arXiv:2611.32300v1 [physics.acc-ph] 24 Nov 2026

Slipstream：基于 PyTorch 的非线性束流动力学

J. K. Jones、A. D. Brynes、M. King、H. L. Owen 和 A. Pollard
Accelerator Science & Technology Centre, STFC Daresbury Laboratory, Warrington, United Kingdom and the Cockcroft Institute, Warrington, United Kingdom（日期：2026年11月24日）

Slipstream 是一个用于储存环、直线加速器和光注入器中非线性束流动力学的 PyTorch 软件包。它提供中央处理器和图形处理器粒子跟踪、包含空间电荷的场图注入器模型，以及对受支持跟踪路径的自动微分。通过与 elegant、ASTRA、 GPT 及其他代码进行比较，评估其在非线性环形加速器跟踪、光学匹配和光注入器方面的准确性与计算成本。环形加速器工作点与 elegant 的差值在 10^{-9}以内。对于经过测试、包含数万个粒子的环形工作负载，与此处比较的单线程中央处理器实现相比，float32 图形处理器跟踪的速度快数百倍。与有限差分相比，自动微分可将 24 参数光学匹配所需时间缩短一个数量级。以高亮度光阴极注入器为例，最终水平发射度在 20 和 100 皮库时与 ASTRA 相差约 1%，在 250 皮库时相差 ≈4%。对于 2^{18} 个宏粒子， Slipstream较快的默认设置在 RTX 3050 图形处理器上耗时 14 秒，所得发射度与ASTRA的结果相差不超过 2%。其他测试考察了相干同步辐射、动态孔径和电阻壁阻抗。该软件包主要由人工智能编程助手在人工指导下开发。这些比较揭示了其模型、图形处理器执行和导数在扫描、拟合和优化中的重复模拟任务中适用的场景。

I. 引言

加速器设计、调试和优化往往需要针对多种机器参数设置反复进行束流动力学计算。数字孪生应用对模拟也提出了类似要求 [1–4]。计算必须足够快速，以支持扫描或拟合，同时保留决定目标可观测量的物理效应。对于某些光学任务，线性传输模型可以满足这一需求；而非线性环形加速器动力学和空间电荷主导的注入器则需要更精细的模型。

现有代码以不同方式组合了这些功能，其中有多个代码支持 GPU 执行。Cheetah 是用于可微束流传输 [5]的 PyTorch代码；其线性模型可以简化为高效的传输映射，近期版本还加入了下文比较中使用的非线性元件选项，以及空间电荷踢 [6]。此处，我们所说的“可微”是指跟踪通过支持自动微分（AD）的操作实现，因此可以通过对模拟进行反向传播，获得输出相对于所有输入的精确梯度；其成本不会随输入数量增加而增长（而是随输出数量增加），并且与有限差分（FD）所需的大量正向运行相比，这一成本很小。 SciBmad 和 JuTrack （均为 Julia）以及直线加速器框架 HELIX （PyTorch，为 PIP-II 强子直线加速器开发，并配备粒子-网格空间电荷求解器）也提供可微跟踪，但采用了不同的元件模型和空间电荷处理方法 [7–10]。 Xsuite 和 ImpactX是成熟的跟踪代码，具备非线性映射和集体效应，旨在同时支持中央处理器和图形处理器执行 [11–13]。由于这些选择的实现方式各不相同，同一标称晶格在不同代码中未必代表相同的数值映射，因而在比较精度和速度时必须加以考虑。这对比较精度和速度都很重要。

光阴极注入器是一个要求颇高的实例。自由电子激光器获得的发射度主要由电子枪和第一段加速结构决定，在此过程中，发射、空间电荷、射频 (RF) 场和螺线管聚焦相互作用 [14–18]。ASTRA和 General Particle Tracer(GPT)是此类计算中成熟的工具 [19, 20]。反复进行注入器模拟有助于寻找工作点、评估抖动并拟合机器参数。

Slipstream 将非线性环形加速器和直线加速器传输与场图光阴极注入器跟踪相结合，运行于 PyTorch 中。注入器模拟包含准静态空间电荷和阴极像电荷场；环形加速器和直线加速器跟踪器则包含磁输运及选定的集体效应模型。该软件包可读取 elegant [21]和 ASTRA 输入文件，并支持中央处理器和 CUDA GPU 执行。受支持的物理计算也保留了对机器参数的依赖，因此可通过自动微分提供用于拟合和优化的导数，不过目前发射时序和孔径损失仍不在可微路径之内。

我们提出三个实际问题：模型在多大程度上能够重现已有的数值结果，执行时间如何随粒子数变化，以及导数何时能够缩短优化所需的时间。
环形加速器跟踪和光学匹配用于测试传输路径和导数路径。空间电荷主导的漂移以及 CLARA 电子枪 [22] 和第一个加速结构用于测试集体模型和实现收敛所需的数值设置。进一步的比较还考察相干同步辐射（CSR）、增强器动力学、束内散射和电阻壁阻抗。

这项工作还提供了一个 AI 辅助加速器模拟的案例研究。在作者指导下，编码助手编写了

大部分实现及配套软件，涵盖物理模型、输入格式和比较工作流。本文考察了这一过程的产出，以及如何独立核验其数值结果。第 IIG 节介绍工作流和具体示例。第 II节和 III 节介绍模型和基准测试规程，随后在第 IV节展示主要结果，在第 V节提供更多比较，并在第 VI节讨论其实际意义。

II. 物理模型与数值方法

Slipstream 采用两种方式描述粒子束团（图 1）。环和直线加速器跟踪器通过晶格元件推进一个由六维状态构成的张量，并以批量操作的方式将每个元件作用于所有粒子。注入器则通过施加场和集体场推进笛卡尔位置与固有速度。显式坐标转换将这两种跟踪器连接起来。PyTorch 提供主要实现 [23]；可选的 Warp 核函数可加速特定计算 [24]。

A. 状态向量与转换

环和直线加速器的状态为 $(x, p_x, y, p_y, \tau, \delta)$。动量 p_x、p_y 和 p_z 均以参考动量 p_0 归一化；τ 是以米为单位表示的到达延迟，迟到时为正；而 $\delta = (p-p_0)/p_0$。纵向动量为

$$p_z = \sqrt{(1+\delta)^2 - p_x^2 - p_y^2}, \tag{1}$$

斜率为 $x' = p_x/p_z$，y' 对应的表达式同理。在有限能量下，δ 不同于与到达时间共轭的能量变量。

注入器出口束团通过弹道传播，从共同时间转换到共同的纵向观测平面。该共同-s 转换先以 float64 精度计算，再转换为工作精度。尤其是，当粒子和参考值的固有速率大小 u 与 u_0 非常接近时，以 float32 计算 $u/u_0 - 1$可能会损失有效数字。

B. 磁输运

在直线漂移中，x 会变化 $\Delta s\, p_x/p_z$，y也同样如此。当 ℓ 为粒子路径长度、βc和$\beta_0 c$ 分别为粒子速度和参考速度时，到达坐标会变化 $\ell/\beta - \Delta s/\beta_0$。曲率为 h的扇形弯转磁铁在正则变量中使用闭式漂移。其三角表达式经过重新排列，以便避免在 $h\Delta s$较小时对几乎相等的量进行相减，这在 float32 中非常重要。

多极铁踢角为

$$\begin{aligned} F_y &= h + k_1 x + \tfrac{1}{2} k_2 (x^2 - y^2) + \ldots, \\ F_x &= k_1 y + k_2 xy + \ldots, \\ \Delta p_x &= -\Delta s\,(1 + hx) F_y, \\ \Delta p_y &= \Delta s\,(1 + hx) F_x, \end{aligned} \tag{2}$$

其中，k_1 和 k_2 分别为归一化四极磁铁和六极磁铁的磁铁强度。更高多极阶数遵循相同的展开形式。每个元件由对称漂移—踢角切片组合而成，四极磁铁和六极磁铁分别采用不同的切片数。对于阶数为 n的对称映射 S_n，吉田三重跳跃构造 [25]，

$$\begin{aligned} S_{n+2}(\Delta s) &= S_n(x_1 \Delta s)\, S_n(x_0 \Delta s)\, S_n(x_1 \Delta s), \\ x_1 &= \frac{1}{2 - 2^{1/(n+1)}}, \quad x_0 = 1 - 2x_1, \end{aligned} \tag{3}$$

可提高积分阶数。可选阶数为 4、6 和 8。边缘映射包含间隙、边缘场积分以及 Brown 二阶项 [26]，，遵循 elegant 的实现 [21]。

精确偶极子选项将偶极场纳入漂移映射，以提高 float32 精度。在增能器对比（第 VB节）中，float32 动态孔径面积与 elegant 的结果相差不超过 3%。采用每个弯转默认 8 个切片时，离散化的组合功能弯转磁铁可能会使标称参考轨道发生偏移。跟踪器会减去每个理想元件产生的偏移，类似于 elegant [21]。

C. 环形加速器和直线加速器中的射频与集体效应

环形加速器的射频腔可以每圈作用一次，作为集中踢，也可以位于各自的晶格位置。行波结构具有固定的相速度，因此低能粒子会发生相位滑移。直线加速器跟踪器在每个元件之后将参考动量重新设定为束团质心的动量，遵循 elegant。另有一种模式使用固定的设计能量分布进行抖动研究。

直线加速器包含一个局部的长波长纵向空间电荷（LSC）模型 [27]。其一维 CSR 模型包括稳态尾场和可选的入口瞬态，并在每个偶极子切片的中心进行评估 [28, 29]。偶极子出口之后、携带出口瞬态的尾场取自 Stupakov 和 Emma 的闭式漂移模型 [30]，如 elegant 的 CSRDRIFT 中所采用；也可以取自根据线电荷的迟滞场制成的内核表，或者更简单地取自截断于超越长度的稳态踢度。与线密度进行卷积即可得到尾场势。稳态计算采用以下两种方式之一：对尾场核函数进行成对求积，其成本为 $O(N^2)$，适用于 N 个粒子，并使用软化长度 ϵ 消除零间距处的奇点；$|\Delta s|^{-1/3} \to (\Delta s^2 + \epsilon^2)^{-1/6}$；或者采用固定的

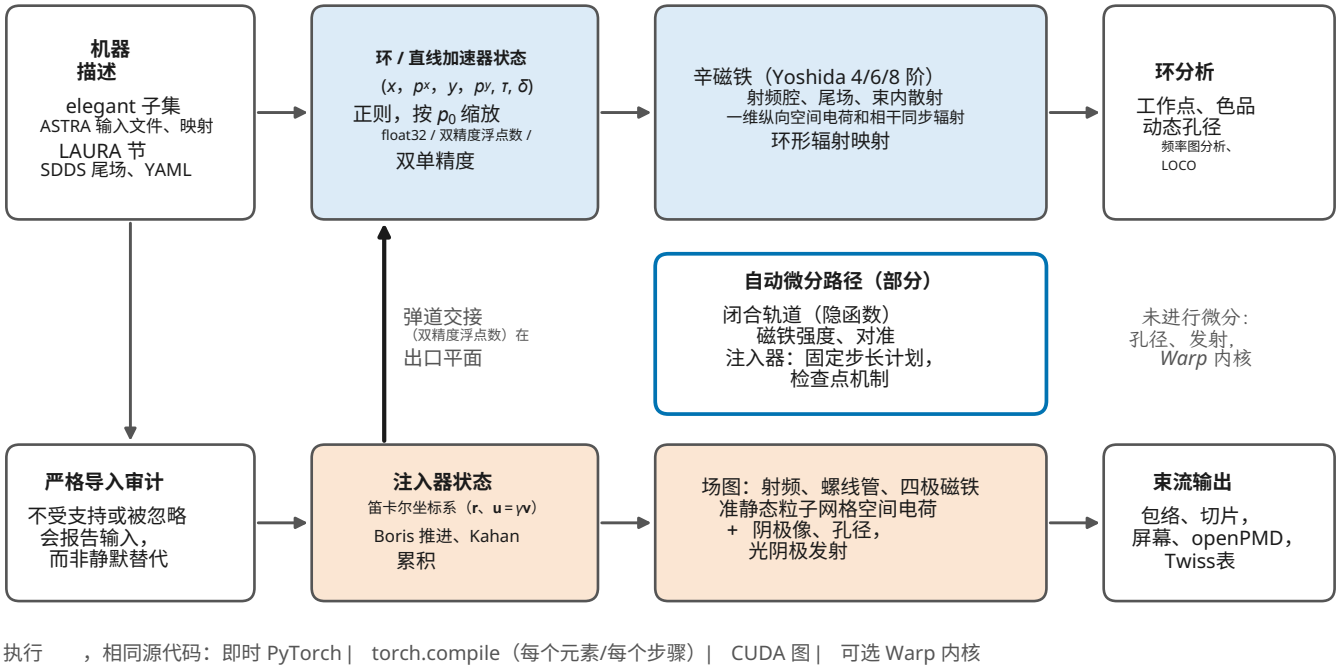

图 1。 SLIPSTREAM 中的跟踪路径和状态描述。蓝色框表示环和直线加速器传输；橙色框表示笛卡尔注入器跟踪。自动微分涵盖受支持的环映射和闭合轨道计算，以及采用固定步长计划的注入器计算。发射时序和孔径损失不进行微分。在分析框中，FMA 表示频率图分析，LOCO 表示闭合轨道线性光学。

直方图网格，成本为 $O(N+B\log B)$，适用于 B 个分箱。瞬态和漂移内核使用固定网格。第 VA 节比较了这些近似方法。

环形加速器同步辐射通过每圈一次的阻尼与激发映射发挥作用。束内散射（IBS）速率遵循 Bane 和 Bjorken–Mtingwa [31,32]。短程尾场以每个单元的尾场电势表 $W(t)$（纵向 V/C，偶极 V/C/m）的形式施加，从 SDDS 文件中读取，或通过高斯探针逆快速傅里叶变换根据制表化阻抗生成。束团电荷被分箱到该表的时间网格上，通过快速傅里叶变换与尾场进行卷积，然后为每个粒子读取得到的电压。

D. 注入器：外加场与空间电荷

粒子推进。 注入器使用相对论 Boris 推进方案 [33] 推进笛卡尔位置和固有速度 $\boldsymbol{u} = \gamma\boldsymbol{v}$。纯磁场旋转（例如螺线管）会保持 $|\boldsymbol{u}|$不变，因此每步只需计算一次 γ。在电子枪出口能量下，纵向空间电荷增量 $a = (q/m)E\Delta t$ 可能小于所存储u值之间的 float32 间距。直接相加会导致该增量被舍弃。因此，位置和动量采用 Kahan 补偿求和 [34]，

$$y = a - c, \quad t = u + y, \quad c \leftarrow (t-u) - y, \quad u \leftarrow t, \tag{4}$$

它会在步与步之间传递舍入修正 c。

外加场。 轴上场图描述驻波腔、以一个重复周期存储的行波结构、螺线管（包括抵消式组合场图） [35]，四极磁铁、具有费米型边缘场的偶极磁铁以及校正磁铁。近轴径向展开用于计算轴外的场。例如，螺线管使用 $B_r = -\frac{r}{2}\mathrm{d}B_0/\mathrm{d}z$和 $B_z = B_0 - \frac{r^2}{4}\mathrm{d}^2B_0/\mathrm{d}z^2$，其中$B_0(z)$是轴上场。自动定相通过相位扫描和抛物线细化，找出每个腔的最大轴上能量增益。

空间电荷求解。 云团置入网格法将电荷沉积到束团静止系中的网格上，并按平均洛伦兹因子γ拉伸纵向坐标。求解器根据$\nabla^2\phi' = -\rho'/\epsilon_0$ 计算静电势，并将其场插值到粒子位置。横向实验室系力为

$$\boldsymbol{F}_\perp = \frac{q}{\gamma}\boldsymbol{E}'_\perp. \tag{5}$$

这种准静态变换包含电场增强和补偿磁力 [36, 37]。

默认的粒子网格（PIC）求解器假设轴对称。它在计算盒的径向边缘设置接地壁，并采用守恒径向有限差分；在纵向使用零填充（Hockney）快速傅里叶变换，以实现纵向开放边界 [38, 39]。另一种笛卡尔求解器使用单元平均积分格林函数和开放边界快速傅里叶变换，

卷积 [37]。两种求解器在束团靠近阴极时，都会通过同一求解器沉积电荷相反的镜像束团，以表示导电阴极。圆柱形计算盒的径向范围延伸至最外侧粒子之外 $6\sigma_r$，纵向范围（在静止系中）延伸至束团范围之外 $6\sigma_z$，并额外留出 25% 的纵向余量；笛卡尔计算盒则在粒子跨度的两侧各增加 5%。

发射。 每个宏粒子会在其指定发射时间之后或该时间所在的第一个步长处变为活跃状态。可选的光阴极模型使用 Dowell 和 Schmerge [18] 的三步模型，根据激光脉冲和提取场计算发射电荷。有限步长会将发射时间量化；这对于收敛性和导数覆盖都很重要。

结构尾场。 表格化的单极尾场作为局部纵向踢力输入，使用 AS-TRA 的 &WAKE 表 [19, 40] 模型。当束团质心到达某个踢力位置时，粒子能量会改变 $-qV(z)$，其中 $V(z) = \sum_j q_j w(z_j - z)$ 汇总了前方粒子的贡献。尾场函数 w 以 V/C 为单位制成表格。势在均匀分箱上使用线性电荷权重进行计算。当尾场表描述一个单元时，包含 n 个单元的结构会接收 n 次踢力。注入器目前尚未对横向结构尾场进行建模。

孔径与诊断。 沿每个粒子在一步中扫过的直线路径检测孔径。屏幕通过插值记录首次向前穿越。观测到的电荷和损失的电荷分别报告。

E. 微分与批处理

磁铁强度、校正器踢角、偏移量和滚转角可以在环映射中保持为张量。形状为 $(M, 1)$ 的张量允许在一个批次中跟踪 M 组机器参数设置。这里，机器参数也称为旋钮，是在扫描、灵敏度计算或优化中变化的输入。

闭合轨道满足 $\boldsymbol{r}(\boldsymbol{z}_{\rm co};\,\boldsymbol{\theta}) = \mathcal{M}(\boldsymbol{z}_{\rm co};\boldsymbol{\theta}) - \boldsymbol{z}_{\rm co} = 0$，其中 $\mathcal{M}$是一周映射， $\boldsymbol{\theta}$ 是参数向量。牛顿求解器会保留其残差对参数的依赖关系。隐函数关系

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{z}_{\rm co}}{\mathrm{d}\boldsymbol{\theta}} = -\,(J - I)^{-1}\,\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial \boldsymbol{\theta}}, \qquad J = \left.\frac{\partial \mathcal{M}}{\partial \boldsymbol{z}}\right|_{\rm co}, \tag{6}$$

由此给出已收敛不动点的灵敏度。通过对基本频率进行数值分析（NAFF） [41],得到的工作点、色品、振幅失谐以及轨道响应矩阵也可以求导。

对于注入器组件，track differentiable 会基于固定步长计划，对场计算、粒子推进、空间电荷求解和束流统计量构建自动微分图。支持的参数包括腔体相位和振幅、螺线管磁场、四极梯度、电荷和激光光斑尺寸。反向模式微分可求得标量输出相对于所有选定参数的梯度。完整的雅可比矩阵需要针对每个输出执行一次反向扫描；环形加速器雅可比矩阵基准测试采用了这一流程。检查点机制会存储选定的中间状态，并在反向扫描期间重新计算其他状态，以减少内存占用。孔径损失、发射时序以及关闭阴极像的步数均不进行微分。

F. 执行与浮点精度

环元件或注入器步可以直接在 PyTorch中执行，也可以通过 torch.compile 和 Triton 内核 [42, 43], 执行，或者通过重放 CUDA 图执行。编译应用于可复用的元件或步函数。变化的标量设置（包括偏移量、倾斜量、屏幕位置和射频相位）以标量张量的形式传入，以便扫描可以复用编译后的计算。注入器网格尺寸取自固定集合：柱坐标求解器使用纵向单元数，笛卡尔求解器则使用几何阶梯，其档位间距约为 4%。束团一旦超出网格范围，网格就会扩大；但只有在所需尺寸低于下一个较小单元数的 70%（柱坐标求解器），或小两个以上约 4% 的档位（笛卡尔求解器）时，网格才会缩小。这样可以避免束团范围在边界附近波动时，每次场更新都触发求解器重建和重新编译。

对于参考能量固定的环形加速器，双单精度表示将每个坐标存储为一对 float32 值，在消费级 GPU 上可提供约 44 位的有效尾数。基准测试将此选项与普通 float32 和双精度浮点数进行比较，并区分重复调用时的执行与编译及其他初始化成本。

G. AI 辅助开发与验证

实现、测试和文档，以及基准测试适配器、分析脚本和图表生成代码，主要借助 Claude Code 使用 Anthropic 的 Claude Sonnet 5.5，以及借助 Codex 使用 OpenAI 的 GPT Codex 6.1 Sol 编写。部分代码由人类编写。作者选定了物理模型和参考实现，设定了验收容差，指导了开发，并审查了代码和数值比较。工作流程结合了文献研究、书面功能计划、实现，以及针对成熟代码或闭式结果的定量检查。作者对科学主张及其解读承担责任。

这些助手既用于探索实现方案，也用于编写最终采用的代码。例如，实现了一个基于 JAX的注入器原型，并将其与 PyTorch进行了比较，但由于未显示出任何优势，最终没有采用。它们还帮助为各基准测试案例构建了连接十种外部仿真代码的适配器（第III节），其中包括第IVA节中的环比较，

并自动执行光阴极注入器敏感性测试，每次涉及数百次运行（第IVG节）。模型依据原始资料实现，并通过闭式解或成熟代码进行验证。这些示例记录了开发与验证工作的范围。

人工智能工具也在人工监督下协助了稿件起草、修改、图表制作和工作流程示意图绘制。数值图使用保存的基准测试数据。通过自动化测试、独立代码比较和收敛研究，评估了该实现对所报告案例的表现。人工智能生成的代码与其自身生成的测试结果一致，并不能单独证明其物理正确性。开发历时约 12 周，主要作者投入约 100–150 小时的工作（包括模拟运行时间）。Claude Code 记录的令牌用量，按 Anthropic 对 Claude Sonnet 5.5 的 API 标价计算，费用约为 400 美元；Codex 的用量则只占其中一小部分。

III. 基准测试设置

表I定义了四种常见基准测试案例。当其模型和接口支持相应计算时，共有 11 种代码参与： Slipstream, elegant, Xsuite, Cheetah, JuTrack, SciBmad, ASTRA, GPT, Im-pactX, Ocelot [44] 和 HELIX。表 II 记录了它们的版本。CLARA 注入器和后续验证研究采用单独的规程，并在相应结果中说明。

仅凭标称磁铁强度和切片数，并不能保证不同代码得到相同的映射。 SciBmad的默认跟踪方法包含硬边缘场，因此比较时选择其用于四极磁铁和六极磁铁的辛积分器，关闭边缘场，并使用精确扇形弯转磁铁。Cheetah的非线性设置将漂移段–踢转–漂移段传输与二阶六极铁结合起来。Xsuite 的比较明确选用了其精确漂移段和六极磁铁模型。因此，环研究会先检查各个独立元件，再解读工作点和导数差异。

适配器会明确转换坐标，包括Cheetah的能量坐标、elegant的横向斜率，以及 ASTRA 和GPT的公共时间束团。位置残差和归一化动量残差分别报告。若使用综合误差，则会先将各分量分别除以其给定的物理尺度。

所有模拟和基准测试均使用同一台工作站：搭载 16 核 AMD Ryzen 9 7950X 和 8 吉比字节显存的 NVIDIA RTX 3050 桌面图形处理器，并运行 Windows 11；在指定情况下使用 WSL2。通用代码环、雅可比矩阵和漂移段基准测试中，每个中央处理器代码均使用一个 CPU 线程。每种通用基准测试设置均以打乱后的顺序，在三个独立进程中运行。报告的预热时间是各进程重复调用时间的中位数。

重复调用时间不包括导入、模型构建和编译。这些时间包括生成通用输出所需的适配器工作，以及对于外部可执行文件而言的进程启动和文件输入输出。它们衡量的是该工作流的延迟，而不是孤立的内核执行。表I 中的容差为所选测试提供验收标准；误差会在整个过程中报告。

后续研究采用了明确标注的例外情况：CLARA 的计时包含多线程 ASTRA 和GPT，CSR 比较包含一次多线程Slipstream运行，而最慢的漂移段扩展性测试点均为单次运行。注入器优化研究采用并发的多线程进程，并按相应的资源分配报告结果。这些规程均在相关表格和图旁注明。

对于本文开展并进行基准测试的工作，我们使用 ASTRA 和 elegant 作为基线，并以此与 Slipstream 进行比较。这一选择基于加速器科学与技术中心（ASTeC）所使用的标准代码和工作流程，以及用于加速器设计和多个设施模拟的现有软件框架，具有实际意义。

IV. 基准测试结果

A. 非线性环形加速器调谐与元件模型

环形加速器比较测试振幅依赖调谐和首圈映射。振幅依赖调谐取决于元件映射中的非线性项，因此对元件模型之间的差异十分敏感。随后，我们将各代码的单元件映射与独立积分进行比较，以确定差异究竟源于元件模型还是跟踪框架。

Slipstream的双精度浮点数工作点与 elegant 至 10^{-9} 在五次振幅逐渐增加的粒子发射中一致（表III，图2a）。细化切片可将最大工作点差值降低至 4×10^{-11}；elegant 在 8/16 个切片下与 16/32 切片的参考运行相差 4×10^{-9}。 Slipstream的首圈残差为几个 10^{-11}，并分别报告位置和归一化动量。 Xsuite在明确选择精确漂移和六极磁铁模型时，也满足调谐容差。

Cheetah和 JuTrack的非线性设置与参考值相差 4×10^{-5} 至 1×10^{-4}，尽管增加了切片数量（Cheetah较快的线性模型没有振幅失谐，相差 3×10^{-3}）。SciBmad关闭硬边缘场并使用精确扇形弯转磁铁，在 4 阶、每个磁铁四个步数（9×10^{-9}）下满足容差，并收敛至 8×10^{-11}；其默认设置采用硬边缘场，相差 4×10^{-3}，这属于模型差异，而非积分误差。

精度会影响哪些可观测量能够满足所述容差。图形处理器上的 float32 满足调谐容差，但不满足首圈容差。双单精度混合方法将每个坐标存储为两个 float32 值，

表 I. 常见基准测试案例。CLARA 注入器、优化和其他验证研究采用的规程另行说明，并随结果一并给出。

Case	工作负载	可观测量	参考值	容差
`ring_tunes`	48 米双弯转磁铁消色差结构环，629 兆电子伏电子；5 粒子，位于 $x = 1$，2，4，6，8 毫米（$y = 1$ 毫米）；1024 圈	分数调谐值（汉宁窗频率分析）；首圈残差（x，p_x，y，p_y）	ELEGANT，6 阶，带有 16/32 个切片	工作点 10^{-5}；第一个圈 10^{-8} 在每个组件中
`ring_grad`	相同的环；一个粒子（$x = 4$ 毫米，$y = 1$ 毫米）；状态经过 39 圈；三个旋钮 k_1 四极磁铁族和 k_2 的两个六极磁铁	4×5 雅可比矩阵；有限差分（FD），相对步长为 10^{-2}–10^{-5} 采用理查森外推；自动微分（自动微分）适用时	ELEGANT 中心差分 雅可比矩阵	.....的单位不变限值第 IVC
`sc_drift`	20皮库，5兆电子伏动能电子束团，3米自由空间漂移漂移段，20 000个宏粒子，20站	均方根尺寸、均方根长度、归一化发射度、均方根能散，平均能量增益	ASTRA 3维求解器，32^3 网格（更精细第 IVF 节中的网格）	尺寸和长度 3%，发射度 5%
`linear_fodo`	1 米硬边缘 FODO，3 兆电子伏质子，$k_1 = \pm 32$ 米$^{-2}$	位置和归一化动量	闭式厚四极磁铁矩阵	10^{-11} 在每个单元中

表二。代码的版本。除非注明平台，否则均原生运行于 Windows 11；PyTorch 2.14.0 搭配 CUDA 13.2（HELIX为 2.14.1），NVIDIA 驱动程序为 616.56。

Code	版本	备注
Slipstream	1.0.1	Warp 1.17.0
elegant	2026.3.0	串行；Pelegant 与 MS-MPI
Xsuite	xtrack 0.111.6	xfields 0.27.2, xobjects 0.6.10; WSL2/Ubuntu
Cheetah	0.8.4	
JuTrack	1.5.0，提交 5b5eebd	Julia 1.10.4
SciBmad	0.6.0	束流跟踪 0.8.7, CUDA.jl 6.4.1; Julia 1.12.7
ASTRA	4.0（DESY，2022）	
GPT	构建于2024年10月14日	
ImpactX	26.10	WSL2/Ubuntu，中央处理器
Ocelot	26.6.1	WSL2/Ubuntu
HELIX	1.20.0	

对于这项小规模工作，其成本与双精度浮点数大致相当，却能同时满足两项容差。在单独的线性极限检验中，Slipstream 的六阶硬边质子 FODO 与解析传输结果一致；位置（单位为米）和归一化动量的差异仅在舍入误差范围内。

我们通过将各代码的单元件映射与对应哈密顿量的独立积分进行比较，在 135 个采样状态上检验了元件模型对工作点差异的解释，其中 x最大为 8 毫米，δ 最大为 1%。Slipstream的最大绝对分量残差为 2×10^{-13}，而 elegant的约为 10^{-9}；位置残差以米为单位测量，动量则以归一化单位表示。SciBmad的四个映射与参考值的差异为 5×10^{-16}。其他代码有一个或两个映射的残差介于 10^{-7} 和 10^{-4} 之间（JuTrack的弯转磁铁、Cheetah 的四极磁铁和六极铁，以及Xsuite的默认自适应漂移段），这足以解释它们为何在此情景下未能通过工作点门限。

图 2（b）展示了 Slipstream 的环形加速器跟踪精度如何取决于积分阶数和步数。这三个阶数的工作点差值与预热时间沿着同一条曲线变化，因此提高阶数并不会降低达到特定精度所需的成本。将步数分配给四极磁铁，并为每个六极铁设置一步，成本更低：每个四极磁铁设置八步（环绕标记）时，在两种精度下，所需时间都比每个磁铁设置八步少约 30%，且工作点差值相同。在 float32 下，每个四极磁铁设置四步后，工作点差值在 1.6×10^{-6} 附近不再改善，因此继续增加步数只会增加成本。在双精度浮点数下，每个四极磁铁设置六步，约需比 SciB-mad 的四步设置多 65% 的时间，才能达到相同的工作点差值；而SciBmad 在单个 CPU 线程上所需的时间则更短。在这个小型示例中，比较的是计算效率，而非扩展效率；后者将在下一节介绍。

B. 环跟踪的成本与扩展性

对于五粒子工作点测试，调度延迟占主导，因此图形处理器几乎没有优势。 Xsuite在一个 CPU 线程上运行 1024 圈需要 0.2 秒，而在图形处理器上使用 Slipstream float32 需要 0.5 秒，使用双精度浮点数则需要 2.1 秒。 SciBmad（阶数为 4，每个四极磁铁和六极铁分四步）在一个 CPU 线程上运行需要 0.9 秒，在图形处理器上使用 float32 需要 4.8 秒，使用双精度浮点数则需要 15 秒，此时启动延迟也占主导。

图 3 测试了更大的粒子集群，粒子数从 5 增加到 50000，运行 64 圈。对于数千个粒子以内的规模，图形处理器运行时间变化不大，而中央处理器运行时间则随粒子数近似线性增加。 Slipstream的图形处理器计算从 Xsuite float32 下 50 个粒子、双精度浮点数下 500 个粒子开始，比单线程计算更快。在 5000 个粒子时，前者快 297 倍，后者快 32 倍。 Xsuite 在同一图形处理器上使用双精度浮点数所需时间是 Slipstream每个粒子

表 III. 环形加速器调谐和首圈映射，对照 ELEGANT （阶数 6，16/32 个切片）。首圈条目为最大绝对残差，分别针对以米为单位的 (x, y) 和以归一化单位表示的 (p_x, p_y) 计算。配置标签给出积分阶数 (o)、四极铁/六极铁切片 (k 或 s) 以及弯转磁铁切片 (b)；对于 SLIPSTREAM，q 和 s 分别表示每个四极磁铁和六极磁铁的步数；yos 表示 XSUITE 中的 Yoshida-4，n 表示 JUTRACK 步；对于 SCIBMAD，o 和 k 分别表示辛阶数以及每个四极磁铁和六极磁铁的步数（关闭硬边缘场，使用精确弯转磁铁；“默认值”是随附方法，其中包含边缘场）。容差范围内的条目以粗体显示。预热时间为三个进程的中位数；在图形处理器上运行 SLIPSTREAM 时，各进程间的差异不超过 1.2%，其他设置下则不超过 12%。

Code	设置	预热 [s]	调谐误差	首圈最大值 $\lvert\Delta x,\ \Delta y\rvert$ [米]	首圈最大值 $\lvert\Delta p_x,\ \Delta p_y\rvert$
SLIPSTREAM	图形处理器 32位浮点数，o6q8s1	0.482	$\mathbf{1.75 \times 10^{-6}}$	5.04×10^{-8}	3.03×10^{-8}
SLIPSTREAM	图形处理器 64位浮点数，o6q8s1	2.07	$\mathbf{1.66 \times 10^{-9}}$	$\mathbf{1.10 \times 10^{-11}}$	$\mathbf{2.68 \times 10^{-11}}$
SLIPSTREAM	图形处理器 64位浮点数，o6k16b32	5.63	$\mathbf{3.59 \times 10^{-11}}$	$\mathbf{5.04 \times 10^{-12}}$	$\mathbf{3.57 \times 10^{-12}}$
SLIPSTREAM	图形处理器 32位浮点数 双单精度，o6q8s1	2.13	$\mathbf{2.8 \times 10^{-9}}$	$\mathbf{1.3 \times 10^{-10}}$	$\mathbf{5.3 \times 10^{-11}}$
SLIPSTREAM	中央处理器 64位浮点数 编译型，o6q8s1	4.57	$\mathbf{1.69 \times 10^{-9}}$	—	
ELEGANT	中央处理器 64位浮点数，o6s8b16	0.701	$\mathbf{3.82 \times 10^{-9}}$	$\mathbf{3.32 \times 10^{-10}}$	$\mathbf{2.55 \times 10^{-10}}$
XSUITE	中央处理器 64位浮点数、yosk8b16、精确模型	0.199	$\mathbf{6.86 \times 10^{-6}}$	5.81×10^{-8}	1.22×10^{-7}
JUTRACK	中央处理器 64位浮点数，n32b64	0.853	4.17×10^{-5}	2.39×10^{-5}	7.10×10^{-7}
SCIBMAD	中央处理器 64位浮点数，o4k4	0.898	$\mathbf{8.86 \times 10^{-9}}$	$\mathbf{7.48 \times 10^{-11}}$	$\mathbf{1.31 \times 10^{-10}}$
SCIBMAD	中央处理器 64位浮点数，o6k32	4.77	$\mathbf{8.08 \times 10^{-11}}$	$\mathbf{5.26 \times 10^{-12}}$	$\mathbf{4.04 \times 10^{-12}}$
SCIBMAD	中央处理器 64位浮点数，默认值（边缘场）	0.745	3.96×10^{-3}	4.37×10^{-5}	5.50×10^{-5}
CHEETAH	中央处理器 64位浮点数，漂移段-踢击-漂移段，16 步数	138	1.04×10^{-4}	1.50×10^{-7}	1.86×10^{-6}
CHEETAH	中央处理器 64位浮点数，线性映射	1.35	3.36×10^{-3}	5.26×10^{-4}	2.03×10^{-4}

粒子数，并且在 5000 和 50 000 个粒子时，比其自身的单线程中央处理器计算快 13–14 倍。相同的精度并不会使元件映射完全相同，因此映射和工作点检查仍然决定着比较结果。SCIBMAD采用 4 阶、每个四极磁铁和六极铁执行 4 步的设置，在一个 CPU 线程上处理 5 个粒子需要 0.06 s，粒子数增加到 50 000 时线性上升至 138 s。在图形处理器上，处理 5 个粒子时需要 0.9 s（双精度浮点数）和 0.3 s（float32）；在双精度浮点数下约 1000 个粒子、float32 下约 100 个粒子时，其速度超过自身的中央处理器计算。在 50 000 个粒子时，它在双精度浮点数和 float32 下分别比 SLIPSTREAM 慢 8.2 倍和 57 倍，并且在双精度浮点数下比 XSUITE 慢 3.5 倍。其 float32 结果也不满足工作点容差（1.5×10^{-4} 经过 1024 圈后）。

在 50 000 个粒子时， SLIPSTREAM 在图形处理器上使用 float32 时，每个粒子周转耗时 0.077 μs，使用 float64 时耗时 1.2 μs，而 XSUITE 2.8 μs（float64）。在单个 CPU 线程上，编译型 SLIPSTREAM和 XSUITE分别耗时 25 和 38 μs，而ELEGANT 耗时 134 μs； SCIBMAD在单个 CPU 线程上耗时 43 μs，在图形处理器上使用 float64 和 float32 时分别耗时 9.9 和 4.4 μs。这些比值是将所述图形处理器与单个 CPU 线程进行比较，且不包括初始化； XSUITE的图形处理器线路构建每个进程约需 5 分钟，而 SCIBMAD首次调用图形处理器约需 40 秒。

C. 环导数与光学匹配

在比较不同代码的导数之前，我们先将每个导数与同一代码的有限差分（FD）结果进行比较。 SLIPSTREAM 的自动微分（AD）与中心有限差分（central-FD） 4×5 雅可比矩阵的相对弗罗贝尼乌斯误差为 4×10^{-9}。将可复用的中央处理器计算编译后，自动微分耗时降至 1.5 秒，有限差分耗时降至 1.8 秒，均使用一个线程。与直接执行未编译代码相比，速度分别提升了 52 倍和 25 倍；结果变化不到 2×10^{-13}。

跨代码雅可比矩阵比较还必须考虑底层轨迹的差异。我们将每个导数缩放为无量纲灵敏度 $S_{ij} = \theta_j (\partial y_i / \partial \theta_j) / \sigma_i$，其中 θ_j 是名义磁铁强度， σ_i 是输出坐标 i在前 40 圈内的均方根振幅， i 是以下之一： x， p_x， y， p_y。共动量情形使用 ELEGANT的轨迹进行这些缩放；第二种非共动量情形使用精细的原生轨迹。这样的缩放可避免位置或动量单位的变化影响判断。

我们相对于 ELEGANT 的有限差分雅可比矩阵设定了两个极限。绝对灵敏度差的最大值除以最大参考灵敏度后，必须满足 $e_{\mathrm{abs}} \leq 10^{-3}$。在大于该最大灵敏度的 10^{-3} 的参考条目中，最差相对差必须满足 $e_{\mathrm{rel}} \leq 1\%$。 SLIPSTREAM 在两次启动中均以超过三个数量级的裕度满足这两个极限，其中一次启动包含 $\delta = 3 \times 10^{-3}$ 和一组不同的参数； $e_{\mathrm{abs}} \approx 3$–$4 \times 10^{-7}$。 SCIBMAD 关闭边缘场并采用精确弯转磁铁后，也满足这两个极限：其前向模式自动微分（FORWARDDIFF）与自身的有限差分结果一致至 4×10^{-9}，并且在第一次启动中，四阶、四步时与 ELEGANT 的差异为 $e_{\mathrm{abs}} = 3.7 \times 10^{-7}$，六阶、32 步时为 1.3×10^{-8}（第二次启动分别为 2.4×10^{-6} 和 6.3×10^{-8}）。对于一个粒子经过 39 圈的计算，计算 4×5 雅可比矩阵耗时 0.09–0.30 秒，比进行一步中心有限差分快 2.7 至 4.4 倍。

其他代码的缩放雅可比差异，以及 SCIBMAD 采用其随附的边缘场模型时，范围从 10^{-3} 到 1，与其缩放端点轨迹差异相当，见 [图 4（a）]。经过 39 圈后， 10^{-4} 的调谐偏移已经会产生约 0.025 弧度的相位差。因此，跨代码导数差异在很大程度上反映了元件模型差异。与某代码自身的 FD 计算结果进行一致性比较

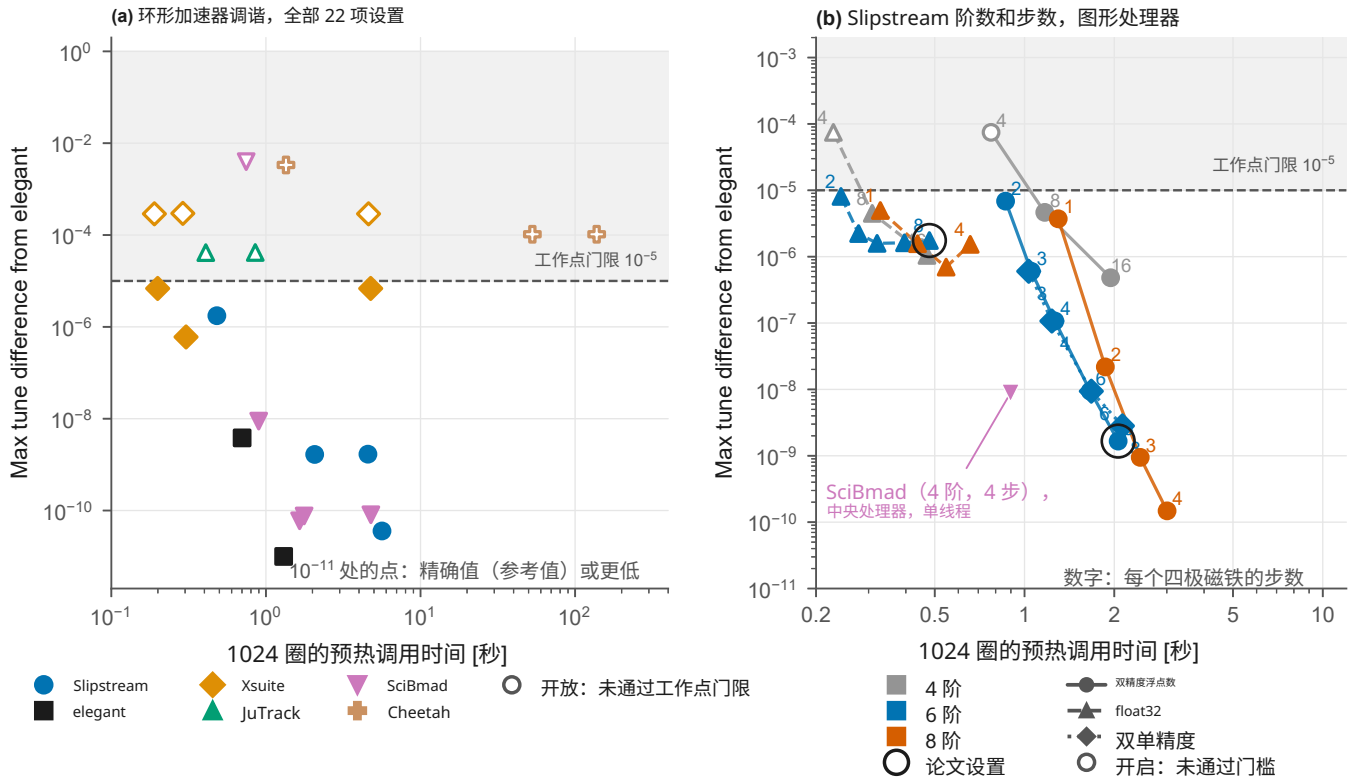

图 2. 非线性环形加速器调谐。(a) 对所有 22 种设置，展示五次启动和两个平面中，相对于 ELEGANT 的最大工作点差值随 1024 圈的预热时间变化的情况；空心标记表示超过了 10^{-5} 容差。(b) 展示在图形处理器上使用 SLIPSTREAM 时，随着积分阶数变化，float32、双精度浮点数和双单精度（混合）算术下，最大工作点差值随 1024 圈的预热时间变化的情况。标签标示四极铁步数，每个六极铁一步，扇区弯转磁铁采用精确计算。圆环标记出本文采用的设置（阶数 6，每个四极磁铁八步）。

仍然是直接检查其导数实现的方法。

有限差分精度也取决于步长。相对于最佳外推有限差分结果的弗罗贝尼乌斯相对误差，在相对步长为 10^{-3}时为 0.09，10^{-3} 在10^{-4} 时为 10^{-5}，在 10^{-5}时为 4×10^{-9} [图 4(b)]。自动微分的结果为此。对一对步长进行外推可提高有限差分精度，成本约为单一步长的两倍。

随着参数增加的成本。对于四输出的环形加速器雅可比矩阵，在测试的 1–40 个磁铁强度参数范围内，自动微分耗时为 1.1–1.2 秒，约相当于七次正向计算 [图5(a)]。该实现对每个输出执行一次反向扫描；增加输入参数不会改变扫描次数。中心差分每个参数需要两次正向计算。

单次中心有限差分步 10^{-5} 在一个参数时耗时 0.3 秒，在 40 个参数时耗时 13 秒。外推对分别耗时 0.6 秒和 26 秒。单步计算时，参数达到三至五个后自动微分开始更快；对于外推对，两个参数时便开始更快；在 40 个参数时，自动微分分别快 10 倍和 21 倍。两种有限差分方法均满足 $e_{\mathrm{abs}} \leq 1.5 \times 10^{-6}$，且低于验收极限 10^{-3}。因此，计时比较的是满足所需容差的方法，尽管它们达到的误差不同。

自动微分也支持标称值为零的参数。对于四极铁偏移，其结果在步长为 0.1 μm 时与中心有限差分一致，精确到5×10^{-9}。此处测得的自动微分/有限差分交叉点仅适用于这一具有四个输出的环计算。参考文献 [10] 报告的 PIC 周期中参数数量为 10 至 12 时的交叉点，涉及不同的系统和工作负载，因此难以直接比较。

光学匹配。接下来，我们测试导数节省是否能缩短优化时间。随机的 1% 四极铁梯度误差扰动了 48 米环形加速器。目标函数用于恢复观测点处的两个工作点和β函数：

$$L_{\mathrm{match}} = \sum_{j=x,y} \left[\left(\frac{\Delta Q_j}{10^{-3}} \right)^2 + \left(\frac{\beta_j/\beta_{j,0} - 1}{10^{-2}} \right)^2 \right], \qquad (7)$$

其中，下标 0 表示未受扰动的目标值，而ΔQ_j 表示工作点差值。这些优化运行使用四阶映射，其中包含 4 个四极铁/六极铁切片和 8 个弯转磁铁切片。每次运行均使用一个 CPU 线程，耗时包括所有目标函数求值和反向扫描。我们比较了使用自动微分或中心有限差分梯度的 L-BFGS-B，以及无需导数的 Nelder–Mead 和 Powell方法 [图 5(b,c)]。

在全部 24 个四极磁铁均可调的情况下，存在精确的校正——

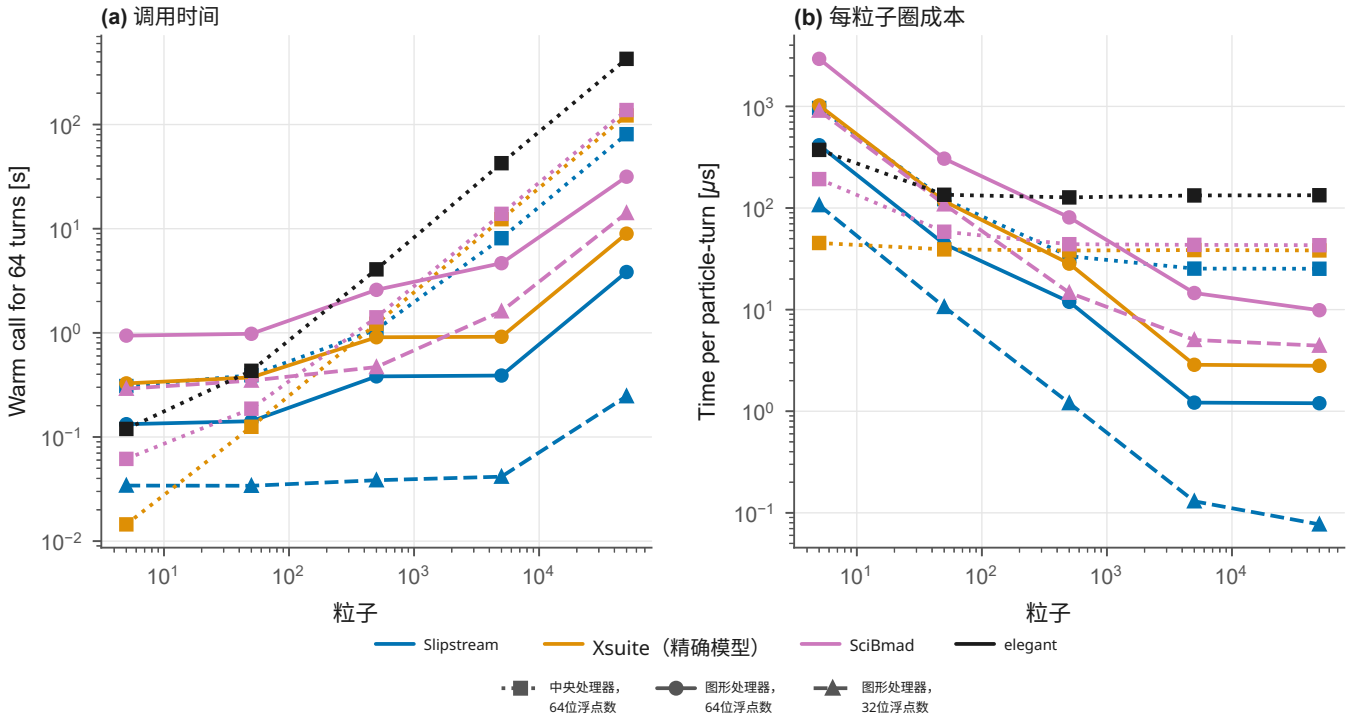

图 3. 粒子　　环形工作负载的计数缩放（64 圈）。（a）预热调用时间；（b）每粒子圈时间　　.

正。自动微分在三个随机种子下均能于 13–14 s 内达到 $L_{\mathrm{match}} \leq 10^{-9}$。采用有限差分的 L-BFGS-B 耗时 214–251 s，Nelder–Mead 耗时 328–387 s。Powell 在三次运行中均达到 30 分钟上限，仍未达到目标。

对于 4–12 个参数，施加的误差由相应的相邻四极磁铁组共享，因此再次存在精确校正。自动微分在全部 12 种情况下均可在 13–45 秒内收敛；有限差分和 Nelder–Mead 所需时间是其 3–12 倍。从 4 个参数时的 3.4 倍增加到 24 个参数时的 18 倍，相较于有限差分的优势不断扩大。

环容差预算。 相同的四个输出、两个工作点以及观测点处的两个 β函数，为 24 个四极磁铁提供了一阶容差预算。我们为每个四极磁铁分别分配 0.1% 的高斯梯度误差，并在一次使用匹配运行的四阶映射的单 CPU 线程上，通过自动微分雅可比矩阵、中心有限差分雅可比矩阵（相对步长 10^{-5}）以及对 40 台机器进行蒙特卡洛计算来获得该预算。一次正向计算耗时 0.78 秒。自动微分雅可比矩阵耗时 2.2 秒，约相当于 2.8 次正向计算；当参数数量从 1 增加到 24 时，其耗时始终保持在 2.0 至 2.2 秒之间。对于 24 个参数，中心有限差分耗时 41 秒，蒙特卡洛耗时 35 秒，因此自动微分分别快 19 倍和 16 倍。自动微分和有限差分雅可比矩阵一致，相对弗罗贝尼乌斯误差为4×10^{-9}。

输出标准差的线性预测值与在 0.1%、0.3% 和 1% 误差下通过 400 台机器进行蒙特卡洛计算所得的结果相差不超过 6%；该参考值的抽样不确定性约为 3.5%。仅使用 40 台机器的估计值本身在参考值的 0.74 到 1.23 倍之间波动。雅可比矩阵还揭示了方差的来源：同一族中的两块四极磁铁贡献了 β_x 方差的 47%。这些输出属于线性光学量，对误差的响应几乎是线性的，因此这是一个有利的情况；此外，这里的蒙特卡洛计算是串行计算，在图形处理器上以批处理方式运行的集合计算成本会更低。

D. 注入器导数与内存

注入器导数研究采用了 5 皮库 CLARA 输入卡片，与第 IVG 节中 20–250 皮库精度研究相互独立。该研究在中央处理器上以双精度浮点数运行，通过场映射推进和柱坐标空间电荷求解，检查整个 3.37 米束线中的自动微分，使用 1024 个宏粒子和 0.5 皮秒步长。与 20–250 皮库精度研究一样，其中包含阴极像。该可微分计算将阴极像作为固定步数处理；此处为 379 步（190 皮秒），根据标称运行设定，当束团质心距阴极 5 厘米时移除阴极像。与步长计划和发射时间一样，该数值保持固定，因此导数不包含参数变化导致的关断步变化。共有六个参数变化：每个腔的相位和场、电子枪螺线管磁场以及束团电荷。四个输出分别为水平发射度、均方根尺寸、均方根束团长度和纵向发射度。

24 个导数（六个参数对应四个输出）与中心有限差分结果一致，相对误差介于 6×10^{-10}

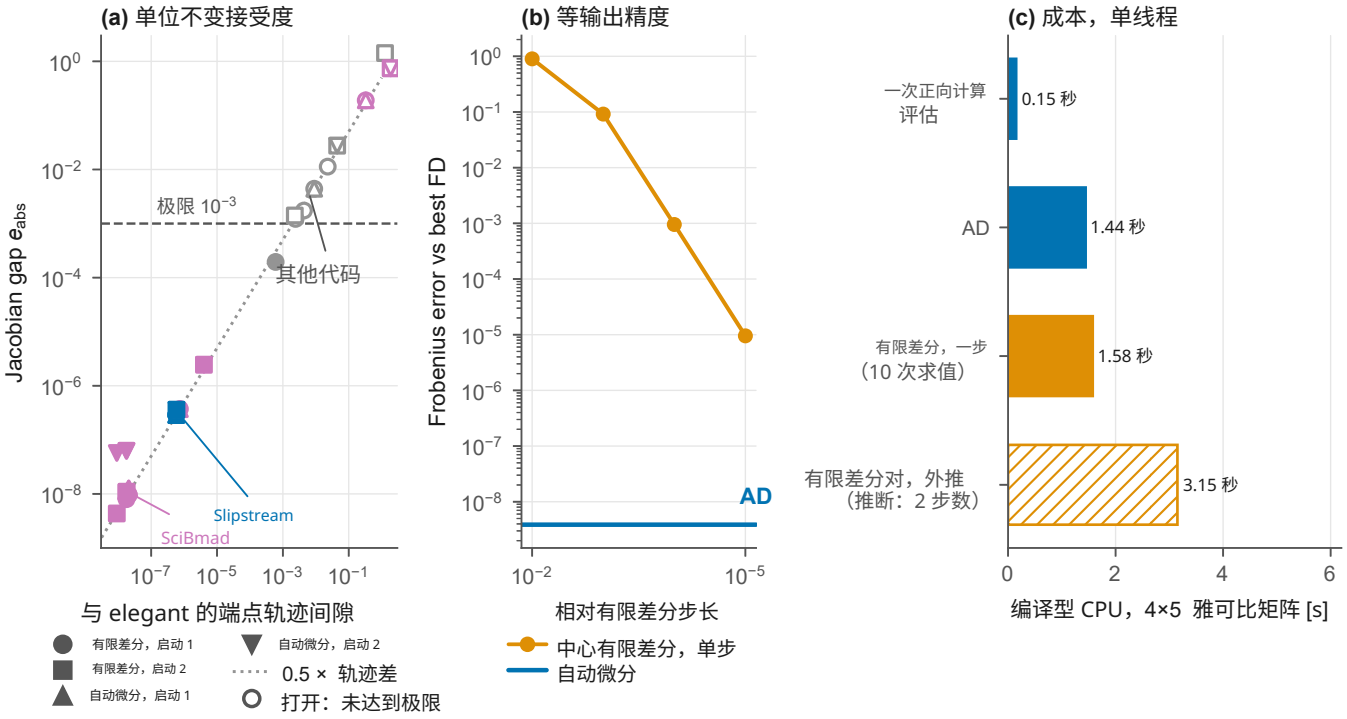

图 4. 跟踪状态对五种磁铁强度的导数。(a) 无量纲雅可比差 e_{abs}与各代码缩放后的端点轨迹差的对比，两者均以 ELEGANT 为基准测量，包含两种启动方式和旋钮组（圆形和方形：有限差分；三角形：自动微分）。实心标记表示在极限范围内。(b) 单步中心有限差分与最佳外推有限差分雅可比之间的弗罗贝尼乌斯误差，以及自动微分的弗罗贝尼乌斯误差（水平线）。(c) 在编译型中央处理器上使用单线程计算一个雅可比矩阵所需的时间；斜线条表示估算值，为单步成本的两倍。

和 2×10^{-5} 在各自的最佳步长下（图 6(a,b)）；自动微分通过四次反向扫描得到这些导数，每个输出对应一次。不同灵敏度的最佳有限差分步长各不相同：计算得到的输出随参数变化时，相对细微结构最大约为 10^{-5}。较大的有限差分步长会对这种结构取平均，而自动微分则返回所实现计算的局部斜率。

束流的响应位置。在中间平面计算灵敏度，可以看出最终响应在何处形成（图6c,d）。在加速结构之前，能散会响应电子枪相位和场的变化。加速之后，它还会响应结构相位的变化，在束线出口处达到约 -5.7%/度。对所有六个参数，出口能散导数与中心有限差分的符合程度均优于10^{-6}。

发射度对螺线管磁场和电子枪场最为敏感。加速后，在采样的下游平面上，螺线管磁场增加 1% 会使其变化 -1.6 至 -2.6%，而电子枪场增加 1% 会使其变化 $+1.0$ 至 $+1.6\%$。结构相位和结构场的灵敏度分别低于每度 0.01% 和每增加 1% 场变化对应的 0.03%。这种局部化特征与发射度主要在束线前段确定这一事实相一致。

内存。带空间电荷的反向模式微分会记录粒子推进和场求解双方的信息，因此内存会随步数、宏粒子数量和网格单元数量增长 [6]。我们在带有阴极图像的情况下，在图形处理器上测量了 float32 正向和反向计算的峰值分配。对于 4096 个宏粒子，在不使用检查点机制时，注入器计算每步需要约 1.8 MiB；我们测量至 2200 步（3.9 GiB），在约 4700 步时将超过图形处理器的 8 GiB 容量。我们没有在不使用检查点机制的情况下运行更长的计算：超过容量后，驱动程序会将分配转移到主机内存，因此这类运行不能代表驻留在图形处理器上的计算。

大约每隔 $\sqrt{n}$ 步存储一次检查点，并重新计算中间状态，可将 10 000 步时的内存占用降至 0.21 吉比字节。在 3551 步时，剩余存储空间随粒子数近似线性增长，在 65 536 个宏粒子时达到 1.8 吉比字节；未进行不使用检查点机制的对应运行。上述导数是在步长计划和粒子发射时间保持不变的条件下计算的。发射时序参数（包括激光脉冲持续时间）不在考虑范围内：每个宏粒子都在其发射时间之后的第一个步数释放，因此输出呈跳变而非平滑变化

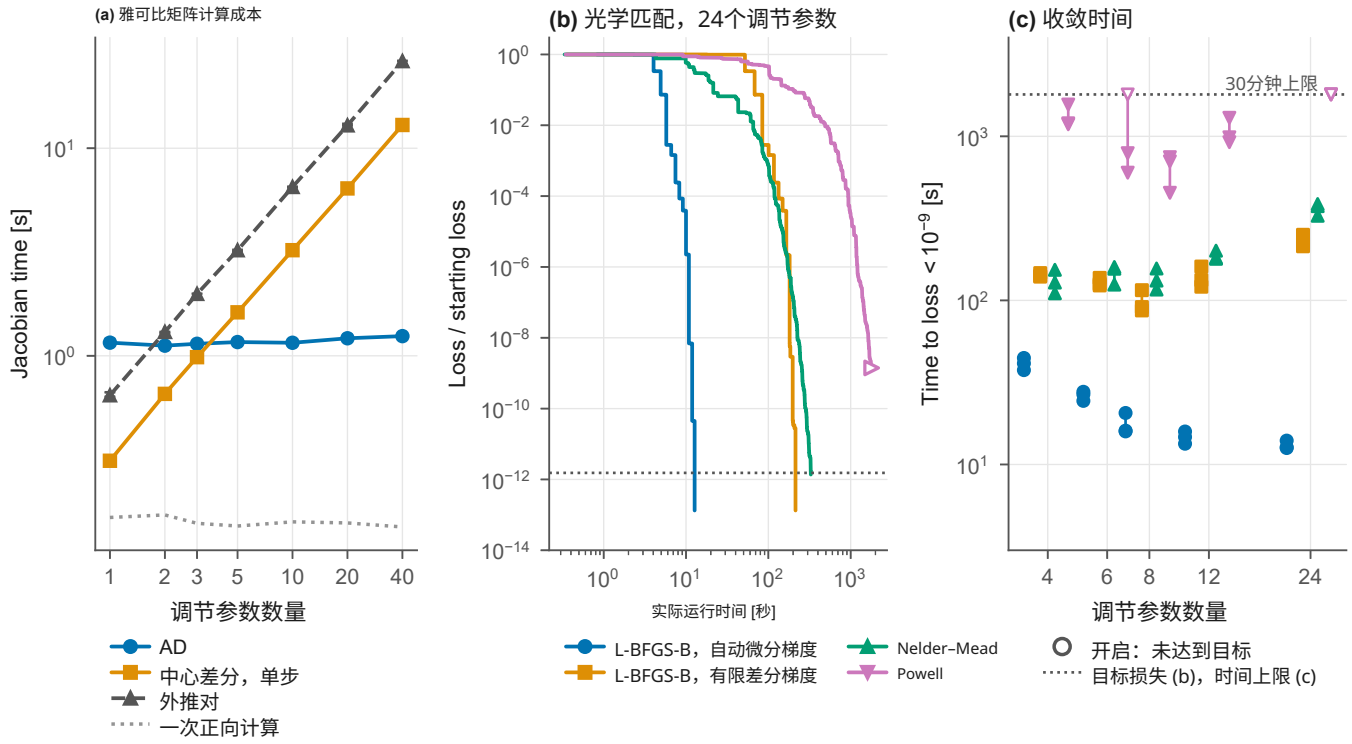

图 5. 导数及其在优化中的成本。(a) 对四个输出 (x, p_x, y, p_y) 计算雅可比矩阵所需的时间与调节参数数量的关系，分别采用自动微分、相对步长为 10^{-5} 的中心差分，以及一对外推步长（编译型 CPU、单线程，三个进程的中位数及观测范围；虚线：一次正向计算）。(b) 对受扰动的 48 米环形加速器进行光学匹配，所有 24 个四极磁铁均可调：损失相对于初始值随经过时间的变化，其中包括每次目标函数评估；空心标记表示 30 分钟的上限。(c) 每种情况和优化器达到低于 10^{-9} 的损失所需时间与调节参数数量的关系（空心标记：达到时间上限）。

，并且在导数存在的所有位置，其导数均为零。

E. 注入器抖动与调谐

容差预算。 雅可比矩阵可以传播参数抖动，从而预测束流可观测量的不确定性。抖动计算采用与导数检验相同的设置：5 pC、1024 个粒子、0.5 ps，并使用阴极像。该计算使用五个输出：水平发射度、均方根尺寸、均方根束团长度、平均能量和均方根能散。它以平均能量和能散替代前述四输出导数检验中的纵向发射度。假设各项相互独立的高斯误差分别为：每个射频相位 $0.1°$、每个腔场 0.1%、螺线管磁场 0.01%，以及电荷 1%。

线性化计算预测的输出均方根抖动为 0.1–1.2%（图 7a）。电荷贡献了发射度方差的 90%，电子枪场贡献了尺寸方差的 81%，电子枪相位贡献了束团长度方差的 81%，直线加速器场贡献了能量方差的 77%，直线加速器相位贡献了能散方差的 50%。

蒙特卡洛研究在这些容差的 1 倍、5 倍和 20 倍处分别进行 40 次运行（图 7b）。在所测试的尺度下，其输出抖动与线性化预测一致，处于抽样不确定性范围内。对 ± 10 标准差进行逐一有限差分，在 1% 的误差内重现了方差预算。五输出自动微分雅可比矩阵的计算成本约为 23 次正向运行，而逐一有限差分计算需要 12 次，蒙特卡洛计算需要 120 次。对于这六个输入，采用有限差分是获得该结果成本更低的方法。

调谐。 雅可比矩阵可以提供由束流可观测量定义的目标函数梯度。我们改变五个参数——电子枪相位和场、螺线管磁场、激光光斑尺寸及结构相位——以最小化一个无量纲目标函数

$$L_{\mathrm{inj}} = \frac{\epsilon_{n,x}}{1\ \mathrm{mm\,mrad}} + 0.05 \left(\frac{E_{\mathrm{kin}} - 30\ \mathrm{MeV}}{1\ \mathrm{MeV}} \right)^2 . \qquad (8)$$

能量惩罚使结构相位以及影响发射度的参数都变得相关。采用自动微分的 L-BFGS- B、Nelder–Mead 和贝叶斯优化分别从两个失谐初始点开始运行，每个初始点和方法各获得 40 分钟（图7c、d）。对于每个初始点和方法，这些都是单次运行，使用 CPU 双精度浮点、1024 个粒子和 1皮秒步长

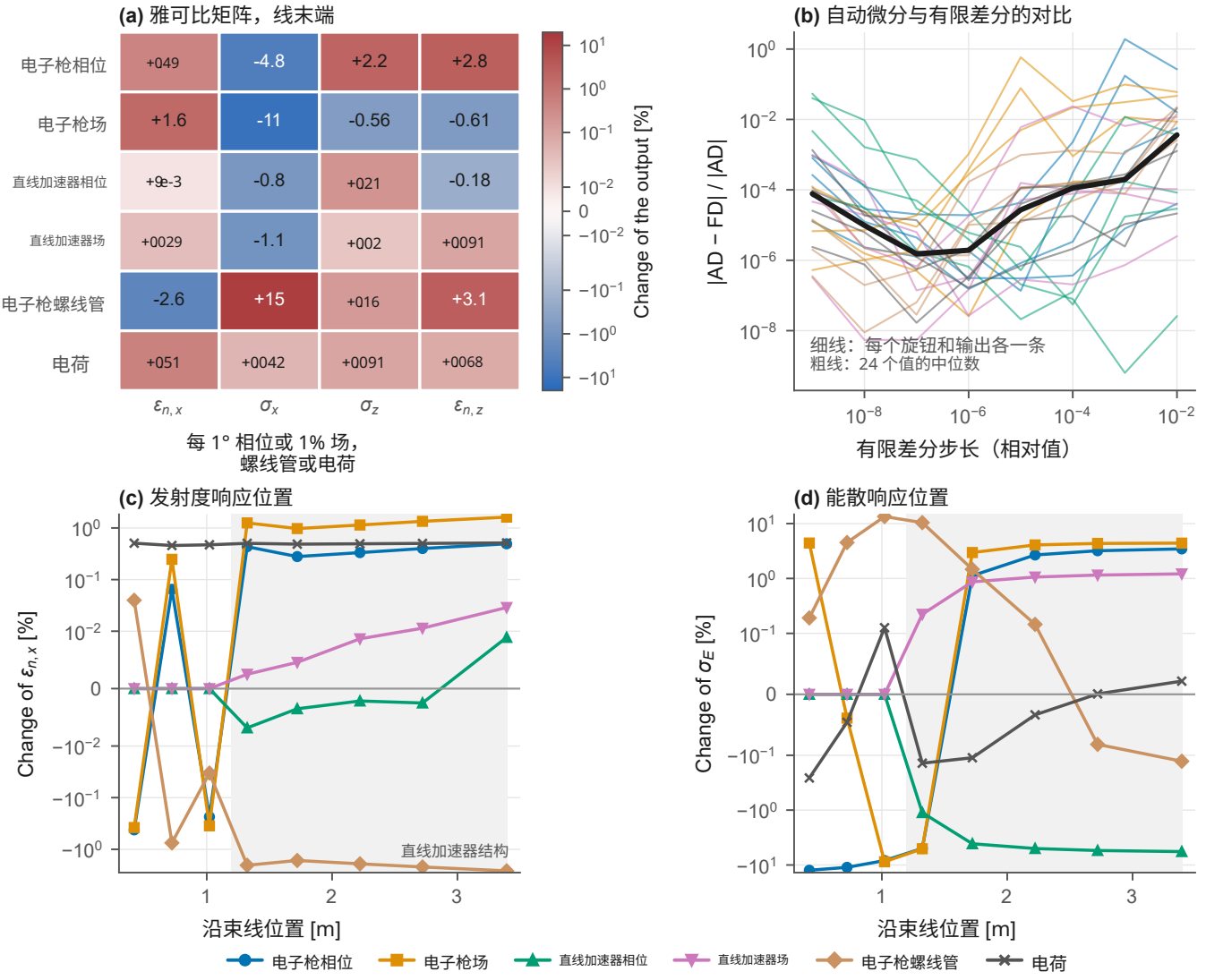

图 6. 5 pC CLARA 注入器的导数。(a) 六个参数对应的四输出雅可比矩阵，表示为相位变化 1° 或场或电荷变化 1% 时输出的百分比变化。(b) 在测试的步长范围内，自动微分与有限差分的相对差异；每条曲线对应一个参数–输出组合，并显示中位数。导数检验采用 CPU 双精度浮点、1024 个粒子、0.5 皮秒步长和阴极像。(c, d) 束流线各平面处的发射度和均方根能散灵敏度；阴影部分标示第一个直线加速器。

以及阴极像。三种方法在独立的进程中并发运行，在 16 核中央处理器上每种方法使用五个线程；经过时间包括资源争用，以及每种方法的反向传播过程或代理模型拟合过程。

贝叶斯优化从两个起点出发，最终得到的目标函数值最低，分别为 0.381 和 0.382；用时分别为 291 秒和 494 秒，达到各自起点所能找到的最佳目标函数值的 10% 以内。自动微分达到该阈值所需的求值次数最少：分别为 4 次和 10 次，而贝叶斯优化需要 13 次和 22 次，Nelder–Mead 则需要 22 次和 33 次。随后，自动微分不再取得改进，目标函数值停在 0.392 和 0.403，此时电子枪相位为 $+1.5^\circ$ 和 -2.1°；另外两种方法的最佳运行结果中，电子枪相位距搜索范围的 $+8^\circ$ 边界均在 0.1° 以内，而 Nelder–Mead 最终得到 0.384 和 0.385。

一次自动微分评估的成本约相当于六次正向运行。对于五个参数，较少的评估次数不足以弥补耗时方面的成本：自动微分分别耗时 529 秒和 1322 秒才达到 10% 以内，而贝叶斯优化分别耗时 291 秒和 494 秒。相比之下，在 24 参数的环匹配中，有限差分梯度的计算成本更高，因此自动微分更具优势。此比较仅适用于这些初始条件和所述的并发资源分配。

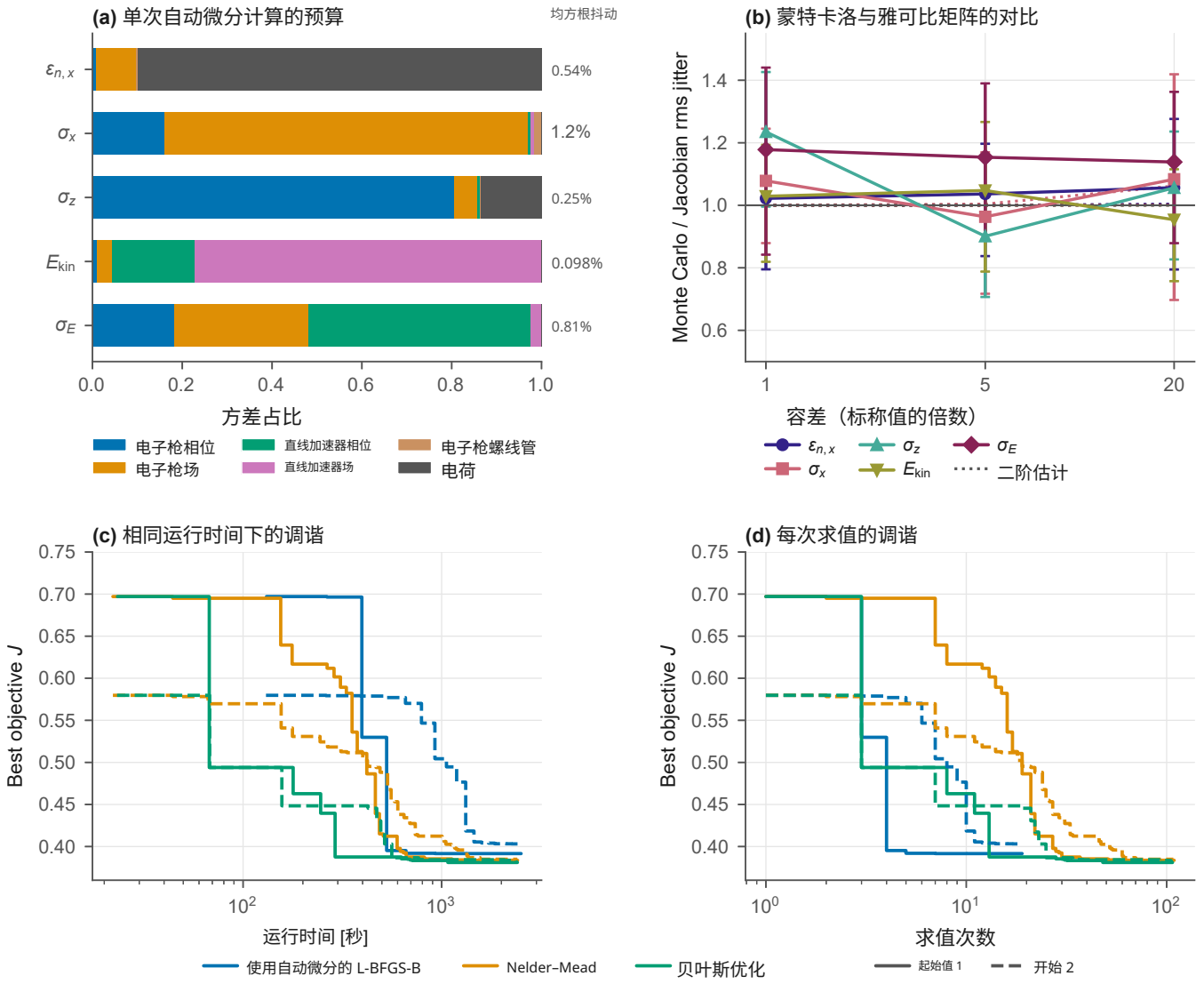

图 7. 注入器雅可比矩阵的应用。(a) 基于五输出雅可比矩阵，展示每个调节参数对五个末端输出方差的占比；假设各相位存在独立的 0.1° 高斯误差、各腔场存在 0.1% 的误差、螺线管磁场存在 0.01% 的误差，电荷存在 1% 的误差；右侧为均方根抖动。(b) 在这些容差的 1、5 和 20 倍下，40 次蒙特卡洛运行所得均方根抖动与雅可比矩阵预测值之比，以及其 95% 自助法区间；虚线还计入了在 ±10 个标准差处测得的曲率。(c, d) 三种方法调谐五个旋钮时的最佳目标函数，分别以运行时间和求值次数为横轴；结果来自两个起始点（实线和虚线）。每种方法均在独立的五线程进程中运行 40 分钟，并在同一台 16 核中央处理器上并行执行。

F. 空间电荷主导的漂移段

跨代码一致性。模拟漂移段可将空间电荷效应与磁输运区分开来。与ASTRA的 32^3 网格相比，所有测试过的 Slipstream、Cheetah、Ocelot、GPT、ImpactX以及ASTRA本身的设置，均满足尺寸、长度和发射度容差。能散的区分度更高：差值范围为 0.2% 至 9%。 Slipstream的笛卡尔求解器在尺寸、发射度和能散方面的差值分别为 0.06%、0.07% 和 0.9%。其

图形处理器 float32 与中央处理器双精度浮点的结果一致至 3×10^{-6}。

将电荷减少 10^{-6} 后，所有差值均降至 0.02% 或以下 [图 9(a)], 这表明，带电束团之间较大的差异是由空间电荷计算造成的。空间电荷使三维求解器中的能散变化了 17%，而 GPT、 ImpactX和 Slipstream的轴对称求解器中的能散变化了 10–12%。 Slipstream的笛卡尔坐标系结果差异约为空间电荷引起变化的 5%，这说明评估结果是否一致时，还应结合所计算的物理效应来判断。

在 Slip- 中，漂移段的平均能量增益为 30.5 电子伏特

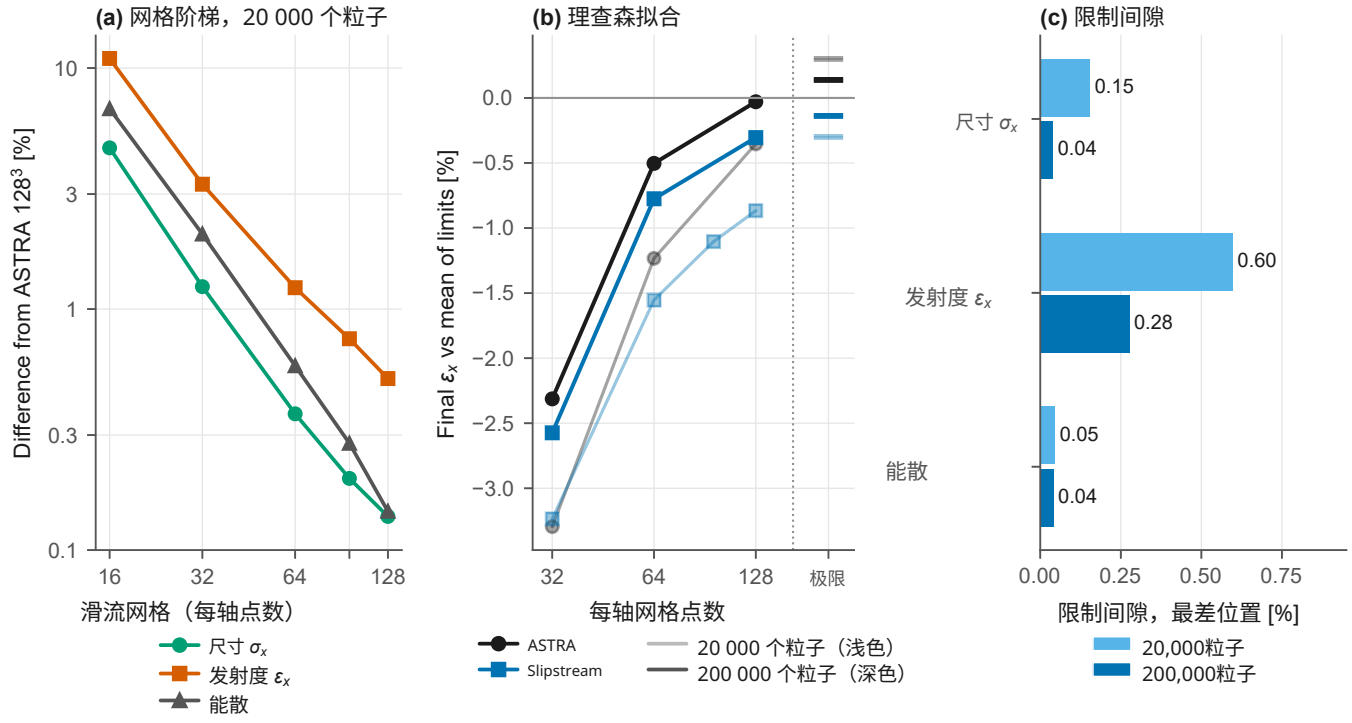

图 8. 20皮库模拟通过3米漂移段的网格收敛性。(a) SLIPSTREAM的笛卡尔坐标结果与 ASTRA 在其最精细（128^3）网格下结果的差值，相对于 SLIPSTREAM 网格，取各站点中的最大值，20,000粒子。(b) 各求解器的末站发射度与两个外推极限的均值之比，分别针对20,000（浅色）和200,000（深色）粒子；“极限”处的刻度标记表示各求解器的外推值。(c) 两个外推极限之间的差值，取各站点中的最差值。

表 IV. SLIPSTREAM 20,000粒子漂移的笛卡尔网格阶梯（1皮秒步长，每10步刷新一次场）。误差是相对于 ASTRA 在其最精细网格（128^3）下结果、取各站点中的最大值。Chg. 表示相对于下一个较粗网格的变化量。

网格预热		ϵ_x 扩展		尺寸 ϵ_x分布		
	[s]	变化量	变化量	与 ASTRA 128^3 比较		
16^3	3.09	—	—	4.7%	11%	6.8%
32^3	3.09	8.6%	5.1%	1.2%	3.3%	2.0%
64^3	4.16	2.2%	1.5%	0.37%	1.2%	0.58%
96^3	14.9	0.54%	0.31%	0.20%	0.75%	0.28%
128^3	15.2	0.27%	0.13%	0.14%	0.51%	0.14%

STREAM 和 ASTRA 在各自最精细的网格下分别为 31.0 电子伏特。高斯束团场能估算为 27.5 电子伏特，为这次小幅能量转移提供了另一个参考尺度。

网格细化。ASTRA 将其三维网格取整为二的幂次，从而得到有效网格 32^3, 64^3 和 128^3。在最细的两个网格之间，其发射度和能散分别变化了 0.9% 和 0.2%。SLIPSTREAM与 AS-TRA的最细网格之间的差值随网格细化而减小（表IV，图8a）。其 64^3 网格耗时约 4 秒；将粒子推进步长或场刷新间隔减半，所得结果的变化均小于 0.01%。

为估算零网格间距极限，在每个站点将各求解器的网格序列拟合为 $f\,(N) = f_\infty + CN^{-p}$，其中 N 为每维单元数，而 p则根据数据 [45]进行拟合。在 200000 个粒子下，拟合得到的尺寸、能散和发射度结果趋近二阶收敛，外推极限之间的差异较小 [图8（b、c）], 而 128^3 结果与各自拟合极限的差异在 0.2% 以内。

在粒子数为 20000 时，拟合得到的发射度阶数为 1.4– 1.5，极限之间相差 $<$ 1%。粒子数较高时出现的小残差尚未能明确归因；场平滑和边界处理可能是影响因素。

粒子数与计算成本。 缩放研究对含有 2000 至 10^6 个宏粒子 [Fig. 9(b,c)].SLIPSTREAM 的束团进行计算，其图形处理器计算在粒子数达到 200 000 之前耗时 4–5 秒，在 10^6, 时耗时 13 秒，表明在此范围的大部分区间内，网格是其主要计算成本来源。 ASTRA 在32^3时，计算 2000、20 000 和 200 000 个粒子分别耗时 9、36 和 330 秒。比较两种代码在 32_3下的表现，SLIPSTREAM 在图形处理器上的速度在粒子数为 2000 时快 3 倍，在 200 000 时快 90 倍。

粒子数也会影响网格收敛。对于三个独立的束团，观测到的发射度收敛阶均从 2000 个粒子时低于 0.5，上升到 20 000 个粒子时的 1.4–1.5，以及 200 000 个粒子时的 1.94。它

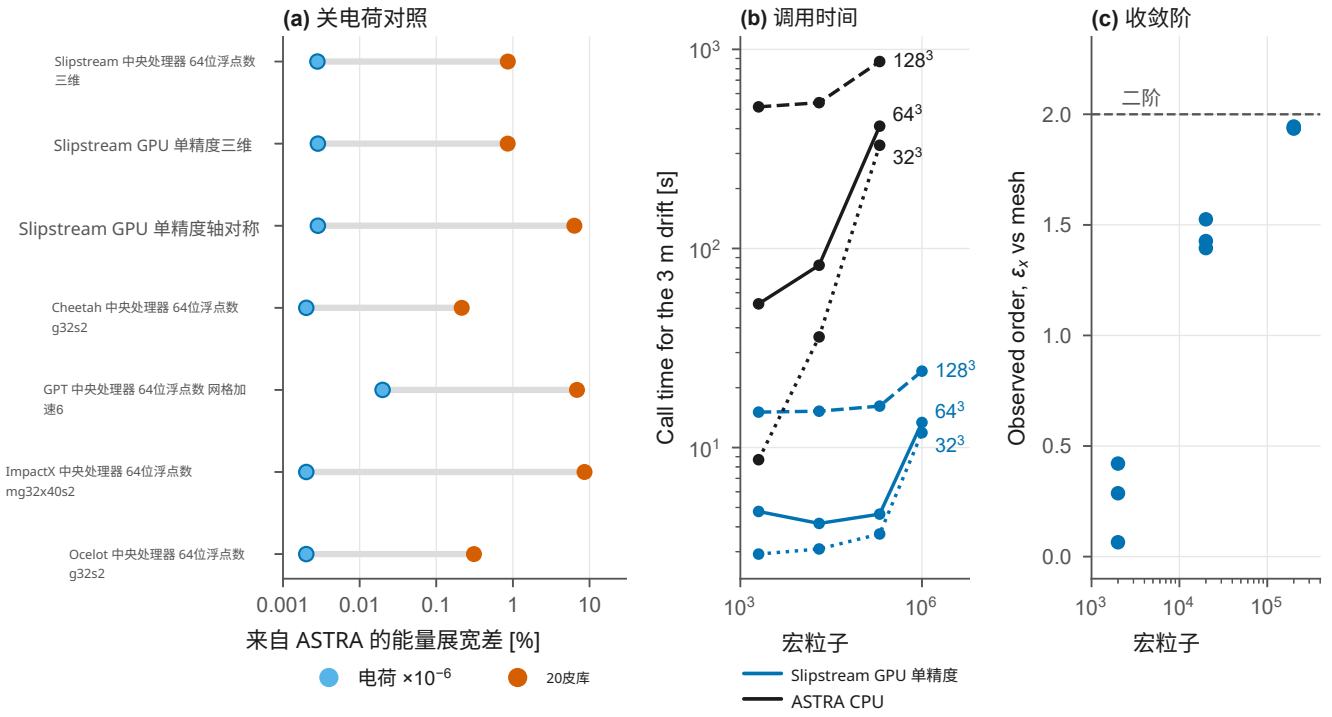

图 9. 漂移段的关电荷对照和粒子数阶梯。(a) ASTRA 在可忽略电荷（蓝色）和 20皮库（橙色）下的能量展宽差，每种设置对应一行。(b) SLIPSTREAM的 GPU 笛卡尔预设与 ASTRA的三维求解器的调用时间与宏粒子数的关系（最慢点仅运行一次）。(c) 对于每个粒子数下的三个独立束团，发射度随网格变化的观测收敛阶。

在 10^6 个粒子时达到 2.0。因此，如果每个网格单元中的采样粒子过少，仅细化网格是不够的。在匹配的网格下，SLIPSTREAM–ASTRA 发射度差值稳定在 0.3% 左右。

G. 场图注入器：CLARA 电子枪和第一个加速结构

本节中的 CLARA 对比旨在考察数值设置如何影响电子枪和加速结构中的一致性。研究对象包括一个场强为 120 MV/m、配有螺线管的 1.5 单元电子枪，一个场强为 21 MV/m 的 60 单元行波结构，以及两个直线加速器螺线管。观测平面位于约 35 MeV 处。考察的电荷为 20、100 和 250 皮库。

这些代码使用相同的轴上场表和 262144 个宏粒子。SLIPSTREAM 在图形处理器上使用 float32、其轴对称求解器和一个阴极像。 GPT 使用网格求解器，束团中约有 64^3 条网格线，并采用导电阴极平面。其行波结构由两个处于正交相位的驻波场图表示；腔体相位根据单粒子波峰相位加上ASTRA的相对相位设定。

ASTRA 和 SLIPSTREAM 分别在更快的设置下以及经过数值细化后进行比较，以改善收敛（表V）。更快的设置是基线 CLARA ASTRAdeck 和 SLIPSTREAM的软件包默认设置。标记为“已收敛”的行表示此处测试的细化设置，而非精确的物理解。 ASTRA 提供了通用数值基准。GPT 在三种电荷下均使用默认网格；在 20皮库下还提供了单独的粒子和网格检查。

细化后的吻合。 三个代码得到的最终水平发射度与细化后的ASTRA结果在每个电荷值下均相差不超过 6%（表V、图 10a）。 SLIP-STREAM相差 +0.1%、 +1.0% 和 −4.2%，对应于 20、100 和 250 皮库。 GPT 比 ASTRA高 1–6%，且在较高电荷下超出幅度较小。

发射度吻合并不意味着每个可观测量都吻合。SLIPSTREAM给出的均方根束流尺寸小于 ASTRA，而 GPT 给出的尺寸更大。两者都预测束团略短、能散更高，其中 GPT的偏差更大。最终平均能量吻合到 0.3%。不能假定任何求解器都能给出完全正确的物理解。

在 20皮库时，将 GPT 的网格分辨率加倍会使发射度变化 0.2%，而将粒子数从 65536 增加至四倍会使其变化 1.8%，因此与 ASTRA 相差 5.7% 并非任一代码的分辨率效应；其原因尚未确定，也未测试其他电荷下的收敛性。 −4.2% 的差异

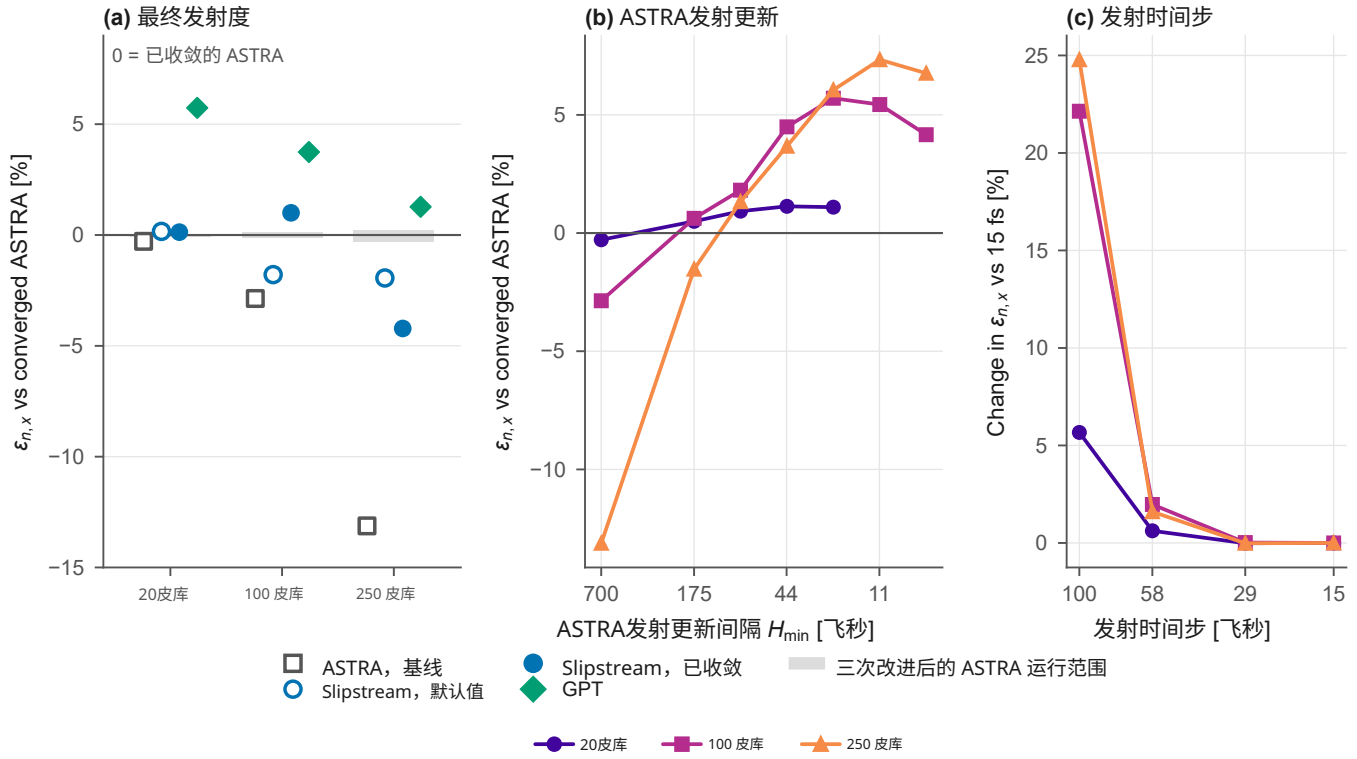

图 10. CLARA 注入器。(a) 三种电荷下，相对于已收敛 ASTRA 的最终归一化水平发射度： ASTRA采用其基准设置（空心方块），SLIPSTREAM 采用其默认值（空心圆）和已收敛设置（实心圆），以及GPT （菱形）；阴影带表示三个经过细化的 ASTRA 设置所得的最小值至最大值。(b) ASTRA的发射度与发射期间空间电荷场刷新的时间间隔之间的关系，采用基准场缩放极限和网格，并相对于已收敛的 ASTRA。(c) SLIPSTREAM的发射度对发射时间步的敏感性，相对于其 15 fs 运行结果。

在 250 皮库时，经过细化的 SLIPSTREAM 也尚未追溯到具体原因；其默认设置相差 −1.9%，因此数值设置会使结果变化约两个百分点。尽管如此，三个代码在发射度上的结果仍一致到 6% 以内，而已收敛的 SLIPSTREAM 和 ASTRA 在 20 和 100 皮库时一致到 1%。

沿束线的演化。图 11 展示了 100 皮库束流从电子枪到观测平面的发射度和束流尺寸，其中 ASTRA（三次精细运行的平均值）、精细设置的 SLIPSTREAM 以及使用默认网格的 GPT 均包含在内。在加速结构之前，各代码彼此吻合：SLIPSTREAM 的发射度比 ASTRA 的平均值高 0.1–2.8%，而 GPT 的发射度介于 −0.9 和 +2.0% 之间；对于 SLIPSTREAM，束流尺寸的差异小于 0.8%，对于 GPT 则小于 2%。在加速结构内及其之后，差异逐渐增大。在其前 0.4 m 范围内， SLIPSTREAM 的发射度以 1 至 3 cm 的周期振荡，与 ASTRA 的差值范围为 −0.5 至 +6.6%。对于 SLIPSTREAM，输出间距为 2 mm；对于 ASTRA，为 10 mm；对于 GPT，为 6 cm。因此，该振荡的幅度及其在此处的差值取决于采样方式。在 1.6 m 之后， SLIPSTREAM 的发射度比 ASTRA 高 0.2–1.6%，而 GPT 的发射度高出 3.2–5.0%；束流尺寸则朝相反方向变化，最终与 ASTRA的结果相差−5.5% 和 +5.5%。

精度和运行时间。 ASTRA的 CLARA 基准设置运行速度比其精细设置快 10–11 倍。在 20 和 100 皮库下，发射度差异小于 3%，但在 250 皮库下低 13%。发射场刷新十分重要：基准设置在 2.92 皮秒的发射时间窗内仅重新计算该场约四次。缩短这一间隔会提高计算得到的发射度；在发射后约 22 飞秒时，发射度趋于稳定 [图 10(b)]。

SLIPSTREAM的默认设置运行速度比经过细化的设置快 6–15 倍。在所有电荷下，默认设置所得发射度与经过细化的 ASTRA 相差均在 2% 以内。在 250 皮库时，默认值比 SLIPSTREAM自身经过细化的结果更接近 ASTRA 。仅凭这种接近并不能证明预测更准确或收敛性更好：数值变化可能在一定程度上抵消求解器之间的差异。

数值选择会影响 SLIPSTREAM。 有三项选择会显著影响结果。发射步长必须重新求解 2.92 皮秒窗口 [图10(c)]。忽略阴极图像会使发射度最多增加 60%。在 100 皮库条件下，将径向网格从默认的 64 个单元细化到 256 个单元，会使发射度增加 4%。这些灵敏度说明，任何声称的一致性结果都必须同时报告粒子数、网格和发射控制参数。

表 V. 在 $z = 3.37147$ m 处，针对细化的 ASTRA 和 Slipstream、默认网格 GPT，以及更快的 ASTRA 基线和 Slipstream 默认值，最终归一化水平发射度为 $\epsilon_{n,\,x}$ [mm mrad]。 GPT 细化检查仅限于 20皮库。后续各列给出每次运行结果与已收敛的 ASTRA 的百分比差值（正值：高于 ASTRA）。运行时间：ASTRA 使用 16 个 CPU 线程， Slipstream 的跟踪循环在图形处理器上运行， GPT 使用 12 个 CPU 线程。

电荷	Code	$\epsilon_{n,x}$	与已收敛 ASTRA [%] 的差值					Run
		[毫米·毫弧度]	$\epsilon_{n,x}$	σ_x	σ_z	σ_E	$\epsilon_{n,z}$	time
20皮库	ASTRA，已收敛	0.3117	–	–	–	–	–	89.1分钟
	Slipstream，已收敛	0.3121	+0.1	−4.5	−0.8	+1.9	+1.7	82 s
	GPT	0.3296	+5.7	+2.9	−2.9	+3.4	+5.3	27.5 分钟
	ASTRA，基线	0.3108	−0.3	−0.1	+0.2	+0.6	+0.6	8.7分钟
	Slipstream，默认值	0.3122	+0.2	−4.1	−0.7	+2.1	+2.1	14 s
100 皮库	ASTRA，已收敛	0.4274	–	–	–	–	–	91.3 分钟
	Slipstream，已收敛	0.4316	+1.0	−5.5	−1.0	+2.7	+0.6	4.2 分钟
	GPT	0.4434	+3.7	+5.6	−3.2	+4.9	+1.2	36.2 分钟
	ASTRA，基线	0.4151	−2.9	+0.2	+0.5	+1.3	+4.8	9.2 分钟
	Slipstream，默认值	0.4197	−1.8	−5.1	−0.9	+3.0	+0.9	17 s
250 皮库	ASTRA，已收敛	0.5560	–	–	–	–	–	111 分钟
	Slipstream，已收敛	0.5325	−4.2	−3.7	−1.9	+3.4	−1.6	2.2 分钟
	GPT	0.5631	+1.3	+2.3	−4.8	+7.9	−0.1	32.1 分钟
	ASTRA，基线	0.4830	−13.1	+0.1	+0.8	+2.8	+13.0	10.5 分钟
	Slipstream，默认值	0.5452	−1.9	−4.1	−1.6	+4.3	−0.8	22 s

结构尾场。 该行波结构在其 60 个单元的每个单元中心各施加一次单极尾场踢（第 IID节）。在 250 皮库条件下，两种代码均采用基准设置时，尾场会使最终平均能量从 35 兆电子伏降低约 40 千电子伏，并使能散降低 12–13 %，而横向发射度没有变化。

Slipstream将能量和能散中由尾场引起的变化复现到 6% 以内，并将单次踢的能量损失复现到 1% 以内。使用 ASTRA自身的电荷分布时， Slipstream 核函数复现其尾场势的误差不超过峰值的 0.01%。我们没有单独分析这 6% 的差值中有多少是由入射束团分布不同造成的。加入尾场后，跟踪循环时间没有可测量的增加。

运行时间。表V将精度设置及其成本分开列出。 Slipstream的默认跟踪循环时间为 14、17 和 22 秒，适用于 RTX 3050 上的 262 144 个宏粒子。其精细设置分别需要 82秒、4.2 分钟和 2.2 分钟。

在基线/默认设置下， Slipstream 的 GPU 跟踪循环比使用 16 个 CPU 线程的 ASTRA 4.0 快 29–38 倍，比使用 12 个线程的 GPT 快 90–130 倍。 ASTRA 在 WSL2 下的 simcodes 容器中使用 Open MPI，并将进程绑定到硬件线程。它复现了串行发射度；串行计算耗时 63–67 分钟。这里的计时比较的是所述实现和资源分配，包括 Slip-stream 的跟踪循环，而非其初始化。

V. 其他验证案例

A. 相干同步辐射

这里的 CSR 研究将对单个尾场模型的测试与通过完整束团压缩器的传输分开进行。这些尾场模型的参考值采用相同的一维线电荷近似，但独立于跟踪实现计算：闭式高斯束团能量损失，以及沿直线段和圆弧直接计算迟滞 Li´énard–Wiechert 场 [46] 。与这些参考值的一致性检验了该近似下的数值实现。

Slipstream在固定直方图网格上计算尾场。在偶极磁铁内，对于该束团和几何结构，入口瞬态描述了约 0.1 米范围内逐渐建立至稳态的过程 [47]。在偶极磁铁后方，采用查表的延迟场尾场模型描述漂移段尾场。稳态尾场模型与闭式能量损失的差值为 0.2%。在最后两个采样角度（ 0.07 和 0.13 弧度）处，入口瞬态的平均能量损失与直接延迟场计算结果的差值为 1%；更早的位置差异较大，此时能量损失较小 [图12(b)]。在采样的下游点，迟滞漂移段的平均能量损失差值为 1% [图12(c)]。 Elegant的闭式漂移模型 [30] 在测试的漂移段内给出的能量损失最多高出 17%，且差异随下游距离增加而增大。 Slip-stream自身对该模型的闭式实现也呈现相同趋势：距出口 5 厘米以内高出 1–2%，距出口 0.6 米处高出 11%，距出口 1 米处高出 19%。

对一个偶极磁铁及其后续漂移段的损失进行积分，可以看出每种近似方法的影响（图 13a）。Slipstream的瞬态模型和迟滞漂移段尾场模型，在各段中对参考值损失的复现误差均为 1%，

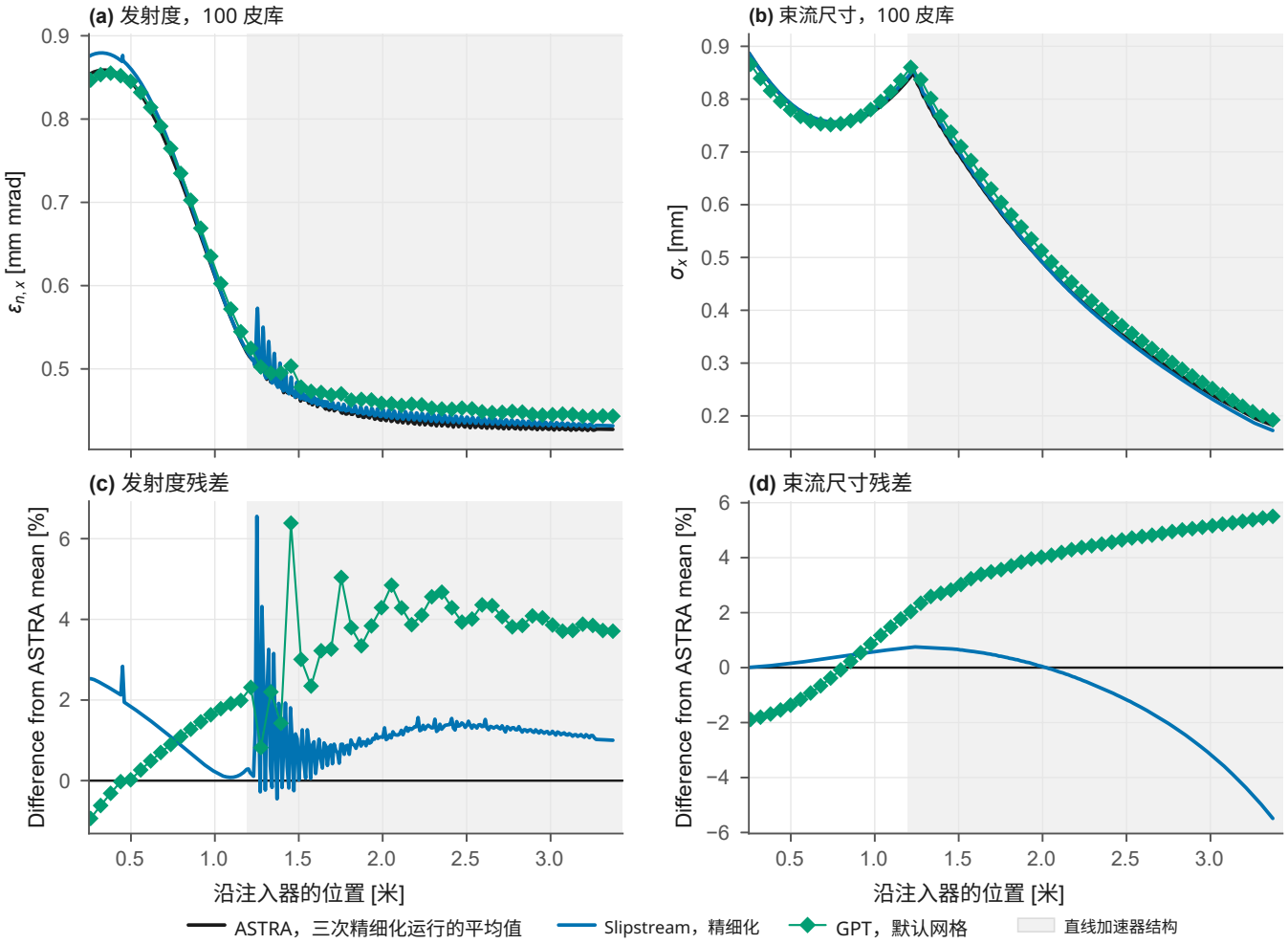

图 11。100 皮库 CLARA 注入器中的束流演化。（a、b）三次精细化 ASTRA 运行的平均值（彼此差异小于 0.4%，差异过小，无法绘制为带状区域）、精细化 Slipstream，以及使用默认网格和 262 144 个宏粒子的 GPT，快照间隔为 0.2 ns；其中展示了归一化水平发射度和水平均方根尺寸。发射度采用正则形式。（c、d）与 ASTRA 平均值的差值：对于 Slipstream，在 ASTRA 的输出位置（每隔 10 mm）处进行评估；对于 GPT，则在其快照位置处进行评估。阴影区域表示直线加速器结构。Slipstream 的输出间距为 2 mm，ASTRA 为 10 mm，GPT 为 6 cm。

同样，Ocelot的迟滞场 CSR 过程 [44]也是如此。整个偶极磁铁均采用稳态模型会高估损失 44%，因为该模型忽略了建立过程。将稳态漂移段截断在超越长度处，会低估漂移段损失 39%。使用 8 个偶极子切片时，elegant的瞬态模型结果高出 9%；在此测试中，需要 64 个切片才能收敛；Slipstream 则在 8 个切片时已收敛。

双弯转测试采用 CLARA 的前两个偶极磁铁 [22] 可变束团压缩器（VBC），束团电荷为 5 pC，此时束团形状变化很小（图 13b）。Slip-stream 和 Ocelot 与冻结束团的迟滞场损失总计相差不超过 2%，但二者都将第二偶极磁铁损失低估了 6%。直接参考值包含从第一个弯转磁铁携带而来的辐射，而这些受测模型忽略了这部分辐射。

全压缩器计算测试的是一个演化中的束团，而不是孤立的尾场模型（表 VI）。在不考虑相干同步辐射时，三个代码给出的发射度相同。仅在偶极磁铁中考虑相干同步辐射时，Slipstream的能量损失比 elegant低 7–14%，这与对瞬态切片的敏感性一致。

纳入漂移段后，在最弱的蛇形磁铁强度下，能量损失的差异缩小到 3% 以内。在标称强度下，Ocelot 和 elegant 的能量损失几乎相同，而Slipstream低 9%。在完全压缩时，Slipstream、Ocelot和 elegant中的能量损失分别为 332.8 keV、356.0 keV 和 373.7 keV：Slipstream与 elegant的差值约为 11%。如表所示，发射度也有所不同。因此，孤立模型之间 1% 的一致性并不适用于所有可观测量。

对于 10^6 个粒子，双精度GPU计算

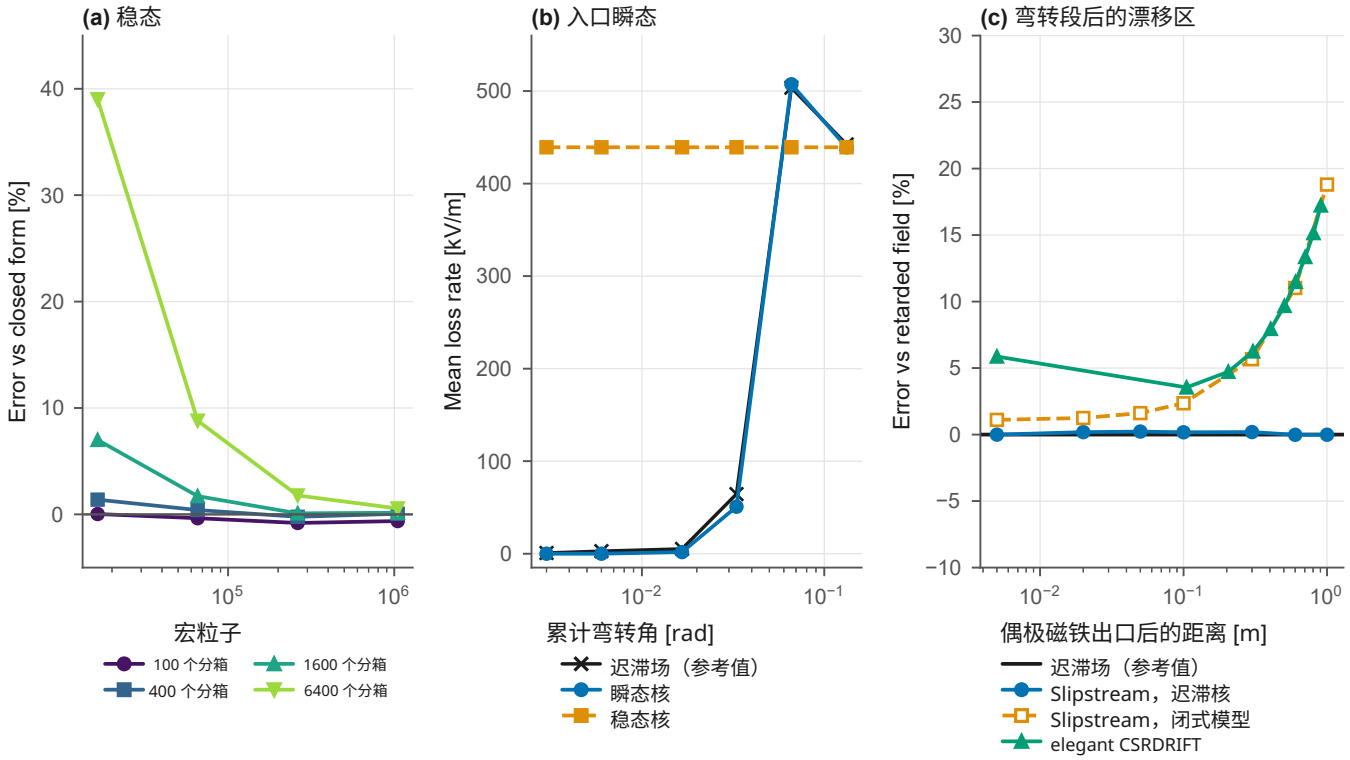

图 12. 对于几何结构为 CLARA蛇形磁铁偶极铁、能量为 190 兆电子伏的 20 μ米、100 皮库高斯束团，比较 CSR 尾场模型与闭式模型和迟滞场参考值。（a）对于四种分箱数，稳态尾场的束团平均能量损失相对于闭式计算的误差随粒子数的变化。（b）迟滞场参考值、入口瞬态尾场模型和稳态尾场模型的束团平均损失率随偶极磁铁内部累积弯转角的变化；在两个最小弯转角处，瞬态尾场模型的损失为零。（c）偶极子出口后平均损失率相对于迟滞场的误差： SLIPSTREAM 的迟滞场尾场模型和闭式模型，以及 ELEGANT 的 CSRDRIFT 尾场。

表 VI. 100 皮库束团经过 CLARA束团压缩器时的平均CSR能量损失和归一化水平发射度，针对三种蛇形磁铁强度（0.925 为完全压缩），分别采用 ELEGANT、 OCELOT 和 SLIPSTREAM。不计入 CSR 时的发射度为 0.483 μ米。“仅偶极磁铁”不包含漂移段CSR；“偶极磁铁和漂移段”采用 ELEGANT的瞬态 + 漂移模型、OCELOT的迟滞场过程，以及 SLIPSTREAM的结合迟滞场漂移段核的入口瞬态。

		0.8		0.925		1.0	
		损失 [千电子伏特]	$\epsilon_{n,x}$ [μ米]	损失 [千电子伏特]	$\epsilon_{n,x}$ [μ米]	损失 [千电子伏特]	$\epsilon_{n,x}$ [μ米]
仅偶极磁铁	ELEGANT	9.9	0.4995	165.3	0.9416	65.9	0.8030
	SLIPSTREAM	8.5	0.4950	153.7	0.8858	61.0	0.7659
偶极磁铁和漂移段	ELEGANT	44.4	0.5548	373.7	1.7442	126.7	1.1156
	OCELOT	43.3	0.5417	356.0	1.6168	126.5	1.1162
	SLIPSTREAM	44.1	0.5442	332.8	1.6036	115.2	1.0283

采用入口瞬态和迟滞漂移段核函数需耗时 2.51 秒，比串行快 7.7 倍 ELEGANT (表 VII，图 13c）。 SLIPSTREAM 使用 32 个 CPU 线程时快 2.2 倍 ELEGANT； OCELOT 耗时约为其两倍。 ELEGANT的耗时包含文件输入输出，因此这些比值反映的是相应工作流程和资源分配。

漂移段处理的成本相当高。闭合形式模型按厘米间隔进行计算，与 EL-EGANT中的做法相同。迟滞漂移段版本所需时间约为其三分之一时间较长，但使用融合 WARP 核函数后，速度比其替代的 PYTORCH 二分计算快 30 倍。在这块图形处理器上，以双精度处理 10^5个粒子时，直接成对求积每次扫描需要数分钟；该处理器的双精度算术速率远低于单精度速率。

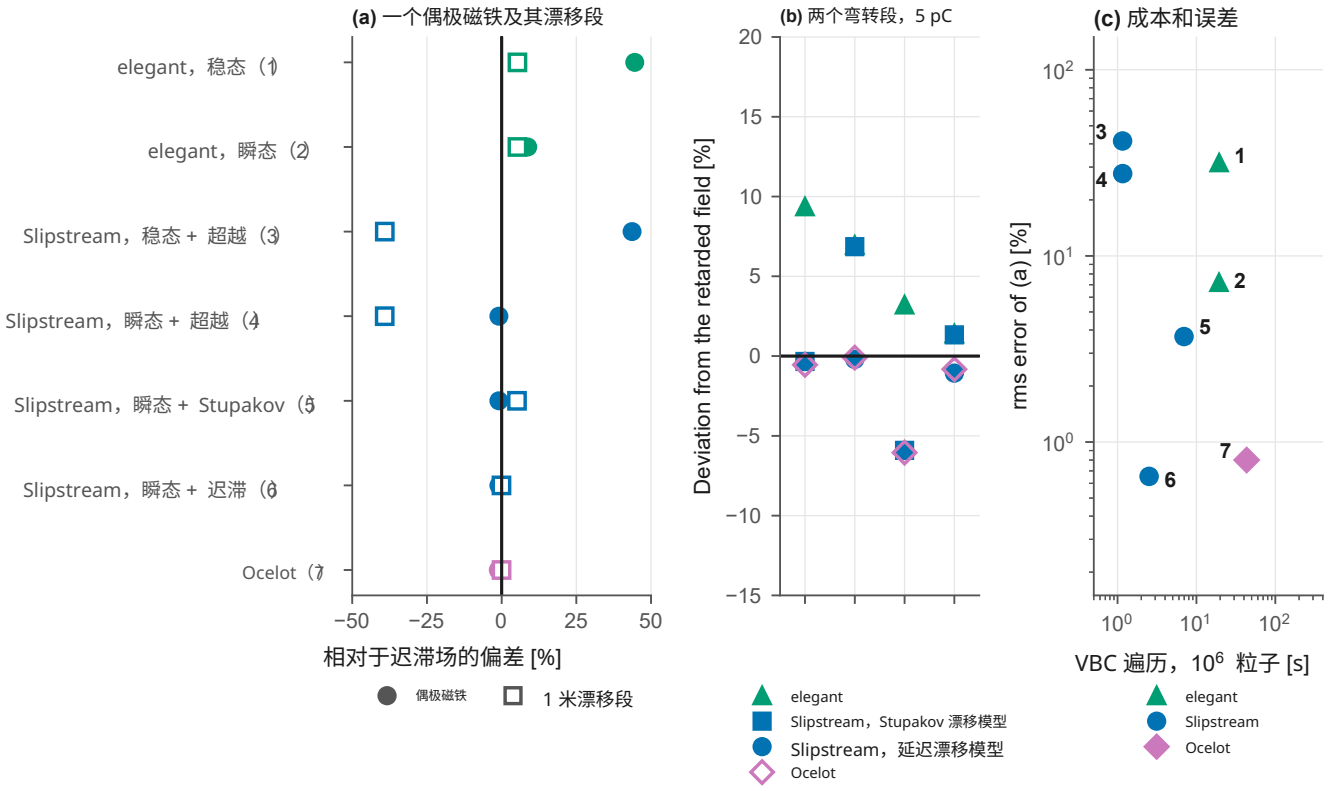

图 13. CSR 模型与延迟场参考值的对比。(a) 一个 20 μm、100 皮库高斯束团在一个 VBC 偶极磁铁（圆圈）及其后 1 m 漂移段（方块）中的平均能量损失，以相对于迟滞场的偏差表示，针对 ELEGANT （稳态和瞬态模型、闭式漂移模型）、 SLIPSTREAM （采用超越长度的稳态或瞬态模型，以及闭式或延迟漂移模型）和 OCELOT。(b) 双弯路径上，前两个 VBC 偶极磁铁各段在 5 pC 时的能量损失，相对于冻结束团迟滞场的偏差。(c) 10^6 粒子的一次 VBC 遍历运行时间（表 VII；SLIPSTREAM 在图形处理器上以双精度运行， ELEGANT 以及 OCELOT 在中央处理器上运行）与 (a) 中两个数值的均方根误差之间的关系；数字对应于 (a) 中列出的设置。

B. Booster 动力学、散射与阻抗

增强器动力学。 Diamond-II 增强器 [48]提供了一个更大环的验证测试，其中包含组合函数偶极磁铁-四极磁铁-六极铁。 SLIPSTREAM的 Twiss 调谐值与 ELEGANT相差不超过 5×10^{-5} ，色品相差不超过 0.02%，并且再现了它们随动量偏移的变化关系。动态孔径测试以三个动量偏移，对初始位置网格进行 1000 圈跟踪。稳定区域与 ELEGANT 的差异在 3% 以内（图形处理器 float32）；分类结果不同的启动点均靠近不稳定边界。

频率图扩散对精度更加敏感。与双单精度算术相比，float32 会增加约三个数量级的噪声，因此高精度映射采用双单精度算术。图形处理器动态孔径网格耗时 9 秒，比串行 EL-EGANT 快 75 倍，比 PELEGANT（ ELEGANT 的 MPI 并行版本，在 16 个进程上运行）快 11 倍。与 PELEGANT 在 32 个进程上的结果相比，float32 频率图快 7.4 倍，但双单精度算术慢 2.3 倍。可观测量所需的精度可能会彻底改变任何性能结论。

束内散射。在另一项基准测试中，沿 ELENA 晶格逐个元件对 Bjorken–Mtingwa 速率 [32] 取平均后，结果与XSUITE的 BjorkenMtingwaIBS 计算 [49] 在相同晶格和束流的三个平面上均相差不超过 5%。若仅在平均光学参数下计算一次速率，差异则为 12–19%。这一比较既检验晶格平均，也检验增长率计算。

电阻壁阻抗。在最后一个基准模型中，SLIPSTREAM 通过匹配多个电阻层界面处的场，求解圆形腔室阻抗。Yokoya 形状因子为扁平腔室提供近似的纵向阻抗 [50]。测试腔室为镀有非蒸散型吸气剂（NEG）的 HALF 真空腔室 [51]：半径 13 mm，铜类基底上有一层电阻率为 10^{-5} Ωm 的1 μm NEG 层，以及一束能量为 2.2 GeV 的电子束。

对于圆形腔室，纵向和偶极

表 VII。对10^6 和 10^5 个粒子（400 个分箱）进行一次包含 CSR 的 VBC 遍历的运行时间 [s]，括号内为相对于 ELEGANT 瞬态模型的加速比。ELEGANT 为串行实现，且包含文件输入输出；OCELOT（版本 26.6.1，Numba）在 WSL2 中运行于中央处理器上；SLIPSTREAM（延迟漂移核）在中央处理器上分别以 1 个和 32 个线程运行，也在图形处理器（RTX 3050）上运行。下方区块给出了各 CSR 模型在图形处理器上以双精度运行时的 SLIPSTREAM。

	10^6 个粒子	10^5个粒子
ELEGANT，串行中央处理器	19.3 (1.0)	1.76 (1.0)
OCELOT，中央处理器	43.3(0.45)	6.1 (0.29)
SLIPSTREAM，单个 CPU 线程	25.1 (0.77)	1.42 (1.2)
SLIPSTREAM，32 个 CPU 线程	8.65 (2.2)	0.84 (2.1)
SLIPSTREAM，单个图形处理器	1.61 (12)	0.54 (3.2)
SLIPSTREAM，图形处理器双精度	2.51 (7.7)	0.59 (3.0)
SLIPSTREAM，*GPU double，by CSR model*		
稳态	1.16(17)	0.15 (12)
瞬态	1.16 (17)	0.18 (9.8)
瞬态，闭式漂移	6.96 (2.8)	1.57 (1.1)
瞬态、迟滞漂移	2.51 (7.7)	0.59 (3.0)

阻抗吻合，IW2D运行 [52]最大相对差为 3×10^{-8}，频率范围为 1 kHz–1 THz（图 14b）。SLIPSTREAM耗时 7 ms，而 IW2D 耗时 0.4 s，包含启动时间。数值结果高度吻合，验证了层匹配实现；此计时比较包含可执行程序的启动成本。

对于平行板，IW2D的扁平腔纵向结果与圆形腔结果及横谷因子 1 的差异在 5 GHz 以内均不超过 1%。当 kbap- 接近 1 时，两者开始出现偏差，频率约为 3.7 GHz；但差异在 5 GHz 以内仍低于 1%，到 10 GHz 时达到 4%。这里，k 是波数，b 是半间隙。这为扁平腔近似设定了一个与频率相关的极限。SLIPSTREAM目前仅提供扁平腔的纵向阻抗，因此不比较 IW2D的扁平腔横向输出。

VI. 讨论

A. 选择模型和执行模式

本文所述的比较围绕三个决策展开：哪种物理近似足够合适、需要何种精度，以及哪种执行模式适用于当前任务。表VIII总结了此处相关的模型差异。

CHEETAH 是此处所比较代码中设计上较为接近的一种：两个软件包都使用 PYTORCH 并支持自动微分。其降阶线性映射适用于线性传输已足够的情况 [5]；本研究中的振幅相关环调谐需要非线性元件模型。JU-TRACK 和 SCIBMAD 提供了其他可微跟踪实现 [7, 8]。JUTRACK 的工作点差异与其扇形弯转映射的误差相符。在关闭其默认方法所采用的硬边缘场后，SCIBMAD与参考值一致。不应将这两项结果解读为对这些代码的普遍排名。

当许多粒子共享同一次晶格计算时，GPU 执行才具有经济性。在环缩放测试中，与单线程 XSUITE 的交叉点约为 float32 下的 50 个粒子和 float64 下的 500 个粒子。必须根据所需的观测量选择精度：float32 能满足环调谐容差，但无法满足更严格的首圈映射容差，而且会给频率图扩散增加大量噪声。双单精度算法可在增加成本的情况下改善这两方面。测得的比值反映的是这台工作站及所述资源的情况。

导数结果同样区分了可用性和实用性。环形加速器雅可比矩阵有四个输出，因此随着输入参数增加，其反向模式计算成本变化不大。例如，这有利于包含 24 个参数的光学匹配。对于包含五个参数的注入器目标函数，梯度的计算成本约为六次正向计算，而贝叶斯优化能在更短的耗时内达到更优的目标函数值。HELIX对 PIC 计算 [10]报告了不同的交叉点；然而，不同的输出、机器和工作负载使得无法直接比较交叉点对应的数量。

容差计算还表明，导数除了可用于基于梯度的搜索之外，还有其他用途。线性化误差预算需要知道可观测量相对于每个误差源的雅可比矩阵，而反向模式自动微分能够以与误差源数量无关的成本提供该矩阵。因此，可以在优化过程中更新容差估计，而不必等设计确定后再单独进行蒙特卡洛研究。每次更新只需针对每个可观测量进行一次反向扫描；相比之下，有限差分每个误差源需要两次求值，蒙特卡洛则需要跟踪数十台机器，而且也无法归因到各个误差源。

XSUITE 和 IMPACTX为 GPU 跟踪和集体效应提供了成熟的替代方案 [11, 12]。SCIB-MAD 也支持在 GPU 上进行可微跟踪，但在所测试的发布版本中不包含集体效应 [7]。SLIPSTREAM将受支持的可微路径和场图注入器跟踪引入同一 Python 环境，并提供环形加速器和直线加速器模型。ASTRA、GPT 和 ELEGANT提供了独立的数值比较。在 CLARA，采用默认设置时 14–22 秒的运行时间足以支持重复扫描，而更精细的计算则适合用于检查选定的候选方案。束流尺寸和纵向可观测量方面仍存在的差异，必须与仅依据发射度一致性得出的任何结论一并说明。

B. 数字孪生研究的接口

这种数字孪生架构将机器描述、虚拟控制系统和仿真模块 [1, 2] 分开。SLIPSTREAM可以根据

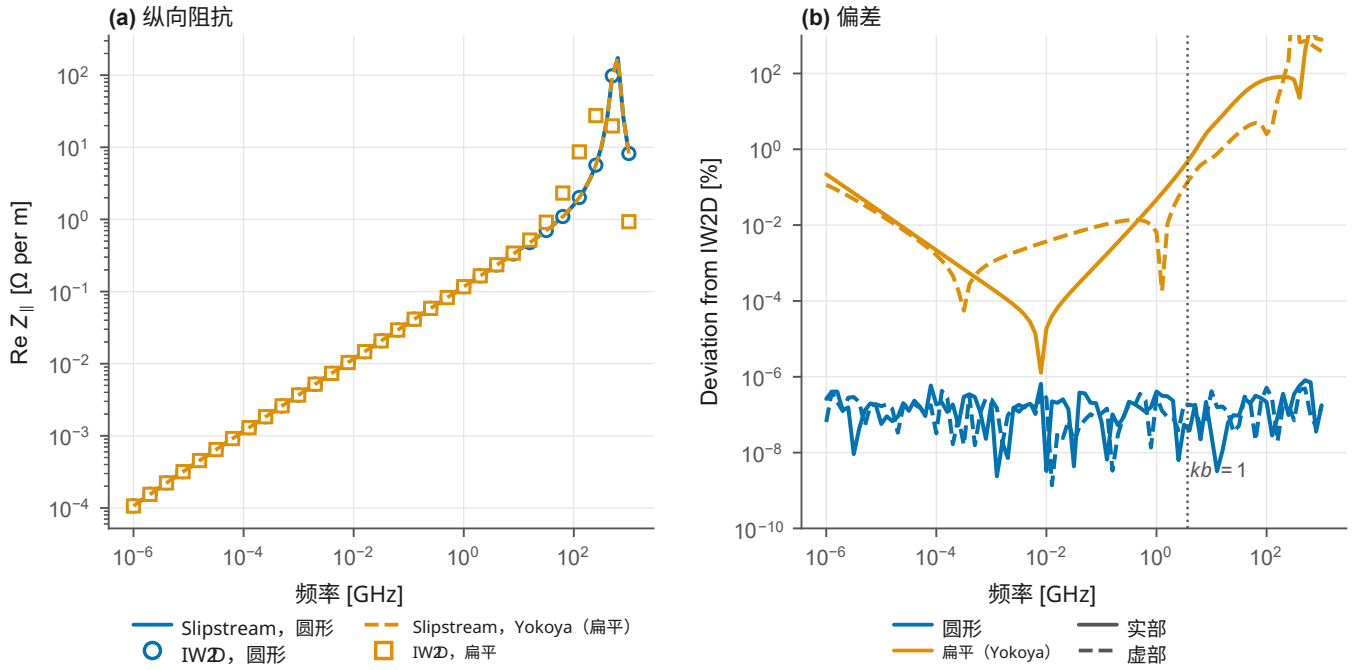

图 14. NEG涂层HALF主腔室的电阻壁阻抗（半径或半间隙为 13 mm， 1 μm NEG，2.2 GeV，长度为 1 m）。（a）纵向阻抗的实部： Slipstream的圆形腔室解和圆形腔室的 IW2D ，以及 IW2D的平腔求解器和 Slipstream使用 Yokoya 平行板因子的圆形腔结果。（b）Slipstream的数值相对于 IW2D的偏差；虚线标示 $kb = 1$。

提供的分节式机器描述构建注入器LAURA，即加速器统一表示的晶格架构 [55, 56]。它会按照仿真模块 [57, 58]所用的布局，写入 openPMD 束流物理粒子文件和 Twiss表。腔体相位、螺线管磁场和激光光斑尺寸对应于控制系统研究中可调整的量。

这些接口确保了与该工作流程的兼容性。本文基准测试评估了模拟行为和运行时间；但并未展示已部署的数字孪生、控制系统延迟或对机器测量值的预测。使用这些接口进行扫描和拟合时，仍需进行收敛性检查，并与相关的测量观测量进行比较，这与使用任何代码时的要求相同。

C. 模型局限性和后续工作

剩余的差异指出了后续工作的方向。一维未屏蔽相干同步辐射模型在完整压缩器以及弯转段之间传输的辐射方面仍存在差异。屏蔽模型或三维模型可用于研究超出本文所测试近似范围的情形。准静态注入器模型采用平均束流能量；在阴极附近进行能量分辨处理，可以更直接地检验该近似。更广泛的场图支持还可用于——利用更多机器描述进行比较。

对于导数，所展示的注入器路径采用固定的发射时间，并排除了孔径损失。针对更多参数开展优化研究，可检验其梯度计算成本是否会在五参数示例之外仍然经济。将 Slipstream用于现代优化算法（例如生成式相空间重建） [59], 也将是对现有代码的一项有益扩展，并可为集体效应主导的晶格（具有显著的 CSR 或 SC 特征）提供一条实现可微分模拟的简便途径。

VII. 结论

Slipstream在 PyTorch中结合了非线性传输、场图光阴极注入器跟踪以及选定的集体效应模型。针对社区使用的标准工具，在多种束流物理模式下对 Slipstream 进行了广泛的基准测试，结果表明，它适用于高精度模拟；在所测试的情况下，图形处理器执行和导数可降低重复计算的成本。

环形加速器基准测试结果与 ele-gant 及其他标准工具高度一致。GPU 执行降低了跟踪大型粒子系综的成本；随着粒子数量增加，每圈运行时间仍能良好扩展，而对于

表八。与这些代码基准测试相关的模型和执行差异，摘自引用论文、项目页面和源代码树。此处仅列出可微分代码或图形处理器代码； ELEGANT、 ASTRA、 GPT 和 OCELOT 均未列出。“n.s.”表示在所查阅的资料中未作说明。最后一列列出了第IV 节中的基准测试案例，每个代码均参与了其中相应的案例；版本见表II。

Code	执行	可微分性	非线性磁体	空间电荷	基准测试
SLIPSTREAM	PYTORCH，可选 WARP；中央处理器、CUDA	环映射和闭合轨道；固定步长注入器采用检查点机制	辛映射，4、6、8 阶；扇区漂移段和边缘	轴对称或三维粒子网格法；阴极像；直线加速器纵向空间电荷	环、雅可比矩阵，漂移段、FODO、CLARA
CHEETAH [5]	PYTORCH；中央处理器、CUDA、MPS	PYTORCH 自动微分；可微映射	线性、二阶以及漂移–踢–漂移	三维格林函数踢 [6]；无阴极	环、雅可比矩阵，漂移段
JUTRACK [8]	JULIA；多线程 CPU	约化 ENZYME自动微分 [53]；一阶泰勒映射	选项四阶辛六维跟踪	图像横向谱矩形中的模型	环、雅可比矩阵
SCIBMAD [7]	JULIA；中央处理器和 CUDA、ROCm、Metal、oneAPI GPUs	前向模式（FORWARDDIFF、GTPSA 泰勒级数）和反向模式	辛积分器，2–8 阶；精确弯转磁铁	pipe 计划中；不在所用版本中	环、雅可比矩阵
XSUITE [11]	Python 与编译内核；中央处理器和 GPU	n.s.	辛厚映射和薄映射	冻结模型和 PIC模型	环，雅可比矩阵
IMPACTX [12, 13]	C++/AMReX 和 Python；中央处理器或 GPU	仅为原型 [54]	基于 s 的辛 maps	三维静止系求解；网格细化	漂移段
HELIX [10]	PYTORCH 自动微分 at 固定能量；C++ 粒子网格法，可选图形处理器 FFT	反向模式雅可比矩阵贯穿 PIC 周期	线性矩阵和多粒子跟踪	三维 FFT PIC 和包络	FODO

小型工作负载。

对 CLARA 注入器和束团压缩器的研究表明，在比较不同代码时，收敛性必不可少。我们在注入器基准测试研究中特别选用了一种代码（ASTRA），并在相干同步辐射研究中选用 EL-EGANT / OCELOT，所用的物理模型在不同代码之间并不相同，尤其是在集体效应占主导的工作区间。不同代码之间达成一致，只是迈向最终目标的一步：以合理的速度提供机器的真实物理模型；尽管如此，这些基准测试仍是颇具启发性的案例研究，展示了各代码如何随数值参数变化而表现，并表明 SLIPSTREAM 能够达到与其他受测代码相近的精度，同时在计算速度方面保持竞争力。注入器研究表明，SLIPSTREAM 还可在这一工作区间提供快速、可微的跟踪，以支持深入研究；不过，在五个参数的情况下，其梯度并未缩短优化时间，参数数量更多时的表现仍有待测试，包括将其用于优化过程中的容差估计。

.....的开发 SLIPSTREAM还提供了一个在人工指导下进行 AI 辅助实现的有据可查的示例，并通过独立数值比较进行了评估；开发耗时约 12 周，工作时段总计约 100–150 小时，记录的 Claude 使用量按 API 标价折合约为 $400（第 IIG节）。

人工智能辅助代码开发的应用，也对仿真代码在这一领域中的作用产生了深远影响——任何有时间且预算适中的人都可以如今创建出准确、快速的束流跟踪代码，并包含多种集体效应模型。事实上，未来几个月乃至几年里，代码之间唯一真正的差异很可能只是编程语言（PYTHON、JAX、 JULIA 等）以及所选用的加速器（中央处理器、图形处理器、TPU、FPGA等）。最终，验证框架本身可能比 SLIPSTREAM更重要；这个验证框架用于验证、评测，并最终将其与一系列同类代码进行比较。

致谢

作者使用了第 IIG节所述的人工智能工具，以协助软件开发、稿件起草与修订，以及图表和插图的制作。所有使用均在人工指导和监督下进行。作者对软件、图、解读及最终稿件负责。最终稿件由作者完成编辑。

数据和代码可用性

SLIPSTREAM 基于 Apache-2.0 许可证开放源代码。能够复现本文 SLIPSTREAM结果的 v1.0.1 版本可在 https://github.com/astec-stfc/slipstream/releases/tag/v1.0.1获取。基准测试案例、比较脚本和保存的结果位于 slipstream-validation 仓库中，https://github.com/astec-stfc/slipstream-validation。

[1] A. D. Brynes、M. King、K. R. L. Baker、R. Banerjee、R. Clarke、D. J. Dunning、J. K. Jones、M. Lep- uta、A. E. Pollard、M. Romanovschi、M. Shaw 和 N. Ziyan，《Closing the loop: Deploying auto- generating digital twins for particle accelerators》，《科学报告》https://doi.org/10.1038/s41598-026-75674-y（2026年）。[2] M. King、A. D. Brynes、F. Jackson、J. K. Jones、N. Ziyan、M. A. Johnson、K. Baker、D. J. Scott、E. Yang、T. Kabana、C. Garnier、S. Chowdhury、N. Neveu 和 R. Roussel，《Controls abstraction towards accel- erator physics: A middle layer Python 软件包 for particle accelerator control》，《欧洲物理学杂志：研究基础设施》10，https://doi.org/10.1007/s41781-026-00169-4（2026年）。[3] A. L. Edelen、S. G. Biedron、B. E. Chase、D. Edstrom、S. V. Milton 和 P. Stabile，《Neural networks for mod- eling and control of particle accelerators》，《IEEE 核科学汇刊》63，878（2016年）。[4] A. Edelen 和 X. Huang，《Machine learning for design and control of particle accelerators: A look backward and forward》，《核与粒子科学年度评论》74，557（2024年）。[5] J. Kaiser、C. Xu、A. Eichler 和 A. Santamaria Garcia，《 Bridging the gap between machine learning and particle accelerator physics with high-speed, differentiable simu- lations》，《物理评论：加速器与束流》27，054601（2024年）。[6] A. Dhamrait、E. Zoni、A. Huebl、J. Qiang、C. E. Mitchell、R. Roussel、J. Kaiser、C. Xu、J.-L. Vay 和 R. Lehe，《The memory scaling of reverse-mode differentiation in particle accelerator simulations with space charge》，收录于 *Proceedings of the Platform for Advanced Scientific Computing Conference (PASC '26)* 2026 1 11, 13 （美国计算机协会，）第 – 页，文章；arXiv:2605.27282。[7] M. G. Signorelli、J. P. Devlin、G. H. Hoffstaetter 和 D. Sagan，《SciBmad: A differentiable, GPU-parallelized software library for particle accelerator design, nonlin- ear analysis, and machine learning》，收录于 *Proc. 17th International Particle Accelerator Conference (IPAC'26)*、*Deauville France* 2026 4737 4740, 5325 ，（）第 – 页，论文 THP；软件：https://github.com/bmad-sim/SciBmad.jl。[8] J. Wan、H. Alamprese、C. Ratcliff、J. Qiang 和 Y. Hao，《JuTrack: A Julia 软件包 for auto-differentiable accel- erator modeling and particle tracking》，《计算机物理通讯》309，109497（2025年）。[9] J. Qiang，《Differentiable self-consistent space-charge sim- ulation for accelerator design》，《物理评论：加速器与束流》26，024601（2023年）。[10] A. Pathak，《HELIX: a hybrid envelope-multiparticle linac code with differentiable space-charge optimization》（2026年），arXiv:2609.04421 [physics.acc-ph]。[11] G. Iadarola、R. De Maria、S. Łopaciuk、A. Abramov、X. Buffat、D. Demetriadou、L. Deniau、P. Hermes、P. Kic- siny、P. Kruyt、A. Latina、L. Mether、K. Paraschou、G. Sterbini、F. F. Van Der Veken、P. Belanger、P. Nie- dermayer、D. Di Croce、T. Pieloni、L. Van Riesen-Haupt 和 M. Seidel，《Xsuite: An integrated beam physics simulation framework》，收录于 *Proc. 68th ICFA Advanced Beam Dynamics Workshop on High-Intensity and High-Brightness Hadron Beams (HB'23) Geneva Switzerland 9–13 October 2023* 2024 JACoW出版，）第 73–80 页，论文 TUA2I1；arXiv:2310.00317。[12] A. Huebl、R. Leh´e、C. Mitchell、J. Qiang、R. Ryne、R. Sandberg 和 J.-L. Vay，《面向百亿亿次级粒子加速器建模与设计的下一代计算工具》，载于 *Proc. 5th North American Particle Accelerator Conference (NAPAC'22), Albuquerque, NM, USA* 2022 , *7–12 August 2022*（JACoW出版，）第 302–306 页，论文 TUYE2。[13] C. Mitchell、A. Huebl、J. Qiang、R. Leh´e、M. Garten、R. Sandberg 和 J.-L. Vay，《ImpactX 对空间电荷验证基准测试的建模》，载于 *Proc. 68th ICFA Advanced Beam Dynamics Workshop on High-Intensity and High-Brightness Hadron Beams (HB'23), Geneva Switzerland* , , *9–13 October 2023*（JACoW出版，2024年）第 583–586 页，论文 THBP44。[14] K.-J. Kim，《激光驱动射频电子枪中的射频与空间电荷效应》，Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 275, 201 (1989)。[15] B. Carlsten，《洛斯阿拉莫斯国家实验室极紫外自由电子激光加速器的新型光电注入器设计》，Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 285, 313 (1989)。[16] L. Serafini 和 J. B. Rosenzweig，《射频光阴极注入器中强相对论准层流束流的包络分析：发射度补偿理论》，Phys. Rev. E 55, 7565 (1997)。[17] I. V. Bazarov、B. M. Dunham 和 C. K. Sinclair，《光阴极注入器可实现的最大束流亮度》，Phys. Rev. Lett. 102, 104801 (2009)。[18] D. H. Dowell 和 J. F. Schmerge，《金属光阴极的量子效率与热发射度》，Phys. Rev. ST Accel. Beams 12, 074201 (2009)。[19] K. Fl ¨ *ASTRA: A Space Charge Tracking Algorithm User's Manual Version 3.2* 2017 , , , DESY （），2017 年 3 月。[20] S. B. van der Geer 和 M. J. de Loos，*The general parti-cle tracer code: design, implementation and application*，博士论文，埃因霍温理工大学（2001）。[21] M. Borland，《elegant：用于加速器模拟的灵活兼容SDDS的代码》，载于 *6th International Computational Accelerator Physics Conference (ICAP2000), Darmstadt* 2000 , *Germany, 11–14 September 2000*（），先进光子源报告 LS-287。[22] D. Angal-Kalinin、A. Bainbridge、A. D. Brynes、R. K. Buckley、S. R. Buckley、G. C. Burt、R. J. Cash、H. M. Castaneda Cortes、D. Christie、J. A. Clarke、R. Clarke、L. S. Cowie、P. A. Corlett、G. Cox、K. D. Dumbell、D. J. Dunning、B. D. Fell、K. Gleave、P. Goudket、A. R. Goulden、S. A. Griffiths、M. D. Hancock、A. Hannah、T. Hartnett、P. W. Heath、J. R. Henderson、C. Hill、P. Hindley、C. Hodgkinson、P. Hornickel、F. Jackson、J. K. Jones、T. J. Jones、N. Joshi、M. King、S. H. Kinder、N. J. Knowles、H. Kockelbergh、K. Marinov、S. L. Mathisen、J. W. McKenzie、K. J. Middleman、B. L. Milit{v}syn、A. Moss、B. D. Muratori、T. C. Q. Noakes、W. Okell、A. Oates、T. H. Pacey、V. V. Paramanov、M. D. Roper、Y. Saveliev、D. J. Scott、B. J. A. Shepherd、R. J. Smith、W. Smith、E. W. Snedden、N. R. Thompson、C. Toller{v}vey、R. Valizadeh、A. Vick、D. A. Walsh、T. Weston、A. E. Wheelhouse、P. H. Williams、J. T. G. Wilson 和

A. Wolski，《紧凑型直线加速器研究与应用前端的设计、规格及首次束流测量》，Physical Review Accelerators and Beams 23, 044801 (2020)。[23] A. Paszke、S. Gross、F. Massa、A. Lerer、J. Brad{v}bury、G. Chanan、T. Killeen、Z. Lin、N. Gimelshein、L. Antiga、A. Desmaison、A. K¨opf、E. Yang、Z. De{v}Vito、M. Raison、A. Tejani、S. Chilamkurthy、B. Steiner、L. Fang、J. Bai 和 S. Chintala，《PyTorch：一种命令式风格、高性能的深度学习库》（2019），arXiv:1912.01703 [cs.LG]。[24] M. Macklin，《Warp：用于图形处理器仿真和图形学的高性能 Python 框架》，NVIDIA GPU 技术大会（GTC）（2022）。[25] H. Yoshida，《高阶辛积分器的构造》，Physics Letters A 150, 262 (1990)。[26] K. L. Brown，*A First- and Second-Order Matrix Theory for the Design of Beam Transport Systems and Charged Particle Spectrometers* 75，技术报告 SLAC-（SLAC，1982），1982 年 6 月版本；首次发布于 1967 年。[27] E. L. Saldin、E. A. Schneidmiller 和 M. V. Yurkov，《TESLA 测试设施直线加速器中由纵向空间电荷驱动的微束团不稳定性》，Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A 528, 355 2004( )。[28] M. Borland，《一种利用相干同步辐射进行粒子跟踪的简易方法》，Phys. Rev. ST Accel. Beams 4, 070701 (2001)。[29] E. Saldin、E. Schneidmiller 和 M. Yurkov，《关于沿圆弧运动的电子束团的相干辐射》，Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 398, 373 (1997)。[30] G. Stupakov 和 P. Emma，《超相对论极限下短磁铁的 CSR 尾场》，载于 *Proceedings of the 8th European Particle Accelerator Conference (EPAC 2002)*（法国巴黎，2002）第 1479 页。[31] K. L. F. Bane，《一种精确而简化的束内散射模型》（2002 0205058），[ ] arXiv:physics/ physics.acc-ph。[32] J. D. Bjorken 和 S. K. Mtingwa，《束内散射》，Particle Accelerators 13, 115 (1983)。[33] H. Qin、S. Zhang、J. Xiao、J. Liu、Y. Sun 和 W. M. Tang，《Boris 算法为何如此出色？》，Physics of Plasmas 20, 084503 (2013)。[34] W. Kahan，《关于减少截断误差的进一步说明》，Communications of the ACM 8, 40 (1965)。[35] D. Scott、A. Bainbridge、R. Cash、T. Jones、K. Marinov、B. Shepherd、B. Militsyn 和 C. Edmonds，《CLARA 高重复频率电子源聚焦螺线管系统的设计与表征》，载于 *Proc. 8th International Particle Accelerator Conference(IPAC'17), Copenhagen, Denmark, May 2017*（JACoW出版，2017），论文 THPIK107。[36] J.-L. Vay，《以相对论速度交叉的束流或等离子体的模拟》，Physics of Plasmas 15, 056701 (2008)。[37] J. Qiang、S. Lidia、R. D. Ryne 和 C. Limborg-Deprey，《用于高亮度束流动力学仿真的三维准静态模型》，Phys. Rev. ST Accel. Beams 9, 044204 (2006)。[38] C. Birdsall 和 A. Langdon，*Plasma Physics via Computer Simulation* 2018（CRC Press，）。[39] R. Hockney 和 J. Eastwood，*Computer Simulation Using Particles* 1988（Taylor & Francis，）。

[40]M. Dohlus、K. Fl¨ottmann 和 C. Henning，*Fast Particle Tracking with Wake Fields*，DESY 报告 12-012（DESY, 2012），arXiv:1201.5270。[41] J. Laskar，多维系统的频率分析：全局动力学与扩散，《Physica D：非线性现象》67，257（1993）。[42] J. Ansel、E. Yang、H. He、N. Gimelshein、A. Jain、M. Voznesensky、B. Bao、P. Bell、D. Berard、E. Burovski、G. Chauhan、A. Chourdia、W. Constable、A. Desmaison、Z. DeVito、E. Ellison、W. Feng、J. Gong、M. Gschwind、B. Hirsh、S. Huang、K. Kalambarkar、L. Kirsch、M. La-zos、M. Lezcano、Y. Liang、J. Liang、Y. Lu、C. K. Luk、B. Maher、Y. Pan、C. Puhrsch、M. Reso、M. Saroufim、M. Y. Siraichi、H. Suk、S. Zhang、M. Suo、P. Tillet、X. Zhao、E. Wang、K. Zhou、R. Zou、X. Wang、A. Math-ews、W. Wen、G. Chanan、P. Wu 和 S. Chintala，PyTorch 2：通过动态 Python 字节码转换和图编译实现更快的机器学习，载于 *Proceedings of the 29th ACM International Conference on Architectural Support for Programming Languages and Operating Systems, Volume 2*（美国计算机协会，2024年），第 929–947 页。[43] P. Tillet、H. T. Kung 和 D. Cox，Triton：用于分块神经网络计算的中间语言和编译器，载于 *Proceedings of the 3rd ACM SIGPLAN International Workshop on Machine Learning and Programming Languages* 2019 10 19（美国计算机协会，）第 – 页。[44] I. Agapov、G. Geloni、S. Tomin 和 I. Zagorodnov，OCELOT：用于同步辐射光源和自由电子激光研究的软件框架，《核仪器与物理研究方法 A辑：加速器、光谱仪、探测器及相关设备》768，151（2014）。[45] P. J. Roache，计算流体动力学中的不确定性量化，《流体力学年度评论》29，123（1997）。[46] J. D. Jackson，*Classical Electrodynamics*，第 3 版（威利出版社，纽约，1999）。[47] A. D. Brynes、P. Smorenburg、I. Akkermans、E. Allaria、L. Badano、S. Brussaard、M. Danailov、A. Demidovich、G. De Ninno、D. Gauthier、G. Gaio、S. B. van der Geer、L. Giannessi、M. J. de Loos、N. S. Mirian、G. Penco、P. Rebernik、F. Rossi、I. Setija、S. Spampinati、C. Spez-zani、M. Trov`o、P. H. Williams 和 S. Di Mitri，超越一维相干同步辐射的极限，《新物理学杂志》20，073035（2018）。[48]钻石光源，*Diamond-II Conceptual Design Report*，技术报告（钻石光源，Harwell 科学与创新园区，英国，2019）。[49] V. Chohan，编，*Extra Low ENergy Antiproton (ELENA) ring and its Transfer Lines: Design Report*，CERN 黄色报告第 CERN-2014-002 号（欧洲核子研究中心，日内瓦，2014）。[50] K. Yokoya，一般截面束流管道的电阻壁阻抗，《粒子加速器》41，221（1993）。[51] Z. H. Bai、G. Y. Feng、T. L. He、W. Li、W. W. Li、G. Liu、Z. L. Ren、L. Wang、P. H. Yang、S. C. Zhang 和 T. Zhang，HALF 储存环的改进型混合型 6BA 晶格，载于 *Proceedings of the 12th International Particle Accelerator Conference (IPAC 2021)*（坎皮纳斯，圣保罗州，巴西，2021年），第 407–409 页。[52] N. Mounet 和 E. M´etral，无限长轴对称多层束流管道的阻抗：矩阵形式体系与多模分析，在 *Proc. 1st Inter-*

national Particle Accelerator Conference (IPAC'10) Ky- ,,, oto Japan 23–28 May 2010 2010 (JACoW出版,) 第2039–2041页，论文 TUPD050。[53] W. S. Moses 和 V. Churavy，《无需为机器学习重写外部代码，自动合成快速梯度》，载于 *Advances in Neural Information Processing Systems 33 (NeurIPS 2020)* (Curran Associates, Inc., 2020) 第12472–12485页，arXiv:2010.01709。[54] A. Huebl、C. E. Mitchell、R. Lehe、A. Formenti、G. Charleux、A. Myers、W. Zhang、J. Qiang、J.-L. Vay、J. Kaiser、C. Hespe、J. P. Gonzalez-Aguilera、C. Xu、A. Santamaria Garcia、R. Roussel、A. Edelen 和 W. S. Moses，《迈向 BLAST/ImpactX 中可微分的束流动力学建模》，载于 *Proc. North American Particle Accelerator Conference (NAPAC'25), Sacramento, CA, USA* 2026 , *10–15 August 2025* (JACoW出版,) 第614–617页，论文 TUP101。

[55] astec-stfc，LAURA：用于统一表示加速器的晶格架构，软件仓库（无日期），访问于 2026 年 10 月 20 日。[56] A. D. Brynes、J. K. Jones、M. King、M. A. Johnson 和 N. Ziyan，一种基于全面晶格描述的灵活端到端粒子加速器仿真框架（2026），arXiv:2604。19103 [physics.acc-ph]。[57] A. Huebl、R. Lehe、J.-L. Vay、D. P. Grote、I. Sbalzarini、S. Kuschel 和 M. Bussmann，openPMD 1.0.0：面向基于粒子和网格的数据的元数据标准。（2015）。[58] astec-stfc，SIMBA：用于加速器束流集成建模的模拟，软件仓库（无日期），访问于 2026 年 10 月 20 日。[59] R. Roussel、A. Edelen、C. Mayes、D. Ratner、J. P. Gonzalez-Aguilera、S. Kim、E. Wisniewski 和 J. Power，利用神经网络和可微分模拟从加速器束流测量中重建相空间，《物理评论快报》**130**，145001（2023）。