



中国科学院近代物理研究所

Institute of Modern Physics, Chinese Academy of Sciences

基于PIML的束流动力学替代模型研究

直线加速器中心

作者: 胡雅欣, 陈小龙, 齐新, 王志军, 李中义, 金超, 孙坤祥



报告人: 胡雅欣

1.研究背景-加速器及束流动力学

强流高功率离子加速器是解决重大科学问题和国家重大需求的重要工具



ADS工业化应用要求：

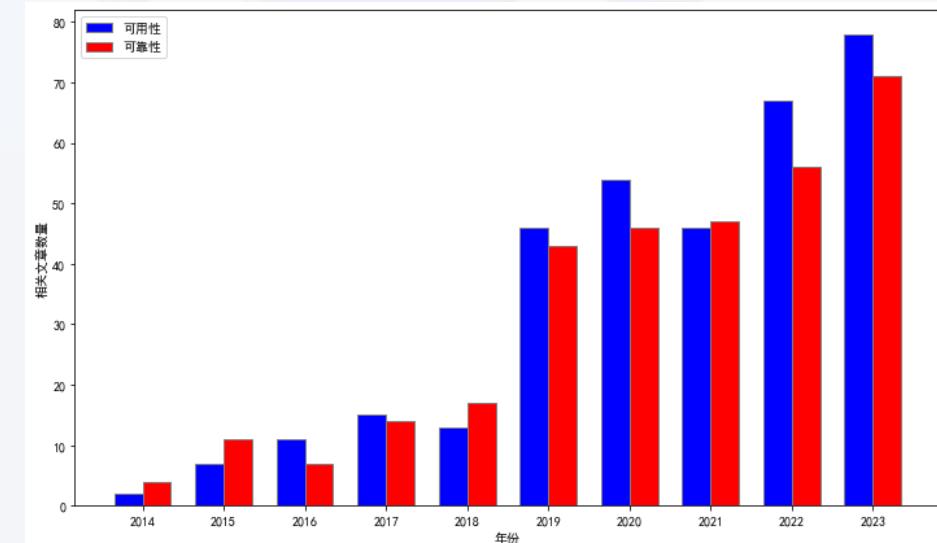
- 平均流强>5mA
- 可用性>85%

强流超导直线加速器特点：

- 数万个元件组成的复杂系统
- 加速元件与强流离子束的强耦合作用

工业级应用，对于加速器的稳定运行提出要求：

- 高可靠性
- 高可用性



图：加速器可用性与可靠性研究关注度统计

1.研究背景-在线计算的需求

现代加速器控制的核心需求——准确并快速掌握束流状态

程序	实验室	编程语言	核心算法
TraceWin	CEA Saclay	C++, Python	PIC(PICNIC)
RF-Track	CERN	C++, Octave, Python	Particle to Particle, CIC (Green function method)
PyORBIT	ORNL	C++, Python	PIC(FFT)
IMPACT	LBNL	Fortran90, Python	PIC (Green function method)
Parmila	LANL	Fortran	PIC(SCHEFF)
BEAMPATH	SLAC	Fortran77	PIC(FFT)
TRACK	ANL	-	PIC(FFT)
WARP3D	LLNL	Fortran	PIC(FFT)

目前常见束流模拟程序



图：束流模拟程序特点

强流高功率离子加速器对束流动力学计算提出较高要求：

- 超快速度
- 超高精度
- 满足真实物理行为

人工智能：让机器模拟人类智能行为（如学习、推理、决策）的科学与工程领域。



AlphaFold

GNoME



ChatGPT

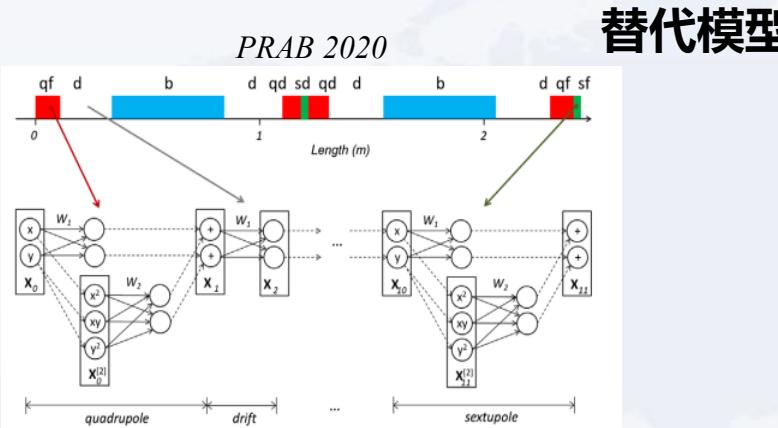
特点：

- **数据驱动学习：**从海量数据中自动学习复杂模式。
- **免特征工程：**无需领域知识手工设计特征提取器。
- **高维特征表征：**深层架构捕捉高维数据复杂结构。
- **强非线性建模：**有效捕获复杂非线性关系。

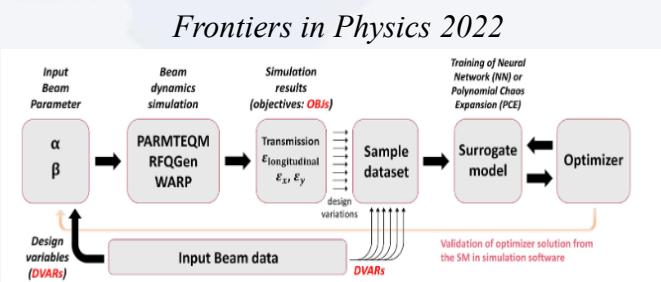
人工智能的高速发展正在为高功率加速器束流
动力学的快速建模与计算开辟新的途径！

1.研究背景-AI助力束流动力学替代模型

- 利用有限的数据实现束流的全息信息—**替代模型(Surrogate Model)**
- 通过在输入与输出之间建立优化的近似关系，从而在保留模型精度的同时大幅度降低计算成本。



DESY:基于物理的束流动力学替代模型/神经网络/PRAB 2020



MIT 核科学实验室: RFQ束流动力学替代/神经网络/Frontiers in Physics 2022

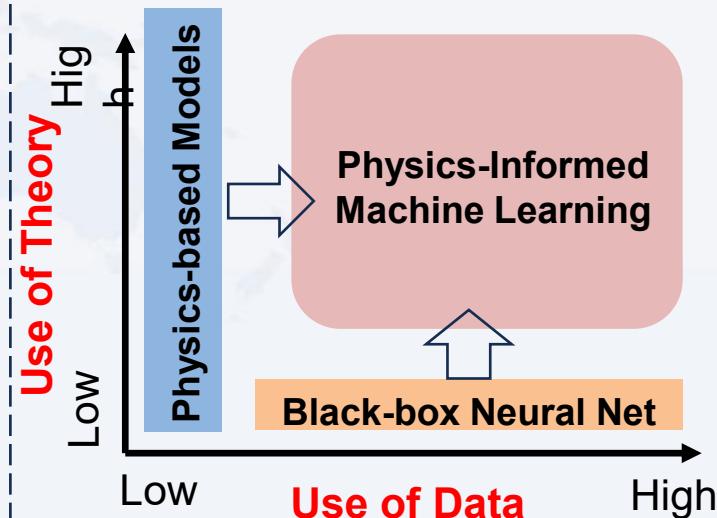
现有研究局限性

研究大多使用数据驱动
数据量需求大、缺乏可解释性

端到端预测
无法体现全程演化

降低数据需求及计算成本、提高物理可信度的有效途径: **PIML**

PIML:将物理定律信息与现有的机器学习方法进行结合



- 将PIML方法引入强流动力学领域**
- 相比传统数值计算: 更快、计算成本更低
 - 相比传统神经网络: 更准、可解释性更强

2. 基于PIML的束流动力学替代模型研究

目标：构建 MEBT 段的替代模型，以磁铁设定为输入，输出全段 Twiss 参数。
实现毫秒级预测，兼顾速度、精度与物理合理性，为在线调束与快速设计迭代提供支持

模拟束线：

中国超重元素研究加速器装置 (CAFe2)

MEBT段

连接RFQ SC Linac, 长度3.5m,
包含6个四极铁、2个buncher



模拟平台：

Advanced Virtual Accelerator
Software (AVAS)

IMP自研计算软件，高保真、高效率，
已用于 CiADS、CAFe等重大项目

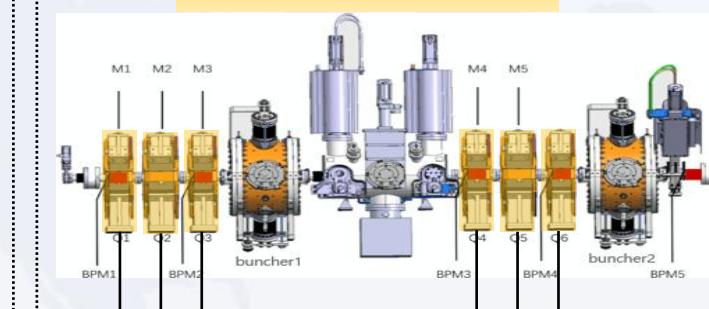
数据集生成：

10,000组随机四极铁设定

全长3.5m → 350步

在每一步记录横向和纵向的Twiss参数 (α, β, γ)

Input:
Quadrupole settings



Surrogate model

Output: Twiss
parameters

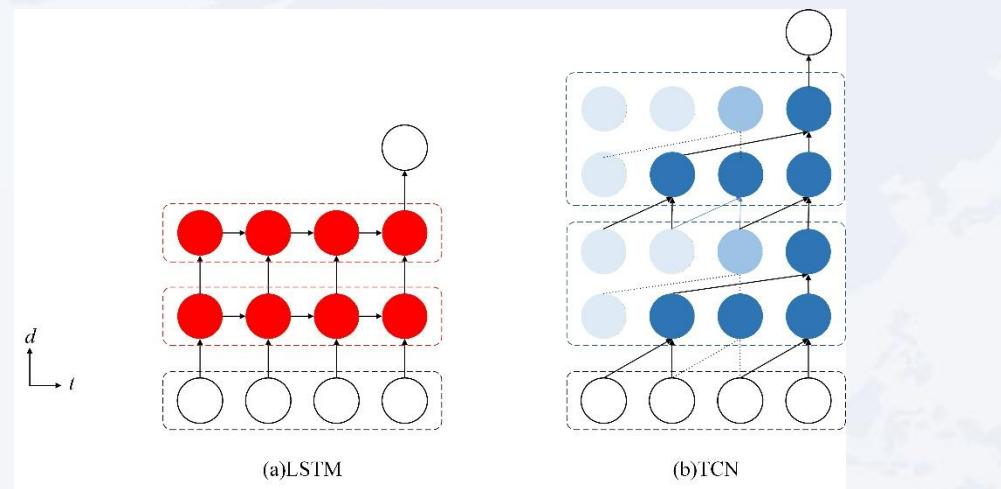
主要研究工作：

- 从点值预测扩展到 Twiss 全段建模
- 引入 Twiss 演化关系作为损失函数
- 毫秒级预测，实现低延迟快速设计迭代

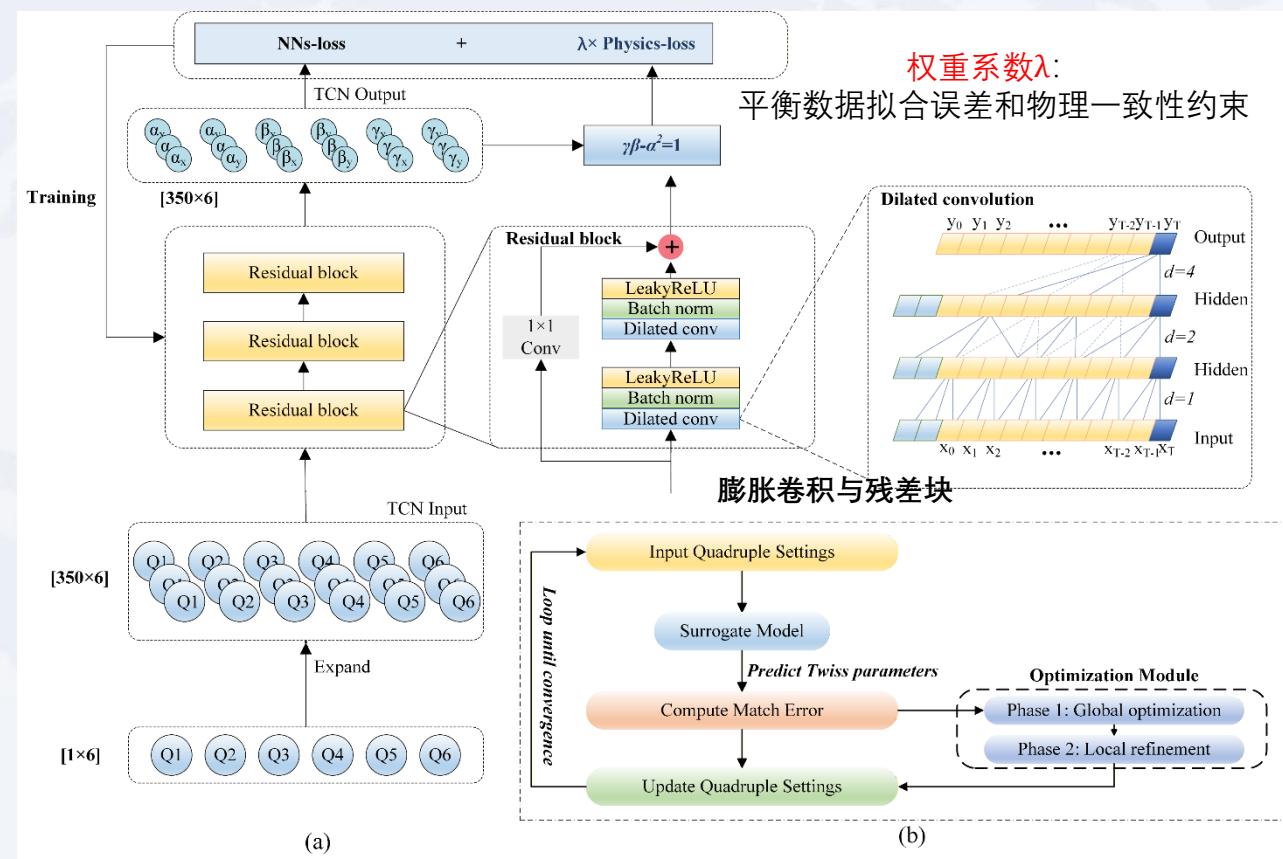
2. 基于PIML的束流动力学替代模型研究

问题定义

- 输入：MEBT段6个四极铁磁场梯度
- 输出：束线 350 个位置的Twiss 参数(α, β, γ)
- 须使预测结果保证 $\gamma\beta - \alpha^2 = 1$
- 本质：将物理约束设进损失函数的空间序列建模问题
- 提出PI-TCN (Physics-Informed Temporal Convolutional Network) 模型



特性	优势	对应在束线建模中的意义
膨胀卷积	扩大感受野，减少层数	用较少的计算量看到更长束段依赖
残差连接	防止梯度消失，支持深层网络	保证模型稳定训练
卷积替代递归	并行高效训练，适合大样本	大幅加速模型拟合，便于工业落地



PC-TCN模型框架

2. 研究结果-LSTM&TCN

Hyperparameter	LSTM	TCN
Stack depth (layers/blocks)	8	8
Hidden dimension / channels	128	128
Kernel size	—	3
Dilation factors	—	2^0-2^7
Parameter count	$\approx 1.01M \approx 0.95M$	

$$r_p(z) = \hat{\gamma}_p(z) \hat{\beta}_p(z) - \hat{\alpha}_p^2(z) - 1$$

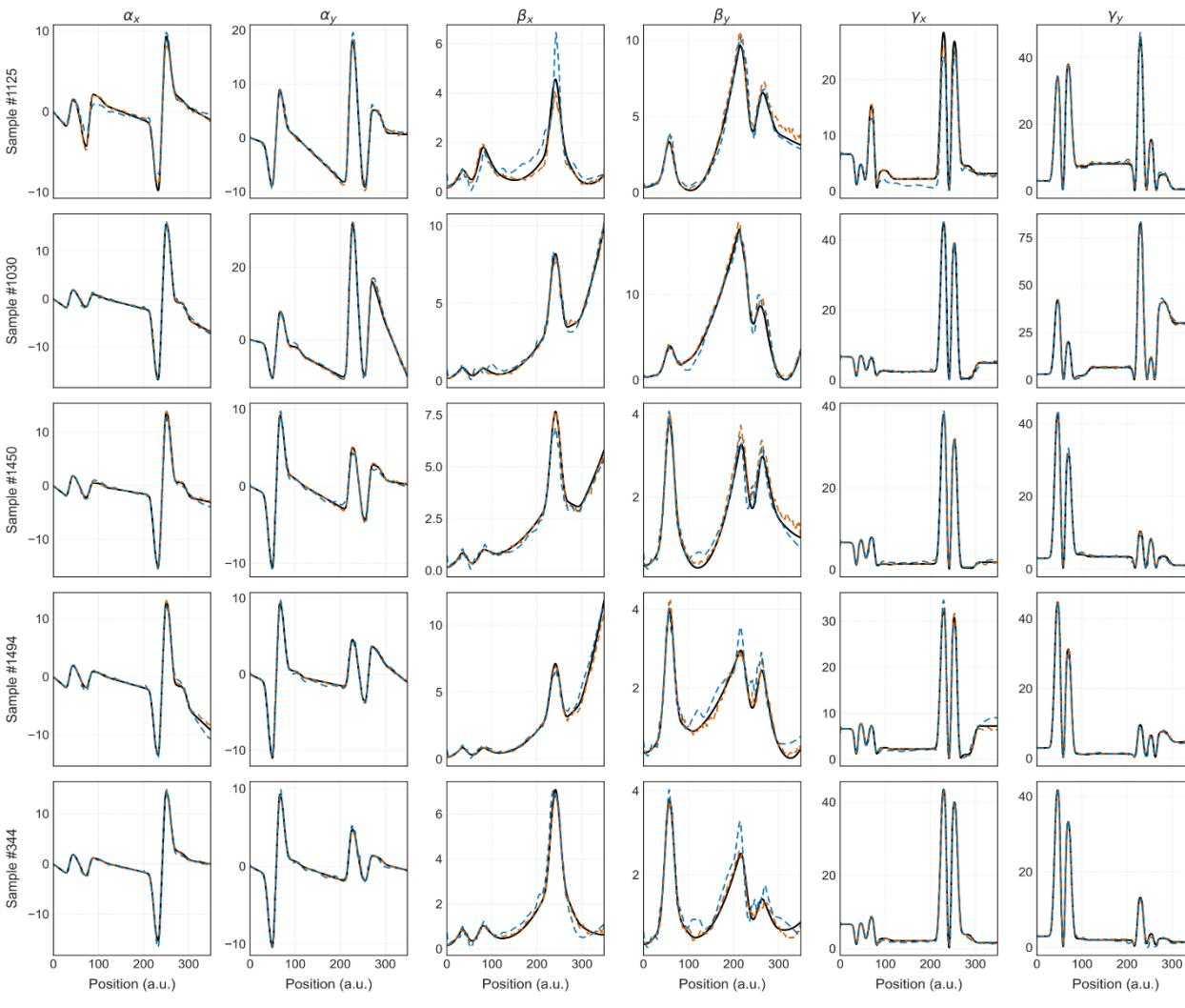
$$\text{Physics MSE} = \frac{1}{2N_{\text{eval}}N_z} \sum_{n=1}^{N_{\text{eval}}} \sum_{t=1}^{N_z} \sum_{p \in \{x,y\}} r_{n,p}^2(z_t)$$

$$\text{CR} = \frac{1}{2N_{\text{eval}}N_z} \sum_{n=1}^{N_{\text{eval}}} \sum_{t=1}^{N_z} \sum_{p \in \{x,y\}} \mathbb{I}(|r_{n,p}(z_t)| < \epsilon)$$

TCN性能显著优于LSTM

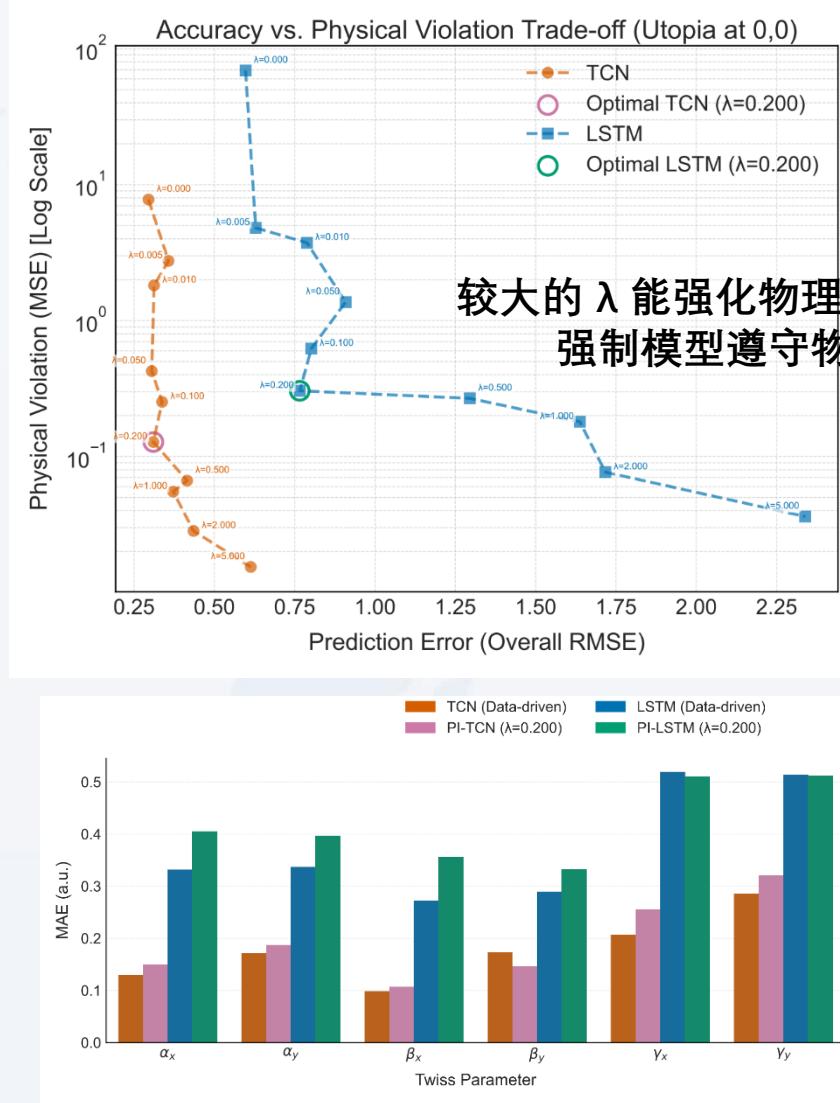
AVAS用时14.78s, PC-TCN用时5.76ms,
速度提升3个数量级以上

Model	MAE	RMSE	R2	Physics MSE	Consistency Ratio
LSTM	0.377	0.597	0.982	69.09	0.101
TCN	0.178	0.295	0.996	7.78	0.239

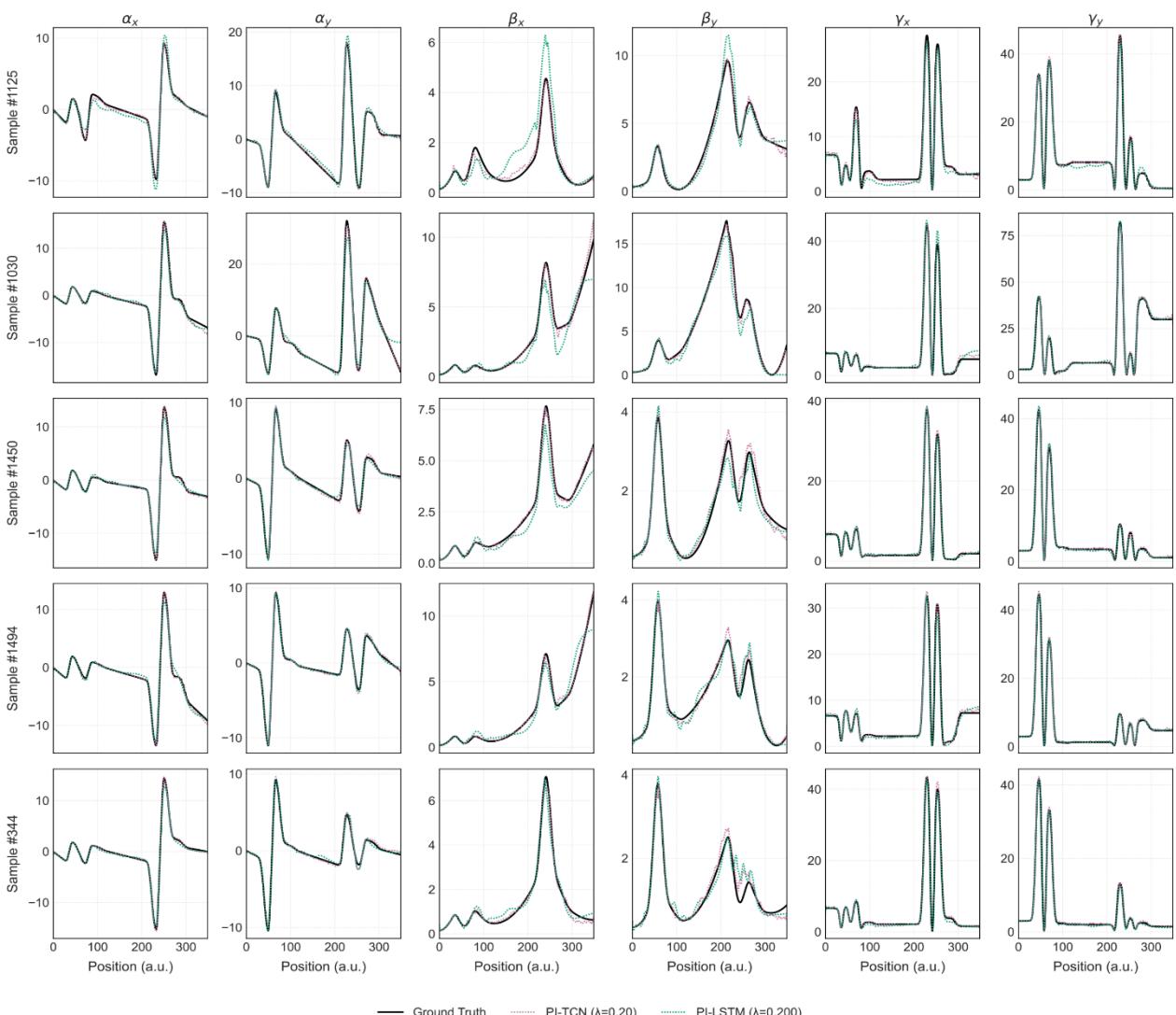


2. 研究结果 PI-LSTM&PI-TCN

精度与物理一致性的权衡分析



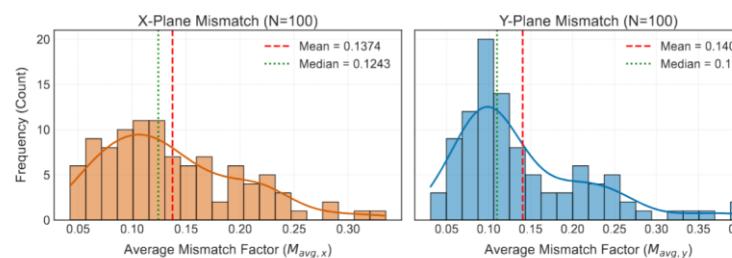
Model	MAE	RMSE	R2	Physics MSE	Consistency Ratio
PI-LSTM	0.419	0.773	0.961	0.304	0.328
PI-TCN	0.195	0.335	0.996	0.128	0.483



研究目标

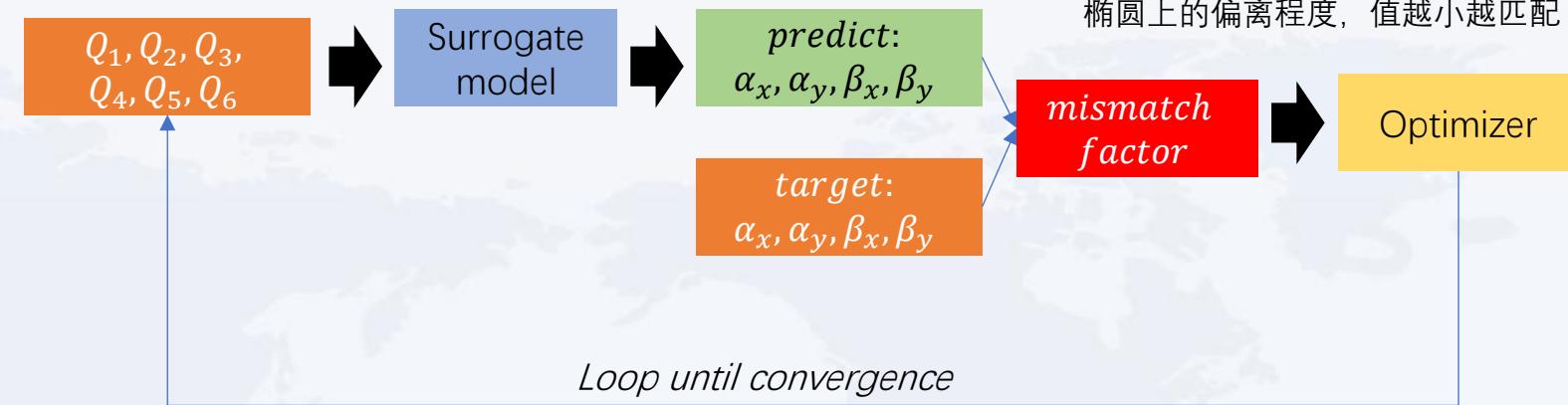
在束线的若干个关键位置，不断调整磁铁值的设定，使得 Twiss 参数能够与预设的目标值精确匹配。

Metric	Mean	Std	Median	Min	Max
Avg. mismatch factor M_{avg}	0.2780	0.1313	0.2441	0.0970	0.6797
Avg. mismatch (X plane) $M_{avg,x}$	0.1374	0.0635	0.1243	0.0425	0.3348
Avg. mismatch (Y plane) $M_{avg,y}$	0.1406	0.0789	0.1100	0.0308	0.4071

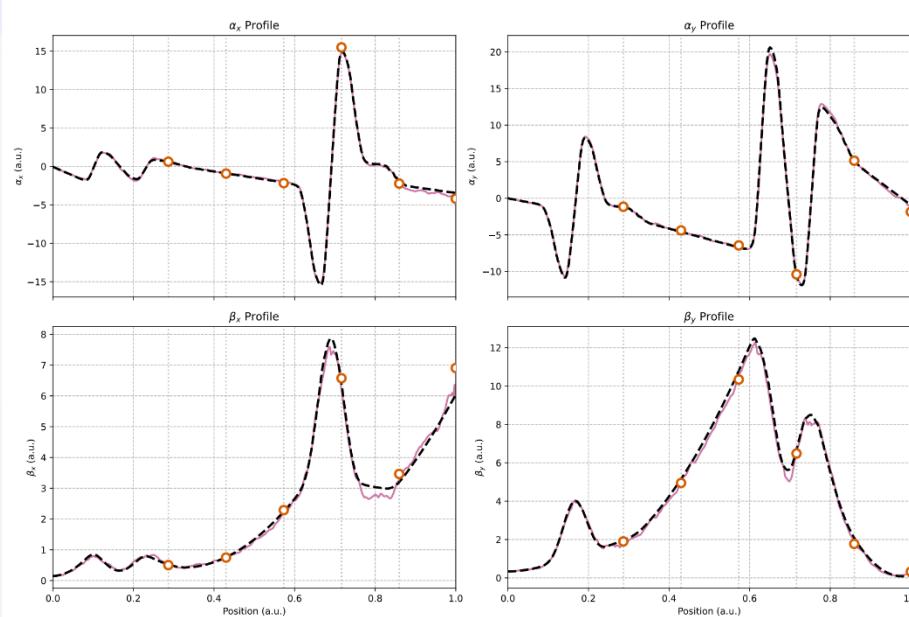


Metric	Description	Mean	Std. Dev.
N_{calls}	Average number of surrogate calls	2,920.0	13.1
T_{per_call}	Inference latency per call (ms)	13.20	0.98
$T_{surrogate_sum}$	Total surrogate inference time (s)	38.55	2.92
T_{algo}	Algorithmic overhead (s)	0.96	0.06
T_{total}	Total optimization time (s)	39.51	2.98

基于替代模型的优化框架



结果展示



- 在设定位置，Twiss 参数与预设目标值高度一致
- 失配因子快速收敛至约0.033
- 优化过程整体耗时约40秒
- 将优化结果输入AVAS，Twiss 演化过程与替代模型高度一致

高功率加速器对束流建模、优化与控制的需求不断提升，传统方法在效率与可操作性上面临挑战。

本研究提出了基于物理约束的替代模型与优化框架，为加速器束流建模和 Twiss 参数匹配提供高效、可靠的解决方案：

- 方法创新：提出物理约束时序卷积网络 (PI-TCN)，结合膨胀卷积、物理约束项与自适应损失平衡，兼顾预测精度与物理一致性
- 性能表现：在 MAE、RMSE 与物理约束违背率方面均显著优于 LSTM；推理速度提升3个数量级，参数量仅 0.4M
- 应用验证：在 MEBT 段实现 6 点 Twiss 参数高精度匹配，多数运行 mismatch factor < 0.05 ；优化效率较 AVAS 提升 1000 倍以上

研究意义：提供高效、可解释、物理一致的替代建模工具，支撑多点匹配与束流调试中的快速优化需求

未来展望

- 扩展数据集覆盖更多运行条件，提升模型泛化能力
- 从 MEBT 段推广至超导段，开展四极磁铁与加速腔体等多元件的替代与联合优化

谢谢各位老师!

Email

huyaxin@impcas.ac.cn