

100 MeV 电子直线加速器束流 输运系统优化计算

杜冠惠 陈银宝

本文叙述在电子直线加速器输运系统的设计中使用的最优化方法，主要是非线性规划中的单纯形法。由输运系统各段的物理设计要求建立目标函数，给出参数初始值，调节参数，使目标函数取极小值的参数即最佳值。最后，用实际计算的结果说明单纯形法的优缺点及单纯形法与 Powell 方法的比较。

关键词：束流输运系统，单纯形法，目标函数，最佳值，束流包络。

一、任务的提出

为了广泛而有效地应用由加速器出来的带电粒子束流，需要在加速器与靶之间，设置一系列的传输元件，它们便组成了“束流输运系统”。束流输运系统的物理设计任务是：给定加速器出口的束流参数，设计最佳输运元件组合，令靶上得到具有任务所要求参数的束流；而且整个系统在投资和运行上都较经济、合理。为此，需找出各种元件的工作参数和它们的位置以及系统的最佳实验靶位。同时要限制各处的束流包络，使之不超过元件最大的允许范围，并满足各种匹配要求。

束流输运系统的设计基于束流传输理论。根据理论，束流可用一个六维相空间椭球 $\mathbf{X}^T \boldsymbol{\sigma}^{-1} \mathbf{X} = 1$ 来描述。这里 \mathbf{X} 为六维相空间坐标矢量， $\boldsymbol{\sigma}$ 为实的对称正定矩阵，是束流相空间的数字描写，称为束流矩阵。系统中的每个传输元件对束流运动的作用以传输矩阵 \mathbf{R} 表示，这些矩阵的乘积便是反映整个系统对束流运动作用的总传输矩阵 \mathbf{M} ，称为装配矩阵，利用它与束流矩阵 $\boldsymbol{\sigma}$ 的关系式：

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{M} \boldsymbol{\sigma}_0 \mathbf{M}^T.$$

就可根据给定的初始束流矩阵 $\boldsymbol{\sigma}_0$ ，求得传输后的束流矩阵 $\boldsymbol{\sigma}$ ，即任务所要求的束流相空间椭球，并且保证传输过程中获得合理的束流包络。从而完成束流传输的计算任务。

例如图 1 是电子直线加速器输运系统，由三段组成，第一段及第二段都是由“自由漂移”及“四极透镜”装配而成的，第三段是由“自由漂移”及“偏转磁铁”组成的消色差段。利用在各元件边界上粒子的坐标和偏角(或速度)连续的条件，可求出粒子在第 n 节第 j 点的运动状态与初始状态的联系：

$$\mathbf{X}_{n,j} = \mathbf{M}_{n,j} \mathbf{X}_{1,0}. \quad (1)$$

(1) 式中的 $\mathbf{X}_{1,0}$ 是初始点的六维坐标矢量， $\mathbf{M}_{n,j}$ 称为系统的装配矩阵，可用逆推关系式求出：

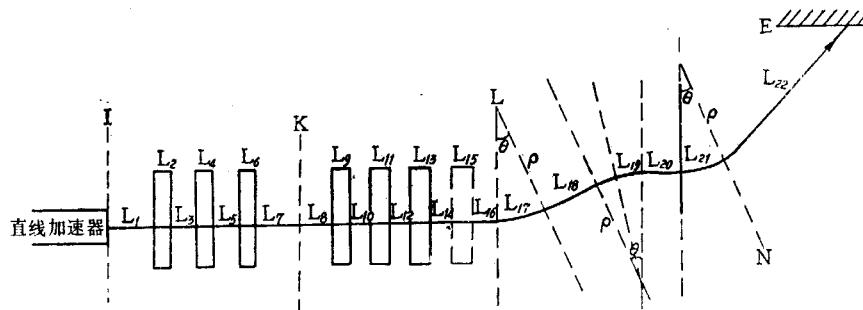


图 1 电子直线加速器输运系统

$$\mathbf{M}_{nj} = \mathbf{R}_{nj} \mathbf{M}_{nj-1} = \mathbf{R}_{nj} \mathbf{R}_{nj-1} \mathbf{M}_{nj-2} = \cdots = \mathbf{R}_{nj} \mathbf{R}_{nj-1} \cdots \mathbf{R}_{10} \mathbf{M}_{10}. \quad (2)$$

(2) 式中的 $\mathbf{M}_{10} = \mathbf{I}$, \mathbf{R}_{nj} , \mathbf{R}_{nj-1} , ..., \mathbf{R}_{10} 都是 6×6 阶的元件矩阵, 也就是“自由漂移”, “四极透镜”等等元件。

$$\sigma_{nj} = \mathbf{M}_{nj} \sigma_{10} \mathbf{M}_{nj}^T. \quad (3)$$

(3) 中的 σ_{10} 的初始束流矩阵, σ_{nj} 称为第 n 节第 j 点的束流矩阵。

因此, 利用以上公式, 计算输运段上各点的束流矩阵 σ_{nj} , 由 σ_{nj} 的各元素得出束流在该点的包络, 散角, 动量散度和发射度, 通过调节磁场强度, 长度(或间距), 角度满足匹配条件或消色差要求。

二、数学模型

在数学上, 束流输运系统的设计计算问题可归结为在约束可行域里求极值的非线性规划问题。我们采用优化计算的单纯形法来解决它。

整个输运系统分成若干段, 有“π”节, “消色差段”, 各段的要求不一样, 例如第一段(图 1 中 I 与 K 之间的部分)为“π”节。图 1 中的 L_1, L_3, L_5 是“自由漂移”元件, 元件矩阵 \mathbf{R} 为:

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 1 & L \\ 1 & \\ & 1 & L \\ & 1 & \\ & & 1 & L/\gamma^2 \\ & & & 1 \end{pmatrix}.$$

L_2, L_4, L_6 是“四极透镜”元件, 元件矩阵 \mathbf{R} 为:

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \cos KL & \frac{1}{K} \sin KL \\ -K \sin KL & \cos KL \\ & \text{ch } KL & \frac{1}{K} \text{sh } KL \\ & K \text{sh } KL & \text{ch } KL \\ & & 1 & L/\gamma^2 \\ & & & 1 \end{pmatrix},$$

其中, L 表示长度, K 表示透镜的磁场强度, 显然, R 的各元素都是超越函数, r 为已知数。

设第一, 第三块透镜的磁场强度为 K_1 , 中间一块透镜的磁场强度为 K_2 , 给出 K_1 , K_2 的初始值, 调节 K_1, K_2 满足成腰要求及 K 点包络要求:

$$\begin{cases} M_k(12) \leq 10^{-6}, \\ M_k(34) \leq 10^{-6}, \\ \sqrt{\sigma_k(11)} \leq 0.2, \\ \sqrt{\sigma_k(33)} \leq 0.5. \end{cases} \quad (4)$$

将(4)化成以下形式:

$$\begin{cases} M_k(12) \leq 10^{-6}, \\ M_k(34) \leq 10^{-6}, \\ 10^{-6} \cdot \sigma_k(11) / 0.2^2 \leq 10^{-6}, \\ 10^{-6} \cdot \sigma_k(33) / 0.5^2 \leq 10^{-6}. \end{cases} \quad (5)$$

由(5)组成目标函数 $F(K_1, K_2)$:

$$\begin{aligned} F(K_1, K_2) = & [M_k(12)]^2 + [M_k(34)]^2 + [10^{-6} \cdot \sigma_k(11) / 0.2^2]^2 + \\ & + [10^{-6} \cdot \sigma_k(33) / 0.5^2]^2 = M_k^2(12) + M_k^2(34) + 10^{-12} / 0.2^4 \sigma_k^2(11) + \\ & + 10^{-12} / 0.5^4 \sigma_k^2(33). \end{aligned} \quad (6)$$

(6) 式中的 $10^{-12} / 0.2^4$ 和 $10^{-12} / 0.5^4$ 称为权重因子, 权重因子可以根据实际工程需要或者一般选权重的方法确定。

三、方法简述

非线性规划的单纯形法^[1]也叫可变多面体搜索法^[2], 也就是直接用比较函数值的方法, 找到极小值。例如: 对二元函数 $f(x_1, x_2)$ 取平面上三点 P_1, P_2, P_3 不在同一直线上, 分以下几步介绍单纯形法:

1 首先计算函数值 f_1, f_2, f_3 比较它们的大小, 最大的记为 $f_H(P_H)$, 次大的记作 $f_a(P_a)$, 最小的记作 $f_L(P_L)$ 。

2 由图2, P_c 是 $\overline{P_a P_L}$ 的中点, 由 $\overline{P_H P_c}$ 方向取 P_R , 使 $\overline{P_H P_R} = 2 \overline{P_H P_c}$, P_R 叫做 P_H 关于 P_c 的反射点, 计算 $f(x_1, x_2)$ 在点 P_R 的值 f_R , 比较 f_R 和 f_a : (1) 若 $f_R \geq f_a$, 可在 P_H 和 P_R 中间取新点 P_s 。(2) 若 $f_R < f_a$, 可以沿着 $P_H P_R$ 方向的延长线上取一个点 P_E , 并计算 f_E 。

3 若 $f_E \leq f_R$, 即取 P_E 做为新点 P_s , 否则取 P_R 作为 P_s 。

4 若 $f_s < f_a$, 这时可把原先最坏的点 P_H 换成 P_s , 得到一个新的单纯形 $\{P_a, P_L, P_s\}$, 再重复以上步骤。

5 如果 $f_s \geq f_a$, 这时, 可把原先的单纯形 $\{P_a, P_H, P_L\}$ 缩小(见图3), 取 $\overline{P_H P_L}$ 及 $\overline{P_a P_L}$ 的中点 P_2, P_1 , 及 P_L 作新的单纯形 $\{P_1, P_2, P_L\}$, 再重复以上步骤, 直到满足判别条件为止(见图3)。

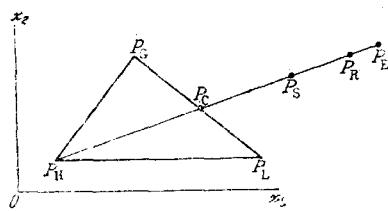


图 2

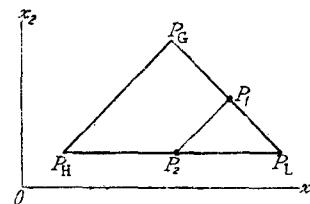


图 3

四、方法的比较

我们首先使用了单纯形法进行计算，实际计算表明：单纯形方法主要有两个优点，一个是对初值要求不严，不管初值给的如何，总可以得出较满意的结果(见表 1)。另外一个优点是单纯形法是用直接比较函数值的方法找到极小值。这点对于目标函数没有明显解析表达式的问题来说尤其重要，因为实际工程中大部分问题属于这种情况。所以，相对于 DFP 方法和 BFGS 方法，单纯形法更适于实际工程的需要。

单纯形法主要缺点是收敛慢，特别是下降到一定精度，很难再下降(见表 2)。针对单纯形法的优缺点，一般采用两者结合的方法，先用单纯形法找到较好的初值，再改用其他方法。

表 1 对称三单元四极透镜系统

磁场强度初值	59.23, 57.00, 59.23	297.0, 265.0, 297.0
迭代次数	83	78
最佳值	297.17, 265.30, 297.17	297.17, 265.9, 297.17
$\sigma_k(12)$	$<10^{-6}$	$<10^{-6}$
$\sigma_k(34)$	$<10^{-6}$	$<10^{-6}$
$\sqrt{\sigma_k(11)}$	0.58119	0.58119
$\sqrt{\sigma_k(33)}$	0.69619	0.69619

表 2 迭代次数与计算精度的关系

步长 h	0.75	0.75	0.25
迭代次数	38	52	100
$\sigma_k(11)$	0.1731465 E -4	0.1733840 E -4	0.1734054 E -4
$\sigma_k(33)$	0.2891119 E -4	0.2888888 E -4	0.2888757 E -4
$\sigma_k(12)$	-0.2601837 E -8	0.4018773 E -8	0.4269623 E -8
$\sigma_k(34)$	0.3999446 E -8	0.8923848 E -9	0.1477645 E -8

本问题的目标函数是参数的隐函数形式，我们采用两种直接方法比较所得的结果。从中可以看出，哪种方法都不能认为绝对比其他方法好，而需要针对不同问题选用不同的方法。下面列出单纯形法和 Powell^[2]对同样方案的结果(见表 3)。

从表中看出，单纯形法迭代 100 次和 Powell 方法迭代四次差不多得到同样的精度，看起来好象 Powell 法效果更好些，但 Powell 法也存在两方面的问题，一个是收敛准则，

表 3 两种方法的结果比较

方 法	单 纯 形 法	Powell 方 法
迭 代 次 数	100	4
磁场强度	1020.7, 1603.7	1020.7, 1603.7
$M_k(12)$	0.526482 E -3	-0.1226670 E -6
$M_k(34)$	-0.701904 E -3	0.3198573 E -6
$\sigma_k(11)$	0.740393 E -1	0.7404001 E -1
$\sigma_k(22)$	0.156489 E -3	0.1564901 E -3
$\sigma_k(12)$	0.339781 E -2	0.3397839 E -2
$\sigma_k(33)$	0.170268 E -2	0.1702529 E -2
$\sigma_k(44)$	0.153063 E -2	0.1530624 E -2
$\sigma_k(34)$	0.160155 E -2	0.1601479 E -2
$\sigma_k(56)$	0.212992 E -3	0.2129917 E -3

一个是一维搜索的步长，这两方面掌握不好，很难找到极小点。所以，在优化方法中，一定是针对不同问题选择不同的方法。

我们在 NOVA-840 计算机上用 FORTRAN 语言编制了程序，在控制台上用机对话的形式和面板开关灵活地调节参数及控制迭代结束。“四极透镜”的磁场强度和“偏转磁铁”的角度是通过程序调节的，而长度是通过不同的方案调节的。本程序已用于我所 100 MeV 电子直线加速器束流输运系统的物理设计计算中。给出的方案之一的各元件参数及束流包络如图 4 所示。通过大量的方案计算及束流的数值模拟计算，证实程序是可靠，实用的。

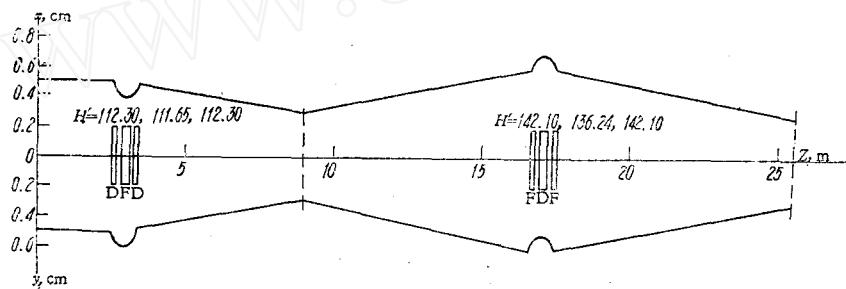


图 4 100 MeV 电子直线加速器束流输运系统方案之一

参 考 文 献

- [1] 南京大学数学系计算数学专业编，最优化计算方法，科学出版社，1978 年。
- [2] D. M. 希梅尔布劳，实用非线性规划，科学出版社，1981 年。

(编辑部收到日期：1983 年 5 月 17 日)

(上接第 656 页)

- [4] F. C. Difilippo et al., *Nucl. Sci. Eng.*, 51, 262(1973).
- [5] Y. Kaneko, *J. Nucl. Sci. Tech.*, 12, 402(1956).
- [6] 罗璋琳等，原子能科学技术，2，180(1981)。
- [7] 王渭君，氢化锆-铀-轻水栅格物理计算，内部资料，1982 年。
- [8] 李文虎等，断源法的空间效应研究，内部资料，1982 年。

(编辑部收到日期：1983 年 5 月 23 日)