



·粒子束及加速器技术·

深度高斯过程辅助的光阴极注入器优化设计*

孙 正^{1,2}, 辛天牧^{1,2}

(1. 中国科学院 高能物理研究所, 北京 100049; 2. 中国科学院大学, 北京 100049)

摘 要: 环形正负电子对撞机(CEPC)对注入器出口处的束团的电荷量、横向发射度、纵向长度等指标提出了严格的要求,设计开发高性能的电子枪及注入器成为了重要挑战。为了得到满足指标的束流,必须同时考虑众多非线性且相互耦合的变量。基于光阴极微波电子枪,提出了一种用多目标遗传算法在高维参数空间进行搜索的方法,对束团的横向归一化发射度和纵向长度进行优化,以期将电子枪的性能发挥至极限。由于考虑空间电荷效应后的束团传输过程模拟计算非常耗时,我们构建了一个3层的深度高斯过程作为替代模型,以解决目标值计算开销大的问题。通过对影响束流横、纵向相空间演化的关键因素分析,共确定了16个几何参数和10个束流元件参数。最后,展示了对由一个L-band的常温微波电子枪、一对螺线管和一个行波加速管组成的注入器,在初始电荷量为10 nC的优化结果。在计算了8000个有效解后,观察到在两个优化目标上均表现良好的解,其对应的横向归一化发射度为 $19.8\pi\text{-mm-mrad}$,束团长度(RMS)为1.0 mm,与当前的设计结果比较,横向归一化发射度压低了约70%。

关键词: 微波电子枪;深度高斯过程;多目标优化;替代模型;高维参数优化

中图分类号: TL503

文献标志码: A

doi: 10.11884/HPLPB202335.230097

Optimization design of photocathode injector assisted by deep Gaussian process

Sun Zheng^{1,2}, Xin Tianmu^{1,2}

(1. Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China;

2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract: The Circular Electron-Positron Collider (CEPC) has high requirements for bunch charge, transverse emittance, and longitudinal length at the injector exit. Consequently, designing a high-performance electron gun and injector has become a challenge. To design an injector that meets the targets, many nonlinear and mutually coupled parameters need to be considered simultaneously. Therefore, we propose a method of searching in a high-dimensional parameter space using a multi-objective genetic algorithm to optimize the normalized transverse emittance and longitudinal bunch length, thus to maximize the performance of the electron gun. Since the full simulation of bunch transportaion with spacecharge effect is extremely time consuming, we adopted the deep Gaussian process as an surrogate model to solve high-dimensional parameter optimization problem. Through the analysis of key factors affecting the evolution of beam transverse and longitudinal phase space, a total of 16 geometric parameters and 10 beam element parameters have been determined in this paper. we present a design optimization for an injector consisting of an L-band radio frequency electron gun, a pair of solenoids, and a traveling wave tube, with an initial charge of 10 nC. After calculating 8000 effective solutions, we acquired a good approximation to the Pareto front between two objectives. The corresponding transverse normalized emittance is $19.8\pi\text{-mm-mrad}$, and the RMS beam length is 1.0 mm. Compared with the design requirement, the transverse normalized emittance is reduced by about 70%.

Key words: radio frequency electron gun, deep Gaussian process, multi-objective optimization, surrogate models, high dimensional optimization

* 收稿日期:2023-04-21; 修订日期:2023-10-29

联系方式:孙 正, sunzheng@ihep.ac.cn。

通信作者:辛天牧, xintm@ihep.ac.cn。

电子枪及注入器的设计一直是电子加速器关键课题之一^[1]。作为加速器的源头部件,从电子枪获得的束流一定程度上决定了整台加速器的束流品质。根据环形正负电子对撞机(CPEC)的技术报告^[1],其正电子源和预注入段(PSPAS)所需的电子束电荷量要求达到 10 nC 以上,这无疑对电子枪及注入器的设计提出了新的挑战。

在注入器的设计中,我们需要对众多参数和不同方面的性能综合考虑,而参数与参数之间、参数与目标之间绝大多数呈非线性关系,通过人工的方法找到一组比较好的解是不容易的,并且效率低,无法将注入器的性能发挥至极限。针对此类问题,通常可以采用多目标优化算法,例如:多目标遗传算法(MOGA)。这类算法已广泛应用于加速器领域,包括电子枪优化设计^[2-8]。国内外已有多个团队在此方面开展研究,最早是康奈尔大学和 Jefferson 实验室(JLab)的研究人员提出多目标优化算法对注入器性能提升的设想^[4-5]。他们考虑了包括各元件的纵向位置、加速梯度的振幅和相位、电压和激光的光斑尺寸、脉冲时间等 22 个决策变量,分别对 100 pC 情况下给出 0.1 mm·mrad 结果和 1 nC 情况下给出 0.7 mm·mrad 的优化结果。A. Hofler 等人^[6]利用优化算法给出了 1 nC 电荷量下横向归一化发射度在 1~2 mm·mrad 的设计参数,同时他们发现,在总共 360 次模拟计算后,遗传算法能找到与手动扫描得出的最小发射度和束流尺寸相同的解,这无疑能大大提升研究人员的设计效率,展示出优化算法在未来更复杂、参数更多的注入器的设计中的巨大潜力。但在传统的注入器设计方案中,绝大多数工作考虑的参数仍不够全面。例如,只考虑束流元件参数对束流动力学优化,或者是只考虑对腔形的几何参数,对腔的微波性能优化。根据微波电子枪理论和设计经验,腔内的电磁场能直接影响束团的横、纵向相空间的变化,将束流元件参数和电子枪腔形参数综合分析是一个更佳的选择。

随着参数空间维度增加,用优化算法搜索时需要计算的解的数量大大增加,利用束流仿真程序 Astra^[9]单独计算一个解的平均时间达到 5 min 甚至更高,这无疑会制约将该思路应用到实际的可能。为了解决这个问题,本文将深度高斯过程(DeepGP)作为替代模型,代替束流仿真程序对解的目标值评估,以加速算法的收敛速度。

光阴极微波电子枪因具有高流强、低发射度和高亮度的优势,得到了广泛应用^[10]。因此,本文基于光阴极微波电子枪的发射原理,探索产生高电荷量、低发射度和短束团的注入器的性能极限,提出了通过非支配排序遗传算法(NSGA)联合优化电子枪的几何结构和束流元件的思路,尽可能将注入器出口束团的横向归一化发射度和束团长度压低。最终给出了初始电荷量 10 nC、束损在 10% 以下的低发射度、短束团的注入器设计。在本文中,若无特殊说明,发射度均为横向归一化发射度 $\epsilon_{n,l}$ 。

1 优化算法和模型

1.1 优化算法及替代模型

近年来,NSGA-II 算法一直是解决多目标优化问题的热门算法之一^[11]。该算法是基于精英种群保留策略的快速非支配排序算法。其作者 K. Deb 于 2014 年提出了改进版本 NSGA-III^[12],该版本在许多优化问题中表现出比 NSGA-II 更优异的性能,例如收敛速度、种群的多样性和对小种群优化方面。因此,我们选择将 NSGA-III 算法作为基础搜索方法,NSGA-III 算法的原理和测试见文献 [12]。

高斯过程(GP)是随机过程的一种形式^[13],它能提供一种贝叶斯非参数推断框架,用于数据的高维非线性空间推断,经常被应用于解决机器学习领域的非线性回归和分类问题。下面给出了由标准高斯过程推导至深度高斯过程的原理。

对于输入数据 $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_n]$, 函数值 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = [f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_n)]$ 都服从多元高斯分布,标准的高斯过程可以定义为

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) \sim N(\boldsymbol{\mu}(\mathbf{x}), \mathbf{K}(\mathbf{x}, \mathbf{x})) \quad (1)$$

式中: $\boldsymbol{\mu}(\mathbf{x})$ 是均值函数,是每个维度的均值; $\mathbf{K}(\mathbf{x}, \mathbf{x})$ 是协方差函数,也称核函数。

选择合适的核函数作为高斯过程衡量两个采样点之间的“距离”是一个关键步骤。对于已知的采样点 \mathbf{x}^* , 其先验分布为: $\mathbf{f}(\mathbf{x}^*) \sim N(\boldsymbol{\mu}^*, \mathbf{K}(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^*))$, 那么在已知 $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ 和 $\mathbf{f}(\mathbf{x}^*)$ 先验分布的情况下,通过联合概率分布可以推导出 \mathbf{f}^* 的后验条件分布: $\mathbf{f}^* \sim (\boldsymbol{\mu}', \mathbf{K}')$, 其中, $\boldsymbol{\mu}' = \mathbf{K}^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{f}$, $\mathbf{K}' = \mathbf{K}^{**} - \mathbf{K}^{*T} \mathbf{K}^{-1} \mathbf{K}^*$ 。后验均值 $\boldsymbol{\mu}'$ 就是对 \mathbf{f}^* 的估计值,标准差 \mathbf{K}' 是估计的不确定度。这就是标准的高斯过程对采样点 \mathbf{x}^* 的目标值估计的原理,它的计算速度不受样本维度的影响,而仅与样本数量的三次方有关,因此适用于对高维参数的目标值估计。尽管高斯过程能从数学上解释对目标值的估计,但当输入样本具有高维度时,仍然存在准确度不高的问题^[14]。Neil D. Lawrence 等人于 2014 年提出了 DeepGP 理论^[14],它是通过堆叠的结构组成多层的 GP 模型,使每一个 GP 的输出作为下一个 GP 的输入,他们通过

2个测试实验证明了DeepGP相比于GP能够提供更准确的高维输入与目标值的关系估计。在标准的GP模型中,我们需要对核函数的超参数进行优化,通常采取极大似然估计的方法,通过最大化边缘似然函数找到其最大值处对应的超参数组合。在DeepGP模型中,根据图1堆叠的结构,边缘似然函数可以写为

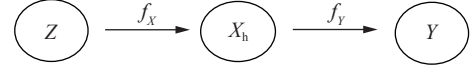


Fig. 1 Single layer structure diagram of DeepGP model

图1 DeepGP模型单层结构示意图

$$\lg p(Y) = \lg \int p(Y|X)p(X|Z)p(Z)dXdZ \quad (2)$$

式中: Z 是第一层的输入,也是第 H 个中间层,即 $Z = X_H \in R_{N \times Q}$,这里的 N 表示数量, Q 是输入的维度。中间层是 X ,多层表示为 X_h , $X_h \in R_{N \times Q}$, $h = 1, \dots, H-1$, H 代表中间层个数, Q_h 是中间层的维度。 Y 表示输出层, $Y \in R_{N \times D}$, D 是输出变量的维度。

对于训练数据,我们可以知道先验分布 $p(Z)$,难以求解的是 $p(Y|X)$ 、 $p(X|Z)$,它们是经过GP的非线性变化后得到的分布。通常应用Jensen不等式对公式(2)求解其变分下界。通过引入两组伪输入点 $\tilde{X} \in R_{N \times Q}$ 和 $\tilde{Z} \in R_{N \times Q}$,变分下界可以表示为

$$\lg p(Y) \geq F_v = \int Q \lg \frac{p(Y|F_Y)p(F_Y|X)p(X|F_X)p(F_X|Z)p(Z)}{Q} dXdZdF_YdF_X \quad (3)$$

式中: Q 是引入的变分分布, F_Y 、 F_X 是关于 X 、 Z 的采样值,这里的 $p(F_Y|X)$ 、 $p(F_X|Z)$ 仍然是难求解的。两组伪输入点对应的函数值是 $U_Y \in R_{N \times D}$ 和 $U_X \in R_{N \times Q}$ 。于是似然函数可以写为

$$p(Y|X, \tilde{X}) = p(Y|F_Y)p(F_Y|U_Y, X)p(U_Y|\tilde{X})dF_YdU_Y \quad (4)$$

$$p(X|Z) = p(X|F_X)p(F_X|U_X, Z)p(U_X|\tilde{Z})dF_XdU_X \quad (5)$$

需要注意的是 F_Y 、 U_Y 是来源于相同的GP模型, $p(U_Y)$ 、 $p(F_Y|U_Y, X)$ 也服从高斯分布。 Q 的形式定义为

$$Q = p(F_Y|U_Y, X)q(U_Y)q(X)p(F_X|U_X, Z)q(U_X)q(Z) \quad (6)$$

这里的 $q(X)$ 和 $q(Z)$ 可以由均值、方差参数来定义高斯分布,它们的形式为

$$q(X) = \prod_{q=1}^Q N(\mu_q^X, S_q^X), \quad q(Z) = \prod_{q=1}^{Q_z} N(\mu_q^Z, S_q^Z) \quad (7)$$

通过将 Q 分布、似然函数代回到变分下界,抵消掉分子中难求解的 $p(F_Y|U_Y, X)$ 、 $p(F_X|U_X, Z)$ 后,整理得到如下形式的变分下界

$$F_v = \int Q \lg \frac{p(Y|F_Y)p(U_Y)p(X|F_X, U_X)p(U_X)p(Z)}{Q'} dXdZdF_YdF_XdU_YdU_X \quad (8)$$

式中: $Q' = q(U_Y)q(X)q(U_X)q(Z)$,公式(8)就是最终需要优化的目标,即找到最大 F_v 对应的参数集合。通过整合、化简得到如下简洁形式

$$F_v = g_Y + r_X + H_{q(X)} - \text{KL}[q(Z)||p(Z)] \quad (9)$$

式中: H 是代表对应分布的熵值,KL是Kullback-Leibler散度, g_Y 、 r_X 的表达式如下,其中 $\langle \cdot \rangle$ 表示期望。

$$g_Y = g(Y, F_Y, U_Y, X) = \left\langle \lg p(Y|F_Y) + \lg \frac{p(U_Y)}{q(U_Y)} \right\rangle_{p(F_Y|U_Y, X)q(U_Y)q(X)} \quad (10)$$

$$r_X = r(X, F_X, U_X, Z) = \left\langle \lg p(X|F_X) + \lg \frac{p(U_X)}{q(U_X)} \right\rangle_{p(F_X|U_X, Z)q(U_X)q(X)q(Z)} \quad (11)$$

以上所求解的目标函数均能由已知的和定义的高斯分布给出。拓展至多层高斯过程,多层结构具体形式如图2所示。变分下界的形式最终表示为

$$F_v = \sum_{m=1}^{M_Y} g_Y^{(m)} + \sum_{h=1}^{H-1} \sum_{m=1}^{M_{X_h}} r_{X_h}^{(m)} + \sum_{h=1}^{H-1} H_{q(X_h)} - \text{KL}(q(Z)||p(Z)) \quad (12)$$

式中: M_h 表示 h 层条件独立的子集。最终,我们通过最大化变分下界 F_v 来得到参数组合,从而得到优化后的

DeepGP 模型。

如图 3 所示, 我们的优化算法是基于 NSGA-III 算法在高维参数空间搜索的方式, 使用了一个由 3 层 GP 组成的 DeepGP 作为替代模型。具体来说, 首先随机产生初始种群, 由 NSGA-III 算法迭代 15 次产生足够的初始训练集后, 再传递给 DeepGP 对前 15 代中的 M 个有效解进行训练, 以获取先验 DeepGP 模型。然后用 NSGA-III 算法对当前种群进行选择、交叉和变异操作, 得到 m_1N 个子代种群, 将这些子代种群传递给替代模型进行评估, 并筛选出 m_2N 个“精英子代(即非支配排序中排序靠前的子代)”和父代种群进行非支配排序, 得到真实的子代种群(即实际传递至下一代的种群), 并作为下次迭代的父代种群。随着种群迭代, 为了更新 DeepGP 的先验模型, 提升其预测能力, 将其前 5 代的有效解作为每一次迭代中的训练样本。整个计算过程经过多次迭代, 直到满足终止条件(本文中是达到最大迭代次数)跳出迭代过程并得到最优解集。

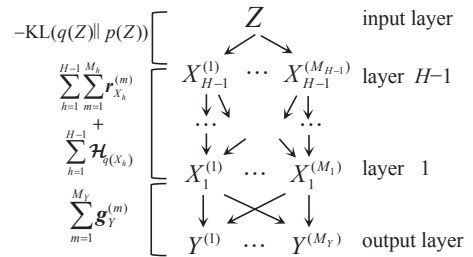


Fig. 2 Schematic diagram of multilayer structure of DeepGP model^[14]

图 2 DeepGP 模型多层结构示意图^[14]

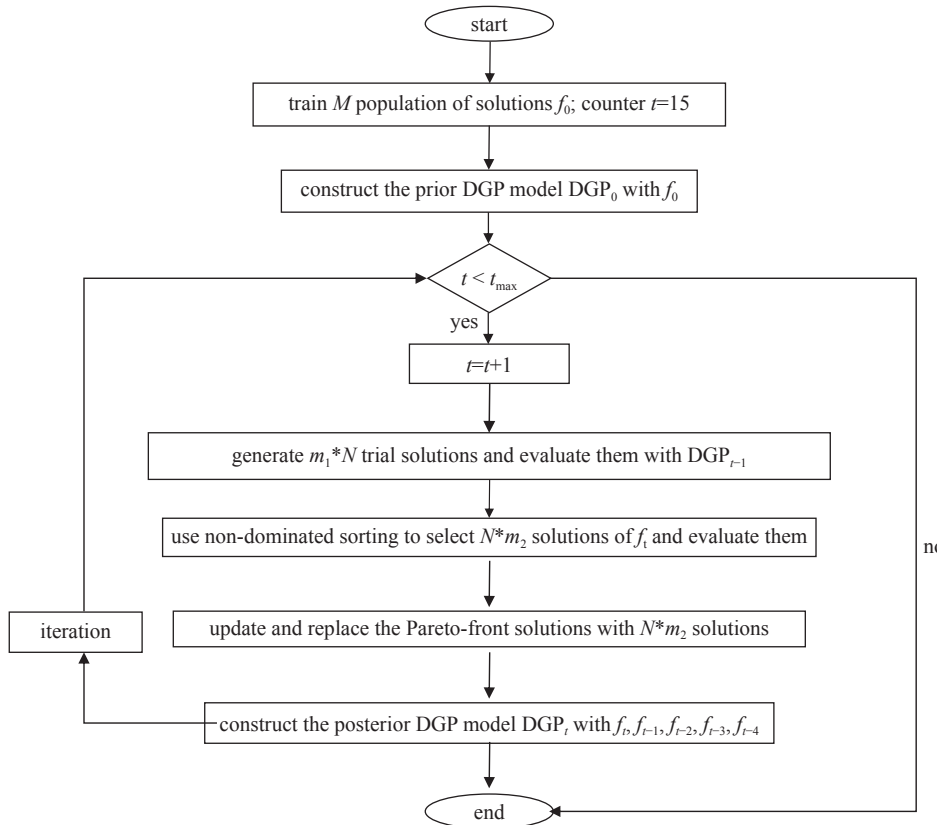


Fig. 3 Block diagram of algorithm^[2]

图 3 算法的框图^[2]

1.2 模型参数介绍

本文优化的注入器由 L-band 的常温微波电子枪, 一对主、副螺线管和一个 18 腔、加速梯度为 30 MV/m 的 S-band 行波管组成。螺线管环绕在枪的外侧, 枪的出口后跟紧一段漂移段后接入行波管。我们最终确定了 26 个优化参数, 包括 16 个几何结构参数和 10 个束流元件相关的参数。使用 Astra 程序计算束流动力学, Poisson Superfish 软件^[15]求解腔内的电场分布。

如图 4 所示的结构, 几何参数分别是: 枪的出口长度、半径、整腔的长度及半径、首腔占整腔的比例、阑片孔的厚度及半径、阑片孔的弧圆心角及半径、鼻锥的半径及弧区半径和圆心角。我们通过定义这些结构参数来描述整个电子枪的形状, 并由 Poisson Superfish 仿真软件计算枪内的轴向电场分布。考虑加工技术的约束条件和计算结果, 表 1 给出了各几何参数的具体范围。

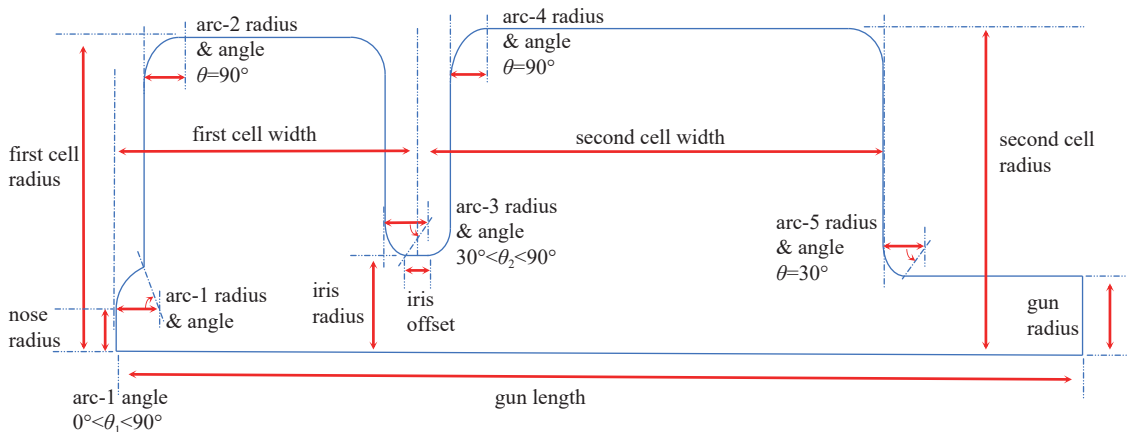


Fig. 4 Schematic diagram of the geometric structure of the electron gun

图 4 电子枪的几何结构示意图

虽然有许多指标来考察电子枪的设计,但本研究重点关注的是腔内的轴向电场分布,其他指标暂不作为优化目标。

注入器的布局如上文所述,最长距离从阴极到观察点为 8 m。注入器包含产生束流的微波电子枪、用于发射度补偿的主螺线管、用于束流升能的行波加速管以及放置在阴极后的反向螺线管,以抵消主螺线管在阴极处的磁场。给定阴极处的初始束团分布:宏粒子数量为 10000,束团电荷量为 10 nC,横纵向分布均为高斯($\sigma_{x,y}=2$ mm; $\sigma_z=2$ ps),本文设计目标旨在注入器出口处产生发射度低于 $30 \pi \cdot \text{mm} \cdot \text{mrad}$ 和束长(RMS)短于 1 mm 的束团。

影响发射度的增长的原因有很多,其过程也非常复杂。本文主要探索对实现束团的发射度补偿的轴向磁场和对束团加速的微波场的优化。首先是阴极处的电场,更高的加速梯度有利于快速地将几乎静止的束团加速到相对论能量,最大限度地减少空间电荷效应的负面影响。同时,为了尽可能抵消阴极处由头部粒子产生的空间电荷场对尾部的粒子受到的加速场的削弱效应,减小由空间电荷力和等离子体振荡对横向发射度的影响,降低束团的能散,通常采用偏峰加速的方法,即通过调整合适的高频相位使得头部粒子“看到”的加速场小于尾部粒子“看到”的加速场,从而补偿由空间电荷引入的能散,因此我们将轴向的最大电场和轴向电场分布(由电子枪的几何参数决定)作为优化参数。此外,因为束团各个纵向切片所受的空间电荷力不一致,会导致投影发射度增长。如果在合适的位置放置螺线管,它能够起到聚焦透镜的作用,使束团变为收敛,在经过一段漂移后,可以使束团的发射度得到补偿。因此,对螺线管磁场分布的优化是必要的。本文使用公式(13)来描述半径为 R 、长度为 L 的螺线管的轴向磁场分布,并将螺线管的中心位置 z 视为优化参数之一。

$$B_z(z) = B_0 \left(\frac{\Delta z_+}{\sqrt{\Delta z_+^2 + R^2}} - \frac{\Delta z_-}{\sqrt{\Delta z_-^2 + R^2}} \right) \quad (13)$$

式中: $\Delta z_{\pm} = z \pm L/2$,螺线管的半径 R 由腔的半径参数决定, B_0 、 L 是需要优化的参数。根据 L. Serafini 提出的不变包络理论公式^[16],对于给定最大加速梯度为 80 MV/m,至少需要 0.245 T 的磁场才能在 RF 枪内满足稳定传输的匹配条件。在文献 [17] 中作者给出了电子枪出口处的发射度的理论公式,其中由高频场引入的发射度可以写成

$$\epsilon_{n,rf}(\pi \cdot \text{m} \cdot \text{rad}) = 4 \left(\langle p_{rf}^2 \rangle \langle r^2 \rangle - \langle p_{rf} r \rangle^2 \right)^{1/2} = \frac{\alpha k \sigma_r^2}{2\pi} \left| \cos(\phi_f(\phi_0)) \frac{d\phi_f(\phi_0)}{d\phi_0} \right| \Delta\phi_0 \quad (14)$$

表 1 几何参数的范围

Table 1 Range of geometric parameters

parameter	unit	range
width of nose	cm	[0.5, 1.5]
radius of arc-1	cm	[0.0, 1.0]
angle of arc-1	°	[0, 90]
radius of iris	cm	[3.0, 5.0]
width of iris	cm	[1.0, 2.6]
angle of arc-3	°	[30, 90]
radius of arc-3	cm	[0.5, 1.0]
length of gun	cm	[27.0, 36.0]
width of gun	cm	[1.0, 2.5]
length of first cell	cm	[4.4, 8.4]
length of second cell	cm	[10, 12]
radius of first cell	cm	[8.5, 9.5]
radius of second cell	cm	[8.5, 9.5]
radius of arc-2	cm	[0.5, 2.0]
angle of arc-2	°	90
radius of arc-4	cm	[0.5, 2.0]
angle of arc-4	°	90
radius of arc-5	cm	[0.5, 2.0]
angle of arc-5	°	30

式中: $\alpha = \frac{qE_0}{m_0c^2k}$, 是描述加速场强度的无量纲的量, ϕ_f 是电子枪出口处微波场的相位, σ_r 是激光打在阴极上的横向半径(RMS), $\Delta\phi_0$ 是激光脉冲持续时间的半高宽(FWHM)值。因空间电荷效应引入的发射度可以用如下表达式估计^[17]

$$\epsilon_{n,sp}(\pi \cdot m \cdot rad) = \frac{\pi I_{av}}{2\alpha k I_A \sin(\phi_f(\phi_0))} \left(\frac{1}{3\frac{\sigma_r}{\sigma_z} + 5} \right) \quad (15)$$

式中: I_A 是 Alfvén 电流, $I_A=17000$ A; σ_r 和 σ_z 是束团的横向和纵向尺寸(RMS); I_{av} 是平均流强, $I_{av}=I(\phi_0)/2$ 。影响以上两种横向发射度的主要因素包括: 电荷量大小、阴极处加速梯度、微波相位, 微波的波数和激光参数。在我们的问题中, 从阴极发射的束团电荷量为 10 nC, 不考虑激光参数, 微波波数由其波长确定, 将其他因素视为优化目标。束流从电子枪的出口产生后, 为使行波管中的场与束流匹配, 束流通过一段漂移段再进入到行波管中进行加速。因此, 漂移管的长度决定了在行波管的入口处是否满足布里渊层流的条件, 以尽可能降低行波管中的束流包络的振荡。根据文献^[8] 给出的公式, 达到行波管入口时的匹配条件为

$$\sigma_{match} = \frac{1}{\gamma'} \sqrt{\frac{I}{2I_A\gamma}} \quad (16)$$

式中: γ 是束团的能量, γ' 是束团能量对 z 方向的一阶导数。给定行波管的加速梯度, 若束团的横向包络尺寸和能量与行波加速管的加速梯度匹配, 假设包络尺寸为 σ_0 , 变化率为 σ_0' , 我们可以由此估算得到漂移段的长度

$$L = \frac{\sigma_0 - \sigma_{match}}{\sigma_0'} \quad (17)$$

尽管理论给出了漂移段长度的计算公式, 但基于理想的假设, 具体数值可能会产生偏差, 因此, 本文将其作为重要的优化参数之一。综合以上分析, 我们最终确定了 10 个与束流元件相关的参数: 主螺线管的磁场、中心位置、长度, 反向螺线管的磁场、长度, 微波场的加速梯度, 阴极处的相位和行波管的入口位置、相位, 这些参数共同决定束团从阴极处发射, 直至观察点处的横、纵向相空间的变化, 具体的参数范围详见表 2。

表 2 束流元件参数范围

Table 2 Beam element parameter range

parameter	unit	range
peak gun field	MV/m	[30, 80]
cavity phase	°	[0, 360]
solenoid 1 peak field	T	[0.1, 0.5]
solenoid 1 position	m	[0.05, 0.2]
solenoid 1 length	m	[0.05, 0.1]
solenoid 2 peak field	T	[0.0, 0.5]
solenoid 2 length	m	[0.05, 0.15]
solenoid 2 radius	m	[0.02, 0.1]
peak TWT field	MV/m	30
TWT phase	°	[0, 360]
TWT position	m	[0.02, 2.0]

2 束流动力学模拟

本文 NSGA-III 算法的种群数量设定为 200, 交叉和变异的概率、参数分别是: {0.9, 20, 0.1, 20}。因为束流在传输的过程中会有粒子丢失, 为尽可能获得高电荷量束团, 我们将束损率低于 10% 作为约束条件。另外, 由于初始种群是随机生成的, 算法在前几次迭代中会得到两类无效解, 一类是 Poisson Superfish 软件无法计算几何结构中的场分布, 另一类是粒子全部丢失, 导致 Astra 程序求解束流动力学失败。因此, 算法需要通过一定的迭代次数来为替代模型积累训练样本, 本文设置算法迭代 15 次后, 再引入替代模型对种群在经过交叉、变异后倍增的解进行评估, 然后进行非支配排序得到一组“精英”子代, 再将它们与父代的种群竞争, 得到下一代种群。图 5 展示了发射度和束团长度的种群演化过程。

图 5(a) 是第 6 至第 15 代的搜索结果, 图 5(b) 是引入 DeepGP 后从第 15 代至 30 代种群的搜索结果。由于初始种群的随机性, 直至第 6 代开始产生有效解, 根据解的演化趋势, 种群正朝着低发射度、短束长的方向搜索, 表明了算法演化机制的有效性。在第 15 代开始引入 DeepGP 对大种群样本评估, 从图 5(b) 可以发现随着替代模型的引入, 越来越多的有效解被找到, 产生了很多和前几代的解相比发射度更小、束长更短的解。观察到种群的帕累托前沿逐渐形成, 并随着迭代过程不断向前推进。算法在两个目标上搜索速度接近, 并试图在发射度、束长这两个目标之间实现“平衡”。

图 6 展示了算法从第 10 代至第 60 代迭代的种群演化过程, 颜色从蓝色至暗红色依次代表种群序号从第 10 代

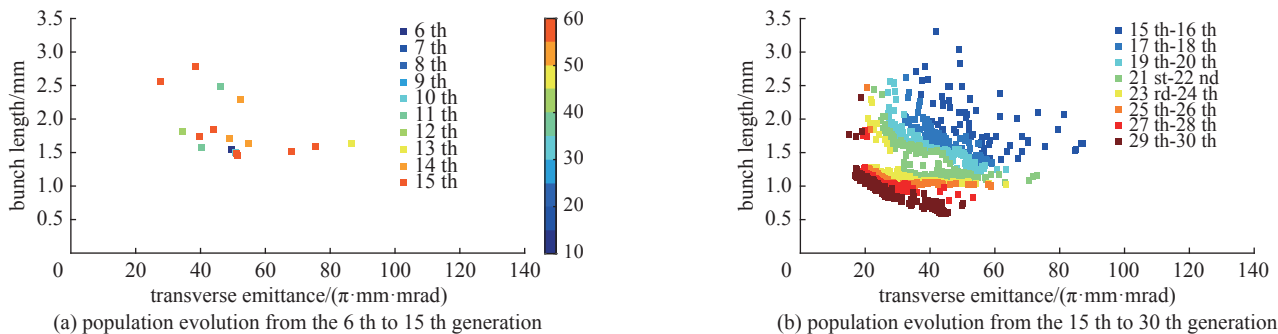


Fig. 5 Evolution of transverse RMS normalized emittance and longitudinal length

图5 算法优化束团发射度和纵向长度的演化情况

递增至第 60 代。从图中可见, 替代模型的引入使得 NSGA-III 算法在高维的参数空间里, 快速找到更优的解, 提升了算法的收敛速度。算法逐渐在第 50 代后趋于收敛, 这表明在该几何结构和束流元件参数组合下, 注入器产生短束长、低发射度束团的性能已经推至极限。从图 7 的演化过程来看, 最终得到的帕累托前沿上, 最低发射度对应的解为: $[17.97 \pi \cdot \text{mm} \cdot \text{mrad}, 1.41 \text{ mm}]$, 最短束长的解为: $[44.88 \pi \cdot \text{mm} \cdot \text{mrad}, 0.43 \text{ mm}]$ 。

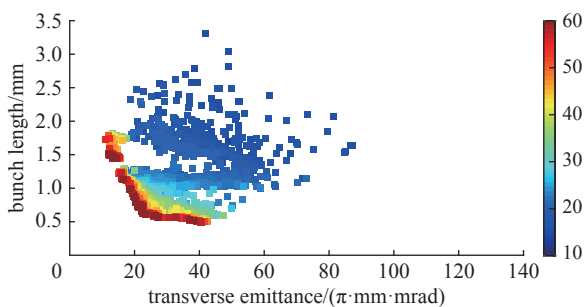


Fig. 6 Evolution of the normalized transverse emittance and longitudinal length of bunch

图6 种群的发射度和纵向长度的演化过程

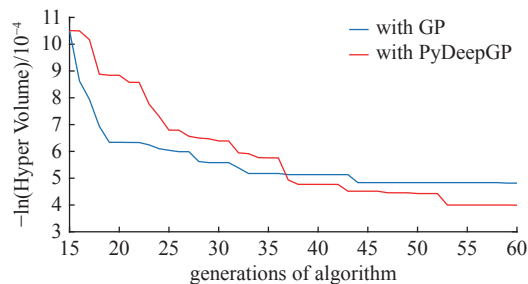


Fig. 7 Negative value of Hyper Volume from NSGA-III with GP and DeepGP

图7 两种方法辅助后的 NSGA-III 算法的收敛指标比较

为了更仔细地评估优化结果, 我们选择了在各个指标上都表现好的一个解: 电荷量为 9.2 nC 、发射度为 $19.8 \pi \cdot \text{mm} \cdot \text{mrad}$ 、束长为 1.0 mm , 束团横向尺寸由初始 2 mm 压缩至 1 mm , 与现有的设计相比^[1], 发射度压低了约 70%。表 3 展示了对应的电子枪的主要几何结构参数和束流元件的参数, 其中注意到半腔和整腔的半径并不相同, 分别是 9.11 、 8.71 cm , 这两个参数主要影响腔间的场平、谐振频率和腔之间的耦合。可以发现, 优化得到的电子枪腔形已经可以提供束流所需的加速场, 基于工程需要的微波性能还在进一步迭代。

本文利用 DeepGP 方法来提升优化算法 NSGA-III 在解空间的搜索能力, 从而增加算法的收敛速度, 相比较标准的 GP 方法, 从收敛性指标 HyperVolume^[18](值越大, 表示收敛性越好) 的比较结果可以看到, 采用 DeepGP 后的 NSGA-III 的 HyperVolume 比采用 GP 方法的收敛指标更大。在相同初始条件下经过 60 次迭代计算, DeepGP 比 GP 更有助于 NSGA-III 算法的收敛, 进而大大减少了计算开销。图 7 展示了基于该两种方法辅助 NSGA-III 算法的收敛指标取负对数后的比较结果。

本文采用的 NSGA-III 算法核心是基于 Tian.Y 开发的代

表 3 该优化解对应主要的参数值

Table 3 Main parameter values of a solution

parameter	unit	range
peak gun field	MV/m	80
cavity phase	°	243
solenoid 1 peak field	T	0.3
solenoid 1 position	m	0.12
solenoid 2 peak field	T	0.28
peak TWT field	MV/m	30
TWT phase	°	104
TWT position	m	0.6
radius of iris	cm	4.9
width of iris	cm	1.0
length of gun	cm	24
width of gun	cm	1.5
length of first cell	cm	6.2
length of second cell	cm	11.0
radius of first cell	cm	9.11
radius of second cell	cm	8.71

码库^[18], 替代模型采用的是 Sheffield 大学开源的代码库。硬件环境包括 Intel®Core™ i7-10700 中央处理器(CPU) @2.90 GHz 和 32 GB 内存; 软件环境包括 Windows10、Anaconda3-5.3.1、Python 3.7、MATLAB 2021b。

3 结 论

本文提出了一种利用深度高斯过程(DeepGP)算法辅助的, 将常温微波电子枪的几何参数和束流元件参数联合优化的多目标优化算法。通过分析束流从阴极发射后的传输过程, 共确定了 26 个优化参数和 2 个目标。优化算法经过了 60 次迭代后收敛, 总共调用 Astra 仿真程序计算了 8 000 个有效解, 采用 8 个进程调用 Astra 计算后, 平均计算一个有效解的时间为 1 min。由于参数之间具有较强的关联性, 手动扫描这些参数不仅效率低, 更是难以找到一组在各个指标上均能满足需求的解, 而本文的方法能大大提升找到多组最优解的效率。

本文在最后展示了在高电荷量下实现低发射度和短束团长度的帕累托前沿解, 选择了一个在各个指标上都满足需求的解: 电荷量为 9.2 nC, 发射度为 $19.8 \pi \cdot \text{mm} \cdot \text{mrad}$, 束长为 1.0 mm, 与当前的设计相比, 横向归一化发射度压低了近 70%。优化形状后的电子枪在阴极处达到了 79.8 MV/m 高的加速梯度, 阴极处磁场几乎为 0, 同时也存在小的轴向电场梯度, 引入了横向聚焦, 符合理论的预期结果。我们也发现主要的束流损失发生在行波管处, 因其具有整个系统中最小的束流孔径(约 1 cm)。

未来我们的工作重点包括继续优化算法, 提高模型的训练效率, 使其能够覆盖更大的参数空间。同时我们还将考虑利用 DeepGP 采样高效准确的特点, 尝试开发逆向求解器, 希望通过指定末端束流参数, 直接给出加速器元件的设计参数。

参 考 文 献:

- [1] The CEPC Study Group, Iqbal M. CEPC conceptual design report: volume 1 - accelerator[R]. Beijing: Chinese Academy of Sciences, 2018.
- [2] Song Minghao, Huang Xiaobiao, Spentzouris L, et al. Storage ring nonlinear dynamics optimization with multi-objective multi-generation Gaussian process optimizer[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 2020, 976: 164273.
- [3] Wan Jinyu, Chu P, Jiao Yi. Neural network-based multiobjective optimization algorithm for nonlinear beam dynamics[J]. *Physical Review Accelerators and Beams*, 2020, 23: 081601.
- [4] Bazarov I V, Sinclair C K. Multivariate optimization of a high brightness dc gun photoinjector[J]. *Physical Review Accelerators and Beams*, 2005, 8: 034202.
- [5] Hannon F E, Hernandez-Garcia C. Simulation and optimisation of a 100 mA dc photo-injector[C]//Proceedings of EPAC 2006. 2006: 3550-3552.
- [6] Hofler A, Evtushenko P, Krasilnikov M. RF gun optimization study[C]//Proceedings of 2007 IEEE Particle Accelerator Conference. 2007: 1326-1328.
- [7] Gulliford C, Bartnik A, Bazarov I, et al. Multiobjective optimization design of an rf gun based electron diffraction beam line[J]. *Physical Review Accelerators and Beams*, 2017, 20: 033401.
- [8] 王程. 高亮度微波电子枪及其前沿技术研究[D]. 上海: 中国科学院大学(中国科学院上海应用物理研究所), 2021. (Wang Cheng. Frontier technology research of high brightness photocathode RF electron gun[D]. Shanghai: University of Chinese Academy of Sciences (Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences), 2021)
- [9] Floettmann K. ASTRA: a space charge tracking algorithm[EB/OL]. http://www.desy.de/~mpyflo/Astra_dokumentation/.
- [10] Rao T, Dowell D H. An engineering guide to photoinjectors[DB/OL]. arXiv preprint arXiv: 1403.7539, 2014.
- [11] Deb K, Pratap A, Agarwal S, et al. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2002, 6(2): 182-197.
- [12] Deb K, Jain H. An evolutionary many-objective optimization algorithm using reference-point-based nondominated sorting approach, part i: solving problems with box constraints[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2014, 18(4): 577-601.
- [13] Rasmussen C E, Williams C K I. Gaussian processes for machine learning[M]. Cambridge: MIT Press, 2006.
- [14] Damianou A C, Lawrence N D. Deep Gaussian processes[DB/OL]: arXiv preprint arXiv: 1211.0358, 2013.
- [15] Halbach K, Holsinger R F. SUPERFISH-A computer program for evaluation of RF cavities with cylindrical symmetry[R]. Los Alamos: LBL, 1976.
- [16] Serafini L, Rosenzweig J B. Envelope analysis of intense relativistic quasilaminar beams in rf photoinjectors: mA theory of emittance compensation[J]. *Physical Review E*, 1997, 55(6): 7565-7590.
- [17] Gao Jie. On the theory of photocathode rf guns[J]. *Chinese Physics C*, 2009, 33(4): 306-310.
- [18] Tian Ye, Cheng Ren, Zhang Xingyi, et al. Techniques for accelerating multi-objective evolutionary algorithms in PlatEMO[C]//Proceedings of 2020 IEEE Congress on Evolutionary Computation. 2020: 1-8.