

Параллельный алгоритм решения задачи о транспортировке пучка заряженных частиц в вакууме*

А.А. Трунов

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.

1. Введение

Исследование релятивистских электронных пучков (РЭП) является актуальной задачей в связи с постоянно возникающими новыми областями их прикладного использования, а также по причине существования многих нерешённых задач теории пучков заряженных частиц. Аналитическое исследование динамики РЭП под воздействием собственных электрических и магнитных полей возможно только в редких случаях из-за сложности описывающих их уравнений. Как следствие этого основную роль играет численное моделирование. Из универсальных методов, позволяющих проводить моделирование как слаботочных, так и сильноточных РЭП, практически единственным активно развиваемым в последнее время методом является метод «частицы-в-ячейках» (particle-in-cell, PIC) [1-4]. Многие другие используемые методы основаны на методе «частицы-в-ячейках» и являются гибридными, например, использующие гидродинамическое описание электронной компоненты [5], гирокинетическое описание [6] и/или метод Монте-Карло для описания столкновений частиц [7].

2. Постановка задачи

Рассматривается осесимметричная задача о транспортировке пучка заряженных частиц в вакуумном зазоре, ограниченном двумя параллельно расположенными идеально 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, её площадь много меньше площади электрода, с которого осуществляется инжекция.

В модели решаются уравнения движения частиц под действием собственных электрических и магнитных полей. Ввиду осевой симметрии исследуемой системы всюду используется цилиндрическая система координат. Собственные поля, создаваемые частицами, находятся из решения уравнений Максвелла (1) по известным координатам и скоростям частиц.

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

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

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

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

c – скорость света.

* Работа проводится в рамках интеграционного проекта №26 СО РАН.

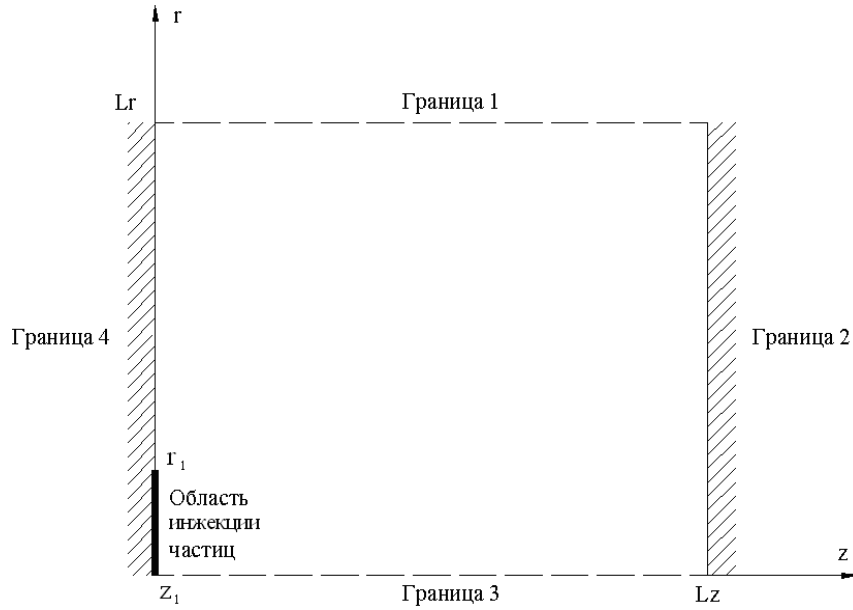


Рис. 1. Вакуумный зазор

Запишем уравнения (1) для компонент векторов собственного электрического и магнитного полей с учётом осевой симметрии задачи $\left(\frac{\partial}{\partial \varphi} = 0\right)$:

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

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

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

где ρ – плотность заряда.

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

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial B_z^i}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r B_r^i) &= 0; \\
 \frac{\partial E_z^i}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r E_r^i) &= 4\pi\rho;
 \end{aligned} \tag{4}$$

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 погрешности округления и погрешности метода [8].

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:

$$z = 0: E_r^i = E_\varphi^i = B_z^i = 0 \quad (0 \leq r \leq Lr - \text{граница идеального проводника}), \text{ граница 4 (рис.1);}$$

$$z = Lz: E_r^i = E_\varphi^i = B_z^i = 0 \quad (0 \leq r \leq Lr - \text{граница идеального проводника}), \text{ граница 2 (рис.1);}$$

$$r = 0: E_\varphi^i = B_r^i = 0 \quad (0 \leq z \leq Lz - \text{ось симметрии}), \text{ граница 3 (рис. 1);}$$

$$r = Lr: E_z^i = E_r^i = E_\varphi^i = B_z^i = B_r^i = B_\varphi^i = 0 \quad (0 \leq z \leq Lz - \text{открытая граница, достаточно удалённая от зарядов}), \text{ граница 1 (рис. 1).}$$

Движение частиц описывается уравнениями Ньютона-Лоренца:

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

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

где \bar{u}_p – релятивистская скорость частицы, $\bar{u}_p = \bar{v}_p \cdot \gamma$;

$\bar{v}_p = (v_{zp}, v_{rp}, v_{\varphi p})$ – скорость частицы;

q – заряд частицы;

m – масса покоя частицы;

\bar{E} – электрическое поле, действующее на частицу;

γ – релятивистский коэффициент, $\gamma = \sqrt{1 + \frac{|\bar{u}_p|^2}{c^2}}$;

\bar{B} – магнитное поле, действующее на частицу.

$\bar{x}_p = (r_p, z_p)$ – радиус-вектор частицы (φ_p не учитывается ввиду осевой симметрии задачи).

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

$$t = 0: v_{zp} \approx 1,9 \cdot 10^9 \text{ см/с}, \quad v_{rp} = 0, \quad v_{\varphi p} = 0;$$

$$0 \leq r_p \leq r_1, \quad 0 \leq z_p \leq z_1.$$

Частицы распределяются по псевдослучайному равномерному закону на небольшом расстоянии от инжектирующего электрода вблизи оси (см. рис. 1). В случае если частица достигает любой границы расчётной области кроме оси симметрии, исследование её движения прекращается. При переходе через ось симметрии (вследствие вычислительной погрешности) частица «отражается», т.е. знаки её радиальной координаты r_p и радиальной компоненты скорости v_{rp} изменяются на противоположные.

3. Вычислительные технологии

Для решения данной задачи применяется метод «частицы-в-ячейках», относящийся к классу гибридных (эйлерово-лагранжевых) методов. Они характерны тем, что эволюция системы частиц на каждом временном шаге разбивается на два этапа. На одном из них при фиксированном положении частиц предварительно вычисляется результат их взаимодействия и (или) их коллективного воздействия на среду. Расчёт ведётся на неподвижной (эйлеровой) сетке, поэтому этап назван эйлеровым. 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, обеспечивающая точное выполнение граничных условий для векторов электромагнитного поля на идеальном проводнике (рис. 2). Смещённые на половину шага в пространстве и времени равномерные сетки обеспечивают второй порядок аппроксимации по времени и пространству [2]. Данная разностная схема успешно используется в коде KARAT [9], широко применяемом для расчёта различных электродинамических систем.

Для интегрирования уравнений движения частиц используется широко распространённый алгоритм Бориса для осесимметричной задачи, основывающийся на алгоритме интегрирования с перешагиванием (leap-frog), который имеет второй порядок аппроксимации и сохраняет импульсы частиц [2]. Вычислительный цикл последовательной программы состоит из попеременного решения двух задач: нахождения собственных электромагнитных полей (эйлеров этап) и интегрирования уравнений движения частиц под действием рассчитанных 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 интерполяции для интегрирования уравнений движения. В качестве такой процедуры применена PIC-интерполяция [4]. При этом вычисление сеточной плотности тока согласовано с изменением плотности заряда в ячейке эйлеровой сетки, что позволяет удовлетворить соотношениям (4) [1].

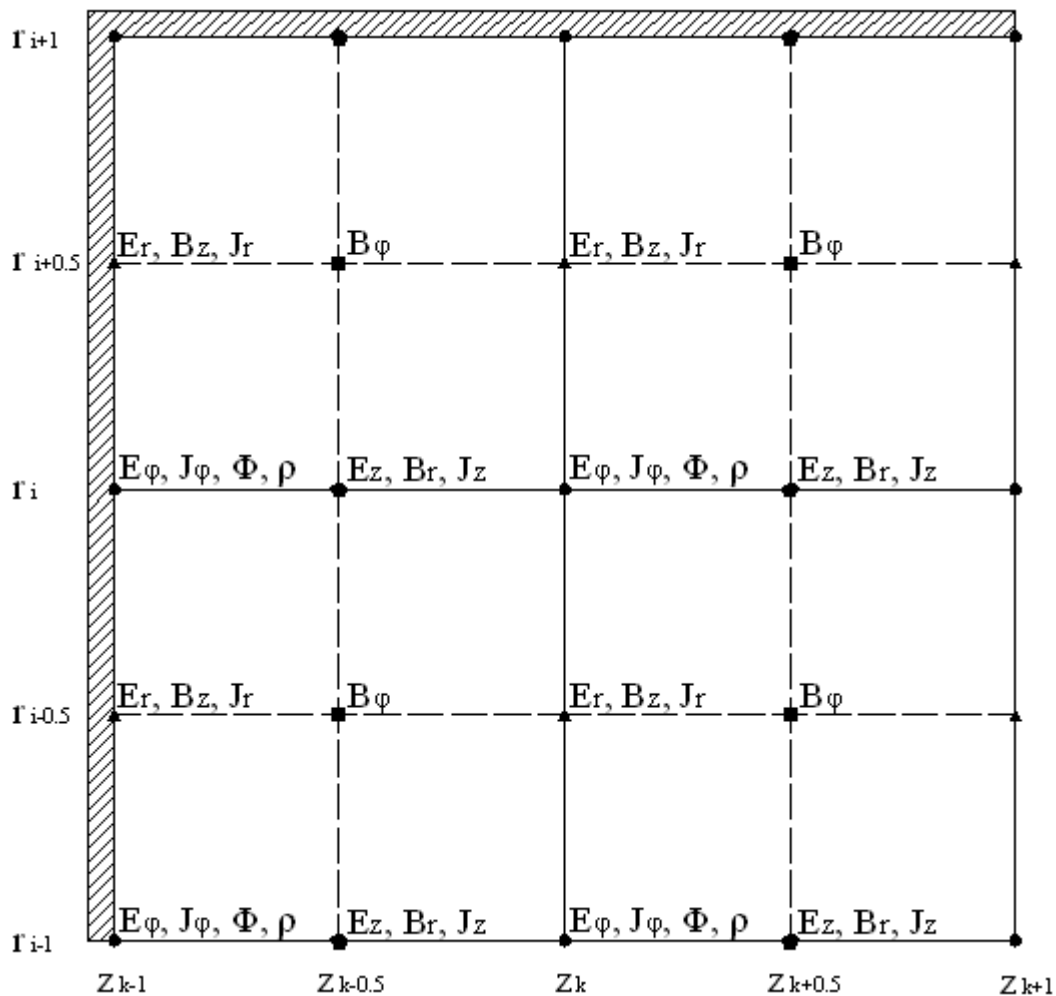


Рис. 2. – Фрагмент сетки и размещение определяемых значений переменных

Выполненный тайминг последовательной программы показал, что доля временных затрат центрального процессора, приходящихся на вычисление электромагнитного поля по уравнениям (1) – (4), составляет приблизительно $3 \cdot 10^{-4}$ при использовании пространственных сеток 100×100 и количества частиц приблизительно $4 \cdot 10^6$. Поскольку выполнение эйлерова этапа алгоритма занимает времени много меньше времени выполнения лагранжева, проведено распараллеливание только лагранжева этапа.

Распараллеливание лагранжева этапа возможно вследствие того, что частицы напрямую не взаимодействуют между собой, взаимодействие их осуществляется косвенно через электромагнитное поле. Вторым существенным фактором является аддитивность плотности тока и её се-

точного аналога. Аддитивность в данном случае означает, что сеточная плотность тока группы частиц равна сумме сеточных плотностей тока каждой из частиц в отдельности.

Параллельный алгоритм решения задачи разработан в рамках модели программирования SPMD (распараллеливание по данным) [10]. При параллельной реализации алгоритма использовался язык программирования Fortran 90 с библиотекой MPI. Структурная блок-схема алгоритма представлена на рис. 3.

Частицы инжектируются в расчётную область, которая является общей для каждого из процессов, при этом производится динамическая балансировка загрузки 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 (5) – (6).

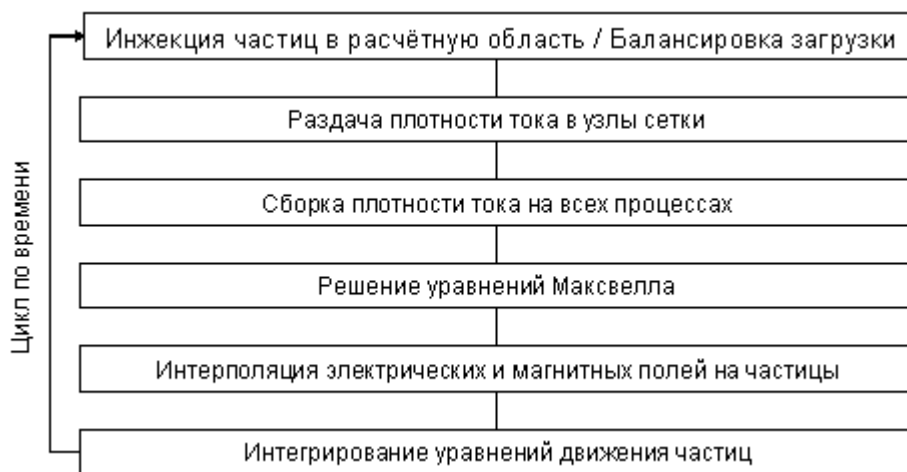


Рис. 3. – Блок-схема параллельного алгоритма

4. Балансировка загрузки

Поскольку число частиц в расчётной области – величина переменная, то возможна ситуация, когда различные процессы обрабатывают существенно различное число частиц, что неудовлетворительно сказывается на производительности параллельной программы в целом. Поэтому необходима процедура выравнивания числа частиц каждого процесса, обычно называемая динамической балансировкой загрузки процессов [11].

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 от остальных процессов 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. Также стоит отметить небольшую трудоёмкость программирования и отладки данного алгоритма. К недостаткам можно отнести ориентированность алгоритма балансировки на задачи, имеющие существенно инжекционный характер.

5. Результаты

На рисунке 4 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 [12] 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.

Полученное на кластере ТГУ СКИФ Cyberia решение (см. рис. 5) хорошо согласуется с решением подобной задачи PIC-кодом KARAT[9] и PIC-кодом OOPIC.

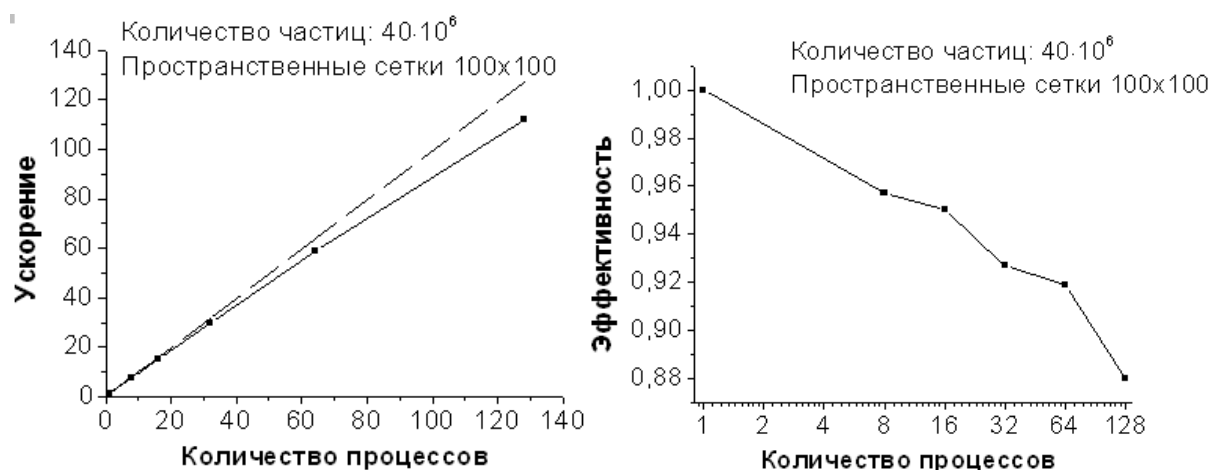


Рис. 4. Зависимости ускорения и эффективности работы параллельной программы от числа процессов

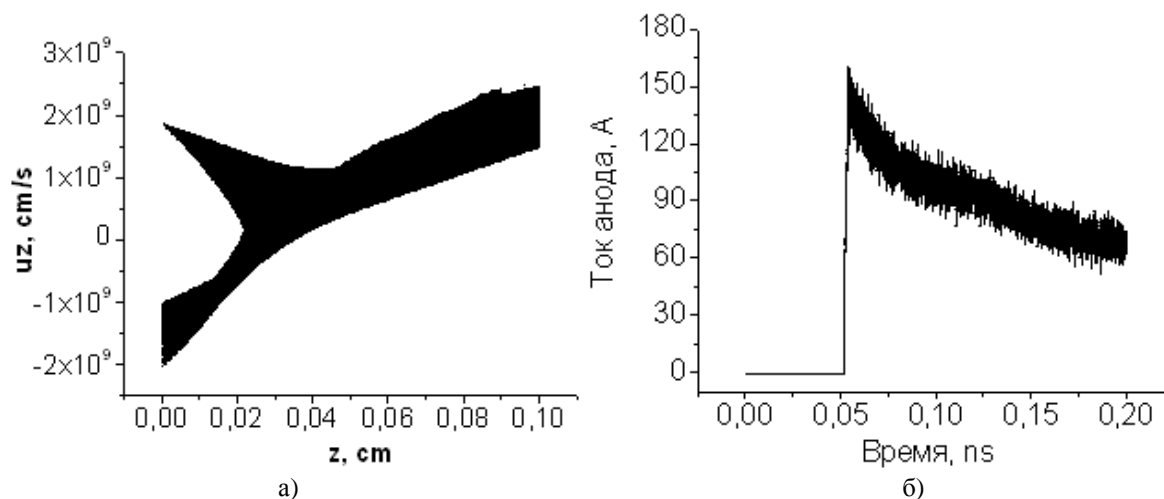


Рис. 5. Зависимость z-компоненты скорости частиц от координаты z (а), зависимость анодного тока от времени (б)

6. Заключение

Необходимо отметить, что вследствие применения процедуры вычисления тока, сохраняющей заряд, наблюдается достаточно высокий уровень счётного шума. При дальнейшей доработке кода планируется разработка алгоритма сглаживания плотности тока (см., например, [13]), а также учёт в модели большего числа физических процессов, происходящих в рассматриваемой системе и аналогичных ей.

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. Liljo J., Karmakar A., Pukhov A., Hochbrucka M. One-dimensional electromagnetic relativistic PIC-hydrodynamic hybrid simulation code H-VLPL (hybrid virtual laser plasma lab) // Computer Physics Communications, 2008, Vol. 179, issue 6, pp. 371-379.
6. Hatzky R., Konies A., Mishchenko A. Electromagnetic gyrokinetic PIC simulation with an adjustable control variates method // Journal of Computational Physics, 2007, Vol. 225, issue 1, pp. 568-590.
7. Sentoku Y., Kemp A.J. Numerical methods for particle simulations at extreme densities and temperatures: Weighted particles, relativistic collisions and reduced currents // Journal of Computational Physics, 2008, Vol. 227, issue 14, pp. 6846-6861.
8. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. – М.: Бином. Лабораторные знания, 2003. – 632 с.
9. Tarakanov V. P. Users's manual for code KARAT (ver. 7.03, May 97), Berkley Research Associates, Inc., 1997. – 109 p.
10. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления – СПб.: БХВ-Петербург, 2002.-608 с.: ил.
11. 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.
12. Беликов Д.А., Говязов И.В., Данилкин Е.А., Лаева В.И., Проханов С.А., Старченко А.В. Высокопроизводительные вычисления на кластерах: Учебн. пособие/Под ред. А.В. Старченко. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2008. – 198 с.
13. Скачков М.В. О проблеме шумов и сохранения заряда в методе крупных частиц. // Математическое моделирование, 2000, т. 12, №9, с. 96-108.