Параллельная реализация алгоритма решения задачи о транспортировке пучка заряженных частиц

А. А. Трунов, А. В. Старченко,
И. Ю. Турчановский, В. А. Шкляев**
Томский государственный университет, Томск
*Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск

Рассматривается осесимметричная задача о транспортировке пучка заряженных частиц в вакуумном зазоре, ограниченном двумя параллельно расположенными проводящими круглыми электродами (рис. 1). Зазор имеет открытую боковую поверхность. Все заряженные частицы обладают одинаковой начальной энергией и удельным зарядом. Плотность тока инжекции распределена равномерно по области инжекции. Область инжекции расположена на одном из торцевых электродов, ее площадь много меньше площади электрода, с которого осуществляется инжекция.

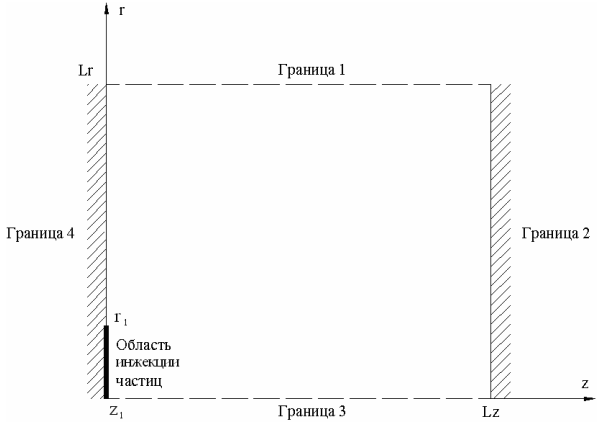


Рис.1. Вакуумный зазор

В такой постановке задача имеет известное стационарное аналитическое решение, что позволяет провести тестирование кода.

Основные уравнения модели

Для решения данной задачи применяется метод крупных частиц (PIC) [1—4]. В модели решаются уравнения движения

частиц под действием собственных электрических и магнитных полей. Собственные поля, создаваемые частицами, находятся из решения уравнений Максвелла (1) по известным координатам и скоростям частиц.

$$\begin{aligned} &\frac{1}{c}\frac{\partial \overline{B}^i}{\partial t} = -rot\overline{E}^i; \\ &\frac{1}{c}\frac{\partial \overline{E}^i}{\partial t} = rot\overline{B}^i - \frac{4\pi}{c}\overline{J}, \end{aligned} \tag{1}$$

где:
$\overline{B}^i = \left(B_r^i, B_\varphi^i, B_z^i\right)$ — вектор собственного магнитного поля;
$\overline{E}^i = \left(E_r^i, E_\varphi^i, E_z^i\right)$ — вектор собственного электрического поля;
$\overline{J} = \left(J_r, J_\varphi, J_z\right)$ — вектор плотности тока;
c — скорость света.

Распишем компоненты векторов электрического и магнитного поля с учетом осевой симметрии задачи $\left(\frac{\partial}{\partial \varphi} = 0\right)$:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{c}\frac{\partial B_r^i}{\partial t} = \frac{\partial E_\varphi^i}{\partial z}; \\ &\frac{1}{c}\frac{\partial B_z^i}{\partial t} = -\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(rE_\varphi^i\right); \\ &\frac{1}{c}\frac{\partial B_\varphi^i}{\partial t} = -\frac{\partial E_r^i}{\partial z} + \frac{\partial E_z^i}{\partial r}; \\ &\frac{1}{c}\frac{\partial E_r^i}{\partial t} = -\frac{\partial B_\varphi^i}{\partial z} - \frac{4\pi}{c}J_r; \\ &\frac{1}{c}\frac{\partial E_z^i}{\partial t} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(rB_\varphi^i\right) - \frac{4\pi}{c}J_z; \\ &\frac{1}{c}\frac{\partial E_\varphi^i}{\partial t} = \frac{\partial B_r^i}{\partial z} - \frac{\partial B_z^i}{\partial r} - \frac{4\pi}{c}J_\varphi. \end{aligned} \tag{2}$$

Помимо уравнений (1) система уравнений Максвелла содержит также уравнения:

$$\begin{aligned} &div\,\overline{B}^i = 0; \\ &div\,\overline{E}^i = 4\pi\rho, \end{aligned} \tag{3}$$

где ρ — плотность заряда.

Распишем уравнения (3) для компонент векторов электрического и магнитного поля с учетом осевой симметрии задачи $\left(\frac{\partial}{\partial \varphi}=0\right)$:

$$\begin{aligned}&\frac{\partial B_z^i}{\partial x}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(rB_r^i\right)=0;\\&\frac{\partial E_z^i}{\partial x}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(rE_r^i\right)=4\pi\rho.\end{aligned}\qquad(4)$$

Соотношения (4) должны выполняться на любом шаге по времени. Известно [2], что если уравнения (4) выполняются на начальном шаге, то они будут справедливы и на последующих шагах по времени, при отсутствии вычислительных погрешностей. Поэтому при приближенном вычислении полей по соотношениям (2) требуется их корректировка.

Начальные условия для векторов электромагнитного поля:

$$E_z^i=E_r^i=E_\varphi^i=B_z^i=B_r^i=B_\varphi^i=0.$$

Граничные условия для векторов электромагнитного поля:
$z=0$: $E_r^i=E_\varphi^i=B_z^i=0$ ($0\le r\le Lr$ — граница идеального проводника), граница 4 (рис. 1);
$z=Lz$: $E_r^i=E_\varphi^i=B_z^i=0$ ($0\le r\le Lr$ — граница идеального проводника), граница 2 (рис. 1);
$r=0$: $E_\varphi^i=B_r^i=0$ ($0\le z\le Lz$ — ось симметрии), граница 3 (рис. 1);
$r=Lr$: $E_z^i=E_r^i=E_\varphi^i=B_z^i=B_r^i=B_\varphi^i=0$ ($0\le z\le Lz$ — открытая граница, достаточно удаленная от зарядов), граница 1 (рис. 1).

Движение частиц описывается уравнениями Ньютона-Лоренца:

$$\frac{d\overline{u}_p}{dt}=\frac{q}{m}\left(\overline{E}+\frac{1}{c}\left[\frac{\overline{u}_p}{\gamma}\times\overline{B}\right]\right),\qquad(5)$$

$$\frac{d\overline{x}_p}{dt}=\frac{\overline{u}_p}{\gamma},\qquad(6)$$

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

частицу; γ – релятивистский коэффициент, $\gamma = \sqrt{1 + \frac{\left|\overline{u}_p\right|^2}{c^2}}$; $\overline{B}$ — магнитное поле, действующее на частицу, $\overline{x}_p = \left(r_p, z_p\right)$– радиус-вектор частицы.

Для решения уравнений (5), (6) имеются начальные условия:

$$t = 0 : v_{zp} \approx 1{,}9 \cdot 10^9 \text{ см/с},\ v_{rp} = 0,\ v_{\varphi p} = 0;$$
$$0 \le r_p \le r_1,\ \ 0 \le z_p \le z_1.$$

Частицы распределяются по псевдослучайному равномерному закону на небольшом расстоянии от инжектирующего электрода вблизи оси (см. рис. 1). В случае если частица достигает любой границы расчетной области, кроме оси симметрии, исследование ее движения прекращается. При переходе через ось симметрии частица «отражается», т. е. знак радиальной компоненты скорости v_{rp} изменяется на противоположный.

Вычислительные технологии

Для решения уравнений Максвелла используется явная разностная схема, обеспечивающая точное выполнение граничных условий для векторов электромагнитного поля на идеальном проводнике (на рис. 2 приведен фрагмент сетки). Смещенные в пространстве и времени равномерные сетки обеспечивают второй порядок аппроксимации [2]. Данная разностная схема успешно используется в электромагнитном коде KARAT [5].

Для интегрирования уравнений движения частиц используется алгоритм Бориса для осесимметричной задачи, основывающийся на алгоритме интегрирования с перешагиванием (leap-frog), который имеет второй порядок аппроксимации [2].

Вычислительный цикл программы состоит из попеременного решения двух задач: нахождения собственных полей (эйлеров этап) и интегрирования уравнений движения частиц под действием собственных полей (лагранжев этап).

Поскольку поля определяются на эйлеровой сетке, а координаты и скорости частиц на лагранжевой, то необходима операция раздачи плотности заряда и плотности тока в узлы эйлеровой

сетки для решения уравнений Максвелла и обратная процедура — для интегрирования уравнений движения. В качестве такой процедуры применена PIC-интерполяция [4].

Полученный тайминг последовательной программы показал, что доля временных затрат центрального процессора, приходящихся на вычисление электромагнитного поля по уравнениям (1)—(4), составляет менее 1 % при использовании пространственных сеток 100×100. Поскольку эйлеров этап занимает время много меньшее лагранжева, проведено распараллеливание только лагранжева этапа.

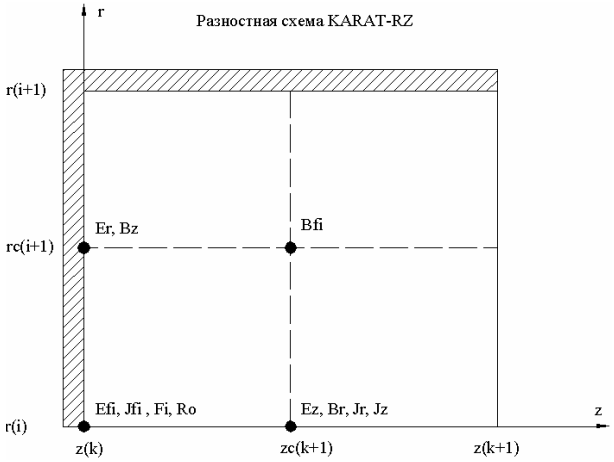


Рис. 2. Сдвинутые сетки

При параллельной реализации алгоритма использовался язык программирования FORTRAN с библиотекой MPI. Уравнения движения (5)—(6) распределенных по процессам частиц интегрируются параллельно, затем процедурой MPI_ALLREDUCE осуществляется сборка рассчитанных сеточных плотностей тока J_r, J_φ, J_z на всех процессах. На эйлеровом этапе все процессы интегрируют уравнения Максвелла во всей расчетной области.

Балансировка загрузки

Поскольку число частиц в расчетной области — величина переменная, то возможна ситуация, когда различные процессы обрабатывают существенно различное число частиц, что неудов-

летворительно сказывается на производительности параллельной программы в целом. Поэтому необходима процедура выравнивания числа частиц каждого процесса, обычно называемая динамической балансировкой загрузки процессов [7].

Балансировка загрузки процессов осуществляется при помощи алгоритма регулирования инжекции частиц: большее число частиц, инжектируемых на данном шаге по времени, получает процесс, имеющий в расчетной области минимальное число частиц. Результаты расчетов показывают, что дисбаланс загрузки составляет доли процента, при этом временные затраты процессорного времени на балансировку минимальны. Также стоит отметить небольшую трудоемкость программирования и отладки данного алгоритма.

Результаты

На рис. 3 приведен график зависимости ускорения и эффективности работы параллельной программы от числа процессов при количестве обрабатываемых частиц порядка 10^6. Пунктиром показано максимальное теоретическое ускорение, вычисленное в соответствии с законом Амдаля [6]. Эффективность работы параллельной программы рассчитывалась как отношение реального ускорения к теоретическому. Полученные результаты говорят о хорошей эффективности распараллеливания алгоритма.

Полученное на кластере ТГУ СКИФ Cyberia решение (см. рис. 4, 5) удовлетворительно согласуется с известным аналитическим решением [8, 9], а также с решением подобной задачи PIC-кодом KARAT [5]. Число частиц в расчетах составляло приблизительно $2 \cdot 10^6$.

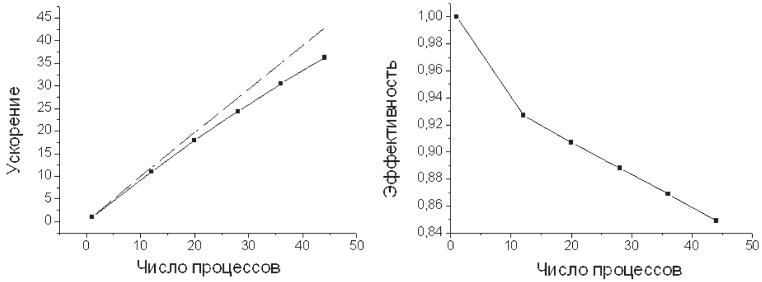


Рис. 3. Зависимости ускорения и эффективности работы параллельной программы от числа процессов

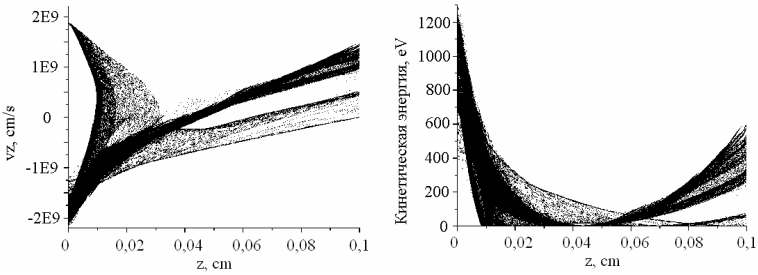
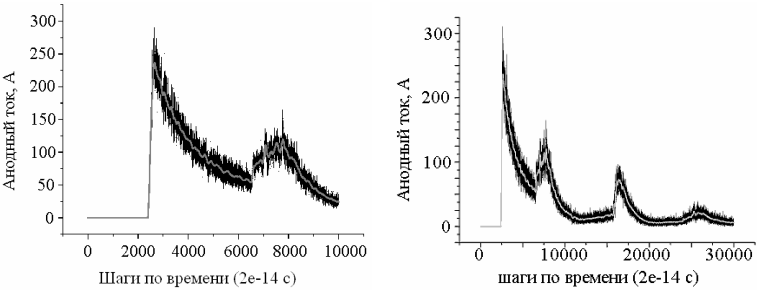


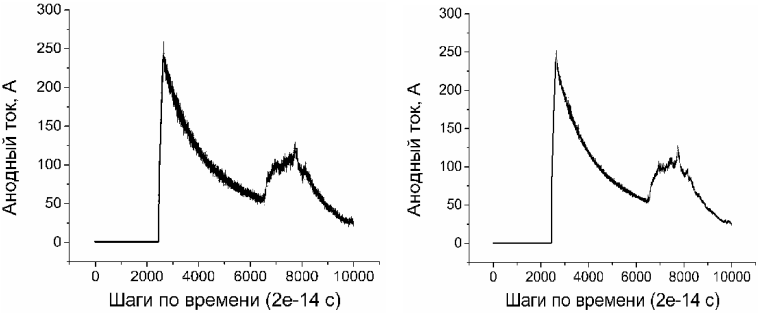
Рис. 4. Зависимости z-компоненты скорости
и кинетической энергии частиц от координаты z



а б

Рис. 5. Зависимости анодного тока от времени (число частиц $\approx 2 \cdot 10^6$)

Также были проведены расчеты с количеством обрабатываемых частиц порядка 10^7 и 10^8 (рис. 6). При этом получено значительное уменьшение шума в анодном токе (см. рис. 5, 6).



а) число частиц $\approx 2 \cdot 10^7$ б) число частиц $\approx 2 \cdot 10^8$

Рис. 6. Зависимости анодного тока от времени

Необходимо отметить, что вследствие отсутствия корректировки полей, о которой упоминалось выше, наблюдается накопление погрешностей решения при счете на значительное число шагов по времени. Это видно из характера поведения анодного тока (рис. 4 а, б) — форма колебаний тока не вполне согласуется с [8, 9]. При дальнейшей доработке кода планируется использовать корректировку полей [2] или расчет плотности тока, при котором выполняется закон непрерывности [10].

Литература

1. **Григорьев Ю. Н., Вшивков В. А., Федорук М. П.** Численное моделирование методами частиц-в-ячейках. — Новосибирск : Издательство СО РАН, 2004. — 360 с.

2. **Бэдсел Ч., Ленгдон А.** Физика плазмы и численное моделирование. — М. : Энергоатомиздат, 1989. — 452 с.

3. **Березин Ю. А., Вшивков В. А.** Метод частиц в динамике разреженной плазмы. — Новосибирск : Наука, 1980. — 96 с.

4. **Хокни Р., Иствуд Дж.** Численное моделирование методом частиц. — М. : Мир, 1987. — 640 с.

5. **Tarakanov V. P.** Users's manual for code KARAT (ver. 7.03, May 97). — Berkley Research Associates, Inc., 1997. — 109 p.

6. **Старченко А. В., Есаулов А. О.** Параллельные вычисления на многопроцессорных вычислительных системах. — Томск : Изд-во Том. ун-та, 2002. — 56 с.

7. **Малышкин В. Э.** Параллельная реализация алгоритмов численного моделирования, Сибирская школа-семинар по параллельным вычислениям / Под ред. проф. А. В. Старченко. — Томск : Изд-во Том. ун-та, 2002. — 129 с.

8. **Миллер Р.** Введение в физику сильноточных пучков заряженных частиц. — М. : Мир, 1984. — 432 с.

9. **Bridges W.B., Birdsall C. K.** Space-charge instabilities in electron diodes // J. Appl. Phys. — 1963. — № 34. — P. 2946.

10. **Скачков М. В.** О проблеме шумов и сохранения заряда в методе крупных частиц // Матем. моделирование. — 2000. — Т. 12. — № 9. — С. 96—108.