

Gitterfreie Simulation von Raumladungseffekten in Teilchenstrahlen

Meshfree Simulation of Space Charge Effects in Particle Beams

Zur Erlangung des akademischen Grades Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)

Genehmigte Dissertation von Steffen Alexander Schmid aus Pforzheim

Tag der Einreichung: 11.05.2021, Tag der Prüfung: 09.09.2021

1. Gutachten: PD Dr. rer. nat. Erion Gjonaj
2. Gutachten: Prof. Dr.-Ing. Herbert De Gersem
3. Gutachten: Prof. Dr. rer. nat. Kurt Aulenbacher
Darmstadt



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

Fachbereich Elektrotechnik
und Informationstechnik
Institut für
Teilchenbeschleunigung und
Elektromagnetische Felder

Gitterfreie Simulation von Raumladungseffekten in Teilchenstrahlen
Meshfree Simulation of Space Charge Effects in Particle Beams

Genehmigte Dissertation von Steffen Alexander Schmid

1. Gutachten: PD Dr. rer. nat. Erion Gjonaj
2. Gutachten: Prof. Dr.-Ing. Herbert De Gerssem
3. Gutachten: Prof. Dr. rer. nat. Kurt Aulenbacher

Tag der Einreichung: 11.05.2021

Tag der Prüfung: 09.09.2021

Darmstadt

Bitte zitieren Sie dieses Dokument als:

URN: urn:nbn:de:tuda-tuprints-211290

URL: <http://tuprints.ulb.tu-darmstadt.de/21129>

Dieses Dokument wird bereitgestellt von tuprints,
E-Publishing-Service der TU Darmstadt
<http://tuprints.ulb.tu-darmstadt.de>
tuprints@ulb.tu-darmstadt.de

Die Veröffentlichung steht unter folgender Creative Commons Lizenz:
Namensnennung – Nicht kommerziell – Keine Bearbeitungen 4.0 International
<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>



Für Heike

Erklärungen laut Promotionsordnung

§8 Abs. 1 lit. c PromO

Ich versichere hiermit, dass die elektronische Version meiner Dissertation mit der schriftlichen Version übereinstimmt.

§8 Abs. 1 lit. d PromO

Ich versichere hiermit, dass zu einem vorherigen Zeitpunkt noch keine Promotion versucht wurde. In diesem Fall sind nähere Angaben über Zeitpunkt, Hochschule, Dissertationsthema und Ergebnis dieses Versuchs mitzuteilen.

§9 Abs. 1 PromO

Ich versichere hiermit, dass die vorliegende Dissertation selbstständig und nur unter Verwendung der angegebenen Quellen verfasst wurde.

§9 Abs. 2 PromO

Die Arbeit hat bisher noch nicht zu Prüfungszwecken gedient.

Darmstadt, 11.05.2021

S. A. Schmid

Zusammenfassung

Der Betrieb eines Teilchenbeschleunigers setzt ein detailliertes Verständnis für die Strahldynamik der Anlage voraus und erfordert dementsprechend theoretische Strahldynamikmodelle. Oftmals erweisen sich numerische Simulationen aufgrund der komplizierten Abhängigkeiten verschiedener Effekte als die einzige praktikable Vorgehensweise.

Der Fokus dieser Forschungsarbeit liegt auf der Entwicklung von numerischen Methoden zur Simulation der Raumladungseffekte eines Teilchenstrahls. Die meisten Standardmethoden erfordern ein Rechengitter, um die Raumladungswechselwirkung zu approximieren. Unter Umständen könnte eine Approximation des Teilchenstrahls durch die diskrete Ladungsdichteverteilung eines Gitters zu numerischen Artefakten und Instabilitäten führen. In dieser Arbeit werden spezialisierte gitterfreie Verfahren für Strahldynamiksimulationen entwickelt, für welche derartige Probleme nicht auftreten. Diese Verfahren werden weiterhin bezüglich ihrer Anwendbarkeit für konkrete Problemstellungen in Elektronenbeschleunigern untersucht.

Das erste Verfahren nutzt die schnelle Multipolmethode (engl. Fast Multipole Method, FMM), um eine hierarchische Näherung für das quasi-elektrostatische Raumladungsfeld des Teilchenstrahls zu berechnen. Zu diesem Zweck werden die Fernfeldwechselwirkungen numerisch effizient durch Multipolentwicklungen dargestellt. Alle Nahfeldwechselwirkungen werden hingegen durch direkte Teilchen-Teilchen Berechnungen vollständig aufgelöst. Aufgrund der hohen numerischen Effizienz eignet sich das FMM Verfahren für Simulationsstudien auf gewöhnlichen Computern.

Anwendungsstudien zum DESY-PITZ und DESY SRF Photoinjektor zeigen typische Szenarien für das neu entwickelte FMM Simulationsprogramm. Vergleichstests mit zwei etablierten Programmen, welche eine gitterbasierte Methode nutzen, demonstrieren die Validität der Simulationsergebnisse. Außerdem zeigt die Studie, dass die FMM Approximation im direkten Vergleich eine detailliertere Auflösung der Raumladungswechselwirkungen liefert.

Das zweite Verfahren nutzt ein Teilchen-Teilchen basiertes Liénard-Wiechert (LW) Modell, um eine vollständig elektromagnetische Lösung für das Raumladungsfeld des Teilchenstrahls zu berechnen. Aufgrund der hohen numerischen Komplexität erfordern derartige Simulationen die Verwendung eines MPI parallelisierten Großrechners.

Eine Simulationsstudie zum THz SASE freie Elektronen Laser (FEL) bei DESY-PITZ zeigt, wie das LW Modell die Dynamik, die strahlungsinduzierte Mikrostruktur und das emittierte Strahlungsfeld eines Elektronenstrahls abbildet. Hierbei ist bemerkenswert, dass das LW Modell den FEL Prozess *ab initio* ausschließlich auf Basis der relativistischen Raumladungswechselwirkung reproduziert.

Abstract

The operation of a particle accelerator relies on a detailed knowledge on the beam dynamics of the machine and, therefore, requires theoretical beam dynamics models. Due to the complex dependencies of various effects, numerical simulation studies often are the only feasible approach.

The focus of this research is the development of numerical methods for simulating the space charge effects of a particle beam. Most common methods depend on a computational grid to approximate the space charge interaction. Under certain circumstances, the approximation of a particle beam with a discretized charge distribution on a mesh might lead to numerical artifacts or even instabilities. This work presents the development and application of two specialized meshfree techniques for which such problems do not occur. Furthermore, the meshfree techniques are specifically tested for simulation studies of electron accelerators.

The first technique uses the Fast Multipole Method (FMM) to compute a hierarchical approximation of the particle beam's quasi-electrostatic space charge field. For this purpose, multipole expansions provide a numerically efficient representation of the far field interactions. The near-field interactions, however, are fully resolved by direct particle-particle computations. The high numerical efficiency of the FMM makes this technique suitable for simulation studies on conventional computers.

Applied studies for the DESY-PITZ and the DESY SRF photoinjector show typical use cases for the newly developed FMM simulation program. Benchmark tests with two well-established programs, which rely on a mesh-based method, demonstrate the validity of the results. Furthermore, the study shows that the FMM approximation provides a comparably more detailed resolution of the space charge interactions.

The second technique uses a particle-particle based Liénard-Wiechert (LW) model to compute a fully electromagnetic solution of the particle beam's space charge field. Due to numerical complexity, such simulations require a MPI parallelized computing cluster.

A simulation study of the THz SASE free electron laser (FEL) at DESY-PITZ shows that the LW model reproduces with high accuracy the beam dynamics, the radiation induced microstructure, and the emitted radiation field of the electron beam. It is notable that the LW model simulates the FEL process *ab initio* solely based on the relativistic space charge interaction.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Modellierung der Strahldynamik in Beschleunigeranlagen	5
2.1. Dynamik eines geladenen Einzelteilchens	5
2.1.1. Physikalische Beschreibung der Teilchentrajektorie	5
2.1.2. Numerische Lösung der Bewegungsgleichung	7
2.2. Elektromagnetische Felder in Teilchenbeschleunigern	8
2.2.1. Physikalische Beschreibung der Raumladungswechselwirkung	9
2.2.2. Numerische Berechnung der Raumladungswechselwirkung	11
2.3. Statistische Beschreibung eines Teilchenstrahls	14
2.3.1. Statistische Momente des Teilchenstrahls	14
2.3.2. Numerische Approximation mit Makroteilchen	15
3. Teilchenbasierte Methoden zur Simulation von Raumladungseffekten	19
3.1. Hierarchische Berechnung von Raumladungskräften	19
3.1.1. Hierarchische Approximation basierend auf Baumstrukturen	22
3.1.2. Berechnung mittels der schnellen Multipolmethode	24
3.2. Implementierung der schnellen Multipolmethode	32
3.3. Modellierung kollektiver Wechselwirkungen von Teilchen	37
3.3.1. Feldglättung mittels Modifikation der Nahfeldwechselwirkung	37
3.3.2. Hybrides Verfahren mit gitterbasierter Interpolation	40
3.3.3. Nahfeldapproximation mittels der Methode selbstkonsistenter Felder	45
3.4. Strahldynamiksimulationen mit der schnellen Multipolmethode	56
3.4.1. Modifikation der Baumstruktur für relativistische Teilchenstrahlen	56
3.4.2. Modifikation der Raumladungsfelder während der Strahlerzeugung	57
3.4.3. Validierung und Optimierung der Fernfeldapproximation	61
3.4.4. Vergleich zwischen teilchenbasierter und gitterbasierter Methode	63
3.5. Modellierung von Teilchenstrahlen mit Energiedispersion	67
3.5.1. Schnelle Multipolmethode für Teilchenstrahlen mit Energiedispersion	68
3.5.2. Anwendungsbeispiel zur raumladungslimitierten Ladungsemission	73
3.6. Strahldynamiksimulation mit Liénard-Wiechert Feldern	75
3.6.1. Modellierung der Liénard-Wiechert Wechselwirkung	75
3.6.2. Erweiterungen zur Simulation des DESY-PITZ THz FEL	78

4. Anwendungen zur Simulation von Teilchenstrahlen	81
4.1. Simulationsstudien zum DESY-PITZ Photoinjektor	81
4.1.1. Motivation	81
4.1.2. Modell des DESY-PITZ Photoinjektors	82
4.1.3. Validierung der Strahldynamiksimulation	82
4.1.4. Anwendungsstudie zur numerischen Parameteroptimierung	87
4.1.5. Strahldynamiksimulation mit Energieklassen	88
4.1.6. Zusammenfassung	92
4.2. Simulation eines SRF Injektors für den E-XFEL	94
4.2.1. Motivation	94
4.2.2. Modell des DESY SRF Photoinjektors	94
4.2.3. Modellierung der Ladungsdichteverteilung und des Phasenraums	95
4.2.4. Untersuchung der Strahlparameter für den FEL Betrieb	98
4.2.5. Stochastische Effekte	101
4.2.6. Zusammenfassung	103
4.3. Strahldynamik eines THz SASE FEL bei DESY-PITZ	104
4.3.1. Motivation	104
4.3.2. Magnetfeld eines planaren Undulators	105
4.3.3. Numerisches Modell für den THz SASE FEL	105
4.3.4. Teilchenstrahldynamik innerhalb des Undulators	107
4.3.5. Ausbildung der Mikrostruktur	109
4.3.6. Analyse der Strahlung des THz SASE FEL	110
4.3.7. Zusammenfassung	116
5. Schlussfolgerung	117
Literatur	121
A. Simulationsprogramm mit FMM Wechselwirkungsberechnung	131
B. Danksagung	135

Abbildungsverzeichnis

2.1. Emittanz und Phasenraumellipse eines Teilchens	6
2.2. Simulationsprogramme für Raumladungseffekte in Teilchenstrahlen	12
2.3. Statistische Definition der Emittanz	15
3.1. Baumstruktur einer 2D Teilchenverteilung	23
3.2. Schema der FMM Wechselwirkungsberechnung	25
3.3. Translation von Multipolmomenten in der FMM	27
3.4. Admissibilitätskriterium von Knotenwechselwirkungen in der FMM	27
3.5. Translation von lokalen Multipolmomenten in der FMM	29
3.6. Parallelisierte Knotenkommunikation	33
3.7. Skalierung der FMM Raumladungsfeldberechnung	34
3.8. Konvergenz- und Effizienzanalyse der FMM Implementierung	35
3.9. Raumladungsfeld und lokale Abweichung der FMM Approximation	36
3.10. Admissibilitätskriterium für die modifizierte Nahfeldwechselwirkung	38
3.11. Konvergenzanalyse für die modifizierte Nahfeldwechselwirkung	39
3.12. Lokale Feldabweichung für die modifizierte Nahfeldwechselwirkung	41
3.13. Gitterbasierte CIC Interpolation der Ladungsdichteverteilung	43
3.14. Konvergenzanalyse für das hybride FMM Verfahren	43
3.15. Lokale Feldabweichung für das hybride FMM Verfahren	44
3.16. Vergleich zwischen Plummer- und Coulombpotential	47
3.17. Nahfeldapproximation eines Blattknotens mittels Plummer-Basis	49
3.18. Potentialverteilung und Plummer-Approximation eines Blattknotens	50
3.19. Konvergenzanalyse für das Plummer-Modell	52
3.20. Lokale Feldabweichung für das Plummer-Modell	54
3.21. Ladungsdichteverteilung im mittleren Ruhesystem eines Teilchenstrahls	57
3.22. Untergliederungsstrategien zur Erzeugung würfelförmiger Teilgebiete	58
3.23. Methode der Spiegelladungen im Formalismus der FMM	59
3.24. Vergleich zwischen einer PPM und FMM Strahldynamiksimulation	62
3.25. Vergleich zwischen FMM und PPM Phasenraumverteilung	62
3.26. FMM Parameterstudie zu Strahlemittanzsimulationen	63
3.27. Gesamtenergie bei der Expansion einer kugelförmigen Teilchenverteilung	64
3.28. Emittanz bei der Expansion einer kugelförmigen Teilchenverteilung	65

3.29. Scheibenemittanz einer kugelförmigen Teilchenverteilung nach der Expansion . . .	66
3.30. Phasenraum mit 30% relativer Energieabweichung und $z - p_z$ -Korrelation.	68
3.31. Abweichung des mittels Energieklassierung berechneten Raumladungsfelds	69
3.32. Adaptive Baumstruktur für FMM mit Energieklassierung	70
3.33. Anzahl der Rechenoperationen für FMM mit Energieklassierung	71
3.34. Laufzeitverhalten bezüglich der Anzahl der Energieklassen B	72
3.35. Konvergenzverhalten bezüglich der Anzahl der Energieklassen B	73
3.36. Raumladungslimitierte Strahlgenerierung in einer Elektronenquelle	74
3.37. Raumzeitdiagramm der LW Wechselwirkung in 1D	76
3.38. Graphische Lösung der Retardierungsgleichung	77
3.39. Strahlungsdämpfung eines Elektrons im Undulator des DESY THz SASE FEL	79
3.40. Konvergenzstudie zur Approximation der retardierten Teilchenkoordinaten	80
4.1. Numerisches Modell des DESY-PITZ Photoinjektors	83
4.2. Vergleich einer Strahldynamiksimulation mit der FMM, ASTRA 3D und KRACK 3	85
4.3. Phasenraumverteilung am Ausgang des DESY-PITZ Photoinjektors	86
4.4. Anwendung der Plummer-Basisfunktionen für den DESY-PITZ Photoinjektor	87
4.5. Phasenraum für eine Simulation mit Plummer-Basisfunktionen	88
4.6. Parameteroptimierung für den DESY-PITZ Photoinjektor	89
4.7. FMM Simulationen mit Raumladungslimitierung	89
4.8. Simulation mit Energieklassen und LW Feldern	90
4.10. Modell des DESY SRF Photoinjektors	95
4.11. Ladungsdichteverteilung eines Teilchenstrahls des DESY SRF Photoinjektors	97
4.12. Phasenraum eines Teilchenstrahls der DESY SRF Elektronenkanone	99
4.13. Scheibenemittanz eines Teilchenstrahls der DESY SRF Elektronenkanone	101
4.14. Scheibenenergiestreuung eines Teilchenstrahls der DESY SRF Elektronenkanone	102
4.15. Stromspektrum für den DESY SRF Photoinjektor	103
4.16. Modell für den Undulator des DESY THz SASE FEL	106
4.17. Transversale Strahlbreite im Undulator des DESY THz SASE FEL	108
4.18. Phasenraum am Ausgang des Undulators des DESY THz SASE FEL	111
4.19. Strahlstromspektrum im Undulator des DESY THz SASE FEL	112
4.20. Strahlungsfeld am Ausgang des Undulators des DESY THz SASE FEL	112
4.21. Winkelverteilung für das Strahlungsfeld des DESY THz SASE FEL	113
4.22. Zeitliche und transversale Pulsform der Strahlung des DESY THz SASE FEL	114
4.23. Spektrum der generierten Strahlung des DESY THz SASE FEL	115

Tabellenverzeichnis

3.1. Anzahl der Rechenoperationen für gitterbasierte FMM	45
3.2. Anzahl der Rechenoperationen für die Plummer-Nahfeldmodellierung	55
3.3. Anteil direkter Wechselwirkungen für die FMM mit Energieklassen	71
4.1. Strahlparameter für eine Simulation mit der FMM, ASTRA 3D und KRACK3	85
4.2. Modell der Energieklassen für die DESY-PITZ Elektronenkanone	91
4.3. Strahlparameter am Ausgang des Undulators des DESY THz SASE FEL	108

Abkürzungsverzeichnis

ALD	Abraham-Lorentz-Dirac
CDS	engl. Cut Disk Structure
CIC	1. Ordnung Interpolationsmethode (engl. Cloud-In-Cell)
E-XFEL	Europäischer X-Strahlen freie Elektronen Laser
FEL	Freie Elektronen Laser
FFT	Schnelle Fourier Transformation (engl. Fast Fourier Transformation)
FMM	Schnelle Multipolmethode (engl. Fast Multipole Method)
HF	Hochfrequenz
LW	Liénard-Wiechert
MC	Monte-Carlo
MS	Mikrostruktur
NGP	0. Ordnung Interpolationsmethode (engl. Nearest-Grid-Point)
OS	Ohne Strahlungswechselwirkung
PITZ	Photoinjektor Testeinrichtung in Zeuthen
PPM	Teilchen-Teilchen Methode (engl. Particle-Particle Method)
QES	Quasi-Elektrostatik
QMW	Quadratischer Mittelwert
SASE	Selbst-amplifizierte spontane Emission
SRF	supraleitend, hochfrequent (engl. Superconducting Radio Frequency)
THz	Terahertz

1. Einleitung

Seit den frühen Fünfzigern haben sich Teilchenbeschleuniger als ein essentielles Werkzeug in der Wissenschaft etabliert [Wie15]. Das Anwendungsspektrum umfasst nicht nur die Grundlagenforschung in der Kern- und Teilchenphysik, sondern erschließt zunehmend neue Einsatzbereiche, wie die Medizin und Materialforschung [Wie15]. Insbesondere durch die fortschreitende Entwicklung auf dem Gebiet der freien Elektronen Laser (FEL) eröffnen sich mit der Erzeugung intensiver Röntgenstrahlungspulse fundamental neue Forschungszweige [RSW19], wie beispielsweise die Möglichkeit eine photochemische Reaktion zeitlich aufzulösen [Nog18].

Der europäische X-Strahlen freie Elektronen Laser (E-XFEL) bei DESY in Hamburg ist eine der leistungsstärksten Quellen für Röntgenstrahlungspulse weltweit. Als Teil der Strategie zur Entwicklung europäischer Forschungsinfrastruktur nimmt das Projekt in den kommenden Jahren eine Schlüsselrolle ein [ESF18]. Für die Erzeugung der Röntgenstrahlungspulse bis in den Subnanometer-Wellenlängenbereich werden am E-XFEL Elektronenpakete mit einer Maximalladung von 1 nC mittels eines supraleitenden Linearbeschleunigers auf bis zu 17.5 GeV Strahlenergie beschleunigt [Alt06]. Auch nach der Fertigstellung des E-XFEL im Jahr 2017 wird kontinuierlich am Ausbau der Anlage gearbeitet. Ein aktuelles Forschungsprojekt untersucht zum Beispiel die notwendigen Anpassungen des supraleitenden Elektronenbeschleunigers für einen Dauerstrahlbetrieb [Sek15]. Ein anderes Projekt bei der DESY Photoinjektor Testeinrichtung in Zeuthen (PITZ) analysiert mit einem Grundlagenexperiment Anwendungsmöglichkeiten für einen bis zu 4 nC Elektronenstrahl des PITZ-Photoinjektors zur Erzeugung von intensiven Terahertz (THz) Strahlungspulsen für Nutzerexperimente am E-XFEL [Sch12].

Die Planung und der Betrieb eines Teilchenbeschleunigers erfordert umfassende Kenntnisse zur Strahldynamik der Teilchen im Inneren der Anlage. Aus diesem Grund stellen numerische Modellierungen des Teilchenstrahls ein sehr wichtiges Standbein bei der Arbeit mit Beschleunigeranlagen dar [Rei08]. Hierbei ist die Modellierung von niederenergetischen Teilchenstrahlen mit großer Ladungsdichte aus numerischer Sicht eine besondere Herausforderung. Die Strahldynamik wird dann maßgeblich durch die Raumladungswchselwirkung zwischen den Teilchen beeinflusst [Kim89]. Für die erwähnten Forschungsprojekte am E-XFEL spielen deshalb insbesondere numerische Simulationen für die Raumladungseffekte während der Erzeugung des Elektronenstrahls und entlang der Strahlführung des Photoinjektors eine entscheidenden Rolle.

Viele etablierte Simulationsprogramme zur Modellierung von Raumladungseffekten, wie beispielsweise ASTRA [Flo17], IMPACT T [Qia06], GPT [Cha12], etc. berechnen die Raumladungswechselwirkung des Teilchenstrahls mit gitterbasierten Methoden. Durch die Approximation des Teilchenstrahls mit der diskreten Ladungsdichteverteilung eines Rechengitters könnten dabei numerisch bedingte Artefakte oder sogar Instabilitäten auftreten [Mey15; Hua16]. Eine Alternative bieten teilchenbasierte Methoden, die eine direkte Berechnung der Raumladungsfelder ohne Rechengitter ermöglichen. In dieser Arbeit werden hierzu zwei Verfahren entwickelt und für aktuelle Forschungsprojekte am E-XFEL angewendet. Das erste Verfahren berechnet eine quasi-elektrostatische (QES) Approximation für die Wechselwirkungsfelder mittels der schnellen Multipolmethode (engl. Fast Multipole Method, FMM) von Greengard und Rokhlin [GR87]. Das zweite Verfahren ermöglicht eine vollständig elektromagnetische Modellierung des Teilchenstrahls, indem ein Liénard-Wiechert (LW) Wechselwirkungsmodell mit einer direkten Teilchen-Teilchen Methode (engl. Particle-Particle Method, PPM) ausgewertet wird. Das Ziel dieser Arbeit ist, diese teilchenbasierten Methoden für den Einsatz in Beschleunigersimulationen geeignet zu erweitern und in angewandten Simulationsstudien zu testen.

Wissenschaftlicher Beitrag

Die folgende Aufzählung fasst die wichtigsten Forschungsergebnisse der vorliegenden Arbeit in fünf Punkten zusammen:

1. Diese Arbeit stellt eine Implementierung der FMM zur gitterfreien Modellierung von Raumladungseffekten in Beschleunigeranlagen vor. Spezifische Erweiterungen durch eine Baumstruktur mit optimierter Knotenuntergliederung, die Methode der Spiegelladungen, sowie Methoden zur Regularisierung von Coulombkollisionen ermöglichen beginnend bei der Strahlerzeugung in einem Photoinjektor bis hin zu hoch relativistischen Teilchenstrahlen eine numerisch effiziente FMM Approximation der Raumladungswechselwirkung.
2. Die FMM Implementierung umfasst zusätzlich ein verallgemeinertes QES Wechselwirkungsmodell, welches durch die Methode der Energieklassen numerisch effizient die Raumladungswechselwirkungen in Teilchenstrahlen mit großer Energiestreuung approximiert. Eine numerische Studie zeigt, dass sich dieses Modell besonders für die Modellierung der Strahldynamik in einer Elektronenkanone eignet.
3. Das neu entwickelte Programm wird zur Charakterisierung von Raumladungseffekten in der Strahldynamik des DESY-PITZ Photoinjektors sowie der DESY SRF Elektronenkanone für deren Anwendungen am E-XFEL eingesetzt. Validierungstests und ein umfassender Vergleich

gegenüber etablierten Simulationsprogrammen mit gitterbasierten Methoden zeigen die Vorteile sowie die Besonderheiten des gitterfreien Simulationsverfahrens.

4. Die Implementierung eines bereits bestehenden LW Simulationsprogramms [Che18] wird durch eine lineare Approximation für zeitretardierte Teilchentrajektorien, ein Dämpfungsmodell für den Energieverlust des Teilchenstrahls aufgrund von Strahlungsemission, sowie Feldmonitore zur Analyse des generierten Strahlungsfelds erweitert. Diese Erweiterungen ermöglichen das Programm zur numerischen Modellierung eines FEL für THz Strahlung anzuwenden.
5. Eine Simulationsstudie zum Grundlagenexperiment der THz Strahlungsquelle bei DESY-PITZ zeigt, dass mit dem erweiterten LW Programm nicht nur die Strahldynamik, sondern auch die strahlungsinduzierte Ausbildung der Mikrostruktur innerhalb des Teilchenstrahls und das emittierte THz Strahlungsfeld modelliert werden können. Dies ist besonders bemerkenswert, weil die Simulationsergebnisse ohne zusätzliche Näherungen *ab initio* aus dem elektromagnetischen LW Wechselwirkungsmodell resultieren.

Gliederung

Die Arbeit ist in drei Kapitel untergliedert. Kapitel 2 behandelt die physikalischen Modelle und numerischen Methoden, die zur Simulation von Teilchenstrahlen in Beschleunigeranlagen genutzt werden. Eine Übersicht zu aktuell verwendeten Simulationsprogrammen zeigt die Einordnung dieser Arbeit in den momentanen Forschungsstand. In Kapitel 3 werden die beiden gitterfreien Verfahren zur Berechnung der Raumladungsfelder vorgestellt. Im Hinblick auf den Einsatz für Strahldynamiksimulationen werden die Implementierung und Adaption der FMM für relativistische Teilchenstrahlen diskutiert sowie numerische Konvergenzstudien gezeigt. Außerdem wird die Methode der Energieklassen zur Simulation von Teilchenstrahlen mit großer Energiedispersion erläutert und numerisch analysiert. Kapitel 4 zeigt das Einsatzpotential der Verfahren anhand von drei konkreten Simulationsstudien. Die erste Studie untersucht die Strahldynamik des DESY-PITZ Photoinjektors, der als Elektronenstrahlquelle für den E-XFEL dient. In der zweiten Studie wird der Teilchenstrahl einer Elektronenkanone mit supraleitender Hochfrequenzkavität simuliert, welche für die zukünftige Ausbaustufe des E-XFEL entwickelt wird. Die dritte Studie modelliert die Strahldynamik und das Strahlungsfeld der THz Lichtquelle bei DESY in Zeuthen. Die Arbeit schließt mit einem Resümee zu den Anwendungstärken der teilchenbasierten Verfahren und gibt einen Ausblick auf weiterführende Forschungsthemen.

2. Modellierung der Strahldynamik in Beschleunigeranlagen

Zur Modellierung der Strahldynamik einer Beschleunigeranlage muss die Dynamik für jedes einzelne Teilchen anhand der Bewegungsgleichung für einen frei beweglichen Ladungsträger in einem elektromagnetischen Feld bestimmt werden. Dazu ist wiederum eine Auswertung der elektromagnetischen Felder innerhalb des Teilchenbeschleunigers erforderlich. Auf Basis aller Trajektorien können abschließend die statistischen Momente zur Beschreibung der strahldynamischen Größen des Teilchenstrahls berechnet werden. In diesem Kapitel werden die dabei verwendeten Modelle und numerischen Methoden diskutiert.

2.1. Dynamik eines geladenen Einzelteilchens

2.1.1. Physikalische Beschreibung der Teilchentrajektorie

Die Position, $\mathbf{x}(t)$, und die Geschwindigkeit, $\mathbf{v}(t)$, eines frei beweglichen Teilchens mit der Ladung q und der Ruhemasse m_0 in einem elektrischen Feld, $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$, und einem magnetischen Feld, $\mathbf{B}(\mathbf{x}, t)$, ergibt sich, mit $\mathbf{u}(t) = \gamma(t) \mathbf{v}(t)$, aus den Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt} \mathbf{x} = \mathbf{v}, \quad (2.1)$$

$$\frac{d}{dt} \mathbf{u} = \frac{q}{m_0} [\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}]. \quad (2.2)$$

Der relativistische Faktor,

$$\gamma = \sqrt{1 + \frac{\mathbf{u}^2}{c^2}}, \quad (2.3)$$

entspricht der Gesamtenergie des Teilchens in Einheiten seiner relativistischen Ruheenergie, $E_0 = m_0 c^2$, und beschränkt die Teilchengeschwindigkeit auf $v \leq c$. Für relativistische Teilchen in einem Beschleuniger ist die Lorentz-Kraft durch ein elektrisches Feld der Stärke 300 MV m^{-1} betragsmäßig vergleichbar mit einem magnetischen Feld der Stärke 1 T [Wil09]. Dieses Verhältnis gibt eine grobe Vorstellung davon, wie sich die strahloptischen Elemente auf die Dynamik des Teilchenstrahls auswirken.

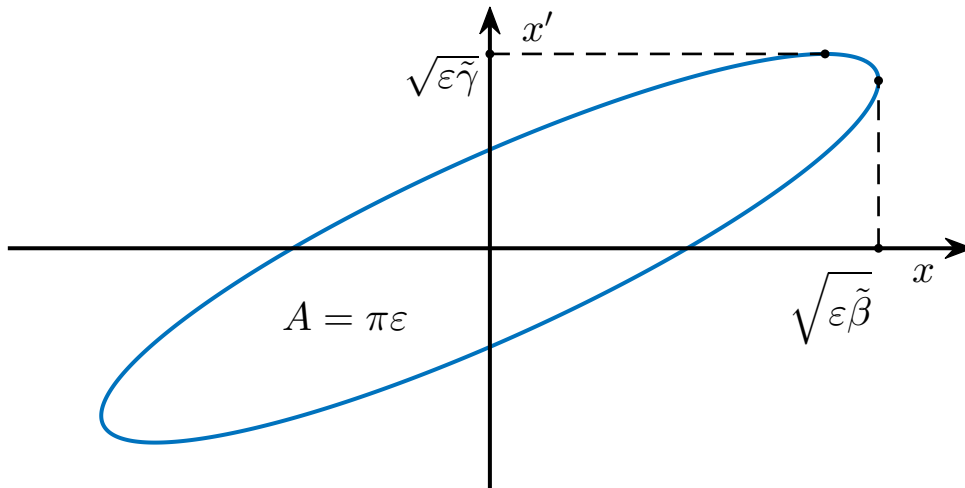


Abbildung 2.1.: Phasenraumdiagramm in Anlehnung an [Wil09] für die Trajektorie eines Teilchens mit transversalem Abstand x und Winkel x' zur nominalen Strahlachse des Beschleunigers. Die Emittanz, ε , ist proportional zu Fläche der Ellipse.

Die Trajektorie eines Einzelteilchens kann bei linearer Näherung der strahloptischen Elemente des Teilchenbeschleunigers semi-analytisch behandelt werden. Hierzu ist es zielführend die zeitabhängigen Gleichungen (2.1) und (2.2) bezüglich der unabhängigen Variable s zu transformieren, welche der zurückgelegten Distanz entlang der nominalen Strahlführung, $\mathbf{s}(s)$, des Teilchenbeschleunigers entspricht. Die transversale Position, $x(s)$, und der Winkel, $x'(s) = dx/ds$, zur nominalen Strahlführung beschreiben den Phasenraum des Teilchens. Zwischen den beiden Teilchenkoordinaten, x und x' , gilt der allgemeine Zusammenhang [Wil09]

$$\tilde{\gamma}(s) x^2(s) + 2\tilde{\alpha}(s) x(s) x'(s) + \tilde{\beta}(s) x'^2(s) = \varepsilon. \quad (2.4)$$

Die optischen Funktionen $\tilde{\alpha}(s)$, $\tilde{\beta}(s)$ und $\tilde{\gamma}(s)$ repräsentieren die effektive Wirkung aller elektromagnetischen Felder der strahloptischen Elemente entlang der Strahlführung des Beschleunigers. Die Strahlemittanz, ε , ist proportional zur Fläche der Ellipse im transversalen Phasenraum des Teilchens in Abb. 2.1.

Nach dem Theorem von Liouville ist das Phasenraumvolumen eines Ensembles von Teilchen, deren Trajektorien durch die kanonischen Gleichungen beschrieben werden, eine Erhaltungsgröße der Bewegung [Rei08]. Für die (2.4) zu Grunde liegenden Annahmen kann diese Aussage ebenso für die Emittanz verallgemeinert werden [Wil09]. Dementsprechend variieren die Orientierung und Form der Phasenraumellipse in Abb. 2.1 zwar als Funktion von s , jedoch bleibt dabei die Fläche, A , immer konstant. Anschaulich interpretiert folgt daraus, dass eine Verringerung der transversalen Breite des Teilchenstrahls, $\Delta x(s) = 2\sqrt{\varepsilon\tilde{\beta}(s)}$, zugleich eine Vergrößerung der

Winkeldivergenz, $\Delta x'(s) = 2\sqrt{\varepsilon\tilde{\gamma}(s)}$, impliziert. Die Emittanz definiert somit eine grundlegende Eigenschaft des Teilchenstrahls.

2.1.2. Numerische Lösung der Bewegungsgleichung

Für nichtlineare Felder, wie z. B. die Raumladungswchselwirkung zwischen den Ladungsträgern, ist im Allgemeinen keine analytische Beschreibung der Trajektorie möglich. In diesem Fall müssen die Bewegungsgleichungen (2.1) und (2.2) durch ein numerisches Integrationsverfahren gelöst werden. Bei der Simulation eines zahlenmäßig großen Ensembles von Teilchen ist - Stabilität und Konsistenz der numerischen Methode vorausgesetzt - insbesondere die numerische Effizienz der Zeitintegration ausschlaggebend. Im Hinblick auf die Optimierung des Speicherbedarfs und der Rechenzeit bieten sich deshalb explizite Runge-Kutta Verfahren oder Finite Differenzen Methoden an [HE88]. Die Simulationsprogramme ASTRA [Flo17] und KRACK3 [DH16] nutzen beispielsweise ein mehrstufiges Runge-Kutta Verfahren mit adaptivem Zeitschritt. In dieser Arbeit wird hingegen ein einstufiges Finite Differenzen Verfahren nach der Methode von Boris [Bor70] eingesetzt.

Bei der Methode von Boris werden die Geschwindigkeitsänderungen durch das elektrische und magnetische Feld getrennt von einander berechnet. Für die Schrittweite Δt erfolgt die numerische Integration der zu den Zeitpunkten t^n diskretisierten Teilchenkoordinaten, $\mathbf{x}^n = \mathbf{x}(t^n)$ und $\mathbf{u}^n = \mathbf{u}(t^n)$, nach dem folgenden Schema [BL04]

$$\mathbf{x}^{n+1/2} = \mathbf{x}^n + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{v}^n, \quad (2.5)$$

$$\mathbf{u}^- = \mathbf{u}^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{q}{m_0} \mathbf{E}(\mathbf{x}^{n+1/2}, t^{n+1/2}), \quad (2.6)$$

$$\mathbf{u}^0 = \mathbf{u}^- + \mathbf{u}^- \times \mathbf{T}^{n+1/2}, \quad (2.7)$$

$$\mathbf{u}^+ = \mathbf{u}^- + \mathbf{u}^0 \times \mathbf{S}^{n+1/2}, \quad (2.8)$$

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^+ + \frac{\Delta t}{2} \frac{q}{m_0} \mathbf{E}(\mathbf{x}^{n+1/2}, t^{n+1/2}), \quad (2.9)$$

$$\mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{x}^{n+1/2} + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{v}^{n+1} \quad (2.10)$$

mit den Hilfsvektoren

$$\mathbf{T}^{n+1/2} := \frac{\Delta t}{2} \frac{q}{m_0 \gamma^-} \mathbf{B}(\mathbf{x}^{n+1/2}, t^{n+1/2}), \quad (2.11)$$

$$\mathbf{S}^{n+1/2} := \frac{2}{1 + \mathbf{T}^{n+1/2} \cdot \mathbf{T}^{n+1/2}} \mathbf{T}^{n+1/2}. \quad (2.12)$$

Es handelt sich hierbei um eine zentrale Differenzen Methode, welche die Integration der Koordinaten, \mathbf{x}^n und \mathbf{v}^n , mit zweiter Ordnung Genauigkeit in der Schrittweite und zeitlich reversibel abbildet [BL04]. Zwecks Synchronisation erfolgt die Integration der Teilchenposition, \mathbf{x}^n , mit (2.5) und (2.10) in jeweils zwei halben Zeitschritten. Die Beschleunigung durch das elektrische Feld verändert sowohl die Geschwindigkeit, \mathbf{v} , als auch die Energie, γ , des Teilchens. Durch eine symmetrische Aufteilung der Geschwindigkeitsänderung in (2.5) und (2.10) wird eine zentrale Auswertung erreicht. Die Gleichungen (2.7) und (2.8) bilden die Rotation des Geschwindigkeitsvektors, \mathbf{v} , durch das Magnetfeld ab. Dabei bleibt die kinetische Energie, $\gamma^- = \gamma^0 = \gamma^+$, des Teilchens konstant. Die Zyklotronfrequenz innerhalb des Magnetfelds beträgt

$$\omega = \frac{q |\mathbf{B}|}{\gamma m_0}, \quad (2.13)$$

sodass (2.7) mit dem Hilfsvektor \mathbf{T} gerade die Hälfte der Rotation des Geschwindigkeitsvektors um den Winkel $\theta = \omega \Delta t$ repräsentiert. Der Betrag des Hilfsvektors \mathbf{S} ist so gewählt, dass die Energieerhaltung, $\gamma^- = \gamma^+$, gewährleistet wird. Die Approximation des Rotationswinkels, θ , skaliert mit dritter Ordnung Genauigkeit in der Schrittweite [BL04].

Die numerischen Eigenschaften der Methode zur Zeitintegration beeinflussen sowohl die Effizienz als auch die Erhaltungsgrößen der Strahldynamiksimulation. Einige Vorteile eines Runge-Kutta Verfahrens sind beispielsweise die Definition der Teilchenkoordinaten, $\mathbf{x}(t_x)$ und $\mathbf{u}(t_u)$, zum selben Zeitpunkt, $t_x = t_u$, eine flexible und fehleradaptive Anpassung des Zeitschritts sowie im Vergleich zu den Finite Differenzen Methoden ein kleinerer lokaler Abschneidefehler [HE88]. Demgegenüber garantiert der Algorithmus von Boris [Bor70] die Erhaltung des Phasenraumvolumens sowie einen global beschränkten Approximationsfehler in der Energieerhaltung und ist damit numerisch langzeitstabil [Qin13]. Für einen umfassenden Vergleich unterschiedlicher Integrationsmethoden zur Modellierung relativistischer Teilchenstrahlen sei an dieser Stelle verwiesen auf Ripperda et al. [Rip18].

2.2. Elektromagnetische Felder in Teilchenbeschleunigern

Die elektromagnetischen Felder in einem Teilchenbeschleuniger können unterschiedlichen Ursprungs sein. Die Felder in strahlloptischen Komponenten, wie beispielsweise das Hochfrequenzfeld einer Beschleunigerkavität oder das fokussierende Magnetfeld einer Solenoidspule, sind extern vorgegeben. Eine Modellierung erfolgt entweder mit analytischen Ausdrücken oder durch tabellierte Feldprofile, welche mit numerischen Simulationsprogrammen, wie z. B. CST Studio [Das21], dem Ansys HFSS und Maxwell Löser [ANS21] oder Poisson Superfish [Los21], berechnet

werden. Zusätzlich dazu bilden sich durch die Wechselwirkung des Teilchenstrahls mit dem Strahlrohr elektromagnetische Wakefelder aus. Derartige Wechselwirkungseffekte werden mithilfe von sogenannten Wakefeldcodes, wie beispielsweise PBCI [Gjo06], Echo [Zag16] und CST Particle Studio [Das21], berechnet. Abschließend beeinflusst insbesondere die Raumladungswechselwirkung der Ladungsträger die Teilchenstrahldynamik des Beschleunigers. Im folgenden Abschnitt werden ausschließlich Methoden zur Modellierung des elektromagnetischen Raumladungsfelds innerhalb eines Teilchenstrahls thematisiert.

2.2.1. Physikalische Beschreibung der Raumladungswechselwirkung

Das elektromagnetische Feld eines Teilchenstrahls mit der Ladungsdichte $\varrho(\mathbf{x}, t)$ und der Stromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ wird allgemein beschrieben durch die Maxwell'schen Gleichungen,

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{D} &= \varrho, & \nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D} &= \mathbf{j}, \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0, & \nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B} &= 0,\end{aligned}$$

wobei mit der Permittivität, ϵ_0 , und der Permeabilität, μ_0 , des Vakuums gilt

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E}, \quad \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}.$$

Für die Definition des Skalar- und Vektorpotentials durch

$$\mathbf{E} := -\nabla\phi - \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A} \quad \text{und} \quad \mathbf{B} := \nabla \times \mathbf{A}$$

ergeben sich mit der Eichbedingung nach Lorenz die inhomogenen Wellengleichungen,

$$\nabla^2 \phi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \phi = -\frac{\varrho}{\epsilon_0}, \quad (2.14)$$

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{A} = -\mu_0 \mathbf{j}. \quad (2.15)$$

Die retardierte Greensche Funktion für offene Randbedingungen [JWM11],

$$G(\mathbf{x}, t, \mathbf{x}', t') = \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \delta\left(t' - \left[t - \frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}{c}\right]\right), \quad (2.16)$$

liefert die Lösung der Wellengleichung für ein relativistisches Teilchen an der Position $\mathbf{x}'(t')$ mit der Ladung q und der Geschwindigkeit $\mathbf{v}'(t') = c \boldsymbol{\beta}'(t')$ in Form der LW Potentiale [JWM11],

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{q}{(1 - \mathbf{n}' \cdot \boldsymbol{\beta}') |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \right]_{t'=t_{\text{ret}}}, \quad (2.17)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}, t) \left[\frac{\boldsymbol{\beta}'}{c} \right]_{t'=t_{\text{ret}}}, \quad (2.18)$$

mit

$$\mathbf{n}' := \frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}.$$

Die Auswertung der LW Potentiale erfordert die Teilchenkoordinaten, \mathbf{x}' und $\boldsymbol{\beta}'$, zum retardierten Zeitpunkt $t' = t_{\text{ret}}$. Die Deltadistribution in (2.16) gibt dafür eine implizite Definition von t_{ret} in Abhängigkeit von \mathbf{x}' , \mathbf{x} und t . Die Zeitdifferenz, $t - t'$, entspricht genau der Lichtlaufzeit, $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'(t')|/c$, zwischen der retardierten Position des Teilchens und dem Ort der Feldauswertung. Eine analytische Auswertung ist im Allgemeinen schwierig, da die LW Potentiale implizit von den Trajektorien aller Teilchen für $t' < t$ abhängen. Die numerische Berechnung der elektromagnetischen Felder wird im Zusammenhang des Simulationsprogramms mit teilchenbasierter Modellierung der Raumladungswechselwirkung in Kapitel 3.6 erläutert.

Für einen Teilchenstrahl, dessen Ladungsträger sich im Laborsystem, I , alle näherungsweise mit gleichbleibend konstanter Geschwindigkeit, $\boldsymbol{\beta}_0$, bewegen, kann das Raumladungsfeld analytisch mit einer QES Näherung im mitbewegten Inertialsystem des Teilchenstrahls, \tilde{I} , approximiert werden. Mit der Lorentz Transformation für die Teilchenkoordinaten in I , (ct', \mathbf{x}') , folgt in \tilde{I} [JWM11]

$$\tilde{ct}' = \gamma_0 (ct' - \boldsymbol{\beta}_0 \cdot \mathbf{x}'), \quad (2.19)$$

$$\tilde{\mathbf{x}}' = \mathbf{x}' + \frac{\gamma_0 - 1}{\boldsymbol{\beta}_0 \cdot \boldsymbol{\beta}_0} (\boldsymbol{\beta}_0 \cdot \mathbf{x}') \boldsymbol{\beta}_0 - \gamma_0 \boldsymbol{\beta}_0 (ct'). \quad (2.20)$$

Gleichung (2.20) elongiert im Wesentlichen die Ortskoordinate der Teilchen, $\tilde{\mathbf{x}}'$, in der Richtung von $\boldsymbol{\beta}_0$ um den Faktor γ_0 . Der letzte Term subtrahiert die Translationsbewegung des Teilchenstrahls, sodass sich in \tilde{I} alle Teilchen in Ruhe befinden.

Die Wellengleichung (2.14) für das Skalarpotential, $\tilde{\phi}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{t})$, wird in \tilde{I} zu einem elektrostatischen Poissonproblem für die skalierte Ladungsdichte $\tilde{\varrho}(\tilde{\mathbf{x}}) = \varrho(\tilde{\mathbf{x}})/\gamma_0$ vereinfacht. Im Freiraum

liefert die Greensche Funktion [JWM11],

$$G(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}}') = \frac{1}{|\tilde{\mathbf{x}} - \tilde{\mathbf{x}}'|}, \quad (2.21)$$

die Lösung für das Wechselwirkungspotential des Teilchens. An dieser Stelle ist zu beachten, dass Teilchen mit unterschiedlichen Ortskoordinaten, \mathbf{x}' , in I durch (2.19) auf verschiedene Zeitpunkte, \tilde{t}' , in \tilde{I} abgebildet werden. Damit die QES Approximation gültig ist, muss die relative Bewegung der Teilchen in \tilde{I} über die Zeitspanne

$$\Delta\tilde{t} = \gamma_0 \beta_0 \cdot \frac{\Delta\mathbf{x}}{c} \quad (2.22)$$

vernachlässigbar klein sein.

Die Rücktransformation des elektrostatischen Felds, $\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{x})$, in das Laborsystem ergibt [JWM11]

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = \gamma_0 \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{x}) - \frac{\gamma_0^2}{\gamma_0 + 1} [\beta_0 \cdot \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{x})] \beta_0, \quad (2.23)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}) = \frac{1}{c} \beta_0 \times \mathbf{E}(\mathbf{x}). \quad (2.24)$$

Durch Einsetzen der Felder (2.23) und (2.24) in die Bewegungsgleichung (2.2) folgt, dass der Betrag für die Lorentzkraft des statischen Raumladungsfelds wie $1/\gamma_0^2$ mit der Energie des Teilchenstrahls skaliert [Kim89]. Aus diesem Grund spielt die statische Raumladungswechselwirkung insbesondere in den Abschnitten mit niedriger Strahlenergie, wie z. B. innerhalb eines Photoinjektors während der Erzeugung des Elektronenstrahls, eine wichtige Rolle.

2.2.2. Numerische Berechnung der Raumladungswechselwirkung

Bei einer Strahldynamiksimulation mit Raumladungswechselwirkung müssen die elektromagnetischen Felder basierend auf der Ladungs- und Stromdichteverteilung des Teilchenstrahls mittels numerischer Methoden berechnet werden. Abbildung 2.2 zeigt eine Auswahl verschiedener Programme, welche entweder eine vollständig elektromagnetische Feldlösung oder deren QES Approximation zur Modellierung der Raumladungswechselwirkung verwenden. Die beiden grün markierten Programme sind im Rahmen dieser Arbeit implementiert bzw. weiterentwickelt worden.

Das elektromagnetische Modell erfordert eine zeitabhängige Lösung der Maxwell'schen Gleichungen. Die Simulationssoftware VSim [Tec21] nutzt dafür die gitterbasierte Methode der

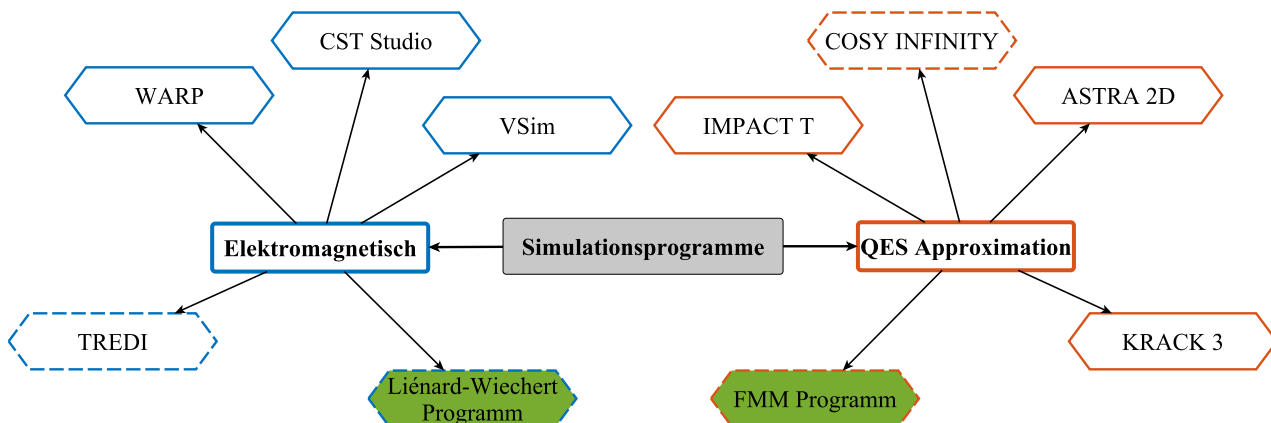


Abbildung 2.2.: Auswahl verschiedener Simulationsprogramme zur Modellierung von Raumladungseffekten in Teilchenstrahlen. Durchgängig umrandete Programme nutzen ein gitterbasiertes Verfahren. Die gestrichelt umrandeten Programme arbeiten ohne den Zwischenschritt über ein Rechengitter. Die grün hinterlegten Programme werden im Rahmen dieser Arbeit genutzt.

Finiten Differenzen [Yee66] im Zeitbereich. In WARP [VG14] ist zusätzlich eine pseudo-spektrale Methode implementiert, bei welcher die räumliche Abhängigkeit der elektromagnetischen Felder mittels einer Fourier Transformation berechnet wird. Die Feldlösung in CST STUDIO [SB06] erfolgt mit der Finite Integrationsmethode [Wei77], welche ebenfalls auf einem Rechengitter basiert. Bei der gitterfreien Methode in TREDI [GQ03] und dem LW Simulationsprogramm, welches im Rahmen dieser Arbeit genutzt wird, werden die elektromagnetischen Felder durch direkte Auswertung der Greenschen Funktion (2.16) für alle wechselwirkenden Teilchenpaare berechnet. Elektromagnetische Strahldynamiksimulationen sind im Allgemeinen numerisch sehr aufwändig, sodass die Berechnungen zumeist auf Großrechnern durchgeführt werden müssen.

Bei der QES Modellierung muss die Poisson Gleichung im mitbewegten Inertialsystem des Teilchenstrahls gelöst werden. Die Programme IMPACT T [Qia06] und KRACK 3 [DH16] wenden dazu den Algorithmus für schnelle Fourier Transformationen (FFT) auf eine gitterbasierte Darstellung der Ladungsdichteverteilung an, um die Feldlösung mit Hilfe von integrierten Greenschen Funktionen darzustellen. Die zweidimensionale Feldverteilung eines rotationsymmetrischen Teilchenstrahls in ASTRA [Flo17] wird durch numerische Integration für ein zylindrisches Rechengitter mit homogen geladenen Gitterzellen berechnet. COSY INFINITY [ZB11] sowie das FMM Simulationsprogramm, welches in dieser Arbeit implementiert wird, berechnen das Raumladungsfeld mit der teilchenbasierten FMM von Greengard und Rokhlin [GR87]. Weil beim elektrostatischen

Modell keine zeitabhängigen Felder ausgewertet werden müssen, wird im Vergleich zum elektromagnetischen Modell weniger Speicher und Rechenleistung benötigt. Dementsprechend kann die Strahldynamiksimulation in den meisten Fällen bereits auf einem leistungsstarken Einzelrechner durchgeführt werden.

Unabhängig vom Modell der Raumladungswechselwirkung können die numerischen Methoden der Simulationsprogrammen aus Abb. 2.2 grundlegend in gitterbasierte und gitterfreie Verfahren unterteilt werden. Alle Simulationen mit gitterbasierten Verfahren haben gemeinsam, dass in jedem Zeitschritt zwischen der physikalischen Teilchenverteilung und deren diskreter Darstellung auf einem Rechengitter hin und her gewechselt werden muss. Im Gegensatz dazu entfällt bei den gitterfreien Verfahren die Approximation des Teilchenstrahls mittels diskreter Gittergrößen. Dieser Unterschied ist für die Modellierung entscheidend, da der Zwischenschritt über das Rechengitter zu numerischen Ungenauigkeiten oder sogar Instabilitäten führen kann.

Zum einen entstehen aufgrund der endlichen Auflösung des räumlichen Rechengitters Alias-Effekte, welche zu unphysikalischen Simulationsergebnissen führen können [BL04]. Letztere äußern sich in Form eines hochfrequenten Rauschens oder als verstärkte Zunahme einer spezifischen Dichtemodulation in der Teilchenverteilung [Oku72]. Theoretische und numerische Untersuchungen zeigen, dass die Effekte sowohl bei der elektromagnetischen [Mey15] als auch bei der QES [Hua16] Modellierung aufgrund einer unphysikalischen Kopplung zwischen den Grundmoden und höheren harmonischen Moden des Rechengitters auftreten.

Ein weiterer Gittereffekt ist die numerische Cherenkov Instabilität, welche speziell bei der elektromagnetischen Modellierung auftreten kann. Es handelt sich dabei um eine unphysikalische Kopplung zwischen der Ladungsdichteverteilung des Teilchenstrahls und einer elektromagnetischen Welle [God74]. Die Analogie zur physikalischen Cherenkov Strahlung besteht darin, dass aufgrund der numerischen Dispersionsrelation die modellierten Teilchen schneller propagieren können als eine elektromagnetische Welle an der Auflösungsgrenze des Rechengitters [Gre04]. In der Anwendung wird dieses Problem beispielsweise durch eine Verfeinerung des Zeitschritts [God74], mit einer Modifikation des Differenzschemas [LGW05; Kär06] oder mittels künstlicher Filterung der problematischen Frequenzbereiche [Bal16] kompensiert.

Unabhängig vom numerischen Verfahren müssen die Ergebnisse jeder Simulation durch Konvergenzstudien zu den numerischen Parametern, wie beispielsweise dem Zeitschritt, Δt , validiert werden. Der grundlegende Unterschied eines gitterfreien Verfahrens besteht darin, dass die numerische Instabilität aufgrund des Zwischenschritts über das Rechengitter methodisch ausgeschlossen ist. Dieser Vorteil motiviert den Einsatz teilchenbasierter Methoden zur Simulation von

Teilchenstrahlen mit Raumladungswechselwirkung. Die numerischen Verfahren zur gitterfreien Berechnung der Raumladungsfelder werden in Kapitel 3 behandelt.

2.3. Statistische Beschreibung eines Teilchenstrahls

2.3.1. Statistische Momente des Teilchenstrahls

Eine numerische Simulation liefert als Ergebnis für jeden Zeitschritt, t^n , eine Verteilungsdichte [HE88],

$$F(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) = \sum_{i=1}^N \delta[\mathbf{x} - \mathbf{x}_i(t)] \delta[\mathbf{p} - \mathbf{p}_i(t)], \quad (2.25)$$

für die Koordinaten, \mathbf{x}_i , und Impulse, $\mathbf{p}_i := m_0 \mathbf{u}_i$, der $i = 1 \dots N$ Teilchen im sechsdimensionalen Phasenraum. Gewöhnlich ist der Mikrozustand des Teilchenstrahls, also die exakten Phasenraumkoordinaten von jedem einzelnen Teilchen, für die Untersuchung der eigentlichen Problemstellung irrelevant. Stattdessen werden mit der Definition für die statistischen Momente,

$$\langle m^k \rangle = \int m^k F(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \, d\mathbf{x} \, d\mathbf{p}, \quad (2.26)$$

bezüglich der Koordinaten m die strahldynamischen Größen wie beispielsweise der quadratische Mittelwert (QMW) für die transversale Strahlbreite, $\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$, oder die Energiestreuung, σ_E , berechnet.

Zur Quantifizierung der Fläche für die Phasenraumellipse aus Abb. 2.3 a) bietet sich eine statistische Auswertung der normalisierten QMW Emittanz des Teilchenstrahls [Flo03],

$$\varepsilon_{n, \text{QMW}} = \frac{1}{m_0 c} \sqrt{\langle x^2 \rangle \langle p_x^2 \rangle - \langle x p_x \rangle^2}, \quad (2.27)$$

an. Aufgrund der Definition über den kanonischen Impuls, p_x , bleibt die normalisierte Emittanz gegenüber Änderungen der Strahlenergie eine invariante Größe [Rei08]. Damit unterscheidet sich $\varepsilon_{n, \text{QMW}}$ von der Strahlemittanz, ε , aus (2.4), welche aufgrund der adiabatischen Dämpfung mit zunehmender Strahlenergie kleiner wird.

Im Allgemeinen ist die QMW Emittanz im Unterschied zum Phasenraumvolumen des Teilchenstrahls nicht zwangsweise eine Konstante der Bewegung im Sinne des Theorems von Liouville. Eine Zunahme der QMW Emittanz kann zwei grundsätzlich unterschiedliche Ursachen haben [OSh98]. Zum einen führen nichtlineare Effekte, beispielsweise die Raumladungswechselwirkung,

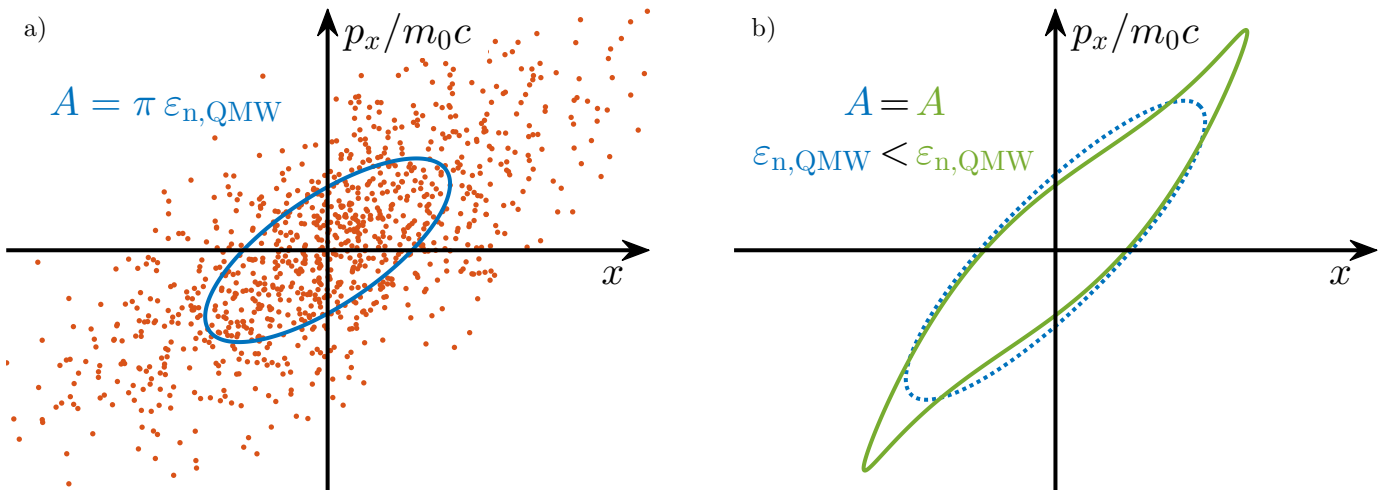


Abbildung 2.3.: Statistische Berechnung der normalisierten QMW Emittanz für ein Ensemble von Teilchen in a). Bei einer Filamentierung des Phasenraums aufgrund nichtlinearer Effekte in b) ist die QMW Emittanz keine Erhaltungsgröße der Bewegung.

zu einer Filamentierung des projizierten Phasenraums, sodass wie in Abb. 2.3 b) zwar die Phasenraumfläche, A , nicht jedoch die Emittanz, $\varepsilon_{n,QMW}$, erhalten ist [Buo94]. Weil bei diesem Prozess die Entropie der Teilchenverteilung nicht zunimmt, ist diese Art von Emittanzwachstum theoretisch reversibel [OSh98]. Demgegenüber nimmt bei irreversiblen Prozessen, wie beispielsweise Coulombkollisionen, die Entropie der Teilchenverteilung zu, woraus ebenfalls eine Zunahme der Emittanz resultieren kann [OSh98].

2.3.2. Numerische Approximation mit Makroteilchen

Für die meisten Anwendungen übersteigt die reale Anzahl physikalischer Teilchen, N_p , eine numerisch praktikable Ensemblegröße, N , um ein Vielfaches. Typische Teilchenstrahlen in Beschleunigeranlagen bestehen aus $N_p \sim 10^{10}$ einzelnen Ladungsträgern [Kra12] und werden beispielsweise mit einer Ensemblegröße von $N \sim 10^6$ [CZD20] modelliert. Selbst in massiv parallelisierten Großsimulationen, wie z. B. im Millennium Simulation Projekt mit $N_p \sim 10^{20}$ und $N \sim 10^{10}$ [Spr05], unterscheiden sich die physikalische und numerische Ensemblegröße um mehrere Größenordnungen.

Wenn die numerische Ensemblegröße die Anzahl der physikalischen Teilchen unterschreitet, handelt es sich um eine Simulation mit sogenannten Makroteilchen. Ein einzelnes Makroteilchen repräsentiert dabei stellvertretend das kollektive Verhalten von N_p/N physikalischen Teilchen [HE88]. Da die Impulsänderung gemäß (2.2) ausschließlich von der spezifischen Ladung, q/m_0 ,

eines Teilchens abhängt, wird die Dynamik der Makroteilchen durch die selben Bewegungsgleichungen beschrieben. Die Phasenraumdichte des Teilchenstrahls wird durch die diskrete Verteilungsdichte der Makroteilchen ausreichend gut approximiert, wenn die Auswertung der statistischen Momente die selben strahldynamischen Größen ergibt wie bei der physikalischen Teilchenverteilung [HE88].

Weil ein einzelnes Makroteilchen die Dynamik mehrerer physikalischer Teilchen repräsentiert, können durch die Wechselwirkung der Makroteilchen keine direkten Kollisionen zwischen den Ladungsträgern modelliert werden. Stattdessen wird die unphysikalische Granularität der Makroteilchenapproximation kompensiert, indem die Wechselwirkungskräfte direkt benachbarter Makroteilchen modifiziert werden [Rei08]. Der Ansatz basiert somit auf der grundlegenden Annahme, dass die Phasenraumdynamik des modellierten Teilchenstrahls nicht maßgeblich durch Kollisionen beeinflusst wird. Die Debye Länge für einen relativistischen Teilchenstrahl [Rei08],

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \gamma^3 m_0 \langle v_x^2 \rangle}{q^2 n}}, \quad (2.28)$$

mit der transversalen Teilchengeschwindigkeit v_x und der räumlichen Teilchendichte n liefert ein Maß für den relativen Einfluss der Kollisionen auf die Strahldynamik. Definitionsgemäß entspricht λ_D der Länge, innerhalb derer Ladungsdichtefluktuationen durch die umliegenden Teilchen abgeschirmt werden.

Damit ein realer Teilchenstrahl als kollisionsfreies System modelliert werden kann, muss λ_D groß gegenüber dem mittleren Abstand zwischen den physikalischen Teilchen, $|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|$, sein [Rei08]. Für die Approximation des Teilchenstrahls mit einer Makroteilchenverteilung ergeben sich außerdem zwei weitere Voraussetzungen. Erstens muss die räumliche Ausdehnung der Makroteilchen vergleichbar mit λ_D sein, sodass die charakteristische Wechselwirkungslänge des Raumladungsfeldes aufgelöst wird [HE88]. Zweitens muss die Ensemblegröße, N , ausreichend groß sein, sodass sich statistische Fluktuationen und künstlich verursachte Kollisionseffekte der granularen Makroteilchenverteilung über eine Längenskala von λ_D ausgleichen [HE88].

Bei einer gitterbasierten Strahldynamiksimulation erfolgt die Modifikation der Wechselwirkungen zwischen direkt benachbarten Makroteilchen implizit durch die Interpolation der Ladungsdichteverteilung auf einem diskreten Rechengitter. Die räumliche Auflösung wird dabei durch die Größe der Gitterzellen vorgegeben. Für kollisionsfreie Simulationen mit den teilchenbasierten Methoden werden in Kapitel 3.3 unterschiedliche Makroteilchenmodelle diskutiert. In beiden Verfahren muss die Konsistenz der Simulationsergebnisse numerisch überprüft werden. Zu diesem

Zweck wird in einer Konvergenzstudie die reale Teilchenverteilung durch Erhöhung der Makroteilchenanzahl, $N \rightarrow N_p$, und Vergrößerung der räumlichen Auflösung für die Raumladungsfelder sukzessive angenähert. Das Simulationsergebnis gilt als valide, sobald die statistischen Momente des Ensembles konvergieren.

3. Teilchenbasierte Methoden zur Simulation von Raumladungseffekten

Im Allgemeinen wird die elektromagnetische Wechselwirkung eines Ensembles geladener Teilchen durch Superposition zeitlich retardierter LW Potentiale beschrieben. Für den besonders wichtigen Sonderfall, dass die zeitabhängigen Retardierungseffekte sowie die elektromagnetischen Strahlungsfelder vernachlässigbar sind, kann die Wechselwirkung innerhalb des Ensembles mittels hierarchischer Methoden numerisch effizient approximiert werden. In den Abschnitten 3.1 bis 3.5 wird die Approximation elektrostatischer Wechselwirkungskräfte mit der FMM diskutiert. Abschnitt 3.6 behandelt die numerische Modellierung elektromagnetischer Wechselwirkungskräfte mittels direkter Auswertung der zeitlich retardierten LW Potentiale.

3.1. Hierarchische Berechnung von Raumladungskräften

Die Berechnung des elektrostatischen Wechselwirkungspotentials, $\phi(\mathbf{x})$, eines Ensembles aus $j \in [1, N]$ Punktladungen, q_j , an den Positionen \mathbf{x}_j erfordert die Auswertung eines Ausdrucks der Form

$$\phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \varrho(\mathbf{x}') G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') d\mathbf{x}' = \sum_{j=1}^N \frac{q_j}{4\pi\epsilon_0} G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j). \quad (3.1)$$

Hierbei beschreibt die Greensche Funktion,

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}, \quad (3.2)$$

die paarweise Wechselwirkung zwischen Ladungen an den Orten \mathbf{x} und \mathbf{x}' eines dreidimensionalen Poisson-Problems mit offenen Randbedingungen [JWM11]. Weil die Wechselwirkung für alle Teilchenpaare, $(i, j \neq i)$, ausgewertet werden muss, skaliert der Rechenaufwand für die Raumladungswechselwirkungen innerhalb des Ensembles mit $\mathcal{O}(N^2)$.

Die grundlegende Idee einer hierarchischen Approximation besteht darin, die Auswertung von (3.1) durch Sortieren und Zusammenfassen von Termen zu vereinfachen. Dazu werden alle Wechselwirkungsterme, $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j)$, des Ensembles in eine Abfolge von Gruppen, G_h , mit dem Gruppenindex h eingeteilt. Die Gruppe G_0 entspricht der höchsten Hierarchieebene dieser Unterteilung

und repräsentiert alle Wechselwirkungsterme des gesamten Ensembles. Die untergeordneten Gruppen, $G_{h'}$, in einer nachfolgenden Hierarchieebene repräsentieren jeweils eine Teilmenge,

$$\dots \subset G_{h'} \subset G_h \subset \dots \subset G_0, \quad (3.3)$$

der übergeordneten Gruppe, G_h , in der nächsthöheren Hierarchieebene. Auf diese Weise ergibt sich eine hierarchische Sortierung, die das gesamte Ensemble in immer kleinere Teilmengen untergliedert. Wird beispielsweise jede Gruppe, G_h , in zwei untergeordnete Gruppen, $G_{h'}$, unterteilt, dann ergibt sich die hierarchische Gruppenstruktur

$$\begin{aligned} G_0 &= G_1 \cup G_2 = G_3 \cup G_4 \cup G_5 \cup \dots, \\ G_1 &= G_3 \cup G_4 = G_7 \cup G_8 \cup \dots, \\ G_2 &= G_5 \cup G_6 = G_{11} \cup \dots, \\ G_3 &= G_7 \cup G_8 = \dots \text{ usw.} \end{aligned}$$

Für die Auswertung des Wechselwirkungspotentials werden alle Terme bezüglich ihres Beitrags, $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j)$, sortiert und soweit wie möglich zu entsprechenden Gruppenwechselwirkungen zusammengefasst. Die effektive Gruppenwechselwirkung, $\phi_{G_h}(\mathbf{x}, \{\mathbf{x}_j \mid j \in G_h\})$, entspricht dem Beitrag aller durch die Punktladungsgruppe G_h repräsentierten Wechselwirkungsterme. Die Gleichung (3.1) reduziert sich somit auf

$$\phi(\mathbf{x}) = \sum_{h \in H} \phi_{G_h}(\mathbf{x}, \{\mathbf{x}_j \mid j \in G_h\}). \quad (3.4)$$

Der Summationsindex, h , läuft über die Menge der Gruppenindizes

$$H := \{\forall h \mid \cup G_h = G_0 \wedge \cap G_h = \emptyset\}, \quad (3.5)$$

sodass dass jeder Term, $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j)$, exakt einmal zum Wechselwirkungspotential, $\phi(\mathbf{x})$, beiträgt. Sowohl die Bildung der Gruppen, G_h , als auch die Menge der Gruppenindizes, H , sind in dieser Form vorerst nicht eindeutig definiert und müssen anhand der Approximation für die Gruppenwechselwirkungen, ϕ_{G_h} , genauer spezifiziert werden.

Um (3.4) numerisch effizient auswerten zu können, muss eine mathematische Formulierung der Gruppenwechselwirkungen gefunden werden, die nicht explizit von den Positionen der einzelnen Quellladungen, \mathbf{x}_j , abhängt. Dazu wird die Greensche Funktion, $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$, im Umfeld des durch die Quellladungen besetzten Raumgebiets mit den Lösungsfunktionen der Laplacegleichung im

Freiraum,

$$f_{l,m}(r, \vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} r^l Y_l^m(\vartheta, \varphi), \quad (3.6)$$

$$g_{l,m}(r, \vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} r^{-l-1} Y_l^m(\vartheta, \varphi), \quad (3.7)$$

den sphärischen Koordinaten r, ϑ, φ und den Kugelflächenfunktionen, $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$, dargestellt als [JWM11]

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \underbrace{\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l}_{r' < r} \bar{f}_{l,m}(r', \vartheta', \varphi') g_{l,m}(r, \vartheta, \varphi). \quad (3.8)$$

Die Funktion $\bar{f}_{l,m}$ entspricht der komplex konjugierten Lösungsfunktion $f_{l,m}$. In der bezüglich \mathbf{x} und \mathbf{x}' vollständig faktorisierten Darstellung können das Wechselwirkungspotential,

$$\phi_{G_h}(\mathbf{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l q_{l,m}^h g_{l,m}(r, \vartheta, \varphi), \quad (3.9)$$

und die entsprechenden Multipolmomente,

$$q_{l,m}^h = \sum_{j \in G_h} \frac{q_j}{4\pi\epsilon_0} \bar{f}_{l,m}(r_j, \vartheta_j, \varphi_j), \quad (3.10)$$

einer Gruppe von Wechselwirkungstermen, G_h , unabhängig von einander berechnet werden. Der numerische Aufwand zur Auswertung von (3.4) skaliert somit linear zur Anzahl der Summanden.

Wird das effektive Wechselwirkungspotential als Summe aller Terme bis zur maximalen Multipolordnung l_0 approximiert, dann beträgt die Abweichung von (3.9) im Definitionsbereich $r > r_h$ [Gre87]

$$\left| \phi_{G_h}(\mathbf{x}, \{\mathbf{x}_j \mid j \in G_h\}) - \sum_{l=0}^{l_0} \sum_{m=-l}^l q_{l,m}^h g_{l,m}(r, \vartheta, \varphi) \right| \leq \sum_{j \in G_h} \frac{q_j}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r - r_h} \left(\frac{r_h}{r}\right)^{l_0+1}. \quad (3.11)$$

Hierbei bezeichnet r_h die radiale Ausdehnung, $r_h = \max(r_j \mid j \in G_h)$, der Punktladungsgruppe bezüglich des Koordinatenursprungs der Multipolentwicklung. Abgesehen von der Multipolordnung ist das Verhältnis,

$$\theta_h(r) = \frac{r_h}{r}, \quad (3.12)$$

von r_h und der Entfernung, $r = |\mathbf{x}|$, zum Koordinatenursprung für die Güte der Approximation entscheidend. Zwecks einer hierarchischen Approximation des Wechselwirkungspotentials

wird beginnend bei G_0 mittels (3.11) überprüft, ob die Genauigkeit von ϕ_{G_h} die Beiträge der Punktladungsgruppe G_h ausreichend gut approximiert. Ist ϕ_{G_h} zu ungenau, wird die Überprüfung für alle untergeordneten Punktladungsgruppen, $\{\forall G_{h'} \mid G_{h'} \subset G_h\}$, wiederholt. Dieses Schema wird solange fortgesetzt, bis ein geeigneter Satz von Gruppenindizes, H , gefunden ist, der zur Auswertung von (3.4) verwendet werden kann.

Die numerische Effizienz der hierarchischen Approximation hängt maßgeblich von zwei Voraussetzungen ab. Zum einen profitiert die Berechnung der Wechselwirkungen innerhalb eines Ensembles nur dann, wenn für die Positionen $\{\mathbf{x}_i \mid i \in [1, N]\}$ die Anzahl der Terme in (3.4) signifikant kleiner ist als in (3.1). Außerdem zahlt sich die Berechnung der Approximation $\phi_{G_h}(\mathbf{x}, \{\mathbf{x}_j \mid j \in G_h\}) \approx \phi_{G_h}(\mathbf{x})$ erst aus, wenn $\phi_{G_h}(\mathbf{x})$ mehrfach an unterschiedlichen Positionen, \mathbf{x}_i , ausgewertet werden kann. Damit beide Voraussetzungen erfüllt sind, müssen bei der Unterteilung einer Punktladungsgruppe, G_h , in untergeordnete Gruppen, $G_{h'}$, alle Wechselwirkungsterme, $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j)$, bezüglich $\theta_h(r)$ sortiert werden. Algorithmisch entspricht diese Sortierung einer Baumstruktur, welche die räumliche Verteilungsdichte des Ensembles widerspiegelt.

3.1.1. Hierarchische Approximation basierend auf Baumstrukturen

Historisch gesehen sind die Algorithmen von Appel [App85] sowie Barnes und Hut [BH86] die ersten Anwendungen hierarchischer Approximationen zur Berechnung von Wechselwirkungskräften. Die Gruppierung der Wechselwirkungsterme erfolgt dabei durch eine Baumstruktur, welche die räumliche Verteilung der Punktladungen repräsentiert. Zur Konstruktion der Baumstruktur wird das Gebiet der Punktladungsverteilung entlang den d räumlichen Dimensionen in Teilgebiete untergliedert. Dieser Schritt wird für jedes Teilgebiet sukzessive fortgesetzt, bis keines der Teilgebiete mehr als eine Punktladung, $N_k = 1$, beinhaltet.

Abbildung 3.1 zeigt exemplarisch die Quadtree-Struktur einer mit grünen Punkten symbolisierten Ladungsverteilung in $d = 2$ Dimensionen. Der Wurzelknoten, $k = 0$, repräsentiert die Gruppe aller Punktladungen, G_0 . Untergeordnete Knoten, k' , der nächsthöheren Verfeinerungsebene repräsentieren jeweils Teilmengen, $G_{k'} \subset G_k$, ihres übergeordneten Knotens, k . Die Blattknoten der Baumstruktur repräsentieren den Beitrag von maximal einem Wechselwirkungsterm. Die räumliche Verteilung der Teilchen spiegelt sich in der lokalen Tiefe der Baumstruktur wieder. Teilgebiete mit höherer Teilchendichte erzeugen räumlich kleinere Blattknoten bei höheren Verfeinerungsebenen. Für eine hinreichend homogene Teilchenverteilung ist die Anzahl der Blattknoten

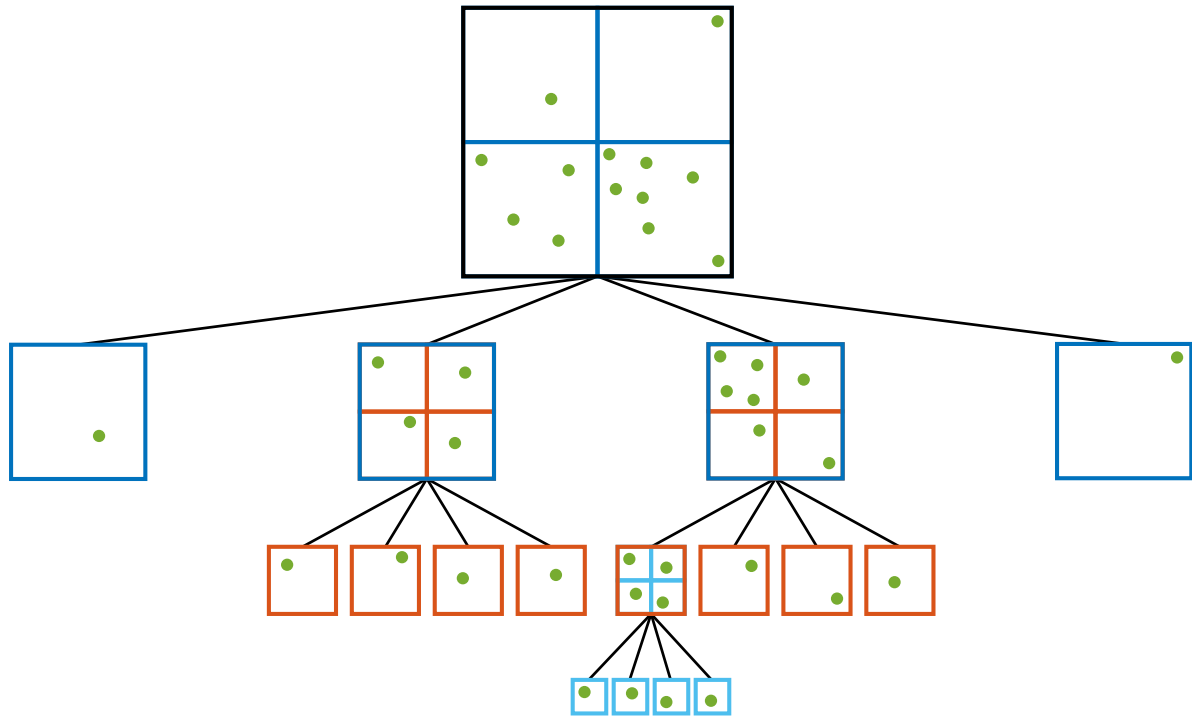


Abbildung 3.1.: Baumstruktur einer zweidimensionalen Punktladungsverteilung. Die Punktladungsgruppen, G_k , der Blattknoten, k , enthalten maximal $N_k = 1$ Teilchen.

N/N_k und dementsprechend ergeben sich

$$n_E \approx \log_{2^d} \left(\frac{N}{N_k} \right) \quad (3.13)$$

Verfeinerungsebenen in der resultierenden Baumstruktur. Algorithmisch entspricht die Baumstruktur einer Sortierung der N Punktladungen bezüglich ihrer Position, x_j , im d -dimensionalen Raum. Die Erstellung der Baumstruktur skaliert wie $\mathcal{O}(N \log N)$ [BH86]. Da hierbei hauptsächlich numerisch günstige Vergleichsoperationen angewendet werden, ist der Rechenaufwand für die Erstellung der Baumstruktur im Vergleich zur Auswertung des Wechselwirkungspotentials geringer.

Zur Auswertung des Wechselwirkungsfelds wird beim Algorithmus von Barnes und Hut [BH86] zuerst die Knotenladung, q_k , sowie der Ladungsschwerpunkt, x_k , der Punktladungsgruppe, G_k , jedes Blattknotens, k , berechnet. Für übergeordnete Knoten können q_k und x_k durch Linearkombination aus den Werten der jeweils untergeordneten Knoten bestimmt werden. Insgesamt skaliert die Auswertung von q_k und x_k für alle Knoten des Baumes wie $\mathcal{O}(N \log N)$ [BH86]. Im nächsten Schritt werden die Wechselwirkungen für jede Stützstelle, x_i mit $i \in G_0$, separat durch rekursive Traversierung der Baumstruktur berechnet. Dazu wird beginnend bei der Wurzel des Baumes,

$k = 0$, das Verhältnis, $\theta_k (|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_k|)$, zwischen der radialen Ausdehnung des Knotens, r_k , und der Entfernung seines Ladungsschwerpunkts, \mathbf{x}_k , zur Stützstelle, \mathbf{x}_i , bestimmt. Ist das Verhältnis kleiner als der zuvor definierte numerische Parameter,

$$\theta_k (|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_k|) \leq \theta_0, \quad (3.14)$$

dann werden alle Beiträge der Punktladungsgruppe, G_k , in Form einer effektiven Wechselwirkung mit der am Ladungsschwerpunkt lokalisierten Knotenladung approximiert. Ist das Kriterium (3.14) hingegen nicht erfüllt, wird die Überprüfung mit allen untergeordneten Knoten in der nächsthöheren Verfeinerungsebene der Baumstruktur wiederholt. Dieses Schema wird solange fortgesetzt, bis entweder alle Wechselwirkungsterme approximiert worden sind oder schlussendlich ein Blattknoten erreicht wird. Im letzteren Fall wird der Wechselwirkungsterm $G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ für die Punktladung, j , des Blattknotens explizit ausgewertet.

Die Anwendung der hierarchischen Methode von Barnes und Hut reduziert den numerischen Aufwand zur Auswertung der Wechselwirkungen von $\mathcal{O}(N^2)$ auf $\mathcal{O}(N \log N)$ [BH86]. Dabei kann über den numerischen Parameter θ_0 der diametrale Zusammenhang zwischen Rechenaufwand und Genauigkeit der Approximation kontrolliert werden. Für $\theta_0 \rightarrow 0$ ist die Methode identisch mit der direkten Auswertung des Wechselwirkungspotentials gemäß (3.1). Die Approximation des Wechselwirkungsfelds der Punktladungsgruppe, G_k , eines Knotens entspricht einem bezüglich des Ladungsschwerpunkts definierten Monopolterm, $q_{0,0}^k \propto q_k$. Außerdem sind die Dipolmomente bezüglich des Ladungsschwerpunkts per Definition identisch $q_{1,m}^k = 0$. Im Formalismus von (3.11) entspricht damit die Güte der Approximation einer Dipolnäherung mit $l_0 = 1$.

3.1.2. Berechnung mittels der schnellen Multipolmethode

Die FMM von Greengard und Rokhlin ist eine Weiterentwicklung des Algorithmus von Barnes und Hut, welche den Rechenaufwand für die Auswertung des Wechselwirkungspotentials auf $\mathcal{O}(N)$ reduziert [GR87]. Dazu nutzt die FMM ebenfalls die Knoten einer Baumstruktur, um die Menge der Punktladungen in hierarchischen Gruppen, G_k , zu organisieren. Die grundlegenden Neuerungen der FMM sind eine verallgemeinerte Darstellung der Fernfeldapproximation als sphärische Multipolentwicklung beliebiger Ordnung, l_0 , sowie die Anwendung von Translationsoperatoren, um Multipolmomente zwischen den Knoten der Baumstruktur zu kommunizieren. Diese Erweiterungen ermöglichen Wechselwirkungen bereits auf der Knotenebene zu approximieren, was schlussendlich zu der Effizienzsteigerung führt [PG96].

Der mathematische Formalismus der FMM basiert auf den Lösungsfunktionen (3.6) und (3.7)

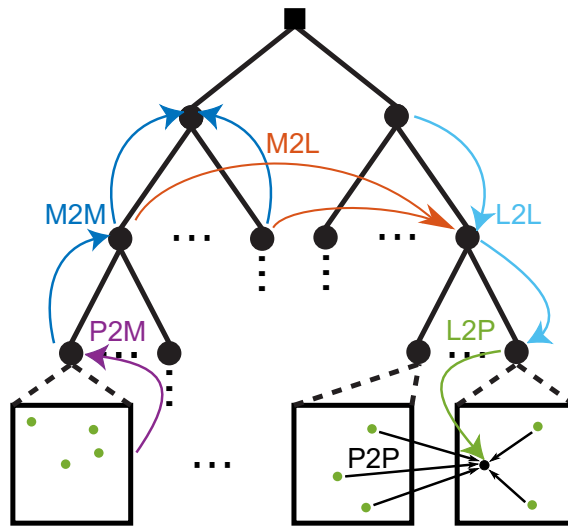


Abbildung 3.2.: Informationsfluss bei der Raumladungsfeldapproximation eines Ensembles von Ladungen (grüne Punkte) mittels der FMM. Fernfeldwechselwirkungen werden durch die Multipolmomente (P2M) der Quellladungen approximiert und mittels Translations- (M2M und L2L) und Kommunikationsoperationen (M2L) innerhalb der gesamten Baumstruktur ausgetauscht. Die Raumladungsfeldapproximation an einer Position (schwarzer Punkt) besteht aus dem Nahfeld umliegender Ladungen (P2P) sowie der lokalen Multipoldarstellung des Fernfelds (L2P).

der Laplacegleichung im Freiraum. Diese Lösungsfunktionen bilden eine vollständige Basis, in welcher das Raumladungspotential einer lokalisierten, räumlich distanzierten Ladungsdichte durch Entwicklung nach Multipolmomenten dargestellt werden kann [JWM11]. Durch Basisfunktionen mit angepasster Normierung [KP06; Ell95],

$$F_{l,m}(r, \vartheta, \varphi) := (-1)^{l-m} \frac{1}{(l+m)!} r^l P_l^m(\cos \vartheta) \exp(im\varphi), \quad (3.15)$$

$$G_{l,m}(r, \vartheta, \varphi) := (-1)^{l-m} (l-m)! r^{-l-1} P_l^m(\cos \vartheta) \exp(im\varphi), \quad (3.16)$$

kann eine kompakte, numerisch effiziente Implementierung der FMM [WL96] erreicht werden. Zur Approximation der Wechselwirkungen mittels der FMM wird analog zum Algorithmus von Barnes und Hut das Ensemble aus Punktladungen mittels einer Baumstruktur in hierarchische Gruppen, G_k , unterteilt. Anschließend werden in fünf aufeinander folgenden Berechnungsphasen die Fernfeldwechselwirkungen des Ensembles approximiert und die Nahfeldwechselwirkungen zwischen benachbarten Knoten ausgewertet. Abbildung 3.2 visualisiert schematisch den damit verbundenen Informationsaustausch innerhalb der Baumstruktur.

In der ersten Phase (P2M) werden für jeden Blattknoten, k , die Multipolmomente [KP06;

Ell95],

$$M_{l,m}^k = \sum_{j \in G_k} \frac{q_j}{4\pi\epsilon_0} F_{l,m}(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j), \quad (3.17)$$

der entsprechenden Punktladungsgruppe, G_k , bezüglich des Knotenursprungs, \mathbf{x}_k , bestimmt. Das Multipolfeld von k konvergiert im Außenbereich des Blattknotens, $|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k| > r_k$, mit einer maximalen Abweichung gemäß (3.11) gegen das Punktladungspotential von G_k .

In der zweiten Phase (M2M) erfolgt die Berechnung der Multipolmomente aller in der Baumhierarchie übergeordneter Knoten bis hin zum Wurzelknoten, $k = 0$. Dabei werden sukzessive die Multipolmomente [KP06; Ell95],

$$M_{l,m}^k = \sum_{G_{k'} \subset G_k} \sum_{l'=0}^{l_0} \sum_{m'=-l'}^{l'} M_{l',m'}^{k'} \bar{F}_{l-l',m-m'}(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k'}), \quad (3.18)$$

der übergeordneten Knoten, k , basierend auf den Multipolmomenten, $M_{l,m}^{k'}$, der jeweils direkt untergeordneten Knoten, k' , approximiert. Gleichung (3.18) transformiert die bezüglich $\mathbf{x}_{k'}$ definierten Multipolmomente, $M_{l',m'}^{k'}$, zuerst in das Koordinatensystem von k , um sie anschließend dort addieren zu können. Abbildung 3.3 veranschaulicht den Berechnungsschritt anhand eines beliebig ausgewählten Knotens, k der Baumstruktur. Die Multipolentwicklung der durch k repräsentierten Wechselwirkungsterme, G_k , konvergiert im Außenbereich, $|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k| > r_k$, exponentiell bezüglich der maximalen Multipolordnung, l_0 , gegen die Superposition der Multipolfelder aller untergeordneten Knoten, k' [Gre87].

In der dritten Phase (M2L und P2P) findet die eigentliche Auswertung der Wechselwirkungen zwischen den Knoten statt. Hierbei muss gewährleistet sein, dass jede Wechselwirkung genau einmal, entweder als Teil des Fernfelds (M2L) oder durch direkte Berechnung (P2P), in die Auswertung des Wechselwirkungspotentials einfließt. Um dies sicherzustellen, wird die Baumstruktur beim Wurzelknoten, $k = k' = 0$, beginnend rekursiv traversiert. Dabei wird zuerst überprüft ob das Knotenpaar (k, k') das Admissibilitätskriterium der Fernfeldapproximation,

$$\theta_{k,k'} = \frac{r_k + r_{k'}}{|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k'}|} \leq \theta_0, \quad (3.19)$$

mit den radialen Knotengrößen r_k , $r_{k'}$ und dem Abstand zwischen den Knotenmittelpunkten $|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k'}|$ erfüllt. Abbildung 3.4 visualisiert dazu exemplarisch die Unterteilung der den Quellknoten, k' , umgebenden Zielknoten, k , für das Admissibilitätskriterium $\theta_{k,k'} \leq 0.75^1$.

¹Zwecks numerischer Effizienz kann der Knotenradius, r_k , durch die längste Kantenlänge, Δ_k , ersetzt werden. Dieses Admissibilitätskriterium ist restriktiver und entspricht für einen kubischen Knoten dann $1.15 \theta_{k,k'} < \theta_0$.

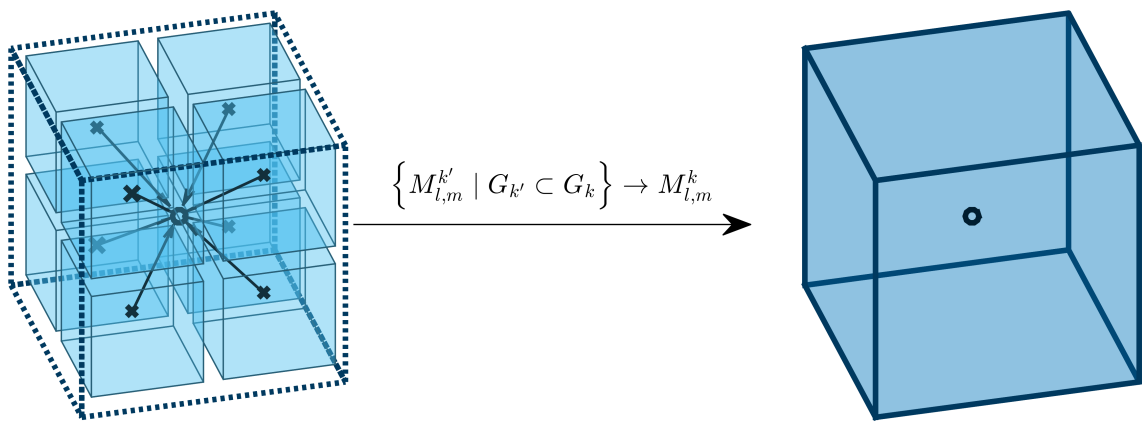


Abbildung 3.3.: Die Multipolmomente, $M_{l,m}^{k'}$, der dem Knoten k untergeordneten Knoten, k' , werden zuerst in das Koordinatensystem von k transformiert und anschließend addiert. Die resultierenden Multipolmomente, $M_{l,m}^k$, entsprechen der Fernfeldapproximation aller durch k repräsentierten Wechselwirkungsterme, G_k .

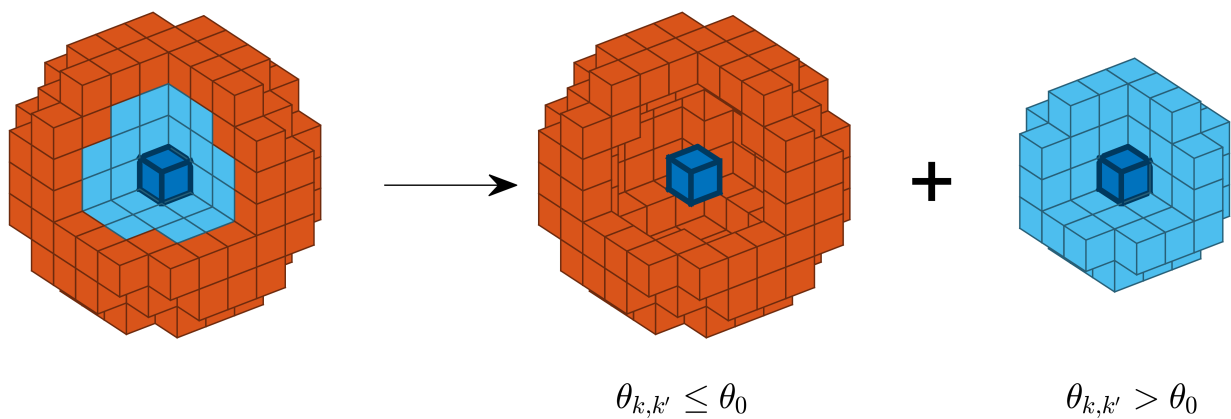


Abbildung 3.4.: Die den Quellknoten, k' , umgebenden Zielknoten, k , werden anhand des (modifizierten) Admissibilitätsparameters, $\theta_0 = 0.75$, in zwei Gruppen unterteilt. Für alle Knotenwechselwirkungen mit $\theta_{k,k'} \leq \theta_0$ ist das Admissibilitätskriterium der Fernfeldapproximation erfüllt. Für die übrigen Knotenwechselwirkungen mit $\theta_{k,k'} > \theta_0$ wird die Überprüfung des Admissibilitätskriteriums auf der folgenden Verfeinerungsebene der Baumstruktur wiederholt.

Im Gültigkeitsbereich der Fernfeldapproximation, $\theta_{k,k'} \leq \theta_0$, werden die Multipolmomente, $M_{l',m'}^{k'}$, des Quellknotens, k' , in den lokalen Momenten [KP06; Ell95],

$$L_{l,m}^k \rightarrow L_{l,m}^k + \sum_{l'=0}^{l_0} \sum_{m'=-l'}^{l'} (-1)^{m'} M_{l',m'}^{k'} \bar{G}_{l+l',m+m'}(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k'}), \quad (3.20)$$

des Zielknotens, k , akkumuliert (M2L) und die rekursive Traversierung endet. Die lokalen Momente, $L_{l,m}^k$, sind bezüglich des Knotenursprungs, \mathbf{x}_k , definiert und entsprechend den Koeffizienten einer Entwicklung der Fernfeldwechselwirkung, welche im Innenbereich des Knotens, $|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k| < r_k$, gültig ist. Der Admissibilitätsparameter, $\theta_0 < 1$, forciert hierbei die räumliche Trennung der durch Quell- und Zielknoten repräsentierten Teilgebiete und stellt somit die Konvergenz der lokalen Fernfeldapproximation in k sicher [Gre87].

Erfüllt das Knotenpaar, (k, k') , das Admissibilitätskriterium nicht, dann wird die Traversierung mit allen Kombinationen der jeweils untergeordneten Knotenpaaren, (κ, κ') mit $G_\kappa \subset G_k$ und $G_{\kappa'} \subset G_{k'}$, solange rekursiv fortgesetzt, bis entweder $\theta_{\kappa,\kappa'} \leq \theta_0$ erfüllt ist oder sowohl κ als auch κ' Blattknoten sind. Tritt letzterer Fall ein, wird das Wechselwirkungspotential der Punktladungen, $j \in G_{\kappa'}$, des Quellknotens, κ' , an den Positionen, \mathbf{x}_i , der Punktladungen, $i \in G_\kappa$, des Zielknotens, κ , gemäß

$$\phi_{\text{P2P}}(\mathbf{x}_i) \rightarrow \phi_{\text{P2P}}(\mathbf{x}_i) + \sum_{j \in G_{\kappa'}} \frac{q_j}{4\pi\epsilon_0} G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \quad (3.21)$$

direkt ausgewertet und akkumuliert (P2P).

In Phase vier (L2L) erfolgt nach Abb. 3.5 der Informationsaustausch von der Wurzel der Baumstruktur, $k = 0$, ausgehend hin zu den Blattknoten. Dazu werden die lokalen Momente, $L_{l,m}^{k'}$, übergeordneter Knoten, k' , nach Knotenebenen getrennt in das Bezugssystem der jeweils untergeordneten Knoten, k , transformiert und zu den bereits vorhandenen lokalen Momenten, $L_{l,m}^k$, aus Phase drei gemäß [KP06; Ell95]

$$L_{l,m}^k \rightarrow L_{l,m}^k + \sum_{l'=0}^{l_0} \sum_{m'=-l'}^{l'} L_{l',m'}^{k'} F_{l'-l,m'-m}(\mathbf{x}_{k'} - \mathbf{x}_k) \quad (3.22)$$

aufaddiert. Die so berechneten lokalen Momente, $L_{l,m}^k$, repräsentieren das Gesamtpotential der Fernfeldwechselwirkung aller umliegender Knoten, welche das Admissibilitätskriterium erfüllen und der selben oder einer dem Knoten, k , übergeordneten Hierarchieebene der Baumstruktur angehören.

In der fünften und somit letzten Phase (L2P) wird für jeden Blattknoten, k , separat die

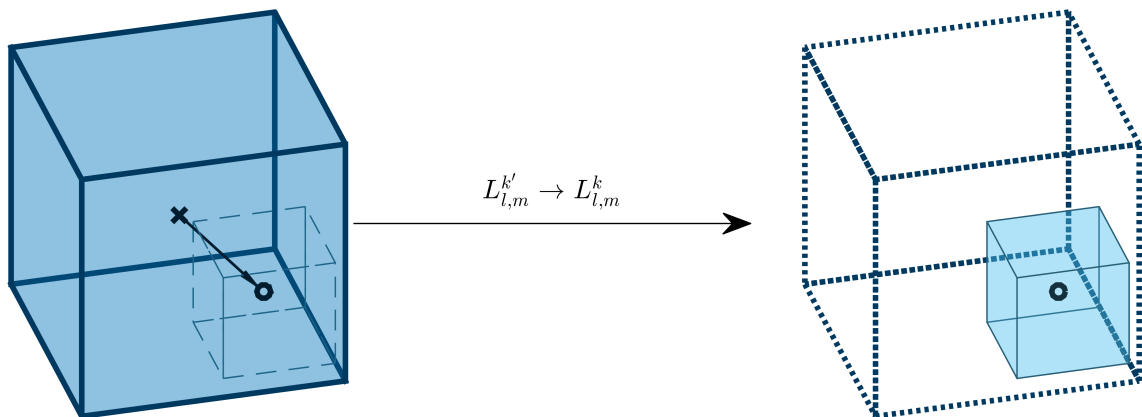


Abbildung 3.5.: Die lokalen Multipolmomente, $L_{l,m}^{k'}$, des dem Knoten k übergeordneten Knotens, k' , werden zuerst in das Koordinatensystem von k transformiert und anschließend zu den lokalen Multipolmomenten, $L_{l,m}^k$, von k hinzu addiert. Die resultierenden lokalen Multipolmomente, $L_{l,m}^k$, entsprechend der Fernfeldapproximation aller Knotenwechselwirkungen, für welche entweder der Knoten, k , selbst oder der übergeordnete Knoten, k' , als Zielknoten fungiert.

Fernfeldapproximation [KP06; Ell95],

$$\phi_{\text{L2P}}(\mathbf{x}_i) = \sum_{l=0}^{l_0} \sum_{m=-l}^l L_{l,m}^k F_{l,m}(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_i), \quad (3.23)$$

des Wechselwirkungspotentials an den Positionen, \mathbf{x}_i , der Punktladungen, $i \in G_k$, ausgewertet und anschließend zum in Phase drei berechneten Nahfeldpotential, $\phi_{\text{P2P}}(\mathbf{x}_i)$, hinzu addiert.

Soll der Einfluss der Raumladungswechselwirkung auf die Dynamik der Punktladungen untersucht werden, dann müssen die elektrostatischen Felder anstatt des Wechselwirkungspotentials berechnet werden. Für die elektrische Feldstärke des Nahfeldpotentials der Punktladungsgruppe G_k folgt direkt aus dem Gradienten der Greenschen Funktion

$$\mathbf{E}_{\text{P2P}}(\mathbf{x}) = -\vec{\nabla} \phi_{\text{P2P}}(\mathbf{x}) = \sum_{j \in G_k} \frac{q_j}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j|^3}. \quad (3.24)$$

Die elektrische Feldstärke der Fernfeldwechselwirkungen wird als Gradient der lokalen Entwicklung des Fernfeldpotentials [KP06; Ran99],

$$\mathbf{E}_{\text{L2P}}(\mathbf{x}) = -\vec{\nabla} \phi_{\text{L2P}}(\mathbf{x}) = - \sum_{l=1}^{l_0} \sum_{m=-l}^l L_{l,m}^k \mathbf{F}_{l,m}(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j), \quad (3.25)$$

berechnet. Für den Gradienten der Basisfunktionen, $\mathbf{F}_{l,m}(\mathbf{x}) = \vec{\nabla} F_{l,m}(\mathbf{x})$, folgt aus dem Zusammenhang der assoziierten Legendrepolynome [AS84],

$$\frac{\partial}{\partial \vartheta} P_l^m[\cos(\vartheta)] = (l - m + 1) \frac{P_{l+1}^m[\cos \vartheta]}{\sin \vartheta} - (l + 1) \cos \vartheta \frac{P_l^m(\cos \vartheta)}{\sin \vartheta}, \quad (3.26)$$

die kompakte Darstellung

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{l,m}(r, \vartheta, \varphi) = & \frac{l}{r} F_{l,m}(r, \vartheta, \varphi) \mathbf{e}_r \\ & + \frac{1}{r \sin \vartheta} \left[\frac{m^2 - (l + 1)^2}{r} F_{l+1,m}(r, \vartheta, \varphi) - (l + 1) \cos \vartheta F_{l,m}(r, \vartheta, \varphi) \right] \mathbf{e}_\vartheta \\ & + \frac{im}{r \sin \vartheta} F_{l,m}(r, \vartheta, \varphi) \mathbf{e}_\varphi. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Obwohl die lokale Entwicklung innerhalb eines Blattknotens eine wohldefinierte und endliche Approximation des Wechselwirkungspotentials liefert, entstehen bei der Auswertung von (3.27) durch die Lamé Koeffizienten, r^{-1} und $(r \sin \vartheta)^{-1}$, des Gradientenoperators in sphärischen Koordinaten zwei hebbare Definitionslücken für $r = 0$ bzw. $\vartheta = 0$. Bei der Auswertung des Raumladungsfelds muss dementsprechend eine Fallunterscheidung für $r \rightarrow 0$ und $\vartheta \rightarrow 0$ vorgenommen werden [KP06]. Diese Fallunterscheidung lässt sich jedoch geschickt umgehen, wenn die Lamé Koeffizienten bereits direkt bei der rekursiven Auswertung mit den Basisfunktionen, $F_{l,m} \propto r^l \sin \vartheta$, für $l > 0$ verrechnet werden.

Mit den angegebenen Formeln für die Definition (P2M), Translation (M2M und L2L), Konversion (M2L) und Auswertung (L2P) der Multipolfelder ist der mathematische Formalismus zur hierarchischen Approximation der Fernfeldwechselwirkungen vollständig. Die Abweichung der Multipoldarstellungen aller fünf Berechnungsphasen der FMM [Gre87] konvergiert bezüglich der maximalen Multipolordnung, l_0 , und des Admissibilitätsparameters, $\theta_0 < 1$, wie

$$\sigma_\phi \propto \theta_0^{l_0}. \quad (3.28)$$

Für den Spezialfall einer homogenen Punktladungsdichte, bei dem alle Wechselwirkungen abgesehen von direkt benachbarten Knoten durch Multipolentwicklungen approximiert werden

($\theta_0 \rightarrow 1$), beträgt die polynomiale Abhängigkeit des Rechenaufwands der FMM [SL91]

$$P(N, l_0) = (l_0 + 1)^2 \left[\underbrace{c_1 N}_{\text{P2M}} + (l_0 + 1)^2 \left(\underbrace{c_2 \frac{N}{N_k}}_{\text{M2M}} + \underbrace{c_3 189 \frac{N}{N_k}}_{\text{M2L}} + \underbrace{c_4 \frac{N}{N_k}}_{\text{L2L}} \right) + \underbrace{c_5 N}_{\text{L2P}} \right] + \underbrace{c_6 27 N N_k}_{\text{P2P}} \quad (3.29)$$

mit den konstanten Gewichtungsfaktoren c_i . Gleichung (3.29) zeigt, dass die Approximation des Wechselwirkungspotentials mittels der FMM für $N_k \ll N$ insgesamt linear mit der Ensemblegröße $\mathcal{O}(N)$ skaliert. Die Berechnung der Multipolmomente (P2M) und die Auswertung der Multipolfelder (L2P) skalieren quadratisch mit der maximalen Multipolordnung, l_0 . Die Translation (M2M, L2L) und Kommunikation (M2L) der Multipolmomente tragen mit $\mathcal{O}(l_0^4)$ zum Gesamtaufwand bei. Weil jeder Knoten mindestens die Multipolmomente von 189 umliegenden Knoten empfängt, dominiert der Rechenaufwand für die Kommunikation gegenüber den beiden Translationsphasen. Insbesondere für Multipolfelder höherer Ordnungen, $l_0 \geq 6$, existiert eine Vielzahl von Weiterentwicklungen der FMM [KP06], welche z. B. durch Ausnutzung von Symmetrieeigenschaften [WL96], FFT-Zerlegung der Faltung in (3.20) [GR88; EB96; Kur08] oder mittels exponentieller Basisfunktionen [CGR99] die numerische Effizienz der Kommunikationsphase (M2L) um Faktor ~ 2 verbessern. Der Beitrag direkt berechneter Wechselwirkungen (P2P) skaliert wie $\mathcal{O}(N N_k)$. Damit die $\mathcal{O}(N)$ Abhängigkeit der FMM erhalten bleibt, muss durch die lokale Auflösung der Baumstruktur eine maximale Anzahl von N_k Punktladungen pro Blattknoten sicherstellt werden. Entsprechend ist, im direkten Gegensatz zu gitterbasierten Methoden, bei der konventionellen FMM eine detaillierte Auflösung der lokalen Punktladungsdichte Voraussetzung, um eine effiziente Auswertung des Wechselwirkungspotentials zu erreichen.

3.2. Implementierung der schnellen Multipolmethode

Die Berechnung der Wechselwirkungskräfte mittels der FMM wird als eigenständige C/C++ Programmibliothek implementiert. Dies bietet den Vorteil, dass der FMM Algorithmus unabhängig vom Programm für die Strahldynamiksimulation weiterentwickelt und auch für andere Anwendungszwecke eingesetzt werden kann. Die Implementierung orientiert sich an der ExaFMM Programmibliothek [Yok13]. Um den Speicherbedarf und die Datenkommunikation möglichst gering zu halten, erfolgt die Anbindung der Datenstrukturen über Adresszeiger. Bei dieser Methode ist zu beachten, dass sich alle Restrukturierungen innerhalb der Programmibliothek direkt auf die angebundenen Datensätze übertragen.

Die Erstellung der Baumstruktur erfolgt durch Sortierung der Makroteilchen bezüglich ihrer Positionierung im dreidimensionalen Raum. Alle einem Knoten zugeordneten Makroteilchen belegen dabei einen zusammenhängenden Speicherbereich. Die Untergliederung in weitere Knoten erfolgt durch Umsortierung der Makroteilchen im Speicherbereich des übergeordneten Knotens. Jeder Datensatz eines Knotens beinhaltet jeweils die Adressierung des Speicherbereichs der zugehörigen Makroteilchen sowie die Zuordnung des übergeordneten Knotens und aller untergeordneten Knoten. Ein Vorteil dieser Methode besteht darin, dass die Anordnung der Makroteilchendaten im Speicher der Zugriffsreihenfolge der FMM Rechenoperationen entspricht. Dadurch können Cache Optimierungen der Speicherzugriffszeiten optimal ausgenutzt werden. Außerdem wird ein signifikanter Anteil des Informationsgehalts der Baumstruktur durch die Anordnung der Makroteilchen im Speicher repräsentiert, weshalb der zusätzliche Speicherbedarf für die Repräsentation der Baumstruktur vergleichsweise gering ist.

Die hier entwickelte Implementierung nutzt zur Auswertung der rechenintensiven Multipoloperationen des FMM Algorithmus von (3.17) bis (3.25) OpenMP basiertes Multithreading. Dabei werden die FMM Basisfunktionen (3.15) und (3.16) anhand der numerisch stabilen Rekursionsrelationen für Legendre Polynome [Pre92] bestimmt. Die Multipolmomente, $M_{l,m}$, und die lokalen Momente, $L_{l,m}$, werden in Form von komplexwertigen Größen verarbeitet. Aus der Forderung eines reellwertigen Wechselwirkungspotentials einer physikalischen Ladungsdichteverteilung folgen die Bedingungen [KP06]

$$M_{l,-m} = (-1)^m \bar{M}_{l,m}, \quad (3.30)$$

$$L_{l,-m} = (-1)^m \bar{L}_{l,m}. \quad (3.31)$$

Aus diesem Grund genügt es, ausschließlich die Momente für $m \leq 0$ (bzw. $m \geq 0$) auszuwerten. Die Bestimmung der Multipolmomente gemäß (3.17) sowie die Auswertung der Fernfeldwech-

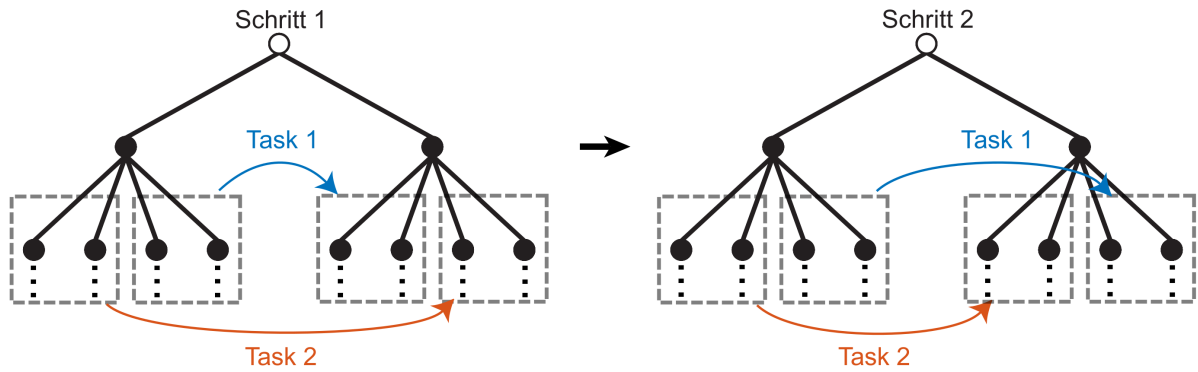


Abbildung 3.6.: Parallelisierte Kommunikation der Wechselwirkungen zwischen Knoten. Durch das zweischrittige Verfahren werden konkurrierende Lese- und Schreibzugriffe bei der parallelen Ausführung von Task 1 und Task 2 vermieden.

selwirkungen über die lokalen Momente gemäß (3.23) und (3.25) stellen knotenspezifische Rechenoperationen dar. Dies erlaubt eine parallele Berechnung für alle Blattknoten, k . Die Translationsoperationen der Multipolmomente, $M_{l,m}^k$, nach (3.18) und der lokalen Momente, $L_{l,m}^k$, nach (3.18) erzeugen Datenabhängigkeiten zwischen direkt aufeinander folgenden Verfeinerungsebenen der Baumstruktur. Für eine parallele Auswertung müssen die Knoten, k , deshalb nach Verfeinerungsebenen getrennt abgearbeitet werden. In der Implementierung der FMM ist die Auswertung der vier zuvor genannten Berechnungsschritte in Form von parallelisierten Schleifeniterationen realisiert.

Die Kommunikation der Wechselwirkungen zwischen den Knoten nach (3.20) bzw. (3.21) und (3.24) nutzt die Methode der dualen Traversierung einer Baumstruktur [Deh02; Yok13; WS95]. Dabei werden in jedem Zielknoten die Beiträge verschiedener Quellknoten akkumuliert. Bei einer parallelisierten Ausführung der dualen Traversierung müssen dementsprechend konkurrierende Schreibzugriffe unterschiedlicher Threads auf den selben Zielknoten unterbunden werden. Abbildung 3.6 visualisiert die im Rahmen dieser Arbeit genutzte algorithmische Umsetzung mittels OpenMP basierter Taskparallelisierung nach dem Vorbild von ExaFMM [Yok13]. Dazu wird für jeden Knoten, k , die Menge der untergeordneten Knoten, $\{\forall \kappa \mid G_\kappa \subset G_k\}$, in zwei Teilmengen, D_1^k und D_2^k , unterteilt. Die Auswertung der Wechselwirkungen zwischen den untergeordneten Knoten von k und k' erfolgt in zwei Schritten. Im ersten Schritt werden parallel die Wechselwirkungen von $D_1^{k'}$ auf D_1^k und von $D_2^{k'}$ auf D_2^k ausgewertet. Im zweiten Schritt erfolgt die parallele Auswertung der Wechselwirkungen von $D_1^{k'}$ auf D_2^k und von $D_2^{k'}$ auf D_1^k . Mit diesem Schema ist sichergestellt, dass keine konkurrierenden Schreibzugriffe auftreten.

Im Hinblick auf die Simulation der Teilchenstrahldynamik unter dem Einfluss von Raumladungswchselwirkung ist die numerische Effizienz der FMM Implementierung für Makroteilchen-

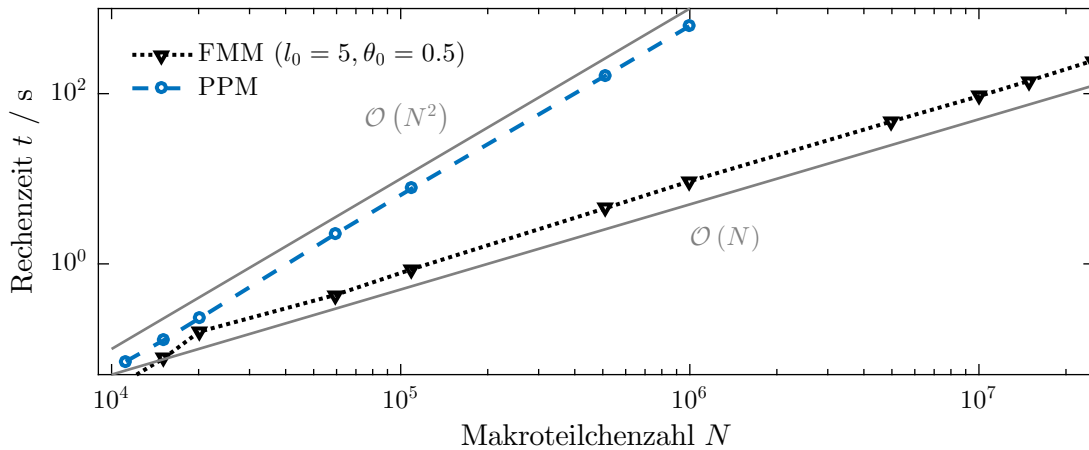


Abbildung 3.7.: Vergleich der Rechenzeit zwischen direkter PPM und hierarchischer FMM Approximation des Raumladungsfeldes einer gaußschen Ladungsdichteverteilung von N Makroteilchen. Die Rechenzeit der FMM skaliert linear mit der Makroteilchenzahl. Für anwendungsrelevante Makroteilchenzahlen, $N \sim 10^6$, ist die FMM gegenüber der PPM um mindestens zwei bis drei Größenordnungen schneller.

verteilungen mit großer Ensemblegröße ausschlaggebend. Abbildung 3.7 vergleicht dazu die Rechenzeiten zwischen der direkten PPM und der FMM Approximation für die Raumladungswchselwirkungen innerhalb einer gaußschen Ladungsdichteverteilung. Die PPM skaliert quadratisch mit der Makroteilchenzahl N . Demgegenüber skaliert die hierarchische FMM Approximation für $N > 5 \cdot 10^4$ linear mit der Makroteilchenzahl. Für kleinere Ensemblegrößen ist die Anzahl der Makroteilchen pro Blattknoten mit $N_k = 75$ nicht mehr vernachlässigbar klein gegenüber N . Die polynomiale Abhängigkeit gemäß (3.29) wird dann durch die quadratisch skalierende Auswertung der direkten Blattknotenwechselwirkungen (P2P-Term) dominiert. Zudem macht sich für kleine N der zusätzliche Rechenaufwand zur Berechnung der Baumstruktur und der entsprechenden Multipoldarstellungen in Form einer gegenüber der PPM erhöhten Steigung im Graphen bemerkbar. Im Hinblick auf für Strahldynamiksimulationen anwendungsrelevante Ensemblegrößen, $N > 10^6$, ist die FMM Implementierung gegenüber der PPM Auswertung mindestens zwei bis drei Größenordnungen schneller.

Abbildung 3.8 zeigt eine kombinierte Konvergenz- und Effizienzanalyse der FMM Implementierung für die Berechnung des dreidimensionalen Raumladungsfeldes einer gaußverteilten Punktladungsdichte. Gemäß (3.11) konvergiert die Abweichung der FMM Approximation exponentiell mit der maximalen Multipolordnung, l_0 , und polynomial mit dem Admissibilitätsparameter, θ_0 . Für $\theta_0 \rightarrow 0$ erfolgt der Übergang von der hierarchischen FMM hin zur PPM Berechnung der Raumladungswchselwirkungsfelder. Für moderate Werte, $0 < l_0 < 20$, dominiert, mit Ausnahme der Randbereiche bei $\theta_0 \gtrsim 0.75$ bzw. $\theta_0 \lesssim 0.1$, der Abschneidefehler der Multipolordnung die Abweichung des Raumladungsfeldes. Demgegenüber hängt die numerische Effizienz der

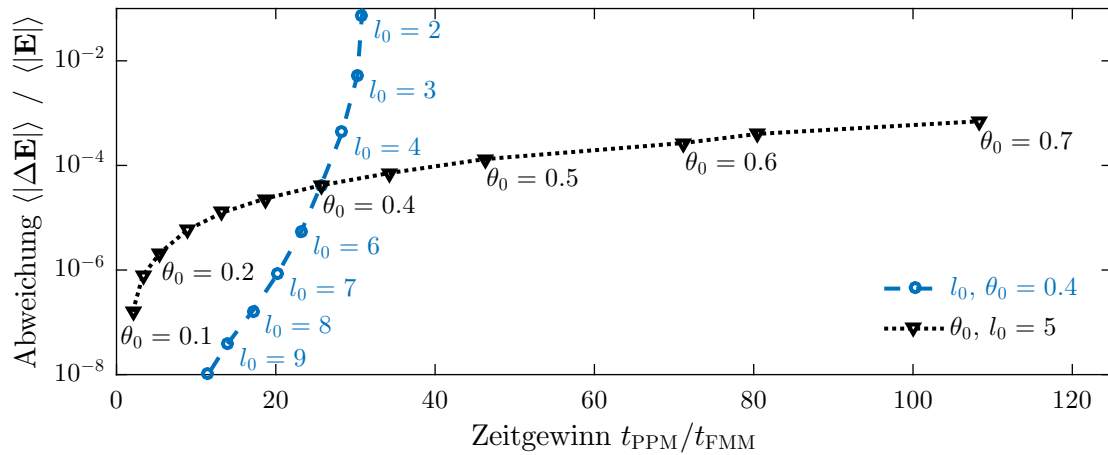


Abbildung 3.8.: Genauigkeit in Abhängigkeit der numerischen Effizienz für die FMM Approximation, \mathbf{E}_{FMM} , des Raumladungsfelds, \mathbf{E}_{PPM} , einer gaußverteilten Punktladungsdichte. Die Abweichung ist definiert als die räumliche Mittelung der lokalen Feldabweichung, $\Delta \mathbf{E} := \mathbf{E}_{\text{FMM}} - \mathbf{E}_{\text{PPM}}$, in Einheiten der räumlich gemittelten Feldstärke. Über die Multipolordnung, l_0 , und den Admissibilitätsparameter, θ_0 , kann die Genauigkeit der FMM Approximation zu Lasten der numerischen Effizienz, und umgekehrt, angepasst werden.

Implementierung über den Admissibilitätsparameter kritisch vom Anteil der direkt berechneten Wechselwirkungen ab. Zwecks numerisch effizienter Auswertung der Raumladungswechselwirkungen sind entsprechend höhere Ordnung Multipolmomente gegenüber einer Erweiterung des Bereichs der lokalen Nahfeldwechselwirkung vorzuziehen. Hierbei ist jedoch zu beachten, dass die Verwendung einer modifizierten Nahfeldwechselwirkung, wie z. B. dem Raumladungsfeld ausgedehnter Makroteilchen gemäß (3.32) und (3.33), zu zusätzlichen Einschränkungen des Admissibilitätsparameters, θ_0 (vgl. (3.34)), führen kann.

Bei der numerischen Modellierung der Phasenraumdynamik eines Teilchenstrahls können lokale Feldabweichungen zu einem künstlichen Anstieg der Strahlemittanz führen [KF15]. Abbildung 3.9 vergleicht die FMM Feldapproximation und deren lokale Abweichung gegenüber der direkt berechneten Feldlösung einer gaußschen Makroteilchenverteilung für unterschiedliche Parameterwerte von l_0 und θ_0 . Die kachelförmige Substruktur in Abb. 3.9 d) für $l_0 = 5$ und $\theta_0 = 0.4$ zeigt, wie sich die räumliche Auflösung der Baumstruktur zum Zentrum der Ladungsdichteverteilung hin erhöht. Für eine restriktivere Wahl des Admissibilitätsparameters, $\theta_0 = 0.2$, in Abb. 3.9 e) findet die Fernfeldapproximation der Wechselwirkung zwischen den Knoten auf einem feineren Level der Baumstruktur statt. Dies äußert sich in einer gegenüber Abb. 3.9 d) kleineren lokalen Feldabweichung und einer räumlich feineren Auflösung der kachelförmigen Substruktur. Eine Erhöhung der maximalen Multipolordnung, $l_0 = 7$, in Abb. 3.9 f) reduziert ebenfalls die lokale Abweichung der FMM Feldapproximation. In diesem Fall bleibt die Längenskala der kachelförmigen

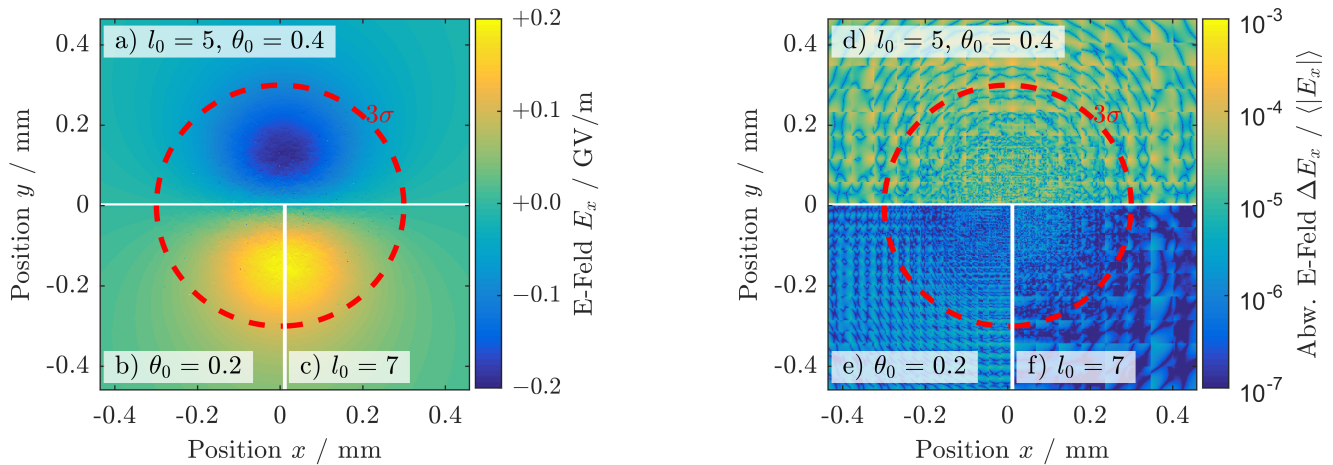


Abbildung 3.9.: Approximation des Raumladungsfelds im Zentrum einer gaußschen Ladungsdichteverteilung für die numerischen FMM Parameter a) $l_0 = 5$ und $\theta_0 = 0.4$, b) $l_0 = 5$ und $\theta_0 = 0.2$, sowie c) $l_0 = 7$ und $\theta_0 = 0.4$. Die lokale Feldabweichung in d) kann durch ein restriktiveres Admissibilitätskriterium in e) oder durch Erhöhung der Multipolordnung in f) reduziert werden.

Substruktur gegenüber Abb. 3.9 d) jedoch unverändert. Dies zeigt, dass die räumliche Auflösung des berechneten Raumladungsfelds im Gegensatz zu gitterbasierten Methoden nicht direkt von der räumlichen Auflösung der Baumstruktur abhängt. Vielmehr entsteht die kachelförmige Substruktur durch die Übergänge zwischen der spezifischen Raumladungsfeldapproximation einzelner Knoten. Zum einen ist die Fernfeldapproximation innerhalb benachbarter Knoten aufgrund des Abschneidefehlers bei der Translation der Multipolmomente und der lokalen Momente für die Multipolordnung $l \leq l_0$ nicht exakt identisch. Außerdem unterteilt das Admissibilitätskriterium die Umgebung jedes Knotens, k , in zwei Raumbereiche, sodass für einen näher gelegenen Knoten, k_1 mit $\theta_{k,k_1} > \theta_0$, zwar das Nahfeld von k aber für dessen benachbarten Knoten, k_2 mit $\theta_{k,k_2} \leq \theta_0$, die Fernfeldapproximation von k ausgewertet wird. Im Vergleich zur elektrische Feldstärke der Raumladungswechselwirkung sind die lokalen Feldabweichungen für die untersuchten Parameterwerte der FMM Approximation um mehr als drei Größenordnungen unterdrückt. Dementsprechend ist bei der Modellierung der Phasenraumdynamik eines Teilchenstrahls kein künstlicher Anstieg der Strahlemittanz zu erwarten.

3.3. Modellierung kollektiver Wechselwirkungen von Teilchen

Im Unterschied zu Punktladungen muss das Raumladungsfeld der Makroteilchen die kollisionsfreie Wechselwirkung innerhalb der physikalischen Teilchenverteilung approximieren [HE88]. Im Allgemeinen entspricht die Greensche Funktion eines Makroteilchens deshalb der Wechselwirkung einer Ladungsdichteverteilung, welche um die Teilchenposition lokalisiert ist und eine endliche räumliche Ausdehnung, Δ_0 , aufweist. Um die Konvergenz der Makroteilchenapproximation zu gewährleisten, muss der Modellparameter Δ_0 klein gegenüber der räumlichen Ausdehnung der physikalischen Teilchenverteilung sein. Weiterhin muss Δ_0 groß gegenüber dem Abstand benachbarter Makroteilchen sein, damit das Raumladungsfeld der Makroteilchen die kollektive Wechselwirkung von vielen physikalischen Teilchen repräsentieren kann [HE88]. Im Hinblick auf die Effizienz des Verfahrens ist außerdem wünschenswert, dass die physikalische Ladungsdichteverteilung numerisch günstig mit einer möglichst geringen Anzahl von Makroteilchen dargestellt werden kann.

3.3.1. Feldglättung mittels Modifikation der Nahfeldwechselwirkung

In gitterbasierten Verfahren wird zur Berechnung des Raumladungsfelds die Makroteilchenverteilung durch Ladungsdeponierung auf ein Rechengitter abgebildet. Erfolgt die Ladungsdeponierung z. B. durch die Cloud-In-Cell (CIC) Methode, dann kann die Auflösung des Rechengitters als die räumliche Ausdehnung, Δ_0^{CIC} , der Makroteilchen interpretiert werden [HE88]. Das vergleichbare Pendant im teilchenbasierten Verfahren ist ein Ensemble homogen geladener Kugeln mit dem Radius $\Delta_0^{\text{P2P}} > 0$, dem modifizierten Wechselwirkungspotential

$$\phi'_{\text{P2P}}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \begin{cases} \frac{q_j}{4\pi\epsilon_0} \frac{3\Delta_0^{\text{P2P}2} - (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)^2}{2\Delta_0^{\text{P2P}3}} & |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| \leq \Delta_0^{\text{P2P}} \\ \frac{q_j}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|} & |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| > \Delta_0^{\text{P2P}} \end{cases} \quad (3.32)$$

und dem modifizierten Nahfeld

$$\mathbf{E}'_{\text{P2P}}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \begin{cases} \frac{q_j}{4\pi\epsilon_0} \frac{(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)}{\Delta_0^{\text{P2P}3}} & |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| \leq \Delta_0^{\text{P2P}} \\ \frac{q_j}{4\pi\epsilon_0} \frac{(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|^3} & |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| > \Delta_0^{\text{P2P}} \end{cases}. \quad (3.33)$$

Die Modifikation der Wechselwirkung bewirkt effektiv eine räumliche Glättung der Raumladungsfelder auf der Längenskala des numerischen Parameters Δ_0^{P2P} . Dadurch werden stoßartige Wechselwirkungen zwischen eng benachbarten Makroteilchen, $|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| \leq \Delta_0^{\text{P2P}}$, unterdrückt.

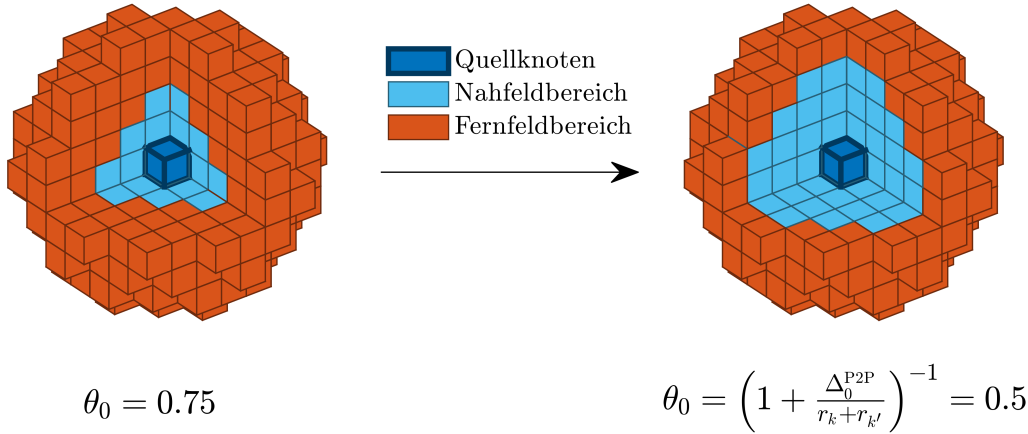


Abbildung 3.10.: Visualisierung des erweiterten Nahfeldbereichs für Blattknoten mit der radialen Ausdehnung $r_k = r'_k = \Delta_0^{\text{P2P}}/2$ bei Anwendung des Modells der modifizierten Nahfeldwechselwirkung. Im Vergleich zum Punktladungsmodell, mit beispielsweise $\theta_0 = 0.75$, beschränkt die räumliche Ausdehnung der Makroteilchen, Δ_0^{P2P} , den Admissibilitätsparameter auf $\theta_0 \leq 0.5$ und erhöht dadurch den Anteil direkter Teilchen-Teilchen Wechselwirkungen.

Um das modifizierte Wechselwirkungsmodell in die FMM zu integrieren, müssen (3.21) und (3.24) der direkten Nahfeldberechnung durch (3.32) und (3.33) ersetzt werden. Für die Multipolentwicklungen der Fernfeldapproximation ist keine direkte Anpassung möglich, weil das Volumen der Makroteilchen die radiale Ausdehnung der Punktladungsgruppe G_k auf $r_k + \Delta_0^{\text{P2P}}$ vergrößert und (3.11) nur im Außenbereich, $r > r_k + \Delta_0^{\text{P2P}}$, gültig ist. Dementsprechend müssen die Wechselwirkungsterme eng benachbarter Makroteilchen, $|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| \leq \Delta_0^{\text{P2P}}$, einzeln ausgewertet werden. Abbildung 3.10 zeigt die daraus resultierende Vergrößerung des Nahfeldbereichs für einen Blattknoten mit dem eingeschränkten Admissibilitätskriterium der Fernfeldapproximation

$$\theta_{k,k'} \leq \left(1 + \frac{\Delta_0^{\text{P2P}}}{r_k + r_{k'}}\right)^{-1}. \quad (3.34)$$

Die Makroteilchengröße, Δ_0^{P2P} , entspricht einem Modellparameter, dessen Wert durch eine numerische Konvergenzstudie festgelegt werden muss. Abbildung 3.11 visualisiert das Konvergenzverhalten bezüglich Δ_0^{P2P} am Beispiel der FMM Approximation des Raumladungsfelds einer gaußschen Ladungsdichteverteilung mit der Standardabweichung $\sigma = 0.3 \text{ mm}$ für eine Ensemblegröße von $N = 10^6$ Makroteilchen. Im teilchenbasierten Modell wird für alle Makroteilchen des Ensembles der selbe konstante Wert Δ_0^{P2P} verwendet. Bei der adaptiven Methode wird die lokale Makroteilchengröße proportional zur Ausdehnung des entsprechenden Blattknotens der

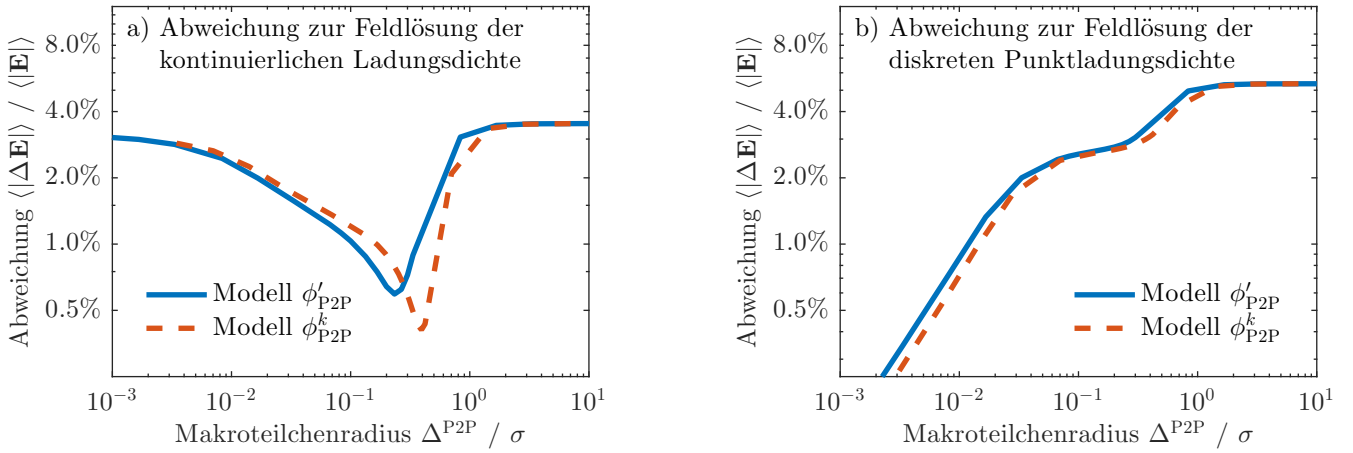


Abbildung 3.11.: Konvergenzanalyse für das mit unterschiedlichen Makroteilchengrößen, Δ_0^{P2P} , approximierte Raumladungsfeld einer gaußschen Ladungsdichteverteilung. Beim optimalen Parameterwert für Δ_0^{P2P} ist die Abweichung der Feldapproximation gegenüber der analytischen Feldlösung für eine kontinuierliche Ladungsdichte in a) minimal. Die Abweichung der modifizierten Makroteilchenfelder für die Feldlösung der diskreten Punktladungsdichte mit $N = 10^6$ Teilchen in b) hat beim optimalen Parameterwert für Δ_0^{P2P} ein lokales Plateau.

Baumstruktur, $\Delta_k^{P2P} \propto r_k$, gewählt. In diesem Fall entspricht der angegebene Parameterwert der gemittelten Makroteilchengröße, $\Delta_0^{P2P} = \langle \Delta_k^{P2P} \rangle$. Für beide Methoden existiert mit $\Delta_0^{P2P} / \sigma \approx 0.23$ bzw. $\langle \Delta_k^{P2P} \rangle / \sigma \approx 0.40$ ein optimaler Parameterwert, bei welchem die Abweichung der Makroteilchenapproximation gegenüber der analytischen Feldlösung minimal ist. Die Feldabweichung der adaptiven Methode ist im Vergleich zur teilchenbasierten Methode um ca. 40 % kleiner. Im Bezug auf die Abweichung gegenüber der Superposition aller $N = 10^6$ Punktladungsfelder entspricht dies gerade der oberen Grenze des Parameterbereichs, für welchen die Feldapproximation nur wenig vom numerischen Wert von Δ_0^{P2P} abhängt. Wird ein kleinerer Makroteilchenradius, $\Delta_0^{P2P} \rightarrow 0$, gewählt, dann konvergiert die Feldapproximation gegen die Superposition der Punktladungsfelder. Die Abweichung von der analytischen Feldlösung wird dabei größer. Für einen größeren Makroteilchenradius, $\Delta_0^{P2P} \rightarrow \infty$, saturiert die Abweichung der FMM Approximation. Das Raumladungsfeld entspricht dann genau der Multipolapproximation der Fernfeldwechselwirkung zwischen den Punktladungen.

Abbildung 3.12 vergleicht die lokale Feldabweichung der Makroteilchenapproximation gegenüber der analytischen Feldlösung für unterschiedlich gewählte Parameterwerte Δ_0^{P2P} in Bildausschnitt 3.12 a) bis 3.12 c) und $\langle \Delta_k^{P2P} \rangle$ in Bildausschnitt 3.12 d) bis 3.12 f). In Abb. 3.12 a) und 3.12 d) ist die Makroteilchengröße so gewählt, dass nur das Wechselwirkungsfeld direkt benachbarter Makroteilchen modifiziert wird. Dadurch überträgt sich die Granularität der Ma-

kroteilchenapproximation auf das numerisch berechnete Raumladungsfeld. Insbesondere in den Bereichen mit großer Ladungsdichte dominieren so die Punktladungsfelder einzelner Makroteilchen den lokalen Approximationsfehler des Raumladungsfelds. Bei der Simulation von Teilchenstrahlen können derartige lokale Feldabweichungen zu einem numerisch erzeugten Anwachsen der Strahlemittanz führen. Die Bildausschnitte 3.12 b) und 3.12 e) visualisieren die lokale Feldabweichung für den Fall, dass jedes Makroteilchen pro Raumrichtung mit ca. 10 bis 15 umliegenden Teilchen überlappt. Die lokale Abweichung der Feldapproximation ist räumlich glatt und mit einer Abweichung von weniger als ein Prozent gegenüber der mittleren Feldstärke für die betrachtete Ladungsdichteverteilung vernachlässigbar. Die Abbildungen 3.12 c) und 3.12 f) zeigen den Fall eines zu groß gewählten Parameterwerts für die Makroteilchengröße. In der lokalen Feldabweichung ist die räumliche Knotenverteilung der Baumstruktur für die FMM Fernfeldapproximation erkennbar.

Das Beispiel in Abb. 3.12 zeigt anschaulich, dass die FMM Approximation der Feldlösung sensibel auf die Granularität der Makroteilchenverteilung ist und dass die lokale Feldlösung durch die Modellierung der Nahfeldwechselwirkungen beeinflusst werden kann. Dabei besteht ein diametraler Zusammenhang zwischen der adaptiven Auflösung der Punktladungsfelder für $\langle \Delta_k^{P2P} \rangle \rightarrow 0$ und der Abweichung des Raumladungsfelds der mittels einer Makroteilchenapproximation modellierten Ladungsdichteverteilung. Insbesondere verschlechtert die Verfeinerung in 3.12 a) die Feldapproximation gegenüber 3.12 b), da das Rauschen in der Makroteilchenapproximation der Ladungsverteilung aufgelöst wird. Dieser Zusammenhang ist aus zwei Gründen ungünstig. Erstens limitiert die räumliche Ausdehnung der Makroteilchen gemäß (3.34) den Geltungsbereich der Fernfeldapproximation und damit indirekt auch die numerische Effizienz der FMM. Zweitens reduziert die Variation von Δ_0^{P2P} bzw. $\langle \Delta_k^{P2P} \rangle$ lediglich die Stärke der Nahfeldwechselwirkung. Trotz der gegenüber 3.12 a) und 3.12 c) reduzierten räumlichen Auflösung in 3.12 b) und 3.12 e) ist der numerische Aufwand zur Feldberechnung exakt gleich. Dies legt nahe, dass die modifizierte Nahfeldauswertung der einzelnen Makroteilchen zu Gunsten eines numerisch effizienteren Wechselwirkungsmodells ersetzt werden kann. Im Folgenden werden zwei Verfahren zur vereinfachten Berechnung der räumlich geglätteten Makroteilchenfelder mittels der FMM untersucht.

3.3.2. Hybrides Verfahren mit gitterbasierter Interpolation

In Anlehnung an Teilchen-Gitter-Methoden kann auch bei der FMM die Ladungsdichteverteilung durch ein räumliches Gitter geglättet werden. Im ersten Schritt muss die Makroteilchenverteilung zuerst durch eine diskrete Gitterladungsdichte approximiert werden, für welche im zweiten Schritt dann das Raumladungsfeld an den Gitterpunkten mit der FMM berechnet wird. Im dritten

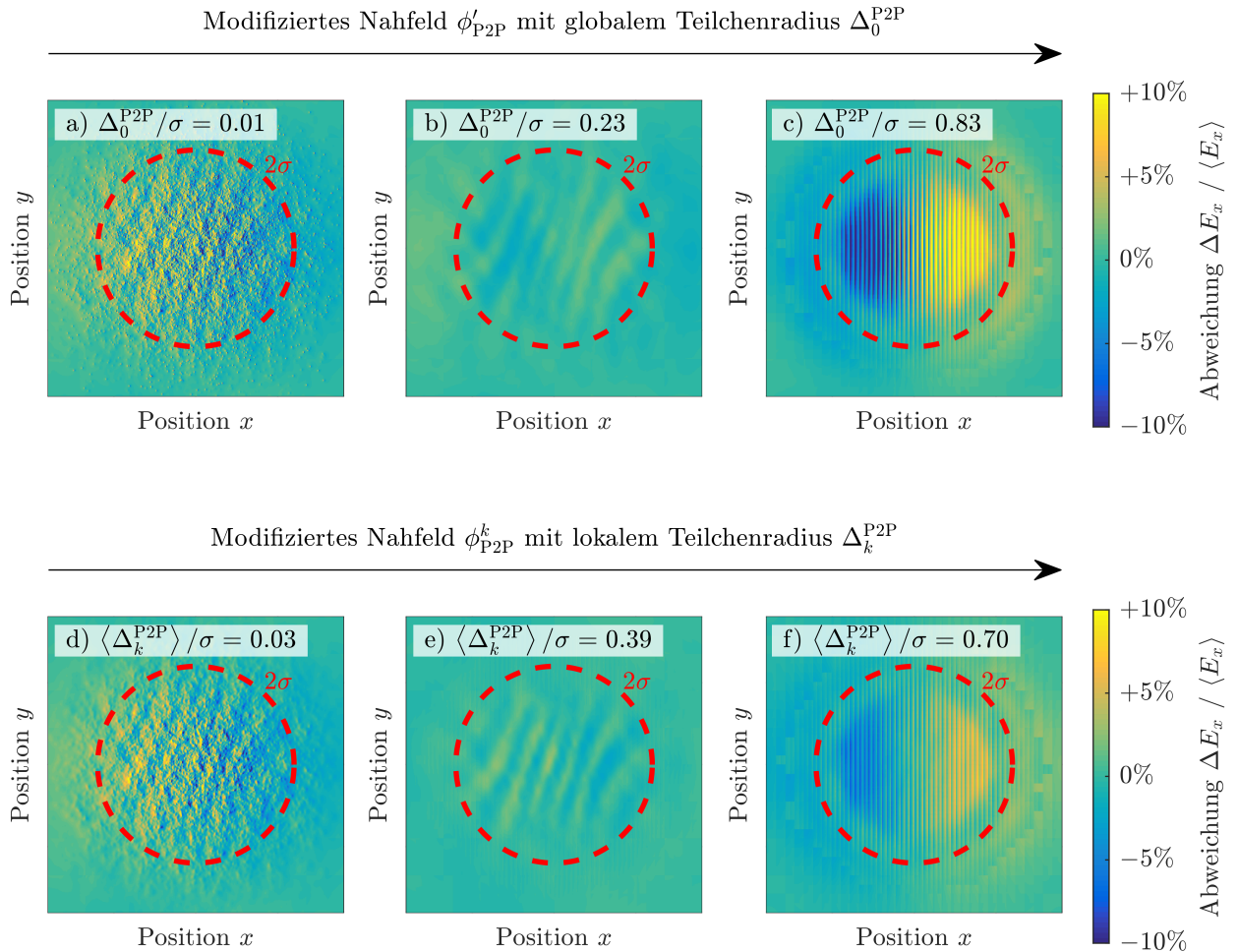


Abbildung 3.12.: Das Schaubild vergleicht die relative Feldabweichung der Makroteilchenapproximation einer gaußschen Ladungsdichteverteilung gegenüber der analytischen Feldlösung bei unterschiedlichen Parameterwerten für Δ_0^{P2P} und $\langle \Delta_k^{\text{P2P}} \rangle$. In den Feldlösungen für die optimale Makroteilchengröße, b) und e), ist die granulare Struktur der Makroteilchenapproximation gegenüber den Feldlösungen in a) und d) nicht sichtbar. Zugleich ist die räumliche Auflösung des Raumladungsfelds ausreichend gut, sodass im Gegensatz zu den Feldlösungen in c) und f) keine systematische Abweichung der Feldstärke vorliegt.

Schritt wird die Feldstärke an den Positionen der Makroteilchen wiederum durch Interpolation der Gitterfeldstärke approximiert. Im Unterschied zur konstanten Ladung der Makroteilchen unterscheiden sich die Ladungen der Gitterpunkte voneinander. Außerdem ist über die vorgegebene Position der Gitterpunkte implizit die lokale Tiefe der Baumstruktur im Voraus festgelegt. Dementsprechend hängt der numerische Aufwand für die hybride FMM hauptsächlich von der Anzahl der Gitterpunkte, N_g , ab. Insbesondere kann über die räumlichen Auflösung des Rechengitters der numerische Aufwand für die Feldauswertung $\mathcal{O}(N_g)$ unabhängig von der Anzahl der Makroteilchen, N , festgelegt werden. Im Gegensatz zu konventionellen Teilchen-Gitter-Verfahren, die z. B. die Feldlösung mittels einer FFT-Methode berechnen, stellt die Anwendung der FMM keine Voraussetzung an die Struktur des Rechengitters. Dies erlaubt durch Aussortieren von unbesetzten Gitterpunkten die effektive Anzahl an Gitterpunkten zusätzlich zu reduzieren.

Abbildung 3.13 zeigt die gitterbasierte Interpolation einer gaußschen Makroteilchenverteilung mittels der CIC Methode. Jedes Makroteilchen nimmt ein hexahedrisches Raumvolumen der Kantenlänge Δ_0^{CIC} ein. Abbildung 3.13 a) zeigt die Aufteilung der Makroteilchenladung anteilig nach der räumlichen Überlappung mit den ebenfalls hexahedrischen Gitterzellen auf die im Abstand Δ_0^{CIC} angeordneten Gitterpunkte. In Bildausschnitt 3.13 b) ist die resultierten Ladung der Gitterpunkte in der transversalen x - y Symmetrieebene des Makroteilchenensembles für eine Gitterauflösung von $\Delta_0/\sigma \approx 16.7\%$ zu sehen. Die CIC bildet die räumlich stark inhomogene Dichteverteilung identisch geladener Makroteilchen auf ein räumlich homogenes Rechengitter mit unterschiedlich geladenen Gitterpunkten ab. Dabei werden alle räumlichen Schwankungen der Ladungsdichteverteilung jenseits der Gitterauflösung von Δ_0^{CIC} geglättet. Bildausschnitt 3.13 c) zeigt das selbe Makroteilchenensemble bei einer feineren Gitterauflösung von $\Delta_0^{\text{CIC}}/\sigma = 3.3\%$. In diesem Fall ist der mittlere Makroteilchenabstand nicht mehr klein gegenüber Δ_0^{CIC} , sodass die lokal granulare Substruktur des Makroteilchenensembles sichtbar wird.

Die Konvergenzstudie für das hybride FMM Verfahren in Abb. 3.14 zeigt, dass auch für die gitterbasierte Approximation der Ladungsdichteverteilung eine optimale Gitterauflösung von $\Delta_0^{\text{CIC}}/\sigma \approx 0.13$ existiert. Für das Optimum beträgt die Feldabweichung ca. 0.6 % und ist vergleichbar mit den Ergebnissen der teilchenbasierten Methode mit modifizierter Nahfeldwechselwirkung. Im Unterschied dazu ist die Feldabweichung für $\Delta_0^{\text{CIC}} \rightarrow \infty$ nicht nach oben beschränkt. Daran lässt sich erkennen, dass die Interpolation auf dem Rechengitter sowohl die Nah- als auch die Fernfeldauswertung beeinflusst.

Der selbe Zusammenhang ist auch in der lokalen Feldabweichung in Abb. 3.15 deutlich zu erkennen. Für das zu feine Rechengitter in Bildausschnitt 3.15 a) und die optimale Gitterauflösung in Bildausschnitt 3.15 b) sind die Ergebnisse qualitativ ähnlich zur teilchenbasierten Methode in

a) CIC Methode

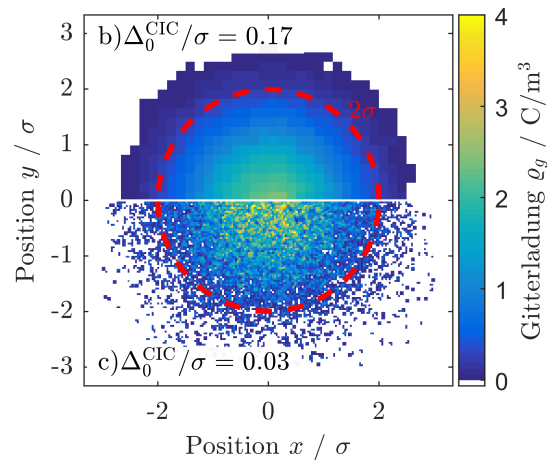
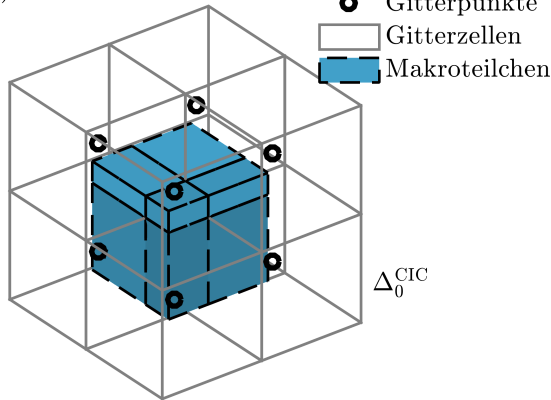


Abbildung 3.13.: Bildausschnitt a) zeigt die Interpolation der Ladungsdichteverteilung auf einem räumlichen Rechengitter mit der CIC Methode. Die Makroteilchenladung wird anteilig bezüglich der Überschneidung zwischen Gitterzelle und Makroteilchenvolumen auf die umliegenden 8 Gitterpunkte aufgeteilt. Bildausschnitt b) stellt die interpolierte Ladungsdichte in der transversalen Symmetrieebene für eine Gitterauflösung von $\Delta_0^{\text{CIC}}/\sigma \approx 0.17$ dar. Bei einer feineren Gitterauflösung von $\Delta_0^{\text{CIC}}/\sigma \approx 0.03$ in c) wird die Granularität der Makroteilchenapproximation sichtbar.

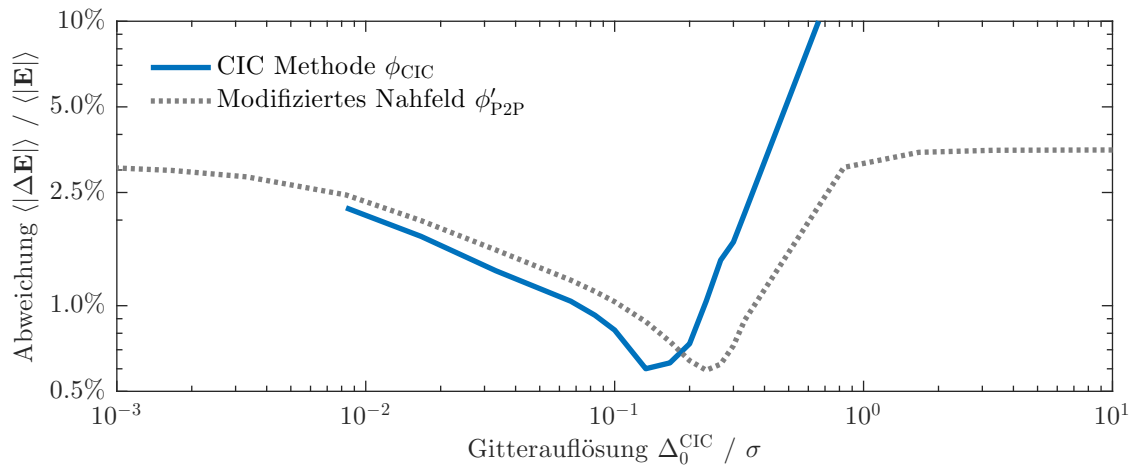


Abbildung 3.14.: Konvergenzanalyse für das hybride FMM Verfahren mit gitterbasierter CIC Interpolation der Ladungsdichteverteilung. Ähnlich zur teilchenbasierten FMM existiert eine optimale Gitterauflösung, $\Delta_0^{\text{CIC}}/\sigma \approx 0.13$, für welche die Abweichung der Feldapproximation gegenüber der analytischen Feldlösung minimal ist. Bei feineren Gitterauflösungen, $\Delta_0^{\text{CIC}} \rightarrow 0$, wird die Granularität der Makroteilchenverteilung sichtbar.

CIC Methode ϕ_{CIC} mit Gitterauflösung Δ_0^{CIC}

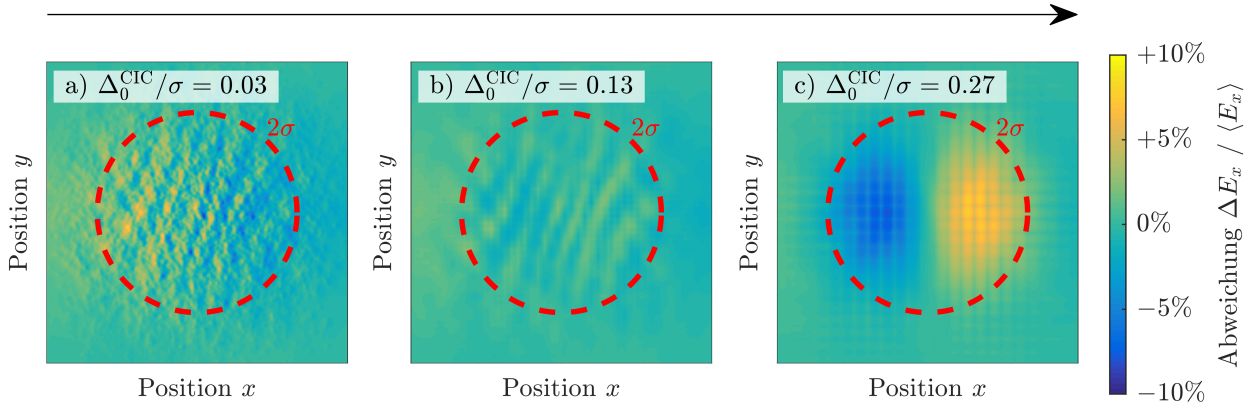


Abbildung 3.15.: Das Schaubild vergleicht die relative Feldabweichung einer mittels der CIC Methode interpolierten Makroteilchenverteilung gegenüber der analytischen Feldlösung für unterschiedliche Gitterauflösungen, Δ_0^{CIC} . Die optimale Gitterauflösung b) mit $\Delta_0^{\text{CIC}}/\sigma \approx 0.13$ glättet gegenüber a) die granulare Struktur der Makroteilchen. Für eine zu geringe räumliche Auflösung wie in c) wird die Feldstärke systematisch unterschätzt und die Struktur des Rechengitters überträgt sich auf die Feldlösung.

Abb. 3.12. Als markanter Unterschied fällt auf, dass für die optimale Gitterauflösung die Struktur des Rechengitters in der Feldlösung zu erkennen ist. Bei der zu grob gewählten Gitterauflösung in Bildausschnitt 3.15 c) wird der Effekt besonders deutlich. Es handelt sich dabei um einen Alias-Effekt des Rechengitters [HE88], welcher zu einer Diskrepanz zwischen dem Raumladungsfeld und der Ladungsdichteverteilung des Makroteilchenensembles führt.

Tabelle 3.1 zeigt den Zusammenhang zwischen der Gitterauflösung, Δ_0^{CIC} , und dem numerischen Aufwand für die hybride FMM. Als Referenz dient die relative Anzahl an Rechenoperationen zur Fern- und Nahfeldapproximation im Vergleich zur teilchenbasierten FMM. Weil bei der teilchenbasierten FMM die Raumladungsfelder zwar auf der Längenskala des Makroteilchenradius, Δ_0^{P2P} , geglättet werden, diese Glättung jedoch nicht den numerischen Aufwand der Felddauswertung beeinflusst, ist die Anzahl der Rechenoperationen unabhängig von Δ_0^{P2P} immer konstant. Im Unterschied dazu kommt bei der hybriden FMM mit Rechengitter eine Effizienzsteigerung zu Stande, weil lokale Substrukturen der Makroteilchenapproximation vom Rechengitter nicht aufgelöst werden. Für die optimale Gitterauflösung, $\Delta_0^{\text{CIC}}/\sigma \approx 0.13$, kann durch die Interpolation der Ladungsdichteverteilung der Rechenaufwand gegenüber der teilchenbasierten Auswertung dadurch um ca. Faktor 15 reduziert werden. Liegt die Gitterauflösung hingegen in der Größenordnung des mittleren Makroteilchenabstands, $\Delta_0^{\text{CIC}}/\sigma \approx 0.03$, dann ist die Anzahl der Gitterpunkte, N_g , durch die Interpolation der Ladungsdichteverteilung größer als die Ensemblegröße, N , der Makroteilchenapproximation. Dementsprechend ist die teilchenbasierte Methode der gitterba-

CIC Gitterauflösung	Aufwand Fernfeldapprox.	Aufwand Nahfeldapprox.
$\Delta_0^{\text{CIC}}/\sigma = 0.17$	0.02	0.03
$\Delta_0^{\text{CIC}}/\sigma = 0.13$	0.06	0.08
$\Delta_0^{\text{CIC}}/\sigma = 0.08$	0.25	0.28
$\Delta_0^{\text{CIC}}/\sigma = 0.03$	4.36	3.17
$\Delta_0^{\text{CIC}}/\sigma = 0.02$	25.72	12.31

Tabelle 3.1.: Relative Anzahl der Rechenoperationen für die gitterbasierte FMM Fern- und Nahfeldapproximation. Die Zahlwerte zeigen den Vergleich zur Anzahl der Rechenoperationen für die teilchenbasierte FMM. Bei einer moderaten Gitterauflösung, $\Delta_0^{\text{CIC}}/\sigma \approx 0.08$, werden zur Auswertung der interpolierten Ladungsdichteverteilung signifikant weniger FMM Rechenoperationen benötigt. Soll hingegen die Substruktur der Makroteilchenverteilung, mit $\Delta_0^{\text{CIC}}/\sigma \approx 0.03$, aufgelöst werden, dann ist die teilchenbasierte Methode numerisch effizienter.

sierten Methode überlegen, wenn die granulare Struktur der Makroteilchenverteilung aufgelöst werden soll.

3.3.3. Nahfeldapproximation mittels der Methode selbstkonsistenter Felder

Die Konvergenzanalysen in Abb. 3.11 und Abb. 3.14 haben gezeigt, dass für die Makroteilchenapproximation einer kontinuierlichen Ladungsdichteverteilung mit moderater Ensemblegröße, $N \sim 10^6$, der numerische Parameter Δ_0 groß genug sein muss, sodass jedes Makroteilchen in jeder Raumrichtung mit seinen ca. 10-15 nächsten Nachbarn überlappt. Im Unterschied zur gitterbasierten CIC Methode konnte die numerische Effizienz der teilchenbasierten FMM mit modifizierter Nahfeldwechselwirkung nicht von der effektiven Verminderung der räumlichen Auflösung des Wechselwirkungspotentials profitieren. Dies liegt unter anderem daran, dass das Nahfeld als direkte Teilchen-Teilchen Wechselwirkung ausgewertet wird. Es bleibt jedoch ungenutzt, dass für eng benachbarte Makroteilchen, $|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| < \Delta_0^{\text{P2P}}$, die modifizierte Nahfeldwechselwirkung nach (3.32) und (3.33) vollständig bezüglich \mathbf{x}_i und \mathbf{x}_j faktorisiert werden könnte. Beispielsweise lässt sich das elektrische Feld zwischen N überlappenden Makroteilchen mit $\mathcal{O}(2N)$ anstatt $\mathcal{O}(N^2)$ berechnen, wenn man zuerst über alle \mathbf{x}_j -Terme summiert und anschließend für jeden \mathbf{x}_i -Term in (3.33) separat die Differenz auswertet.

Ein vollständig faktorisiertes Modell für die Nahfeldwechselwirkung hat zwei signifikante Vorteile. Zunächst skaliert die Auswertung der Nahfeldwechselwirkungen innerhalb eines Blattknotens, k , linear, wie $P(N_k) = 2N_k$, anstatt quadratisch mit der Anzahl der enthaltenen Makroteilchen N_k . Dies bedeutet, dass in (3.29) auch ohne die Voraussetzung $N_k \ll N$ die numerische Effizienz der FMM Approximation erhalten bleibt. Weiter eröffnet dies die Möglichkeit, die FMM Baumstruktur

auf Basis der räumlichen Ausdehnung der Blattknoten k anstatt der lokalen Makroteilchendichte zu steuern. Ähnlich zur gitterbasierten FMM kann dadurch die maximale Verfeinerungsebene der Baumstruktur im Voraus festgelegt werden, sodass der numerische Aufwand für die Raumladungswechselwirkung insgesamt reduziert wird. Im Folgenden wird dazu ein vollständig faktorisiertes Nahfeldwechselwirkungsmodell auf Basis der Methode selbstkonsistenter Felder [Clu73; HO92; Wei99] angewandt.

Nahfeldapproximation eines Blattknotens auf Basis des Plummer-Modells

Ein möglicher Ansatz für die Nahfeldapproximation des Raumladungsfelds eines Blattknotens, k , sind das Plummer-Potential und die entsprechende Raumladungsdichteverteilung [Clu73],

$$\phi_{\text{p}}^k(\tilde{r}) = -\frac{1}{a_0} (\tilde{r}^2 + 1)^{-1/2}, \quad (3.35)$$

$$\varrho_{\text{p}}^k(\tilde{r}) = -\frac{3}{a_0^3} \varepsilon_0 (\tilde{r}^2 + 1)^{-5/2}, \quad (3.36)$$

welche zusammen die Poissongleichung der Elektrostatik im Vakuum,

$$\Delta \phi_{\text{p}}^k(\mathbf{x}) = -\frac{1}{\varepsilon_0} \varrho_{\text{p}}^k(\mathbf{x}), \quad (3.37)$$

erfüllen. Die Radialkoordinate, $\tilde{r} := r/a_0$, entspricht dem Abstand, r , vom Zentrum eines Blattknotens, k , in Einheiten des Plummer-Radius, $a_0 > 0$. Der Plummer-Radius ist ein Skalenparameter, welcher die räumliche Ausdehnung für die zum Knotenzentrum hin sanft ansteigende Raumladungsdichteverteilung, $\varrho_{\text{p}}^k(\tilde{r})$, beschreibt. Abbildung 3.16 skizziert den Verlauf von $\phi_{\text{p}}^k(\tilde{r})$ für $a_0 = 1$. Das Plummer-Potential ist im Zentrum des Blattknotens, k , endlich und geht für $r \gg a_0$ in das Potential einer Punktladung über. Mit den genannten Eigenschaften eignet sich das Plummer-Modell potentiell als Ausgangspunkt zur Approximation der Ladungsdichteverteilung für die im Blattknoten enthaltenen Makroteilchen.

Durch eine Erweiterung dieses Ansatzes [Clu73; HO92] bezüglich der radialen Ordnung, $n \leq n_0$, und den Raumwinkelordnungen, $l \leq l_0$ und $|m| \leq l$, kann ein biorthogonales Basisset aus Potentialfunktionen, $\phi_{n,l,m}(\mathbf{x})$, und Raumladungsdichteverteilungen, $\varrho_{n,l,m}(\mathbf{x})$, konstruiert werden, welche jeweils paarweise (3.37) erfüllen. Für das verallgemeinerte Plummer-Potential gilt

$$\phi_{n_0,l_0}^k(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{a_0} \sum_{n=0}^{n_0} \sum_{l=0}^{l_0} \sum_{m=-l}^l p_{n,l,m}^k H_{n,l,m} \left(\frac{r}{a_0}, \vartheta, \varphi \right) \quad (3.38)$$

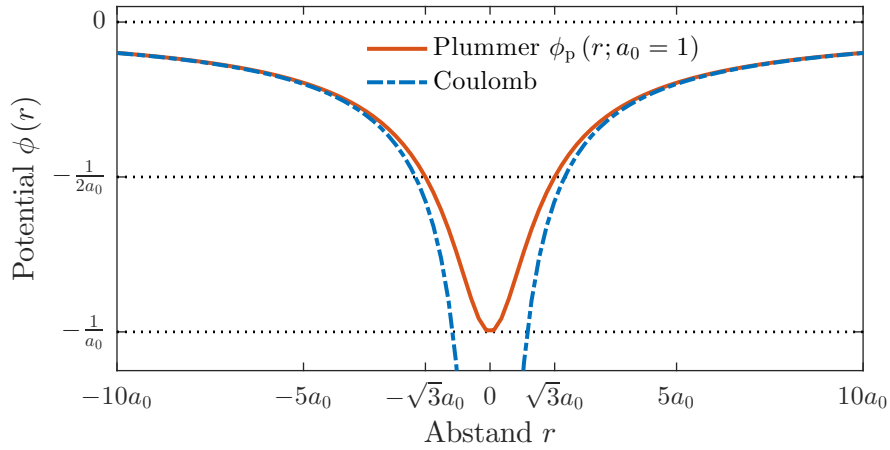


Abbildung 3.16.: Skizze des Plummer-Potentials, $\phi_p^k(\tilde{r})$, für $a_0 = 1$. Das Plummer-Potential ist im Zentrum, bei $r = 0$, nach unten auf $-a_0^{-1}$ beschränkt. Für $r \gg a_0$ geht $\phi_p^k(\tilde{r})$ in das Coulombpotential einer Punktladung über.

mit den biorthogonalen Basisfunktionen [HO92]

$$H_{n,l,m}(\tilde{r}, \vartheta, \varphi) = -\frac{\psi(\tilde{r})}{\sqrt{\tilde{r}^2 + 1}} C_n^{l+1}[\xi(\tilde{r})] G_{l,m}[\psi(\tilde{r}), \vartheta, \varphi] \quad (3.39)$$

und den Hilfsgrößen

$$\begin{aligned} \psi(\tilde{r}) &:= (\tilde{r}^2 + 1) / \tilde{r}, \\ \xi(\tilde{r}) &:= (\tilde{r}^2 - 1) / (\tilde{r}^2 + 1). \end{aligned} \quad (3.40)$$

Die Berechnung der Gegenbauer-Polynome, $C_n^{l+1}(\xi)$, erfolgt auf Basis der Rekursionsrelation [AS84]

$$\begin{aligned} C_0^l(\xi) &= 1, \\ C_1^l(\xi) &= 2l\xi, \\ (n+1)C_{n+1}^l(\xi) &= 2\xi(n+l)C_n^l(\xi) - (n+2l-1)C_n^l(\xi). \end{aligned} \quad (3.41)$$

Für die Nahfeldapproximation der im Blattknoten, k , enthaltenen Makroteilchen, $j \in [1, N_k]$, ergeben sich die Entwicklungskoeffizienten des verallgemeinerten Plummer-Potentials zu

$$p_{n,l,m}^k = \alpha_{n,l} \sum_{j=1}^{N_k} \frac{C_n^{l+1}[\xi(\tilde{r}_j)]}{(\tilde{r}_j^2 + 1)^{l+1/2}} q_{j,l,m}^k \quad (3.42)$$

mit der Normierungskonstante

$$\alpha_{n,l} := \frac{(2l+1)(n+1+l)}{\pi(n+2l+1)!} \frac{16^{l+1}n!(l!)^2}{4n(n+2l+2) + (2l+1)(2l+3)}. \quad (3.43)$$

Die normierten Multipolmomente der Makroteilchen,

$$q'_{j,l,m} = \frac{q_j}{4\pi\epsilon_0} \bar{F}_{l,m}(\tilde{r}_j, \vartheta_j, \varphi_j) = \frac{q_j}{4\pi\epsilon_0} \bar{F}_{l,m}(r_j, \vartheta_j, \varphi_j) (a_0)^{-l} = \frac{q_{j,l,m}}{a_0^l}, \quad (3.44)$$

sind definiert bezüglich des lokalen Koordinatensystems des Blattknotens. Das elektrische Feld ergibt sich aus dem verallgemeinerten Plummer-Potential zu

$$\mathbf{E}^k(r, \vartheta, \varphi) = - \left(\frac{1}{a_0} \right)^2 \sum_{n=0}^{n_0} \sum_{l=0}^{l_0} \sum_{m=-l}^l p_{n,l,m}^k \mathbf{H}_{n,l,m} \left(\frac{r}{a_0}, \vartheta, \varphi \right) \quad (3.45)$$

mit dem Gradient der Plummer-Basisfunktionen,

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{n,l,m}(\tilde{r}, \vartheta, \varphi) &= \vec{\nabla} H_{n,l,m}(\tilde{r}, \vartheta, \varphi) \\ &= \frac{1}{\psi^2 \tilde{r}} H_{n,l,m}(\tilde{r}, \vartheta, \varphi) \left\{ l\psi^2 + 4 \frac{\partial}{\partial \xi} \log [C_n^{l+1}(\xi)] - (2l+1) \right\} \mathbf{e}_r \\ &\quad + \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial}{\partial \vartheta} H_{n,l,m}(\tilde{r}, \vartheta, \varphi) \mathbf{e}_\vartheta \\ &\quad + \frac{1}{\tilde{r} \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} H_{n,l,m}(\tilde{r}, \vartheta, \varphi) \mathbf{e}_\varphi. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Die Berechnung der partiellen Ableitungen von $H_{n,l,m}$ bezüglich ϑ und φ folgt analog zu (3.27). Für die partielle Ableitung der Gegenbauerpolynome existiert der Zusammenhang [HO92]

$$\frac{\partial}{\partial \xi} C_n^{l+1}(\xi) = 2(l+1) C_{n-1}^{l+2}(\xi). \quad (3.47)$$

Abbildung 3.17 zeigt die Approximation des Nahfeldpotentials von $N_k = 7000$ Makroteilchen mittels der verallgemeinerten Plummer-Basis. Die Makroteilchenverteilung entspricht dem Inhalt eines Knotens, k , in der dritten Verfeinerungsebene der Baumstruktur einer gaußverteilten Raumladungsdichte. Das Schaubild zeigt den Potentialverlauf auf der z -Achse in 3.17 a) und entlang der Diagonalen, d , des Knotens in 3.17 b). Das betrachtete Raumvolumen ist gegenüber dem Zentrum der gaußverteilten Ladungsdichte in x - y -Richtung transversal versetzt. Die daraus resultierende Anisotropie der Makroteilchendichte bezüglich des Knotenursprungs überträgt sich auf den Verlauf des Raumladungspotentials entlang der Raumdiagonalen. Das verallgemeinerte

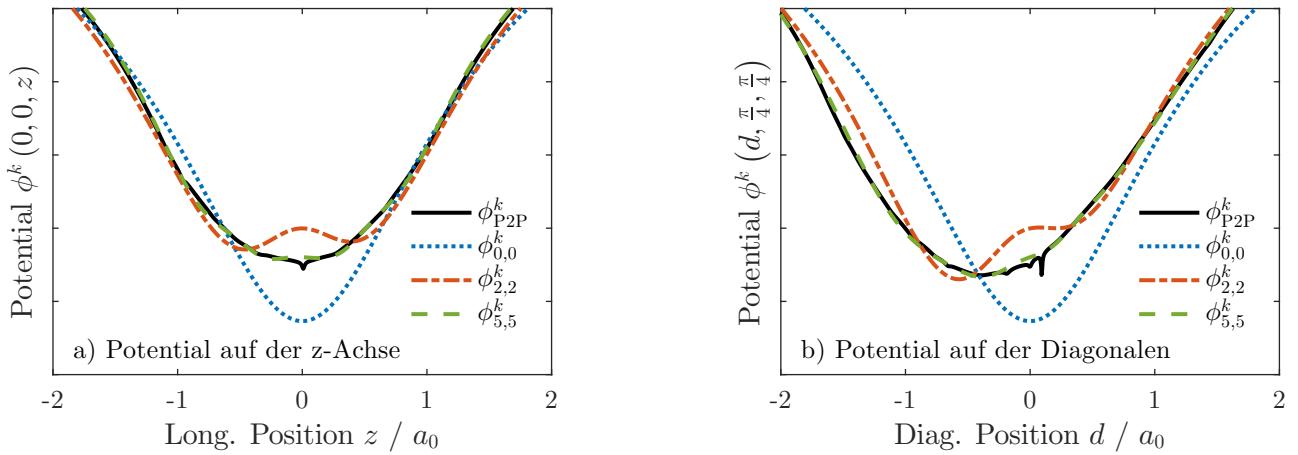


Abbildung 3.17.: Nahfeldapproximation, ϕ_{n_0, l_0}^k , des Coulombpotentials, ϕ_{P2P}^k , von $N_k = 7000$ Makroteilchen entlang der z-Achse a) und der Diagonalen b) eines Blattknotens, k . Der Plummer-Radius, a_0 , beträgt ein Viertel der Raumdiagonalen des Blattknotens. Für höhere radiale, $n_0 = 5$, und angulare, $l_0 = 5$, Ordnungen konvergiert ϕ_{n_0, l_0}^k gegen ϕ_{P2P}^k .

Plummer-Potential, ϕ_{n_0, l_0}^k , konvergiert bei Erhöhung der Ordnung, n_0 und l_0 , gegen den mittels Superposition berechneten Potentialverlauf, ϕ_{P2P}^k , der Makroteilchenverteilung. Lokal auftretende Punktladungsdivergenzen, wie sie z. B. für ϕ_{P2P}^k bei $z \approx 0$ in 3.17 a) und bei $d \approx 0.2$ in 3.17 b) zu sehen sind, werden durch die endliche räumliche Auflösung der Basisfunktionen mit $n \leq n_0$ und $l \leq l_0$ regularisiert. Der Plummer-Radius, a_0 , des zu Grunde liegenden Basissets beträgt 50% der max. radialen Ausdehnung, r_k , der Makroteilchenverteilung. Dies entspricht in etwa dem Wert von $a_0 \approx 0.44 r_k$, der nach Definition des Plummer-Radius für eine homogene Ladungsdichteverteilung innerhalb eines Knotens anzusetzen ist. Bei Verwendung von höheren Ordnungen, $n_0 \geq 2$, beeinflusst der exakte Wert von a_0 die Qualität der Approximation nur marginal.

Die Bildausschnitte in Abb. 3.18 zeigen den Potentialverlauf im Inneren, 3.18 a) und 3.18 b), auf der Oberfläche, 3.18 c) und 3.18 d), sowie im Umfeld, 3.18 e) und 3.18 f) des Blattknotens, k , im Vergleich. Im Knoteninneren regularisiert die räumliche Auflösung der bei $n_0 = 5$ und $l_0 = 5$ begrenzten Plummer-Basis das Raumladungsfeld der granularen Makroteilchenverteilung. Auf der Knotenoberfläche spiegelt die Plummer-Approximation die grundlegenden Eigenschaften der Makroteilchenverteilung wie z. B. den gegenüber des Knotenzentrums versetzten Ladungsschwerpunkt wieder. Im Umfeld nähern sich beide Potentiale für zunehmenden Abstand dem Coulombpotential einer im Knotenzentrum platzierten Punktladung an. Die gute Übereinstimmung zwischen ϕ_{P2P}^k und $\phi_{5,5}^k$ zeigt, dass die verallgemeinerte Plummer-Basis zur Approximation der Nahfeldwechselwirkungen von Blattknoten geeignet ist.

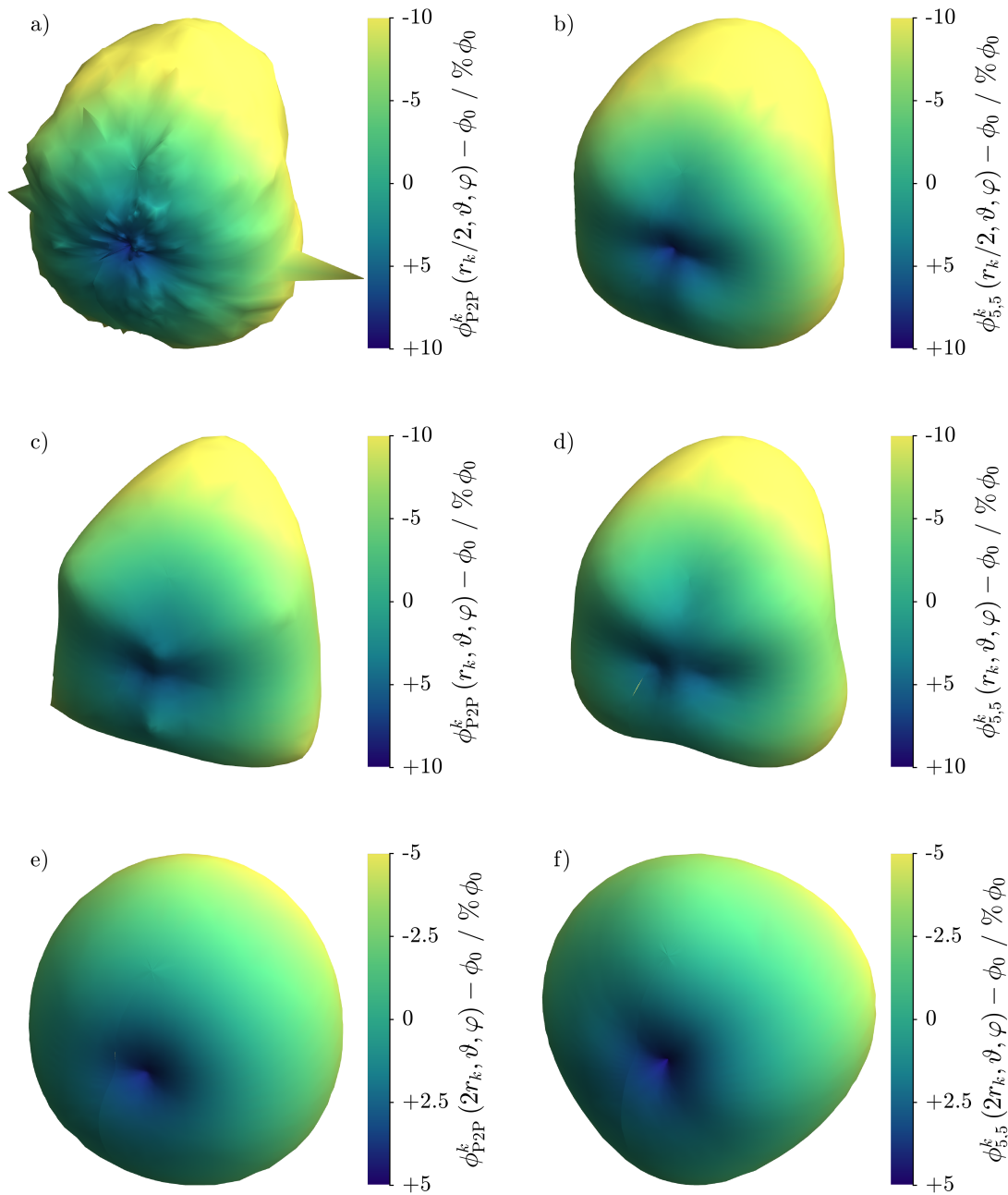


Abbildung 3.18.: Potentialverteilung, ϕ_{P2P}^k , und Plummer-Approximation, $\phi_{5,5}^k$, eines Blattknotens, k , mit radialer Ausdehnung r_k für verschiedene Abstände zum Knotenzentrum bei $r = 0$. Die Farbskala visualisiert die Anisotropie der Potentialverteilung im Bezug auf einen Referenzwert $\phi_0 := \phi_{5,5}^k(r, 0, 0)$. Durch die endliche räumliche Auflösung der Plummer-Basisfunktionen mit $n \leq 5$ und $l \leq 5$ wird die granulare Makroteilchendichte im Inneren des Blattknotens regularisiert.

Anwendung verallgemeinerter Plummer-Potentiale in der FMM

Die Methode der selbstkonsistenten Felder ermöglicht es die lokale Auflösung der adaptiven FMM Baumstruktur zu limitieren, wodurch eine räumliche Glättung der Ladungsdichteverteilung erreicht werden kann. Dazu wird das auf der Makroteilchenanzahl basierende Kriterium zur Untergliederung eines Knotens, $N_k \geq N_0$, durch ein auf der räumlichen Knotengröße basierendes Kriterium ersetzt. Die Limitierung der adaptiven Verfeinerung führt dazu, dass die Blattknoten in Gebieten mit erhöhter Ladungsdichte eine gegenüber N_0 signifikant erhöhte Anzahl $N_k \gg N_0$ an Makroteilchen enthalten können. Um die lineare Komplexität der FMM zu erhalten, muss entsprechend das quadratisch skalierende Teilchen-Teilchen-Modell der Nahfeldwechselwirkung durch die linear skalierende Nahfeldapproximation eines Blattknotens ersetzt werden.

Für die Nahfeldapproximation auf Basis des Plummer-Modells werden im P2M-Schritt der FMM gemäß (3.42) die Entwicklungskoeffizienten, p_{nlm}^k , der lokalen Makroteilchenverteilung aller Blattknoten bestimmt. Weil die Multipolmomente der Makroteilchen aus (3.44) ebenfalls für die Fernfeldapproximation der FMM benötigt werden, ist der zusätzliche numerische Aufwand, der durch die Modifikation des P2M-Schrittes zu Stande kommt,

$$\mathcal{O}_{\text{P2M}}(N \times l_0^2) \Rightarrow \mathcal{O}_{\text{P2M}^k}(N \times n_0 \times l_0^2), \quad (3.48)$$

vergleichsweise gering. Im Unterschied zu anderen Basissets für die Methode der selbstkonsistenten Felder, wie z. B. das auf sphärischen Besselfunktionen aufbauende Modell einer homogen geladenen Kugel [Wei99], lässt sich das verallgemeinerte Plummer-Modell deshalb gut mit der teilchenbasierten FMM kombinieren. Die Berechnung der Nahfeldwechselwirkung skaliert linear mit der Anzahl der Auswertungen von (3.45). Dadurch entkoppelt die Laufzeitabhängigkeit des modifizierten P2P-Schritts,

$$\mathcal{O}_{\text{P2P}}(N \times N_k) \Rightarrow \mathcal{O}_{\text{P2P}^k}(N \times n_0 \times l_0^2), \quad (3.49)$$

von der Anzahl, N_k , der Makroteilchen pro Blattknoten und somit von der räumlichen Auflösung der Baumstruktur. Zur Berechnung der Koeffizienten p_{nlm}^k wird der Plummer-Radius Parameter mit $a_0 \approx 0.5 r_k$ der maximalen radialen Ausdehnung, r_k , des Blattknotens angesetzt. Durch Variation von a_0 bei der Auswertung von (3.45) kann die Glättung der Raumladungsfelder zusätzlich gesteuert werden. Je größer a_0 dabei gewählt wird, desto größer ist die räumliche Überschneidung der Plummer-Potentiale und damit die Glättung des Raumladungsfelds zwischen benachbarten Blattknoten.

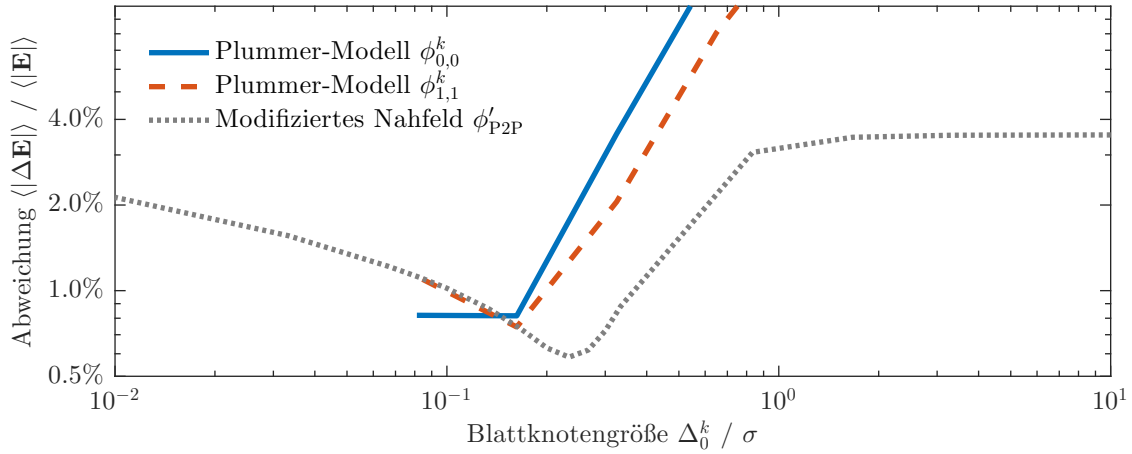


Abbildung 3.19.: Konvergenzverhalten für das Raumladungsfeld einer gaußschen Ladungsdichteverteilung mit Nahfeldmodellierung auf Basis der verallgemeinerten Plummer-Potentiale, ϕ_{n_0, l_0}^k . Die räumliche Größe der Blattknoten, Δ_0^k , wird durch Limitierung der maximalen Verfeinerungsebene der FMM Baumstruktur definiert. Für eine Baumstruktur mit 5 Ebenen, entsprechend $\Delta_0^k/\sigma \approx 0.16$, ist die Abweichung gegenüber der analytischen Feldlösung minimal.

Abbildung 3.19 zeigt das Konvergenzverhalten der Raumladungsapproximation mit Nahfeldmodellierung auf Basis der verallgemeinerten Plummer-Potentiale, ϕ_{n_0, l_0}^k , in Abhängigkeit von der Blattknotengröße, Δ_0^k . Die räumliche Auflösung der Baumstruktur, Δ_0^k , wird durch Limitierung der maximalen Anzahl an Verfeinerungsebenen gesteuert. Die Berechnung der Entwicklungskoeffizienten, p_{nlm}^k , erfolgt mit dem der jeweiligen Blattknotengröße entsprechenden Plummer-Radius Parameter a_0 . Für die Auswertung der Nahfeldapproximation wird der Plummer-Radius auf $2a_0$ verdoppelt. Letzteres forciert eine räumliche Überlagerung der Plummer-Potentiale, ϕ_{n_0, l_0}^k , benachbarter Blattknoten und glättet auf diese Weise lokale Abweichungen in der Nahfeldwechselwirkung. Bei 5 Verfeinerungsebenen, mit einer Blattknotengröße von $\Delta_0^k/\sigma \approx 0.16$, ist die Abweichung der Feldapproximation für die Grundordnung, $\phi_{0,0}^k$, gegenüber der analytischen Feldlösung mit 0.82% minimal. Die Feldapproximation für das erweiterte Plummer-Potential, $\phi_{1,1}^k$, ist mit 0.75% Abweichung marginal kleiner und vergleichbar zur modifizierten Nahfeldmodellierung, ϕ'_{P2P} , für $\Delta_0^{P2P}/\sigma \approx 0.17$.

Die Bildausschnitte Abb. 3.20 b) und Abb. 3.20 e) zeigen die entsprechende Verteilung der lokalen Feldabweichung für $\phi_{0,0}^k$ und $\phi_{1,1}^k$. In beiden Fällen beträgt die lokale Abweichung von der analytischen Lösung weniger als 5%. Bei zu groß gewählten Blattknoten, $\Delta_0^k/\sigma \geq 0.32$, wird die Feldstärke ähnlich zur CIC Methode systematisch unterschätzt. In der lokalen Feldabweichung für $\phi_{0,0}^k$ in Abb. 3.20 c) zeichnen sich deutlich die räumlichen Grenzen der Blattknoten ab. Im Vergleich dazu ist die lokale Abweichung für die höhere Ordnung Nahfeldapproximation $\phi_{1,1}^k$ in Abb. 3.20 f) weniger stark ausgeprägt. Für eine kleinere Blattknotengröße, $\Delta_0^k/\sigma \approx 0.08$, entsprechend 6

Verfeinerungsebenen in der Baumstruktur, wird zunehmend die Granularität der Makroteilchenverteilung sichtbar. Erwartungsgemäß ist dabei die Nahfeldapproximation der Grundordnung $\phi_{0,0}^k$ in Abb. 3.20 a) weniger sensitiv gegenüber lokalen Abweichungen der Ladungsdichteverteilung als die höhere Ordnung Approximation $\phi_{1,1}^k$ in Abb. 3.20 d). Dementsprechend ist $\phi_{1,1}^k$ in Abb. 3.19 für $\Delta_0^k/\sigma \leq 0.16$ nahezu identisch mit ϕ'_{P2P} .

Die numerische Effizienz für die Plummer-Potentiale profitiert maßgeblich davon, dass das Admissibilitätskriterium der FMM Fernfeldapproximation weitestgehend unabhängig von der Blattknotengröße, Δ_0^k , optimiert werden kann. Eine weniger restriktive Wahl des Admissibilitätsparameters, z. B. $\theta_0 = 0.75$ für Abb. 3.19 anstatt $\theta_0 = 0.5$ für Abb. 3.11, reduziert sowohl den Rechenaufwand für die Fernfeld- als auch für die Nahfeldapproximation signifikant. Durch Kompensation mittels der Multipolordnung für die Fernfeldapproximation, z. B. $l_0 = 6$ für Abb. 3.19 anstatt $l_0 = 5$ für Abb. 3.11, kann so der numerische Aufwand der FMM Auswertung bei vergleichbarer Genauigkeit der Raumladungsfeldapproximation optimiert werden. Im Unterschied dazu ist das Admissibilitätskriterium bei der modifizierten Nahfeldwechselwirkung aufgrund der endlichen Makroteilchengröße, $\Delta_0^{\text{P2P}} > 0$, gemäß (3.34) nur eingeschränkt variierbar. Dementsprechend ist der effektive Admissibilitätsparameter, z. B. $\theta'_0 \leq 0.75$ in Abb. 3.19, für die modifizierte Nahfeldwechselwirkung insbesondere in den Bereichen mit großer Makroteilchendichte restriktiver.

Tabelle 3.2 zeigt die Anzahl der Rechenoperationen für die unterschiedlichen Nahfeldmodelle. Die Zahlwerte beziehen sich auf einen Vergleich zur teilchenbasierten FMM mit modifizierter Nahfeldwechselwirkung, ϕ'_{P2P} , für die optimale Makroteilchengröße von $\Delta_0^{\text{P2P}}/\sigma \approx 0.23$. Eine Verkleinerung der Makroteilchengröße, von $\Delta_0^{\text{P2P}}/\sigma \approx 0.23$ auf $\Delta_0^{\text{P2P}}/\sigma \approx 0.17$ sowie von $\Delta_0^{\text{P2P}}/\sigma \approx 0.17$ auf $\Delta_0^{\text{P2P}}/\sigma \approx 0.08$, reduziert jeweils den Rechenaufwand für die Nahfeldapproximation um knapp die Hälfte. Zugleich erhöht sich der Rechenaufwand für die Fernfeldapproximation. Dieser Zusammenhang zeigt, dass im untersuchten Ensemble die numerische Effizienz der FMM Feldapproximation aufgrund der Einschränkung des Admissibilitätsparameters, $\theta'_0 \leq 0.75$, beeinträchtigt ist. Im Vergleich dazu reduziert die Modellierung der Nahfeldwechselwirkung mit dem Plummer-Potential, $\phi_{0,0}^k$, für die optimierte Blattknotengröße, $\Delta_0^k/\sigma \approx 0.16$, die Anzahl der direkt ausgewerteten Nahfeldwechselwirkungen gegenüber dem teilchenbasierten Modell, ϕ'_{P2P} , um knapp eine Größenordnung. Außerdem reduziert die vereinfachte Baumstruktur auch die Anzahl der Knotenwechselwirkungen für die Fernfeldapproximation auf knapp die Hälfte gegenüber dem Referenzwert. Für das verallgemeinerte Plummer-Potential, z. B. $\phi_{1,1}^k$, erhöht sich die Anzahl der Nahfeldauswertungen gemäß (3.49) linear mit der Anzahl der Entwicklungsterme. Die Anzahl der Knotenwechselwirkungen für die Fernfeldapproximation ist unabhängig von der Modellierung identisch. Für die verfeinerte Baumstruktur mit einer Blattknotengröße von $\Delta_0^k/\sigma \approx 0.08$ ist

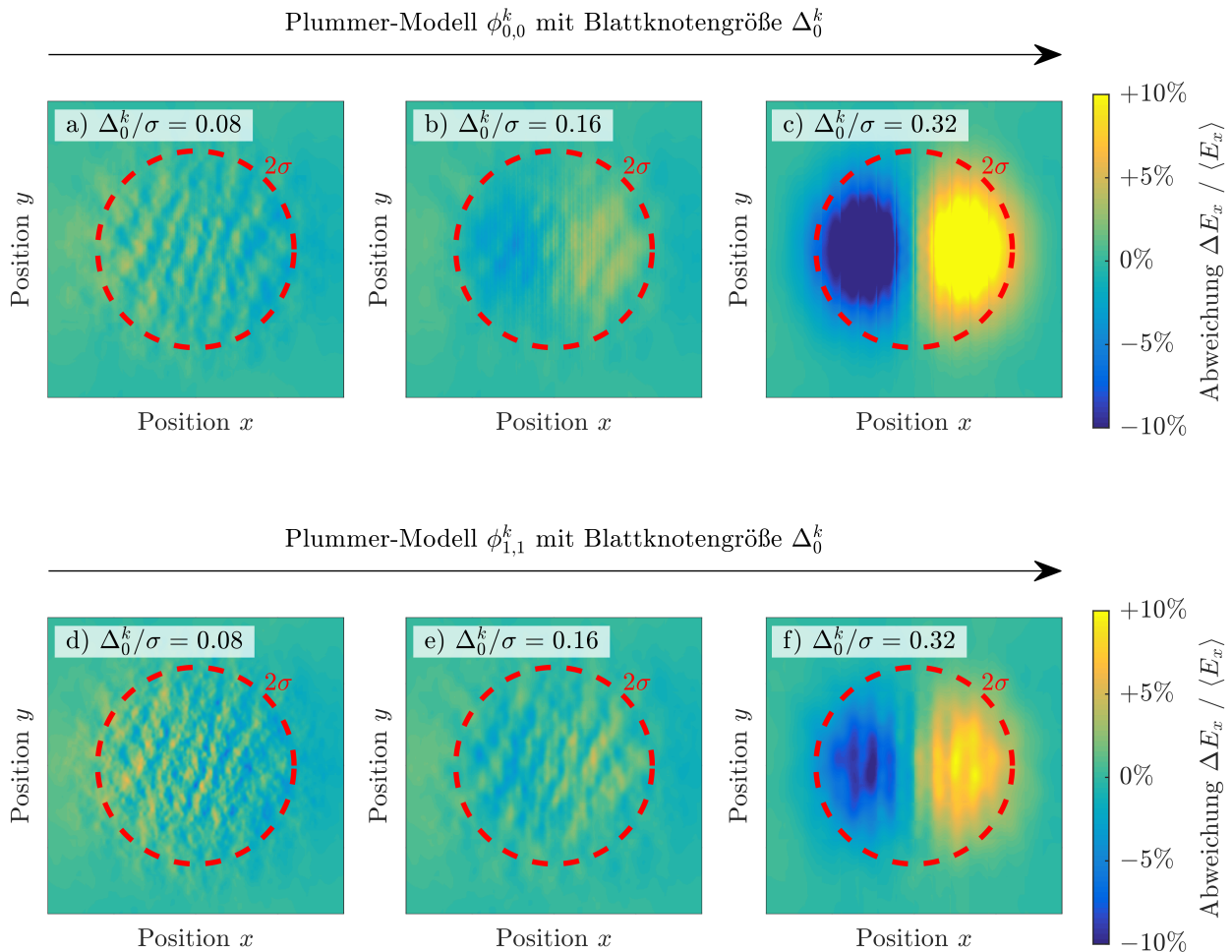


Abbildung 3.20.: Das Schaubild vergleicht die lokale Feldabweichung der Plummer-Nahfeldmodellierung, ϕ_{n_0,l_0}^k , gegenüber der analytischen Feldlösung einer gaußschen Ladungsdichteverteilung für unterschiedlichen Blattknotengrößen, Δ_0^k . Für zu kleine Blattknoten wird bei $\phi_{0,0}^k$ in a) und bei $\phi_{1,1}^k$ in d) die Granularität der Makroteilchenverteilung sichtbar. Die Bildausschnitte b) und e) zeigen die Abweichung von $\phi_{0,0}^k$ und $\phi_{1,1}^k$ bei der optimalen Blattknotengröße. Bei zu großen Blattknoten in c) für $\phi_{0,0}^k$ bzw. in f) für $\phi_{1,1}^k$ wird die Feldstärke systematisch unterschätzt.

Nahfeldmodell	Aufwand Fernfeldapprox.	Aufwand Nahfeldapprox.
$\phi'_{\text{P2P}} (\Delta_0^{\text{P2P}}/\sigma = 0.17)$	1.254	0.528
$\phi'_{\text{P2P}} (\Delta_0^{\text{P2P}}/\sigma = 0.08)$	1.484	0.277
$\phi_{0,0}^k (\Delta_0^k/\sigma = 0.16)$	0.478	0.011
$\phi_{0,0}^k (\Delta_0^k/\sigma = 0.08)$	1.484	0.011
$\phi_{1,1}^k (\Delta_0^k/\sigma = 0.16)$	0.478	0.063
$\phi_{1,1}^k (\Delta_0^k/\sigma = 0.08)$	1.484	0.066

Tabelle 3.2.: Relative Anzahl der Rechenoperationen für die FMM Feldauswertung mit Nahfeldapproximation auf Basis der Plummer-Potentiale, ϕ_{n_0,l_0}^k . Die Zahlwerte zeigen den Vergleich zur Anzahl der Rechenoperationen für die teilchenbasierte FMM mit modifizierter Nahfeldwechselwirkung, ϕ'_{P2P} , für die optimale Makroteilchengröße von $\Delta_0^{\text{P2P}}/\sigma \approx 0.23$.

der Aufwand zur Fernfeldapproximation bei den Plummer-Modellen, ϕ_{n_0,l_0}^k , identisch mit dem teilchenbasierten Modell, ϕ'_{P2P} , für die Makroteilchengröße $\Delta_0^{\text{P2P}}/\sigma \approx 0.08$. Dies zeigt, dass nach 6 Verfeinerungsebenen bei einer Blattknotengröße $\Delta_0^k/\sigma \approx 0.08$ in beiden Fällen die maximale räumliche Auflösung der Baumstruktur erreicht ist.

Die Studie zur Modellierung der Nahfeldwechselwirkung auf Basis der Methode selbstkonsistenter Felder zeigt, dass durch die Verwendung von verallgemeinerten Plummer-Potentialen, ϕ_{n_0,l_0}^k , die numerische Effizienz der FMM Feldauswertung gegenüber dem teilchenbasierten Modell, ϕ'_{P2P} , gesteigert werden kann. Ähnlich wie bei einer gitterbasierten Methode reduziert das vereinfachte Modell der Nahfeldwechselwirkung die räumliche Auflösung der Ladungsdichteverteilung zu Gunsten einer schnelleren Auswertung des Raumladungsfelds. Letzteres ist insbesondere bei Anwendungen der FMM für Strahldynamiksimulationen interessant, da die Makroteilchenapproximation der Phasenraumverteilung eines Teilchenstrahls eine kollisionsfreie Modellierung der Raumladungswechselwirkung erfordert. Somit bietet die Kombination der FMM mit den verallgemeinerten Plummer-Potentialen eine nützliche Alternative zur gitterbasierten Interpolation der Makroteilchenapproximation einer kontinuierlichen Raumladungsdichteverteilung.

3.4. Strahldynamiksimulationen mit der schnellen Multipolmethode

Im Rahmen dieser Arbeit wird die schnelle Multipolmethode (engl. Fast Multipole Method, FMM) in eine vorhandenen Simulationssoftware zur Berechnung der Dynamik geladener Teilchenstrahlen unter dem Einfluss von elektromagnetischen Feldern implementiert. In der Simulation wird die Phasenraumentwicklung einer Makroteilchenapproximation des Teilchenstrahls durch Integration der Bewegungsgleichungen für Makroteilchen simuliert. Die Auswertung der Wechselwirkungskräfte zwischen den Makroteilchen mit der FMM bildet dabei das zentrale Element der Berechnungen.

3.4.1. Modifikation der Baumstruktur für relativistische Teilchenstrahlen

Weil die FMM zur Approximation von elektrostatischen Wechselwirkungsfeldern genutzt wird, sind für relativistische Teilchenstrahlen die Eigenschaften der Ladungsdichteverteilung im mitbewegten Inertialsystem ausschlaggebend. Dazu werden die Makroteilchenpositionen mittels einer Lorentz Transformation in das mittlere Ruhesystem des Teilchenstrahls abgebildet. Geometrisch entspricht diese Transformation einer Dehnung der Ladungsdichteverteilung entlang der Strahlrichtung um den relativistischen Faktor γ . Abbildung 3.21 visualisiert am Beispiel der Strahlerzeugung innerhalb eines Photoinjektors drei unterschiedliche Formen, welche die transformierte Ladungsdichteverteilung im mitbewegten Inertialsystem annehmen kann. Zu Beginn der Teilchenemission aus der Photokathode, bei $t = 0$, ist die longitudinale Ausdehnung, σ_l , signifikant kleiner als die transversale Ausdehnung, σ_t , der Ladungsdichteverteilung. Außerdem ist die Energie des Teilchenstrahls klein und somit die relativistische Dehnung $\gamma \sim 1$. Dementsprechend liegt im mitbewegten Inertialsystem eine oblate Ladungsdichteverteilung vor. Im Anschluss an die Teilchenemission erfolgt der Übergang zu einer sphärischen Ladungsdichteverteilung bei $t \approx 25$ ps. Mit zunehmender Strahlenergie vergrößert sich die relativistische Dehnung, $\gamma \gg 1$, sodass ab $t \leq 40$ ps die Ladungsdichteverteilung im mitbewegten Inertialsystem prolata deformiert ist.

Aufgrund des Konvergenzverhaltens der FMM Multipoloperationen gemäß (3.28) ist eine Baumstruktur mit räumlich würfelförmig unterteilten Knoten vorteilhaft. Um dies bei einer anisotropen Verteilung der Ladungsdichte zu erreichen, bietet sich die Kombination unterschiedlicher Untergliederungsstrategien an. Abbildung 3.22 zeigt die entsprechenden Baumstrukturen für eine räumlich oblate 3.22 a), sphärische 3.22 b) und prolata 3.22 c) Ladungsdichteverteilung. Für die oblate Verteilung in Abb. 3.22 a) werden durch eine Vier-Knotenuntergliederung in der transversalen Ebene binnen drei Verfeinerungslevel Knoten mit würfelförmigen Teilgebieten erzeugt. Bei der

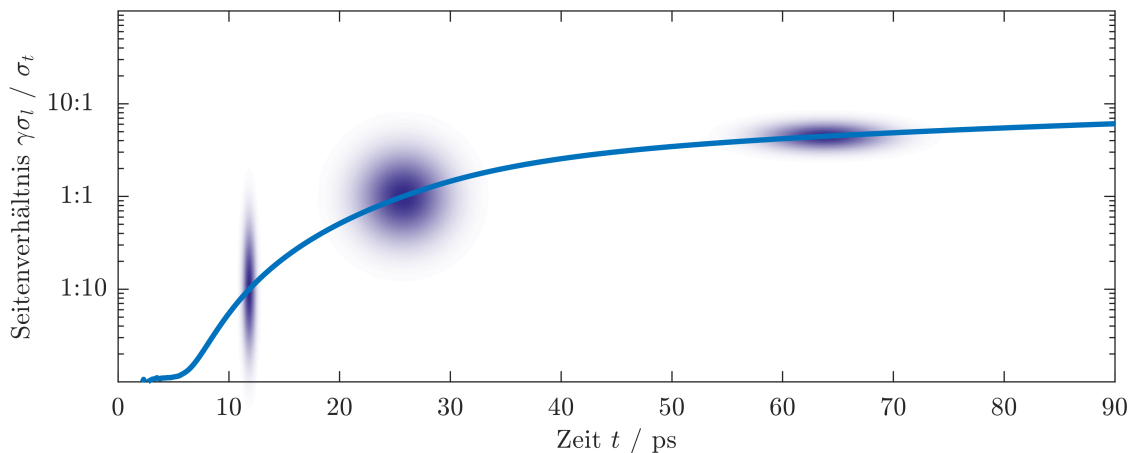


Abbildung 3.21.: Verhältnis aus longitudinaler, $\gamma\sigma_l$, und transversaler, σ_t , Ausdehnung der Ladungsdichteverteilung im mitbewegten Inertialsystem eines Teilchenstrahls für die Strahlgenerierung innerhalb eines Photoinjektors. Während und kurz nach Teilchenemission, ab $t = 0$, ist die Ladungsdichteverteilung des Teilchenstrahls oblat deformiert. Mit zunehmender Strahlenregie erfolgt durch die Dehnung um den relativistische Faktor γ der Übergang von einer, bei $t \approx 25$ ps, sphärischen in eine, ab $t \geq 40$ ps, prolat deformierte Ladungsdichteverteilung.

sphärischen Verteilung in Abb. 3.22 b) kann direkt bei der Wurzel beginnend die gebräuchliche Acht-Knotenunterteilung angewendet werden. Für die prolat deformierte Ladungsdichteverteilung in Abb. 3.22 c) wird eine Zwei-Knotenuntergliederung genutzt. Durch die Anpassung der Untergliederungsstrategie an die Form der Ladungsdichteverteilung werden Knoten mit einer räumlich weitestgehend homogenen Teilchenverteilung erzeugt. Dies hat gegenüber einer nicht angepassten Baumstruktur zwei Vorteile. Erstens verkleinert sich die Anzahl der Knoten innerhalb der Baumstruktur insgesamt, weil im Vergleich zu einer reinen Acht-Knotenunterteilung weniger Verfeinerungsebenen nötig sind. Zweitens reduziert sich der Anteil räumlich weit ausgedehnter Blattknoten, die eine stark asymmetrische Verteilung von nur wenigen Teilchen repräsentieren. Letztere sind insbesondere im Hinblick auf das Admissibilitätskriterium der Fernfeldapproximation problematisch. Bei numerischen Tests der Implementierung hat sich gezeigt, dass die FMM mit kombinierter Untergliederungsstrategie im Vergleich zur FMM mit konventioneller Acht-Knotenunterteilung für die untersuchten Anwendungsfälle um bis zu einem Faktor zwei schneller ist.

3.4.2. Modifikation der Raumladungsfelder während der Strahlerzeugung

Um Dynamik der Strahlerzeugung innerhalb des Injektorabschnitts simulieren zu können, sind zusätzliche Anpassungen der Implementierung erforderlich. Beim allgemein genutzten Verfahren

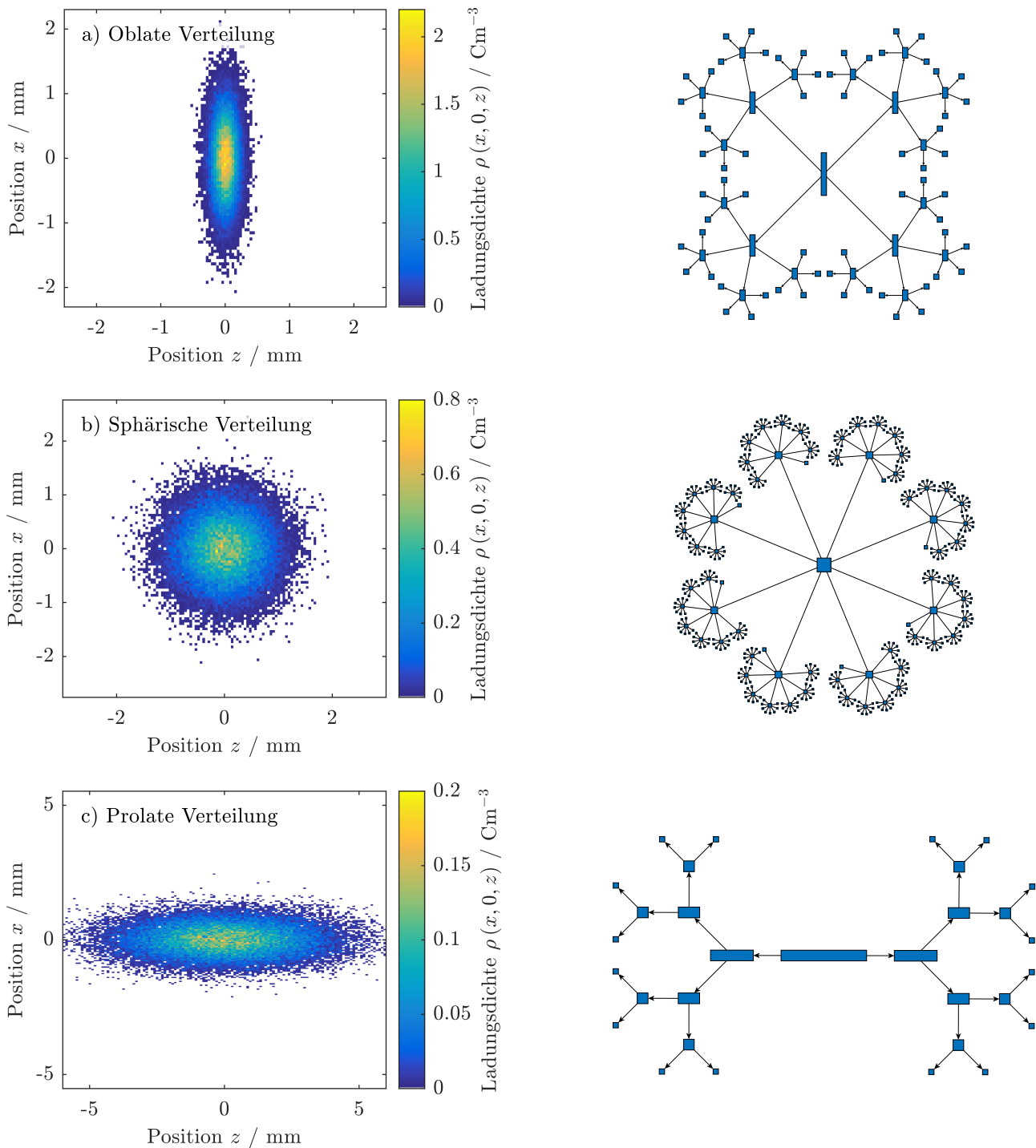


Abbildung 3.22.: Kombination unterschiedlicher Untergliederungsstrategien zur Erzeugung würfelförmiger Knotengebiete für eine a) oblate, b) sphärische und c) prolate Ladungsdichteverteilung. Bei der Strahldynamiksimulation innerhalb des Injektorabschnitts durchläuft die Form der Ladungsdichteverteilung alle drei unterschiedlichen Phasen.

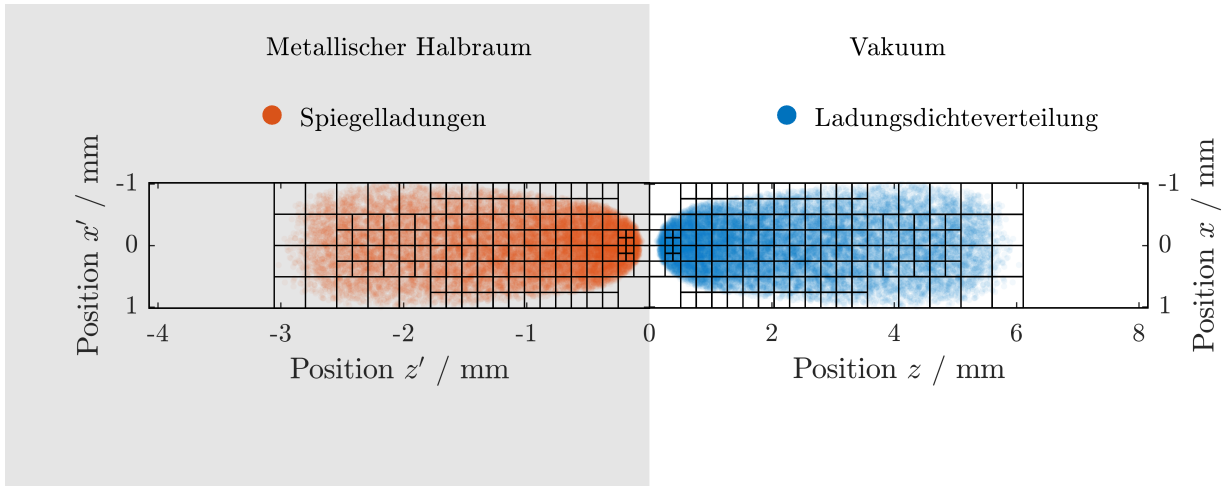


Abbildung 3.23.: Methode der Spiegelladungen zur Berechnung der modifizierten Wechselwirkung in der Umgebung eines elektrisch leitfähigen Halbraums, $\sigma \rightarrow \infty$, für $z \leq 0$. Bei der Anwendung der FMM werden zusätzlich zu den Knotenwechselwirkungen innerhalb der Ladungsdichteverteilung die Wechselwirkungen mit den Spiegelladungen ausgewertet.

wird die Strahlerzeugung als Teilchenemission aus einem geerdeten, perfekt leitfähigen Halbraum modelliert. Die Halbraumgrenze entspricht dabei der Oberfläche einer planaren Photokathode. Die Randbedingungen an der Kathodenoberfläche modifizieren die Greensche Funktion der Raumladungswchselwirkung zwischen den Teilchen. Diese Modifikation kann durch die Methode der Spiegelladungen beschrieben werden. Abbildung 3.23 zeigt die entsprechend an der Grenzfläche des Halbraums, bei $z = 0$, gespiegelte Ladungsdichteverteilung gegennamiger Polarität.

Algorithmisch betrachtet müssen abgesehen von den Wechselwirkungstermen der ursprünglichen Baumstruktur zusätzlich die Wechselwirkungsterme der entsprechenden Spiegelungen ausgewertet werden. Hierzu können die Multipolmomente, $\tilde{M}_{l,m}^{\tilde{k}}$, für die Fernfeldapproximation des Knotens, \tilde{k} , aus der gespiegelten Baumstruktur über den algebraischen Zusammenhang [KP06]

$$\tilde{M}_{l,m}^{\tilde{k}} = -(-1)^{l+m} M_{l,m}^k \quad (3.50)$$

mit den Multipolmomenten, $M_{l,m}^k$, eines Knotens, k , aus der ursprünglichen Baumstruktur bestimmt werden. Dementsprechend entfallen die Berechnung (P2M) und die Translation (M2M) der Multipolmomente, $\tilde{M}_{l,m}^{\tilde{k}}$, innerhalb der gespiegelten Baumstruktur. Stattdessen erfolgt direkt im Anschluss an die Auswertung der eigentlichen Knotenwechselwirkungen (M2L, P2P) eine zweite Traversierung der Wechselwirkungen zwischen den Quellknoten, \tilde{k} , der gespiegelten und den Zielknoten, k , der ursprünglichen Baumstruktur. Die zweite Traversierung unterscheidet sich dahingehend, dass anstatt der bezüglich des Knotenursprungs, \mathbf{r}_k , definierten Multipolmomente, $M_{l,m}^k$, die bezüglich des gespiegelten Knotenursprungs, $\mathbf{r}_{\tilde{k}}$, definierten Multipolmomente, $\tilde{M}_{l,m}^{\tilde{k}}$,

ausgetauscht werden.

Für die numerische Effizienz ist dabei entscheidend, dass das Admissibilitätskriterium gemäß (3.19) bereits bei einer möglichst kleinen Verfeinerungsebene der Baumstruktur erfüllt wird. Dazu müssen räumliche Überlappungen zwischen den Quellknoten, \tilde{k} , der gespiegelten und den Zielknoten, k , der ursprünglichen Baumstruktur vermieden werden. Um dies zu gewährleisten, wird der Knotenursprung, r_0 , des Wurzelknotens, $k = 0$, so gewählt, dass die resultierende Baumstruktur vollständig im Raumgebiet $z > 0$ definiert ist. Dadurch ergibt sich der in Abb. 3.23 sichtbare Versatz der Baumstruktur gegenüber der räumlichen Mitte der eigentlichen Ladungsdichteverteilung.

Die Translationsoperationen (L2L) sowie die Auswertung der Basisfunktionen zur Fernfeldapproximation (L2P) sind für die lokalen Momente der Ladungen, $L_{l,m}^k$, und Spiegelladungen, $\tilde{L}_{l,m}^k$, identisch und können für beide Beiträge simultan durchgeführt werden. Aufgrund der unterschiedlichen Parität des elektrischen und magnetischen Felds dürfen die lokalen Momente, $L_{l,m}^k$ und $\tilde{L}_{l,m}^k$, jedoch erst auf der Ebene der Blattknoten miteinander verrechnet werden. Dazu werden die Felder der Ladungen und der Spiegelladungen gemäß (3.24) und (3.25) separat bestimmt und anschließend mittels des Superpositionsprinzips zum effektiven Gesamtfeld überlagert.

Insgesamt erfüllt der polynomiale Rechenaufwand, $\tilde{P}(N, l_0)$, zur Auswertung der modifizierten Wechselwirkungen gemäß (3.29) stets

$$\tilde{P}(N, l_0) \leq \frac{1}{2}P(2N, l_0). \quad (3.51)$$

Anschaulich entspricht dieser Zusammenhang der Beobachtung, dass innerhalb der globalen Baumstruktur der Ladungsdichteverteilung aus $2N$ Wechselwirkungstermen in Abb. 3.23 lediglich die Hälfte aller Wechselwirkungen ausgewertet wird. Im Verlauf der Strahldynamiksimulation nimmt der Abstand der Ladungsdichteverteilung von der Grenzfläche des Halbraums bei $z = 0$ stetig zu. Dementsprechend ist das Admissibilitätskriterium bereits bei immer kleineren werdenden Verfeinerungsebenen erfüllt. Schlussendlich reduziert dies den zusätzlichen Rechenaufwand durch die modifizierte Wechselwirkung auf eine einzige Fernfeldapproximation des gespiegelten Wurzelknotens, $\tilde{k} = 0$. Im Gegensatz zu nicht adaptiven Methoden erfolgt durch das adaptive Admissibilitätskriterium der FMM nach (3.19) automatisch ein konsistenter Übergang von der durch die Kathodenoberfläche modifizierten Wechselwirkung während der Strahlerzeugung hin zur Raumladungswechselwirkung eines im Freiraum propagierenden Teilchenstrahls.

3.4.3. Validierung und Optimierung der Fernfeldapproximation

Für typische Anwendungen wird der Einfluss der Wechselwirkungsfelder auf die Dynamik der Makroteilchen gewöhnlich über mehrere tausend Zeitschritte integriert. Dabei übertragen sich Ungenauigkeiten in der Raumladungsfeldapproximation auf die Ladungsdichteverteilung und somit auch auf die Wechselwirkungsfelder in den folgenden Zeitschritten. Durch die gegenseitige Kopplung von Ladungsdichteverteilung und Strahldynamik können sich anfängliche Ungenauigkeiten signifikant verstärken und somit auf die Simulationsergebnisse auswirken. Aus diesem Grund ist für die Strahldynamiksimulation eine möglichst genaue Approximation der Raumladungsfelder wünschenswert. Andererseits dominiert die Auswertung der Raumladungsfelder den numerischen Aufwand der Strahldynamiksimulation und sollte deshalb möglichst effizient erfolgen.

Zur Validierung der Ergebnisse einer Strahldynamiksimulation mit hierarchischer FMM Approximation der Wechselwirkungsfelder gegenüber der Referenzlösung mit direkter PPM Auswertung des Raumladungsfelds folgt ein Vergleich am Beispiel des DESY-PITZ Photoinjektors. Für eine detaillierte Übersicht zum experimentellen Aufbau sei an dieser Stelle verwiesen auf Stefan et al. [Ste10]. Die Fernfeldapproximation der FMM nutzt die Multipolordnung von $l_0 = 6$ mit dem Admissibilitätsparameter $\theta_0 = 0.65$. Für die Auswertung der direkten Wechselwirkungen nutzen beide Simulationen das Modell der modifizierten Nahfeldwechselwirkung mit einer Makroteilchengröße von $\Delta_0^{\text{P2P}} = 50 \mu\text{m}$. Die Phasenraumapproximation des Teilchenstrahls ist aufgrund des numerischen Aufwands für die Referenzlösung auf $N = 2.5 \cdot 10^5$ Makroteilchen begrenzt.

Abbildung 3.24 vergleicht in 3.24 a) die transversalen, ε_t , und in 3.24 b) die longitudinalen, ε_l , Strahlemittanzen, welche typische Kenngrößen für die Strahldynamik innerhalb eines Photoinjektors darstellen. Die Abweichung beider Größen gegenüber der Referenzlösung beträgt über die gesamte Simulationsdistanz von 5.74 m hinweg weniger als 0.5%. Die weiteren typischen Kenngrößen, wie z. B. die geometrische Breite, σ_x , und die energetische Dispersion, σ_E , des Teilchenstrahls, zeigen ebenfalls sehr gute Übereinstimmung. Abbildung 3.25 vergleicht die transversale Projektion der Phasenraumverteilung beim Verlassen des Photoinjektors bei Strahlposition $z = 5.74 \text{ m}$. Die Makroteilchenverteilung der Strahldynamiksimulation mit hierarchischer Approximation der Wechselwirkungsfelder ist mit der Referenzlösung konform.

Abbildung 3.26 zeigt eine Studie zum Einfluss der Multipolordnung, l_0 , und des Admissibilitätsparameters, θ_0 , auf die numerische Effizienz und die Ergebnistoleranzen einer Strahldynamiksimulation mit FMM Approximation der Raumladungsfelder. Die Simulationsergebnisse zeigen qualitativ ähnliche Konvergenzeigenschaften bezüglich der Multipolordnung und des Admissibilitätsparameters wie die Felddauswertung in Abb. 3.8. Für den untersuchten Parameterbereich fällt

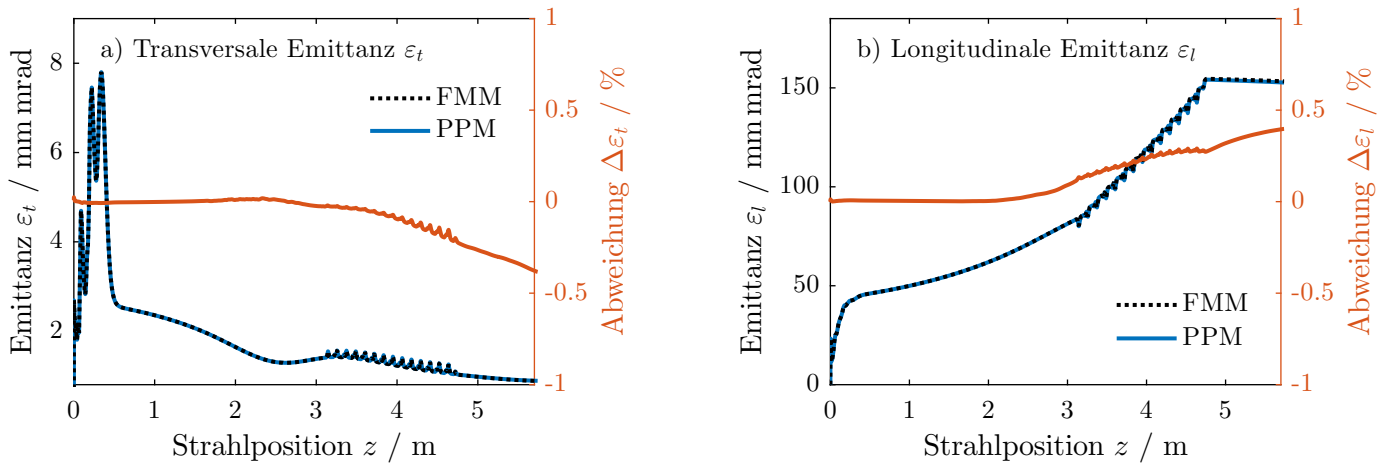


Abbildung 3.24.: Vergleich der transversalen, ε_t , und longitudinalen, ε_l , Emittanz zwischen einer Strahldynamiksimulation des PITZ Injektors mittels direkter PPM und hierarchischer FMM Berechnung der Raumladungswchselwirkung. Für $\theta_0 = 0.65$ und $l_0 = 6$ beträgt die Abweichung der FMM Approximation weniger als 0.5%.

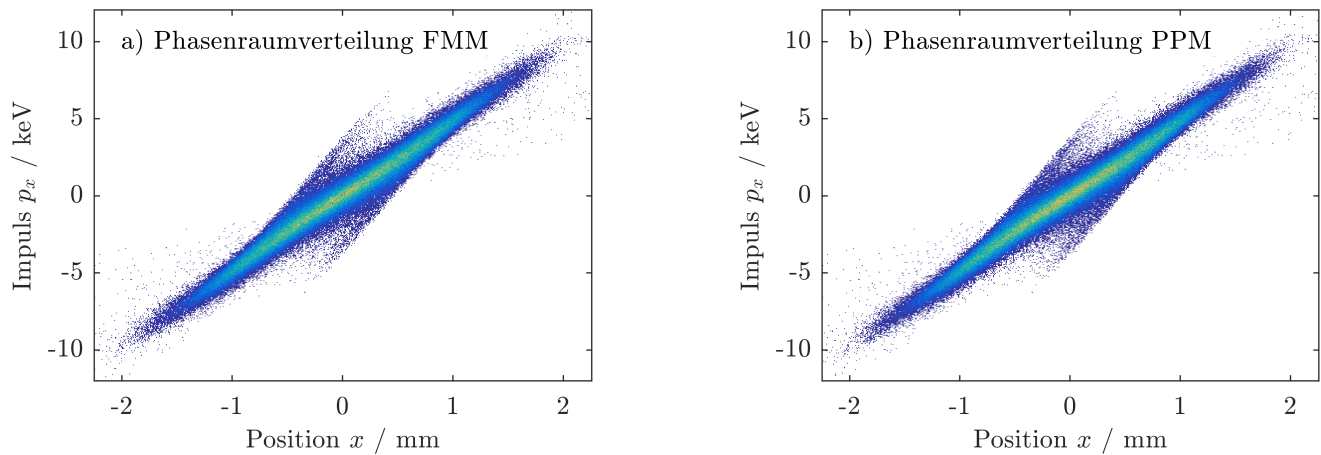


Abbildung 3.25.: Vergleich der Ergebnisse einer Strahldynamiksimulation mit a) FMM und b) PPM Berechnung der Raumladungswchselwirkung von $N = 2.5 \cdot 10^5$ Makroteilchen. Das Schaubild zeigt die transversale Phasenraumdichte bei Strahlposition 5.74 m des PITZ Injektors.

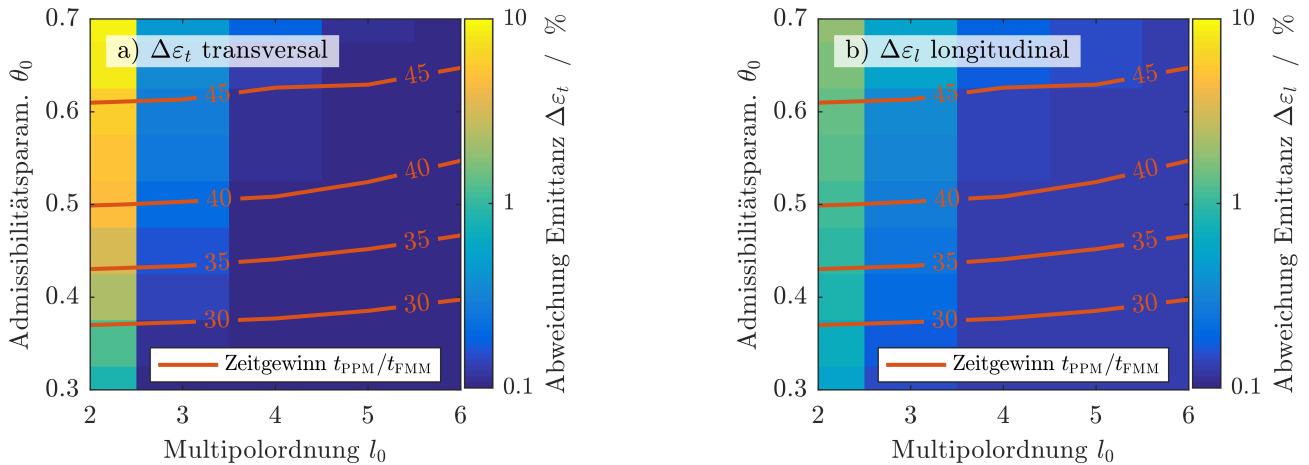


Abbildung 3.26.: Parameterstudie zum Einfluss der Multipolordnung, l_0 , und des Admissibilitaetsparameters, θ_0 , auf die Performanz und die Konvergenz einer FMM Strahldynamiksimulation am Beispiel des PITZ Photoinjektors. Die Abweichung der a) transversalen, ε_t , und b) longitudinalen, ε_l , Strahlemittanz im Vergleich zur PPM Referenzloesung dient als Konvergenzkriterium. Der Zeitgewinn bezieht sich auf die komplette Simulation von der Strahlgenerierung bis zum Ende des Injektorabschnitts bei 5.74 m für $N = 2.5 \cdot 10^5$ Makroteilchen.

auf, dass eine Erhöhung der Multipolordnung, l_0 , zu Gunsten eines weniger restriktiven Admissibilitaetskriteriums, θ_0 , die numerische Effizienz des Simulationsablaufs erhöht. Für die Parameterwahl $l_0 = 6$ und $\theta_0 = 0.65$ kann dadurch die Rechenzeit um Faktor 45 gegenüber der Referenzloesung reduziert werden. Gleichbedeutend ermöglicht die Anwendung der FMM eine signifikant verbesserte Phasenraumaufloesung durch die Nutzung einer um Faktor ~ 100 erhöhten Makroteilchendichte bei vergleichbarer Rechenzeit. Diese Eigenschaft macht die FMM Implementierung insbesondere zur gitterfreien Simulation der raumladungsdominierten Phasenraumdynamik während und nach der Strahlgenerierung im Injektorabschnitt von Teilchenbeschleunigern interessant.

3.4.4. Vergleich zwischen teilchenbasierter und gitterbasierter Methode

Die folgende Untersuchung zeigt drei Simulationsstudien für die raumladungsinduzierte Expansion einer kugelfoermigen Ladungsdichteverteilung. Die Eigendynamik des Systems kann für diesen Sonderfall analytisch beschrieben werden [Gre11]. Zusätzlich skaliert das Raumladungsfeld der Ladungsdichteverteilung linear mit dem Abstand zum Zentrum [Lap65], sodass während der Expansion die Emittanz der Teilchenverteilung erhalten bleibt [Buo94]. Dementsprechend sind derartige Teilchenstrahlen auch für technische Anwendungen [Lui04; Kho03] interessant.

In der numerischen Modellierung wird die Teilchenverteilung mit einer Gesamtladung von $Q =$

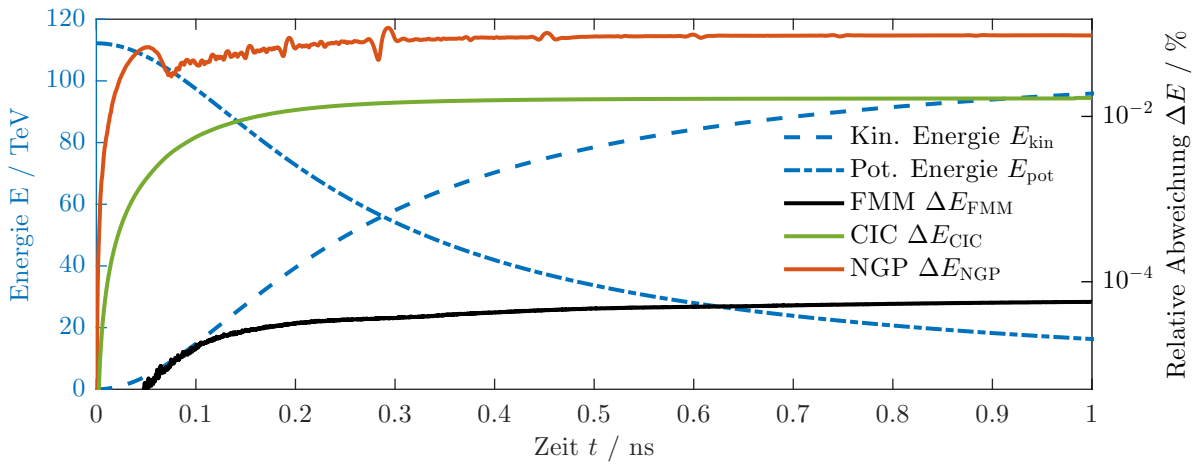


Abbildung 3.27.: Für eine expandierende Ladungsdichteverteilung ist die Summe der elektrischen Feldenergie, E_{pot} , und der kinetischen Teilchenenergie, E_{kin} , erhalten. Die relative Abweichung, ΔE , quantifiziert die Diskrepanz zwischen der momentanen Gesamtenergie, $E_{\text{pot}}(t) + E_{\text{kin}}(t)$, zur Zeit t und der elektrischen Feldenergie zu Simulationsbeginn, $E_{\text{pot}}(0)$, für die drei numerischen Modellierungen.

1 nC durch $N = 2 \cdot 10^6$ Makroteilchen approximiert. Um relativistische Effekte vernachlässigen zu können, werden außerdem Protonen anstatt von Elektronen modelliert. Die FMM Approximation nutzt eine Multipolentwicklung bis zur Ordnung $l_0 = 5$ und den Admissibilitätsparameter $\theta_0 = 0.5$. Bei den gitterbasierten Simulationen wird die Ladungsdichteverteilung durch einen zusätzlichen Zwischenschritt auf ein hexahedrisches Rechengitter abgebildet. Die Interpolation erfolgt mittels der CIC Methode oder anhand der nächstliegenden Gitterpunkte (NGP). Alle drei Simulationen verwenden eine fest vorgegebene Auflösung, $\Delta_0^{\text{P2P}} = \Delta_0^{\text{CIC}} = \Delta_0^{\text{NGP}}$, welche zu Simulationsbeginn ca. 3.3 % des Kugeldurchmessers entspricht.

Abbildung 3.27 zeigt die Umsetzung der elektrischen Feldenergie, E_{pot} , in die kinetische Teilchenenergie, E_{kin} , während der Expansion. Da die Gesamtenergie exakt erhalten ist, muss die Summe $E_{\text{pot}} + E_{\text{kin}}$ zu jedem Zeitpunkt, t , konstant sein. Die Abweichung, $\Delta E(t)$, entspricht dem Approximationsfehler für die Gesamtenergie bezüglich der elektrischen Feldenergie, $E_{\text{pot}}(0)$, zu Beginn der Expansion. Für die drei Strahldynamiksimulationen ist aufgrund numerischer Ungenauigkeiten bei der Feldauswertung und Zeitintegration die Gesamtenergie nur näherungsweise erhalten. Die numerische Abweichung der teilchenbasierten FMM Simulation ist im Vergleich zu den beiden gitterbasierten Verfahren allerdings um knapp zwei Größenordnungen kleiner.

Wird bei der Strahldynamiksimulation die analytische Feldlösung einer kugelförmigen Ladungsdichteverteilung angesetzt, dann ist, wie in Abb. 3.28 gezeigt, die Emittanz erwartungsgemäß konstant $\varepsilon_x = 0$. Demgegenüber ist für die Simulationen mit numerischer Auswertung des Raumladungsfelds eine leichte Zunahme der Emittanz zu beobachten. Dieser Effekt ist auf zwei Ursachen

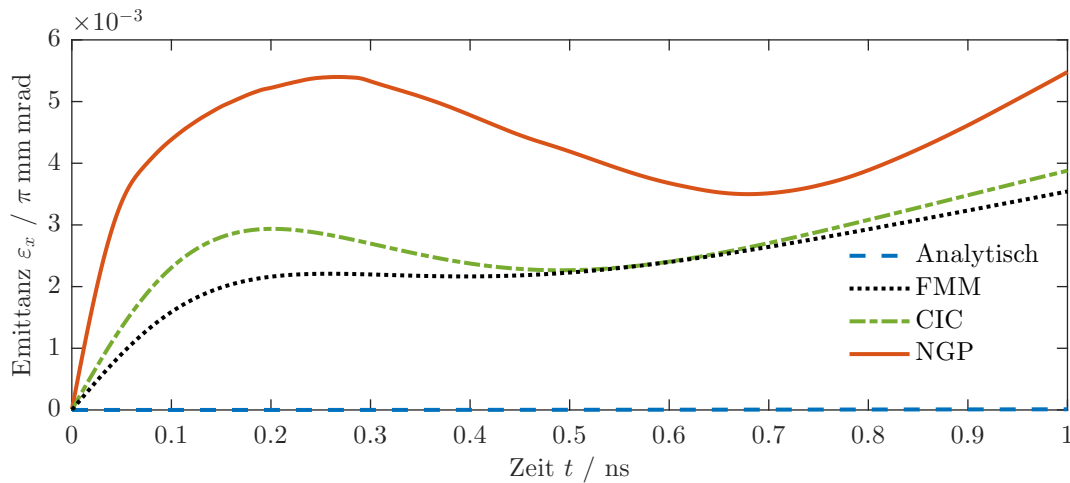


Abbildung 3.28.: Emittanz, ε_x , bei der Expansion einer kugelförmigen Ladungsdichteverteilung. Das Raumladungsfeld skaliert exakt linear mit dem Abstand zur Kugelmitte, sodass ε_x im analytischen Modell erhalten ist. Bei den numerischen Simulationen ist, durch die Granularität der Makroteilchenapproximation und den Approximationsfehler des Raumladungsfelds bedingt, ein Anstieg von ε_x zu beobachten.

zurückzuführen. Einerseits ist die numerische Auswertung des Raumladungsfelds fehlerbehaftet, sodass die Feldstärke nicht exakt linear mit dem Abstand zum Kugelzentrum skaliert. Eine genauere Feldapproximation, wie beispielsweise durch den Wechsel von der NGP zur CIC Methode, reduziert somit den Anstieg der Emittanz. Andererseits ist aufgrund der Granularität des Makroteilchenmodells die numerische Approximation der Ladungsdichteverteilung nicht exakt homogen und kugelförmig. Aus diesem Grund ist auch bei den numerisch genaueren CIC und FMM Simulationen ein Zunahme der Emittanz zu sehen. Letzteres kann wiederum durch eine Erhöhung der Makroteilchenanzahl, N , kompensiert werden.

Abbildung 3.29 zeigt den Verlauf der Emittanz, ε_x , entlang einer Unterteilung der Teilchenverteilung in 300 Scheiben für $t = 1.0$ ns. Zu diesem Zeitpunkt ist die Ladungsdichteverteilung im Vergleich zum anfänglichen QMW der Ausdehnung, $\sigma_x(0)$, auf $\sigma_x(t)/\sigma_x(0) \approx 6.89$ expandiert. Die teilchenbasierte FMM sowie die hybride FMM mit gitterbasierter CIC Interpolation liefern weitestgehend konsistente Ergebnisse. Dementsprechend eignen sich beide Methoden für das untersuchte Simulationsbeispiel ähnlich gut. Für die Simulation mit der NGP Methode ist hingegen deutlich der Einfluss des Rechengitters zu erkennen. Die Scheibenemittanz oszilliert mit der Periodenlänge $\lambda \approx 6.89 \Delta_0^{\text{NGP}}$. Es handelt sich um eine Modulation der Ladungsdichteverteilung, welche zu Simulationsbeginn durch den Approximationsfehler des Rechengitters entstanden ist und sich bei der Expansion zusammen mit der Teilchenverteilung ausgedehnt hat.

Zusammenfassend ergibt sich, dass die teilchenbasierte FMM tendenziell die genaueste Approximation der Raumladungswechselwirkung liefert. Das FMM Simulationsergebnis wird hauptsäch-

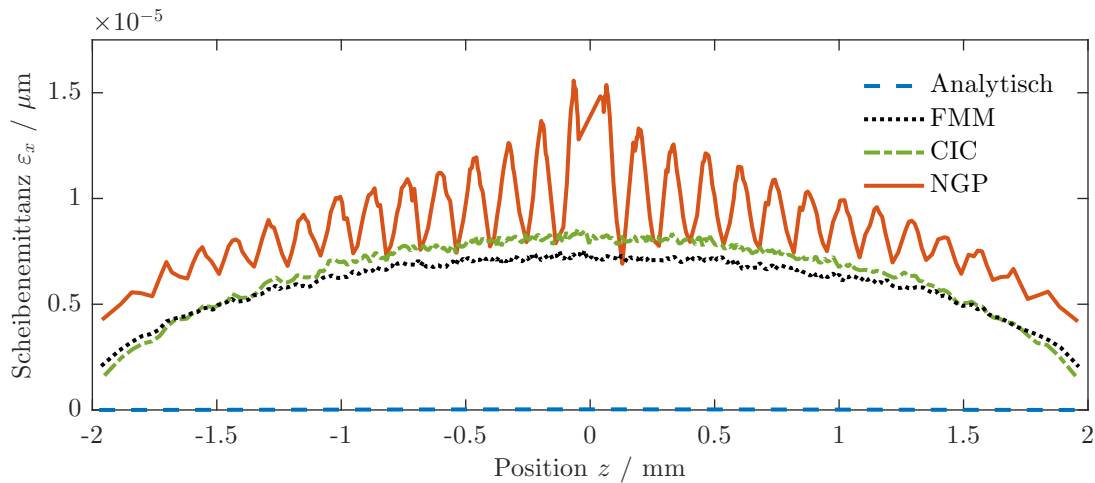


Abbildung 3.29.: Auswertung der Scheibenemittanz, ε_x , für die QMW Ausdehnung $\sigma_x(t)/\sigma_x(0) \approx 6.89$. Aufgrund einer unzureichenden Gitterauflösung zu Simulationsbeginn oszilliert die Scheibenemittanz für die NGP Methode mit der Periodenlänge $\lambda \approx 6.89 \Delta_0^{\text{NGP}}$.

lich durch die Granularität des Makroteilchenmodells für die Ladungsdichteverteilung beeinflusst. Durch eine Erhöhung der Makroteilchenanzahl, $N \rightarrow \infty$, bei gleichzeitiger Verfeinerung der räumlichen Auflösung, $\Delta_0^{\text{P2P}} \rightarrow 0$, kann die Abweichung verringert werden. Die CIC Methode liefert für eine räumlich weitestgehend homogene Ladungsdichteverteilung ebenfalls konsistente Ergebnisse. Die Simulationsergebnisse sind insbesondere dann vergleichbar mit der FMM Approximation, wenn die numerischen Abweichungen durch eine limitierte Makroteilchenanzahl, N , dominiert werden. Die NGP Methode zeigt im direkten Vergleich erwartungsgemäß die größten Abweichungen.

3.5. Modellierung von Teilchenstrahlen mit Energiedispersion

Die vereinfachte Modellierung von Raumladungsfeldern als elektrostatisches Coulombpotential im mitbewegten Inertialsystem ist strenggenommen nur für eine monoenergetische, gleichförmig bewegte Ladungsdichteverteilung anwendbar. Im allgemeinen Fall muss das Raumladungsfeld numerisch aufwändig auf Basis der zeitlich retardierten Liénard-Wiechert (LW) Potentiale ausgewertet werden. Unter der Voraussetzung, dass die Strahldynamik nicht durch Retardierungs- und Abstrahlungseffekte dominiert wird, kann die Methode der Energieklassierung [Fub06] eine numerisch günstige Alternative für die Approximation der Raumladungsfelder einer Ladungsdichteverteilung mit großer Energiedispersion sein. Bei dieser Methode wird die energetische Verteilung der Makroteilchen durch ein Histogramm mit B Energieklassen approximiert. Anschließend wird für jede Energieklasse separat das Raumladungsfeld der quasi-monoenergetischen Makroteilchenverteilung in Form eines elektrostatischen Coulombpotentials ausgewertet. Das Raumladungsfeld des Teilchenstrahls ergibt sich durch Superposition der separat berechneten Felder, $\mathbf{E}_b(\mathbf{x})$ und $\mathbf{B}_b(\mathbf{x})$, aller Energieklassen, $b = 1 \dots B$, gemäß

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) \approx \sum_{b=1}^B \mathbf{E}_b(\mathbf{x}), \quad (3.52)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}) \approx \sum_{b=1}^B \mathbf{B}_b(\mathbf{x}). \quad (3.53)$$

Abbildung 3.30 zeigt ein Modell des longitudinalen Phasenraums eines Teilchenstrahls direkt nach dem Abschluss der Strahlgenerierung innerhalb eines Photoinjektors. Die Makroteilchenverteilung ist bezüglich den longitudinalen Koordinaten z , p_z stark korreliert und weist eine relative Energieabweichung von $\sigma_E/E \approx 30\%$ auf. Die Färbung der Makroteilchen zeigt die Untergliederung des Phasenraums in ein Histogramm mit $B = 10$ Energieklassen. Der Lorentz Faktor für die gemittelte kinetische Energie des Teilchenstrahls beträgt $\langle \gamma \rangle \approx 1.19$. Demgegenüber erstreckt sich der Lorentz Faktor für die Energieklassen von $\gamma_1 \approx 1.08$ bis $\gamma_{10} \approx 1.30$.

Abbildung 3.31 vergleicht die Abweichung des mit $B = 1$ und $B = 10$ Energieklassen approximierten Raumladungsfelds gegenüber der Superposition aller separat transformierter Einzelteilchenfelder für die in Abb. 3.30 visualisierte Ladungsdichteverteilung. Gegenüber der monoenergetischen Approximation reduziert die Verwendung von $B = 10$ Energieklassen die maximale Abweichung der transversalen Raumladungsfeldkomponente in Abb. 3.31 b) gegenüber Abb. 3.31 a) von über 5% auf knapp 1% Prozent. Bei der longitudinalen Raumladungsfeldkomponenten in Abb. 3.31 c) beträgt die Abweichung gegenüber Abb. 3.31 d) sogar knapp 15%. Die Feldstärke der

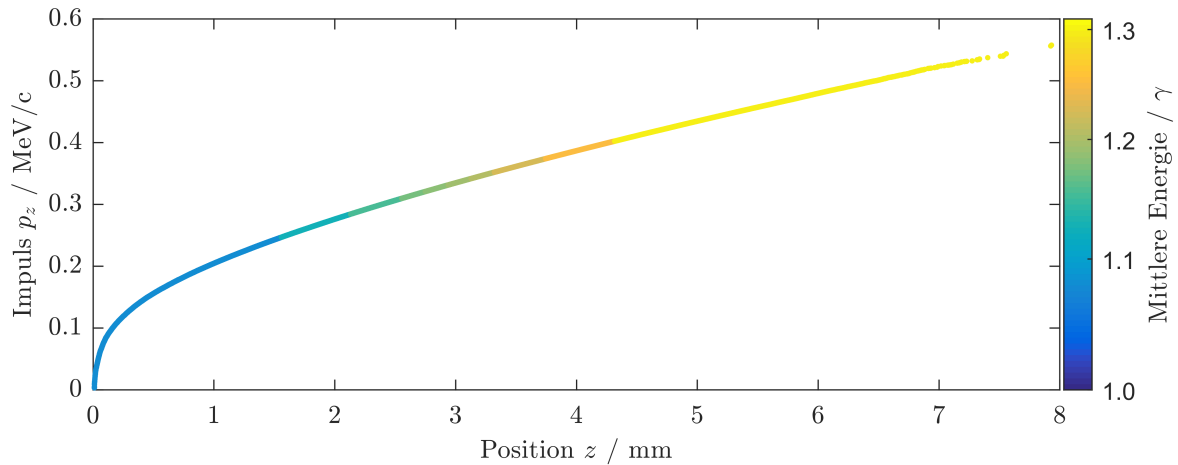


Abbildung 3.30.: Modell des longitudinalen Phasenraums nach Abschluss der Strahlgenerierung innerhalb eines Photoinjektors. Die Makroteilchenverteilung hat eine relative Energieabweichung von 30% und ist bezüglich der longitudinalen Koordinaten, z und p_z , maximal korreliert, $\rho(z, p_z) = 1$. Die Färbung zeigt die Aufteilung der Makroteilchen in $B = 10$ Energieklassen für den Wertebereich $1.0 \leq \gamma \leq 1.3$.

monoenergetischen Approximation ist in der vorderen Strahlhälfte für $z > 3$ mm systematisch zu groß und in der hinteren Hälfte für $z < 3$ mm systematisch zu klein. Der systematische Fehler folgt direkt aus der Diskrepanz zwischen der Einzelteilchenenergie und dem gemittelten Lorentz Faktor $\langle \gamma \rangle$. Durch eine bessere Übereinstimmung zwischen der Einzelteilchenenergie und dem lokalen Lorentz Faktor, γ_b , reduziert die Methode der Energieklassierung den systematischen Fehler der Feldapproximation. Insbesondere verbessert sich dadurch die Approximation des longitudinalen Raumladungsfelds in der Nähe der Halbraumgrenze bei $z = 0$ mm, was wiederum die Modellierung der Strahlgenerierung maßgeblich beeinflusst.

3.5.1. Schnelle Multipolmethode für Teilchenstrahlen mit Energiedispersion

Die Auswertung des mit Energieklassen approximierten Raumladungsfelds erfolgt auf Basis einer modifizierten FMM. Dazu werden im Vorfeld der FMM Berechnung die Makroteilchen der Ladungsdichteverteilung bezüglich ihres relativistischen Faktors γ sortiert und anschließend auf die entsprechenden Energieklassen verteilt. Die Wertebereiche der B Energieklassen können entweder äquidistant, optimiert bezüglich der Feldapproximation [Fub06] oder mittels eines adaptiven Bisektionsverfahrens festgelegt werden. Beim Bisektionsverfahren wird die Makroteilchenverteilung basierend auf dem gemittelten Impulsvektor solange untergliedert bis die gewünschte Anzahl der Energieklassen, B , erreicht ist. Anschließend wird für jede Energieklasse, b , separat das Raumladungsfeld der entsprechenden Ladungsdichteverteilung unter Verwendung des FMM Algorithmus an allen Makroteilchenpositionen ausgewertet und aufsummiert.

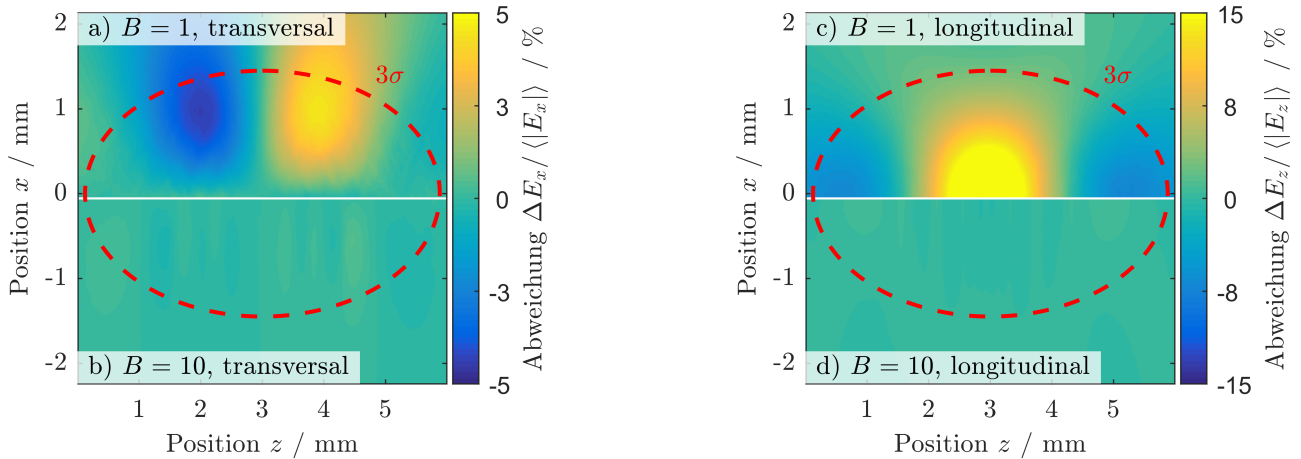


Abbildung 3.31.: Abweichung der transversalen a) und b) sowie longitudinalen c) und d) Raumladungsfeldapproximation einer Makroteilchenverteilung mit $\sigma_E/E \approx 30\%$ Energiedispersion für $B = 1$ bzw. $B = 10$ Energieklassen. Als Referenzlösung dient die Superposition aller separat transformierten Einzelteilchenfelder der Teilchenverteilung. Die rot gestrichelte Linie markiert die 3σ Ausdehnung der Ladungsdichteverteilung des Teilchenstrahls.

Die Grundlage zur Auswertung des Raumladungsfelds bildet eine Baumstruktur der gesamten Makroteilchenverteilung im mittleren Ruhesystem der entsprechenden Energieklasse b . Alle Makroteilchen, die nicht zur Energieklasse b gehören, fungieren als zusätzliche Stützstellen für die Feldauswertung. Für Knoten, die ausschließlich Stützstellen zur Feldauswertung enthalten, wird die Untergliederung bereits bei niedrigeren Verfeinerungsebenen beendet. Die Besonderheit bei der Kombination von FMM und Energieklassen besteht darin, dass im Gegensatz zum monoenergetischen Fall die Anzahl der Stützstellen für die Feldauswertung gegenüber der Anzahl der Wechselwirkungsterme deutlich überwiegt. Aus diesem Grund ist es vorteilhaft, die Baumstruktur bezüglich der Feldauswertung zu optimieren.

Ausgehend von der Annahme, dass die Zuordnung der Makroteilchen auf die Energieklassen, B , weitestgehend einer uniformen Verteilung entspricht, erzeugt eine Reduktion der maximal zulässigen Makroteilchenanzahl pro Blattknoten von N_k auf

$$N'_k := \frac{N_k}{\sqrt{B}} \quad (3.54)$$

eine unabhängig von B gleichbleibende Anzahl knoteninterner Wechselwirkungsberechnungen von

$$N'_k \times \sum_{b=1}^B N'_k = N'_k \times B \times N'_k = N_k^2. \quad (3.55)$$

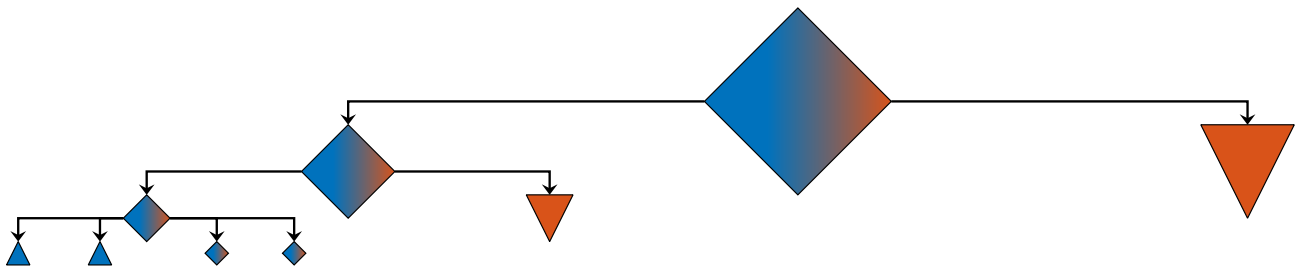


Abbildung 3.32.: Schematische Darstellung der adaptiven Baumstruktur für die Energieklasse $b = 1$ von $B = 10$. Vollständig blau eingefärbte Knoten (Delta) beinhalten ausschließlich die zu $b = 1$ zugeordneten Makroteilchen. Orange Knoten (Nabla) enthalten nur die Stützstellen zur Feldauswertung aus den übrigen Klassen $b = 2 \dots 10$. Im Übergangsbereich existieren gemischte Knoten (Rhombus). Alle Zweige der Baumstruktur, die weniger als die Auswertung von $N_k'^2$ direkten Wechselwirkungsberechnungen erfordern, werden nicht weiter verfeinert.

Zusätzlich können alle Äste der Baumstruktur, deren maximale Anzahl direkter Wechselwirkungsberechnungen mit den nächstgelegenen Nachbarknoten weniger als N_k^2 beträgt, abgeschnitten werden. Mit dieser Methode werden Knotenwechselwirkungen gegenüber Teilchenwechselwirkungen systematisch bevorzugt. Abbildung 3.32 zeigt dazu eine schematische Darstellung der optimierten Baumstruktur für die Energieklasse $b = 1$ der Feldapproximation in Abb. 3.31 mit $B = 10$.

Abbildung 3.33 vergleicht die Anzahl der FMM Rechenoperationen, die zur Auswertung des Raumladungsfelds einer Ladungsdichteverteilung mit und ohne Korrelation zwischen den Orts- und Impulskoordinaten des Phasenraums, also $\rho(z, p_z) = 1$ bzw. $\rho(z, p_z) = 0$, benötigt werden. Für die konventionelle Baumstruktur der FMM erhöht sich der numerische Aufwand der Feldauswertung mit $B = 10$ Energieklassen in beiden Fällen um nahezu Faktor 6.5 gegenüber der monoenergetischen Approximation $B = 1$. Aufgrund der ungleichmäßigen Verteilung der FMM Rechenoperationen auf die Knoten- und Teilchenwechselwirkungen liegt nahe, dass die Baumstruktur mit der Blattknotengröße N_k nicht optimal zur Problemstellung passt. Demgegenüber erzeugt eine adaptive Baumstruktur mit der reduzierter Blattknotengröße N_k' nach (3.55) eine gleichmäßigere Verteilung der FMM Rechenoperationen auf Knoten- und Teilchenwechselwirkungen. Für den unkorrelierten Phasenraum, $\rho(z, p_z) = 0$, sinkt dadurch der numerische Aufwand für $B = 10$ Energieklassen auf ca. Faktor 3 gegenüber der monoenergetischen Approximation $B = 1$. Für den korrelierten Phasenraum, $\rho(z, p_z) = 1$, profitiert die numerische Effizienz der FMM zusätzlich von der räumlichen Entkopplung der Raumladungswechselwirkung zwischen den einzelnen Energieklassen. Außerdem kann durch das Entfernen ungenutzter Äste der Baumstruktur die Anzahl der Multipoltranslationsoperationen (M2L, M2M und L2L) zusätzlich reduziert

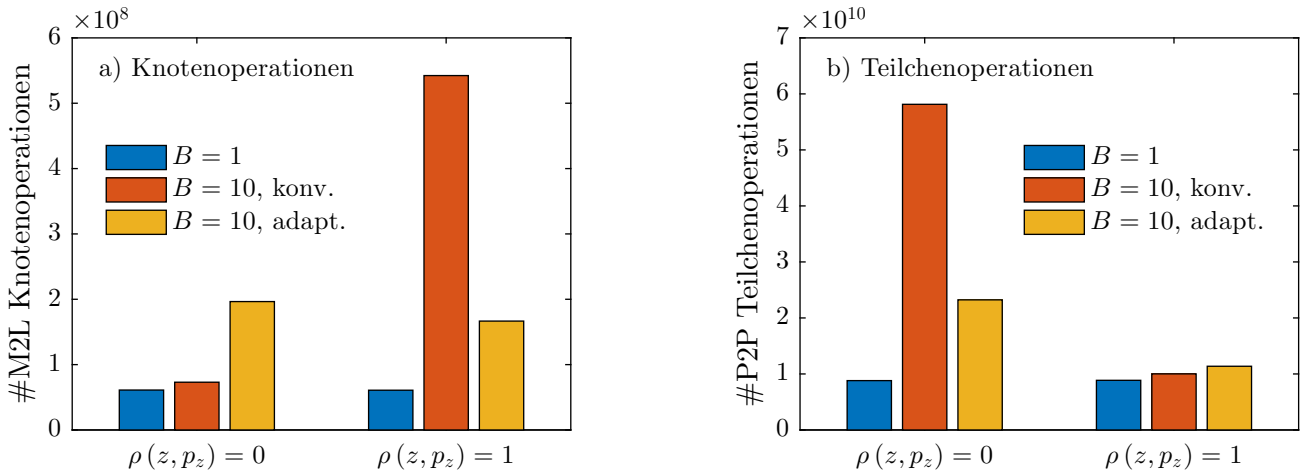


Abbildung 3.33.: Anzahl der FMM Knoten- und Teilchenoperationen für eine Raumladungsfeldapproximation mit $B = 1$ und $B = 10$ Energieklassen im Vergleich. Eine adaptive Baumstruktur erhöht die numerische Effizienz der Felddauswertung gegenüber der konventionellen Baumstruktur signifikant. Die numerische Effizienz der FMM profitiert von der räumlichen Entkopplung der Raumladungswechselwirkung einer Ladungsdichteverteilung mit korreliertem Phasenraum, $\rho(z, p_z) = 1$.

Verteilungstyp	QES Approx. $B = 1$	Energieklassen Approx. $B = 10$
$\rho(z, p_z) = 1$	9.2e-03 %	9.5e-03 %
$\rho(z, p_z) = 0$	9.2e-03 %	3.4e-02 %

Tabelle 3.3.: Vergleich des relativen Anteils direkter Wechselwirkungsberechnungen zwischen einer Makroteilchenverteilung mit korrelierter, $\rho(z, p_z) = 1$, und unkorrelierter, $\rho(z, p_z) = 0$, Phasenraumverteilung für $B = 1$ sowie $B = 10$ Energieklassen.

werden.

Tabelle 3.3 zeigt den minimal möglichen Anteil direkter Wechselwirkungsberechnungen, der für eine Baumstruktur mit nur einem Makroteilchen pro Blatt, $N_k = 1$, erreicht wird. Da sich die räumliche Ladungsdichte der korrelierten, $\rho(z, p_z) = 1$, nicht von der unkorrelierten, $\rho(z, p_z) = 0$, Makroteilchenverteilung unterscheidet, ergeben sich für $B = 1$ Energieklassen die selben Ergebnisse. Im Fall vom $B = 10$ Energieklassen erhöht sich der Anteil direkter Wechselwirkungsberechnungen bei der korrelierten Makroteilchenverteilung nur minimal. Für einen unkorrelierten Phasenraum müssen hingegen drei mal mehr direkte Wechselwirkungsauswertungen durchgeführt werden. Dies zeigt, dass sich durch die lokale Raumladungswechselwirkung einer korrelierten Makroteilchenverteilung die Effizienz der FMM Auswertung des Raumladungsfelds erhöht.

Abbildung 3.34 zeigt den Anstieg des numerischen Aufwands zur Auswertung des Raumladungsfelds in Abhängigkeit der Anzahl der Energieklassen B . Sowohl für die unkorrelierte, $\rho(z, p_z) = 0$, als auch für die korrelierte, $\rho(z, p_z) = 1$, Phasenraumverteilung steigt der Rechen-

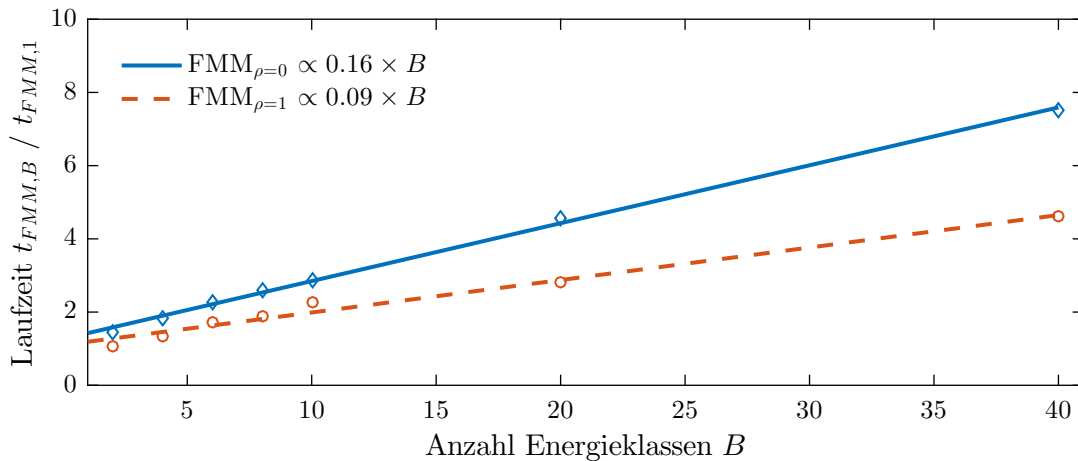


Abbildung 3.34.: Der numerische Aufwand zur Feldberechnung skaliert linear mit der Anzahl der Energieklassen, B . Die Proportionalitätskonstante für eine korrelierte Phasenraumverteilung, $\rho(z, p_z) = 1$, ist gegenüber dem unkorrelierten Fall um Faktor 1.75 kleiner.

aufwand linear mit der Anzahl der Energieklassen B an. Die Proportionalitätskonstante für die korrelierte, $\rho(z, p_z) = 1$, Phasenraumverteilung ist gegenüber dem unkorrelierten Fall um Faktor 1.75 kleiner. Dementsprechend eignet sich die hier implementierte Methode insbesondere gut zur Berechnung der Raumladungswechselwirkung einer stark korrelierten Phasenraumverteilung wie z. B. bei der Strahlgenerierung innerhalb eines Elektroneninjektors. Im für Anwendungen relevanten Parameterbereich, $B \leq 10$, erhöht die Methode der Energieklassen den numerische Aufwand zu Felddauswertung um ca. Faktor 2.0 bis 2.5 gegenüber der monoenergetischen Approximation.

Abbildung 3.35 zeigt die Abweichung des Raumladungsfelds in Abhängigkeit von der Anzahl der Energieklassen B . Für das longitudinale Raumladungsfeld der korrelierten Phasenraumverteilung, $\rho(z, p_z) = 1$, ist die Abweichung der monoenergetischen Approximation $B = 1$ mit fast 10% Unterschied besonders stark ausgeprägt. In diesem Fall lässt sich bereits mit $B = 8$ Energieklassen eine signifikant verbesserte Approximation des Raumladungsfelds mit weniger als 1% Abweichung zur Superposition der Einzelteilchenfelder erreichen. Bei der unkorrelierten Verteilung, $\rho(z, p_z) = 0$, findet effektiv eine räumliche Mittelung des Raumladungsfelds statt. Dementsprechend beträgt die Abweichung des Raumladungsfelds der unkorrelierten Phasenraumverteilung, $\rho(z, p_z) = 0$, mit $\langle \gamma \rangle \approx 1.19$ und $\sigma_E/E \approx 30\%$ gegenüber der monoenergetischen Approximation, $B = 1$, weniger als 0.5%. Prinzipiell ist es möglich durch Verwendung der optimierten Wertebereiche für die Energieklassen [Fub06] ein lineares Konvergenzverhalten bezüglich der Klassenanzahl B zu erzielen. Für das adaptive Bisektionsverfahren konvergiert die Approximation des Raumladungsfelds lediglich sublinear. Bei der Anwendung für Strahldynamiksimulationen überwiegen jedoch die Vorteile des Bisektionsverfahrens. Eine Aufteilung der Makroteilchenvertei-

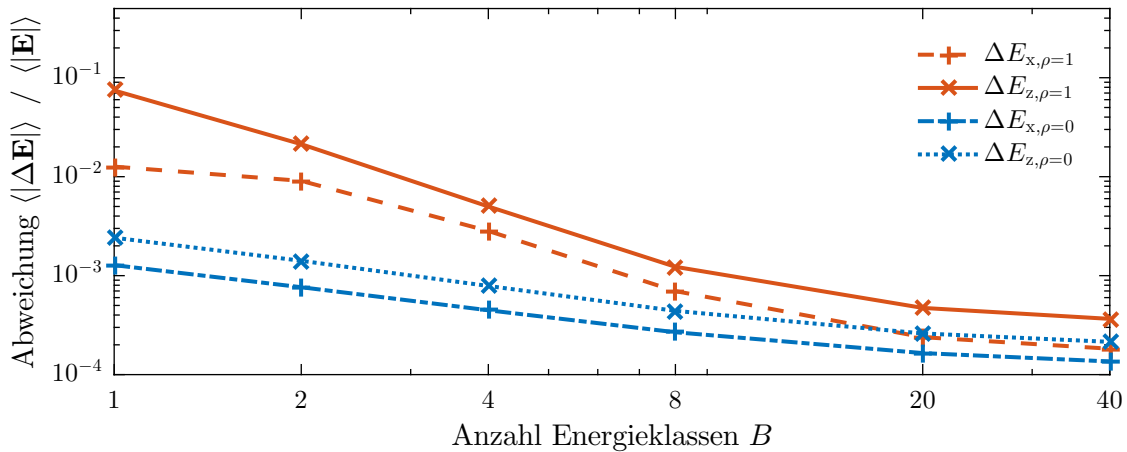


Abbildung 3.35.: Relative Abweichung des Raumladungsfelds gegenüber der Superposition der Einzelteilchenfelder in Abhängigkeit der Anzahl der Energieklassen, B . Für einen Teilchenstrahl mit korrelierter Phasenraumverteilung, $\rho(z, p_z) = 1$, verbessert die Verwendung von bereits wenigen Energieklassen, $B < 10$, die Feldapproximation signifikant. Bei einer unkorrelierten Phasenraumverteilung, $\rho(z, p_z) = 0$, ist der Nutzen weniger stark ausgeprägt.

lung zu annähernd gleichen Teilen auf die B Energieklassen begünstigt die numerische Effizienz der FMM Raumladungsfeldapproximation. Außerdem wird durch eine adaptive Anpassung der Energieklassen die Phasenraumverteilung des Teilchenstrahls besser repräsentiert, weshalb die Abweichung der Feldapproximation im Vergleich zur den anderen beiden Methoden geringer ausfällt.

3.5.2. Anwendungsbeispiel zur raumladungslimitierten Ladungsemission

Die Modellierung der raumladungsdominierten Strahldynamik innerhalb eines Photoinjektors ist ein vielversprechendes Anwendungsgebiet für Raumladungsfeldsimulationen auf Basis der Methode der Energieklassen. Abbildung 3.36 a) zeigt hierzu exemplarisch den Kathodenstrom, I , während einer raumladungslimitierten Strahlgenerierung in einer Elektronenquelle mit elektrostatischem Beschleunigungsfeld. Über eine Zeitspanne von ca. 0.22 ns wird eine Gesamtladung von $Q = 10$ nC auf der Kathodenoberfläche generiert. Der aktiv emittierende Flächenanteil der Photokathode ist kreisförmig und hat einen Durchmesser von 1.2 mm. Das elektrostatische Beschleunigungsfeld vor der Kathode beträgt konstant $E_z = -45$ MV m⁻¹.

In der numerischen Modellierung wird die Ladungsdichteverteilung der erzeugten Elektronen mittels $N = 10^7$ Makroteilchen approximiert. Die metallischen Randbedingungen auf der Kathodenoberfläche werden durch die Methode der Spiegelladungen abgebildet. Das Raumladungsfeld der emittierten Makroteilchen wirkt dem elektrostatischen Beschleunigungsfeld entgegen und

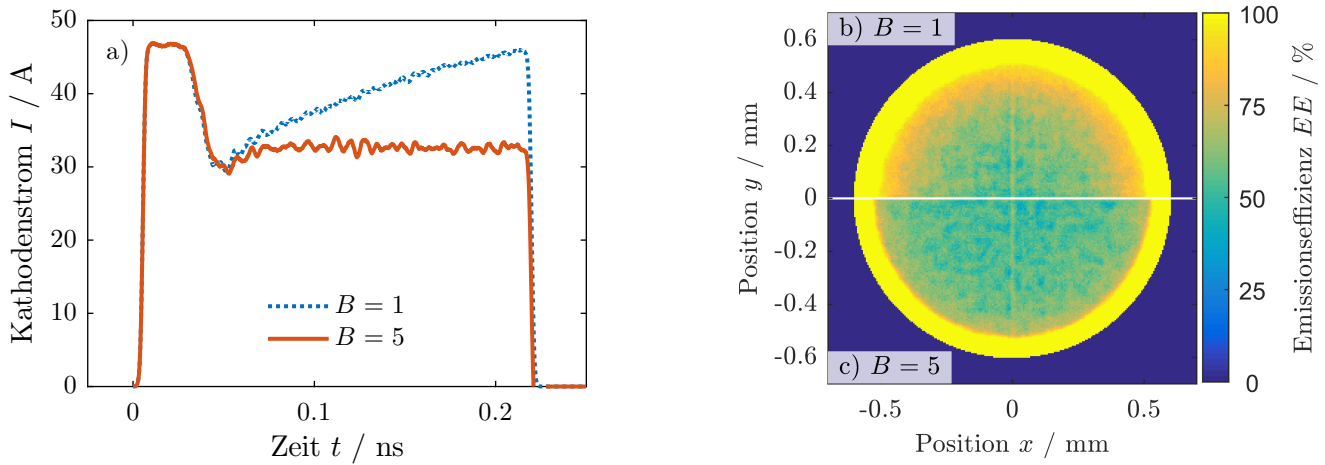


Abbildung 3.36.: Simulation des Kathodenstroms a) sowie der Emissionseffizienz b) und c) bei der raumladungslimitierten Strahlgenerierung in einer Elektronenquelle mit elektrostatischem Beschleunigungsfeld. Die Simulationsergebnisse für die monoenergetische Raumladungsfeldapproximation, $B = 1$, überschätzen systematisch den Kathodenstrom und die Emissionseffizienz. Für das erweiterte Modell der Raumladungswechselwirkung mit $B = 5$ Energieklassen saturiert der Kathodenstrom beim Erreichen des Raumladungslimits.

limitiert so den Kathodenstrom. Alle Makroteilchen, die aufgrund des Raumladungslimits rückwärts durch die Emissionsfläche hindurch propagieren, werden aus der Simulation entfernt. Die Emissionseffizienz, EE , in Abb. 3.36 b) und Abb. 3.36 c) zeigt den relativen Anteil der nicht reabsorbierten Makroteilchen in Abhängigkeit von der Position auf der Photokathode.

Nach dem Child-Langmuir Gesetz ist zu erwarten, dass sich in der Simulation nach einer transienten Anfangsphase ein konstanter Kathodenstrom einstellen wird. Die mit $B = 5$ Energieklassen durchgeführte Simulation zeigt ab $t > 50$ ps genau das zu erwartende Verhalten. Im Gegensatz dazu steigt bei der Simulation mit monoenergetischer Feldapproximation, $B = 1$, der Kathodenstrom nach dem Erreichen des Raumladungslimits wieder an. Die Diskrepanz ist eine direkte Folge der Mittlung des Lorentz Faktors, γ , unter Einbeziehung der hochenergetischen Makroteilchen an der Spitze des Elektronenstrahls. Aufgrund des räumlichen Abstands sollte das Raumladungsfeld der Makroteilchen am vorderen Strahlende keinen maßgeblichen Einfluss auf den Emissionsprozess haben. Über die Mittlung des Lorentz Faktors, γ , wird die longitudinale Komponente des lokalen Raumladungsfelds an der Emissionsfläche jedoch systematisch unterschätzt. Der Effekt resultiert in einer unphysikalischen Erhöhung des Kathodenstroms und der Emissionseffizienz in den Simulationsergebnissen mit monoenergetischer Raumladungsfeldapproximation.

3.6. Strahldynamiksimulation mit Liénard-Wiechert Feldern

Für viele technisch relevante Anwendungen von Beschleunigeranlagen beeinflussen Wechselwirkungseffekte durch elektromagnetische Strahlung maßgeblich die Dynamik des Teilchenstrahls. Beispielsweise basiert das Funktionsprinzip eines FEL auf der Wechselwirkung des Teilchenstrahls mit seinem eigenen Strahlungsfeld innerhalb des Undulators. Andererseits kann sich durch die Wechselwirkung mit kohärenter Synchrotronstrahlung entlang der Strahlführung eine Mikrostrukturinstabilität ausbilden, welche wiederum die FEL Leistung beschränkt. Derartige Effekte können durch das QES Wechselwirkungsmodell nicht abgebildet werden. Stattdessen erfordert die Simulation ein elektromagnetisches Modell der Raumladungswechselwirkung, welches die transienten Retardierungs- und Abstrahlungseffekte der relativistischen Ladungsträger beschreibt. Im Folgenden wird hierzu ein Simulationsprogramm mit teilchenbasierten Liénard-Wiechert (LW) Raumladungsfeldern aus einem vorangegangenen Forschungsprojekt [Che18] vorgestellt. Außerdem werden Erweiterungen des Programms zur Simulation einer THz Strahlungsquelle implementiert.

3.6.1. Modellierung der Liénard-Wiechert Wechselwirkung

Die LW Potentiale (2.17) und (2.18) liefern einen expliziten Ausdruck für das elektromagnetische Wechselwirkungsfeld [JWM11],

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{\mathbf{n}' - \boldsymbol{\beta}'}{\gamma'^2 (1 - \mathbf{n}' \cdot \boldsymbol{\beta}')^3 |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2} + \frac{\mathbf{n}' \times \left[(\mathbf{n}' - \boldsymbol{\beta}') \times \frac{\partial}{\partial t'} \boldsymbol{\beta}' \right]}{c (1 - \mathbf{n}' \cdot \boldsymbol{\beta}')^3 |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \right]_{t'=t_{\text{ret}}}, \quad (3.56)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \times \left[-\frac{\mathbf{n}'}{c} \right]_{t'=t_{\text{ret}}}, \quad (3.57)$$

welches eine relativistisch bewegte Punktladung, q , am Ort \mathbf{x} zur Zeit t erzeugt. Für die Auswertung werden die Position, \mathbf{x}' , die Geschwindigkeit, $c\boldsymbol{\beta}'$, der relativistische Faktor, γ' , und die Geschwindigkeitsänderung, $c\partial\boldsymbol{\beta}'/\partial t'$, der Punktladung zur retardierten Zeit, $t' < t$, benötigt. Letztere ergibt sich aus dem Schnittpunkt zwischen der Weltlinie der Punktladung, $[ct', \mathbf{x}'(t')]$, und dem rückwärtsgewandten Lichtkegel,

$$ds^2 := (ct - ct')^2 - (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 = 0, \quad (3.58)$$

für die Koordinaten, $[ct, \mathbf{x}]$, der Feldauswertung. Abbildung 3.37 visualisiert das Raumzeitdiagramm zur impliziten Retardierungsgleichung (3.58) für den eindimensionalen Fall.

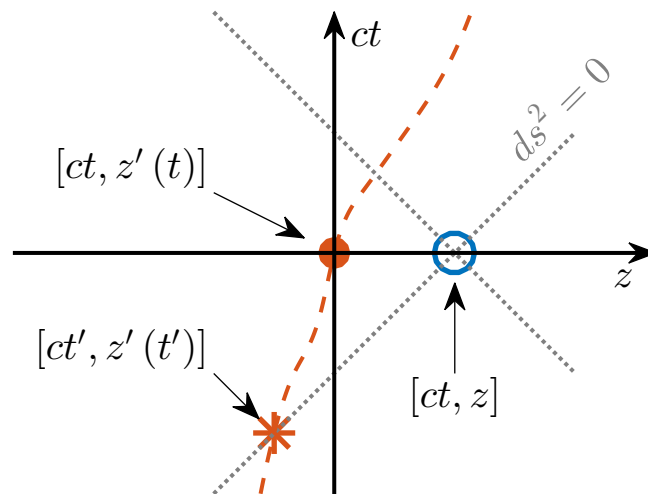


Abbildung 3.37.: Raumzeitdiagramm zur Berechnung des LW Wechselwirkungsfelds einer Punktladung an der Position z zur Zeit t . Die retardierte Zeit, t' , ergibt sich aus dem Schnittpunkt des rückwärtsgewandten Lichtkegels, $ds^2 = 0$, mit der Weltlinie der Punktladung bei $z'(t')$.

Für den Sonderfall eines unbeschleunigten Teilchenstrahls mit $\partial\beta'/\partial t' = 0$ sind die LW Raumladungsfelder mit dem QES Wechselwirkungsmodell identisch. Abbildung 3.38 visualisiert Lösungen der Retardierungsgleichung (3.58) für eine Anordnung von Teilchen mit der Geschwindigkeit $\beta_z = 0.3$, welche sich zum Zeitpunkt t an den Positionen $\mathbf{x}'(t)$ befinden. Die retardierten Teilchenpositionen, $\mathbf{x}'(t')$, zeigen die scheinbare Form [Suf88], in welcher die kreisförmige Anordnung einem bei der Position \mathbf{x} lokalisierten Betrachter zur Zeit t erscheint. Aufgrund der endlichen Lichtgeschwindigkeit, c , sind die retardierten Teilchenpositionen gegenüber den momentanen Positionen, $\mathbf{x}'(t)$, entgegen der Propagationsrichtung hin versetzt. Die Länge dieses Versatzes hängt sowohl vom räumlichen Abstand der Teilchen, $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'(t)|$, als auch von der Geschwindigkeit, $c\beta$, ab. Für Teilchen, die sich bezüglich der Propagationsrichtung direkt vor \mathbf{x} befinden, ist der retardierte Abstand, $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'(t')|$, kleiner. Demgegenüber vergrößert sich der retardierte Abstand für die Teilchen direkt hinter \mathbf{x} . Somit unterscheiden sich die Lösungen von (3.58) für \mathbf{x} am hinteren Ende in Abb. 3.38 a), im Zentrum in Abb. 3.38 b) und am vorderen Ende in Abb. 3.38 c) signifikant. Insbesondere bei der Annäherung von relativistischen Geschwindigkeiten, $\beta \rightarrow 1$, erhöht sich die effektive Länge der retardierten Abstände teilweise auf ein Vielfaches gegenüber den momentanen Abständen innerhalb der Teilchenverteilung.

Im Allgemeinen müssen zur Berechnung der LW Wechselwirkungen die vollständigen Trajektorien aller Teilchen, $\mathbf{x}'(t')$, für den vergangenen Zeitbereich, $t' < t$, bekannt sein. Bei der numerischen Strahldynamiksimulation werden dazu die Phasenraumkoordinaten für alle Makroteilchen, $j = 1 \dots N$, des Ensembles zu jedem Zeitschritt, $i = 1 \dots N_t$, im Speicher vorgehalten. Die Auswertung des Raumladungsfelds an einer beliebigen Position, \mathbf{x} , zur Zeit t erfolgt mittels

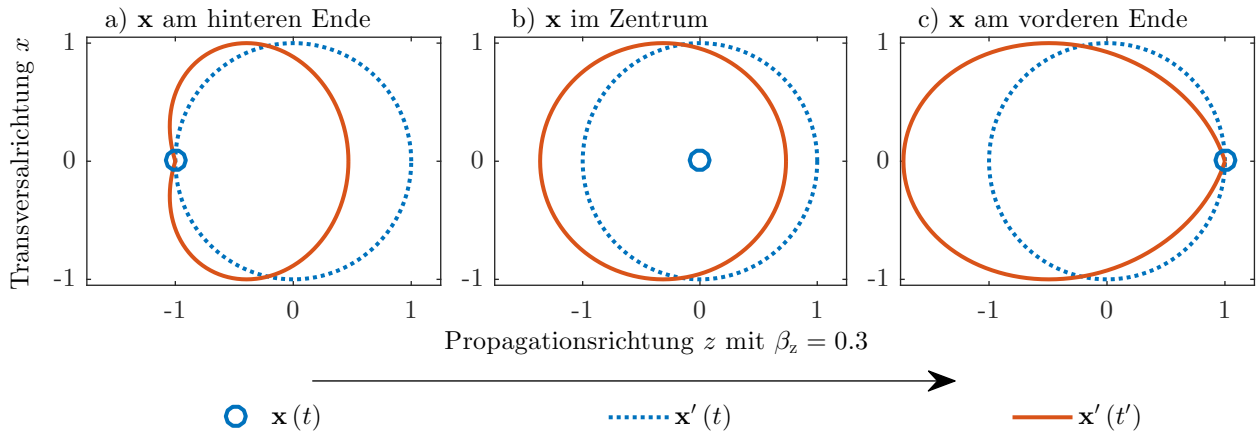


Abbildung 3.38.: Graphische Lösung der Retardierungsgleichung für eine gleichförmig mit $\beta_z = 0.3$ bewegte, kreisförmige Verteilung von Teilchen an den Positionen $\mathbf{x}'(t)$. Das Schaubild zeigt die retardierten Teilchenpositionen, $\mathbf{x}'(t)$, zur Feldauswertung an der Position \mathbf{x} für das a) hintere Ende, b) Zentrum, sowie c) vordere Ende der Verteilung. Die retardierte Teilchenposition hängt vom Abstand und relativem Winkel zur Propagationsrichtung, β , ab.

eines zweischrittigen Verfahrens. Im ersten Schritt wird für jedes Makroteilchen, j , die implizite Retardierungsgleichung (3.58) gelöst. Dazu werden in der abgespeicherten Trajektorie die aufeinanderfolgenden Zeitkoordinaten, t_j^i und t_j^{i+1} , gesucht, für welche der Übergang des vierdimensionalen Abstands von zeitartig, $ds^2 > 0$, nach raumartig, $ds^2 < 0$, erfolgt. Diese Suche ist in Form eines iterativen Bisektionsverfahrens mit einer Laufzeitskalierung von $\mathcal{O}[\log(N_t)]$ implementiert. Im zweiten Schritt erfolgt die Berechnung des Wechselwirkungsfelds (3.56) und (3.57) mit der Approximation für die zeitlich retardierten Teilchenkoordinaten,

$$\mathbf{x}'_j \approx (\mathbf{x}_j^{i+1} + \mathbf{x}_j^i) / 2, \quad (3.59)$$

$$\beta'_j \approx (\beta_j^{i+1} + \beta_j^i) / 2, \quad (3.60)$$

$$\frac{\partial}{\partial t'} \beta'_j \approx (\beta_j^{i+1} - \beta_j^i) / (t_j^{i+1} - t_j^i). \quad (3.61)$$

Strahldynamiksimulationen mit teilchenbasierter LW Wechselwirkung sind numerisch sehr aufwändig. Die Auswertung des elektromagnetischen Felds der Raumladungswechselwirkung skaliert quadratisch mit der Makroteilchenzahl $\mathcal{O}(N^2)$ und logarithmisch mit der Anzahl der Zeitschritte $\mathcal{O}(\log N_t)$. Außerdem skaliert der Speicherbedarf für die Weltlinien der Makroteilchen linear mit der Anzahl der Zeitschritte $\mathcal{O}(N_t)$. Aus diesem Grund müssen numerische Simulationen für anwendungsrelevante Ensemblegrößen, $N \geq 10^5$, MPI parallelisiert auf Rechenclustern durchgeführt werden. Das Simulationsprogramm nutzt dazu eine teilchenbasierte Parallelisierung, bei welcher das Makroteilchenensemble zu gleichen Teilen auf die Rechenknoten des Clusters verteilt

wird. Für die Auswertung der Raumladungswechselwirkung zum Zeitpunkt t werden die Positionen aller Makroteilchen, $\mathbf{x}(t)$, unter den Rechenknoten kommuniziert. Jeder Knoten berechnet dann das anteilige Raumladungsfeld der lokal abgespeicherten Teilchentrajektorien, $\mathbf{x}'(t')$, für alle Stützstellen der Felddauswertung, $\mathbf{x}(t)$, und addiert anschließend die MPI kommunizierten Ergebnisse der anderen Knoten.

3.6.2. Erweiterungen zur Simulation des DESY-PITZ THz FEL

Ursprünglich wurde das LW Programm zur Strahldynamiksimulation eines Photoinjektors entwickelt. Bei der Anwendungsstudie in Kapitel 4.3 hat sich gezeigt, dass sich mit dem teilchenbasierten Verfahren auch eine *ab initio* Modellierung für einen FEL zur selbst-amplifizierten spontanen Emission (SASE) von THz Strahlung umsetzen lässt. Im Folgenden werden hierfür drei zusätzliche Erweiterungen implementiert, welche sich im Hinblick auf dieses neue Anwendungsgebiet als besonders nützlich erweisen.

Die erste neu entwickelte Erweiterung umfasst die Implementierung virtueller Feldmonitore zur Analyse der Wechselwirkungsfelder. Jeder Feldmonitor besteht aus einem dreidimensionalen hexahedrischen Rechengitter, auf welchem mit äquidistanten Zeitschritten die elektromagnetischen Felder (3.56) und (3.57) für alle Makroteilchen des Teilchenstrahls ausgewertet werden. Sowohl die räumliche Position und Auflösung des Rechengitter als auch die zu analysierende Zeitspanne und Zeitauflösung des Feldmonitors sind frei wählbar. Die Auswertung der elektromagnetischen Felder erfolgt im Anschluss an die Simulation auf Basis der vollständigen Trajektorien aller Makroteilchen und ist ebenfalls MPI parallelisiert. Dabei werden die beiden Summanden in (3.56) getrennt ausgewertet, sodass die retardierte Raumladungswechselwirkung, $\propto |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-2}$, und das emittierte Strahlungsfeld, $\propto |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-1}$, separat untersucht werden können. Die Modellierung in Kapitel 4.3 nutzt einen normal zur Strahlachse orientierten Feldmonitor, um das Strahlungsfeld am hinteren Ausgang des Undulators zu analysieren. Aufgrund des numerischen Aufwands und der zu verarbeitenden Datenmenge bietet es sich an, die Auflösung und Größe des Feldmonitors im Voraus an die Problemstellung anzupassen.

Eine zweite Erweiterung ermöglicht den Energieverlust des Teilchenstrahls aufgrund von Strahlungsdämpfung in der Simulation zu berücksichtigen. Nach dem Modell von Abraham-Lorentz-Dirac (ALD) wirkt aufgrund der abgestrahlten Feldenergie auf ein Punktteilchen mit der Ladung q , der relativistischen Geschwindigkeit $c\beta$, und dem entsprechenden Lorentz-Faktor γ ,

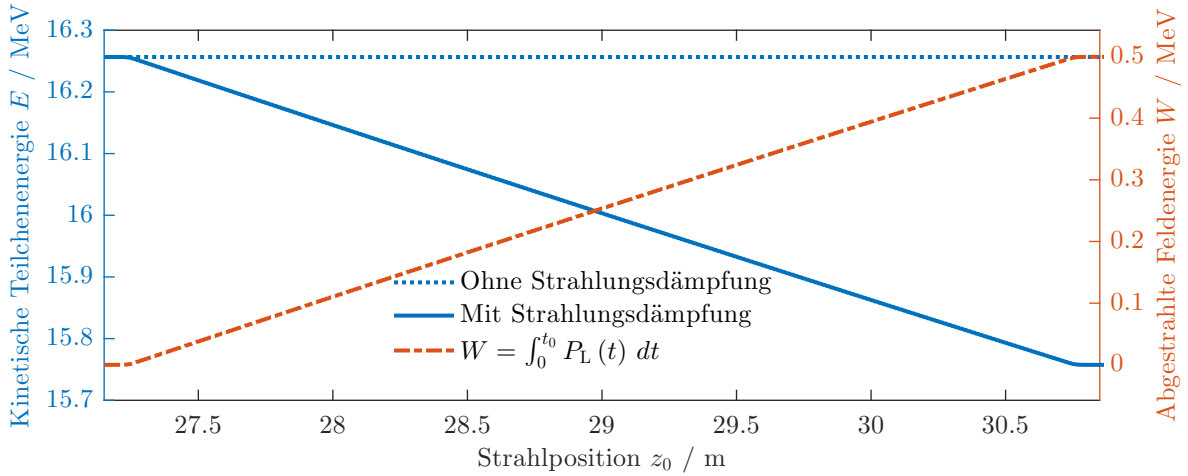


Abbildung 3.39.: Kinetische Energie, E , eines Elektrons im Undulator aus Kapitel 4.3 mit und ohne Strahlungsdämpfung. Der Energieverlust durch die Dämpfungskraft, F_{ALD} , entspricht der Verlustleistung, P_L , für die abgestrahlte elektromagnetische Feldenergie, W .

die effektive Dämpfungskraft [JWM11]

$$\mathbf{F}_{\text{ALD}} = \frac{q^2 \gamma^2}{6\pi\epsilon_0 c^2} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial t^2} \boldsymbol{\beta} + 3\gamma^2 \left(\boldsymbol{\beta} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\beta} \right) \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\beta} + \gamma^2 \left[\boldsymbol{\beta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial t^2} \boldsymbol{\beta} + 3\gamma^2 \left(\boldsymbol{\beta} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\beta} \right)^2 \right] \boldsymbol{\beta} \right\}. \quad (3.62)$$

Diese Dämpfungskraft wird für jedes Makroteilchen separat ausgewertet und bei der numerischen Zeitintegration für die Teilchentrajektorie zur Lorentzkraft hinzu addiert. Abbildung 3.39 zeigt die Energie eines einzelnen Elektrons unter Berücksichtigung der Strahlungsdämpfung am Beispiel des Undulators aus Kapitel 4.3. In der Simulation mit Strahlungsdämpfung verringert sich die kinetische Energie des Elektrons konsistent mit der Verlustleistung für die emittierte elektromagnetische Feldenergie [JWM11],

$$P_L = \frac{q^2 \gamma^6}{6\pi\epsilon_0 c} \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\beta} \right)^2 - \left(\boldsymbol{\beta} \times \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\beta} \right)^2 \right]. \quad (3.63)$$

Mit der dritten Erweiterung wird die Approximation der retardierten Teilchenkoordinaten verbessert und der Speicherbedarf für die Teilchentrajektorien reduziert. Diese beiden Punkte sind insbesondere dann wichtig, wenn die oszillierende Strahlführung für einen mehrere Meter langen Undulator wie in Kapitel 4.3 modelliert werden soll. Wird die Trajektorie, $\mathbf{x}_j^i(t^i)$, eines Makroteilchens, j , zum Zeitpunkt t^i lokal als eine gleichförmige Bewegung mit der Geschwindigkeit $\boldsymbol{\beta}_j^i$ approximiert, dann ergibt sich die analytische Lösung der Retardierungsgleichung (3.58) für

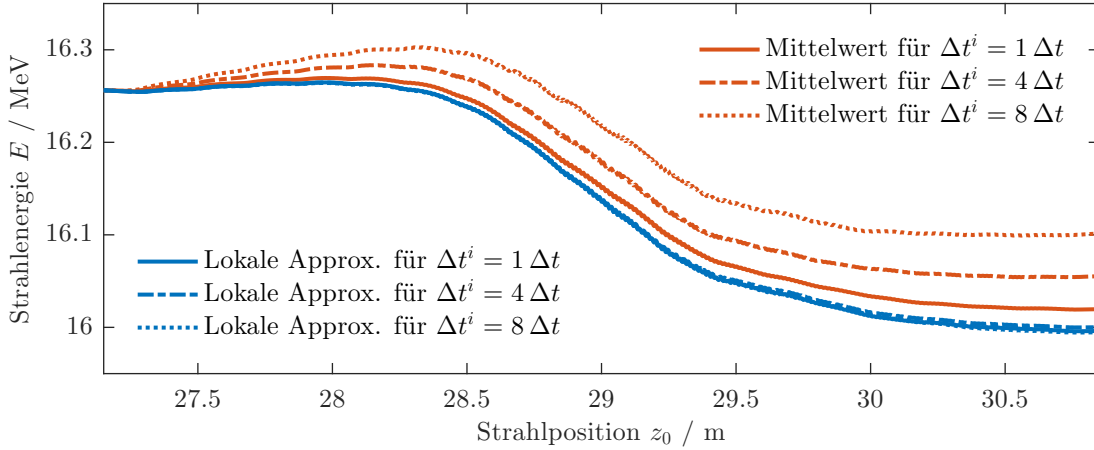


Abbildung 3.40.: Konvergenzstudie zum Verlauf der Strahlenergie, E , im Undulator aus Kapitel 4.3 für eine Simulation mit dem Zeitschritt $\Delta t = 0.1$ ps. Eine lokale Approximation der retardierten Teilchenkoordinaten nach (3.65) verbessert gegenüber dem einfachen Mittelwertansatz aus (3.59) die Robustheit des Verfahrens in Bezug auf die zeitlichen Auflösung, Δt^i , der Teilchentrajektorien.

die Felddauswertung an der Position \mathbf{x} zum Zeitpunkt t als

$$ct'_j - ct_j^i = \gamma_j^{i2} (cT_j^i - \boldsymbol{\beta}_j^i \cdot \mathbf{X}_j^i) - \gamma_j^i \sqrt{\mathbf{X}_j^{i2} - c^2 T_j^{i2} + \gamma_j^{i2} (cT_j^i - \boldsymbol{\beta}_j^i \cdot \mathbf{X}_j^i)^2}, \quad (3.64)$$

$$\mathbf{x}'_j - \mathbf{x}_j^i = \boldsymbol{\beta}_j^i (ct'_j - ct_j^i), \quad (3.65)$$

mit $T_j^i := t - t_j^i$ und $\mathbf{X}_j^i := \mathbf{x} - \mathbf{x}_j^i$. In der numerischen Strahldynamiksimulation erweist sich diese Formel für zwei unterschiedliche Anwendungen als nützlich. Erstens zeigt Abbildung 3.40 am Beispiel der numerischen Studie aus Kapitel 4.3, dass die lokale Approximation (3.65) gegenüber dem einfachen Mittelwertansatz (3.59) die Robustheit des Verfahrens in Bezug auf die zeitlichen Auflösung, Δt^i , der Teilchentrajektorien erhöht. Außerdem werden auch die Nahfeldwechselwirkungen besser aufgelöst, sodass selbst wenn die zeitlichen Auflösung der Teilchentrajektorie dem Zeitschritt der Simulation, $\Delta t^i = \Delta t$, entspricht, die lokale Approximation vorzuziehen ist. Zweitens kann mittels (3.65) die Trajektorie eines Teilchens für $t'_j < t_j^{i=1}$ extrapoliert werden. Letzteres ermöglicht eine konsistente Auswertung der Raumladungsfelder zu Simulationsbeginn, indem auf Basis der initial vorgegeben Teilchenverteilung eine generische Trajektorie für die retardierten Teilchenpositionen erzeugt wird. Somit kann der Simulationsstart an einem beliebigen Punkt innerhalb einer Driftstrecke der modellierten Beschleunigerstruktur erfolgen. Beispielsweise nutzt die Simulationsstudie in Kapitel 4.3 dieses Verfahren, weil für die initial vorgegebene Makroteilchenapproximation des Elektronenstrahls keine retardierten Teilchentrajektorien verfügbar sind.

4. Anwendungen zur Simulation von Teilchenstrahlen

Dieses Kapitel zeigt drei konkrete Anwendungen für die teilchenbasierten Simulationsprogramme. In der ersten Studie wird die neue Implementierung des FMM Simulationsprogramms anhand einer numerischen Studie zur Strahldynamik des DESY-PITZ Photoinjektors ausführlich getestet. Dazu werden die Simulationsergebnisse gegenüber gitterbasierten Modellierungen mit ASTRA [Flo17] und KRACK3 [DH16] validiert. Für die zweite Simulationsstudie wird die FMM Implementierung genutzt, um den Einfluss von Raumladungseffekten während der Strahlerzeugung in der DESY SRF Elektronenkanone zu untersuchen. Die dritte Untersuchung modelliert die Strahldynamik und das Strahlungsfeld der THz Lichtquelle bei DESY-PITZ mit dem speziell zu diesem Zweck erweiterten LW Simulationsprogramm.

4.1. Simulationsstudien zum DESY-PITZ Photoinjektor

Die folgende Simulationsstudie untersucht die Teilchenstrahldynamik für ein Experiment bei der DESY Photoinjektor Testeinrichtung in Zeuthen (PITZ) [Kra12]. Zur Modellierung der Raumladungseffekte werden die Wechselwirkungen mit der FMM ausgewertet. Als ein typisches Anwendungsbeispiel wird in einer numerischen Parameterstudie die Laserspotgröße auf der Photokathode im Hinblick auf die Strahlemittanz optimiert. Der Vergleich zwischen den Ergebnissen für die FMM Simulation gegenüber den Programmen ASTRA 3D und KRACK 3 liefert eine sehr gute Übereinstimmung. Darüber hinaus werden am Beispiel des Photoinjektors Anwendungen für die Erweiterungen der FMM mit den Plummer-Basisfunktionen und dem Energieklassen Modell gezeigt.

4.1.1. Motivation

Bei DESY-PITZ werden Elektronenstrahlquellen für die Anwendung in freie Elektronen Lasern wie z. B. den E-XFEL oder FLASH in Hamburg entwickelt [Ste10]. Die Effizienz des FEL Prozesses wird maßgeblich durch die Energiestreuung und die transversale Emittanz des verwendeten Elektronenstrahls beeinflusst [Sch14]. Für die Ausgangsleistung des FEL ist die Strahldynamik innerhalb des Photoinjektors deshalb ein entscheidender Faktor [Ste10]. Insbesondere das Emit-

tanzwachstum aufgrund der Raumladungswchselwirkung zwischen den niederenergetischen Elektronen im Umfeld der Photokathode (vgl. [Kim89]) limitiert hierbei die Strahlqualität. Weil sich dieser Effekt nicht nachträglich kompensieren lässt, muss die Strahlemittanz bereits innerhalb des Photoinjektors minimiert werden [Kra12]. Numerische Parameterstudien liefern dabei einen wichtigen Beitrag, um den optimalen Arbeitspunkt des Photoinjektors zu identifizieren [Kra12].

4.1.2. Modell des DESY-PITZ Photoinjektors

Abbildung 4.1 a) zeigt eine schematische Darstellung des DESY-PITZ Photoinjektors im Schnittbild. Das Modell für die Strahlführung umfasst das Hochfrequenzbeschleunigungsfeld (HF) der Elektronenkanone mit 1.6 Zellen, die Magnetfelder von zwei Solenoidspulen [Kra12], sowie das HF-Feld der „Cut Disk Structure“ (CDS) Beschleunigerkavität mit 14 Zellen (vgl. [Par10]). Das zeitliche Profil des Photostroms aus der Cs₂Te Kathode in Abb. 4.1 b) entspricht einer Plateauverteilung mit 21.5 ps zeitlicher Halbwertbreite und einer Signalflanke von 2.0 ps [Kra12]. Das Beschleunigungsfeld innerhalb der Elektronenkanone hat eine Frequenz von $f = 1.3$ GHz mit einer maximale Feldamplitude von $E_z = 60.58$ MV m⁻¹ [Kra12]. Die Solenoidspule bei Strahlposition $z_0 \approx 27.4$ cm fokussiert den Elektronenstrahl in transversaler Richtung. Eine weitere Solenoidspule mit entgegengesetzter Bestromung bei $z_0 < 0$ cm kompensiert die longitudinale Komponente des fokussierenden Magnetfelds in der Kathodenebene bei $z_0 = 0$ [Kra12]. Abbildung 4.1 c) zeigt die entsprechenden Feldprofile entlang der Strahlführung im Inneren der Elektronenkanone für die Hochfrequenzphase mit maximaler Strahlenergie. Die Teilchenstrahldynamik wird bis zur Strahlposition $z_0 = 5.74$ m untersucht, bei welcher sich im experimentellen Aufbau eine Messeinrichtung für die Strahlemittanz befindet [Kra12].

4.1.3. Validierung der Strahldynamiksimulation

Die Optimierung des Arbeitspunkts für den DESY-PITZ Photoinjektor erfordert systematische Parameterstudien zu den Einflussgrößen auf die Emittanz des Elektronenstrahls [Kra12]. Zur gegenseitigen Validierung der numerischen Modelle bietet sich ein Vergleich der Ergebnisse einer Strahldynamiksimulation mit teilchenbasierter FMM Approximation der Raumladungswchselwirkung gegenüber den Simulationsergebnissen für die gitterbasierten Programme ASTRA 3D und KRACK 3 an. Die Ladungsdichteverteilung des untersuchten Elektronenstrahls entspricht der Strahlgenerierung durch einen homogenen Laserspot mit $r_0 = 0.8$ mm Radius auf der Photokathode und hat eine Gesamtladung von 1 nC. Die Modellierung der Strahlerzeugung in der FMM Simulation und KRACK 3 basiert auf der selben Makroteilchenapproximation wie für eine ASTRA Simulation (vgl. [Flo17]). Dabei beträgt die Ensemblegröße für die FMM Simulation $N = 5 \cdot 10^6$,

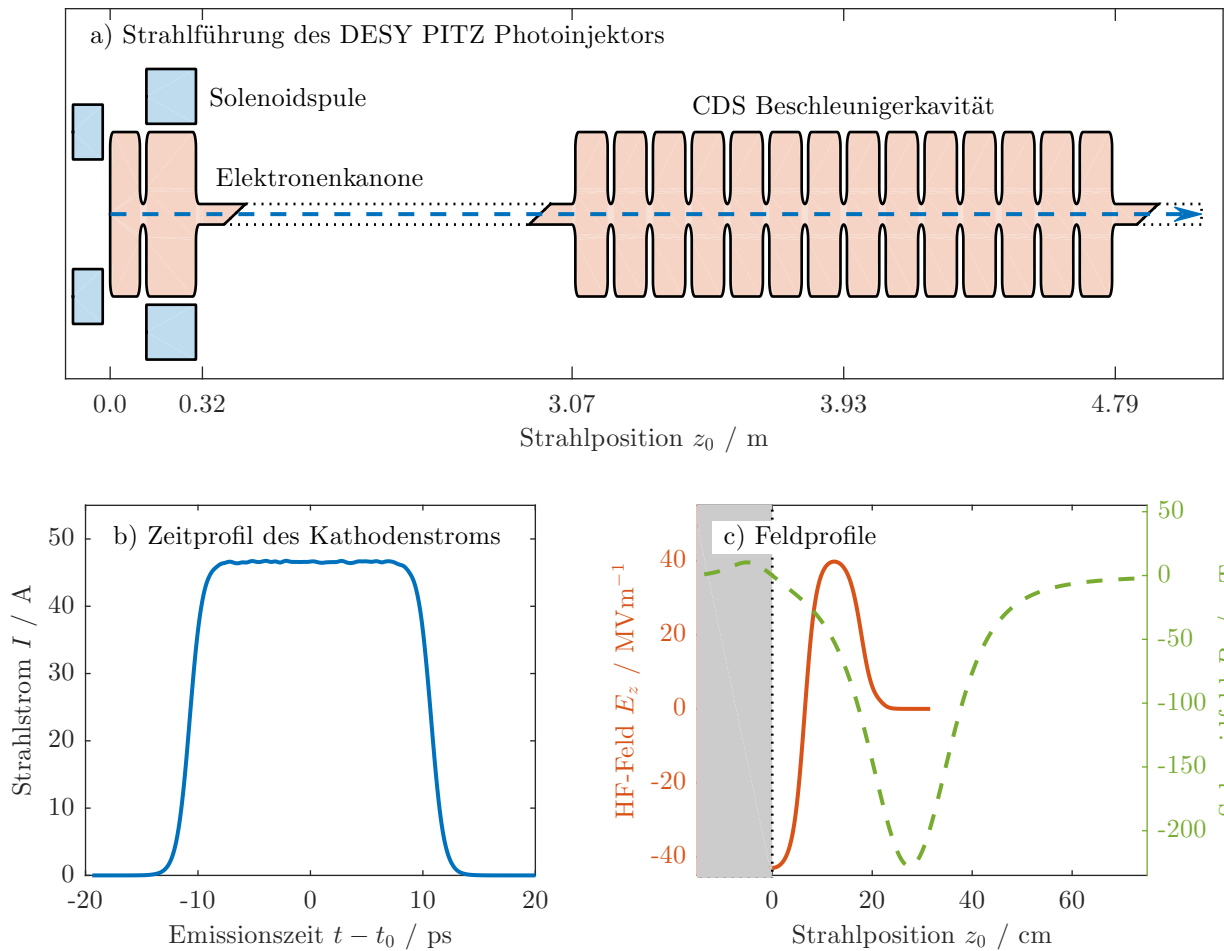


Abbildung 4.1.: Die Skizze in a) zeigt eine schematische Darstellung der Strahlführung durch die 1.6 Zellen Elektronenkanone, die beiden Solenoidspulen sowie die CDS Beschleunigerkavität des DESY-PITZ Photoinjektors. Das Zeitprofil des Elektronenstrahlstroms aus der Cs_2Te Photokathode in b) entspricht einem Plateau mit 21.5 ps Länge und 2 ps Anstiegs- bzw. Abfallzeit [Kra12]. Die Feldprofile in c) zeigen das Feld entlang der Strahlachse für die Hochfrequenzphase mit maximaler Teilchenstrahlenergie.

für die gitterbasierten Simulationen hingegen $N = 5 \cdot 10^5$ Makroteilchen. Die Fernfeldapproximation der FMM für den Admissibilitätsparameter $\theta_0 = 0.5$ nutzt eine maximale Multipolordnung von $l_0 = 4$. Für die modifizierte Nahfeldwechselwirkung werden sphärische Makroteilchen mit einem festen Radius von $\Delta_0^{\text{P2P}} = 10 \mu\text{m}$ verwendet. Die Auswertung der Raumladungswechselwirkung in KRACK 3 erfolgt durch maximal $200 \times 200 \times 1000$ hexahedrische Gitterzellen mit einer minimalen Kantenlänge von $10 \mu\text{m}$. In der ASTRA 3D Simulation kann die metallische Randbedingung an der Photokathode nicht modelliert werden (vgl. [Flo17]), weshalb bis Strahlposition $z_0 = 12 \text{ cm}$ ASTRA 2D für ein zweidimensionales zylindrisches Rechengitter mit 50×100 Gitterzellen und danach ASTRA 3D für ein dreidimensionales hexahedrisches Rechengitter mit $64 \times 64 \times 128$ Gitterzellen verwendet wird.

Abbildung 4.2 zeigt die Simulationsergebnisse für die a) transversale, ε_x , und b) longitudinale, ε_z , Strahlemittanz. Die Erhöhung der transversalen Strahlemittanz innerhalb der Elektronenkanone für $z_0 \leq 35 \text{ cm}$ kommt aufgrund der transversalen Defokussierung durch das HF-Beschleunigungsfeld (vgl. [Rei08]) zu Stande. Dabei hängt die Änderung der transversalen Teilchenimpulse von der longitudinalen Position innerhalb des Elektronenstrahls ab und bedingt dadurch eine effektive Vergrößerung der projizierten Emittanz. Das Magnetfeld der Solenoidspule kompensiert die Defokussierung durch das HF-Beschleunigungsfeld und die Raumladungswechselwirkung der Ladungsdichteverteilung, sodass die projizierte Emittanz beim Verlassen des Photoinjektors minimal wird. Der direkte Vergleich zeigt eine zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen den drei Simulationen. Die Abweichung der transversalen Strahlemittanz zwischen der FMM Simulation und KRACK 3 in Abb. 4.2 a) beträgt über die gesamte Strahlführung des Photoinjektors hinweg maximal $\pm 3.25 \%$. Für die longitudinale Strahlemittanz, ε_z , ergibt sich eine maximale Abweichung von $\pm 1.64 \%$. Die weiteren strahldynamischen Größen, wie z. B. die Strahlbreite oder Energiestreuung, stimmen ebenfalls sehr gut überein. Tabelle 4.1 zeigt hierzu eine Übersicht für das Ende des Photoinjektors bei Strahlposition $z_0 = 5.74 \text{ m}$.

Die Phasenraumverteilung beim Verlassen des DESY-PITZ Photoinjektors ist für die Strahldynamiksimulation mit der FMM in Abb. 4.3 a) und b) sowie für KRACK 3 in Abb. 4.3 c) zu sehen. Eine gute Übereinstimmung der Phasenraumverteilung des Elektronenstrahls ist Voraussetzung dafür, dass die Makroteilchenapproximation als Ausgangspunkt für weiterführende Simulationsstudien verwendet werden kann. Für eine Approximation der Phasenraumverteilung mit $N = 5 \cdot 10^5$ Makroteilchen hat sich gezeigt [Sch19a], dass die Rauscheffekte der Makroteilchenapproximation im Simulationsergebnis der FMM in Abb. 4.3 a) stärker hervortreten als bei der Simulation mit KRACK 3 in Abb. 4.3 c). Dieser Effekt ist zu erwarten, weil bei der FMM Berechnung die räumliche Verteilung der Ladungsdichte und dementsprechend auch deren Makroteilchenrauschen

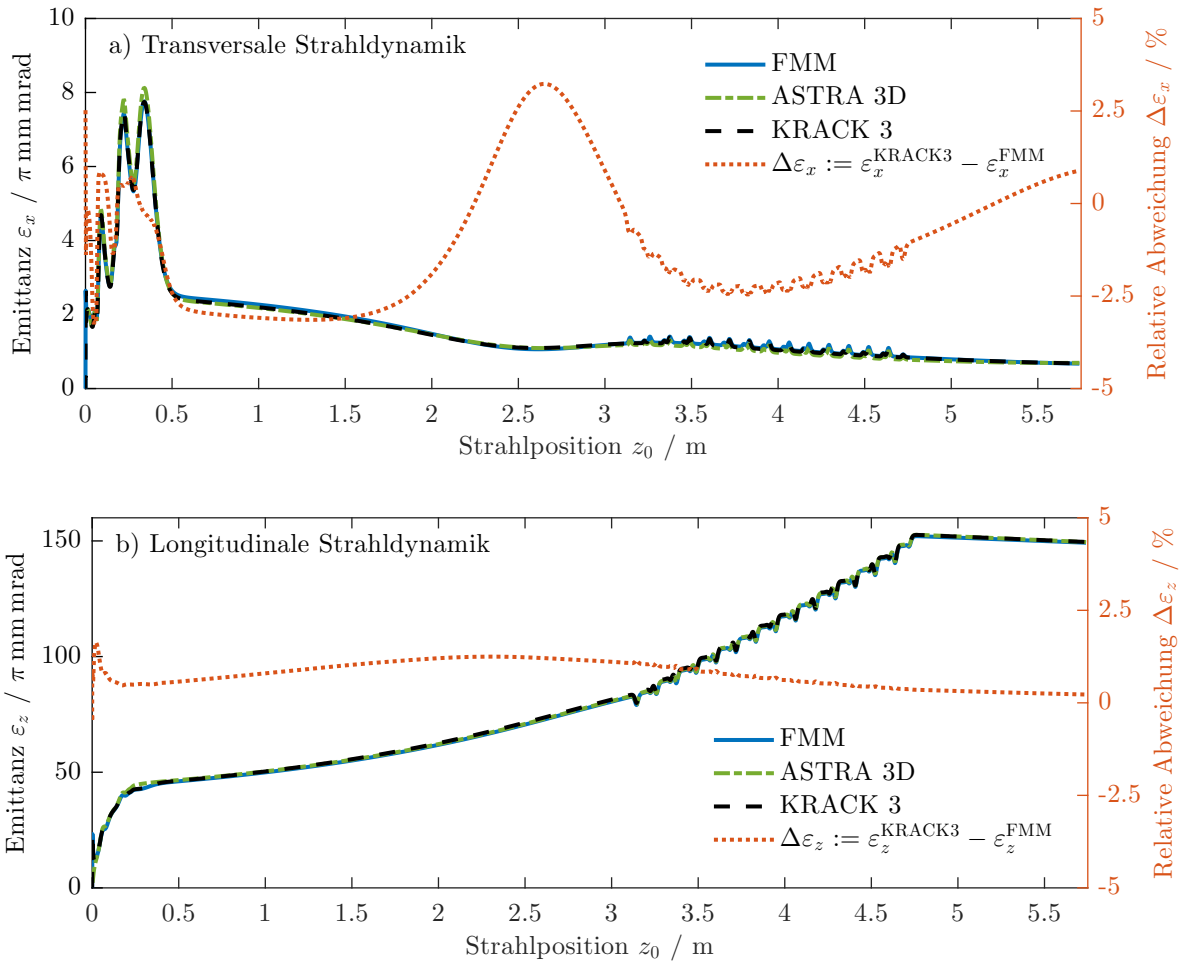


Abbildung 4.2.: Vergleich der a) transversalen, ε_x , und b) longitudinalen, ε_z , Strahlemittanz für eine Strahldynamiksimulation des DESY-PITZ Photoinjektors mit der FMM, ASTRA 3D und KRACK 3. Die initiale Ladungsdichteverteilung entspricht einer Strahlgenerierung durch einen homogenen Laserspot mit $r_0 = 0.8$ mm Radius auf der Photokathode und hat eine Gesamtladung von 1 nC.

Strahlparameter	FMM	KRACK 3	ASTRA 3D
Strahlbreite σ_x / mm	0.660	0.662	0.684
Strahlbreite σ_y / mm	0.660	0.662	0.683
Strahllänge σ_z / mm	2.279	2.281	2.306
Energiestreuung σ_E / keV	853.274	853.756	863.000
Emittanz ε_x / π mm mrad	0.673	0.679	0.695
Emittanz ε_y / π mm mrad	0.672	0.681	0.693
Emittanz ε_z / π mm mrad	149.213	149.549	149.510

Tabelle 4.1.: Vergleich der strahldynamischen Größen am Ende des DESY-PITZ Photoinjektors bei $z_0 = 5.74$ m für eine Simulation mit der FMM, KRACK 3 und ASTRA 3D.

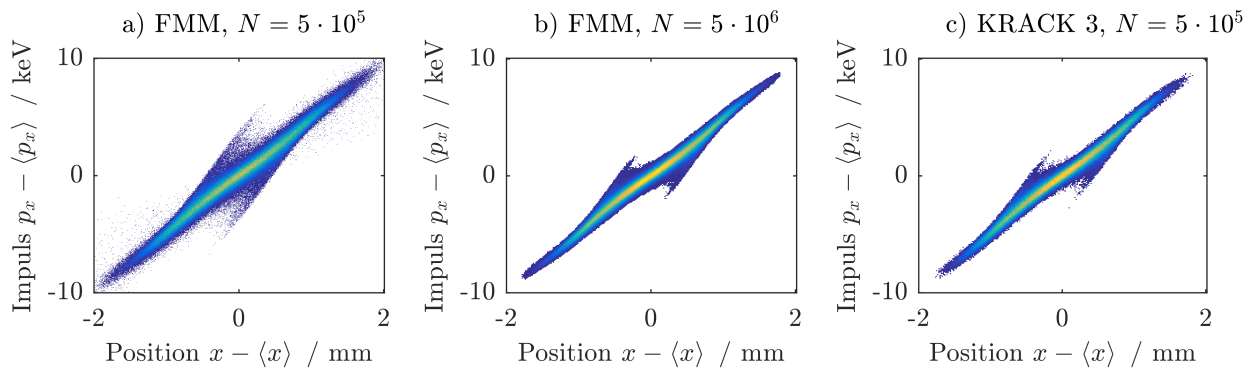


Abbildung 4.3.: Vergleich des transversalen Phasenraums am Ausgang des DESY-PITZ Photoinjektors für eine Simulation mit der FMM in a) und in b) sowie mit KRACK 3 in c). Die Sensitivität der FMM Feldlösung auf Rauscheffekte in der Ladungsdichteverteilung erfordert eine Erhöhung der Makroteilchenanzahl von $N = 5 \cdot 10^5$ in a) auf $N = 5 \cdot 10^6$ in b) um die selben Ergebnisse wie bei der gitterbasierten Simulation mit KRACK 3 in c) zu erzielen.

vollständig aufgelöst werden. Die berechnete Feldapproximation konvergiert gegen die Superposition von N Punktladungsfeldern, wobei die Nahfeldwechselwirkungen durch das entsprechende Makroteilchenmodell regularisiert werden. Im Unterschied dazu approximiert KRACK 3 [CZD20] durch die Verwendung von integrierten Greenschen Funktionen [Qia06] das Raumladungsfeld von homogen geladenen Hexaedern, deren räumliche Ausdehnung ausschließlich durch das Rechengitter und nicht durch die Makroteilchenanzahl N vorgegeben ist. Dementsprechend hängt die Raumladungsapproximation nicht von den lokalen Eigenschaften der Makroteilchenverteilung ab und die Rauscheffekte werden nicht aufgelöst. Durch Erhöhung der Makroteilchenanzahl auf $N = 5 \cdot 10^6$ kann das Rauschen bei der FMM Simulation in Abb. 4.3 b) reduziert werden, sodass sich gegenüber der Berechnungsmethode von KRACK 3 in Abb. 4.3 c) eine sehr gute Übereinstimmung ergibt.

Die Strahldynamiksimulation des DESY-PITZ Photoinjektors mit der FMM und $N = 5 \cdot 10^6$ Makroteilchen ist ein konkretes Anwendungsbeispiel für die verallgemeinerten Plummer-Basisfunktionen aus Kapitel 3.3.3. Abbildung 4.4 zeigt die transversale Strahlemittanz einer FMM Simulation für die Nahfeldmodellierung mit dem Plummer-Modell im Vergleich zu sphärischen Makroteilchen. Bei der Simulation für das Plummer-Modell werden alle Nahfeldwechselwirkungen ab der sechsten Verfeinerungsebene der FMM Baumstruktur mit den entsprechenden Knotenpotentialen durch die Grundordnung der Plummer-Basisfunktionen, $n_0 = 0$ und $l_0 = 0$, approximiert. Die Nahfeldwechselwirkungen bis einschließlich der fünften Verfeinerungsebene werden identisch zur teilchenbasierten FMM mit dem sphärischen Makroteilchenmodell regularisiert. Für die Simulationsergebnisse ergibt sich eine maximale Abweichung von $|\Delta \varepsilon_x| \leq 2.8\%$. Dabei fällt bei der Rauschunterdrückung mit dem Plummer-Modell die Strahlemittanz tendenziell etwas kleiner aus.

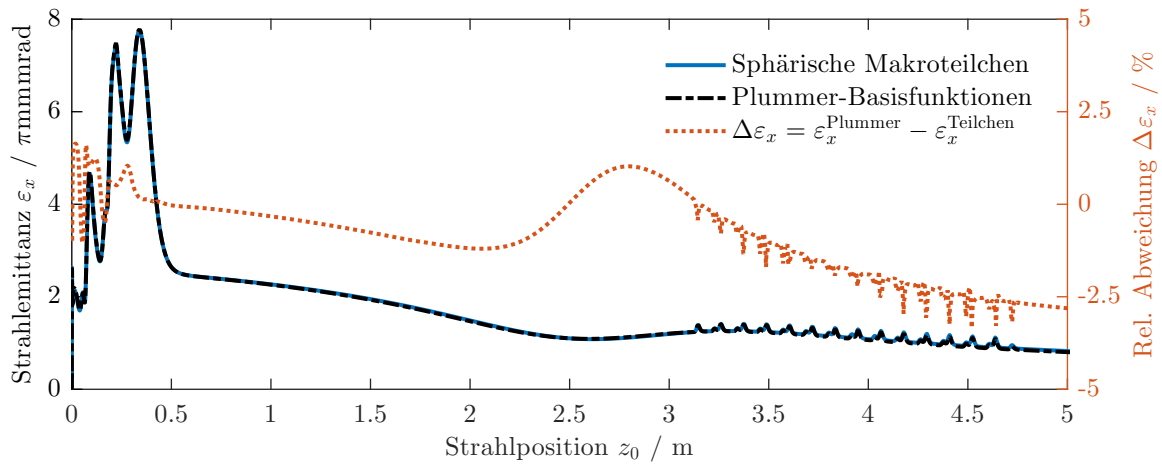


Abbildung 4.4.: Anwendung der Plummer-Basisfunktionen zur FMM Simulation des DESY-PITZ Photoinjektors. Die Modellierung der Nahfeldwechselwirkungen erfolgt durch die Grundordnung, $n_0 = 0$ und $l_0 = 0$, der verallgemeinerten Plummer-Basis. Die initiale Ladungsdichteverteilung entspricht einer Strahlgenerierung durch einen homogenen Laserspot mit $r_0 = 0.8$ mm Radius auf der Photokathode und hat eine Gesamtladung von 1 nC.

Am hinteren Ende des Photoinjektors ergibt sich für die Nahfeldmodellierung mit sphärischen Makroteilchen in Abb. 4.5 a) bzw. mit den Plummer-Basisfunktionen in Abb. 4.5 b) eine sehr gute Übereinstimmung des transversalen Phasenraums. Hierbei ist insbesondere bemerkenswert, dass die Verwendung der Plummer-Basis den numerischen Aufwand für die Strahldynamiksimulation gegenüber der FMM mit modifizierter Nahfeldwechselwirkung auf knapp die Hälfte reduziert.

4.1.4. Anwendungsstudie zur numerischen Parameteroptimierung

Abbildung 4.6 vergleicht die Ergebnisse einer Simulation mit der FMM, ASTRA 3D und KRACK 3 für die Parameteroptimierung des Laserspotradius, r_0 , auf der Photokathodenoberfläche bei vorgegebener Gesamtladung, Q_0 . Für die transversale Strahlemittanz, ε_x , ist ein lokales Minimum zu erwarten. Sowohl die thermische Emittanz bei der Photoemission, $\varepsilon_{th} \propto r_0$ [Dow10], als auch der Defokussierungseffekt durch das HF-Beschleunigungsfeld, $\varepsilon_{rf} \propto r_0^2$ [Kim89], steigen mit zunehmendem Laserspotradius an. Im Unterschied dazu skaliert die raumladungsinduzierte Emittanz, $\varepsilon_{rl} \propto r_0^{-1}$ [Kim89], umgekehrt proportional zu r_0 . Die Raumladungslimitierung gibt den minimalen Laserspotradius, r_0 , an, ab welchem die Gesamtladung, Q_0 , bei der Strahlgenerierung aufgrund des Raumladungsfelds nicht mehr vollständig aus der Photokathode extrahiert werden kann. Für die Laserspotradien oberhalb des Raumladungslimits zeigt sich eine zufriedenstellende Übereinstimmung der Simulationsergebnisse. Die FMM Simulation liefert eine minimale Emittanz für $Q_0 = 0.1$ nC bei dem Laserspotradius $r_0 \approx 0.25$ mm bzw. für $Q_0 = 1.0$ nC bei dem Laserspotradius $r_0 \approx 0.8$ mm. Im Bereich der Raumladungslimitierung zeigen sich Unterschiede, welche aus

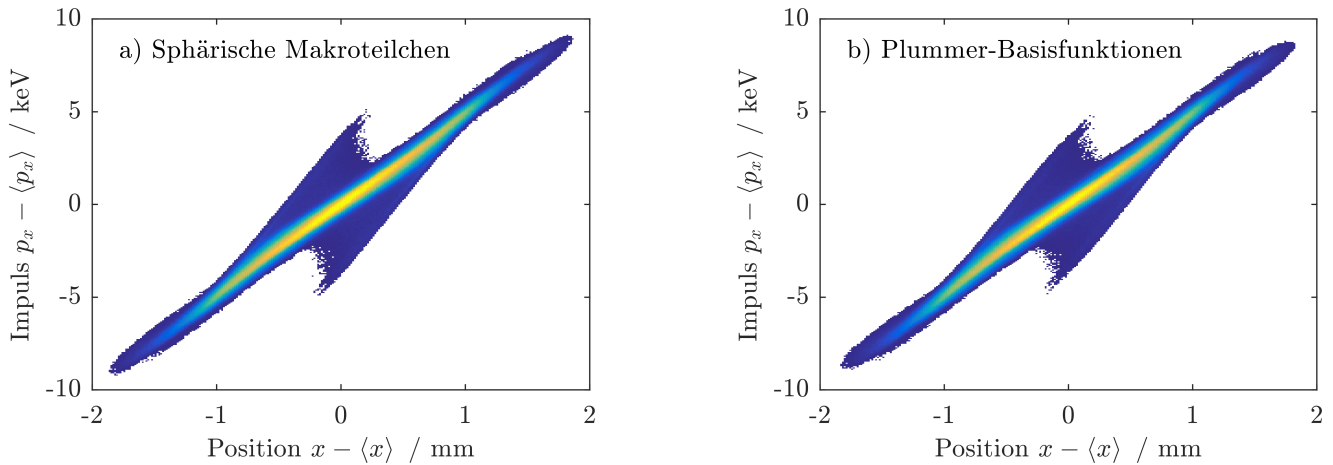


Abbildung 4.5.: Vergleich des transversalen Phasenraums am Ausgang des DESY-PITZ Photoinjektors für eine FMM Simulation mit Modellierung der Nahfeldwechselwirkungen durch sphärische Makroteilchen in a) sowie durch die Grundordnung, $n_0 = 0$ und $l_0 = 0$, der Plummer-Basisfunktionen in b).

der Modellierung der Strahlgenerierung an der Grenzfläche der Photokathode resultieren.

Zur Raumladungslimitierung für den 1.0 nC Elektronenstrahl wurden mit der FMM numerische Studien mit bis zu $N = 1 \cdot 10^7$ Makroteilchen durchgeführt. Der Skalierungsparameter s repräsentiert dabei die Größe des Makroteilchenradius, Δ_0^{P2P} , im Verhältnis zum Laserspotradius von $r_0 = 0.6$ mm. Im Bereich der Raumladungslimitierung zeigt die extrahierte Gesamtladung in Abb. 4.7 a) eine deutliche Modellabhängigkeit von der Regularisierung für die Nahfeldwechselwirkungen. Ein größerer Skalierungsparameter führt zu einer ebenfalls größeren Elektronenstrahlladung. Diese Abhängigkeit ist zu erwarten, da durch die Regularisierung das maximale Raumladungsfeld auf der Kathodenoberfläche vorgegeben wird. Dementsprechend ist die Gesamtladung des generierten Elektronenstrahls bei der FMM Simulation eine modellabhängige Größe, die entweder durch einen Abgleich mit Messwerten oder eine numerische Modellierung für die Emissionscharakteristik der Photokathode extern vorgegeben werden kann. Abbildung 4.7 b) zeigt exemplarisch das zeitliche Profil des Elektronenstrahlstroms für die in Abb. 4.7 a) markierten Parameterwerte. Durch die Variation des Makroteilchenradius, Δ_0^{P2P} , ergibt sich ein deutlich unterschiedlicher Stromverlauf.

4.1.5. Strahldynamiksimulation mit Energieklassen

Abbildung 4.8 zeigt eine numerischen Studie zur DESY-PITZ Elektronenkanone für drei unterschiedliche Modelle der Raumladungswechselwirkung. Der Elektronenstrahl, entsprechend

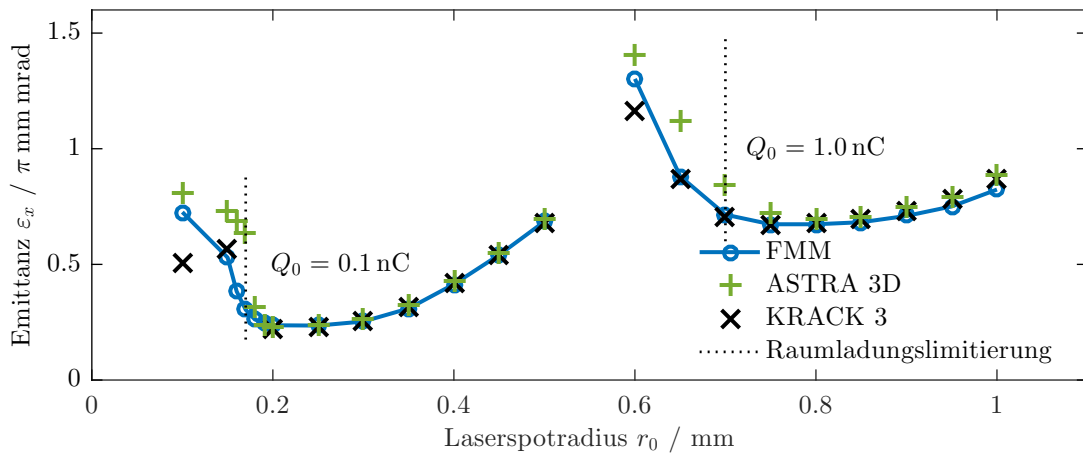


Abbildung 4.6.: Vergleich der Ergebnisse für eine Simulation mit der FMM, ASTRA 3D und KRACK 3 zur Parameteroptimierung des Laserspotradius, r_0 , auf der Kathodenoberfläche bei vorgegebener Gesamtladung, Q_0 . Die Simulationsergebnisse oberhalb der Raumladungslimitierung, bei $r_0 \geq 0.17 \text{ mm}$ für $Q_0 = 0.1 \text{ nC}$ bzw. $r_0 \geq 0.7 \text{ mm}$ für $Q_0 = 1.0 \text{ nC}$, stimmen sehr gut überein. Im Bereich der Raumladungslimitierung wird das Simulationsergebnis durch das numerische Modell für die Strahlgenerierung beeinflusst.

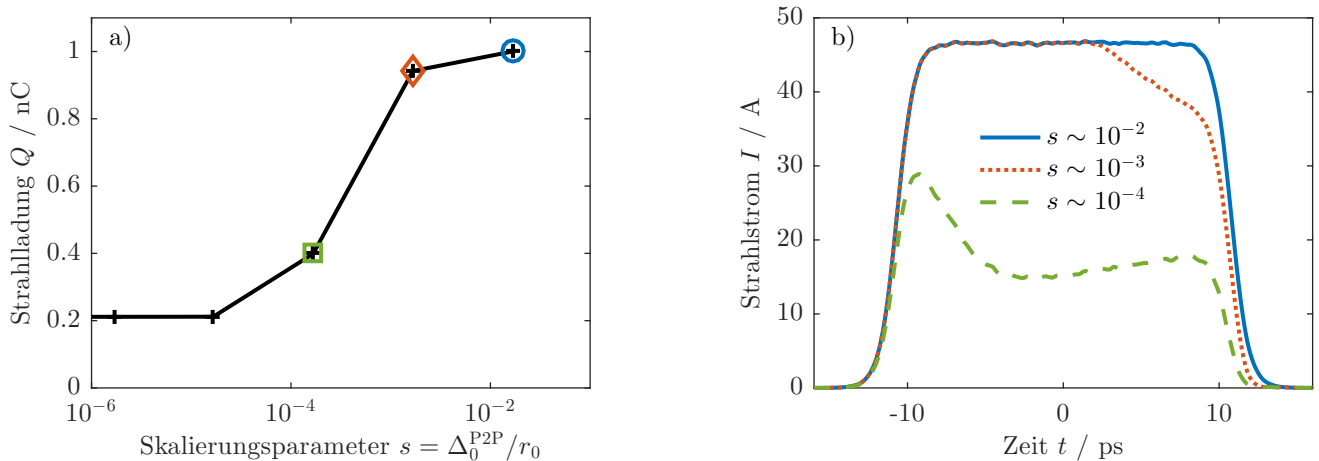


Abbildung 4.7.: Vergleich der a) Strahlladung und des b) Strahlstroms im Bereich der Raumladungs-limitierung für den Laserspotradius $r_0 = 0.6 \text{ mm}$. Die Simulationsergebnisse der FMM mit $N = 1 \cdot 10^7$ Makroteilchen zeigen eine deutliche Abhängigkeit vom Makroteilchenradius, Δ_0^{P2P} , für die Nahfeldmodellierung.

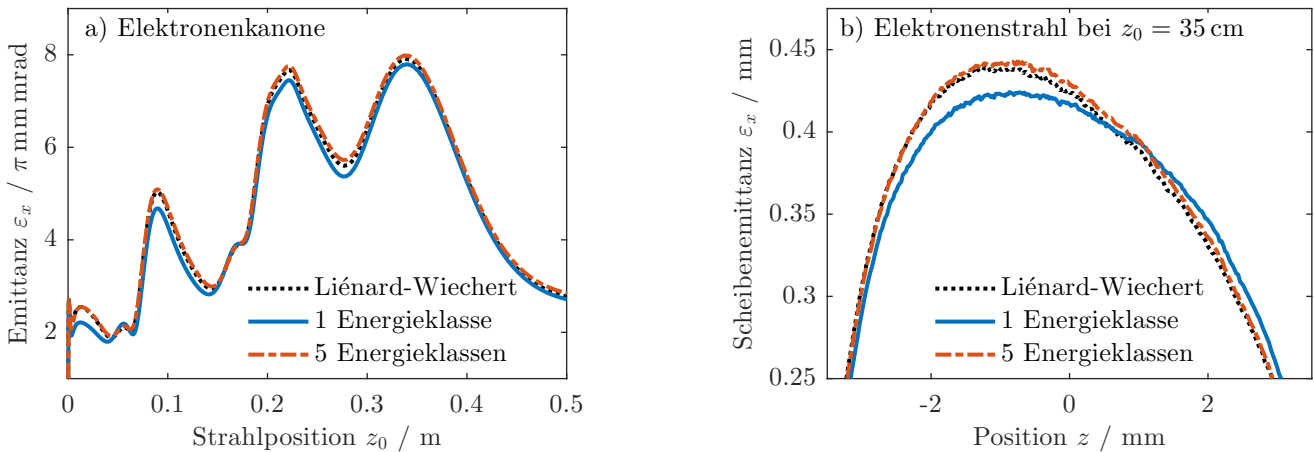


Abbildung 4.8.: Vergleich der a) Gesamt- und b) Scheibenemittanz für drei unterschiedliche Strahldynamiksimulationen des DESY-PITZ Photoinjektors mit dem LW Modell, einer QES Feldapproximation mit einer Energieklasse sowie deren Erweiterung mit fünf Energieklassen. Der untersuchte Elektronenstrahl mit $Q_0 = 1.0 \text{ nC}$ Gesamtladung entspricht einem Laserspotradius von $r_0 \approx 0.8 \text{ mm}$ und wird mit $N = 2.5 \cdot 10^5$ Makroteilchen modelliert.

einem Laserspotradius von $r_0 \approx 0.8 \text{ mm}$, hat eine Gesamtladung von $Q_0 = 1.0 \text{ nC}$ und wird mit $N = 2.5 \cdot 10^5$ modelliert. Das LW Modell gibt die physikalisch vollständige Beschreibung der elektromagnetischen Wechselwirkung zwischen den Elektronen wieder. Die Modellierung durch das einfache QES Feldmodell mit der FMM ermöglicht zwar eine signifikante Reduktion des numerischen Rechenaufwands, jedoch kann durch diese Approximation strenggenommen nur die Raumladungswechselwirkung einer unbeschleunigten, monoenergetischen Teilchenverteilung beschrieben werden. Die Methode mit fünf Energieklassen ist eine Erweiterung der QES Feldapproximation zur Modellierung einer Teilchenverteilung mit großer Energiestreuung, wie sie zum Beispiel während der Strahlerzeugung innerhalb der Elektronenkanone auftritt. Die transversale Strahlemittanz in Abb. 4.8 a) zeigt, dass durch die Verwendung von fünf Energieklassen das Ergebnis der LW Simulation gegenüber dem QES Modell besser approximiert wird. Für die zeitlich später emittierten Makroteilchen wird die Raumladungswechselwirkung aufgrund der Definition des gemittelten Ruhesystems der QES Feldapproximation systematisch unterschätzt. Dadurch bedingt ergibt sich bei der Scheibenemittanz in Abb. 4.8 b) insbesondere für die hintere Hälfte des Elektronenstrahls ab $z < 0$ eine signifikante Abweichung.

Ein signifikanter Vorteil des Energieklassen Modells besteht darin, dass durch die numerische Effizienz der FMM Approximation Strahldynamiksimulationen für anwendungsrelevante Ensemblegrößen möglich werden. Tabelle 4.2 zeigt eine Übersicht zum Zeitgewinn und Approximationsfehler für die Simulation der Elektronenkanone mit mehreren Energieklassen. Der Vergleich für die Ensemblegröße $N = 2.5 \cdot 10^5$ bezieht sich auf eine Modellierung mit der PPM, bei welcher

#Makroteilchen N	#Energieklassen B	Zeitgewinn	$\Delta\varepsilon_x / \%$	$\Delta\varepsilon_z / \%$
$2.5 \cdot 10^5$	1	$\times 18$	3.67	1.64
$2.5 \cdot 10^5$	5	$\times 16$	0.09	0.73
$2.5 \cdot 10^5$	10	$\times 13$	0.11	0.43
$2.5 \cdot 10^5$	20	$\times 9$	0.15	0.25
$2.5 \cdot 10^6$	1	$\times 145^*$	4.67	1.95
$2.5 \cdot 10^6$	5	$\times 129^*$	0.10	0.50
$2.5 \cdot 10^6$	10	$\times 95^*$	0.02	0.19

* Schätzwert extrapoliert bezüglich Ergebnis für $N = 2.5 \cdot 10^5$

Tabelle 4.2.: Zeitgewinn und Approximationsfehler für die transversale, ε_x , bzw. longitudinale, ε_z , Strahlemittanz bei Anwendung des Modells der Energieklassen auf die DESY-PITZ Elektronenkanone. Die Referenzwerte für die Ensemblegröße $N = 2.5 \cdot 10^5$ entsprechen einer Simulation mit separater Auswertung des Raumladungsfelds für jedes Makroteilchen. Die Abweichungen für die Ensemblegröße $N = 2.5 \cdot 10^6$ beziehen sich auf eine Simulation mit 20 Energieklassen.

die Raumladungswechselwirkung für das Ruhesystem jedes einzelnen Makroteilchens separat ausgewertet wird. Der numerische Aufwand für die PPM Feldauswertung skaliert dementsprechend wie $\mathcal{O}(N^2)$. Mit einer FMM Simulation für fünf Energieklassen kann die transversale und longitudinale Strahlemittanz der Referenzsimulation mit weniger als 1 % Abweichung reproduziert werden. Dabei ist die FMM Simulation um einen Faktor 16 schneller als die Referenzsimulation und lediglich um etwa 15 % langsamer gegenüber dem rein QES Teilchenstrahlmodell. Eine Simulation mit mehr als fünf Energieklassen ist hier nicht zielführend, da die Aussagekraft der Ergebnisse aufgrund der sehr geringen Ensemblegröße limitiert ist. Für eine anwendungsrelevante Ensemblegröße wie $N = 2.5 \cdot 10^6$ kann keine direkte Modellierung durchgeführt werden, sodass die Erhöhung der Rechenzeit gegenüber der Referenzsimulation für $N = 2.5 \cdot 10^5$ mit einem Faktor 100 abgeschätzt werden muss. Die Referenzwerte zur Abweichung der Strahlemittanz beziehen sich auf eine FMM Simulation mit 20 Energieklassen. Für fünf Energieklassen beträgt der Unterschied bereits weniger als 1 %. Durch die um ca. 12.5 % verlängerte Rechenzeit gegenüber der QES Feldapproximation entstehen dabei keine wesentlichen Einschränkungen für anwendungsrelevante Simulationsstudien.

Abbildung 4.9 vergleicht die Simulationsergebnisse am Ausgang der DESY-PITZ Elektronenkanone bei Strahlposition $z_0 = 35$ cm für das Wechselwirkungsmodell mit mehreren Energieklassen. Die longitudinale Phasenraumdicke für das QES Teilchenstrahlmodell mit einer Energieklasse in Abb. 4.9 a) wird hauptsächlich durch das Beschleunigungs- und Magnetfeld der Elektronenkanone vorgegeben. Die bogenförmigen Struktur entsteht durch den Phasenvorschub des Beschleunigungsfelds während der Strahlgenerierung. Eine Modellierung der Raumladungswechselwirkung

mit fünf Energieklassen beeinflusst die extern vorgegebene Kontur der Phasenraumdichte in Abb. 4.9 b) nur marginal. Jedoch ändert sich die Energieverteilung der Elektronen innerhalb des Teilchenstrahls, weshalb für den Elektronenstrahlstrom in Abb. 4.9 c) ein deutlicher Effekt zu erkennen ist. Insbesondere vergrößert die Korrektur das Raumladungsfeld auf der Photokathodenoberfläche und reduziert auf diese Weise den effektiven Elektronenstrahlstrom im hinteren Drittel des Teilchenstrahls. Der Konvergenztest mit zwanzig Energieklassen ergibt, dass die Energiestreuung des Teilchenstrahls bereits mit wenigen Energieklassen abgebildet werden kann. Dieses Ergebnis zeigt anhand eines konkreten Anwendungsbeispiels, dass sich die Modellierung der Raumladungswechselwirkung mit Energieklassen numerisch effizient bei der Strahldynamiksimulation eines Photoinjektors einsetzen lässt.

4.1.6. Zusammenfassung

In dieser Simulationsstudie wurde die teilchenbasierte FMM eingesetzt, um die Effekte der Raumladungswechselwirkung auf die Dynamik des Elektronenstrahls im DESY-PITZ Photoinjektor zu simulieren. Die Validierungsstudie gegenüber den gitterbasierten Simulationsprogrammen ASTRA 3D und KRACK 3 zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen der teilchenbasierten Modellierung. Aufgrund der räumlich adaptiven Felddauflösung durch die FMM ist das Simulationsergebnis im Vergleich zu den gitterbasierten Verfahren sensitiver auf die Mikrostruktur der Makroteilchenapproximation. In diesem Zusammenhang ermöglicht eine vereinfachte Nahfeldapproximation mit Plummer-Basisfunktionen die numerische Effizienz der FMM Simulation zu erhöhen. Bei der Optimierungsstudie zum Laserspotradius liefern die Simulationen mit teilchenbasierter und gitterbasierter Auswertung der Raumladungswechselwirkung konsistente Ergebnisse. Für die raumladungslimitierte Strahlerzeugung hängt das Simulationsergebnis der FMM vom Modell der Nahfeldwechselwirkung ab und sollte entweder durch den Abgleich mit experimentellen Werten oder durch ein Emissionsmodell für die Photokathode ergänzt werden. Mit der Erweiterung des Wechselwirkungsmodells durch Energieklassen kann die FMM numerisch effizient auf Teilchenstrahlen mit großer Energiestreuung angewendet werden. Eine Strahldynamiksimulation der DESY-PITZ Elektronenkanone zeigt, dass Energiestreuung sowohl die Emittanz als auch das Stromprofil des Teilchenstrahls beeinflusst.

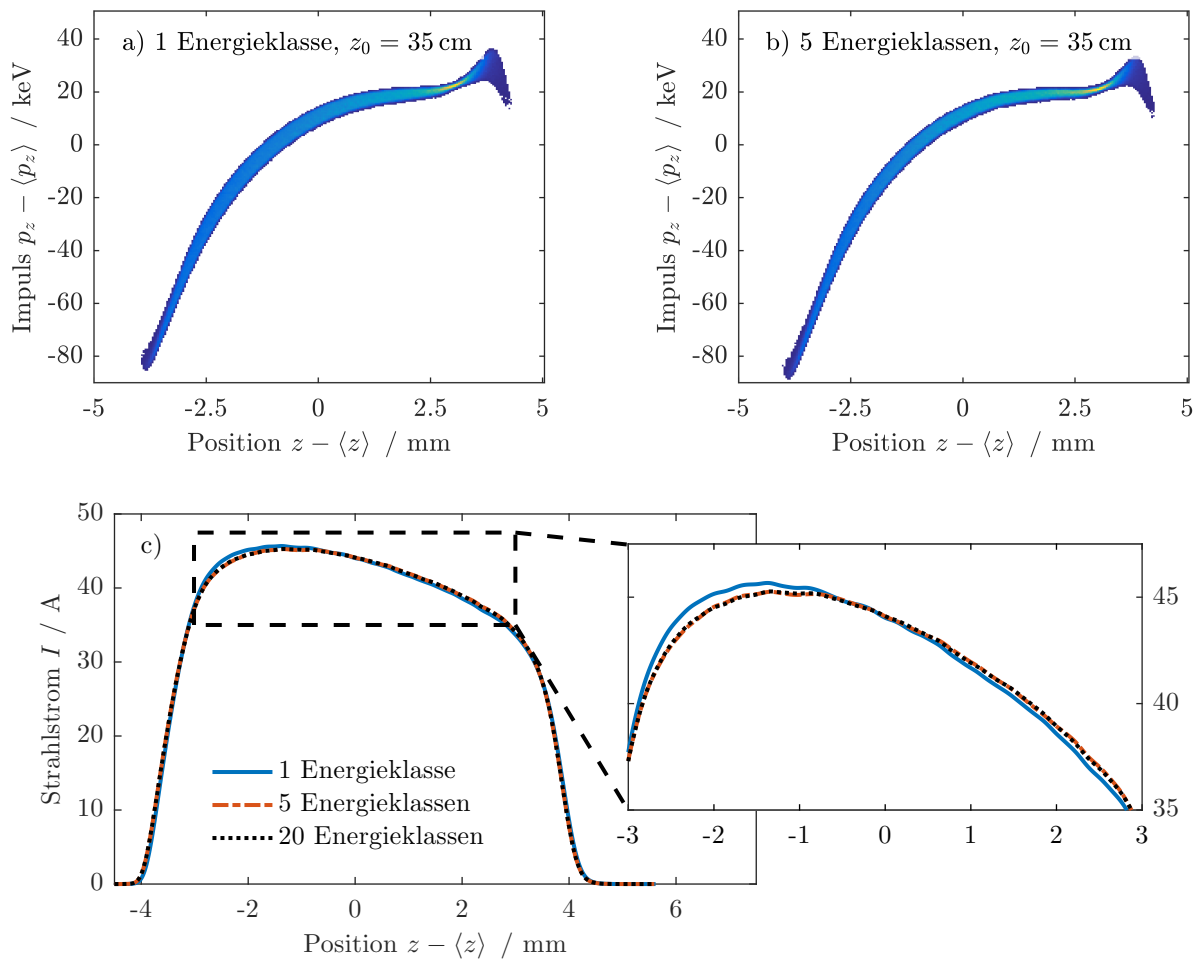


Abbildung 4.9.: Longitudinaler Phasenraum in a) und b) sowie Strahlstrom in c) am Ausgang der DESY-PITZ Elektronenkanone bei Strahlposition $z_0 = 35$ cm für eine Approximation der Raumladungswchselwirkung mit mehreren Energieklassen. Bereits fünf Energieklassen reichen aus, um den Effekt der Energiestreuung des Teilchenstrahls abzubilden. Der maximale Elektronenstrahlstrom ist für das Wechselwirkungsmodell mit mehreren Energieklassen kleiner als beim QES Teilchenstrahlmodell mit einer Energieklasse.

4.2. Simulation eines SRF Injektors für den E-XFEL

In dieser Simulationsstudie wird die Dynamik eines Elektronenstrahls bei der Strahlerzeugung innerhalb eines Photoinjektors mit supraleitender Hochfrequenzkavität (engl. Superconducting Radio Frequency SRF) modelliert. Das Ziel der Untersuchung ist es, die Phasenraumverteilung des Teilchenstrahls beim Verlassen des SRF Photoinjektors zu berechnen. Die hierfür generierten Ergebnisse dienen als Ausgangspunkt für weiterführende Simulationsstudien zur Untersuchung der Strahldynamik innerhalb des E-XFEL bei DESY in Hamburg.

4.2.1. Motivation

Am E-XFEL bei DESY in Hamburg werden Elektronenstrahlen mit einer Strahlenergie von bis zu 17.5 GeV genutzt, um intensive Röntgenstrahlungsblitze bis in den Subnanometer-Wellenlängenbereich zu generieren [Alt06]. Für den nominalen Betriebsmodus durchlaufen bei einer Wiederholrate von 10 Hz und einer Strahlpulslänge von 650 μs [Alt06] dabei bis zu 27.000 Elektronenpakete pro Sekunde [Sek15] die Beschleunigerstrecke. Im Rahmen eines Forschungsprogramms zur Erweiterung der Funktionalität des E-XFEL werden weitere Betriebsmodi für größere Strahlpulslängen und für den Dauerstrahlbetrieb untersucht [Sek15]. Ein Aspekt der dazu erforderlichen Anpassungen an der Strahlführung zieht die Verwendung eines SRF Photoinjektors auf Basis einer supraleitenden 1.6-Zellen TESLA Kavität in Betracht [Sek15]. Für eine Übersicht zum experimentellen Aufbau und aktuellen Entwicklungsstand des SRF Photoinjektors sei an dieser Stelle verwiesen auf [Vog19]. Im Hinblick auf den Einbau des neu entwickelten SRF Photoinjektors in die Strahlführung des E-XFEL ist eine vorausgehende Charakterisierung des generierten Elektronenstrahls unabdingbar. Die folgende Simulationsstudie untersucht dazu den Einfluss von Raumladungseffekten auf die Ladungsdichteverteilung und Phasenraumdynamik des erzeugten Teilchenstrahls. Außerdem werden die für den FEL Betrieb relevanten Strahlparameter ausgewertet und der Einfluss stochastischer Effekte durch die Makroteilchenapproximation des Elektronenstrahlstroms diskutiert.

4.2.2. Modell des DESY SRF Photoinjektors

Die Strahlführung des SRF Photoinjektors ist in Abb. 4.10 a) skizziert. Abbildung 4.10 b) zeigt den zeitlichen Verlauf des Kathodenstroms bei der Erzeugung des Elektronenstrahls mit $Q = 100 \text{ pC}$ Gesamtladung. In der Simulation für die Teilchenstrahldynamik wird dieser Prozess als Makroteilchenemission aus einem perfekt leitfähigen Halbraum modelliert. Der generierte Elektronenstrahl wird durch das elektrische Feld einer SRF Kavität beschleunigt und anschließend

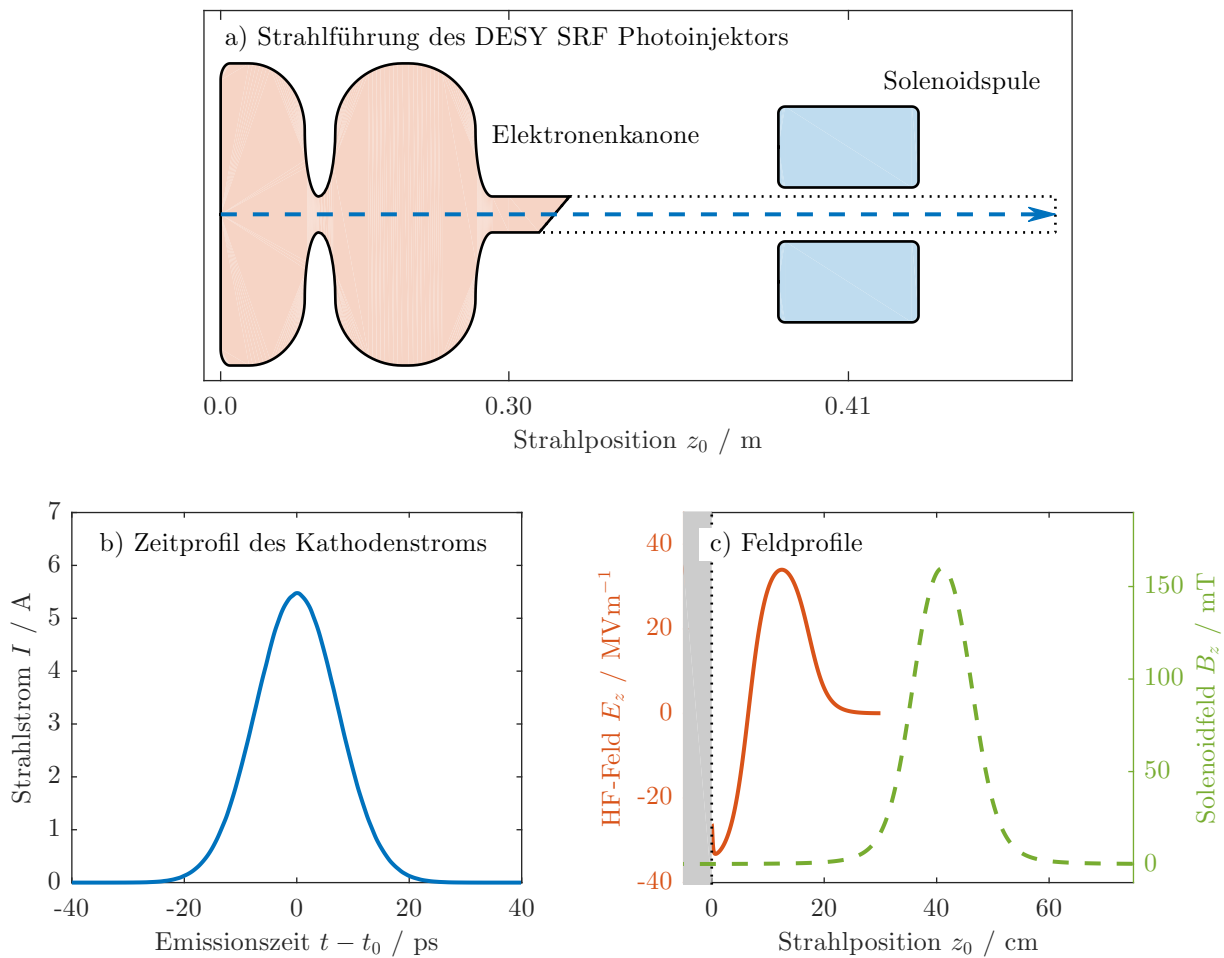


Abbildung 4.10.: Die Strahlführung des DESY SRF Photoinjektors in a) besteht aus einer Elektronenkanone und einer Solenoidspule. Der photoinduzierte Kathodenstrom in b) generiert einen Elektronenstrahl mit einer Gesamtladung von $Q = 100$ pC. Das elektrische Feld der SRF Kavität in c) hat eine maximale Amplitude von $E_z^0 = 40$ MVm^{-1} . Das Magnetfeld der Solenoidspule erreicht seinen Maximalwert, $B_z^0 = 160$ mT, bei Strahlposition $z_0 = 0.41$ m .

im Magnetfeld einer Solenoidspule transversal fokussiert. Abbildung 4.10 c) zeigt die Feldverteilungen für diese beiden Komponenten des SRF Photoinjektors. Die hier verwendete Konfiguration entspricht einem potenziellen Betriebsmodus für den Einsatz des SRF Photoinjektors im E-XFEL, welcher in einer vorausgegangenen Simulationsstudie bei DESY in Hamburg identifiziert worden ist [Baz20].

4.2.3. Modellierung der Ladungsdichteverteilung und des Phasenraums

Abbildung 4.11 zeigt drei Momentaufnahmen für die Ladungsdichteverteilung aus einer FMM Simulation des Elektronenstrahls mit $N = 10^6$ Makroteilchen. Weil die fokussierende Solenoidspule

aufgrund der supraleitenden Elektronenkanone verhältnismäßig weit von der Photokathodenoberfläche entfernt angebracht werden muss, machen sich in der transversalen Strahldynamik die Einflüsse des HF-Beschleunigungsfeldes und der Raumladungswechselwirkung deutlich bemerkbar. Direkt nach der Strahlerzeugung in Abb. 4.11 a) und Abb. 4.11 b) expandiert die Raumladungswechselwirkung den niederenergetischen Elektronenstrahl. Beim Austritt aus der Elektronenkanone in Abb. 4.11 c) und Abb. 4.11 d) ist die Ladungsdichteverteilung dementsprechend transversal aufgeweitet. Außerdem sind am vorderen und hinteren Ende des Teilchenstrahls zwei Bereiche mit einer erhöhten Ladungsdichte zu erkennen. Bis zum Ausgang des Photoinjektors bei Strahlposition $z_0 = 3$ m in Abb. 4.11 e) und Abb. 4.11 f) bildet sich um den weitestgehend homogenen Kernbereich des Elektronenstrahls eine um bis zu Faktor drei erhöhte Ladungsdichte aus. Die Dicke dieser Inhomogenität, welche die Strahlmitte in Form einer dünnen Hülle umgibt, beträgt ca. ein Zwanzigstel der transversalen Ausdehnung des Elektronenstrahls. Das Schnittbild 4.11 f) zeigt außerdem, dass sich die Inhomogenität in der transversalen Ladungsdichteverteilung nahezu über die gesamte Länge des Elektronenstrahls erstreckt. Eine weitere Besonderheit stellen die Randbereiche der Ladungsdichteverteilung am vorderen und hinteren Ende des Elektronenstrahls dar, welche eine nur geringe Ladungsdichte besitzen. Dadurch bedingt ist die räumliche Ausdehnung der Ladungsdichteverteilung annähernd doppelt so groß wie der eigentliche Kernbereich des Elektronenstrahls.

Abbildung 4.12 vergleicht die Phasenraumverteilung am Ausgang des Photoinjektors für zwei gitterbasierte Simulationen mit ASTRA 2D [Flo17] und KRACK 3 [CZD20] mit den Ergebnissen der teilchenbasierten FMM Simulation. Unabhängig von der Auswertung der Raumladungswechselwirkung ergeben sich die folgenden Gemeinsamkeiten: Die X-förmige Struktur im transversalen Phasenraum, wie z. B. für die ASTRA 2D Simulation in Abb. 4.12 a) zu sehen, deutet auf einen Gabelungseffekt bei der transversalen Fokussierung des Elektronenstrahls durch die Solenoidspule hin. Dieser Effekt entsteht, wenn die effektive Fokussierstärke entlang der longitudinalen Ausdehnung eines Teilchenstrahls aufgrund lokaler Inhomogenitäten in der Raumladungsdichte- und Energieverteilung variiert [Car89]. Für den untersuchten Teilchenstrahl werden die Elektronen in den diffusen Randbereichen zu stark fokussiert. Dies führt letztendlich zu den Teilchentrajektorien, welche den transversal defokussierten Anteil in der Phasenraumverteilung des Elektronenstrahls bilden. Im Vergleich dazu ist die effektive Fokussierstärke für die Strahlmitte aufgrund der größeren kinetischen Energie und Raumladungsabstoßung zwischen den Elektronen kleiner. Dementsprechend bleibt der Kernbereich des Elektronenstrahls transversal fokussiert. Die bogenförmige Struktur im longitudinalen Phasenraum, wie z. B. für die ASTRA 2D Simulation in Abb. 4.12 b) zu sehen, tritt unabhängig von der Raumladungswechselwirkung auf. Der Effekt entsteht durch den ca. 31° Phasenvorschub des 1.3 GHz HF-Beschleunigungsfelds

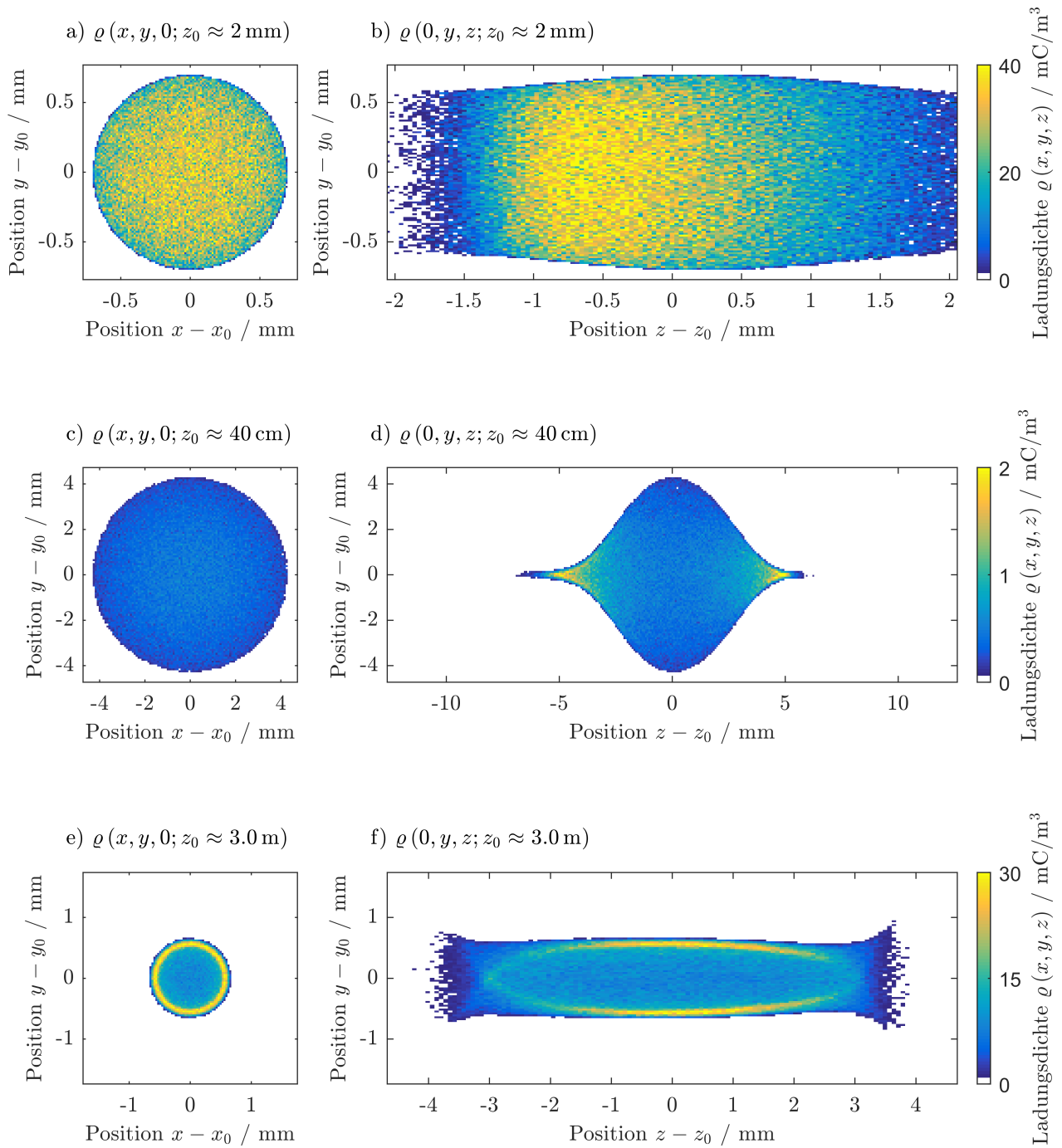


Abbildung 4.11.: Ladungsdichteverteilung des Elektronenstrahls direkt nach der Strahlerzeugung in a) und b), beim Verlassen der Elektronenkanone in c) und d) sowie am Ausgang des SRF Photoinjektors bei Strahlposition $z_0 = 3 \text{ m}$ in e) und f).

während der Erzeugung des Elektronenstrahls. Dementsprechend variiert das effektive Beschleunigungsfeld in Abhängigkeit von der longitudinalen Position innerhalb des Teilchenstrahls, sodass die Elektronen eine unterschiedliche Energie aufweisen. Die wellenförmige Struktur am longitudinal hinteren Ende des Teilchenstrahls ist wiederum auf den Einfluss nichtlinearer Raumladungskräfte zurückzuführen. Ein derartiger Effekt entsteht, wenn das Raumladungsfeld der bereits emittierten Elektronen mit dem HF-Feld der Beschleunigerkavität überlagert, sodass die nachfolgend emittierten Elektronen weniger stark beschleunigt werden.

Im direkten Vergleich zwischen den Simulationsergebnissen der beiden gitterbasierten Verfahren und der FMM Simulation fallen zwei Unterschiede auf. Zum einen variiert die lokale Verteilung der Makroteilchendichte im Kernbereich des Elektronenstrahls. Für die Simulationen mit ASTRA 2D in Abb. 4.12 a) und KRACK 3 in Abb. 4.12 c) ist eine rautenförmig abgesetzte Struktur im Zentrum der transversalen Phasenraumverteilung zu erkennen. In der Phasenraum-dichte für die teilchenbasierte FMM Simulation in Abb. 4.12 e) ist hingegen kein abgegrenzter Übergang zwischen Kern- und Außenbereich sichtbar. Außerdem ist die Makroteilchendichte im Zentrum etwas größer als bei den gitterbasierten Simulationen. Als Unterschied im longitudinalen Phasenraum fällt auf, dass die lokale Streuung bezüglich der Impulskomponente p_z für die Simulationen mit ASTRA 2D in Abb. 4.12 b) und KRACK 3 in Abb. 4.12 d) geringer ausfällt als bei der FMM Simulation in Abb. 4.12 f). Beide Unterschiede sind auf die Granularität in der Makroteilchenapproximation des Elektronenstrahls zurückzuführen. Im Gegensatz zu den gitterbasierten Verfahren löst die FMM Approximation der Raumladungsfelder diese lokale Granularität räumlich auf, sodass in der gezeigten Strahldynamiksimulation Kollisionen zwischen den Makroteilchen auftreten können. Der Effekt kann kompensiert werden, indem bei der FMM Simulation die Anzahl der Makroteilchen, N , oder die Glättung der Nahfeldwechselwirkungen, Δ_0^{P2P} , entsprechend angepasst werden.

4.2.4. Untersuchung der Strahlparameter für den FEL Betrieb

Für die Diskussion der folgenden Simulationsergebnisse ist vorwegzunehmen, dass die abgegebene Laserleistung eines FEL unter anderem durch die transversale Emittanz und die Energiestreuung des Elektronenstrahls limitiert wird. Anschaulich interpretiert muss die transversale Emittanz klein genug sein, sodass der divergierende Elektronenstrahl und der generierte Photonenstrahl im Undulator räumlich überlappen [Sch14]. Außerdem muss die Energiestreuung des Elektronenstrahls entsprechend klein sein, da nur ein schmalbandiger Anteil des Energiespektrums die Resonanzbedingung der FEL Verstärkung erfüllt [Sch14]. Für Photonquellen der vierten Generation, welchen auch der E-XFEL zuzuordnen ist [Alt06], sind dabei insbesonde-

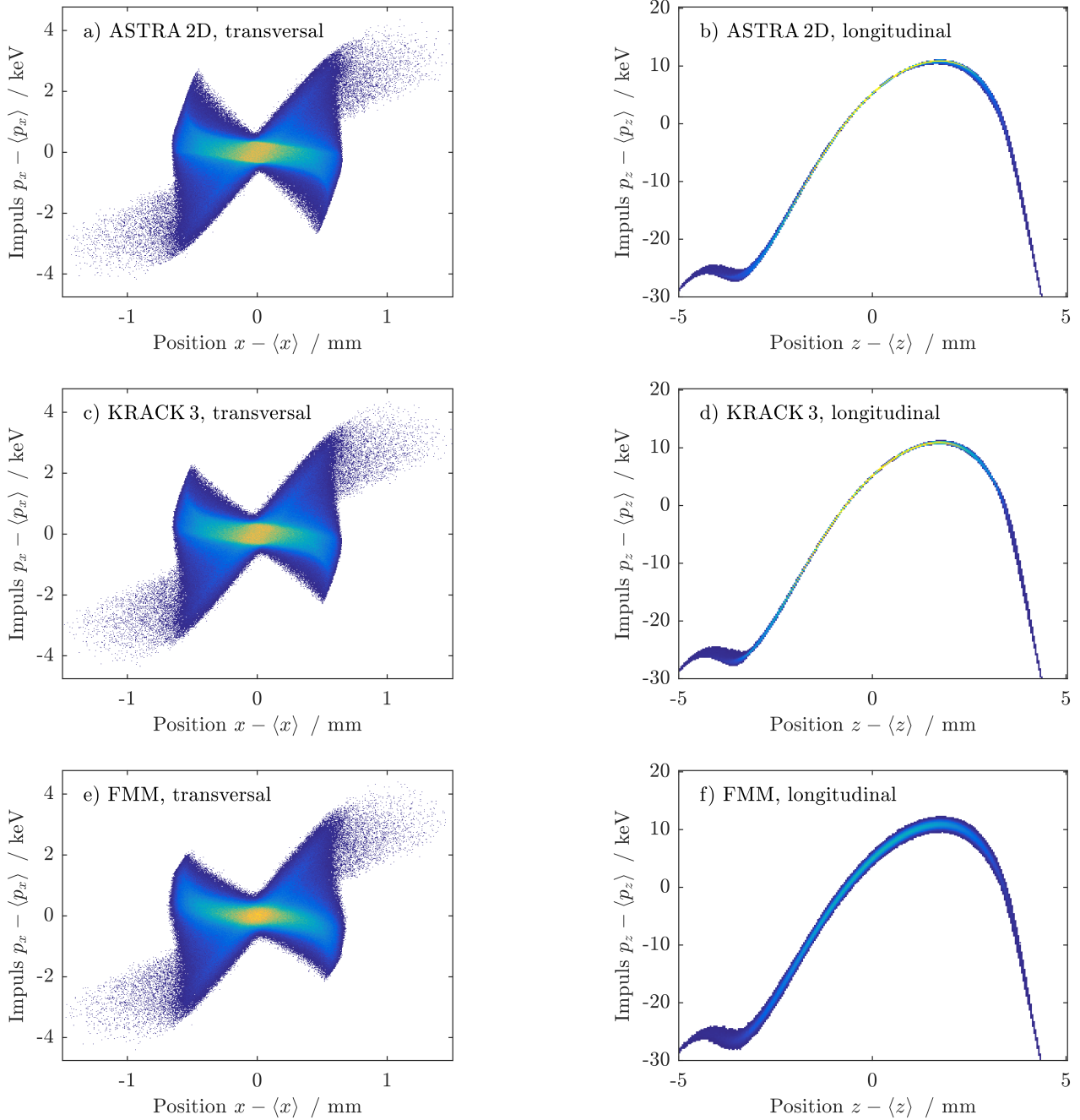


Abbildung 4.12.: Vergleich des transversalen und longitudinalen Phasenraums bei Strahlposition $z_0 = 3 \text{ m}$ für drei unterschiedliche Verfahren zur Simulation eines Elektronenstrahls mit $N = 2 \cdot 10^6$ Makroteilchen. ASTRA 2D in a) und b) nutzt ein zylindrisches Rechengitter mit $N_r = 70$ radialen und $N_l = 140$ longitudinalen Gitterpunkten. KRACK 3 in c) und d) verwendet ein hexahedrisches Rechengitter mit $N_x \times N_y \times N_z = 105 \times 105 \times 210$ Gitterpunkten. Die Nahfeldwechselwirkung für die FMM Simulation in e) und f) nutzt einen Makroteilchenradius von $\Delta_0^{\text{P2P}} = 30 \mu\text{m}$.

re die Scheibenemittanz und -energiestreuung für den Bereich der maximalen Ladungsdichte des Elektronenstrahls ausschlaggebend [Sch14]. Die Ergebnisse der weiterführenden Simulationsstudien bei DESY in Hamburg werden dementsprechend direkt durch die Modellierung der Strahlgenerierung innerhalb des SRF Photoinjektors beeinflusst.

Abbildung 4.13 vergleicht den Verlauf der transversalen Scheibenemittanz, ε_x , entlang der longitudinalen Ausdehnung des simulierten Elektronenstrahls. Die FMM Simulationen liefern im untersuchten Parameterbereich, wie z. B. bei der exemplarisch visualisierten Halbierung des Makroteilchenradius von $\Delta_0^{\text{P2P}} = 30 \mu\text{m}$ auf $\Delta_0^{\text{P2P}} = 15 \mu\text{m}$, konsistente Ergebnisse. Im gegebenen Fall variiert das Simulationsergebnis für die Scheibenemittanz im Kernbereich des Elektronenstrahls mit $|z| \leq 1 \text{ mm}$ um weniger als 1 %. In den longitudinalen Randbereichen für $|z| > 1 \text{ mm}$ unterscheiden sich die Simulationsergebnisse um maximal 5 %. Eine leichte Abhängigkeit von Δ_0^{P2P} ist zu erwarten, da sich bei einer Approximation des Elektronenstrahls mit $N = 2 \cdot 10^6$ Makroteilchen die Granularität der Ladungsdichteverteilung bemerkbar machen kann. Die Abweichung einer weiteren FMM Simulation mit verfeinerter Auflösung der Ladungsdichteverteilung für $N = 1 \cdot 10^7$ Makroteilchen und $\Delta_0^{\text{P2P}} = 15 \mu\text{m}$ beträgt maximal 2.5 %. Im Vergleich zur FMM ergibt sich bei den gitterbasierten Verfahren eine etwas größere Scheibenemittanz. Für ASTRA 2D beträgt die Abweichung gegenüber dem Ergebnis der FMM Simulationen in der Strahlmitte, bei $z = 0$, ca. 13 %. Dieser Wert kann auch für eine gröbere Gitterauflösung von $N_t = 35 \times N_l = 70$ reproduziert werden. Dementsprechend ist davon auszugehen, dass das numerische Anwachsen der Emittanz in ASTRA 2D nicht auf die Modellierung der Raumladungswechselwirkung zurückzuführen ist. Für KRACK 3 nähert sich das Simulationsergebnis bei sukzessiver Verfeinerung des Rechengitters von $35 \times 35 \times 70$ über $70 \times 70 \times 140$ zu $105 \times 105 \times 210$ bis auf ca. 2 % Abweichung in der Strahlmitte dem Ergebnis der FMM Simulationen an.

Abbildung 4.14 zeigt den Verlauf der Scheibenenergiestreuung, σ_E , innerhalb des Elektronenstrahls. Wie bereits für den longitudinalen Phasenraum in Abb. 4.12 zu sehen war, ist im untersuchten Parameterbereich das Ergebnis für die Scheibenenergiestreuung bei den FMM Simulationen größer als bei den gitterbasierten Verfahren. Der Vergleich zwischen den FMM Simulationen zeigt, dass die Scheibenenergiestreuung invers zur Makroteilchengröße, Δ_0^{P2P} , und zur Makroteilchenzahl, N , korreliert. Diese Abhängigkeit folgt nach (3.33) direkt aus der modifizierten Nahfeldwechselwirkung eines Makroteilchens, welche für die Makroteilchenladung $q_j \propto N^{-1}$ ebenfalls invers proportional zu N und Δ_0^{P2P} skaliert. Die Ergebnisse der gitterbasierten Rechnungen lassen sich durch die teilchenbasierte FMM Simulation nachbilden, indem Makroteilchenzahl und -größe entsprechend angepasst werden. Für den Elektronenstrahl des E-XFEL kann zur Vermeidung von Strahlinstabilitäten durch kohärente Synchrotronstrahlung

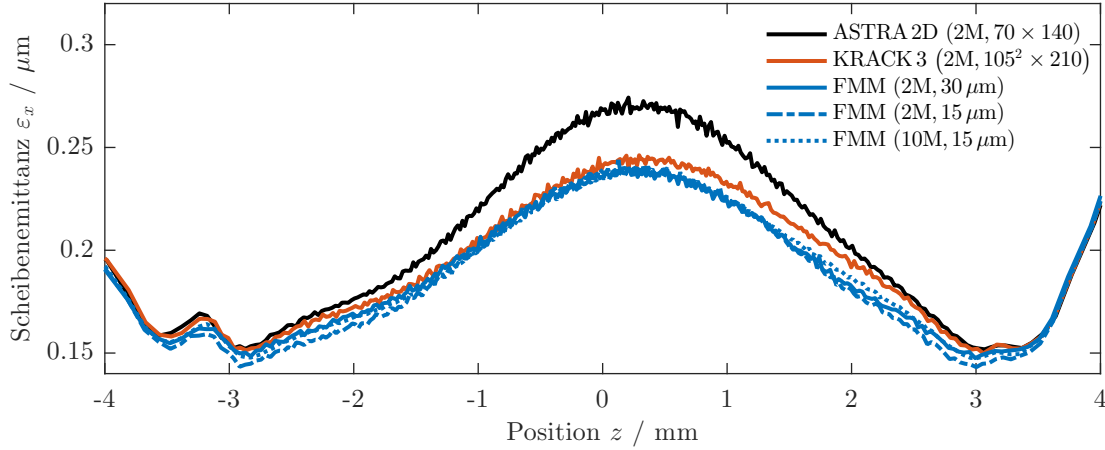


Abbildung 4.13.: Vergleich der Simulationsergebnisse für den Verlauf der transversalen Emittanz, ε_x , entlang einer longitudinalen Untergliederung des Teilchenstrahls in 300 Scheiben. Für jede Simulation sind die numerischen Werte für die Makroteilchenzahl, N , und die Größe des Rechengitters bzw. im Falle der FMM die Makroteilchengröße, Δ_0^{P2P} , angegeben. Es fällt auf, dass die transversale Emittanz in der teilchenbasierten FMM Simulation etwas kleiner ist als bei den gitterbasierten Methoden.

die Energiestreuung mittels eines Lasers zusätzlich um 3 keV bis 25 keV erhöht werden [Zie08; Ham18]. Für diesen Fall ist die Scheibenenergiebreite im Wesentlichen extern vorgegeben, sodass die Modellabhängigkeit zwischen den teilchen- und gitterbasierten Simulationen weniger ausschlaggebend ist.

4.2.5. Stochastische Effekte

Ein weiterer Aspekt der Simulationsstudien bei DESY untersucht die Einflüsse des initialen Schrotrauschens in der Ladungsdichteverteilung des Elektronenstrahls auf die Strahldynamik innerhalb des E-XFEL. Insbesondere in der Anfangsphase des Laserprozesses wird die Teilchenstrahldynamik aufgrund von selbst-amplifizierter spontaner Emission von Röntgenstrahlung direkt durch die spektralen Eigenschaften der Teilchenverteilung beeinflusst [Sch14]. Für die folgende Betrachtung wird das Stromspektrum des Elektronenstrahls bei Strahlposition $z_0 = 3$ m als diskrete Fourierreihe entwickelt. Dazu werden die Koeffizienten, \hat{I}_i , für jede Frequenz, $f_i = i \cdot \Delta f$, als Summe der Einzelteilchenspektren,

$$\hat{I}_i = \Delta f \sum_{j=1}^N q_j \frac{v_j}{c_0} e^{-i 2\pi \frac{f_i}{c_0} z_j}, \quad (4.1)$$

mit der longitudinalen Position, z_j , und der Geschwindigkeit, $v_j = c_0 \beta_j \cdot \mathbf{e}_z$, aller Makroteilchen, $j = 1 \dots N$, bestimmt. Abbildung 4.15 vergleicht die spektrale Leistungsdichte des Elektronen-

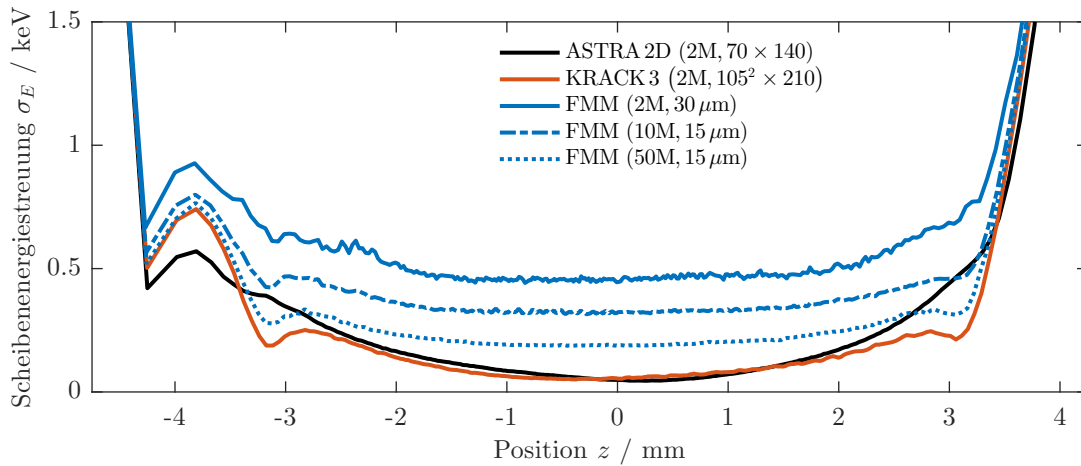


Abbildung 4.14.: Vergleich der Simulationsergebnisse für den Verlauf der Energiestreuung, σ_E , entlang einer longitudinalen Untergliederung des Teilchenstrahls in 300 Scheiben. Für jede Simulation sind die numerischen Werte für die Makroteilchenzahl, N , und die Größe des Rechengitters bzw. im Falle der FMM die Makroteilchengröße, Δ_0^{P2P} , angegeben. Bei der FMM Simulation besteht eine inverse Korrelation der Scheibenenergiestreuung für die Makroteilchenzahl bzw. den Makroteilchenradius.

strahlstroms für vier FMM Strahldynamiksimulationen. Der eigentliche Strompuls belegt den Frequenzbereich bis maximal ca. $f \sim 100$ GHz. Demgegenüber charakterisiert der Spektralbereich $f \gg 100$ GHz die Granularität der Makroteilchenabastdichte [HE88] für den Elektronenstrahl.

Die vier FMM Simulationen unterscheiden sich jeweils in der Makroteilchenanzahl für die Approximation des Elektronenstrahls. Die untersuchten Makroteilchenverteilungen sind mit dem Programm zur Generierung von Teilchenstrahlen für Simulationen mit ASTRA erstellt [Flo17]. Für die Referenzsimulation wird die Phasenraumverteilung des Elektronenstrahls mit $N = 2 \cdot 10^6$ Makroteilchen auf Basis einer Monte-Carlo (MC) Methode modelliert. Die initialen Phasenraumkoordinaten für jedes Makroteilchen sind dabei zufällig gewählt. Bei der quasi-MC Simulation ist die Makroteilchenverteilung durch eine sogenannte Niederdiskrepanz-Folge definiert, sodass statistische Fluktuationen reduziert werden. Im Vergleich zur Referenzsimulation in Abb. 4.15 wird dadurch eine deutliche Verminderung der spektralen Leistungsdichte des Elektronenstrahlstroms für den Frequenzbereich $f > 250$ GHz erreicht. Bei der MC Modellierung des Elektronenstrahls mit $N = 1 \cdot 10^7$ und $N = 5 \cdot 10^7$ Makroteilchen ist in Abb. 4.15 ebenfalls eine Reduktion der spektralen Leistungsdichte für den Frequenzbereich $f > 250$ GHz zu beobachten. Im Unterschied zur quasi-MC Simulation werden die Signalbeiträge mit Frequenzen zwischen $f = 500$ GHz und $f = 1500$ GHz jedoch weniger stark unterdrückt.

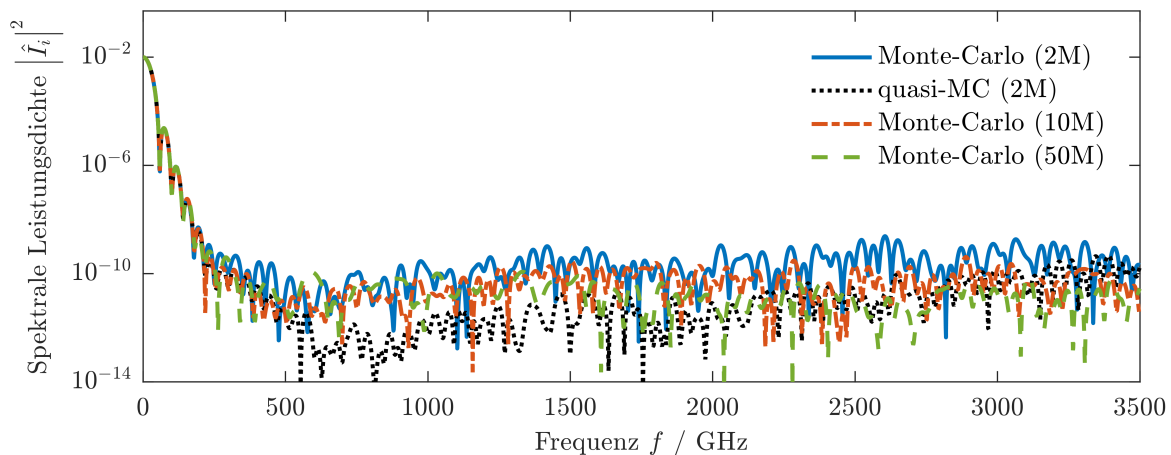


Abbildung 4.15.: Vergleich des Stromspektrums bei Strahlposition $z_0 = 3$ m für drei FMM Simulationen mit $\Delta_0^{\text{P2P}} = 15 \mu\text{m}$ und einer unterschiedlichen Anzahl von Makroteilchen zur Approximation des Elektronenstrahls. Die initialen Makroteilchenverteilungen sind mit dem Programm zur Erzeugung von Teilchenstrahlen in ASTRA erstellt [Flo17]. Bei der quasi-MC Modellierung wird dazu die optionale Rauschunterdrückung genutzt.

4.2.6. Zusammenfassung

In dieser Studie wurde der Elektronenstrahl eines SRF Photoinjektors für eine zukünftige Ausbaustufe des E-XFEL mittels einer gitterfreien FMM Simulationen charakterisiert. Die transversale Strahldynamik stimmt sehr gut mit den Ergebnissen einer gitterbasierten Modellierung durch KRACK 3 überein. Bei der longitudinalen Strahldynamik skaliert die Scheibenenergiebreite für die FMM Modellierung invers proportional zur Makroteilchenanzahl, N , und zum Makroteilchenradius, Δ_0^{P2P} . Diese Modellabhängigkeit entsteht, weil in der FMM Approximation des Raumladungsfelds die granulare Makroteilchenabtastdichte des Elektronenstrahls lokal aufgelöst werden kann. Bei entsprechender Wahl der Parameterwerte für N und Δ_0^{P2P} liefern die FMM Simulation und die Modellierung mit KRACK 3 konsistente Ergebnisse. Eine Analyse des Stromspektrums zeigt außerdem, wie durch eine Erhöhung der Makroteilchenanzahl bzw. bei Verwendung einer quasi-MC Niederdiskrepanz-Folge die spektrale Leistungsdichte des Schrotrauschens im Frequenzbereich $f > 250$ GHz abfällt. Der Einfluss solcher stochastischer Effekte auf die Strahldynamik des E-XFEL soll in einer weiterführenden Simulationsstudie bei DESY genauer untersucht werden.

4.3. Strahldynamik eines THz SASE FEL bei DESY-PITZ

In einem Grundlagenexperiment bei DESY-PITZ soll der Elektronenstrahl eines Photoinjektors zur Erzeugung hoch intensiver THz Strahlung genutzt werden [Li19]. Das Funktionsprinzip nutzt den Verstärkungsprozess eines freien Elektronen Lasers (FEL), welcher durch die selbst-amplifizierte spontane Emission (SASE) von Strahlungspulsen initiiert wird. Einer der Schlüsselfaktoren zur Durchführung des Experiments besteht darin, den Transport des Elektronenstrahls ohne Ladungsverlust zu gewährleisten. Hierfür ist insbesondere die Strahldynamik innerhalb der Undulatorsektion des THz SASE FEL entscheidend. In einer numerischen Studie werden zu diesem Zweck die Phasenraumdynamik des Elektronenstrahls sowie das generierte Strahlungsfeld durch ein vollständiges Wechselwirkungsmodell mit teilchenbasierten LW Feldern simuliert. Die Ergebnisse zeigen, dass für die Modellierung sowohl retardierte Raumladungs- als auch Abstrahlungseffekte eine signifikante Rolle spielen.

4.3.1. Motivation

Unter den Anwendern des E-XFEL besteht ein zunehmendes Forschungsinteresse an einer Klasse von Experimenten, zu deren Durchführung eine Photonenquelle für intensive THz Strahlungspulse mit einstellbarer Wellenlänge benötigt wird [Zal18]. Ein Konzeptvorschlag sieht hierzu vor, die THz Strahlung mittels eines SASE FEL für einen Elektronenstrahl wie den des PITZ Photoinjektors zu generieren [Sch12]. Für einen 16.7 MeV Elektronenstrahl mit bis zu 4 nC Gesamtladung ließen sich auf diese Weise THz Strahlungspulse bei einer Wellenlänge von 100 μm mit potentiell 40 MW Spitzenleistung erzeugen [Kra18]. Ein Grundlagenexperiment zur experimentellen Umsetzung einer derartigen THz Photonenquelle befindet sich momentan im Aufbau bei DESY-PITZ in Zeuthen [Li19]. Der Strahltransport durch die Undulatorsektion des THz SASE FEL gestaltet sich hierbei als besondere Herausforderung, da über eine Länge von 3.4 m keine Möglichkeit besteht den Elektronenstrahl transversal zu fokussieren [Kra18].

Um die Durchführung des Experiments durch numerische Modellierungen zu unterstützen, werden in dieser Studie drei konkrete Aspekte untersucht [Sch19b]. Erstens ermöglicht eine Analyse der Strahldynamik innerhalb des Undulators die Divergenz des 4 nC Elektronenstrahls aufgrund der Raumladungswechselwirkung zu quantifizieren. Zweitens zeigt die Studie wie sich durch SASE eine mikrostrukturierte Ladungsdichteverteilung im longitudinalen Phasenraum des Elektronenstrahls ausbildet. Drittens lässt sich mit dem teilchenbasierten LW Verfahren die Ausbildung des THz Strahlungsfelds *ab initio* modellieren.

4.3.2. Magnetfeld eines planaren Undulators

Das Magnetfeld eines planaren Undulators kann durch den analytischen Potentialansatz [Wil09],

$$\phi(y, z) = k_U^{-1} \sinh(k_U y) \sin(k_U z), \quad (4.2)$$

$$\mathbf{B}(y, z) = -B_0 \vec{\nabla} \phi(y, z), \quad (4.3)$$

beschrieben werden. Abbildung 4.16 zeigt zu diesem Modell das Magnetfeld und die resultierende Elektronenstrahlführung für den vorderen Bereich der Undulatorsektion des DESY THz SASE FEL. Die B_y Komponente des Magnetfelds bewirkt eine transversale Oszillation des Elektronenstrahls bezüglich der x -Koordinate und erzeugt auf diese Weise das THz Strahlungsfeld. Aus der B_z Komponente resultiert ein Fokussiereffekt in transversaler Richtung entlang der y -Koordinate. Für die Feldamplitude, $B_0 = 1.28 \text{ T}$, und die Undulatorwellenlänge, $\lambda_U = 2\pi k_U^{-1} = 3 \text{ cm}$, werden die entsprechenden Parameterwerte aus der Designstudie in [Kra18] angesetzt. Die Gesamtlänge des Undulators entspricht $N_U = 120$ Periodenlängen, wobei zum Eingang und Ausgang des Undulators hin die Magnetfeldamplitude, $B_0(z)$, über eine Länge von jeweils $2\lambda_U$ hinweg linear abfällt. Letzteres erzeugt einen gleichmäßigen Übergang bei der Ein- und Auskopplung des Elektronenstrahls in die Undulatorsektion und verhindert auf diese Weise eine transversale Driftbewegung entlang der x -Koordinate.

4.3.3. Numerisches Modell für den THz SASE FEL

Die Simulation der Strahldynamik des THz SASE FEL gestaltet sich besonders aufwändig, da für den untersuchten Elektronenstrahl eine vollständige Modellierung der elektromagnetischen Wechselwirkungsfelder erforderlich ist. Einerseits spielt für einen Elektronenstrahl mit 4 nC Gesamtladung bei einer moderaten Strahlenergie von 16.7 MeV die Raumladungswchselwirkung eine entscheidende Rolle. Andererseits ist aufgrund der oszillierenden Strahlführung ein signifikanter Einfluss durch elektromagnetische Strahlungsfelder zu erwarten. Die vollständige Modellierung aller elektromagnetischen Wechselwirkungseffekte erfolgt in dieser Studie mit dem teilchenbasierten LW Modell aus Kapitel 3.6. Außerdem wird dem Energieverlust aufgrund der emittierten Strahlungsleistung durch das Dämpfungsmodell aus Kapitel 3.6.2 für jedes Teilchen separat Rechnung getragen. Um den Einfluss der Strahlungsfelder auf die Strahldynamik zu verdeutlichen, wird zusätzlich eine Simulation mit retardierten Raumladungsfeldern ohne Strahlungswechselwirkung (OS) durchgeführt. Dazu vernachlässigt das OS Modell in (3.56) den Strahlungsanteil, $\propto |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-1}$, der LW Felder. Für einen weiteren Vergleich wird die Strahldynamik

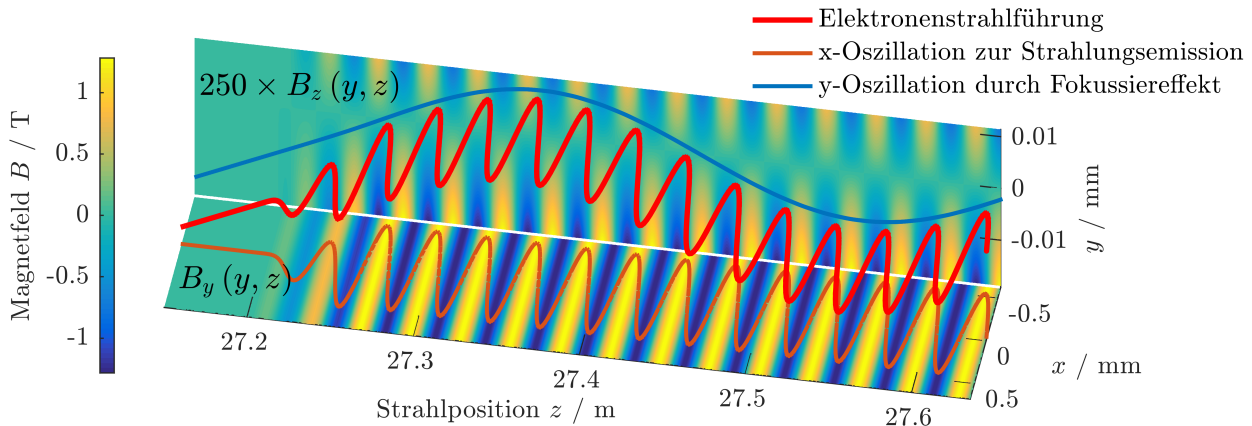


Abbildung 4.16.: Ausschnitt zum Modell eines planaren Undulators mit $N_U = 120$ Periodenlängen für die Simulation des DESY THz SASE FEL. Die transversale Komponente des Magnetfelds, B_y , bewirkt eine Oszillation des Elektronenstrahls in der xz -Ebene mit der Undulatorwellenlänge $\lambda_U = 3$ cm. Die longitudinale Komponente, B_z , fokussiert den Elektronenstrahl in der transversalen y -Richtung. Zwecks Einkopplung des Elektronenstrahls sinkt die Magnetfeldamplitude zum Eingang des Undulators hin über eine Länge von $2 \lambda_U$ linear ab.

außerdem mit einer QES Approximation der Wechselwirkungsfelder modelliert.

Die initiale Makroteilchenapproximation des Elektronenstrahls stammt aus einer numerischen Studie zur Optimierung der Strahlführung, welche bei DESY in Zeuthen durchgeführt wurde [Kra18]. In dieser Studie wird die Strahldynamik eines 4 nC Elektronenstrahls von der Photokathode des PITZ Injektors bis zum Eingang des Undulators bei Strahlposition $z_0 = 27.15$ m für insgesamt $N = 2 \cdot 10^5$ Makroteilchen mit ASTRA simuliert. Aufgrund der Speicher- und Rechenzeiteinschränkungen durch das LW Modell approximieren die nachfolgend diskutierten Simulationen den selben Elektronenstrahl mit maximal $N = 5 \cdot 10^4$ bis $N = 1 \cdot 10^5$ Makroteilchen. Außerdem wird zu Simulationsbeginn, weil für die initiale Ladungsdichteverteilung keine zeitretardierte Größen verfügbar sind, die LW Raumladungswechselwirkung mit der Erweiterung aus Kapitel 3.6.2 durch generisch retardierte Teilchentrajektorien approximiert.

Für die Analyse der THz Strahlung wird in (3.56) der Strahlungsanteil, $\propto |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-1}$, aus den LW Feldern auf einem Feldmonitor (vgl. Kapitel 3.6.2) am Ende der Undulatorsektion bei Strahlposition $z_0 = 30.8$ m ausgewertet. Der zweidimensionale Feldmonitor ist frontal zur Strahlachse ausgerichtet und besitzt eine maximale Gitterauflösung von $\Delta x = 0.2$ mm mal $\Delta y = 0.4$ mm. Das Strahlungsfeld wird mit der Zeitschrittweite $\Delta t = 20$ fs aufgelöst, sodass alle elektromagnetischen Felder bis zu einer maximalen Frequenz von $f_{\max} \approx 25$ THz erfasst werden.

4.3.4. Teilchenstrahldynamik innerhalb des Undulators

Zur Quantifizierung der raumladungsinduzierten Strahldivergenz dient die transversale Breite des Elektronenstrahls im Undulator als Kenngröße. Abbildung 4.17 zeigt die Simulationsergebnisse für die beiden teilchenbasierten LW und OS Wechselwirkungsmodelle. Der untersuchte Elektronenstrahl ist bezüglich der x -Koordinate fokussiert, sodass die Strahlbreite, σ_x , zur Mitte des Undulators hin ein lokales Minimum erreicht. Aufgrund der natürlichen Fokussierung durch das Magnetfeld des Undulators vollzieht der Elektronenstrahl eine Betatronoszillation in y -Richtung. Bei einer Strahlenergie entsprechend von $\gamma \approx 32.8$ folgt mit dem Undulatorparameter,

$$K = \frac{q_e B_0}{m_e c_0 k_U} = 3.5855, \quad (4.4)$$

für die Wellenlänge der Betatronoszillation [HK07]

$$\lambda_y \approx \frac{\sqrt{2} \gamma}{K} \frac{2\pi}{k_U} = 38.8 \text{ cm}. \quad (4.5)$$

Dementsprechend oszilliert die simulierte Strahlbreite, σ_y , mit der Wellenlänge $\lambda_y/2$ um den Mittelwert $\langle \sigma_y \rangle \approx 0.13 \text{ mm}$. Im Vergleich zum OS Modell ist die Strahlbreite, σ_x , am hinteren Ende des Undulators für die Simulation mit dem LW Modell signifikant größer. Die Diskrepanz zwischen den beiden Wechselwirkungsmodellen wird ungefähr ab Strahlposition $z_0 = 28 \text{ m}$ sichtbar. Dieser Unterschied zeigt, dass die Wechselwirkung der Elektronen innerhalb des Undulators wesentlich durch das generierte Strahlungsfeld beeinflusst wird.

Tabelle 4.3 vergleicht die strahldynamischen Größen am Ausgang des Undulators für das LW und OS Modell sowie für eine FMM Simulation mit der QES Approximation des Wechselwirkungsfelds. Das Ergebnis für die QES Modellierung repräsentiert die selbe Approximation der Strahldynamik, welche beispielsweise in den Simulationsprogrammen ASTRA 3D bzw. KRACK 3 verwendet wird. Der direkte Vergleich zwischen der LW Modellierung mit den beiden vereinfachten Modellen offenbart signifikante Unterschiede in den Simulationsergebnissen für die Energiestreuung, σ_E , und die Strahlemittanz, ε . Dies zeigt, dass weder das OS Modell noch die gebräuchlichen Simulationsprogramme mit QES Approximation die Phasenraumdynamik des Elektronenstrahls korrekt wiedergeben können.

Für die transversale Strahlbreite, σ_x , ist bemerkenswert, dass die QES Approximation vermeintlich besser mit dem LW Modell übereinstimmt als die OS Modellierung. Jedoch konnte diese Übereinstimmung für Erweiterungen der QES Approximation, wie beispielsweise durch die Methode der Energieklassen aus Kapitel 3.5, nicht reproduziert werden. Stattdessen handelt es

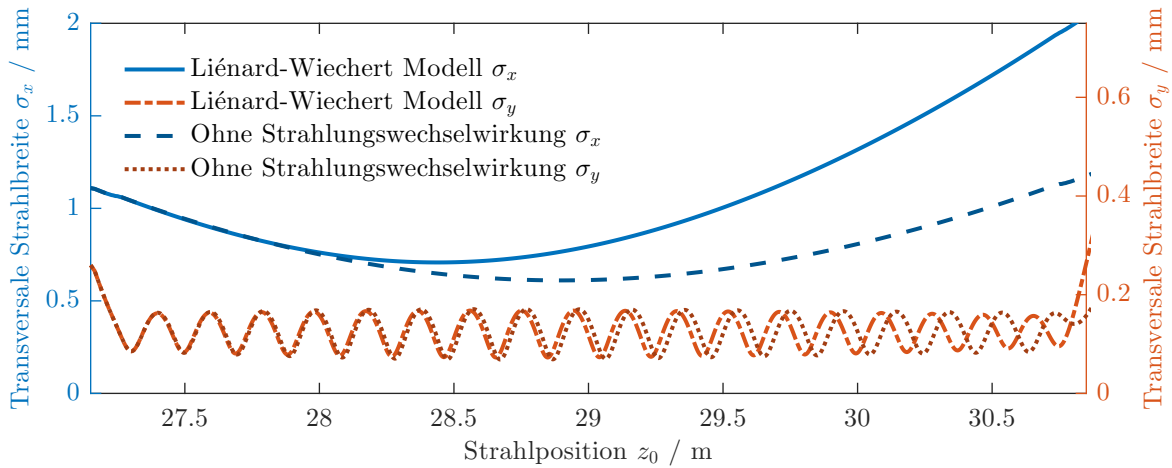


Abbildung 4.17.: Transversale Breite des Elektronenstrahls im Undulator für eine Simulation mit dem LW bzw. OS Wechselwirkungsmodell. Der Vergleich zeigt, dass die Strahlbreite in der x -Koordinate, σ_x , maßgeblich durch die Strahlungswechselwirkung beeinflusst wird. Die Strahlbreite in der y -Koordinate, σ_y , wird durch den Fokussiereffekt des Undulators limitiert.

Strahlparameter	LW Modell	OS Modell	QES Approximation
Strahlbreite σ_x / mm	2.1	1.2	2.2
Strahlbreite σ_y / mm	0.4	0.2	0.3
Strahllänge σ_z / mm	2.2	2.2	2.2
Energiestreuung σ_E / keV	341.3	108.3	90.9
Emittanz ε_x / π mmmrad	14.6	6.7	11.6
Emittanz ε_y / π mmmrad	8.1	7.2	6.5
Emittanz ε_z / π mmmrad	1368.1	295.7	277.6

Tabelle 4.3.: Strahlparameter am Ausgang des Undulators bei Strahlposition $z_0 = 30.9$ m für das LW und OS Wechselwirkungsmodell sowie für eine FMM Simulation mit QES Approximation der Raumladungsfelder.

sich hierbei um ein zufälliges Artefakt, welches durch die Definition des Ruhesystems über die gemittelte Makroteilchengeschwindigkeit zu Stande kommt. Für den untersuchten Elektronenstrahl ist diese Definition nicht eindeutig, da die longitudinale Ausdehnung der Teilchenverteilung mit $\sigma_z \approx 2$ mm nicht vernachlässigbar klein gegenüber der Undulatorwellenlänge, $\lambda_U = 3$ cm, ist. Dementsprechend unterscheiden sich innerhalb des Undulators die Geschwindigkeiten der einzelnen Makroteilchen maßgeblich von der mittleren Teilchenstrahlgeschwindigkeit.

4.3.5. Ausbildung der Mikrostruktur

Abbildung 4.18 zeigt das Simulationsergebnis der LW Modellierung für den projizierten Phasenraum beim Verlassen des Undulators. Der Elektronenstrahl in Bildausschnitt 4.18 a) ist bezüglich der x -Koordinate defokussiert und durch die Strahldivergenz auf mehr als 1 cm transversal aufgeweitet. Demgegenüber ist die Ausdehnung bezüglich der y -Koordinate in Bildausschnitt 4.18 b) aufgrund der natürlichen Fokussierung durch den Undulator um einen Faktor fünf kleiner. Der longitudinalen Phasenraum in Bildausschnitt 4.18 c) zeigt die für den Elektronenstrahl eines FEL charakteristische Mikrostruktur (MS). Eine Theorie zur Ausbildung der MS in einem FEL wird in [Sch14] beschrieben. Das im Undulator erzeugte Strahlungsfeld mit der Amplitude E_x und der Wellenlänge λ_{THz} bewirkt eine zeitliche Modulation,

$$\frac{d}{dt}E = -\frac{q_e c_0 K}{2\gamma} E_x \cos[\psi(t)], \quad (4.6)$$

der Teilchenenergie, E . Die Energieänderung hängt von der ponderomotorische Phase,

$$\psi(t) = \frac{2\pi}{\lambda_U} z(t) + \frac{2\pi}{\lambda_{\text{THz}}} [z(t) - c_0 t], \quad (4.7)$$

ab, wobei $z(t)$ die Position des Teilchens bezüglich des Strahlungsfelds beschreibt. Diese Wechselwirkung mit dem Strahlungsfeld äußert sich in Abb. 4.18 c) durch die lokale Streuung der Teilchenimpulse, p_z , und in Tab. 4.3 durch die vergleichsweise große Energiestreuung, σ_E , für das LW Modell. Außerdem bildet sich aufgrund der definierten Phasenbeziehung zwischen dem Strahlungsfeld und der Energieänderung über mehrere Periodenlängen des Undulators hinweg eine longitudinale Modulation der Raumladungsdichte aus [HK07]. Die Länge λ_{MS} in Bildausschnitt 4.18 c) entspricht dem Abstand zwischen den Teilchenpositionen, $z(t)$, mit einer konstanten ponderomotorischen Phase, $\frac{d}{dt}\psi(t) = 0$, und damit näherungsweise der Wellenlänge [Wie15],

$$\lambda_{\text{THz}} \approx \frac{\lambda_U}{2\gamma^2} \left(1 + \frac{K^2}{2}\right) = 114 \mu\text{m}, \quad (4.8)$$

für das Strahlungsfeld. Durch Variation des Undulatorparameters, K , über die Magnetfeldamplitude, B_0 , konnte dieser Zusammenhang zwischen λ_{MS} und λ_{THz} in weiteren Simulationsstudien für unterschiedliche Wellenlängen konsistent reproduziert werden.

Bei einem SASE FEL beginnt die Ausbildung der MS mit dem initialen Strahlungsfeld, welches durch spontane Emission aus dem Schrotrauschen der Elektronenverteilung des Teilchenstrahls hervorgeht. Abbildung 4.19 zeigt, wie zwischen Strahlposition $z_0 = 27.6$ m und $z_0 = 28.6$ m die entsprechenden Wellenlängen, λ_{MS} , in der spektralen Leistungsdichte des Elektronenstrahlstroms verstärkt werden. Die Spektralkomponenten für $100 \mu\text{m} < \lambda_{\text{MS}} < 115 \mu\text{m}$ resultieren aus den Grundfrequenzen des Strahlungsfelds, welches der untersuchte Elektronenstrahl im Undulator erzeugt. Darüber hinaus sind für das Emissionsspektrum eines Undulators mit $K > 1$ zusätzliche Effekte durch ungerade Harmonische, wie z. B. die zweite Oberschwingung im Bereich $33 \mu\text{m} < \lambda_{\text{MS}} < 38 \mu\text{m}$, zu erwarten [Sch14]. Aufgrund der transversalen Dynamik und der Ausdehnung des Elektronenstrahls sind im Spektrum außerdem die Beiträge von geraden Harmonischen, wie z. B. für die erste Oberschwingung bei $50 \mu\text{m} < \lambda_{\text{MS}} < 60 \mu\text{m}$, zu sehen [Sch14].

4.3.6. Analyse der Strahlung des THz SASE FEL

Im Unterschied zur inkohärenten Abstrahlung eines unstrukturierten Teilchenstrahls überlagern sich die elektromagnetischen Felder der mikrostrukturierten Elektronenverteilung phasensynchron. Der Verstärkungseffekt in einem SASE FEL generiert auf diese Weise einen kohärenten Strahlungspuls [Sch14]. Abbildung 4.20 vergleicht hierzu eine Momentaufnahme der E_x -Komponente des Strahlungsfelds auf einem Schirm an der Position $z_s = 30.8$ m zum Zeitpunkt $t_s = 102.85$ ns. Während der Erzeugung des abgebildeten Strahlungsfelds befand sich der Elektronenstrahl ungefähr in der Mitte des Undulators bei Strahlposition $z_0 \approx 28.9$ m. Das Strahlungsfeld in Bildausschnitt 4.20 a), welches in einer Referenzsimulation ohne Raumladungswchselwirkung erzeugt wird, ist erwartungsgemäß inkohärent. Im Vergleich dazu zeigt das Simulationsergebnis für die LW Modellierung in Bildausschnitt 4.20 b) qualitative Ähnlichkeit mit der Feldverteilung einer kohärenten Punktlichtquelle. Außerdem ist die Feldstärke in Abb. 4.20 b) um bis zu einen Faktor 3.5 größer als in Abb. 4.20 a).

Abbildung 4.21 zeigt die mittlere Feldstärke, $E_x(\gamma\theta)$, der elektromagnetischen Strahlung aus Abb. 4.20 in Abhängigkeit des transversalen Abstrahlungswinkels θ . Für die inkohärente Feldverteilung der Simulation ohne Wechselwirkungen ist die mittlere Feldstärke verschwindend klein. Bei der Feldverteilung für die LW Simulation überlagern die Strahlungsfelder aufgrund der Kohärenz hingegen konstruktiv. Für die Phase der elektromagnetischen Welle gilt in der

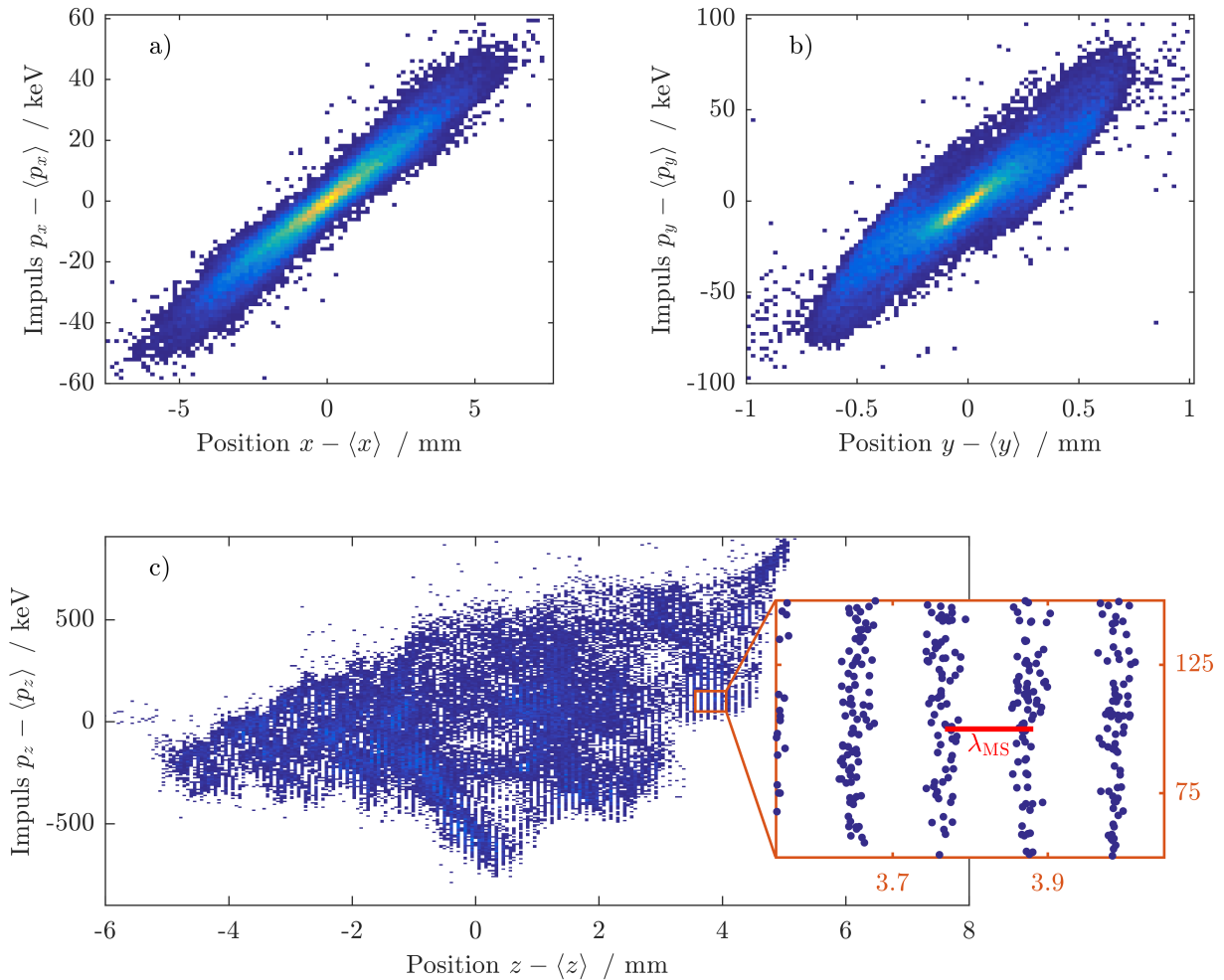


Abbildung 4.18.: Phasenraumprojektion des Elektronenstrahls bezüglich der Oszillationsrichtung, x , in a), der Fokussierichtung, y , in b) und der longitudinalen Koordinate, z , in c) am Ausgang des Undulators bei Strahlposition $z_0 = 30.88$ m. In der Simulation werden die Wechselwirkungen durch teilchenbasierte LW Felder und die Strahlungsdämpfung mit dem ALD Modell berechnet. Der Elektronenstrahl in a) und b) ist beim Verlassen des Undulators transversal defokussiert. Die Mikrostrukturgröße, λ_{MS} , im longitudinalen Phasenraum in c) stimmt mit der theoretischen Wellenlänge, $\lambda_{\text{THz}} \approx 114 \mu\text{m}$, des THz SASE FEL überein.

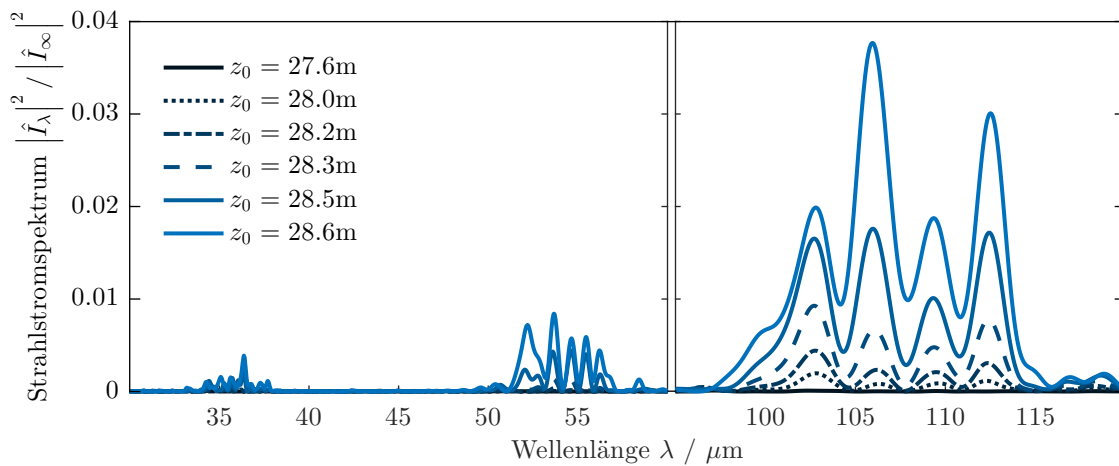


Abbildung 4.19.: Spektrale Leistungsdichte des Elektronenstrahlstroms $|\hat{I}_\lambda|^2$ gemäß (4.1) im Undulator. Durch die Wechselwirkung mit der generierten THz Strahlung ist ab Strahlposition $z_0 > 27.5$ m eine Mikrostruktur im longitudinalen Phasenraum des Elektronenstrahls deutlich sichtbar.

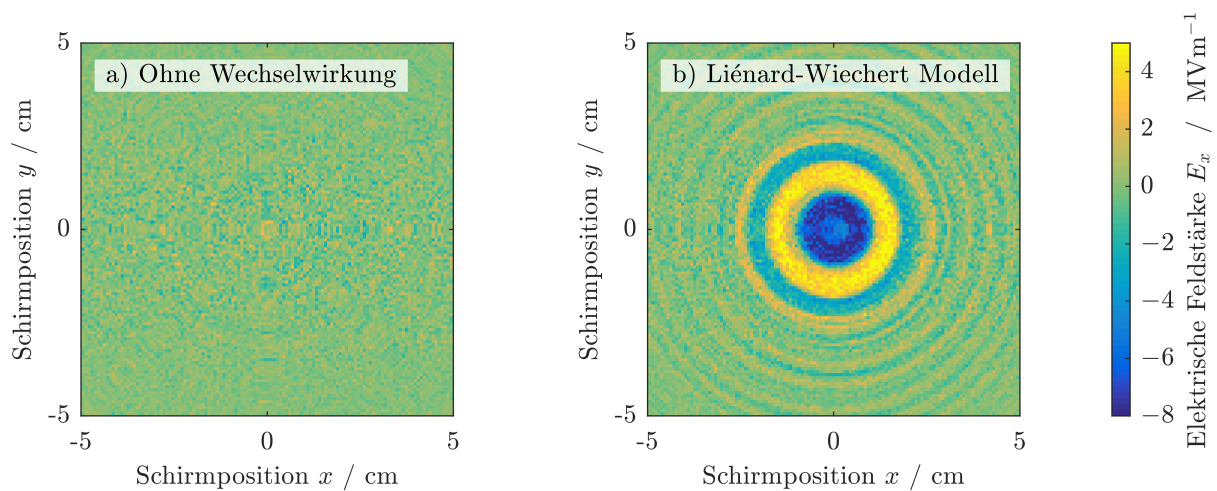


Abbildung 4.20.: Momentaufnahme der elektrischen Feldstärke, E_x , für das Strahlungsfeld auf einem virtuellen Schirm bei $z_s = 30.8$ m zum Zeitpunkt $t_s = 102.86$ ns. Die Referenzsimulation in a) erfolgt ohne Wechselwirkungseffekte. In b) ist das Ergebnis für die teilchenbasierte LW Modellierung dargestellt. Das abgebildete Strahlungsfeld wurde ungefähr zur Zeit $t_0 \approx 96.5$ ns bei Strahlposition $z_0 \approx 28.9$ m emittiert.

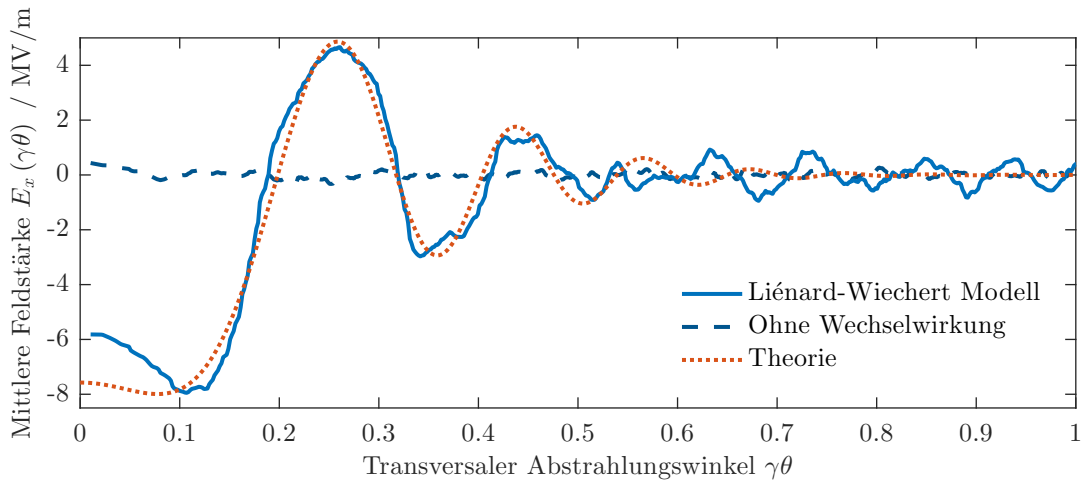


Abbildung 4.21.: Winkelverteilung für die mittlere Feldstärke der THz Strahlung auf einem virtuellen Schirm bei $z_S = 30.8$ m zum Zeitpunkt $t_S = 102.86$ ns. Die Variable θ entspricht dem transversalen Abstrahlungswinkel für den Elektronenstrahl bei $z'_0(t') \approx 28.9$ m zum retardierten Zeitpunkt $t' \approx 96.6$ ns in Bezug auf das Schirmzentrum, bei $\theta = 0$. Der Graph „Theorie“ zeigt ein einfaches Modell für die Winkelverteilung.

Umgebung des Schirmmittelpunkts bei $z = z_S$ näherungsweise

$$\varphi(\theta) \approx \frac{2\pi}{\lambda_U} [z_S - z'_0(\theta)]. \quad (4.9)$$

Die Koordinate $z'_0(\theta)$ entspricht dem Ladungsschwerpunkt des Teilchenstrahls zum retardierten Zeitpunkt der Strahlungsemission $t'(\theta)$ für die Abstrahlrichtung θ auf dem Beobachtungsschirm. Bei $\theta = 0$ befindet sich der Elektronenstrahl in ca. 2.7 m Abstand vom Schirm. Die transversale Abhängigkeit der Feldamplitude des THz Laserstrahls kann in grober Näherung mit einer gaußschen Verteilung modelliert werden [Sch14]. Mit dieser vereinfachten Theorie kann die grundlegende Struktur der Winkelverteilung für die LW Simulation in Abb. 4.21 wiedergegeben werden. Die beobachtenden Abweichungen sind hingegen zu erwarten, da bei der numerischen Modellierung zusätzliche Effekte, wie beispielsweise die Beiträge der Oberschwingungen oder die Winkelabhängigkeit des Spektrums der Undulatorstrahlung für $\theta \neq 0$, berücksichtigt werden.

Die zeitliche Pulsform für die Strahlungsleistung, P , auf dem Schirm bei $z_S = 30.8$ m ist in Abb. 4.22 a) dargestellt. Der Zeitverlauf kann grob in drei Phasen untergliedert werden. In der ersten Phase, für $t - t_S < 20$ ps, tritt der Teilchenstrahl zur entsprechend retardierten Zeit, t' , sukzessive in den Undulator ein, weshalb eine wachsende Anzahl von Elektronen zum Strahlungsfeld beitragen. Während der zweiten Phase, zwischen $t - t_S \geq 20$ ps und $t - t_S \leq 27.5$ ps, befindet sich der Teilchenstrahl vollständig innerhalb des Undulators, sodass die kumulierte Abstrahlung aller Elektronen den Schirm erreicht. In der dritten Phase, ab $t - t_S > 27.5$ ps, verlässt

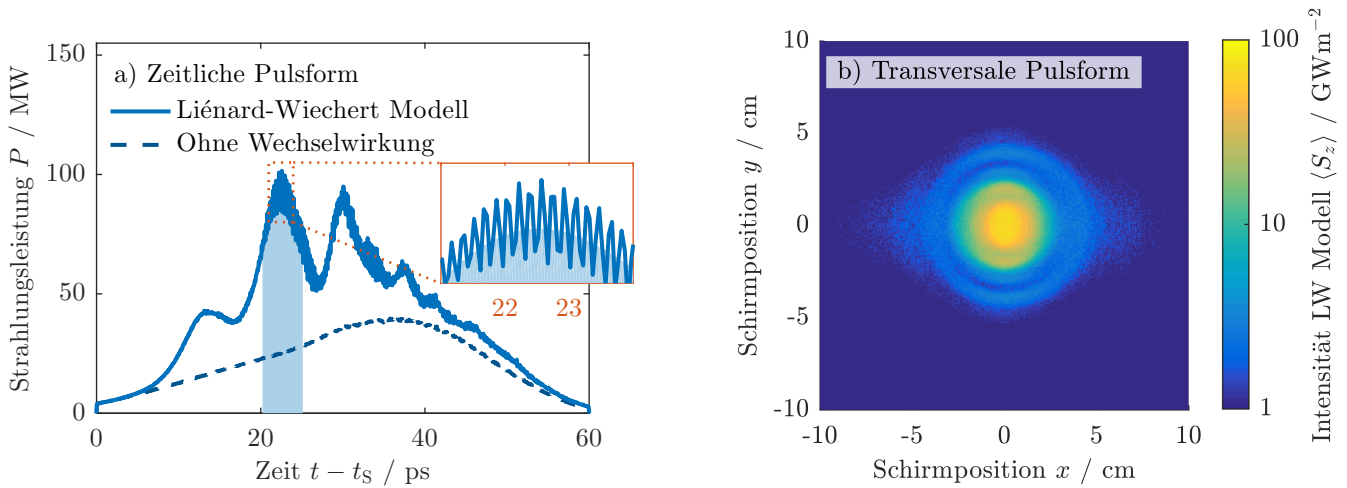


Abbildung 4.22.: Abbildung a) zeigt die Gesamtleistung für die elektromagnetische Strahlungsleistung auf einem virtuellen $10 \text{ cm} \times 10 \text{ cm}$ Schirm am Ende des Undulators, bei $z_S = 30.8 \text{ m}$, bezüglich des Referenzzeitpunkts $t_S = 102.84 \text{ ns}$. In Abbildung b) ist die zeitliche gemittelte Intensitätsverteilung über das in a) hellblau hinterlegte Intervall dargestellt.

der Teilchenstrahl allmählich den Undulator und passiert den Schirm, womit wieder weniger Elektronen zum Strahlungsfeld beitragen. Die Strahlungsleistung für die Referenzsimulation ohne Wechselwirkungseffekte steigt aufgrund der zunehmenden Elektronenanzahl sowie der Annäherung an den Schirm zunächst kontinuierlich an. Der Maximalwert wird zum Zeitpunkt $t - t_S \approx 36.5 \text{ ps}$ erreicht, bei welchem etwa 12.5 % der Elektronen des Teilchenstrahls den Undulator bereits verlassen haben. Im folgenden Verlauf fallen die Elektronenanzahl vor dem Schirm und somit auch die Strahlungsleistung wieder kontinuierlich ab.

Die Strahlungsleistung für die LW Simulation ist systematisch größer, weil zusätzlich zum inkohärenten Anteil wie bei der Referenzsimulation die kohärente Abstrahlung durch den SASE Effekt den Schirm passiert. Außerdem zeigt der vergrößerte Bildausschnitt in Abb. 4.22 a), dass die Strahlungsleistung wie zu erwarten mit der doppelten Frequenz des kohärenten THz Strahlungsfelds oszilliert. Bis etwa $t - t_S \leq 5.0 \text{ ps}$ ist die Strahlungsleistung mit dem Ergebnis für die Referenzsimulation nahezu identisch, da sich noch keine MS innerhalb des Elektronenstrahls ausgebildet hat. Der beobachtete Anstieg ab $t - t_S > 5.0 \text{ ps}$ korreliert direkt mit der Ausbildung der MS in Abb. 4.19 zum retardierten Zeitpunkt $t' \approx 92 \text{ ns}$ bei Strahlposition $z_0(t') \approx 27.5 \text{ m}$. Bevor der Kernbereich des Elektronenstrahls ab ca. $t - t_S \geq 35 \text{ ps}$ den Schirm passiert, treten drei abgesetzte Maxima bei $t_1 - t_S \approx 13.5 \text{ ps}$, $t_2 - t_S \approx 22.5 \text{ ps}$, und $t_3 - t_S \approx 30 \text{ ps}$ auf. Die Frequenz des einfallenden Strahlungsfelds beträgt entsprechend $f_1 \approx 2.64 \text{ THz}$, $f_2 \approx 2.78 \text{ THz}$ und $f_3 \approx 2.67 \text{ THz}$. Das Auftreten mehrerer Maxima ist typisch für das chaotische Einzelstrahlspek-

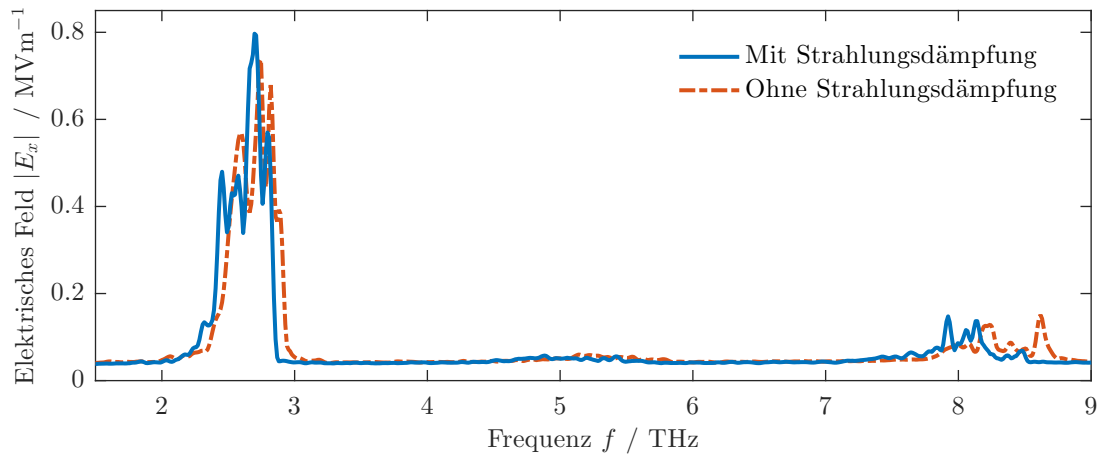


Abbildung 4.23.: Spektrum des elektromagnetischen Feldes, E_x , auf der Strahlachse an der Position $z_S = 30.8$ m. Der THz Strahlungspuls belegt hauptsächlich den Frequenzbereich zwischen $f = 2.5$ THz und $f = 2.9$ THz. Ab $f > 7.5$ THz sind die Beiträge der dritten Harmonischen zu erkennen. Die Modellierung der Strahlungsämpfung bewirkt effektiv eine Rotverschiebung des Spektrums um $\Delta f \approx -100$ GHz.

trum eines SASE FEL [Sch14]. Die zeitliche Modulation resultiert aus Interferenzeffekten, welche aufgrund einer gegenüber der Ausdehnung des Elektronenstrahls kürzeren Kohärenzlänge des elektromagnetischen Strahlungsfelds entstehen. Abbildung 4.22 b) zeigt exemplarisch die zeitlich gemittelte Intensitätsverteilung auf dem Schirm für das zweite Maximum der Leistungskurve. Das transversale Profil der Intensitätsverteilung entspricht weitestgehend der TEM Grundmode des FEL. Mit zunehmenden Abstand vom Schirmzentrum werden außerdem weitere Effekte, wie zum Beispiel die Winkelverteilung der inkohärenten Strahlung entlang der x -Koordinate aufgrund der Defokussierung des Teilchenstrahls in dieser Richtung, sichtbar.

Abbildung 4.23 vergleicht das Spektrum des elektromagnetischen Feldes für eine Simulation mit und ohne Berücksichtigung der Strahlungsämpfung. Für die Berechnung des Spektrums wird die Feldamplitude auf der Achse des Elektronenstrahls im Zentrum des Schirms an der Position $z_S = 30.8$ m ausgewertet. Der Frequenzbereich zwischen $f \approx 2.5$ THz und $f \approx 2.9$ THz entspricht den Grundfrequenzen des Strahlungsfelds, welches der untersuchte Elektronenstrahl im Undulator erzeugt. Die Beiträge gerader Harmonischer für die Emission entlang der Richtung des Teilchenstrahls sind unterdrückt [Sch14]. Dementsprechend sind im gezeigten Spektrum ausschließlich die Beiträge der dritten Harmonischen zwischen $f \approx 7.5$ THz und $f \approx 8.7$ THz zu sehen. Die Strahlungsämpfung bewirkt eine Rotverschiebung des Spektrums um ca. $\Delta f \approx -100$ GHz. Gemäß (4.8) entspricht die beobachtete Frequenzänderung einer Reduktion der kinetischen Energie des Elektronenstrahls um $\Delta E \approx -0.25$ MeV. Dieses Ergebnis ist konsistent mit dem Erwartungswert der mittleren Elektronenenergie, $\langle E \rangle \approx 16.0$ MeV, für die Simulation mit Strahlungsämpfung.

4.3.7. Zusammenfassung

Zusammenfassend wurde in dieser Simulationsstudie gezeigt, dass die Dynamik des Elektronenstrahls im Undulator für den DESY THz SASE FEL nur durch ein vollständiges Wechselwirkungsmodell mit LW Feldern adäquat modelliert werden kann. Die Ergebnisse der Simulationsstudie liefern wichtige Kenngrößen für die Anpassung der Strahlführung zur Ein- und Auskoppelung des Elektronenstrahls in die Undulatorsektion. Außerdem ist bemerkenswert, dass durch die teilchenbasierte Simulation ohne zusätzliche Annahmen und Näherungen die Mikrostruktur des Elektronenstrahls korrekt reproduziert werden kann. Auf diese Weise ermöglicht die teilchenbasierte LW Simulation eine modellunabhängige Untersuchung der durch den FEL generierten THz Strahlung.

5. Schlussfolgerung

Diese Arbeit liefert einen Beitrag zur Forschung an numerischen Verfahren für die Simulation der Strahldynamik in Beschleunigeranlagen. Der Forschungsschwerpunkt liegt auf der Modellierung von Raumladungseffekten innerhalb des Teilchenstrahls. Dazu werden für zwei unterschiedliche Wechselwirkungsmodelle die Raumladungsfelder der Teilchen mit gitterfreien Methoden berechnet. Beim QES Wechselwirkungsmodell wird das Raumladungsfeld numerisch effizient mit der FMM approximiert. Für das elektromagnetische LW Wechselwirkungsmodell findet eine PPM Auswertung des Raumladungsfelds anhand der Teilchentrajektorien auf Basis zeitlich retardierter Größen statt.

Die Anwendung der FMM auf einen relativistischen Teilchenstrahl erfordert gegenüber dem ursprünglichen Algorithmus zusätzliche Erweiterungen. Die neue Implementierung passt die Knotenuntergliederung der Baumstruktur für eine oblat oder prolat deformierte Teilchenverteilung entsprechend an. Auf diese Weise wird, beginnend bei der Strahlerzeugung bis hin zu hoch relativistischen Teilchenstrahlen, eine optimale Unterteilung der Ladungsdichteverteilung gewährleistet. Die Methode der Spiegelladungen wird genutzt, um das Raumladungsfeld während der Strahlgenerierung im direkten Umfeld der Photokathode auswerten zu können. Ein zusätzlich implementiertes Energieklassenmodell ermöglicht die Raumladungswechselwirkungen innerhalb eines Teilchenstrahls mit großer Energiestreuung zu modellieren. Außerdem benötigt die Makroteilchenapproximation des Teilchenstrahls eine Modifikation der Nahfeldwechselwirkungen, welche in dieser Implementierung entweder mit dem Modell homogen geladener Kugeln, mittels einer gitterbasierten Cloud-In-Cell Methode oder durch verallgemeinerte Plummer-Potentialfunktionen reguliert werden.

Eine Validierungsstudie am Beispiel des DESY-PITZ Photoinjektors zeigt, dass die Ergebnisse einer Strahldynamikmodellierung auf Basis der FMM sehr gut mit den Referenzlösungen der zwei etablierten Simulationsprogramme ASTRA und KRACK3 übereinstimmen. Aufgrund der detaillierten Auflösung des Raumladungsfelds ist das Simulationsergebnis der teilchenbasierten Modellierung im Vergleich zu den gitterbasierten Verfahren dabei sensitiver auf die Ensemblegröße der Makroteilchenapproximation des Teilchenstrahls. Für die Nahfeldmodellierung mit verallgemeinerten Plummer-Potentialfunktionen kann die räumliche Auflösung der Feldapproximation zu Gunsten einer kürzeren Rechenzeit verringert werden. Außerdem erweist sich das Energieklassenmodell als ein numerisch günstiges Verfahren, um die Raumladungswechselwirkung

bezüglich der Effekte durch die longitudinal korrelierte Energiestreuung für den Teilchenstrahl innerhalb des Photoinjektors zu korrigieren. In einer weiteren Studie wird das neu entwickelte Simulationsprogramm zur Modellierung der Strahldynamik des DESY SRF Photoinjektors angewendet. Die Phasenraumverteilung des Teilchenstrahls beim Verlassen des Photoinjektors wird für weiterführende Simulationsstudien zum Ausbau des E-XFEL bei DESY in Hamburg benötigt.

Die Modellierung des Grundlagenexperiments zu einem THz SASE FEL bei DESY-PITZ in Zeuthen macht für das bereits bestehende LW Simulationsprogramm ebenfalls zusätzliche Erweiterungen erforderlich. Eine neu implementierte Interpolation der retardierten Teilchentrajektorien erhöht die räumliche Auflösung der Feldberechnung und reduziert den Speicherbedarf der Simulation. Außerdem ermöglicht das Verfahren eine konsistente Initialisierung des Raumladungsfeldes für den Simulationsbeginn innerhalb einer Driftstrecke. Darüber hinaus wird ein relativistisches Strahlungsdämpfungsmodell ergänzt, welches den Energieverlust des Teilchenstrahls durch die abgestrahlte Leistung beim Passieren des Undulators modelliert. Neu implementierte Feldmonitore ermöglichen außerdem den generierten THz Strahlungspuls zu analysieren.

Die Erweiterungen erlauben eine vollständig gitterfreie Modellierung für die Strahldynamik innerhalb der Undulatorsektion des THz SASE FEL. Ein Vergleich zwischen numerischen Studien mit unterschiedlichen Wechselwirkungsmodellen zeigt, dass die strahldynamischen Größen nur durch das zeitretardierte LW Feldmodell korrekt wiedergegeben werden. Außerdem ist besonders hervorzuheben, dass mit der LW Simulation die Ausbildung der FEL typischen Mikrostruktur *ab initio* auf Basis der Raumladungswechselwirkungen innerhalb des Elektronenstrahls modelliert werden kann. Die Charakterisierung des generierten THz Strahlungspulses erfolgt durch einen virtuellen Feldmonitor am Ende der Undulatorsektion. Auf diese Weise können mit der gitterfreien Simulation die spektralen Eigenschaften und die Intensitätsverteilung des generierten Strahlungsfelds ausgewertet werden.

Zusammengefasst erweisen sich die neu entwickelten Simulationsprogramme als besonders nützlich, sobald eine detaillierte Auflösung der lokalen Raumladungswechselwirkungen innerhalb eines Teilchenstrahls notwendig ist. Damit bilden die gitterfreien Verfahren eine wertvolle Erweiterung zu den bereits etablierten Simulationsprogrammen und erschließen auf diese Weise neue Forschungsmöglichkeiten. Im Ausblick folgen hierzu exemplarisch drei aktuelle wissenschaftliche Fragestellungen, die sich besonders zur Anwendung und Weiterentwicklung der gitterfreien Simulationsverfahren anbieten.

Ausblick

Zur Simulation eines Photoinjektors werden die Emissionseigenschaften des Kathodenmaterials und die Dynamik der ausgetretenen Teilchen als zwei unabhängige Prozesse modelliert. Das Konvergenzverhalten für dieses Modell kann insbesondere für raumladungslimitierte Teilchenstrahlen problematisch sein. Möglicherweise könnte eine Verbesserung erzielt werden, indem das Raumladungsfeld von bereits emittierten Teilchen bei der Modellierung für die Ladungsemission aus der Photokathode berücksichtigt wird. Eine numerische Studie von Karkare et al. [Kar13] zeigt, wie sich durch ein teilchenbasiertes MC Verfahren der Ladungstransport innerhalb einer GaAs Photokathode ohne Raumladungsfelder simulieren lässt. Für die Simulation der Ladungsemission unter Einbeziehung des Raumladungsfelds könnte in diesem Modell beispielsweise die Arbeitsfunktion der Elektronen beim Verlassen der Kathodenoberfläche entsprechend angepasst werden.

Bei der Modellierung für die Strahldynamik des THz SASE FEL bietet sich außerdem eine Erweiterung des LW Simulationsprogramms an. Aufgrund der eingeschränkten Ensemblegröße für die Makroteilchenapproximation der Ladungsdichteverteilung ergibt sich der berechtigte Einwand, dass in der numerischen Modellierung die Granularität des Teilchenstrahls überschätzt wird. Weil der numerische Aufwand die praktisch nutzbare Ensemblegröße limitiert, könnte die Granularität alternativ durch ausgedehnte Makroteilchen mit einer gaußschen Ladungsdichteverteilung geglättet werden. Eine Untersuchung von Dohlus [Doh03] zeigt, wie die entsprechenden Raumladungsfelder semi-analytisch ausgewertet werden könnten.

Abschließend bietet sich die Implementierung eines zusätzlichen Wechselwirkungsmodells zur Simulation von Coulombkollisionen innerhalb des Teilchenstrahls an. Aktuelle Forschungsergebnisse von Di Mitri et al. [Di 20] zeigen, dass derartige Streuprozesse die Scheibenenergiestreuung und dementsprechend auch die Mikrostrukturinstabilität des Teilchenstrahls in einem FEL maßgeblich beeinflussen. Weil die Teilchendynamik bei Kollisionen durch lokale Wechselwirkungen dominiert wird, könnte eine derartige Modellierung numerisch effizient mit der gitterfreien Approximation des Raumladungsfelds durch die FMM kombiniert werden.

Literatur

- [Alt06] M. Altarelli u. a. *XFEL: The European X-Ray Free-Electron Laser - Technical Design Report*. Hrsg. von DESY. 2006. DOI: 10.3204/DESY_06-097.
- [ANS21] ANSYS. *Ansys Electronics: Ansys HFSS, Ansys Maxwell*. 2021. URL: <https://www.ansys.com/>.
- [App85] A. W. Appel. „An Efficient Program for Many-Body Simulation“. In: *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 6.1 (1985), S. 85–103. ISSN: 0196-5204. DOI: 10.1137/0906008.
- [AS84] M. Abramowitz und I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Wiley, 1984. ISBN: 0471800074.
- [Bal16] M. C. Balk u. a. „Klystron and High Current Density Backward Wave Oscillator Simulation with CST STUDIO SUITE“. In: *Proceedings of the International Vacuum Electronics Conference, USA, CA, Monterey* (2016). DOI: 10.1109/IVEC.2016.7561758.
- [Baz20] D. Bazyl. *DESY and University of Hamburg Accelerator Physics Seminar: Current Status of the Optimization of the SRF Photo Injector for the CW European XFEL*. 2020. URL: <https://accphysem.desy.de>.
- [BH86] G. Barnes und P. Hut. „A Hierarchical $O(N \log N)$ Force-Calculation Algorithm“. In: *Nature* 324.6096 (1986), S. 446–449. ISSN: 1476-4687. DOI: 10.1038/324446a0.
- [BL04] C. K. Birdsall und A. B. Langdon. *Plasma Physics via Computer Simulation*. Taylor & Francis, 2004. ISBN: 9781482263060.
- [Bor70] J. P. Boris. „Relativistic Plasma Simulation - Optimization of a Hybrid Code“. In: *Proceedings of the Conference on the Numerical Simulations of Plasmas, USA, Washington, D.C.* (1970), S. 3–67.
- [Buo94] J. Buon. *Beam Phase Space and Emittance*. Hrsg. von CERN. 1994. DOI: 10.5170/CERN-1994-001.89.
- [Car89] B. E. Carlsen. „New Photoelectric Injector Design for the Los Alamos National Laboratory XUV FEL Accelerator“. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 285.1 (1989), S. 313–319. ISSN: 0168-9002. DOI: 10.1016/0168-9002(89)90472-5.

-
- [CGR99] H. Cheng, L. Greengard und V. Rokhlin. „A Fast Adaptive Multipole Algorithm in Three Dimensions“. In: *Journal of Computational Physics* 155.2 (1999), S. 468–498. ISSN: 0021-9991. DOI: 10.1006/jcph.1999.6355.
- [Cha12] R P. Chatelain u. a. „Space-Charge Effects in Ultrafast Electron Diffraction Patterns from Single Crystals“. In: *Ultramicroscopy* 116 (2012), S. 86–94. ISSN: 0304-3991. DOI: 10.1016/j.ultramic.2012.03.001.
- [Che18] Y. Chen u. a. „Modeling and Simulation of RF Photoinjectors for Coherent Light Sources“. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 889 (2018), S. 129–137. ISSN: 0168-9002. DOI: 10.1016/j.nima.2018.02.017.
- [Clu73] M. Clutton-Brock. „The Gravitational Field of Three-Dimensional Galaxies“. In: *Astrophysics and Space Science* 23.1 (1973), S. 55–69. ISSN: 0004-640X. DOI: 10.1007/BF00647652.
- [CZD20] Y. Chen, I. Zagorodnov und M. Dohlus. „Beam Dynamics of Realistic Bunches at the Injector Section of the European X-ray Free-Electron Laser“. In: *Physical Review Accelerators and Beams* 23.4 (2020), S. 044201. ISSN: 2469-9888. DOI: 10.1103/PhysRevAccelBeams.23.044201.
- [Das21] Dassault Systems. *CST Studio Suite*. 2021. URL: <https://www.3ds.com>.
- [Deh02] W. Dehnen. „A Hierarchical O(N) Force Calculation Algorithm“. In: *Journal of Computational Physics* 179.1 (2002), S. 27–42. ISSN: 0021-9991. DOI: 10.1006/jcph.2002.7026.
- [DH16] M. Dohlus und C. Henning. „Periodic Poisson Model for Beam Dynamics Simulation“. In: *Physical Review Accelerators and Beams* 19.3 (2016). ISSN: 2469-9888. DOI: 10.1103/PhysRevAccelBeams.19.034401.
- [Di 20] S. Di Mitri u. a. „Experimental Evidence of Intrabeam Scattering in a Free-Electron Laser Driver“. In: *New Journal of Physics* 22.8 (2020), S. 083053. ISSN: 1367-2630. DOI: 10.1088/1367-2630/aba572.
- [Doh03] M. Dohlus. *Two Methods for the Calculation of CSR Fields*. Hrsg. von DESY. 2003. URL: <https://www.desy.de/~dohlus/UWake>.
- [Dow10] D. H. Dowell u. a. „Cathode R&D for Future Light Sources“. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 622.3 (2010), S. 685–697. ISSN: 0168-9002. DOI: 10.1016/j.nima.2010.03.104.
- [EB96] W. D. Elliott und J. A. Jr. Board. „Fast Fourier Transform Accelerated Fast Multipole Algorithm“. In: *SIAM Journal on Scientific Computing* 17.2 (1996), S. 398–415. ISSN: 1064-8275. DOI: 10.1137/S1064827594264259.

-
- [Ell95] W. D. Elliott. „Multipole Algorithms for Molecular Dynamics Simulation on High Performance Computers“. Dissertation. USA, NC, Durham: Duke University, 1995.
- [ESF18] ESFRI. *Strategy Report on Research Infrastructure: Roadmap 2018*. Hrsg. von European Strategy Forum on Research Infrastructures. 2018.
- [Flo03] K. Floettmann. „Some Basic Features of the Beam Emittance“. In: *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams* 6.3 (2003). ISSN: 1098-4402. DOI: 10.1103/PhysRevSTAB.6.034202.
- [Flo17] K. Floettmann. *ASTRA Version 3.2: A Space Charge Tracking Algorithm*. 2017. URL: <https://www.desy.de/~mpyflo/>.
- [Fub06] G. Fubiani u. a. „Space Charge Modeling of Dense Electron Beams with Large Energy Spreads“. In: *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams* 9.6 (2006), S. 21. ISSN: 1098-4402. DOI: 10.1103/PhysRevSTAB.9.064402.
- [Gjo06] E. Gjonaj u. a. „Large Scale Parallel Wake Field Computations for 3D-Accelerator Structures with the PBCI Code“. In: *Proceedings of the 9th International Computational Accelerator Physics Conference, France, Chamonix* (2006), S. 29–34.
- [God74] B. B. Godfrey. „Numerical Cherenkov Instabilities in Electromagnetic Particle Codes“. In: *Journal of Computational Physics* 15.4 (1974), S. 504–521. ISSN: 0021-9991. DOI: 10.1016/0021-9991(74)90076-X.
- [GQ03] L. Giannessi und M. Quattromini. „TREDI Simulations for High-Brilliance Photoinjectors and Magnetic Chicanes“. In: *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams* 6.12 (2003). ISSN: 1098-4402. DOI: 10.1103/PhysRevSTAB.6.120101.
- [GR87] L. Greengard und V. Rokhlin. „A Fast Algorithm for Particle Simulations“. In: *Journal of Computational Physics* 73.2 (1987), S. 325–348. ISSN: 0021-9991. DOI: 10.1016/0021-9991(87)90140-9.
- [GR88] L. Greengard und V. Rokhlin. *On the Efficient Implementation of the Fast Multipole Algorithm*. Hrsg. von Yale University. 1988.
- [Gre04] A. D. Greenwood u. a. „On the Elimination of Numerical Cherenkov Radiation in PIC Simulations“. In: *Journal of Computational Physics* 201.2 (2004), S. 665–684. ISSN: 0021-9991. DOI: 10.1016/j.jcp.2004.06.021.
- [Gre11] M. Grech u. a. „Coulomb Explosion of Uniformly Charged Spheroids“. In: *Phys. Rev. E* 84.5 (2011), S. 056404. ISSN: 2470-0045. DOI: 10.1103/PhysRevE.84.056404.

-
- [Gre87] L. Greengard. „The Rapid Evaluation of Potential Fields in Particle Systems“. Dissertation. USA, New Haven: Yale University, 1987.
- [Ham18] M. Hamberg u. a. „Electron Beam Heating with the European XFEL Laser Heater“. In: *Proceedings of the 38th International Free Electron Laser Conference, USA, NM, Santa Fe* (2018), S. 450–451.
- [HE88] R. W. Hockney und J. W. Eastwood. *Computer Simulation Using Particles*. Taylor & Francis, 1988. ISBN: 0852743920.
- [HK07] Z. Huang und K-J Kim. „Review of X-Ray Free-Electron Laser Theory“. In: *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams* 10.3 (2007), S. 034801. ISSN: 1098-4402. DOI: 10.1103/PhysRevSTAB.10.034801.
- [HO92] L. Hernquist und J. P. Ostriker. „A Self-Consistent Field Method for Galactic Dynamics“. In: *The Astronomical Journal* 386.2 (1992), S. 375–397. ISSN: 0004-6256. DOI: 10.1086/171025.
- [Hua16] C.-K. Huang u. a. „Finite Grid Instability and Spectral Fidelity of the Electrostatic Particle-In-Cell Algorithm“. In: *Computer Physics Communications* 207 (2016), S. 123–135. ISSN: 0010-4655. DOI: 10.1016/j.cpc.2016.05.021.
- [JWM11] J. D. Jackson, C. Witte und K. Müller. *Klassische Elektrodynamik*. De Gruyter, 2011. ISBN: 978-3-11-020003-4.
- [Kär06] M. Kärkkäinen u. a. „Low-Dispersion Wake Field Calculation Tools“. In: *Proceedings of the 9th International Computational Accelerator Physics Conference, France, Chamonix* (2006), S. 35–40.
- [Kar13] S. Karkare u. a. „Monte Carlo Charge Transport and Photoemission from Negative Electron Affinity GaAs Photocathodes“. In: *Journal of Applied Physics* 113.10 (2013), S. 104904. ISSN: 0021-8979. DOI: 10.1063/1.4794822.
- [KF15] F. Kesting und G. Franchetti. „Propagation of Numerical Noise in Particle-In-Cell Tracking“. In: *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams* 18.11 (2015), S. 114201. ISSN: 1098-4402. DOI: 10.1103/PhysRevSTAB.18.114201.
- [Kho03] M. Khojoyan u. a. „Beam Dynamics Optimization for the High Brightness PITZ Photo Injector Using 3D Ellipsoidal Cathode Laser Pulses“. In: *Proceedings of the 35th Free Electron Laser Conference, USA, NY, New York* (2003), S. 298–302.
- [Kim89] K-J Kim. „RF and Space-Charge Effects in Laser-Driven RF Electron Guns“. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 275.2 (1989), S. 201–218. ISSN: 0168-9002. DOI: 10.1016/0168-9002(89)90688-8.

-
- [KP06] J. Kurzak und B. M. Pettitt. „Fast Multipole Methods for Particle Dynamics“. In: *Molecular Simulation* 32.10-11 (2006), S. 775–790. ISSN: 0892-7022. DOI: 10.1080/08927020600991161.
- [KPS03] K. Floettmann, P. Piot und S.M. Lidia. „Recent Improvements to the ASTRA Particle Tracking Code“. In: *Proceedings of the 2003 Particle Accelerator Conference, USA, OR, Portland* (2003), S. 3500–3502.
- [Kra12] M. Krasilnikov u. a. „Experimentally Minimized Beam Emittance from an L-Band Photoinjector“. In: *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams* 15.10 (2012), S. 100701. ISSN: 1098-4402. DOI: 10.1103/PhysRevSTAB.15.100701.
- [Kra18] M. Krasilnikov u. a. „Start-to-End Simulations of THz SASE FEL Proof-of-Principle Experiment at PITZ“. In: *Proceedings of the 13th International Computational Accelerator Physics Conference, USA, FL, Key West* (2018), S. 246–250.
- [Kur08] J. Kurzak u. a. „Automatic Generation of FFT for Translations of Multipole Expansions in Spherical Harmonics“. In: *The International Journal of High Performance Computing Applications* 22.2 (2008), S. 219–230. ISSN: 1094-3420. DOI: 10.1177/1094342008090915.
- [Lap65] P. M. Lapostolle. *Effets de la Charge d’Espace dans un Accélérateur Linéaire à Protons*. Hrsg. von CERN. 1965. URL: <http://cds.cern.ch/record/355640>.
- [LGW05] T. Lau, E. Gjonaj und T. Weiland. „Time Integration Methods for Particle Beam Simulations with the Finite Integration Theory“. In: *Frequenz* 59.9-10 (2005), S. 210–219. ISSN: 0016-1136. DOI: 10.1515/FREQ.2005.59.9-10.210.
- [Li19] X.-K. Li u. a. „Design Studies of a Proof-of-Principle Experiment on THz SASE FEL at PITZ“. In: *Journal of Physics: Conference Series* 1350 (2019), S. 012036. ISSN: 1742-6588. DOI: 10.1088/1742-6596/1350/1/012036.
- [Los21] Los Alamos Accelerator Code Group. *Poisson Superfish*. 2021. URL: <https://laacg.lanl.gov>.
- [Lui04] O. J. Luiten u. a. „How to Realize Uniform Three-Dimensional Ellipsoidal Electron Bunches“. In: *Physical Review Letters* 93.9 (2004), S. 094802. ISSN: 0031-9007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.93.094802.
- [Mey15] M. D. Meyers u. a. „On the Numerical Dispersion of Electromagnetic Particle-In-Cell Code: Finite grid instability“. In: *Journal of Computational Physics* 297 (2015), S. 565–583. ISSN: 0021-9991. DOI: 10.1016/j.jcp.2015.05.037.

-
- [Nog18] P. Nogly u. a. „Retinal Isomerization in Bacteriorhodopsin Captured by a Femtosecond X-Ray Laser“. In: *Science* 361.6398 (2018), eaat0094. ISSN: 0036-8075. DOI: 10.1126/science.aat0094.
- [Oku72] H. Okuda. „Nonphysical Noises and Instabilities in Plasma Simulation due to a Spatial Grid“. In: *Journal of Computational Physics* 10.3 (1972), S. 475–486. ISSN: 0021-9991. DOI: 10.1016/0021-9991(72)90048-4.
- [OSh98] P. G. O’Shea. „Reversible and Irreversible Emittance Growth“. In: *Physical Review E* 57.1 (1998), S. 1081–1087. ISSN: 2470-0045. DOI: 10.1103/PhysRevE.57.1081.
- [Par10] V. V. Paramonov u. a. „The PITZ CDS Booster Cavity RF Tuning and Start of Conditioning“. In: *Proceedings of the 25th Linear Accelerator Conference, Japan, Tsukuba* (2010), S. 241–243.
- [PG96] S. Pfalzner und P. Gibbon. *Many-Body Tree Methods in Physics*. Cambridge University Press, 1996. ISBN: 9780521495646. DOI: 10.1017/CBO9780511529368.
- [Pre92] W. H. Press. *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 1992. ISBN: 0521437202.
- [Qia06] J. Qiang u. a. „Three-Dimensional Quasistatic Model for High Brightness Beam Dynamics Simulation“. In: *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams* 9.4 (2006), S. 044204. ISSN: 1098-4402. DOI: 10.1103/PhysRevSTAB.9.044204.
- [Qin13] H. Qin u. a. „Why is Boris Algorithm so Good?“ In: *Physics of Plasmas* 20.8 (2013), S. 084503. ISSN: 1070-664X. DOI: 10.1063/1.4818428.
- [Ran99] W. T. Rankin. „Efficient Parallel Implementations of Multipole Based N-Body Algorithms“. Dissertation. USA, NC, Durham: Duke University, 1999.
- [Rei08] M. Reiser. *Theory and Design of Charged Particle Beams*. Wiley-VCH, 2008. ISBN: 9783527407415.
- [Rip18] B. Ripperda u. a. „A Comprehensive Comparison of Relativistic Particle Integrators“. In: *The Astrophysical Journal Supplement Series* 235.1 (2018), S. 1–20. ISSN: 1538-4365. DOI: 10.3847/1538-4365/aab114.
- [RS95] G. Ripken und F. Schmidt. *A Symplectic Six-Dimensional Thin Lens Formalism for Tracking*. Hrsg. von CERN. 1995. URL: <https://cds.cern.ch/record/281283>.
- [RSW19] J. Rossbach, J. R. Schneider und W. Wurth. „10 Years of Pioneering X-Ray Science at the Free-Electron Laser FLASH at DESY“. In: *Physics Reports* 808 (2019), S. 1–74. ISSN: 0370-1573. DOI: 10.1016/j.physrep.2019.02.002.

-
- [SB06] H. Spachmann und U. Becker. „Electron Gun Simulation with CST PARTICLE STUDIO“. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 558.1 (2006), S. 50–53. ISSN: 0168-9002. DOI: 10.1016/j.nima.2005.11.075.
- [Sch12] E. Schneidmiller u. a. „Tunable IR/THz Source for Pump Probe Experiments at the European XFEL“. In: *Proceedings of the 34th Free Electron Laser Conference, Japan, Nara* (2012), S. 503–506.
- [Sch14] P. Schmüser u. a. *Free-Electron Lasers in the Ultraviolet and X-Ray Regime: Physical Principles, Experimental Results, Technical Realization*. Springer International Publishing, 2014. ISBN: 9783319040813.
- [Sch19a] S. A. Schmid u. a. „Simulating Space Charge Dominated Beam Dynamics Using FMM“. In: *Proceedings of the North American Particle Accelerator Conference, USA, MI, Lansing* (2019), S. 909–911.
- [Sch19b] S. A. Schmid u. a. „Space Charge Field Beam Dynamics Simulations for the THz SASE FEL at PITZ“. In: *Proceedings of the 39th International Free Electron Laser Conference, Germany, Hamburg* (2019), S. 606–608.
- [Sek15] J. Sekutowicz u. a. „Research and Development towards Duty Factor Upgrade of the European X-Ray Free Electron Laser Linac“. In: *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams* 18.5 (2015), S. 050701. ISSN: 1098-4402. DOI: 10.1103/PhysRevSTAB.18.050701.
- [SL91] K. E. Schmidt und M. A. Lee. „Implementing the Fast Multipole Method in Three Dimensions“. In: *Journal of Statistical Physics* 63.5-6 (1991), S. 1223–1235. ISSN: 0022-4715. DOI: 10.1007/BF01030008.
- [Spr05] V. Springel u. a. „Simulations of the Formation, Evolution and Clustering of Galaxies and Quasars“. In: *Nature* 435.7042 (2005), S. 629–636. ISSN: 1476-4687. DOI: 10.1038/nature03597.
- [Ste10] F. Stephan u. a. „Detailed Characterization of Electron Sources Yielding First Demonstration of European X-ray Free-Electron Laser Beam Quality“. In: *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams* 13.2 (2010), S. 020704. ISSN: 1098-4402. DOI: 10.1103/PhysRevSTAB.13.020704.
- [Suf88] K. G. Suffern. „The Apparent Shape of a Rapidly Moving Sphere“. In: *American Journal of Physics* 56.8 (1988), S. 729–733. ISSN: 0002-9505. DOI: 10.1119/1.15511.
- [Tec21] Tech-X. *VSim*. 2021. URL: <https://txcorp.com/>.

-
- [VG14] J.-L. Vay und B. B. Godfrey. „Modeling of Relativistic Plasmas with the Particle-In-Cell Method“. In: *Comptes Rendus Mécanique* 342.10 (2014), S. 610–618. ISSN: 1631-0721. DOI: 10.1016/j.crme.2014.07.006.
- [Vog19] E. Vogel u. a. „Status of the All Superconducting Gun Cavity at DESY“. In: *Proceedings of the 19th International Conference of RF Supraconductivity, Germany, Dresden* (2019), S. 1087–1090.
- [Wei77] T. Weiland. „A Discretization Method for the Solution of Maxwell’s Equations for Six-Component Fields“. In: *AEU - International Journal of Electronics and Communications* 31.3 (1977), S. 116–120. ISSN: 1434-8411.
- [Wei99] M. D. Weinberg. „An Adaptive Algorithm for N-Body Field Expansions“. In: *The Astronomical Journal* 117.1 (1999), S. 629–637. ISSN: 0004-6256. DOI: 10.1086/300669.
- [Wie15] H. Wiedemann. *Particle Accelerator Physics*. Springer, 2015. ISBN: 9783319183176.
- [Wil09] K. Wille. *The Physics of Particle Accelerators: An Introduction*. Oxford Univ. Press, 2009. ISBN: 0198505507.
- [WL96] H. Y. Wang und R. LeSar. „An Efficient Fast–Multipole Algorithm Based on an Expansion in the Solid Harmonics“. In: *The Journal of Chemical Physics* 104.11 (1996), S. 4173–4179. ISSN: 0021-9606. DOI: 10.1063/1.471667.
- [WS95] M. S. Warren und J. F. Salmon. „A Portable Parallel Particle Program“. In: *Computer Physics Communications* 87.1 (1995), S. 266–290. ISSN: 0010-4655. DOI: 10.1016/0010-4655(94)00177-4.
- [Yee66] K. S. Yee. „Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwell’s Equations in Isotropic Media“. In: *IEEE Transactions on Antennas and Propagation* 14.3 (1966), S. 302–307. ISSN: 0018-926X. DOI: 10.1109/TAP.1966.1138693.
- [Yok13] R. Yokota. „An FMM Based on Dual Tree Traversal for Many-Core Architectures“. In: *Journal of Algorithms & Computational Technology* 7.3 (2013), S. 301–324. ISSN: 1748-3018. DOI: 10.1260/1748-3018.7.3.301.
- [Zag16] I. Zagorodnov. *2nd Topical Workshop on Instabilities, Impedance and Collective Effects, UK, Oxfordshire, Abingdon: Wakefield Code ECHO*. 2016. URL: <https://indico.cern.ch/event/459623>.
- [Zal18] P. Zalden u. a. *Terahertz Science at the European XFEL*. Hrsg. von European XFEL. 2018. URL: <https://xfel.tind.io/record/1564>.

-
- [ZB11] H. Zhang und M. Berz. „The Fast Multipole Method in the Differential Algebra Framework“. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 645.1 (2011), S. 338–344. ISSN: 0168-9002. DOI: 10.1016/j.nima.2011.01.053.
- [Zie08] V. G. Ziemann u. a. „The XFEL Laser Heater“. In: *Proceedings of the 11th European Particle Accelerator Conference, Italy, Genoa* (2008), S. 2695–2697.

A. Simulationsprogramm mit FMM

Wechselwirkungsberechnung

Übersicht zur Programmstruktur

Die Programmstruktur ist modular aufgebaut, sodass verschiedene Berechnungsmodule zu einer frei definierbaren Simulationsstudie kombiniert werden können. Abbildung A.1 zeigt eine nach Gruppen organisierte Übersicht aller implementierten Berechnungsmodule. Die Gruppe der analytischen Feldmodelle umfasst mathematische Funktionen zur Beschreibung der externen Felder unterschiedlicher Beschleunigerkomponenten. Derartige Feldmodelle werden z. B. für die Simulation der Strahldynamik im Undulator des PITZ THz FEL Experiments eingesetzt. Die numerischen Feldmodelle berechnen das lokale Feld an der Position eines Makroteilchens anhand von extern definierten Wertetabellen. Dadurch können numerische Feldlösungen von Beschleunigerkomponenten in die Simulation der Strahldynamik integriert werden. Diese Methode wird z. B. zur Modellierung des PITZ Photoinjektors genutzt. Die Berechnung der Wechselwirkungsfelder mittels der FMM bildet das zentrale Element der Simulationssoftware. Außerdem können die Wechselwirkungsfelder mit einer PPM ausgewertet werden, um z. B. in Konvergenzstudien die Ergebnisse mit der FMM Approximation verglichen zu können. Die Zeitintegration der Makroteilchenbewegung unter dem Einfluss der externen und internen Feldkräfte erfolgt mittels der expliziten Boris-Methode [Bor70] für relativistische Punktladungen. Die Gruppe der Matrixoptik Elemente umfasst zusätzliche Berechnungsmodule, welche die Phasenraummodulation unterschiedlicher Beschleunigerkomponenten in Form von Matrixgleichungen [RS95] beschreiben. Dadurch kann die Dynamik in strahloptischen Anordnungen, wie z. B. einer FODO Strecke, numerisch effizient angenähert werden. Über die Ausgabefunktionen wird die Auswertung der statistischen Momente, wie z. B. Position, Ausdehnung und Emittanz des Teilchenstrahls, sowie die Zwischenspeicherung der Makroteilchenverteilung gesteuert. Alle Module nutzen, soweit sinnvoll, OpenMP basiertes Multithreading für die Auswertung rechenintensiver Operationen.

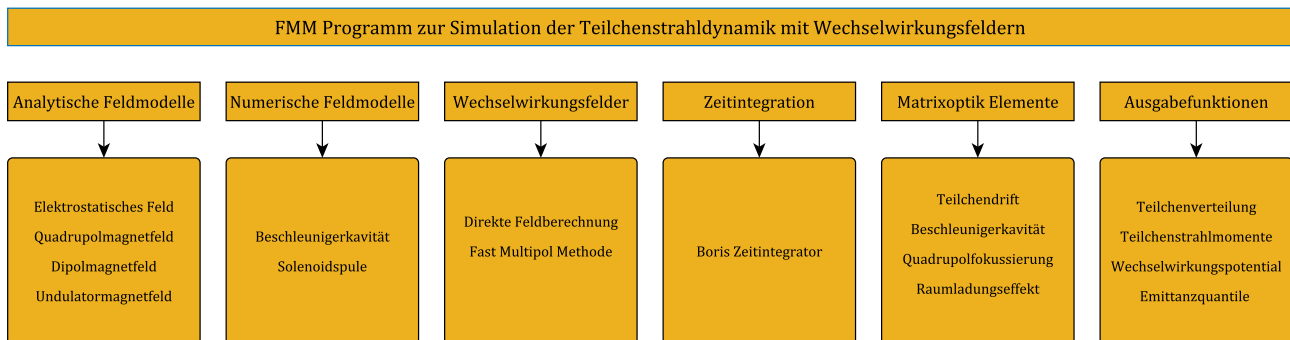


Abbildung A.1.: Organigramm des FMM Simulationsprogramms zur Berechnung der Strahldynamik in Teilchenbeschleunigern mit Raumladungswechselwirkung. Die Untergliederung des Simulationsablaufs in einzelne Berechnungsmodule ermöglicht zusätzliche Flexibilität bei der Anwendung und Erweiterung.

Definitionsdatei einer Strahldynamiksimulation

Abbildung A.2 zeigt exemplarisch den Inhalt der Definitionsdatei einer Simulationsstudie des DESY-PITZ Photoinjektors mit den Abschnitten [CONTROL] und [SIMULATION_SETUP]. Im Abschnitt [CONTROL] wird neben weiteren Einstellmöglichkeiten die initiale Makroteilchenverteilung als Textdatei im Format von ASTRA [KPS03] vorgegeben. Der Einstieg des Simulationsablaufs wird im Abschnitt [SIMULATION_SETUP] konfiguriert. Der Typ beamline definiert, dass es sich um eine sukzessive Abfolge von Berechnungsmodulen gemäß Abb. A.1 handelt. Dabei entspricht das erste Modul in element(1) einer Berechnung des Raumladungsfelds mittels der FMM. Die numerischen Parameter der FMM Approximation werden in Abschnitt [WECHSELWIRKUNGSFELD] vom Typ spacecharge_Fmm definiert. Es folgen drei weitere Module für die Berechnung der externen Felder, die Zeitintegration und die Ausgabefunktion. Die Definition der numerischen Parameter jedes Moduls erfolgt ebenfalls in einem separaten Abschnitt. Im gegebenen Beispiel werden die Module des Simulationsablaufs solange sukzessive ausgeführt, bis die vorgegebene Anzahl von Zeitintegrationsschritten abgeschlossen ist.

Bei der Erstellung der Definitionsdatei ist zu beachten, dass sich die Kombination der einzelnen Berechnungsmodule zu einem logischen Simulationsablauf zusammenfügen muss. Letzteres vorausgesetzt, ermöglicht der modulare Aufbau eine flexible Verwendung der FMM in unterschiedlichen Anwendungsgebieten für Strahldynamiksimulationen. Darüber hinaus kann die Implementierung genutzt werden, um Simulationsstudien auf Basis gitterbasierter Wechselwirkungsmodelle mit dem teilchenbasierten FMM Wechselwirkungsmodell zu vergleichen. Dies ermöglicht eine unabhängige Validierung der Wechselwirkungseffekte.

```
[CONTROL]
bunchfile = teilchenverteilung.ini

[SIMULATION_SETUP]
type           = beamline
element(1)    = WECHSELWIRKUNGSFELD
element(2)    = EXTERNE_FELDER
element(3)    = ZEITINTEGRATION
element(4)    = AUSGABEFUNKTION

[WECHSELWIRKUNGSFELD]
type           = spacecharge_Fmm
fmm_mode      = particleFMM
...
```

Abbildung A.2.: Modulare Definition des Ablaufs einer Strahldynamiksimulation.

B. Danksagung

Meine besondere Dankbarkeit gilt PD Dr. rer. nat. Erion Gjonaj und Prof. Dr.-Ing. Herbert De Gersem für die wissenschaftliche Betreuung dieser Arbeit. Ich bedanke mich für den persönlichen Austausch und die fachliche Begleitung meiner Forschungsthemen. Es ist eine große Unterstützung stets auf die langjährigen Erfahrungswerte meiner wissenschaftlicher Vorbilder zurückgreifen zu dürfen. Außerdem danke ich für den unermüdlichen Einsatz zur Akquise von Forschungsmitteln, die es mir ermöglicht haben mich vollständig auf diese Arbeit zu fokussieren.

Gleichermaßen möchte ich mich bei Dr. Martin Dohlus und Dr. Chen Ye von DESY in Hamburg, bei Dr. Frank Stephan und Dr. Mikhail Krasilnikov von DESY-PITZ in Zeuthen, sowie bei allen anderen DESY Kolleg*innen für die intensive Zusammenarbeit bedanken. Unsere gemeinsamen Treffen waren eine große Bereicherung und ich habe stets von euren Ideen und Anregungen profitiert. Ferner bedanke ich mich für die Bereitstellung der Forschungsmittel durch DESY, welche diese Zusammenarbeit erst möglich gemacht haben.

Ich danke der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die finanzielle Unterstützung, Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Norbert Pietralla für die wissenschaftliche Leitung und Carina Seeger für die Administration des Graduiertenkollegs GRK 2128 „AccelencE“. Die Kollaboration und der Austausch mit den Kolleg*innen aus Darmstadt und Mainz ist in dieser Form einzigartig und hat mich sowohl fachlich als auch persönlich geprägt. Insbesondere möchte ich an dieser Stelle Prof. Dr. Kurt Aulenbacher von der JGU Mainz für die fachliche Betreuung danken.

Außerdem bedanke mich bei allen meinen Kolleg*innen für die gemeinsame Zeit am TEMF. Insbesondere danke ich Dr. Wolfgang Müller, Dragos Munteanu, Heike Koch und Achim Wagner dafür, dass sie mir bei allen technischen und administrativen Angelegenheiten den Rücken frei gehalten haben. Ganz besonders möchte ich Dr. Yun Ouedraogo, Dr. David Bizzozero, Dr. Yvonne Späck-Leigsnering, Dr. Kyle Taylor und Dr. Daria Astapovych aus meiner Arbeitsgruppe danken, die ich zuerst als qualifizierte Kolleg*innen schätzen und später als gute Freunde kennen gelernt habe.

Abschließend möchte ich mich bei meinen Eltern, meiner Schwester und ganz besonders bei meiner Partnerin Heike Böhler bedanken. Ihr gebt mir die Kraft Rückschläge zu bewältigen und freut euch gemeinsam mit mir über Erfolge. Ich danke euch, dass ihr immer für mich da seid.

Steffen Alexander Schmid
Darmstadt, 11.05.2021