

粒子数と初期分布がエミッタンス計算に及ぼす影響

山本昌志*

2007年2月12日

概要

ベンチマークテストを行っている各コードでエミッタンスの計算結果が異なる原因を探った。GPT を使ってエミッタンスを計算したところ、粒子の初期分布と粒子数が原因のひとつとなっている—という結論を得た。この結論を得た GPT の計算を報告する。

1 はじめに

各コードのベンチマークの結果を見たところ、パルス幅が長い場合の計算結果の違いに驚いた。とくに、メッシュを使うプログラム—Parmela(管さん)とGPT(私)—と、粒子間の相互作用をひとつずつ計算するプログラム—水野さんと山本尚人さんのコード—との間での違いが顕著である。いっぽう、パルス幅が短いときは、両者は比較的良好に一致している。なぜこのようなことが生じるのか?—という疑問に対して、以下のような推測を行った。

- そもそもトラッキングを行った粒子数で、エミッタンス等の計算は収束しているのか? 収束していなければ、計算結果が異なるのは当然だ。収束に関しては、水野さんや他の方も言及している。
- 粒子の初期分布の影響が大きく影響しているのではないか? 初期の粒子の密度のゆらぎはクーロン力のゆらぎになり、エミッタンス増大に寄与する。エミッタンスの小さいビームでは、この効果は無視できないと考えた。

これらのことを調べるために、 $\phi=1$ [mm] , $L=200$ [mm] , $E=0.5$ [MeV] のビームについて、GPT を使って計算した。GPT では、水野さんや山本尚人さんの計算と同じように *3D point-to-point* の計算も可能だし、初期分布も変化させることができる。そこで、GPT をつかい *3D point-to-point* の計算における粒子数と初期分布の影響について計算した。さらに、*3D particle-in-cell* の粒子数の影響についても調べた。

計算の結果、 $\phi=1$ [mm] , $L=200$ [mm] , $E=0.5$ [MeV] のビームの場合、最初にみなさんが報告した粒子数は、収束していないことが分かった。さらに、粒子の初期分布の与え方もエミッタンスの計算に影響することが分かった。以降、詳細を報告する。

2 計算方法

先に示した推測を確かめるために、粒子数や初期分布を変化させて、エミッタンスの変化を計算した。また、空間電荷効果の計算方法の違いによるエミッタンスの収束の具合も調べた。

*国立秋田工業高等専門学校 電気情報工学科

2.1 空間電荷効果

ここでのシミュレーションの空間電荷効果は、GPT のの計算アルゴリズムのうち、次の二通りの方法を用いた。

- *3D point-to-point* 三次元に分布するマクロパーティクルの任意の 2 つの粒子に働く力を全て計算する。
- *3D particle-in-cell* 三次元のマクロパーティクルの重心系に乗った空間のメッシュに区切り、ポアソン方程式を計算して力を求める。

このうち、*3D point-to-point* は水野さんや山本尚人さんの計算方法とほぼ同じ計算と考えている。それに対して、*3D particle-in-cell* は Parmela とほぼ同じ計算方法であろう。また、私が最初に報告した計算結果も *3D particle-in-cell* である。

増田さんの KUBLAI はもっと本格的な二次元の PIC 法なので、GPT では同じような計算はできない。そこで、今回は KUBLAI については言及しないものとする。

2.2 粒子の初期分布

GPT では、粒子の初期分布は 5 種類の方法が選択できる。ここでは、完全な乱数とハマーズリーシーケンス (Hammersley sequence) を使った。完全な乱数¹は水野さんや山本尚人さんの計算に合わせている。ハマーズリーシーケンスは、準乱数と呼ばれるもので、GPT のデフォルトとなっており、前回の私の計算がそのようになっている。

乱数の統計ノイズは、ハマーズリーシーケンスで $1/N$ 、通常の乱数では $1/\sqrt{N}$ になる²。そのため、モンテカルロ計算では、ハマーズリーシーケンスの方が収束が早いらしい。詳細は私は知らないが、完全な乱数の図 1 とハマーズリーシーケンスの図 2 を比べればその理由は明らかであろう。

今回の問題では、 z 方向も考慮の必要がある。 x と y 方向とも同じように乱数が生成されているので、全体の密度のゆらぎは図 1 や図 2 の程度であろう。したがって、計算上生じる密度のゆらぎに起因するエミッタンスの増大は、ハマーズリーシーケンスは乱数の場合に比べて小さくなる。同じ粒子数であれば、ハマーズリーシーケンスの方が計算誤差は小さくなると思う。

管さんの Parmela の初期分布は、両者の中間の性質を持っていると私は考えている。 z 方向は、ハマーズリーシーケンスに近い分布、 x と y 方向は乱数に近い分布である。

¹コンピューターが作る乱数なので、完全とはいえない。

²GPT のマニュアルの受け売りです。

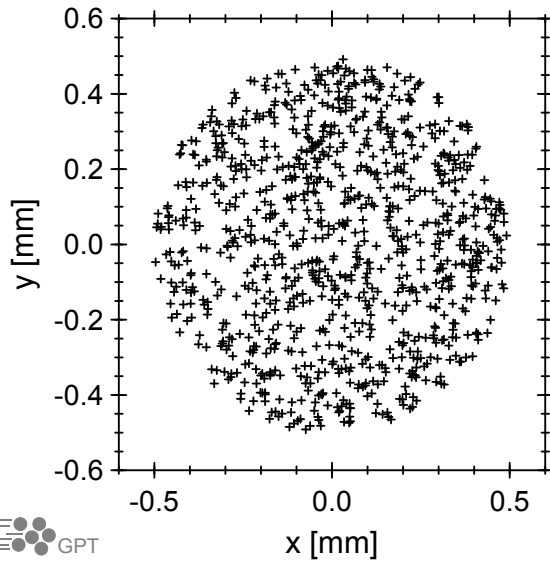


図 1: ランダムに分布させた 1000 個の粒子の xy 断面 .

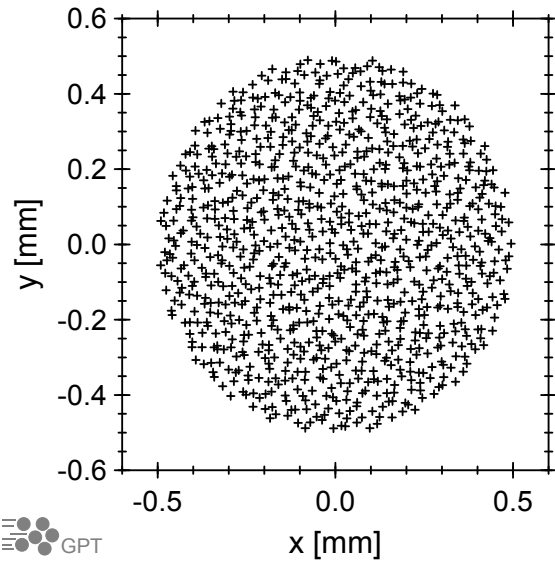


図 2: ハマーズリーシーケンスを使って分布させた 1000 個の粒子の xy 断面 .

3 計算結果

3.1 3D point-to-point の計算

3D point-to-point を用いて空間電荷効果の取り扱った場合の粒子数に依存するエミッタンスの収束の様子を調べた . 初期分布は , $E=0.5$ [MeV] , $L=200$ [mm] , $\phi=1$ [mm] とした . これは , 最初の課題でコードにより計算結果に大きな差が生じたケースである .

初期分布を完全に乱数とした場合の計算結果を図 3 に , ハマーズリーシーケンスを図 4 にしめす . 初期分布がランダムかつ粒子数が 5000 個の場合は , 水野さんや山本尚人さんと同じような計算を行っている . そのため , この GPT をふくめ , 水野さんや山本尚人さんの三つの結果はほとんど同一となっている . このことから , 三つの計算コードにはちゃんと計算していることが確認できる .

初期分布が乱数でもハマーズリーシーケンスでも , 粒子数が 20000 個では計算が収束していない—ことが図から分かる . 早急に , 粒子数を増加させて , 収束を確認する必要がある . そうしないと , SCSS の入射部 ($E=0.5$ [MeV] , $L=200$ [mm] , $\phi=1$ [mm]) の計算には使えないだろう . GPT では 20000 個の計算に丸 1 日 , 費した . 今のところ , これが GPT の限界である . 水野さんや山本尚人さんのコードで , 収束を確認することはできないだろうか?

図 3 と図 4 を比べると , 初期分布の違いによってもエミッタンスの増大の仕方が異なることが分かる . 先に述べたように , この原因は密度のゆらぎと考えている . ハマーズリーシーケンスの方がエミッタンスが小さいことからそれを支持している . だれか , 定量的な考察をしてくれるとありがたいのですが この推測が正しいのであれば , 乱数を使うのを止めて , ハマーズリーシーケンスを採用すべきである .

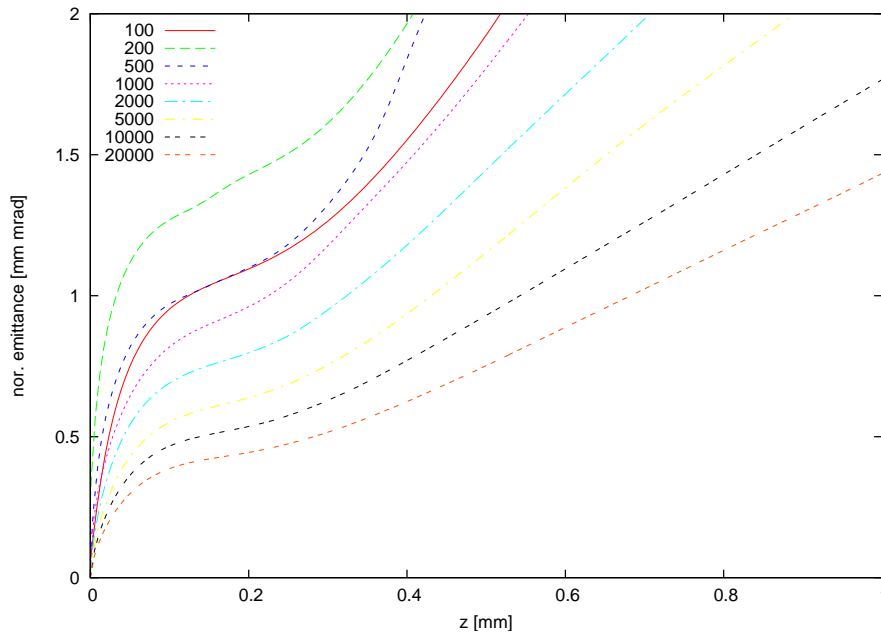


図 3: 初期分布がランダムの場合の粒子数とエミッタンスの関係．空間電荷効果は，GPT の 3D point-to-point を使ってを計算している．初期条件は， $E=0.5$ [MeV] ， $L=200$ [mm] である．

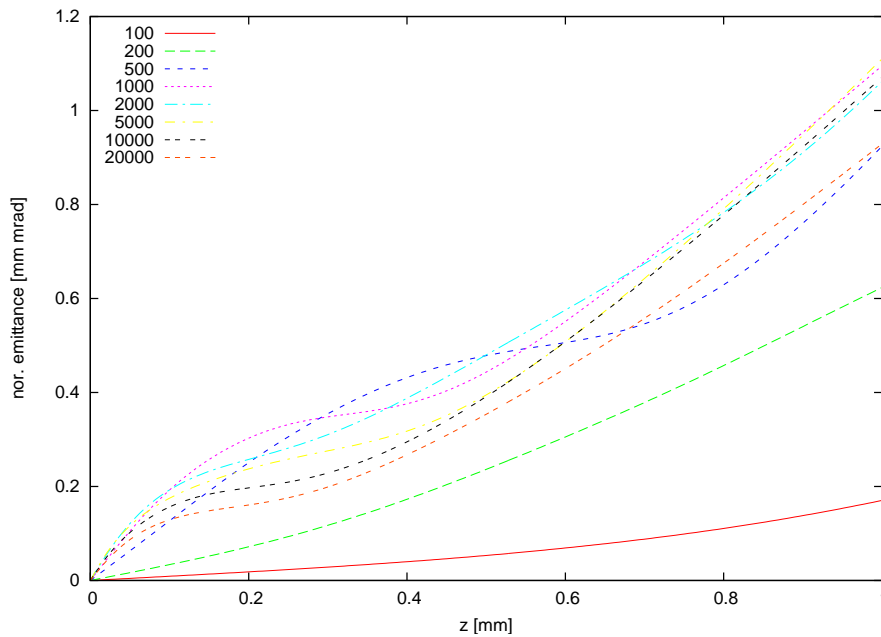


図 4: ハマーズリーシーケンスで初期分布を決めた場合の粒子数とエミッタンスの関係．空間電荷効果は，GPT の 3D point-to-point を使ってを計算している．初期条件は， $E=0.5$ [MeV] ， $L=200$ [mm] である．

3.2 3D particle-in-cellの計算

メッシュを使った空間電荷効果の計算 3D particle-in-cell の場合の粒子数をエミッタンスの関係を GPT の計算により調べた。ビームは先と同じ, $E=0.5$ [MeV], $L=200$ [mm], $\phi=1$ [mm] である。粒子の生成は, ハマーズリーシーケンスである。

図 5 に計算結果を示す。この場合, 粒子数が 50 万個以上であれば, 計算が収束しているように見える³。前回報告した 10 万個の粒子数では収束していないのは明らかである。もう少し, 詳細に調べて, 計算が収束する粒子数をきちんと把握する必要がある。これは, 次の課題とする。

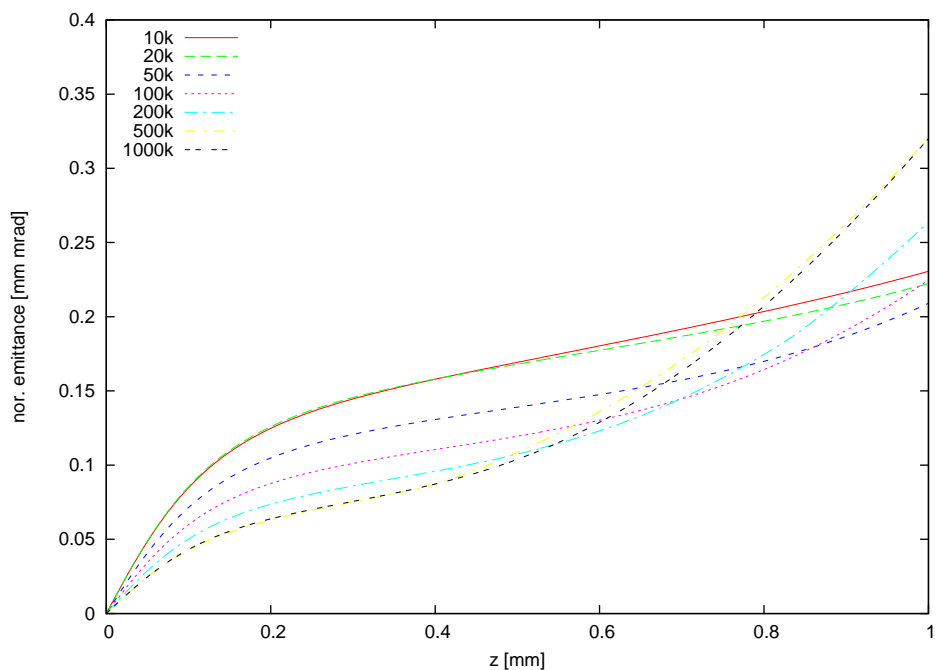


図 5: 3D particle-in-cell の場合の粒子数とエミッタンスの関係。初期条件は $E=0.5$ [MeV], $L=200$ [mm] で, ハマーズリーシーケンスで粒子を生成している。

4 まとめ

前回の報告で, コードにより結果に大きな差があった $E=0.5$ [MeV], $L=200$ [mm], $\phi=1$ [mm] のビームについて, GPT でさらに詳細にシミュレーションを行った。その結果, 以下のことが分かった。

- ここで示したビームのエミッタンス計算では, 私を含めた全員の前回の結果は粒子が不足している。個々の粒子の間のクーロン力を計算する 3D point-to-point のアルゴリズムでは, 20000 個の粒子でも計算は収束しない。メッシュを使ったプログラムでも, 50 万個程度は必要である。いずれにしても, 計算が収束する粒子数を確定しなくてはならない。

³計算例が少ないので, ちょっと自身が無い

- 粒子の初期分布の与え方により，エミッタンスは大きく異なる．初期分布を完全な乱数よりも，ハマーズリーシーケンスとした方が，エミッタンスの増大は小さい．この違いは，初期の密度分布のゆらぎがクーロン力のゆらぎになり，それが原因となるエミッタンスの増大が原因となっていると考えている．粒子数を非常に多くとれば，両者は一致するだろう．しかし，早い収束を得るためには，統計ノイズの小さいハマーズリーシーケンスを採用すべきである．