

Point-to-mesh 法を適用した水野コードにおける エミッタンスの粒子数依存性に関する検討

水野 明彦

2007年3月15日

1 はじめに

山本昌志氏より、エミッタンスの粒子数依存性に関する報告を頂いた。これによると、パルス幅 200mm、エネルギー 0.5MeV の課題について GPT を用いて 3D particle-in-cell の計算を行った結果、エミッタンスの値は 50 万個程度で収束するようだ、とのことであった。ただし、粒子の初期分布に Hammersley Sequence を用いた場合である。山本氏も、GPT において 3D point-to-point の粒子数依存性評価は難しい、とコメントされていたとおり、私のコードを用いて 50 万個の計算を行うと、1m トラッキングした場合、単純計算で 120 日位かかると思われる。これは、基本的に粒子同士の相互作用を計算しているために、計算時間が n^2 に比例してしまうからである。このため、50 万個の計算は事実上不可能である。^{*1}

しかし、なんらかの方法で粒子数を増やして計算を行い、エミッタンスの収束を確認する必要があるため、point-to-point の計算を point-to-mesh で行うことを考え、試してみた。

2 point-to-mesh 法

私のコードでは、各粒子間相互作用を全て計算して、ある粒子が他の全ての粒子から受ける電磁場を求めている。一方で、cavity の電磁場は MAFIA で計算している。MAFIA では、cavity 内部をメッシュに切って、mesh 交点での電磁場の値を計算してファイルに書き出す。トラッキングシミュレーションでは、そのファイルの値を読み込み、粒子の位置での電磁場は、近傍のメッシュ交点からの線形補間で求めている。この方法を、粒子間相互作用の計算に応用することを考えた。すなわち、電子パンチの存在する範囲をメッシュで切って、メッシュ交点に各粒子が生成するの電磁場の積算を計算し、一旦メモリーに蓄える。各粒子が受ける電磁場は、近傍のメッシュ交点の電磁場から線形補間して求める。メッシュは、電子パンチの進み、および拡がりに対応し 1 ステップ毎に切り直すが、現状ではメッシュ交点数は一定である。すなわち、ビームが占める空間が広がる毎に、メッシュ間隔は荒くなっていく。

このようなもの考えたとき、メッシュ交点数を一定にして、粒子数を増やすと、計算時間は粒子数 n に比例する。したがって、数十万個の粒子にも対応可能である。

何も考えずにこの方法を試してみたが、大きな問題があることが分かった。マクロ粒子の初期分布は乱数

^{*1} 始めから計算したいパラメータが分かっており、1 回だけ 120 日間計算すれば問題が解決することが分かっていたら何とかなるかもしれないが、我々は 50 万個でパラメータサーベイをしなければならぬので、何時になったら終わるか分からない。

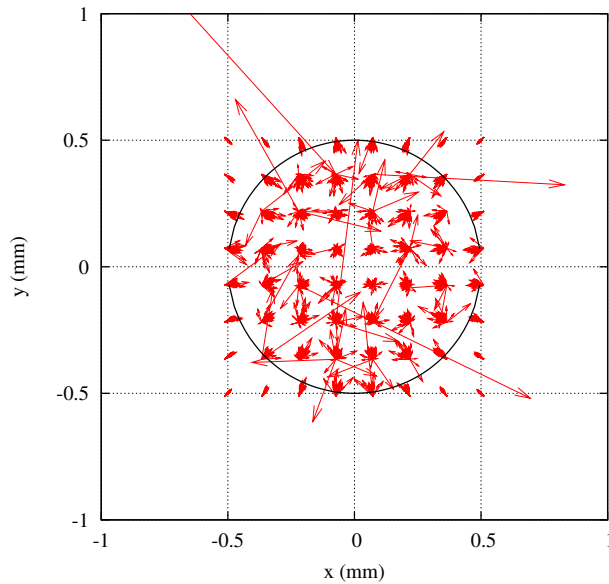


図 1

で与える。これに対し、メッシュ交点はマクロ粒子の位置と相互関係が全く無く、規則正しく整列している。(現状では、メッシュで区切られた最小体積は直方体であり、 x 方向と y 方向のメッシュ間隔は同一である。) したがって、あるメッシュ交点ではマクロ粒子と異常に接近してしまうことがある。この場合、メッシュ交点の電磁場は大変大きくなるので、そのメッシュ交点と隣の交点の間に位置する全マクロ粒子に与えられる電磁場は、大きくなったメッシュ交点の電磁場に引きずられて大変大きくなってしまふ。この結果、エミッタンスの精度が悪くなってしまふ。図. 1 は、パルス長 200mm、ビーム径 ϕ 1mm、エネルギー 0.5MeV、粒子 20000 個で構成される電子パンチを、 $(x \times y \times z) = (8 \times 8 \times 94)$ 本の直線でメッシュ状に切り、各メッシュ交点での電磁場を計算してベクトル表示したものである。電磁場の強さは適当に規格化している。図. 1 では x 、 y 平面を示しているのので、同じメッシュ交点に、 z の値が異なるメッシュ交点のデータが重なっている。このグラフでは、全体としては矢印が x 、 y 原点に向いている。電場が負の方向に電子が動くので、電子パンチは transverse 方向に広がる、ということを示している。しかし、幾らかのメッシュ交点で、非常に大きな電場が存在しており、かつ、あり得ない方向を向いている。これが、マクロ粒子と異常接近しているメッシュ交点のものであり、このまま計算するとエミッタンスの精度が著しく悪化する。

異常接近を排除するため、とりあえず、メッシュに接近し過ぎた粒子からの寄与は計算しないことにした。どこまで接近して良いとするかは大きな問題であるが、ここでは次のようにした。メッシュを切る全体積を V とする。粒子数を n として 1 つの粒子が占める平均体積を求め、それが立方体だと考えた場合の一辺の距離を求める。これは、 $d = \sqrt[3]{V/n}$ である。最接近許容距離は、 d/α と考え、 α を段々と小さな値にしていって、図. 1 のような異常なベクトルが無くなる場所を探した。図. 2 に示すのは $\alpha = 2$ の場合であり、ほぼベクトルの大きさが均等になっている。この $\alpha = 2$ を採用して以下の計算を行った。ただし、 α の値はもっと注意深く、または別の方法で決めるべきであろうと思う。また、線型補間ではなく、複数のメッシュ交点間のフィッティングから電場を求めるとか、他の方法も考える必要がある。

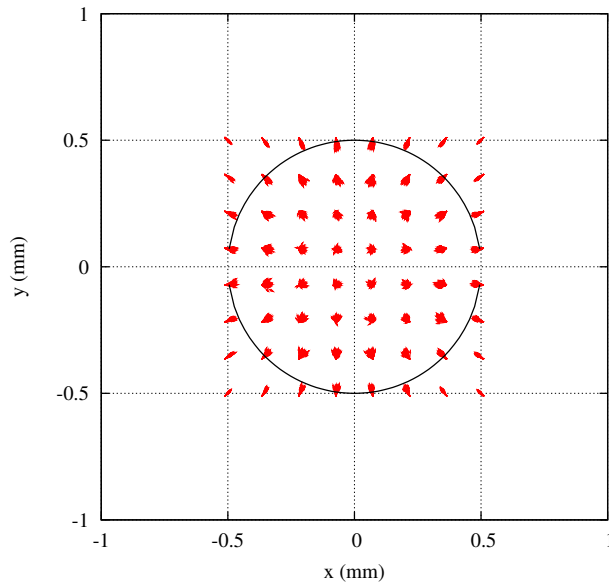


図 2

3 各パラメータの粒子数依存性

前項で記述したように、 $\alpha = 2$ で定義されるような最接近許容距離を採用し、初期パルス長 200mm、ビームサイズ $\phi 1\text{mm}$ 、ビームエネルギー 0.5MeV の条件において各パラメータの粒子数依存性を検証した。なお、トラッキングにおいてメッシュを切る空間の体積 V は時間発展とともに変化するので、最接近許容距離も時間とともに変化している。

粒子数は、2000 個から 80 万個まで計算した。図. 3 にエミッタンス、図. 4 に ΔE 、図. 5 にビーム半径、図. 6 にパルス長をそれぞれ示す。

ΔE については 50 万個でほぼ収束しているように見える。エミッタンスは、80 万個でももう少し収束して

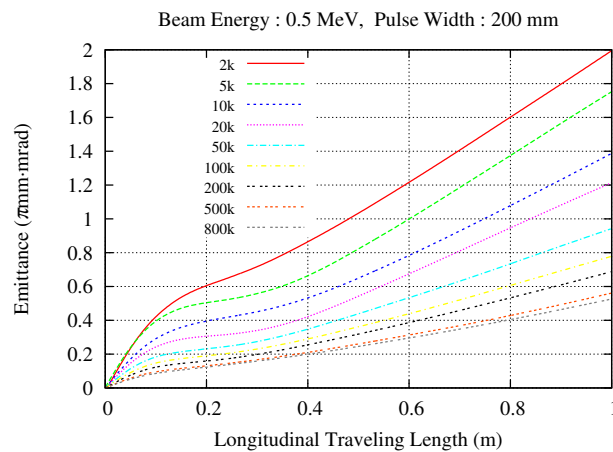


図 3 エミッタンス

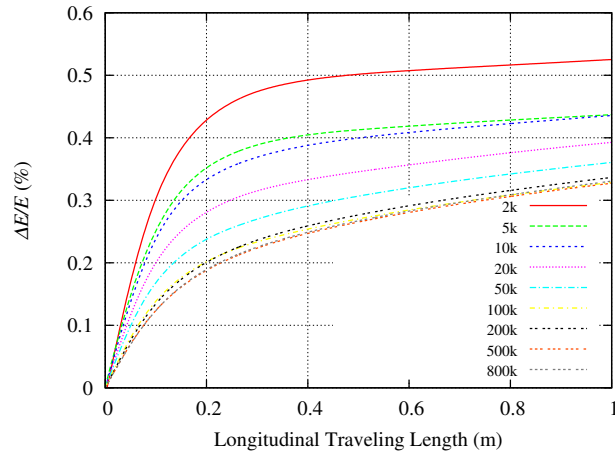


図 4 ΔE

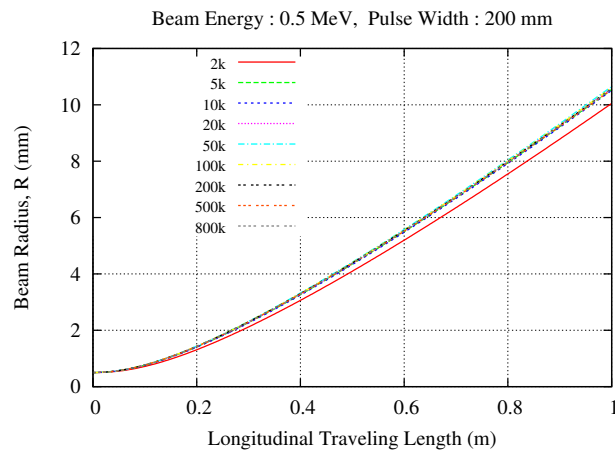


図 5 ビーム半径

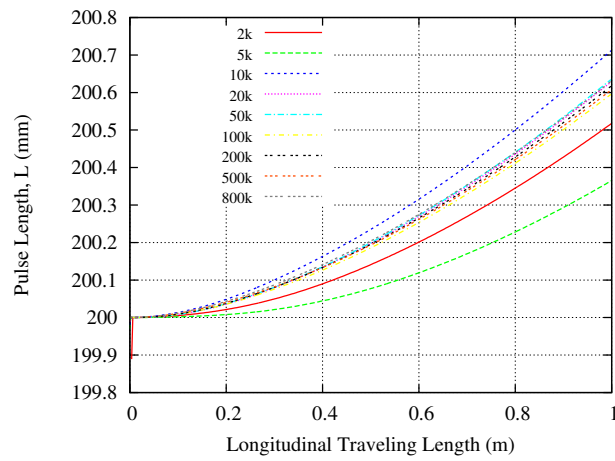


図 6 パルス長

いないかもしれないが、ほぼ収束に達する状況ではある。ビームサイズ、パルス幅については十分に収束していると言えるだろう。

4 考察

今回の粒子数依存性に対する評価は、新たに考案した point-to-mesh 法を用いた。このような方法を用いても良いものなのかどうか、少し考察を行いたい。

point-to-point 法の最大の問題点は、粒子数依存性が大きいにもかかわらず、計算時間が粒子数の 2 乗に比例して増大することである。これに対し、粒子数を増加させる為の方法として point-to-mesh 法を用いた。このようにすると、同じメッシュ内に入った複数の粒子は、ほぼ似通った電磁場を受けることになる。したがって、point-to-mesh 法で粒子数を増大させても、物理的にあまり意味が無いのではないかと考えることもできる。

これに対し、私は次のように考えている。

point-to-point 法にしても、point-to-mesh 法にしても、マクロ粒子を仮定している。マクロ粒子は、複数の電子をまとめて表現しているものであり、トラッキングコード内では点電荷として考えている。しかし、実際は、複数の電子をまとめているから拡がりを持っている。拡がりを持たなければならないものを点電荷で近似していることが、そもそもの誤りである。

ただし、マクロ粒子を遠くから見ると、実際は拡がりを持っているにしても点電荷として近似して大きな誤りはない。これに対し、マクロ粒子を近くで見ると、点電荷という仮定が大きな誤差を生むようになる。

このような観点から考えると、粒子数を増やすということは、マクロ粒子の拡がりの体積を小さくすることである。また、粒子数を増やすと 1 つのマクロ粒子の電荷量が少なくなるので、粒子がメッシュ近傍にあったとしても、その影響を小さくおさえることができる。したがって、point-to-mesh 法においても、粒子数を増やすことには意味がある。

粒子同士が異常接近するということは、お互いのマクロ粒子の拡がりが重なってしまっている、ということである。したがって、この場合には、マクロ粒子相互間の作用は、お互いの中心間を引き合う力では無くなる。この場合を正確に計算するためには、なんらかの方法で粒子の拡がりを考慮する必要がある。今回の計算においてはそれは間に合わないので、とりあえず最近許容距離を導入し、それ以上接近したものについては相互作用を計算しない方法をとった。したがって、物理的におかしな計算をしているわけではない。

ただし、この方法を用いるにあたり、粒子数だけではなく、mesh の切り方に対する最適化も必要であると考えられるが、今回は最適化をしていない。これは、今後検討しなければならない。

また、今回は、Hammersley Sequence を用いなかったため、これに対する考察も必要である。ただし、point-to-mesh 法では、今のところ、粒子の初期分布に対して無関係に mesh を切っている。したがって、このような方法で Hammersley Sequence を用いても、メッシュ交点がマクロ粒子に異常接近する確率は大きくは変わらないであろうから、結果は、乱数を用いた場合とほとんど変わらないだろうと考えられる。

なお、工夫して計算時間の高速化を図ったのではあるが、例えば 50 万個の計算にはちょうど 2 日間を要している。計算時間は、メッシュ数により大きく異なる。この意味においても、メッシュ数に対する各パラメータの依存性を検証し、計算時間をさらに短縮できるかどうか検討しなければならない。

図. 7 に、トラッキング終了後の粒子分布を示す。粒子数は 10 万個の場合である。x-y 平面での粒子分布を見ると、正 8 角形に見える。これは、メッシュの切り方に依存している。また、z-x 平面でみると、 $x = 10\text{mm}$ 、 $x = -10\text{mm}$ のビーム境界で、粒子分布がフィラメント状のノイズを形成している。これらもメッシュ数に関

係しており、このような状況が発生していてもよいのかどうかの検討も加える必要がある。

80万個の場合をグラフにしようと思ったのであるが、ファイルサイズが大きくなり過ぎるので10万個のデータを示した。傾向は同じである。

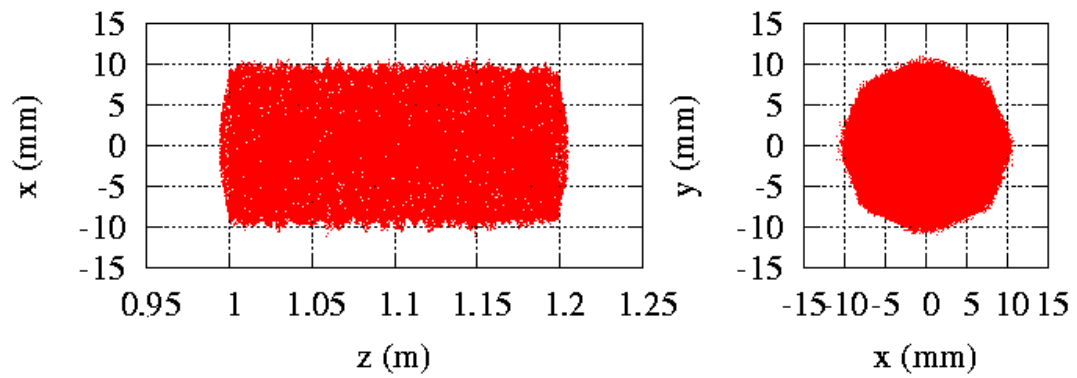


図7 トラッキング終了後の粒子分布

5 付録：point-to-point 法で、初期粒子を規則正しく並べた場合

粒子の初期分布として、規則正しく並べる場合の計算を行ってみた。粒子数依存性を調べる目的で、1300個、9800個、33787個の各々の場合を計算した。1300個の場合の初期分布を図. 8に、エミッタンスの結果を図. 9に示す。

エミッタンスは、この場合では粒子数の一番少ない1300個がもっとも良い。また、粒子数の変化にとともに、エミッタンスの時間発展の様子も変化している。マクロ的観点から見た粒子の初期分布条件を変えないように、粒子数を変えようとしているのであるが、結果としてそのようなにはなっていないことに問題があるのかもしれない。この状態では、エミッタンスの収束について議論出来ないであろう。

粒子を並べる方法を何か工夫すれば良いのかもしれない。例えば、 x - y 平面では、正方形のメッシュを切って、その交点に粒子を置く方法を用いているが、同心円上に粒子を並べていくとか、もっと別の方法を採用すべきであろう。いずれにせよ、この状態では、規則正しく並べる方法を用いることはできないと考えられ更なる検討が必要である。

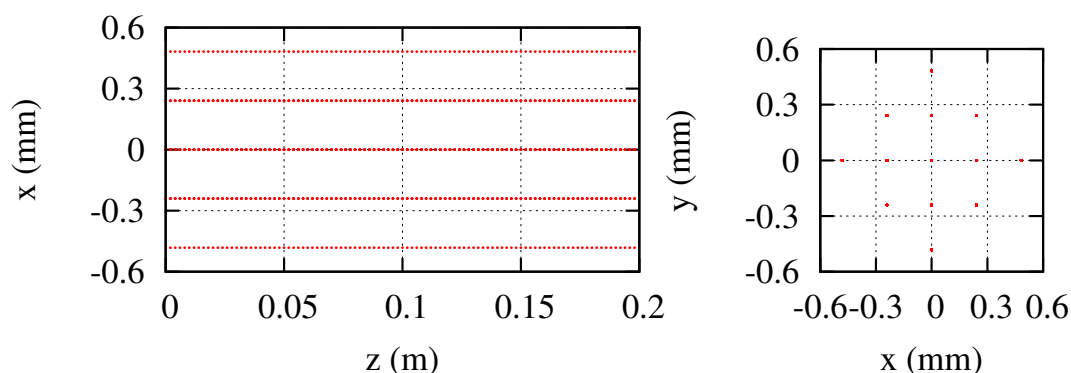


図8 規則正しく並べた場合の初期粒子分布

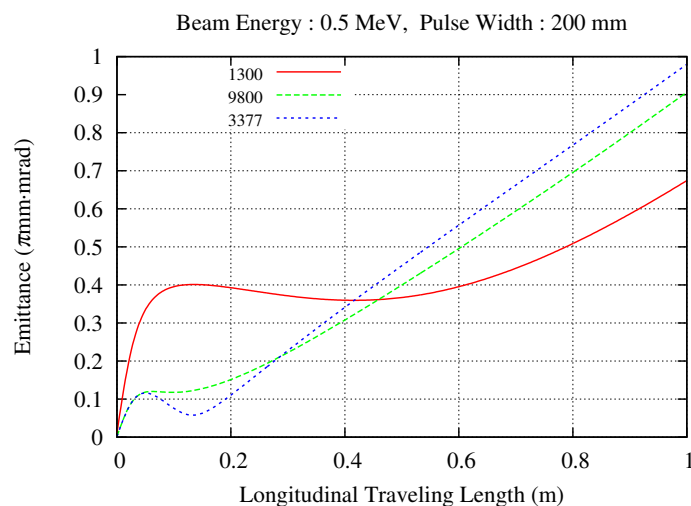


図9 エミッタンスの粒子数依存性