

文章编号: 1007-4627(2015)04-0415-06

多目标粒子群优化算法在交替相位聚焦直线加速器优化设计中的应用

姜培勇^{1,2}, 原有进¹, 李朋¹, 殷学军¹, 王志军¹

(1. 中国科学院近代物理研究所, 兰州 730000;

2. 中国科学院大学, 北京 100049)

摘要: 现代智能优化算法粒子群算法 (Particle Swarm Optimization) 在加速器设计优化上的应用逐渐增多。交替相位聚焦直线加速器 (Alternative Phase Focused Drift Tube Linac) 具有节省空间和造价的优点。将交替相位聚焦直线加速器的初步设计方案作为种子, 植入粒子群算法中; 以加速器的加速效率和束流能量作为目标, 得到该方案的 Pareto 最优解集; 在粒子进化过程中, 以 Pareto 最优解集作为粒子的运动方向, 以随机选取的 Pareto 最优解的运行结果作为粒子的输入参数来源, 最终得到了输出能量为 5.35 MeV/u、加速效率大于 83% 的 APF 优化方案。

关键词: 多目标优化; 粒子群算法; 交替相位聚焦; Pareto 最优解集

中图分类号: O571.42 **文献标志码:** A **DOI:** 10.11804/NuclPhysRev.32.04.415

1 引言

粒子群算法 (Particle Swarm Optimization) 作为新兴的现代智能优化算法, 已经得到了深入细致的研究^[1-4]。它从随机解群出发, 以适应度 (Fitness) 评价粒子, 通过迭代的方式找到最优解。随机解群即是粒子群; 为了得到最优解, 粒子在搜索域中以某种数学规律运动, 表现为粒子具有位置和速度。仅从形式上看, 粒子群的优化过程, 实质上是一个大数据的暴力破解过程。粒子群算法在加速器设计、优化过程中, 已经得到了应用^[5-7]。

加速器的设计与优化, 是一个多目标的优化过程。多目标优化可以将多目标通过加权相加得到一个“和目标”, 从而转化为单目标优化; 这需要不断地调试, 寻找合适的加权因子序列, 耗费时间较长。本文对多目标的处理, 基于 Pareto 最优解集。

任意可行解 X_i , 具有 N 个适应度 F_{in} 评价其 N 个目标, 并且定义适应度最小为方案最优。对于任意两个可行解 X_i 和 X_j , 当且仅当对于 N 个适应度, 都具有 $F_{in} < F_{jn}$ 时, 称 X_i 相对于 X_j Pareto 占优 (Pareto Dominance), 或者说, X_i 支配 X_j 。如果一个可行解不被任何其他可行解支配, 则该可行解为非支

配解 (Non-Dominated Solution), 称其为一个 Pareto 最优解 (Pareto Optimal Solution)。所有 Pareto 最优解的集合, 称为 Pareto 最优解集 (Pareto Optimal Set)。Pareto 最优解集映射在目标空间中的集合, 称为 Pareto 前沿 (Pareto Front)。在迭代过程中, 优化得到的 Pareto 前沿向真正的 Pareto 前沿逼近。图 1 是双目标时的非支配解和被支配解及 Pareto 前沿示意图。

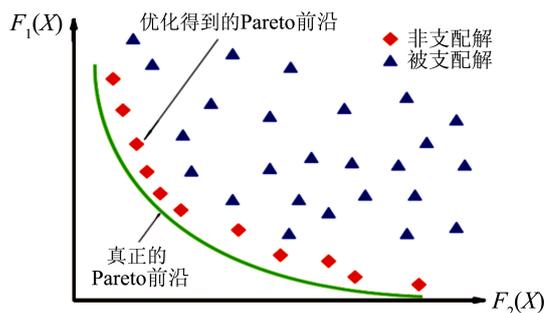


图 1 (在线彩图) 双目标时的非支配解和被支配解及 Pareto 前沿示意图

蓝色三角形是被支配解, 红色菱形是非支配解, 红色菱形集合是优化得到的 Pareto 前沿, 绿色实线是真正的 Pareto 前沿。

当采用基于 Pareto 最优解的方法进行多目标优化时, 优化过程中得到的非支配解的集合引导着优化方向

收稿日期: 2015-04-19; 修改日期: 2015-05-19

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11305227)

作者简介: 姜培勇(1984-), 男, 山东菏泽人, 博士研究生, 从事核技术及应用、加速器物理研究; jiangpeiyong@impcas.ac.cn。

的发展。

文中使用的“粒子”为 PSO 优化过程中的可行解，“带电粒子”为束流动力学模拟中的宏粒子。

2 交变相位聚焦直线加速器

交变相位聚焦直线加速器 (Alternative Phase Focused Drift Tube Linac, APF DTL) 在 1953 年首次提出, 以应对低速时磁场聚焦力弱的问题^[8]。APF 不同于常规 DTL 之处, 在于其横向聚焦不依赖于四极铁、螺线管等传统聚焦元件, 而是通过高频场的相位调制实现。因此它占用的空间资源更小, 造价更低。每一个加速间隙都可以等效成一个四极铁, 在 $(x[\text{mm}], x'[\text{mrad}], y[\text{mm}], y'[\text{mrad}], z[\text{mm}], \Delta p/p[\text{rad}])$ 坐标系下, 横、纵向的传输矩阵可以写成如下的形式^[9]:

$$k_t = \frac{-\pi q E_0 T L \sin \phi_s}{m_0 c^2 \frac{1}{\gamma^2} \beta^2 \lambda}, \quad (1)$$

$$k_l = \frac{2\pi q E_0 T L \sin \phi_s}{m_0 c^2 \beta^2 \lambda}, \quad (2)$$

$$M_t = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ k_t & (\beta\gamma)_i \\ (\beta\gamma)_f & (\beta\gamma)_f \end{vmatrix}, \quad (3)$$

$$M_l = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ k_l & (\beta\gamma)_i \\ (\beta\gamma)_f & (\beta\gamma)_f \end{vmatrix}, \quad (4)$$

其中: q , E_0 , T , L , ϕ_s , m_0 , c , $\frac{1}{\gamma}$, β 和 λ 分别是荷质比、加速单元的平均电场、加速单元的渡越时间因子 (Transit Time Factor)、加速单元长度、同步相位、单位原子质量、真空光速、带电粒子在加速单元中的平均洛伦兹因子、带电粒子在加速单元中的平均相对论速度和自由空间的高频波长。下标 t 和 l 分别表示横向 (transverse) 和纵向 (longitudinal); 下标 i 和 f 分别表示初状态 (initial) 和末状态 (final)。

根据式 (1) ~ (4), 当同步相位是负值时, 横向散焦, 纵向聚焦, 这就是纵向稳定原理。当同步相位是正值时, 横向聚焦, 纵向散焦。当正、负相位交替排列时, 即可实现横、纵向束流同时稳定^[10-11]。

最初的 APF 采用对称的正负相位交替排布模式, 因为结构忽聚忽散, 束流的发射度增长快, 结构的接受度小。之后相位排布不对称的 APF (Asymmetric Alternating Phase Focused, AAPF) 能够增加物理设计的自由度, 从而提升束流质量, 而被广泛研究^[12]。Iwata^[13] 给出了一个方程, 可以给出同步相位序列, 并在 HIMAC 建成 APF DTL 出束。

以矩阵计算 TWISS 参数传递为内核, 以控制束流尺寸为目标, 文献[6]给出了 APF 的初步设计方案。由于矩阵计算完全线性, 而在加速间隙内部, 因为同步相位变化很大, 非线性强烈; 同时由于加速单元多, 束流对交变的同步相位误差非常敏感。直接将初步设计作为输入参数用 Beampath 模拟, 束流输出能量达不到初步设计值。本文基于初步的设计方案, 利用多目标优化粒子群算法, 得到优化了的最终方案。

优化内容是: 束流为 $^{12}\text{C}^{5+}$, 输入能量为 600 keV/u, 采用 200 MHz 高频频率; 孔径 6 mm, 具有 61 个加速单元。优化目标是: 在满足设计要求的 5.3 MeV/u 的输出能量下, 得到最大的结构接受度。

该 APF 设计是作为中国科学院近代物理研究所专用治癌装置的备用直线注入器方案设计的。专用治癌装置要求环中储存离子数大于 10^9 , 注入时间为 1 ms, 周期为 10 s。因此, 在 APF 注入器引出口, 束流 1 ms 内的平均流强为 800 nA。考虑进束流注、引中各种损失以及束流高斯分布等影响, 加上合理的裕量, 微脉冲峰值流强不超过 10 μA 。在这种弱流强下, 空间电荷效应可以忽略不计。

3 优化参数

本文利用 Beampath 软件进行束流模拟, 通过调用 Beampath 的方式进行粒子群优化^[14]。优化参数是 Beampath 中 RFgap 模块的输入参数: TUBE (NGAP), GAP (NGAP) 和 POTEN (NGAP), 一共 3 NGAP 个优化变量。

模拟软件 Beampath 是用 Fortran 语言编写的多元件带电粒子模拟 (Particle-In-Cell, PIC) 程序, 可以用来模拟带电粒子在电磁场中的传输。它的 RFgap 模块主要包含的输入参数如下:

NGAP: 腔体中单元的个数;

TUBE (NGAP): NGAP 个漂移管的长度;

GAP (NGAP): NGAP 个加速间隙的长度;

POTEN (NGAP): NGAP 个加速间隙的电压;

BETA (NGAP): NGAP 个单元的束流速度。

同步相位可以通过下面的公式得到

$$\phi_{s_i} = \phi_{s_{i-1}} + \frac{2\pi L_i}{(\beta_{i-1}\lambda)} - \pi, \quad (5)$$

其中: 下标 i 表示第 i 个单元, ϕ_{s_i} , L_i 和 β_i 分别是同步相位、单元长度和相对论速度。 $L_i = \frac{1}{2}g_{i-1} + l_i + \frac{1}{2}g_i$, g 和 l 是漂移管长度和加速间隙长度。

输入参数 BETA (NGAP) 并不直接参与运算, 它作为带电粒子统计参数在程序中被调用。

Beampath 可以输出每一个时间步的束流位置、加速效率和束流能量。

4 APF优化方法

传统的粒子群优化算法, 粒子初始化时是随机的; 但是完全随机得到的粒子在优化过程中需要耗费的时间很长。在已有初步设计的情况下, 粒子的初始化是以初步设计参数为中心生成的粒子。这样生成的粒子具有特定的属性, 能够降低搜索时间, 并能逃离不预期的局部解。大型电磁计算软件 CST 的优化模块中, 也是通过类似的方法, 得到初始的粒子分布。APF 优化的具体做法是首先给定搜索域比例 SearchRatio=[0.8, 1.2], 然后将首粒子设为初步设计值, 并以此粒子的数值乘以搜索域比例得到搜索区间的边界; 之后将剩下的粒子随机填充在搜索域中。种子的格式是 $X = [\text{TUBE}(\text{NGAP}), \text{GAP}(\text{NGAP}), \text{POTEN}(\text{NGAP})]$, 初始速度 V 是和 X 相同行数和列数的 0 值矩阵。

优化方案使用两个适应度, 一是加速效率的函数, 二是束流能量的函数。在优化方案中, 初始的束流发射度是理论结构接受度的 4 倍; 由于结构最优时, 其接受度最大, 因此, 在发射度不变的情况下, 加速效率最高。因为结构太长, 参数太多, 束流在 APF 终端的加速效率不随结构参数的微弱变化而显著地变化; 即结构终端加速效率的微小变化不能很好地反映出前段结构的进化。为了增加后端结构的权重, 该适应度被定为时间步长与加速效率乘积的和:

$$F_{\text{eff}} = - \sum_{k=1}^K k E_k, \quad (6)$$

其中 E_k 是第 k 时间步时的束流加速效率, 负号是将最小值定为最优决定的。这样, 每一时间步对应的加速效率都被包含在 F_{eff} 中。因为束流的能量增益是

$$\Delta W = q E_0 T L \cos \phi_s. \quad (7)$$

当单元长度不合适时, $\cos \phi_s$ 为负, 这时束流减速。为了将束流减速在适应度上体现出来, 能量适应度的值被定为时间步长与束流能量乘积的和:

$$F_W = - \sum_{k=1}^K k W_k, \quad (8)$$

其中 W_k 是第 k 时间步时的束流能量。

通过迭代, 即可得到双目标的 Pareto 优化解集。由于粒子性质相近, 粒子的适应度也非常接近, 因此优化得到的 Pareto 前沿也易出现聚集成堆的现象, 其实质

是优化陷入了局部解。由于 Pareto 前沿引领粒子群进化的方向, 因此, 在进一步的进化中, 会进一步加剧聚集的现象, 最终导致优化过早收敛、不能跳出局部解的结果。为了使粒子群能够在全搜索域内搜索以得到全局最优解, 在目标空间划分网格来简约粒子。当同一网格内有多个非支配解时, 随机性地选择一个, 得到了简约的 Pareto 前沿。

当粒子数目超过一定值时, 粒子群算法的收敛性与粒子数目的增长没有明显的正相关的关系。当粒子数目大于临界粒子数目时, 总会有部分粒子一直是被支配解。如果一个可行解的适应度在历史上一直处于粒子群的最高部分, 那么该可行解对于粒子的进化没有明显现实意义和潜在意义。基因遗传算法的思想来源是物种进化, 粒子群算法的思想来源是鸟类觅食, 退火算法的思想来源是固体退火, 用类似的思想, 可以将社会上颇具意义的思想融入粒子群算法。一个优秀班级里一直学习最差的学生, 会在大型考试之后被分流; 而留下来空位, 被新的学生使用。在粒子群算法中, 通过评价每一个粒子的历史记录, 清除最差的粒子。新生的替代粒子通过 Pareto 最优解集随机生成。其生成方法是随机选择一个 Pareto 最优解, 给它一个幅值非常小的扰动; 同时, 其速度初始化为 0。

单目标时的粒子进化方程如下:

$$V_{t+1} = w V_t + C_1 r_1 (P_t - X_t) + C_2 r_2 (G_t - X_t), \quad (9)$$

其中: w 是惯性权重; C_1, C_2 分别是认知学习因子和社会学习因子; r_1, r_2 是 [0, 1] 的随机数; P_t 是每个粒子的历史最优; G_t 是全局最优。双目标时, 采用了新的进化方程^[15]:

$$V_{t+1} = w V_t + C_1 r_1 (P_t - X_t) + C_2 r_2 [\lambda (G_{1t} - X_t) + R_3 (1 - \lambda) (G_{2t} - X_t)], \quad (10)$$

其中: G_{1t} 和 G_{2t} 是随机选取的非支配解; w 和 C_1, C_2 依据 Maurice Clerc 提出的带收缩因子的粒子群优化算法, 取值分别是: 0.729, 1.495 和 1.495; λ 取值 0.5; R_3 是 [0, 1] 之间的随机数。

当粒子超出边界时, 采用了停止在边界上, 同时速度降为 0 的方式处理。这样, 在该迭代次数时, 该粒子以边界值参与运算; 在下一迭代次数时, 该粒子惯性量为 0, 只受历史最优值和 Pareto 前沿的影响; 并重新具有了幅值不为 0 的速度。

当漂移管长度和加速间隙长度进化之后, 计算得到该可行解的每一个加速间隙中点的坐标 Z 。随机选取任一非支配解, 读取其每一时间步对应的束流位置坐标 z

和束流能量 W_z ，并以 (z, W_z) 为原参数对坐标 Z 线性插值，求得每一个加速间隙中点处的束流能量 W_z 。然后用束流能量 W_z 确定该点处的相对论速度，并作为该可行解的 BETA 参数。

5 APF 优化结果及优化策略分析

优化结束后，选择符合能量增益、加速效率最高的非支配解，计算其接受度。根据接受度，重新给定初始束流分布。当满足加速效率时，终止优化，得到束流的初始分布。

优化方案的输出束流能量为 5.35 MeV/u，与设计能量一致。图 2 和图 3 是束流的 Beta 函数 (β_x, β_y 和 β_z) 和 rms 的束流尺寸 (X_{rms}, Y_{rms} 和 ϕ_{rms})。束流的横向 rms 尺寸沿着纵向位置略有增加，仍然维持在较低的水平。随着能量升高，束流的几何发射度减小，束流的 Beta 函数呈逐渐增大的趋势。由于高频相位和非线性的影响，束流的 rms 归一化发射度 ($\epsilon_{xn}, \epsilon_{yn}$ 和 ϵ_{zn}) 呈增长趋势。同时，加速间隙内电磁场对束流的耦合作用和相空间的丝化、变形，归一化发射度呈现较强的振荡，如图 4 所示。图 5 是束流的相空间 $(x - x', y - y'$ 和 $\phi - \Delta P/P)$ 分布图。其中上三幅蓝色表示输入的发射度，红色表示结构的接受度；下三幅表示输出的发射度。 x 和 y 方向的输入 rms 几何发射

度分别是： $5.249 \pi \text{ mm} \cdot \text{mrad}$ ， $5.524 \pi \text{ mm} \cdot \text{mrad}$ 。纵向 rms 动量分散为 $\pm 0.789\%$ ，rms 的相宽为 $\pm 15.957^\circ$ 。在卡 $\pm 30^\circ$ 的情况下，束流的加速效率大于 83%；而优化之前通过线性矩阵得到的初步方案，用 Beampath 模拟的输出能量不到 5 MeV/u，加速效率小于 5%。

在操纵 Beampath 的输入参数对 APF 设计进行优化时，优化参数多达 183 个，但由于优化策略合理，优化结果满足物理要求。将初步设计作为种子，使得最终的优化方案在初步设计方案附近，同时极大地降低了暴力破解的盲目性，加速了问题的收敛。将束流在任意时间步的结果都包含在适应度中，使得结构的微小变化，都能够在适应度中反映出来；尤其是步数越大，相应步长下物理量的权重越大，将适应度的重心放在了整个结构上。对 Pareto 前沿进行了网格划分和粒子简约，使得非支配解不至于过度集中，利于全局解的搜索。由于优化参数非常多，很多粒子进化缓慢，始终处于适应度最差的部分；基于此，在优化过程中根据实际情况操纵粒子的消亡与增生，加速了问题的收敛。当粒子超越边界时，采用了使粒子停留在边界上的手段。对于没有参与进化的相对论速度参数 BETA (NGAP)，采用了从 Pareto 最优解集随机调取的方法。这些根据实际问题创设的优化策略，既利于全局最优的搜索，又能加快收敛。

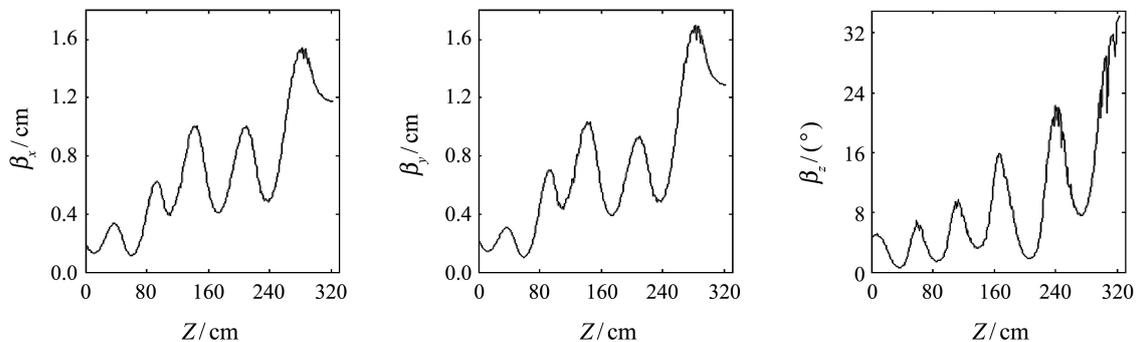


图 2 Beta函数沿纵向位置变化曲线图

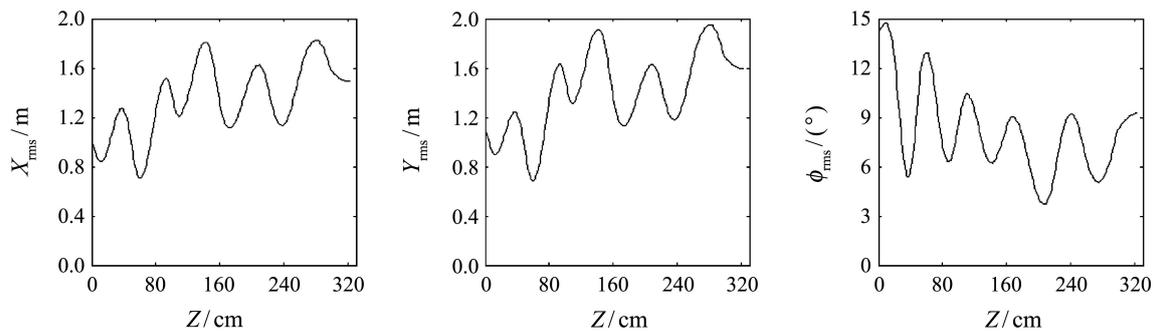


图 3 束流的rms尺寸沿纵向位置变化曲线图

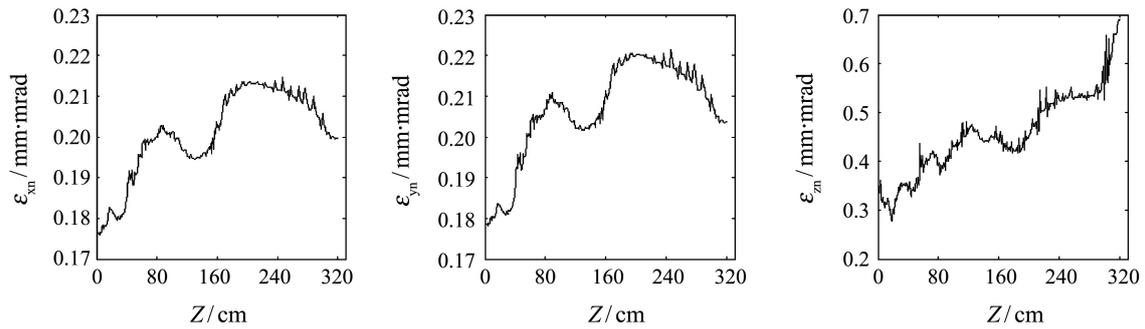


图 4 束流 rms 归一化发射度沿纵向位置变化曲线图

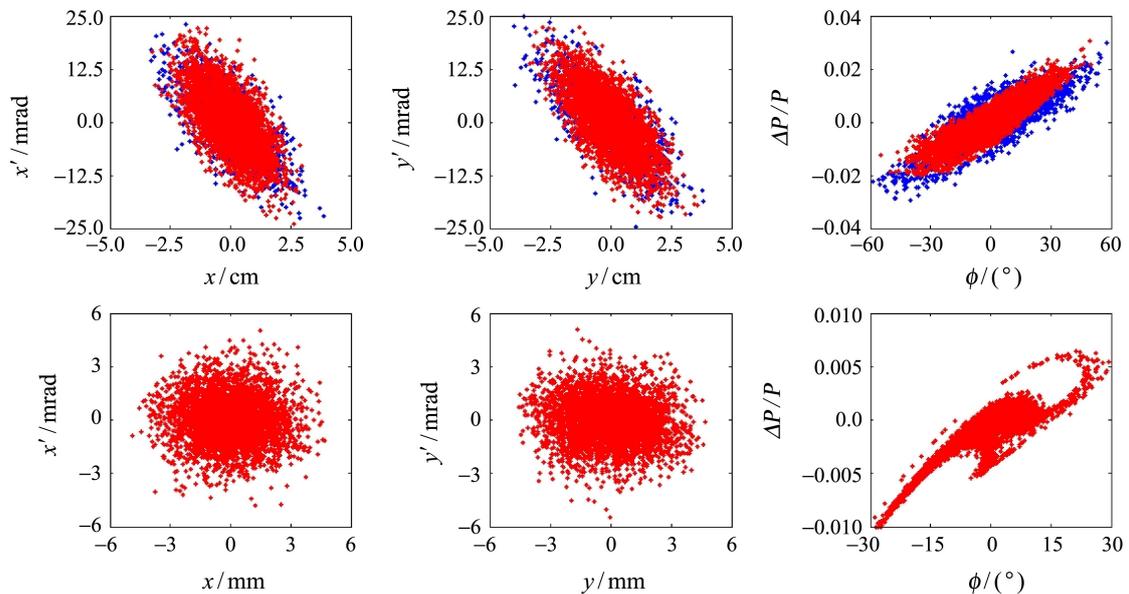


图 5 (在线彩图) 束流的相空间分布图

上三幅蓝色表示输入的发射度, 红色表示结构的接受度; 下三幅表示输出的发射度。

6 结论

本文根据 APF DTL 的束流动力学要求和束流动力学模拟软件 BEAMPATH 调用的独有特点, 创设了多目标优化的各种策略, 在多优化参数的情况下, 应用粒子群算法, 采用双目标优化方案, 对 APF 设计的结构参数进行了优化, 获得了在初始设计附近的全局最优解。优化后的 APF 输出能量为 5.35 MeV/u, 加速效率大于 83%, 能够满足物理要求。优化过程中, 增大了粒子群算法的随机性, 减小了目标空间的聚集度, 将优化算法与 APF 的物理问题紧密结合来提出双优化目标, 是该物理问题成功优化的关键因素。

参考文献:

- [1] KENNEDY J, EBERHART R. Particle Swarm Optimization[C]//Proceedings of IEEE International Conference on Neural Networks, 1995, IV: 1942.
- [2] CLERC M, KENNEDY J. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2002, 6: 58.
- [3] EBERHART R, SHI Yuhui. Comparing Inertia Weights and Constriction Factors in Particle Swarm Optimization[C]//Proceedings of the Congress on Evolutionary Computing, 2000: 84.
- [4] LEI Mingde, YAN Xinping. Multi-objective intelligent optimization algorithm and its application[M]. Beijing: Science Press, 2009: 11. (in Chinese)
(雷德明, 严新平. 多目标智能优化算法及其应用[M]. 北京: 科学出版社, 2009: 11.)
- [5] BAI Zhenghe. Electron Storage Ring Lattice Design and Optimization Using Particle Swarm Optimization Algorithm[D]. Hefei: University of science and technology of China, 2013(05): 51. (in Chinese)
(白正贺. 基于粒子群优化算法的电子储存环磁聚焦结构设计及优化[D]. 合肥: 中国科技大学, 2013: 51.)
- [6] JIANG Peiyong, YUAN Youjin, LI Peng, et al. A 5.3 MeV/u, 200 MHz APF DTL for carbon ions as an injector of medical synchrotron[C]//Proceedings of IPAC2013, 2013.

- [7] WANG Zhijun. The Application of Optimization Methods in the Design of Linear Accelerator[D]. Lanzhou: Institute of Modern Physics, CAS2013: 30. (in Chinese)
(王志军. 优化方法在直线加速器设计中的应用[D]. 中国科学院近代物理研究所, 2013: 30.)
- [8] GOOD M L. Physics Review, 1953, **92**: 538.
- [9] CRANDALL K R. Trace 3-D documentation. 1997: 16.
- [10] KAPCHINSKIY I M. Theory of Resonance Linear Accelerators[M]. New York: Harwood Academic Pub, 1985: 184.
- [11] BRYANT P J. A Brief History and Review of Accelerators. Proceedings of 5th General Accelerators Physics Courses, 1994, **1**: 9.
- [12] WELLS N. Radio-frequency Quadrupole and Alternating Phase Focusing Methods Used in Proton Linear Accelerator Technology in the USSR[M]. Santa Monica, CA: RAND Corporation, 1985: 44.
- [13] IWATA Y, YAMADA S, MURAKAMI T, *et al.* Nucl Instr and Meth A, 2006, **569**: 685.
- [14] BATYGIN Yuri. Nucl Instr and Meth A, 2005, **539**: 455.
- [15] YAN Xueli, WANG Xuewu, LIAN Zhigang. Journal of East China University of Science and Technology (Natural Science Edition), 2011, **37**: 515. (in Chinese)
(闫雪丽, 王学武, 连志刚. 华东理工大学学报(自然科学版), 2011, **37**: 515.)

Application of Multi-Objective Particle Swarm Optimization in the Design Optimization of Alternative Phase Focused DTL

JIANG Peiyong^{1,2,1)}, YUAN Youjin¹, LI Peng¹, YIN Xuejun¹, WANG Zhijun¹

(1. Institute of Modern Physics, Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730000, China;

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

Abstract: The Particle Swarm Optimization(PSO), one of the modern intelligent optimization algorithms, is increasingly employed in the design and optimization of accelerators. Alternative Phase Focused Drift Tube Linac(APF DTL) has an advantage in cost-efficient fabrication and reduced construction space. The preliminary design of APF DTL is involved in the optimization as the anchor; by taking the acceleration efficiency and the beam energy as two fitness functions, the Pareto optimal set is obtained; the evolutionary direction is determined by the Pareto optimal set and the particles' parameters in the optimization are derived from the simulations of the randomly selected Pareto optimal solutions. A final optimized design with extracted energy of 5.35 MeV/u and acceleration efficiency greater than 83% is acquired.

Key words: multi-objective; particle swarm optimization; alternative phase focusing; Pareto optimal set

Received date: 19 Apr. 2015; **Revised date:** 19 May 2015

Foundation item: National Natural Science Foundation of China(11305227)

1) JIANG Peiyong, E-mail: jiangpeiyong@impcas.ac.cn.