Моделирование на вычислительном кластере динамики тонкого трубчатого замагниченного моноэнергетического пучка электронов

А.А. Трунов, А.В. Старченко, И.Ю. Турчановский, В.А. Шкляев
Томский научный центр

Рассматривается задача о транспортировке пучка заряженных частиц в двумерной осесимметричной постановке. Решение проводится методом «частицы-в-ячейках» для самосогласованного электромагнитного поля. Проведено распараллеливание лагранжевого этапа в методе. Предложена динамическая балансировка загрузки, существенно использующая свойства задачи и обеспечивающая малый дисбаланс при низких затратах процессорного времени.

Введение

Исследование релятивистских электронных пучков является актуальной задачей в связи с постоянно возникающими новыми областями их прикладного использования, а также по причине существования целого ряда нерешённых задач теории пучков заряженных частиц. Аналитическое исследование их динамики возможно только в редких случаях из-за сложности описывающих их уравнений. Как следствие этого, основную роль играет численное моделирование.

Постановка задачи

Рассматривается осесимметричная задача о транспортировке тонкого трубчатого замагниченного моноэнергетического пучка электронов в эквипотенциальном цилиндрическом канале дрейфа (рис. 1). Все заряженные частицы обладают одинаковым удельным зарядом. Плотность тока инжекции распределена равномерно по области инжекции. Область инжекции расположена на одном из торцевых электродов, её площадь много меньше площади электрода, с которого осуществляется инжекция.

Рассматриваемый процесс описывается с помощью уравнений движения частиц под действием собственных электрических и магнитных полей, а также сильного продольного внешнего магнитного поля. Ввиду осевой симметрии исследуемой системы используется цилиндрическая система координат.

Собственные поля, создаваемые частицами, находятся из решения уравнений Максвелла (1), (2) по известным значениям координат и скорости частиц.

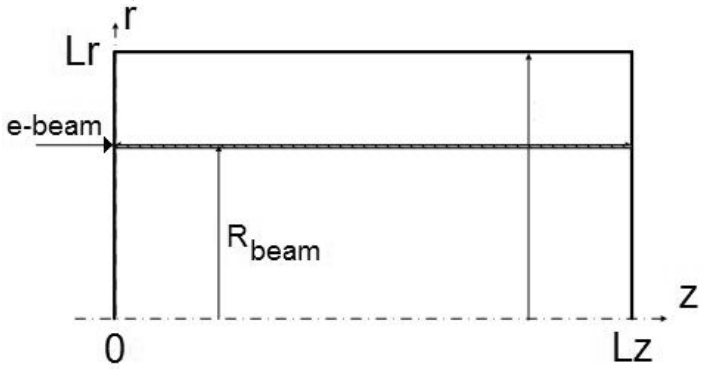


Рис. 1. Геометрия задачи

Lr = 1 см; Lz = 10 см; R_{beam} = 0,67 см; ширина пучка 0,1 мм,

$$\frac{1}{c}\frac{\partial \bar{B}^i}{\partial t} = -rot\ \bar{E}^i,\ \ \frac{1}{c}\frac{\partial \bar{E}^i}{\partial t} = rot\ \bar{B}^i - \frac{4\pi}{c}\bar{J}; \qquad (1)$$

$$div\ \bar{B}^i = 0;\ div\ \bar{E}^i = 4\pi\rho, \qquad (2)$$

где $\bar{B}^i = \left(B_r^i, B_\varphi^i, B_z^i\right)$ – вектор собственного магнитного поля;

$\bar{E}^i = \left(E_r^i, E_\varphi^i, E_z^i\right)$ – вектор собственного электрического поля;

$\bar{J} = (J_r, J_\varphi, J_z)$ – вектор плотности тока; c – скорость света;

ρ – плотность заряда.

Начальные условия для векторов собственного электромагнитного поля: $E_z^i = E_r^i = E_\varphi^i = B_z^i = B_r^i = B_\varphi^i = 0.$ Внешнее продольное магнитное поле: $B_z^e = 100T;\ B_r^e = B_\varphi^e = 0.$ На границах области исследования (кроме оси симметрии) ставятся граничные условия для векторов электромагнитного поля на идеальном металле [2]. На оси симметрии используются условия симметрии [2].

Движение частиц описывается уравнениями Ньютона–Лоренца:

$$\frac{d\bar{u}_p}{dt} = \frac{q}{m}\left(\bar{E} + \frac{1}{c}\left[\frac{\bar{u}_p}{\gamma} \times \bar{B}\right]\right),\ \ \frac{d\bar{x}_p}{dt} = \frac{\bar{u}_p}{\gamma}, \qquad (3)$$

где $\bar{u}_p$ – релятивистская скорость частицы; $\bar{u}_p = \bar{v}_p \cdot \gamma;\ \bar{v}_p = \left(v_{zp}, v_{rp}, v_{\varphi p}\right)$ – скорость частицы; q – заряд частицы; m – масса покоя частицы; $\bar{E} = \bar{E}^i$ – электрическое поле, действующее на частицу; γ – релятивист-

ский коэффициент; $\overline{B} = \overline{B}^i + \overline{B}^e$ – магнитное поле, действующее на частицу; $x_p=(r_p, z_p)$ – радиус-вектор частицы (φ_p не учитывается ввиду осевой симметрии задачи).

Для решения уравнений (3) имеются начальные условия:

$$t = 0 : u_{zp} \approx 5{,}2 \cdot 10^{10}\ см/с,\ u_{rp} = 0,\ u_{\varphi p} = 0;\ 0 \le r_p \le r_1,\ 0 \le z_p \le z_1.$$

Частицы распределяются по псевдослучайному равномерному закону на небольшом расстоянии от инжектирующего электрода. В случае если частица достигает любой границы расчётной области, кроме оси симметрии, исследование её движения прекращается. При переходе через ось симметрии знаки радиальной координаты r_p и радиальной компоненты скорости u_{rp} частицы изменяются.

Вычислительные технологии

Для решения данной задачи применяется метод «частицы-в-ячейках», относящийся к классу эйлерово-лагранжевых методов. Они характерны тем, что эволюция системы частиц на каждом временном шаге разбивается на два этапа. На одном из них (эйлеровом этапе) при фиксированном положении частиц предварительно вычисляется результат их взаимодействия и (или) их коллективного воздействия на среду. Расчёт ведётся на неподвижной (эйлеровой) сетке. На другом, лагранжевом, этапе выполняется интегрирование на очередном временном шаге динамической системы, правая часть которой (поля) вычислена на эйлеровом этапе [1]. Для решения уравнений Максвелла используется явная разностная схема, имеющая второй порядок аппроксимации по времени и пространству и обеспечивающая точное выполнение граничных условий для векторов электромагнитного поля на идеальном проводнике [2]. Ввиду осевой симметрии используется двумерная пространственная сетка (r–z-координаты). Для интегрирования уравнений движения частиц применяется алгоритм Бориса с перешагиванием для осесимметричной задачи, имеющий второй порядок аппроксимации и сохраняющий импульсы частиц [1]. Вычислительный цикл последовательной программы состоит из попеременного решения двух задач: нахождения векторов собственного электромагнитного поля $\overline{E}^i$ и $\overline{B}^i$ (эйлеров этап) и интегрирования уравнений движения частиц под действием рассчитанных собственных полей (лагранжев этап). Поскольку электромагнитное поле определяется на эйлеровой сетке, а координаты и скорости частиц – на лагранжевой, то необходимы операция раздачи плотности заряда и плотности тока в узлы эйлеровой сетки для решения уравнений Максвелла и обратная

процедура интерполяции для интегрирования уравнений движения. В качестве такой процедуры применена PIC-интерполяция [1]. При этом вычисление сеточной плотности тока согласовано с изменением плотности заряда в ячейке эйлеровой сетки, что позволяет удовлетворить соотношениям (2) [1].

Выполненный тайминг последовательной программы показал, что доля временных затрат центрального процессора, приходящихся на вычисление собственного электромагнитного поля по уравнениям (2), составляет приблизительно $3 \cdot 10^{-4}$ при использовании пространственных сеток 100×100 и количества частиц приблизительно $4 \cdot 10^{6}$. Поскольку время выполнения эйлерова этапа алгоритма занимает много меньше времени выполнения лагранжева, проведено распараллеливание только лагранжева этапа. При параллельной реализации алгоритма использовался язык программирования Fortran 90 с библиотекой MPI. Частицы инжектируются в расчётную область, полностью рассматривающуюся каждым из процессов, при этом производится динамическая балансировка загрузки процессов вычислительной системы при расчёте движения частиц (см. ниже). На начальном шаге по времени частицы распределяются равномерно по процессам. Далее происходит раздача плотности тока в узлы сетки на каждом из процессов, на основе имеющихся координат частиц данного процесса. В результате получаются «неполные» плотности тока для каждого процесса. Для интегрирования уравнений Максвелла (1) необходимо собрать на каждом из процессов источники (сеточные плотности тока). Сборка (суммированием) рассчитанных «неполных» сеточных плотностей тока J_r, J_φ, J_z на всех процессах осуществляется процедурой MPI_ALLREDUCE. На эйлеровом этапе все процессы интегрируют уравнения Максвелла во всей расчётной области. Далее параллельно интегрируются уравнения движения распределённых по процессам частиц (3).

Балансировка загрузки процессов осуществляется при помощи алгоритма регулирования инжекции частиц: максимальное число частиц, инжектируемых на данном шаге по времени, получает процесс, имеющий в расчётной области минимальное число частиц. На очередном шаге по времени мастер-процесс получает число частиц, рассчитываемых остальными процессами, и в соответствии с дисбалансом загрузки распределяет инжектируемые частицы по процессам. Результаты расчётов показывают, что дисбаланс загрузки составляет малые доли процента, при этом временные затраты процессорного времени на балансировку минимальны. К недостаткам алгоритма можно отне-

сти его ориентированность на задачи, имеющие существенно инжекционный характер.

Результаты

На рис. 2 приведены графики зависимости ускорения и эффективности работы параллельной программы от числа процессов при количестве обрабатываемых частиц $40 \cdot 10^6$ и пространственных сетках 100×100. Пунктиром показано максимальное теоретическое ускорение, вычисленное в соответствии с законом Амдаля при доле вычислительных операций параллельной программы, которые выполняются сугубо последовательно, равной $3 \cdot 10^{-4}$. Эффективность работы параллельной программы рассчитывалась как отношение реального ускорения к теоретическому. Полученные результаты говорят о хорошей эффективности распараллеливания алгоритма.

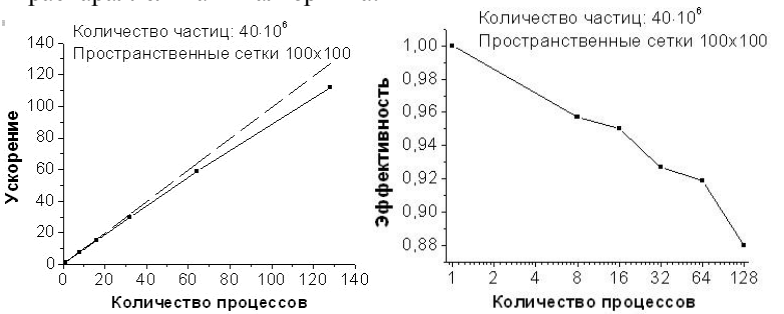
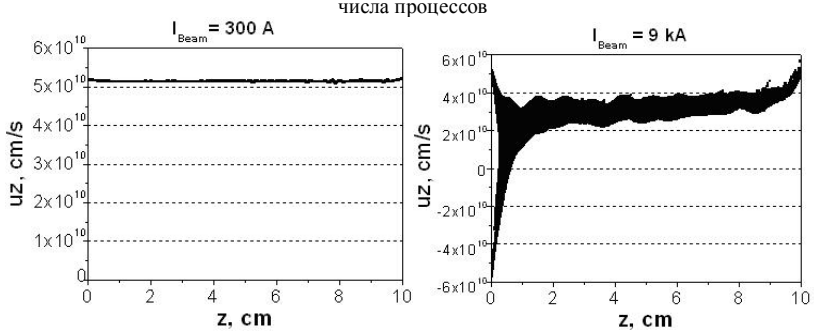


Рис. 2. Зависимости ускорения и эффективности работы параллельной программы от числа процессов



а) б)

Рис. 3. Зависимости z-компоненты скорости частиц от координаты z для тока пучка 300 А (*а*) и 9 кА (*б*)

Полученное на кластере ТГУ СКИФ Cyberia решение (рис. 3) хорошо согласуется с решением подобной задачи PIC-кодом KARAT [2] и PIC-кодом OOPIC. При этом видно образование виртуального катода на рис. 3, *б* при токе пучка выше критического (около 9 кА).

Литература

1. **Григорьев Ю.Н., Вшивков В.А., Федорук М.П.** Численное моделирование методами частиц-в-ячейках. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2004. 360 с.
2. **Tarakanov V.P.** Users's manual for code KARAT (ver. 7.03, May 97), Berkley Research Associates, Inc., 1997. 109 p.
3. **Вшивков В.А., Краева М.А., Малышкин В.Э.** Параллельная реализация метода частиц //Программирование, 1997. №2. С. 39-51.