



·强流加速器与粒子束技术·

基于 Geant4 的回旋加速器束流动力学计算^{*}

张 罡, 何小中, 杜 洋, 石金水, 杨国君

(中国工程物理研究院 流体物理研究所, 四川 绵阳 621000)

摘 要: 针对回旋加速器的束流动力学设计, 基于 Geant4 模拟研究, 提供一种可行的数值模拟方法。通过电磁场仿真软件 Opera 建立相应的电磁场数据导入到 Geant4 中进行插值计算, 利用 Geant4 自带的电磁场微分方程与微分方程求解器计算粒子的平衡轨道, 振荡频率以及加速轨道。其结果表明: 对于横向运动而言, Geant4 的计算结果与传统数值方法计算结果趋于一致; 对于轴向运动而言, 由于磁场插值方法的差异性, 二者有一定的区别, 对于在加速过程中的非平衡粒子, 其能量变化围绕平衡粒子振荡。对于束损, 通过限制粒子的运动时间, 轴向位移加快计算效率, 加入电极碰撞的判定使模拟更趋近实际情况。

关键词: 回旋加速器; Geant4; 仿真模拟; Opera; 束流动力学

中图分类号: TL542

文献标志码: A

doi: 10.11884/HPLPB202234.210458

Beam dynamics calculation of cyclotron based on Geant4

Zhang Gang, He Xiaozhong, Du Yang, Shi Jinshui, Yang Guojun

(Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang 621000, China)

Abstract: Based on GEANT4 simulation, a feasible numerical simulation method is provided for the beam dynamics design of cyclotron. Through the electromagnetic field simulation software Opera, the corresponding electromagnetic field data are imported into GEANT4 for interpolation calculation. The equilibrium orbit, oscillation frequency and acceleration orbit of particles are calculated by using the electromagnetic field differential equation and differential equation solver of GEANT4. The results show that: for the transverse motion, GEANT4 calculation results and the traditional numerical method calculation results tend to be consistent; for the axial motion, due to the difference of the magnetic field interpolation method, there is a certain difference between the two. For the acceleration of the non-equilibrium particle, its energy changes around the equilibrium particle. For the beam loss, the simulation is closer to the actual experimental situation by limiting the particle motion time, accelerating the calculation efficiency by axial displacement and adding the determination of electrode collision.

Key words: cyclotron, Geant4, simulation, Opera, beam dynamics

传统的计算方法能够准确描述束流的加速物理过程, 但是对于其辐射防护和束流打靶模型还未与束流动力学的计算结合在一起, 而基于 C++ 编写的 Geant4 程序框架不仅能对束流动力学进行精准的描述, 其包含的相应核数据库也能够为辐射防护和束流打靶实验提供相应模拟基础^[1-3], 同时已有相关学者研究如何从 CAD 模型直接导入到 Geant4 中^[4-5], 建立相关的实体物理模型, 从而形成一整套回旋加速器设计解决方案。

对于 Geant4 模拟的束流动力学而言, 事实上已有相应的研究, 如 G4Beamline^[6], 它是基于 Geant4 的程序包, 允许用户输入几何体、束流参数定义、物理过程以及可视化等, 输入方式通过 ASCII 脚本输入, A. Sato 等人利用 G4Beamline 模拟了 μ 介子在螺线管线圈的传输特性, 得到了 μ 介子在靶材的动量分布^[7]; F.W. Jones 等人利用 G4Beamline 模拟了回旋加速器平衡轨道, 横向振荡频率以及轴向振荡频率等物理参数, 与 CYCIOPS 数据相比较, 二者结果趋于一致, 其结果表明 G4Beamline 能够准确的描述质子在电磁场中的物理过程^[8]。但是对于如何通过 Geant4 源码去构建合适的物理过程, 从而实现相应的束流传输过程, 目前国内外鲜有相关文献。本文从 Geant4 源码入手, 以中国工程物理研究院流体物理研究所研制的 LB-11 回旋加速器参数为例^[9], 搭建一套合适的束流动力学

* 收稿日期: 2021-10-30; 修订日期: 2022-02-28
联系方式: 张 罡, az282719581@qq.com。
通信作者: 何小中, hexiaozhong@tsinghua.org.cn。

物理过程模拟程序。

1 物理建模与基本原理

模拟中,加速器区域为半径为 100 cm、高度为 100 cm 的圆柱体,填充材料为真空,模拟时,采用质子作为初始发射粒子。

在 Geant4 中,粒子在电磁场中传输精度主要通过 G4FieldManager 来控制,其中 DeltaOneStep 是指积分过程末端可以接受的位置的误差;EpsilonMin 和 EpsilonMax 则进一步限制位置和动量的相对误差,在本文中最大的相对误差为 1×10^{-5} ,最小相对误差为 1×10^{-6} ,DeltaOneStep 为 5×10^{-6} mm;粒子的运动方程采用 Geant4 自带的 G4EqMagElectricField,它是基于右手螺旋定则的电磁场微分运动方程,对于微分方程的求解器,Geant4 提供 2~5 阶的 RK 方法,本文采用 G4ClassicalRK4,它是 4 阶 RK 方法。在磁场中运动的带电粒子,一般是作曲线运动,Geant4 模拟其在磁场中运动是利用折线来代替曲线,折线与真实径迹的距离会产生一定的误差,本文将该误差设置为 0.001 mm。

对于电场而言,采用准静态近似,此时不同半径处的高频电压是一致的。对于不同半径处的电压,采用高频仿真软件 HFSS 模拟得到不同半径处的压降比例函数,加载到 Geant4 程序,高频相位则通过粒子的初始相位以及 Geant4 的 Global Time 来进行相关计算,最后通过 Geant4 中的 Step 来获取相应的粒子信息,并输出到文本中进行相关的后处理。

2 Geant4 仿真模拟

中心区电场设计一般采用的是超松弛迭代法^[10],该方法得到的是电势分布,通过数值微分求得得到各处的电场分量。随着计算机的发展,迭代法逐渐成为中心区设计的主要方法,其中 Opera3D 为国际多数实验室设计回旋加速器的软件,它采用 Newton-Rahpson 迭代法求解不同边界条件的场,同时输出文件和形式相对方便,以电场为例,LB-11 的中心区结构如图 1 所示。

2.1 加速过程物理建模

由于 Geant4 对于电磁模拟是离散过程,通过 Opera3D 导出的电磁场是网格节点的值,故需对电磁场进行插值,本文中采取的是 8 点插值,对于处于网格一点 G ,如图 2 所示。

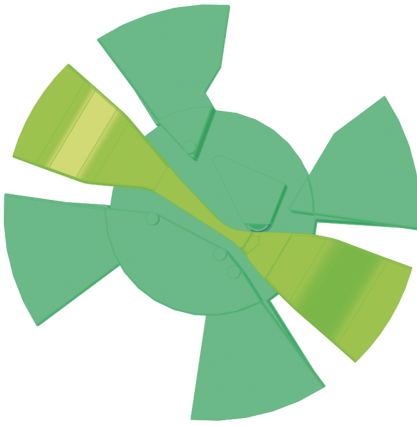


Fig. 1 LB-11 central region structure

图 1 LB-11 中心区结构

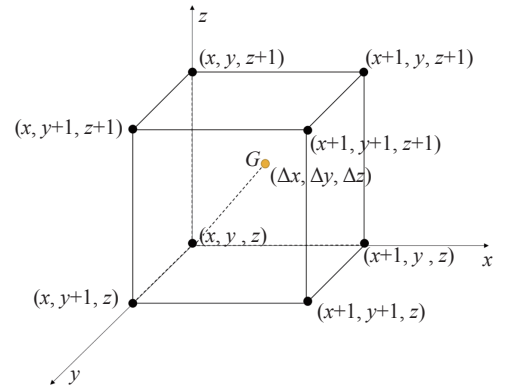


Fig. 2 Node diagram

图 2 节点示意图

若假设 G 距离节点 (x,y,z) 最近,则点 G 距离该节点的距离为 $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$,以横向磁场 B_x 为例,则点 G 处 B_x 插值公式为

$$\begin{aligned}
 B_x(X, Y, Z) = & B_x(x, y, z) * \Delta x * \Delta y * \Delta z + B_x(x, y, z + 1) * \Delta x * \Delta y * (1 - \Delta z) + B_x(x, y + 1, z) * \Delta x * (1 - \Delta y) * \Delta z + \\
 & B_x(x + 1, y, z) * (1 - \Delta x) * \Delta y * \Delta z + B_x(x + 1, y + 1, z) * (1 - \Delta x) * (1 - \Delta y) * \Delta z + \\
 & B_x(x + 1, y + 1, z + 1) * (1 - \Delta x) * (1 - \Delta y) * (1 - \Delta z)
 \end{aligned} \quad (1)$$

式中:坐标 (X, Y, Z) 表示点 G 的坐标。

对于 B_y 和 B_z 亦然,为了减少数据文本的读取时间以及计算机内存消耗,考虑到大部分回旋加速器都是 1/8 轴对称模型,因此由 Opera 导出的 1/8 场可以设置相应的对称性,若假设加速器是关于 xz 平面对称,则

$$\begin{cases} B_x = \text{sign}(y) * \text{sign}(x) * B_x \\ B_z = \text{sign}(y) * \text{sign}(z) * B_z \end{cases} \quad (2)$$

2.2 粒子丢失判定

在加速场中运行的粒子, 初始条件(相位, 动量, 位置等)的因素可能会导致粒子损失, 主要可能有如下情况: (1)粒子与电极碰撞; (2)粒子的轴向振荡超过磁隙间距; (3)粒子滑相进入减速相位; (4)粒子与物质相互作用。

由于真实加速器内部压强并非为真空, 存在一定的空气分子, 束流有可能会与这些空气分子发生相互作用而丢失, 考虑到模拟效率, 本文不讨论由于束流与物质相互作用带来的束流损失, 加速器内部设置为真空。

若引出粒子的能量为 E , 当粒子滑相进入减速相位时, 一般会出现两种情况: (1)对于能量较小 ($< E/2$) 就开始滑相的粒子, 其动能最终会由于滑相而减速至 0; (2)对于能量较大的粒子 ($> E/2$), 其运动的时间要大于能够正常引出的粒子, 通过设置粒子运动的时间阈值来截断超过该运动时间的粒子, 本文中粒子平均一圈加速约 0.1027 MeV 的能量, 加速到 11 MeV 所需时间约为 6000 ns, 给定 30% 的时间余量作为时间阈值, 当粒子的运动时间超过给定的时间阈值, 则该粒子被截断。

对于轴线偏移, 可以通过 Geant4 中的 Step 来获取粒子的轴向位移来判断该粒子是否超过了加速器的磁隙高度。

在中心区, Dee 电极和假 Dee 之间会加入一些柱子, 用来限制束流从离子源的高频相位以及调整电场形状, 束流轰击在电极柱上的效果如图 3 所示。

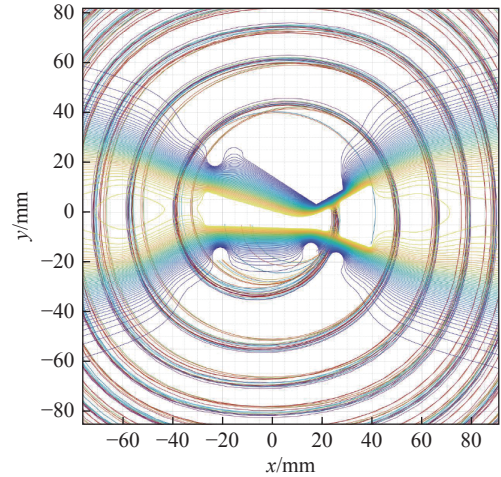


Fig. 3 The particles collided with the electrode

图 3 粒子碰撞电极

3 模拟结果与分析

中国工程物理研究院流体物理研究所于 2007 年研制了一台 11 MeV、流强 50 μ A 的小型医用回旋加速器 LB-11, 该机器已经通过调试并成功出束, 本文以此为例, 模拟中所需物理参数如表 1 所示。

表 1 LB-11 物理参数
Table 1 Parameters of LB-11

structure	name	parameters value
magnet	hill gaps	3.8 cm
	Dee pole numbers	4
RF	voltage	42 kV
	frequency	72.05 MHz
	insert direction	transverse
ion source	slit area	2 mm ²
	extraction energy	~3 eV
central region	phase acceptance	>40°
extraction	extraction method	stripping
	extraction radius	40 cm

为了研究 Geant4 模拟程序对带电粒子模拟在电磁场中运动的正确性, 以自编程序 CycSimulation 为参考, CycSimulation 是以文献 [11] 中算法为基础, 对粒子的平衡轨道计算, 本文采用粒子跟踪的方法得到, 具体计算流程如下:

(1) 输入所需计算半径 r 以及动量因子 f , 其中动量因子是动量的加权参数, 用于后续迭代, 一般其初始值设置为 $f = 1$ 。

(2) 对于 1/8 轴对称的回旋加速器, 若峰区角平分线位于轴线, 假设粒子的发射位置同样处于轴线上, 则粒子发射方向必然垂直于轴线。以半径 r 处计算圆轨道的平均磁场强度 B , 从而计算出粒子初始迭代参数动量 P_0 。

(3) 分别以动量因子 $f_1 = f$, $f_2 = f + \Delta f$, 其中 Δf 为任意小量, 对动量进行加权 $P_1 = P_0 \times f_1$, $P_2 = P_0 \times f_2$ 。

(4) 分别以初始条件 (r, P_1) 以及 (r, P_2) 带入到运动方程中计算得到粒子运动一个周期后的半径 r_{1f} , r_{2f} 。

(5) 利用牛顿插值法计算新的动量迭代因子 $f_{\text{new}} = f_i + (r - r_{1f}) \times \frac{f_2 - f_1}{r_{2f} - r_{1f}}$, 进而计算新的迭代参数 $P_{\text{new}} = P_0 \times f_{\text{new}}$, 再一次带入运动方程进行计算, 重复几次就可以得到闭轨。

对于横向和轴向振荡频率, 本文采用 Twiss 参数计算得到, 假设处于平衡轨道附近 (r_0, p_0) 有三个粒子, 其初始条件分别为

$$\begin{cases} r = r_0, p = p_0 \\ r = r_0 + \Delta r, p = p_0 \\ r = r_0, p = p_0 + \Delta p \end{cases} \quad (3)$$

式中: $\Delta r, \Delta p$ 为任意小量。对于周期性结构而言, 粒子运动在旁轴近似可以表示为

$$Y(\theta_f) = MY(\theta_i) \quad (4)$$

其中

$$Y(\theta) = \begin{bmatrix} y(\theta) \\ y'(\theta) \end{bmatrix} M = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \quad (5)$$

式中: $y(\theta), y'(\theta)$ 表示粒子相空间参数, M 表示粒子的 Twiss 参数。同时假设粒子的闭轨道参数为

$$\begin{cases} r = r_e \\ p = p_e \end{cases} \quad (6)$$

可以得到 $y(\theta) = r - r_e, y'(\theta) = p - p_e$, 并将其与式(3) 带入式(4)中, 最终解其方程可以得到

$$\begin{cases} a_{11} = \frac{r_{1f} - r_{0f}}{\Delta r} \\ a_{12} = \frac{r_{2f} - r_{0f}}{\Delta p} \\ a_{21} = \frac{p_{1f} - p_{0f}}{\Delta r} \\ a_{22} = \frac{p_{2f} - p_{0f}}{\Delta p} \end{cases} \quad (7)$$

因此可以得到粒子运动的径向振荡频率

$$\nu_r = \frac{N}{2\pi} a \cos \frac{(a_{11} + a_{22})}{2} \quad (8)$$

式中: N 为一个周期内的扇块数, 同理可以得到轴向振荡频率。

上述算法能够准确计算回旋加速器横向振荡频率, 轴向振荡频率, 回旋周期等参数, LB-11 正是基于此设计完成。分别以闭轨, 横向振荡频率以及轴向振荡频率 3 个参数作为验证条件, 对比 CycSimulation 与 Geant4 的差异。

3.1 平衡轨道参数的差异

根据 CycSimulation 计算的 1 MeV 位置的闭轨为例, 将参数带入到 Geant4 中进行模拟计算, 其结果如图 4 所示。

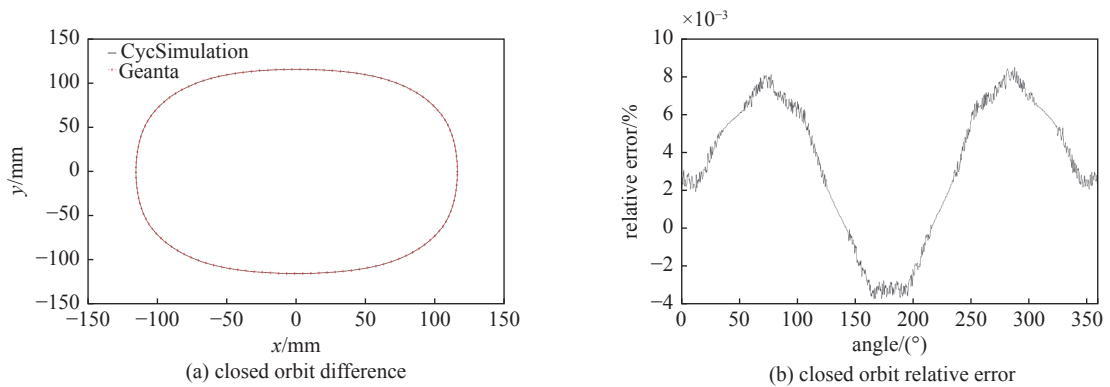


Fig. 4 Comparison of closed orbit calculation between Geant4 and Cycsimulation

图 4 Geant4 与 CycSimulation 闭轨差异

从图 4(a) 来看, Geant4 与 CycSimulation 计算结果处于一致, 根据图 (b) 可以知道, 两款软件对于闭轨计算的相对误差不超过 0.01%, 另一方面, 该结果也表明二者在等时性回旋频率的计算上差异较小。

对于横向和轴向振荡频率, 给定 $\Delta z = 1 \text{ mm}$, $\Delta r = 1 \text{ mm}$, $\Delta p = 1 \text{ mrad}$ 的偏移, 模拟 1 MeV 到 10 MeV 的质子在加速器中的振荡行为, 两款软件的差异如图 5 所示。

从图 5 可以看到, 径向振荡频率二者基本趋于一致; 而轴向振荡频率, 由于 CycSimulation 程序导入的是 2 维磁场, 对于轴向磁场采用泰勒展开得到, Geant4 中则采取的是 8 点插值法, 二者在轴向磁场的插值方式的差异导致轴向振荡频率计算的差异。CycSimulation 中磁场泰勒展开的算法如下。在笛卡尔坐标系下, 轴向运动方程为

$$\frac{d}{dt} \left(m \frac{dz}{dt} \right) = -q_e (v_x B_y - v_y B_x) \quad (9)$$

式中: m 为粒子质量, q_e 为粒子的荷电量, v_x 和 v_y 为粒子运动矢量, B_x 和 B_y 为磁感应强度矢量。

若粒子偏离中央平面距离较小, 则将磁场按 $z=0$ 处作泰勒展开, 保留一次项, 以 B_x 为例

$$B_x(x, y, z) = B_x(x, y, 0) + \left(\frac{\partial B_x}{\partial z} \right) z + \dots \quad (10)$$

由于 $B_x(x, y, 0) = 0$, 且 $\nabla \times B = 0$, 因此有:

$$B_x(x, y, z) \approx \left(\frac{\partial B_z}{\partial x} \right)_{z=0} z \quad (11)$$

式中: B_z 为磁感应强度在 z 方向矢量, 将微分化差分, 即:

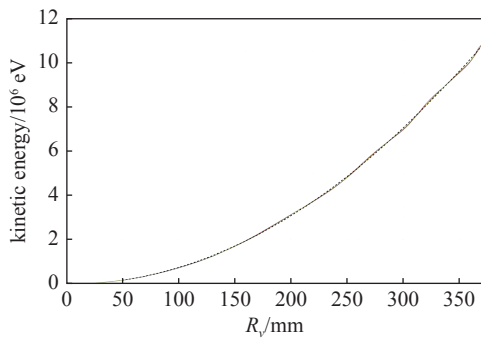
$$B_x(x, y, z) \approx \frac{B_z(x_i + \Delta x, y_i, 0) - B_z(x_i, y_i, 0)}{\Delta x} z \quad (12)$$

式中对 $B_z(x_i, y_i, 0)$ 的求解采取二维泰勒展开, 保留二次项, 以某一点观察其与 8 点插值差异, 结果如图 6 所示。从图中可以看到, 随着轴向偏移的不断增大, 二者的差异也会越来越大。但一般情况下, 回旋加速器中粒子的轴向振荡不超过 10 mm, 两种插值方法在该处的误差为 $3.274 \times 10^{-5} \text{ T}$ 。由于细微的计算误差并不影响回旋加速器的设计, 所以可以认为 Geant4 的计算结果是可信的。

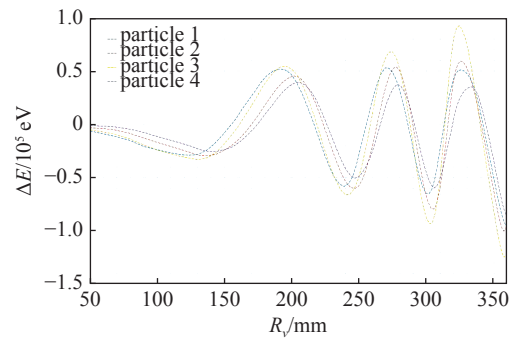
3.2 加速过程

由于离子源出射的粒子相对于平衡粒子存在一定的径向偏移, 所以粒子在加速轨道中能量的变化应围绕平衡粒子能量振荡, 若统计位于 x 轴正半轴上每圈粒子能量变化, 则结果如图 7 所示。

图 7 中, R_p 表示在谷区半径, 图 (a) 虚线表示平衡轨道粒子能量变化, 其余线条是 Geant4 模拟从离子源随机出



(a) comparison of different particle



(b) oscillation of energy difference with radius energy gain and equilibrium orbital particle energy

Fig. 7 GEANT4 simulates the energy changes of accelerating particles and equilibrium particles

图 7 Geant4 模拟加速粒子与平衡粒子能量变化

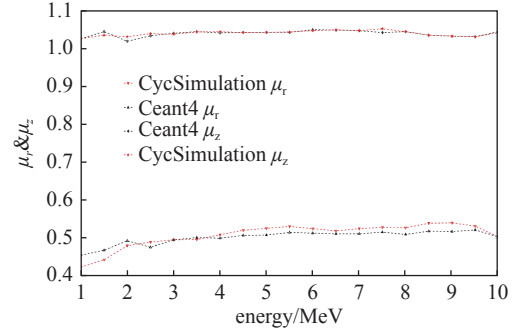


Fig. 5 Difference of betatron tunes between GEANT4 and Cycsimulation

图 5 Geant4 与 CycSimulation 横向和轴向振荡频率差异

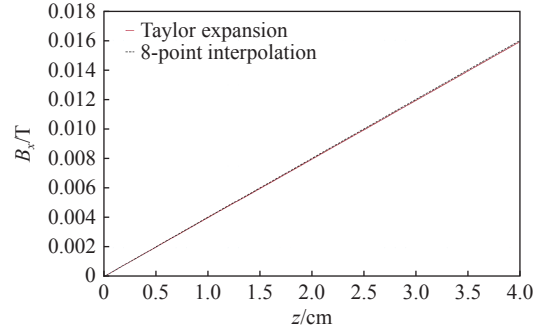


Fig. 6 Comparison of interpolation methods

图 6 插值方法差异比较

射粒子的能量变化。图(b)表示 Geant4 模拟加速过程中,不同粒子能量与平衡轨道能量差异,其振荡行为主要取决于粒子的径向振荡,各粒子在 x 轴正半轴的径向振荡行为如图 8 所示。从图中可以看到, LB-11 粒子径向运动稳定,振幅基本位于 ± 2 mm 以内,未见明显变化;其趋势与图 7(b) 中能量-半径振荡行为的趋势处于一致,可以判断 Geant4 能够正确模拟粒子的加速过程。

4 结 论

本文对加速器的模拟仅建立在电磁场的基础上,未导入加速器的实体模型。Geant4 能够准确地对带电粒子的束流动力学进行计算,与传统数值计算方法相比较,对于静态平衡轨道,二者差异较小,相对误差不超过 0.01%;对于径向运动而言,二者基本趋于一致;对于轴向运动的计算,二者有一定的差异,主要是由于二者对于轴向磁场的差值方法差异导致;在加速过程中,程序导入由 Opera 仿真模拟得到的静电场数据以及 HFSS 计算得到的腔压变化曲线,对由离子源出射粒子进行加速,结果表明: Geant4 能够正确模拟带电粒子在电磁场中的加速行为;程序能够准确地判断粒子是否打在电极上,从而更趋近于实际情况,通过轴向偏移判断粒子是否超过磁隙以及粒子的运动时间来判断粒子是否滑相,从而加快计算效率。

下一步工作将针对 Geant4 导入加速器实体物理模型以及束流与加速器内部空气分子相互作用进行相关研究,从而实现更为真实的回旋加速器束损分析。

参考文献:

- [1] 秦斌. 虚拟样机环境下的紧凑型回旋加速器物理设计[D]. 武汉: 华中科技大学, 2007. (Qin Bin. Design of compact cyclotrons in virtual prototyping environment[D]. Wuhan: Huazhong University of Science and Technology, 2007)
- [2] Smirnov V. Computer codes for beam dynamics analysis of cyclotronlike accelerators[J]. *Physical Review Accelerators and Beams*, 2017, 20(12): 124801.
- [3] Agostinelli S, Allison J, Amako K, et al. Geant4—a simulation toolkit[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2003, 506(3): 250-303.
- [4] Poole C M, Cornelius I, Trapp J V, et al. Fast tessellated solid navigation in GEANT4[J]. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 2012, 59(4): 1695-1701.
- [5] Poole C M, Cornelius I, Trapp J V, et al. A CAD interface for GEANT4[J]. *Australasian Physical & Engineering Sciences in Medicine*, 2012, 35(3): 329-334.
- [6] Roberts T J, Beard K B, Ahmed S, et al. G4beamline particle tracking in matter dominated beam line[C]//Proceedings of the Particle Accelerator, 24th Conference (PAC'11). 2011: 373-375.
- [7] Sato A. G4beamline simulation for the comet solenoid channel[C]//Proceedings of IPAC'10. 2010: 3449-3451.
- [8] Jones F W, Planche T, Rao Y N. Tracking in a cyclotron with Geant4[C]//Proceedings of Cyclotrons2013. 2013: 423-425.
- [9] 何小中, 杨国君, 龙继东, 等. 小型回旋加速器物理设计[C]//第二届全国核技术及应用研究学术研讨会大会论文摘要集. 2009: 836-841. (He Xiaozhong, Yang Guojun, Long Jidong, et al. Physical design of mini-type cyclotron[C]//National Symposium on Nuclear Technology and Applied Research. 2009: 836-841)
- [10] 姚红娟. CYCIAE-100回旋加速器轴向注入与中心区理论和实验研究[D]. 北京: 清华大学, 2008. (Yao Hongjuan. Theoretical and experimental study of the CYCIAE-100 cyclotron injection system and central region[D]. Beijing: Tsinghua University, 2008)
- [11] 唐靖宇, 魏宝文. 回旋加速器理论与设计[M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2008. (Tang Jingyu, Wei Baowen. Theory and design of cyclotrons[M]. Hefei: University of Science and Technology of China Press, 2008)

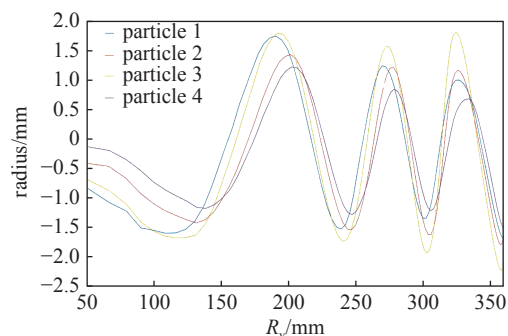


Fig. 8 Radial oscillation

图 8 粒子的横向振荡行为