

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ИОНОВ С УЧЕТОМ ВЛИЯНИЯ ПРОСТРАНСТВЕННОГО ЗАРЯДА

*Макарова Мария Ивановна¹, Борисков Александр Сергеевич,² Гузов Максим Алексеевич,
Опекунов Александр Михайлович, Поляков Леонид Евгеньевич² (otd4@expd.vniief.ru)*

¹СарФТИ НИЯУ МИФИ, г. Саров Нижегородской обл.

²ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

При расчете динамики пучка в ускорителях необходимо учитывать различные эффекты.

Особенно важным становится учет кулоновских сил, который можно произвести, используя специально разработанные методы. На сегодняшний день существуют такие методы как метод «крупных частиц», «частица в ячейке», «модель трубок тока».

В задаче учета влияния пространственного заряда был использован метод крупных частиц. Физико-математическая модель, описывающая поведение пучка заряженных частиц с учетом кулоновского расталкивания в ускоряющей структуре с пространственно-однородной квадрупольной фокусировкой (ПОКФ) [1], была реализована на языке программирования C в среде CUDA.

Данная модель позволяет описывать процесс ускорения протонов в канале ускорителя, начиная с момента инжекции, и до вывода заряженных частиц в следующую стадию ускорения.

В результате исследований для различных фаз инжекции протонов рассчитаны следующие параметры пучка: фазовый портрет, энергетический разброс, максимальный ток в сгустке и т. д.

Ключевые слова: динамика ионных пучков; пространственный заряд; модель «крупных частиц», ускоритель с пространственно-однородной квадрупольной фокусировкой.

ION DYNAMICS NUMERICAL SIMULATION A WITH SPACE CHARGE EFFECT

*Makarova Mariya Ivanovna¹, Boriskov Alaxandr Sergeevich.², Polyakov Leonid Evgenyevich,
²Guzov Maxim Alexeevich, Opekunov Alexandr Mikhailovich (otd4@expd.vniief.ru)*

¹Sarov State Physics and Technical Institute, Sarov Nizhny Novgorod region

²FSUE «RFNC-VNIIEF», Sarov Nizhny Novgorod region

It is necessary need to take into account various effects in the design of the beam dynamics in accelerators.

It is especially important to take into account the Coulomb forces. It can be done using special methods. So far, there are such methods as the large-particle method, the particle-in-cell method, the tube-current model.

The numerical model that describes the behavior of a beam of charged particles taking into account Coulomb repulsion in the radio frequency quadrupole accelerator was implemented in the C programming code in the CUDA environment.

This model allows us to describe the process of acceleration of protons in the accelerator channel from the moment of injection until the output of charged particles to the next stage of acceleration.

As a result of the studies for various phases of proton injection the following beam parameters are calculated: phase portrait, energy spread, peak current in the bunch, etc.

Keywords: ion beam dynamics; space charge; large-particle model, radio frequency quadrupole accelerator.

Сравнительная характеристика методов учета пространственного заряда

метод «частица–частица»	метод «частица в ячейке»	метод трубок тока
– достаточно точное описание динамики – прост для понимания – вычислительно емкий метод	– менее точен, чем метод «частица–частица» – значительно быстрее, чем метод «частица–частица»	– более экономичен по сравнению с методом «частица в ячейке» в случае стационарных задач

Одной из задач современной ускорительной физики является разработка линейных резонансных ускорителей ионов на средние энергии – от единиц кэВ до десятков МэВ. Особый интерес представляет линейный ускоритель с пространственно-однородной квадрупольной фокусировкой (ПОКФ), решающий проблему эффективного ускорения пучка [2]. Ускоряющие структуры с ПОКФ часто используются как инжекторы ионов к более крупным ускорителям. При проектировании крупных ускорительных комплексов, состоящих из нескольких каскадов ускорения, необходимо минимизировать потери пучка. Для этого необходимо проводить расчеты динамики частиц.

Аналитические методы расчета пучка зачастую не позволяют учесть многих эффектов, действующих на пучок, хотя они часто достаточны для описания основных характеристик. Проблема усугубляется тем, что при ускорении низкоскоростных интенсивных пучков ионов становится важным учет кулоновских сил, который можно произвести, используя специально разработанные методы. Это говорит об актуальности расчета динамики частиц с учетом эффекта пространственного заряда.

В данной работе проводится расчет динамики протонного пучка с энергией до 3 МэВ в ускорителе ПОКФ. С использованием кода C++ была реализована физико-математическая модель движения пучка протонов в ускоряющей структуре с ПОКФ. На первом этапе была рассчитана динамика для модели одной частицы. Далее на языке программирования C в среде CUDA был выполнен расчет динамики пучка протонов с учетом эффекта пространственного заряда.

Методы учета эффекта пространственного заряда

Существует множество различных методов учета эффекта пространственного заряда. Для сравнения приведены методы «частица-частица» и «частица в ячейке», в которых используется модель крупных частиц. Рассмотрен также метод трубок тока. Общим для метода «частица в ячейке» и метода трубок тока является то, что на расчетную область накладывается сетка, в процессе движения частиц ищется вклад плотности заряда каждой модельной частицы на ячейки сетки [3]. В табл. 1 представлена сравнительная характеристика методов учета пространственного заряда.

В работе использован метод «частица–частица». В данном методе используется модель крупных частиц, в которой поток представляется в виде конечного числа равномерно заряженных шаров, каждый из которых имеет набор характеристик (положение, заряд, масса, скорость).

Заряд вычисляем по формуле:

$$q = \frac{I\lambda}{cN} \tag{1}$$

находим силу, действующую на *i*-й шар со стороны *j*-го:

$$F_{ij} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0(2R)^2} \left(\frac{2R}{r_{ij}}\right)^3 \frac{r_{ij}}{2R}, r_{ij} \geq 2R \tag{2}$$

$$F_{ij} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0(2R)^2} \left[2\left(\frac{r_{ij}}{2R}\right)^3 - 9\left(\frac{r_{ij}}{2R}\right) + 8 \right] \frac{r_{ij}}{2R}, 0 \leq r_{ij} < 2R \tag{3}$$

где *r_{ij}* – расстояние между центрами *i*-го и *j*-го шаров. Общий заряд пучка – сумма зарядов всех шаров. Таким образом, суммируя силы для каждой частицы, получаем влияние на нее остальных частиц сгустка. [2, 3]

$$F_i = \sum_{ij} F_{ij} \tag{4}$$

Метод «частица–частица» основан на непрерывном интегрировании уравнений движения частиц, с учетом их непосредственного взаимодействия. Модель крупных частиц, используемая в данном методе, достаточно точно описывает динамику частиц, однако метод вычислительно емкий, поэтому требует наиболее оптимального способа реализации.

Задача о разлете пучка частиц под действием кулоновского расталкивания

В работе производился расчет динамики протонов с массой *m* = 938,27 МэВ и зарядом *q* = 1,6 · 10⁻¹⁹ Кл. Метод «частица–частица» является вычислительно емким, так как необходимо произвести моделирование с большим количеством параметров. Для реализации поставленной задачи необходимо выбрать наиболее оптимальный метод расчета. С этой целью был выполнен обзор различных вычислительных архитектур, произведена сравнитель-

ная характеристика их особенностей в работе с различными задачами.

В ходе решения поставленной задачи была написана программа на языке программирования CUDA, расчет был произведен на Graphic Processor Unit (GPU), так как необходимо произвести множество параллельных вычислений. Вызов параллельных частей производится «функцией-ядром». «Функция-ядро» на GPU выполняется в виде большого количества параллельных потоков (нитей). Каждый поток выполняет «функцию-ядро». Потоки группируются в блоки, блоки группируются в сеть блоков. При запуске «функции-ядра» в <<<nBlk, nTid>> указываются параметры сети блоков. Первая переменная nBlk задает количество блоков, а nTid – количество нитей в одном блоке. Если перемножить nBlk*nTid, то получим общее число потоков, которое будет запущено на GPU [4].

Для оценки полученных результатов был произведен аналитический расчет динамики двух частиц и расчет динамики с использованием программного кода. В результате этих расчетов получено, что на частицы, расстояние между которыми $r = 1,361635 \cdot 10^{-2}$ м, действуют силы $|F| = 1,242685 \cdot 10^{-24}$ Н.

На рис. 1 показан разлет частиц с течением времени.

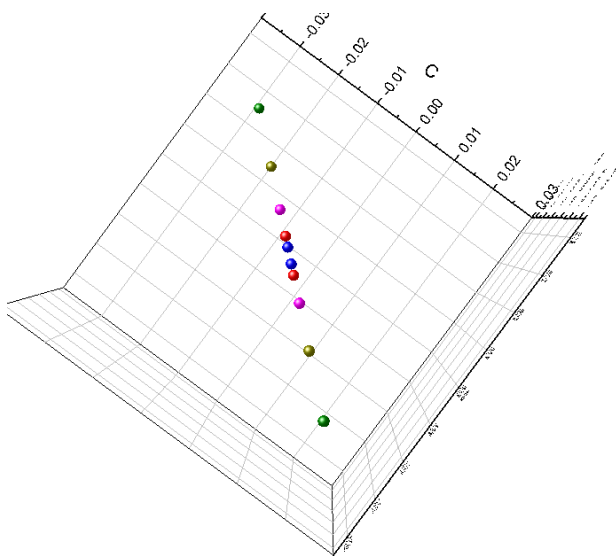


Рис. 1. Разлет частиц: точки в центре графика – начальное положение частиц, точки с краю – положение частиц спустя время $t = 0,001$ с

Убедившись в адекватности расчета кулоновского расталкивания двух частиц, используем разработанный программный код для учета влияния эффекта пространственного заряда большего количества частиц.

Рассмотрим пучок, состоящий из 4800 частиц. Зададим начальное распределение частиц, близкое к распределению пучка на начальном этапе ускорения. Проследим эволюцию сгустка под действием кулоновского расталкивания.

На рис. 2–4 представлены распределения частиц в сгустке в разные моменты времени, что позволяет оценить динамику их разлета.

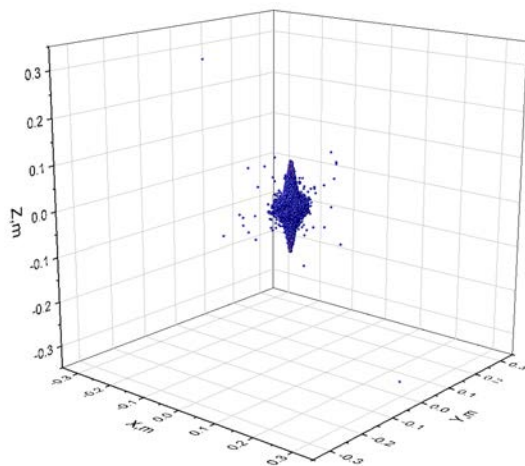


Рис. 2. Распределение частиц в сгустке спустя $t = 0,00015$ с после начала разлета из центра

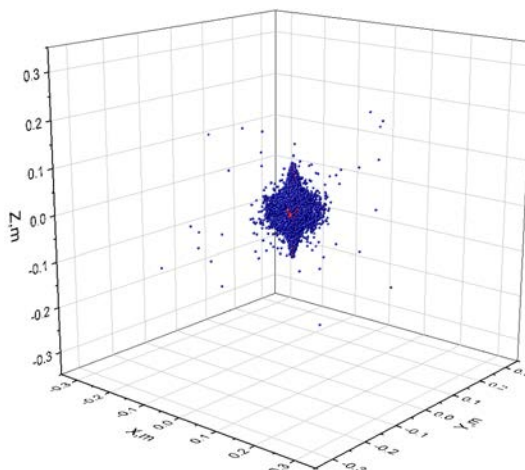


Рис. 3. Распределение частиц в сгустке спустя $t = 0,00021$ с после начала разлета из центра

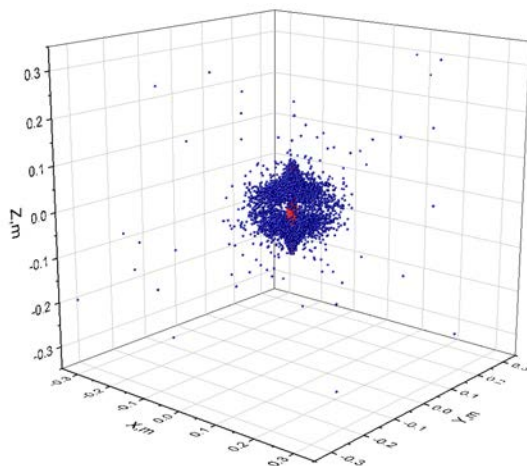


Рис. 4. Распределение частиц в сгустке спустя $t = 0,00027$ с после начала разлета из центра

По распределениям частиц в разные моменты времени, представленным на рис. 2–4, виден процесс разлета частиц под действием пространственного заряда. Можно отметить, что частицы разлетаются равномерно по всем направлениям от их первоначального положения.

Исходные данные для расчета динамики ускоряющей структуры с ПОКФ

Необходимо рассчитать динамику пучка протонов в ускоряющей структуре с пространственно-однородной квадрупольной фокусировкой с учетом эффекта пространственного заряда. Изучение динамики протонного сгустка начиналось с изучения динамики одной частицы в ускорителе с ПОКФ [5]. Исходные данные для расчетов представлены в табл. 2.

Таблица 2

Параметры ускоряющей структуры

Параметр	Значение
Длина ускорителя, м	5
Частота, МГц	162.5
Начальная энергия синхронной частицы, кэВ	57
Выходная энергия синхронной частицы, МэВ	до 3
Длина группирователя, м	3
Длина согласователя, м	0.1
Масса, МэВ	938.27
Заряд, Кл	$1.6 \cdot 10^{-19}$
Амплитуда напряжения, кВ	150
Фазовая протяженность	2π
Количество частиц	4800
Длина волны, см	184.62
Начальная апертура, см	0.09
Конечная апертура, см	0.0433

Начальное распределение пучка частиц зададим таким образом (рис. 5), чтобы оно соответствовало распределению пучка на начальном этапе ускорения, и проследим его динамику с течением времени.

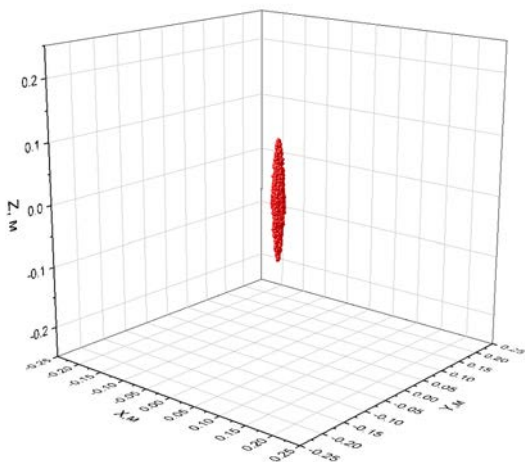


Рис. 5. Начальное распределение частиц

В результате расчетов необходимо определить фазовый портрет пучка, энергию на выходе из ускоряющей структуры, конечное распределение пучка, коэффициент захвата частиц.

В данной работе для расчета динамики протонов использован метод «частица–частица». Эта задача является вычислительно емкой, так как необходимо произвести моделирование с большим количеством параметров.

Ускорительный тракт разделен на 3 части: согласователь, группирователь и ускоряющий участок. Для возникновения необходимых эффектов, действующих на частицы по мере прохождения ими различных участков ускоряющей структуры, необходимо изменять различные параметры структуры. На рис. 6 изображен график зависимости параметра модуляции M канала от координаты вдоль оси ускорителя Z .

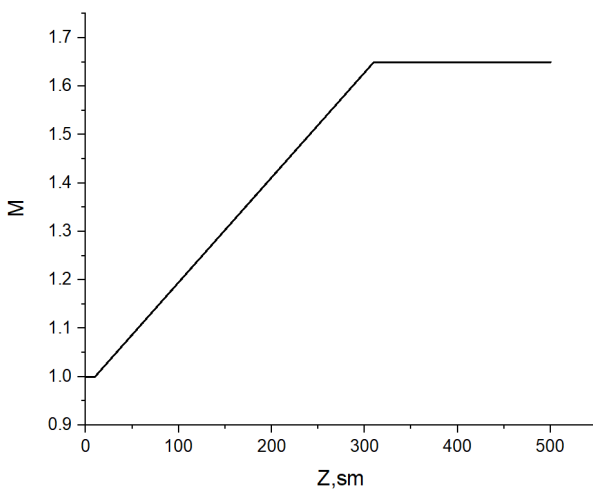


Рис. 6. Зависимость параметра модуляции от координаты вдоль оси ускорителя

На рис. 7 представлена зависимость фазы синхронной частицы fis от координаты вдоль оси ускоряющей структуры Z .

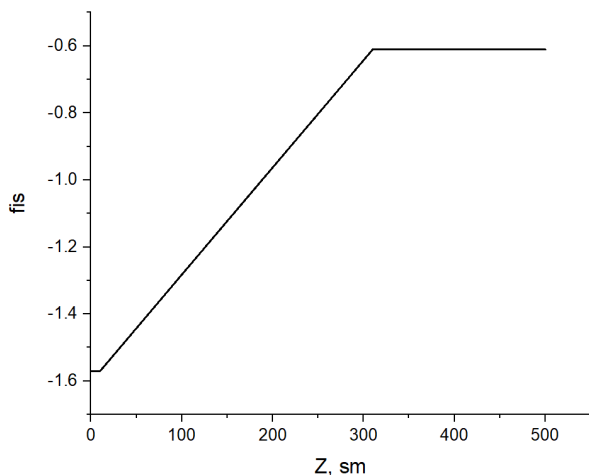


Рис. 7. Зависимость фазы синхронной частицы от координаты вдоль оси ускоряющей структуры

Результаты расчетов

В ходе решения поставленной задачи была написана программа в среде программирования CUDA, расчет был произведен на GPU, так как необходимо произвести множество параллельных вычислений.

С помощью рассчитанных значений скоростей протонов в процессе ускорения был построен график зависимостей скоростей частиц β от продвижения вдоль оси структуры z (рис. 8), из которого видно, что относительная скорость частиц β_z колеблется вблизи скорости синхронной частицы β_s :

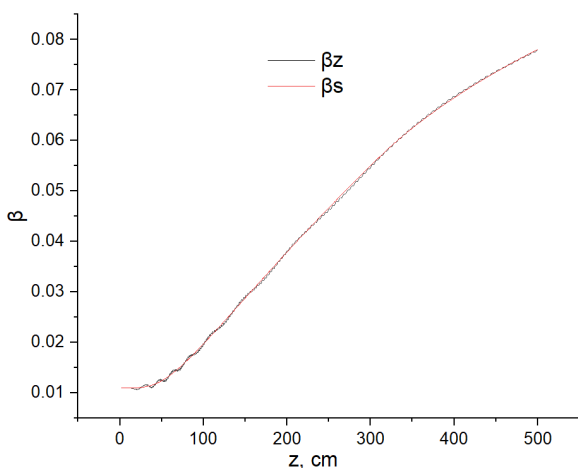


Рис. 8. График зависимостей скоростей частиц от продвижения вдоль оси структуры

В процессе ускорения частицы изменяли свои фазы относительно ускоряющего высокочастотного поля в интервале от 0 до 2π . Зависимость фазы частицы от ее относительной скорости вдоль оси ускорителя β_z характеризует фазовый портрет, представленный на рис. 9.

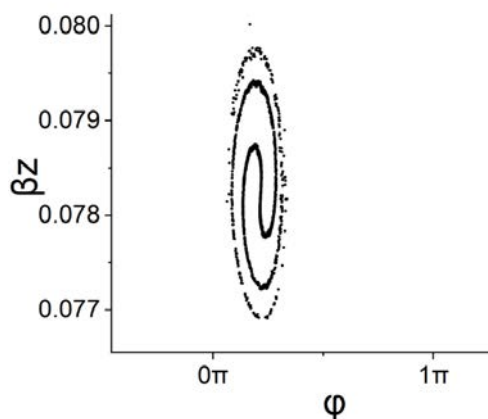


Рис.9. Фазовый портрет пучка

На рис. 10 представлено распределение пучка частиц на выходе из ускоряющей структуры.

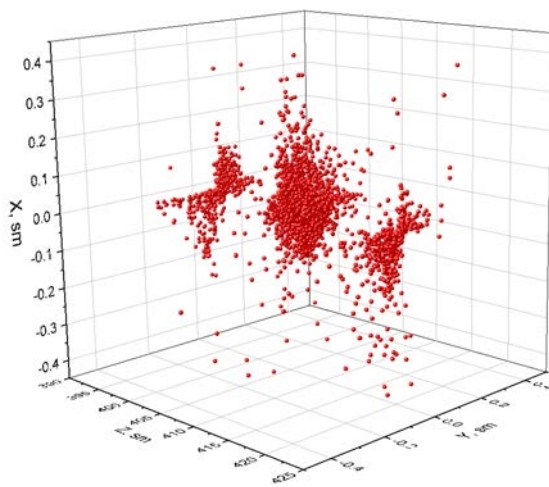


Рис. 10. Распределение пучка частиц на выходе из ускоряющей структуры

Можно отметить, что пучок протонов в результате прохождения через ускоряющую структуру был разделен на отдельные сгустки, что свойственно данной ускоряющей структуре на стадии группировки.

На рис. 11 представлен профиль пучка после ускорения.

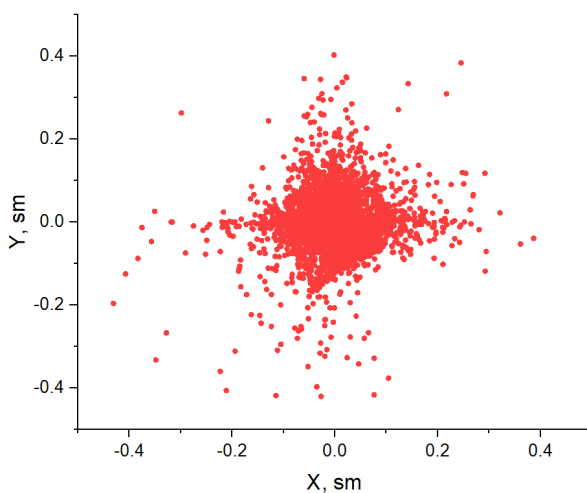


Рис. 11. Профиль пучка после ускорения

Из рис. 11 видно, что пучок сжимается при прохождении через ускоряющую структуру. По представленному профилю пучка можно заметить действие фокусирующего поля ускорителя.

В результате ускорения получаем протоны со средней энергией 2,86 МэВ. Коэффициент захвата в процесс ускорения равен 93,8 %.

Сравнение полученных значений с результатами расчетов на BEAMDULAC RFQ

Проведен сравнительный анализ полученных значений относительных скоростей синхронной частицы β_s и β_z со значениями, полученными в резуль-

тате расчета той же структуры в программе BEAMDULAC RFQ – β_s (BEAMDULAC RFQ) (рис. 12).

В результате расчетов выяснилось, что отклонение не превышает 0,66 %.

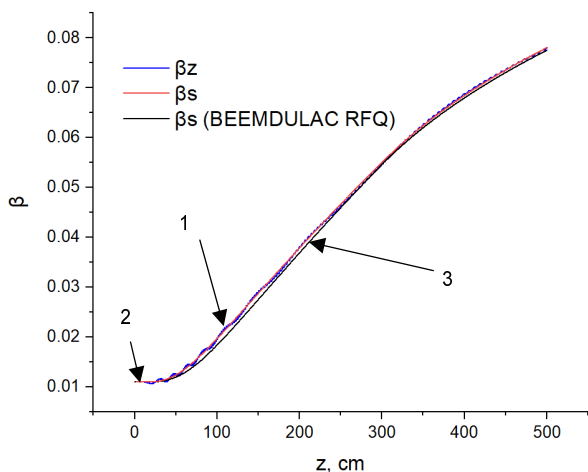


Рис. 12. График зависимостей скоростей частиц от продольного движения вдоль оси структуры, построенный по расчетам: 1–2 – β_z и β_s – относительные скорости синхронной частицы; 3 – β_s (BEAMDULAC RFQ) – скорость синхронной частицы, рассчитанная по программе BEAMDULAC RFQ

Заключение

На первом этапе работы была рассчитана динамика пучка протонов в канале ускорителя с пространственно-однородной квадрупольной фокусировкой с учетом эффекта пространственного заряда.

На втором этапе смоделирована динамика разлета двух частиц под действием кулоновского рас-

талкивания. Проведены аналитические расчеты и расчет динамики частиц с использованием разработанного программного кода.

На третьем этапе был смоделирован пучок, состоящий из 4800 частиц, рассчитана динамика для такого пучка в ускорителе с ПОКФ с учетом эффекта пространственного заряда. Получен фазовый портрет пучка, из которого видно уменьшение фазовой протяженности пучка, что свидетельствует о группировке пучка в процессе ускорения. Получен профиль пучка, по которому можно видеть действие фокусирующего поля ускорителя. Построено конечное распределение протонов, по которому виден эффект группировки пучка.

Список литературы

1. Масунов Э. С., Полозов С. М. Практикум по курсу «Электрофизические установки и технологии» Ч. 1. Линейные ускорители. Учебное пособие. М.: МИФИ, 2004. С. 42–53.
2. Овсянников Д. А., Свистунов Ю. А. Моделирование и оптимизация пучков заряженных частиц в ускорителях. СПб.: Науч.-иссл. ин-т прикл. химии, 2003. С. 104.
3. Рошаль А. С. Моделирование заряженных пучков. М.: Атомиздат, 1979.
4. Лафоре Р. Объектно-ориентированное программирование в C++ 4-е издание. СПб: Питер, 2004. С. 923.
5. Борисков А. С., Поляков Л. Е., Брехова А. А. Численное моделирование динамики протонного пучка в ускоряющих структурах с ПОКФ / 18-я науч.-технич. конф. «Молодежь в науке» // Сб. докл. Саров: ФГУП «РЯФЦ-ВНИИЭФ. 2020. С. 175–180.