

A Beam Dynamics Calculation Based on PIC Method

Masashi Yamamoto¹

Department of Electrical and Computer Engineering, Akita National College of Technology
1-1 Bunkyo-cho, Iijima, Akita, 011-8511

Abstract

We had accomplished a code for beam tracking based on Particle In Cell (PIC) method with rectangular meshes. This type of code by PIC method can calculate the self-consistent interaction between charged particles and electromagnetic field in cavities. Therefore, this kind of code should be used widely for designing a linac, particularly for a low energy section such as buncher or heavy beam loading structures. The code that we made first used the rectangular meshes to discrete the field in domain. Although it is easy to make the program that use rectangular meshes, there are larger error on the boundary than triangular meshes. Therefore we make a program which use triangular meshes to reduce an error on the boundary. In this paper we present a current status and a few problem on programming.

PIC法によるビームシミュレーション

1. はじめに

昨年のリニアック技術研究会で報告[1]したように、我々は加速器の設計に使うコードを開発している。その体系を図1に示す。一通りのプログラムを、本年度末に完成させる予定で作業を進めている。これらのコード群のうち、粒子軌道計算—ビームトラッキング—のシミュレーションのプログラムの開発状況について、今回報告する。

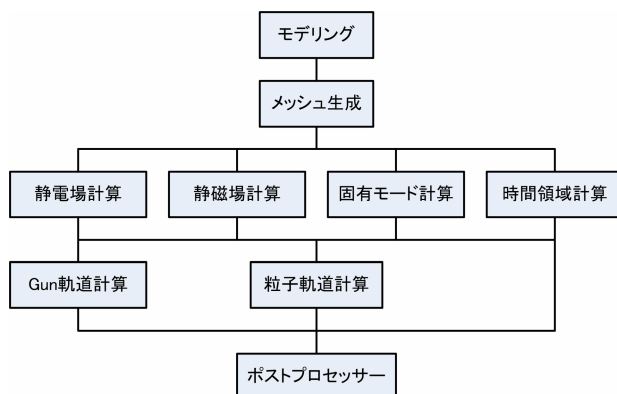


図1：作成中のコードの体系

言うまでもないが、ビームトラッキングコードは、我々以前にもいろいろなものが開発され、実際の設計に供されてきた。リニアックの設計のための PARMELAやGPT[2]、あるいは元々はプラズマのシミュレーション用であるがMAGIC[3]などが利用されている。我々も、これらと同様のリニアックの設計に使えるトラッキングコードの開発を進めている。これらのうち PARMELAやGPTでは、電磁場と粒子の相互作用をきちんと計算していない。電磁場が

粒子に与える影響—ローレンツカー—is取り込まれているが、粒子が電磁場に与える影響—ウェークフィールド—is計算していない。もちろん、空間電荷効果は計算しているので、多くの場合、それでも良い近似であろう。しかし、バンチャー加速管あるいは低エネルギーの加速管でビームローディングが大きい場合など、無視できない誤差となりうる。きちんとしたシミュレーションを行うためには、粒子が加速/減速されることによる電磁場の変化を考慮しなくてはならない。そもそも、これまでのウェークフィールドを計算に入れないシミュレーションの問題の有無を言う為には、それがあつ場合と無い場合の計算を行い、比較を行う必要がある。これまで使われてきた多くのコード—MAGICを除く—では、その比較すらできない。

また、場合によってはビームローディングによるRFの変化を計算しなくてはならないだろう。もちろん、PARMELAやGPTではそのような計算はできない。これまでは、等価回路モデルを作成して計算していたが、これも近似が多い。ウェークフィールドをきちんと考慮したトラッキングコードがあれば、ビームローディングによるRFの変化の計算も可能である。

リニアックの低エネルギー部のビームの振る舞いやRFの状態をきちんと計算したいという要求のもと、新たにトラッキングコードの作成をはじめた。

2. 計算方法

リニアックのほとんど機器は軸対称構造である。特に加速管は対称性が良く、二次元モデルでほとんどの現象の説明ができる。また、加速する電子ビームも軸対称と考えてよいだろう。加えて、加速管内部の電磁場はTMモードが圧倒的に大きい。した

¹ E-mail: yamamoto@akita-nct.ac.jp

がって、低エネルギー部の電子ビームの振る舞いは、軸対称二次元モデルでTMモードを計算すればよいことになる。

このような計算を行う場合、いろいろな方法が考えられる。その中でもParticle In Cell(PIC)法が最も良いアルゴリズムである。現代では高速で多くのメモリ積んだコンピューターが容易に利用できる。このような状況では、単純なモデルで大量かつ高速に計算を行うことにより計算精度を向上させる方法が良い。PIC法の計算モデルは単純で、この要請に合致する。PIC法は計算モデルが単純なので、そのアルゴリズムも単純でプログラムも比較的容易である。しかし、高精度を得ようとすると、メッシュの分割数や粒子数を増加することになるので、コンピューターに負荷はかかる。高速のコンピューターが使える現代のような状況では、都合の良い方法と言える。

PIC法ではマクスウェルの方程式と運動方程式をを離散化して、計算する。計算での近似は、離散化のみで、自己矛盾の無い体系で計算できる。詳細の説明は参考文献[4]に譲るが、概略の計算手法は次の通りである。まずは、計算する領域をメッシュ状に区切る。そのメッシュはグリッドとデュアルグリッドの二重構造[5]にする。我々が計算するのは軸対称構造のTMモードのみなので、電磁場は (E_r, E_z, H_θ) である。グリッド上に電場、デュアルグリッド上に磁場を図1のようにそれぞれ配置する。

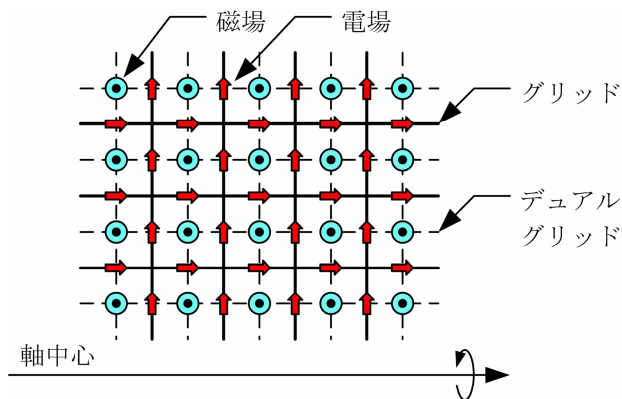


図2：長方形メッシュ

荷電粒子が電磁場を与える作用は、電流として取り込む。その電流密度 \mathbf{j} はデュアルグリッド上、電場と同じ位置に配置する。粒子の位置からこの電流を導くことは簡単ではない。粒子が入っているグ

リッドの位置に応じて、その四辺に電流を振り分けることになる。

電荷密度は振り分ける必要は無い。なぜならば、連続の式 $(\nabla \cdot \mathbf{j} + \partial_t \rho = 0)$ を満足するように計算すれば、自動的に発散の式 $(\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho)$ を満足する。言うまでもないが、最初から電荷がある場合—静電場—にはこの発散の式を使うことになる。加速器のシミュレーションでは、電荷のない状態から計算する機会が多いので、連続の式を満足するように気をつけて計算すればよい。磁場に関する発散の式 $(\nabla \cdot \mathbf{B} = 0)$ は、図2のように磁場を配置しているの自動的満足する。マクスウェルの方程式のうち残りの2つ $(\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} + \partial_t \mathbf{D}$ と $\nabla \times \mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{B})$ 、すなわち電磁場の回転を表す式を時間を追って逐次計算を行う。この微分方程式より、電場と磁場の時間変化がわかる。

実際のマクスウェルの方程式は、離散化して計算する。計算領域をメッシュ状に区切るにより微分を差分に置き換えることができ、コンピューターでの数値計算が可能となる。あとは時間を追って、電場と磁場を交互に計算する。それと同時に、粒子の運動も時間を追って計算する。

これまで述べてきたPIC法では電磁場と粒子の運動を逐次計算する。これは、実際に加速器内部で起きている現象を直接、計算している。このようなアルゴリズムでは、途中で連立方程式や固有値の計算が不要なため、プログラムは単純であると共に、高速な計算が可能となる。また、計算に必要なメモリーも計算点—電場と磁場の計算点と粒子数—に比例する。計算量もメモリーも必要な粒子数や電磁場を計算するノードの数の一乗に比例する。

3. 現状と問題点

3.1 現状

電磁場の計算領域を図2のように長方形メッシュで離散化したPIC法のプログラムを作成した[4]。このプログラムを使って、単純な加速管に高エネルギーの電子のバンチを入力した場合の計算結果を図3に示す。100[MeV]のバンチを電磁場の無い加速管に入射したときの様子である。図から、バンチが後方にウェークフィールドを誘起している様子が分かる。もちろん、個々の粒子の運動方程式も計算している。

このプログラムの作成によりPIC法の原理的なことを学習し、問題点も明らかになった。

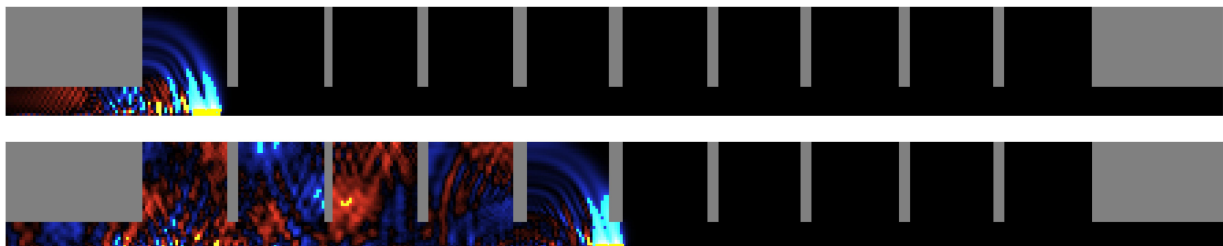


図3：加速管内のバンチと電磁場の様子(PIC法)

3.2 長方形メッシュの問題点と利点

長方形メッシュのプログラムは容易に作成できる。その一方で、空洞内部の形状誤差が大きいのも確かである。長方形を細かくして、形状精度を向上させる方法もあるが、さらにメモリーと計算時間が必要となる。また、境界の部分のみに三角形を使う方法もある。これは良い方法であるが、メッシュによって異なるルーチンで計算することになり、少し違和感がある。全ての領域で三角形メッシュを使えば、このような問題は解決できる。このようなことが動機となって、三角形メッシュを使ったPICのプログラムの作成をはじめた。

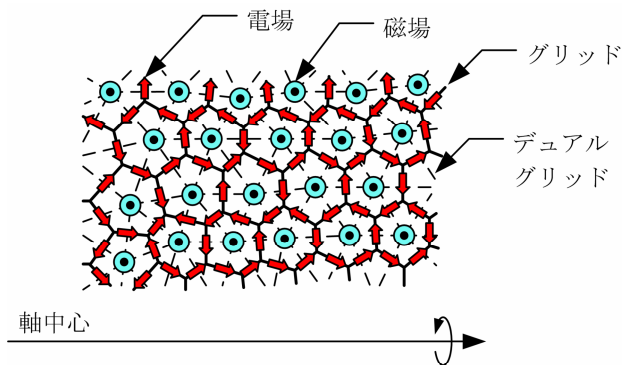
最初に述べたように長方形メッシュのプログラムは比較的容易に作成できる—ことは大きなメリットである。プログラムの作成が容易な理由は、計算のデータを格納するデータ構造に二次元配列が都合よく使えるからである。二次元配列の添え字がそのまま、データの物理的な位置を示すことができる。すなわち、C言語でE[i][j]のようにすれば、座標($i\Delta x$, $j\Delta y$)の電場を表すことができる。このようにデータ構造が単純なので、プログラムの動作も高速である。

3.3 三角メッシュのプログラム

形状精度を向上させるためには、図3のようにデュアルグリッドは三角形、グリッドは多角形のメッシュを作成しなくてはならない。我々は三角形メッシュを作成するプログラムを既に作成しているので、それを使うことにした。まずは三角形を作成して、それをもとに多角形のグリッドを作る。後の積分計算を行うことを考えると、グリッドの頂点は、三角形の外芯にすべきである。なぜならば、三角形の外芯にするとデュアルグリッドとグリッドの辺がお互いに直交するので、後の積分計算が簡単になる。そのためには、三角形の外芯が、三角形の内部にあるようにする必要がある。この条件を満たす三角形は、最大角が90度以内である。この条件を満たすようにメッシュ生成プログラムにしなくてはならない。

図3のようなメッシュの場合でも、個々の関係を配列を使って示すことは原理的には可能である。しかし、プログラムが複雑なり得策ではない。そのため、構造体やクラスを使い柔軟なデータ構造を使ったプログラムにすべきである。このような理由から、我々はクラスが使えるC++でプログラムを作成している。クラスを上手に使うと、プログラムの手間が大幅に省ける。

三角形メッシュでは、四角形メッシュに比べ計算時間が大幅に増加する可能性がある。特に問題となる部分は、粒子の運動方程式の計算である。粒子が属する三角形の計算が必要となり、計算時間の増加の原因となる。四角形メッシュの場合、配列の要素番号で座標が分かるので、この計算にほとんど時間がかからない。三角形メッシュでは、この部分の計算時間の短縮が課題となるであろう。



4. まとめ

領域を長方形に分割するPIC法のビームトラッキングのプログラムを作成して、この方法の有効性や計算のアルゴリズムを確認した。四角形メッシュのPIC法は、プログラムが簡単で高速に動作する。その反面、空洞の形状精度が悪い—という問題もある。そこで、形状精度の良い三角形メッシュを使ったPIC法のプログラムの作成を開始した。この場合、データ構造が複雑になったり、計算量が増加して速度の低下を招く可能性がある。

三角形メッシュのPIC法のプログラムの作成は、まだ完成していないので、それが含む問題の詳細は分からない。早急にプログラムを作成して、四角形メッシュとの比較を行いたい。

参考文献

- [1] M. Yamamoto, et. al., "DEVELOPMENT OF 2D ELECTROMAGNETIC FIELD SOLVER", Proc. 30th Accel. Meeting in Japan, pp.504-506, 2005.
- [2] Pulsar Physics, <http://www.pulsar.nl/index.htm>.
- [3] Mission Research Corporation, Virginia, USA.
- [4] A. Aiba, 秋田高専卒業論文, http://www.akitanct.jp/~yamamoto/study/thesis/2005/thesis_aiba.pdf.
- [5] 本間利久 他, "数値電磁力学", 森北出版社, 2002.