCPIC2D) using FORTRON 95 language. This code can be applied to the transport line calculation of arbitrarily distributed beam. The simulation result for CYCIAE-100 injection line is presented, and validated by ORBIT and TRACE-3D. It indicates that the space charge effects have significant impact on the injection line, and the results given by three codes are basically accordant with each other. When the beam intensity reaches several ten milliamperes, the two PIC-based codes CYCPIC2D and ORBIT still give consistent results, while the result given by TRACE-3D shows evident difference with the other two.

**Key words** beam dynamics, space charge effect, Particle-In-Cell method, split-operator, axial injection line of cyclotron

---

Received 10 November 2006

\* Supported by National Natural Science Foundation of China (10125518)

1) E-mail: Yangjianjun00@mails.tsinghua.edu.cn