

УДК 621.385: 537.533

Параллельные алгоритмы и технологии расчета интенсивных пучков заряженных частиц на многопроцессорных суперЭВМ

В. М. Свешников

Рассмотрены параллельные алгоритмы расчета потенциала электрического поля, траекторий движения заряженных частиц и объемного заряда. Они основаны на декомпозиции расчетной области на подобласти, сопрягаемые без наложения. Изложены технологии проведения вычислений.

PACS: 41.85.-p

Ключевые слова: алгоритм, частица, объемный заряд, траектория, потенциал.

Введение

Разработка современных электрофизических приборов, в которых рабочим элементом являются интенсивные пучки заряженных частиц, требует знания не только их качественных характеристик, но и количественных оценок параметров, полученных с высокой точностью. Это требование приводит к необходимости выполнения численного моделирования с большими значениями параметров дискретизации такими, как число узлов разностной сетки и число трубок тока. Время вычислений на персональных компьютерах при этом может исчисляться сутками. Оно значительно сокращается, достигая приемлемых величин, при проведении расчетов на многопроцессорных суперЭВМ. Использование вычислительных возможностей современных многопроцессорных систем позволит выйти на новый уровень понимания изучаемых процессов и явлений, существенно усовершенствовать и улучшить различные устройства и технологические процессы, создать новые типы приборов.

Расчет интенсивных пучков заряженных частиц математически представляет собой нелинейную самосогласованную задачу о движении заряженных частиц с учетом собственного пространственного заряда, вносимого частицами. Решение данной задачи включает в себя алгоритмы вычисления потенциала электрического поля, траекторий движения заряженных частиц и объемного заряда. Для работы на многопроцессорных компьютерах их необходимо подвергнуть специальной процедуре распараллеливания, что приводит

не только к модификации имеющихся последовательных алгоритмов, но и к необходимости создания новых параллельных алгоритмов. При этом в параллельные алгоритмы помимо арифметических операций входят операции межпроцессорных обменов информацией, которые выполняются значительно медленнее арифметических операций. Минимизация коммуникационных потерь является важным звеном в разработке параллельных алгоритмов и технологий.

Основные принципы построения параллельных алгоритмов расчета интенсивных пучков заряженных частиц рассмотрены в работе [1]. В настоящей работе даны более детальные алгоритмы решения данной задачи на адаптивных квазиструктурированных сетках. Они базируются на оригинальном варианте широко известного метода декомпозиции расчетной области на подобласти [2, 3], сопрягаемые без наложения. Дискретизация исходной задачи проводится на специальных прямоугольных квазиструктурированных сетках, которые сочетают простоту прямоугольных сеток с адаптивными свойствами неструктурированных сеток. Вычисление потенциала электрического поля осуществляется с помощью итерационного метода декомпозиции, который основан на решении системы линейных алгебраических уравнений, аппроксимирующих уравнение Пуанкаре—Стеклова на границе сопряжения подобластей. Проведены распараллеливание данных алгоритмов и их оптимизация в целях минимизации коммуникационных потерь.

Рассмотрены параллельные алгоритмы вычисления траекторий движения заряженных частиц и объемного заряда.

Постановка задачи.

Декомпозиция расчетной области

Рассмотрена задача расчета интенсивного стационарного пучка заряженных частиц в замкнутой

Свешников Виктор Митрофанович, д-р физ.-мат. наук, зав. лабораторией.

Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН.

Россия, 630090, г. Новосибирск, пр. Академика
Лаврентьева, 6.

E-mail: victor@lapasrv.sccc.ru

Статья поступила в редакцию 18 ноября 2009 г.

двухмерной области $\bar{G} = G\Upsilon\Gamma$, где Γ — граница области G . Математически данная проблема сводится к нелинейной самосогласованной задаче, постановка которой приведена, например, в работе [4]. Ее решение осуществляется каким-либо итерационным методом, который можно записать в виде

$$\rho^{(n+1)} = \Phi(\rho^{(n)}), \quad (1)$$

где ρ — плотность объемного заряда, вносимого частицами;

Φ — функция, определяющая конкретный метод;

$n = 0, 1, \dots$ — номер итерации.

В задачах с ограничением тока эмиссии объемным зарядом в (1) вместо ρ фигурирует j — плотность тока пучка. На каждой итерации (1) решаются следующие вычислительные задачи:

- расчет потенциала и напряженности электрического поля;
- вычисление траекторий движения заряженных частиц;
- расчет объемного заряда.

Все они подлежат распараллеливанию при проведении расчетов на многопроцессорных ЭВМ. Распараллеливание расчета электрического поля осуществляли на основе декомпозиции расчетной области на подобласти, сопрягаемые без наложения, для распараллеливания вычисления траекторий проводили разбиение заряженных частиц на группы. При расчете объемного заряда использовали оба варианта, так как объемный заряд вносят группы частиц, а влияет он на электрическое поле, которое рассчитывается в подобластях. Отметим, что на каждом шаге итерационного процесса (1) применена одна и та же технология распараллеливания, поэтому в дальнейшем предполагается, что рассматриваемая задача линейризована, и потенциал электрического поля ϕ находится из решения краевой задачи

$$\Delta\phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad l\phi|_{\Gamma} = g, \quad (2)$$

где Δ — оператор Лапласа;

l — оператор граничных условий;

ϵ_0 — диэлектрическая постоянная;

ρ, g — известные функции координат.

Рассматриваются граничные условия Дирихле, Неймана, а также смешанные краевые условия. Задача (2) предполагается плоской или осесимметричной, рассматриваемой, соответственно, в декартовой или цилиндрической системе координат.

Проведем декомпозицию расчетной области G (рис. 1). Для этого опишем вокруг нее прямо-

угольник $\bar{R} = \{0 \leq x \leq D_x, 0 \leq y \leq D_y\}$, где D_x, D_y — заданы ($\bar{G} \subset \bar{R}$). Построим в \bar{R} прямоугольную равномерную макросетку

$$\bar{\Omega}_H = \left\{ X_I = IH_x, Y_J = JH_y, I = \overline{0, N_x}, J = \overline{0, N_y}, H_x = \frac{D_x}{N_x}, H_y = \frac{D_y}{N_y} \right\},$$

где N_x, N_y — заданные целые числа с шагами $N_x, N_y \gg h$ (h — максимальный шаг сетки, на которой аппроксимируется задача (2)).

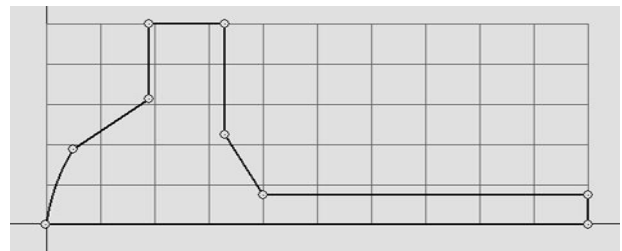


Рис. 1. Декомпозиция расчетной области

При этом область G разбивается на подобласти G_k . Среди них будем различать внутренние $G_k^{(1)}$, граничные $G_k^{(2)}$ и внешние подобласти. Замыкание $\bar{G}_k^{(1)}$ внутренних подобластей состоит только из точек G , граничных $\bar{G}_k^{(2)}$ — из точек G и Γ , а внешние подобласти исключаются из расчетов. Граница сопряжения подобластей, которую мы обозначим через γ , состоит из отрезков координатных линий макросетки $\bar{\Omega}_H$. Точки пересечения ее координатных линий назовем макроузлами.

Исходную краевую задачу (2) переформулируем следующим образом: в замкнутой области \bar{G} требуется найти решение операторного уравнения Пуанкаре—Стеклова

$$Fv = 0 \quad (3)$$

совместно с решением краевой задачи

$$\Delta\phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad l\phi|_{\Gamma} = g, \quad \phi|_{\gamma} = v \quad (4)$$

относительно функций ϕ и v . Здесь v — след функции ϕ на γ , а оператор F определяется как

$$Fv \equiv \left(\frac{\partial\phi(v)}{\partial\bar{n}} \right)_{\gamma}^{(+)} - \left(\frac{\partial\phi(v)}{\partial\bar{n}} \right)_{\gamma}^{(-)},$$

где знаки "+" и "-" означают, что соответствующие величины лежат по разные стороны от γ .

Уравнение (3) следует из условий сопряжения на γ для функции φ и ее нормальных производных.

Расчет потенциала электрического поля

В подобластях G_k построим равномерные прямоугольные подсетки (рис. 2).

$$\bar{\Omega}_{h,k} = \left\{ x_{i_k} = X_I + i_k h_{x,k}, y_{j_k} = Y_J + j_k h_{y,k}, \right. \\ \left. i_k = \overline{0, n_{x,k}}, j_k = \overline{0, n_{y,k}} \right\}$$

с шагами $h_{x,k} = \frac{X_{I+1} - X_I}{n_{x,k}}$, $h_{y,k} = \frac{Y_{J+1} - Y_J}{n_{y,k}}$, при-

чем будем предполагать без существенного ограничения общности, что $n_{x,k} = 2^{m_{x,k}}$, $n_{y,k} = 2^{m_{y,k}}$, где $m_{x,k}, m_{y,k} > 0$ — целые числа. В целях адаптации в граничных подобластях проведем локальную модификацию подсеток, состоящую в сдвиге приграничных узлов, отстоящих от границы на расстояние, меньшее половины шага сетки, в ближайшие точки пересечения координатных линий сетки с границей. Объединение подсеток образует результирующую квазиструктурированную сетку $\bar{\Omega}_h$. Краевая задача (4) методом конечных объемов [5] заменяется на $\bar{\Omega}_h$ приближенной задачей

$$\Delta_h \varphi_h = -\frac{\rho_h}{\varepsilon_0}, \quad l_h \varphi_h|_{\Gamma} = g_2, \quad \varphi_h|_{\gamma} = v_h,$$

где φ_h, ρ_h, v_h — приближенные значения функций; Δ_h, l_h — аппроксимации оператора Лапласа и оператора граничных условий.

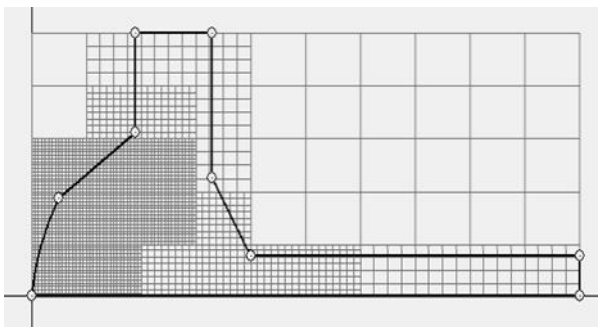


Рис. 2. Квазиструктурированная сетка

Ее решение сводится к решению следующих дискретных подзадач:

$$\Delta_h^{(k)} \varphi_h^{(k)} = -\frac{\rho_h^{(k)}}{\varepsilon_0}, \quad \varphi_h^{(k)}|_{\gamma_k} = v_h^{(k)}, \\ \Delta_h^{(k)} \varphi_h^{(k)} = -\frac{\rho_h^{(k)}}{\varepsilon_0}, \quad l_h^{(k)} \varphi_h^{(k)}|_{\Gamma_k} = g^{(k)}, \quad \varphi_h^{(k)}|_{\gamma_k} = v_h^{(k)},$$

соответственно, во внутренних и граничных подобластях. Здесь индекс k указывает на принадлежность объекта подобласти G_k, γ_k — граница G_k .

На границе сопряжения введем сетку ω_h , состоящую из узлов подсеток $\bar{\Omega}_h^{(k)}$ и не содержащую макроузлов. Пусть N — число узлов ω_h . Оператор F на ω_h заменим его разностным аналогом F_h , который определим как

$$(F_h v_h)_i = \left(d_h^{(+)} \varphi_h^{(+)}(v_h) \right)_i + \left(d_h^{(-)} \varphi_h^{(-)}(v_h) \right)_i, \quad (5) \\ i = \overline{1, N}.$$

В работе [6] показано, что функцию v_h можно найти из решения системы линейных алгебраических уравнений вида

$$A v_h + b = 0; \quad (6)$$

$$\Delta_h^{(p)} v_h = -\frac{\rho_h}{\varepsilon_0}, \quad (7)$$

где $A = \{a_{i,j}, i = \overline{1, N}, j = \overline{1, N+P}\}$ — прямоугольная матрица;

$b = \{b_i, i = \overline{1, N}\}$, $v_h = \{v_{h,i}, i = \overline{1, N+P}\}$ — векторы (P — число макроузлов);

$\Delta_h^{(p)}$ — аппроксимация оператора Лапласа на сеточном шаблоне, включающем узлы сетки ω_h и один из макроузлов.

Для вычисления вектора b присвоим v_h пробный вектор $e^{(0)}$, все элементы которого равны нулю. Решим краевую задачу

$$\Delta_h \psi_h^{(0)} = -\frac{\rho_h}{\varepsilon_0}, \quad l_h \psi_h^{(0)}|_{\Gamma} = g, \quad \psi_h^{(0)}|_{\gamma} = e^{(0)}$$

относительно функции $\psi_h^{(0)}$ и вычислим разности нормальных производных вида (5), которые и являются компонентами вектора b .

Решение систем (6), (7) будем проводить с помощью итерационного процесса вида

$$v_h^{(\xi+1)} = \Lambda(v_h^{(\xi)}, \bar{A} v_h^{(\xi)}), \quad \xi = 0, 1, \dots, K, \quad (8)$$

где Λ — функция, определяющая конкретный алгоритм;

\bar{A} — квадратная матрица, состоящая из прямоугольных блоков $A, \Delta_h^{(p)}$.

Смысл формулы (8) заключается в том, что в данном итерационном процессе используются

лишь сам вектор $v_h^{(\xi)}$ и действие $\bar{A}v_h^{(\xi)}$ матрицы на вектор. Этим требованиям удовлетворяют, например, градиентные итерационные методы [5]. Разумеется, в (8) вместо $v_h^{(\xi)}$ может фигурировать вспомогательный вектор, если этого требует конкретный алгоритм.

Распараллеливание численных алгоритмов

Алгоритмы решения самосогласованной задачи можно разделить на две группы, которые отличаются технологией распараллеливания:

- вычисление потенциала и напряженности электрического поля;
- расчет траекторий и объемного заряда.

Различие в технологии распараллеливания связано с видом и объемом информации, которая должна храниться на одном процессоре.

Пусть вычислительная сеть состоит из N_p процессоров. Проведем декомпозицию расчетной области G на подобласти G_k ($k = \overline{1, K}$) макросеткой Ω_H . Так как внешние подобласти исключаются из расчетов, то $K \leq N_x N_y$.

Для расчета электрического поля объединим внутренние и граничные подобласти в N_p групп. Цель такого объединения — обеспечить приблизительно равную вычислительную нагрузку на всех процессорах. Различные подобласти могут содержать различное число сеточных узлов и, следовательно, расчет электрического поля в них может требовать различное время. В связи с этим простейший способ объединения подобластей в группы – это приблизительное равенство суммарного числа внутренних узлов в них. Так, на рис. 3 процессор $P1$ отвечает за обработку двух подобластей, а каждый из процессоров $P2$ и $P3$ — одной подобласти.

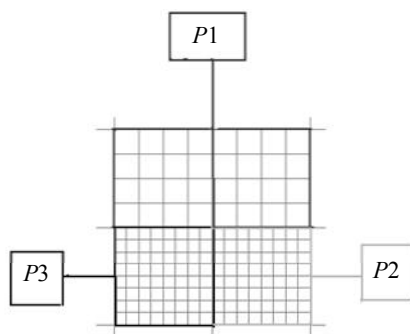


Рис. 3. Отображение подобластей на вычислительную сеть

При расчете траекторий в группы объединяются трубки тока (в дальнейшем — группы траекто-

рий или траекторные группы). Вычисление объемного заряда проводится каждый раз при расчете очередной точки траектории по алгоритмам, изложенным в работе [7].

Проведем отображение рассматриваемой задачи на вычислительную сеть: p -я группа подобластей — p -й процессор, p -я группа траекторий — p -й процессор ($p = \overline{1, N_p}$).

При расчете электрического поля на p -м процессоре должна храниться следующая информация о p -й группе подобластей:

- массив потенциала;
- массивы напряженности;
- массив объемного заряда.

При расчете траекторий и объемного заряда на p -м процессоре должна храниться следующая информация:

- начальные фазовые координаты всех частиц p -й группы траекторий;
- массивы напряженности электрического поля в подобластях, через которые проходит пучок заряженных частиц;
- массив объемного заряда в тех же подобластях.

Снабдим каждую группу подобластей признаком: t -группа, т. е. группа подобластей, в которых хотя бы через одну проходит пучок, f -группа, т. е. группа подобластей, не содержащих пучка.

Параллельный алгоритм решения самосогласованной задачи на каждой итерации (1) по объемному заряду с номером n состоит из следующих шагов.

Шаг 1. Расчет электрического поля.

Для вычисления потенциала электрического поля необходимо решать систему линейных алгебраических уравнений

$$Av_h^{(n)} + b^{(n)} = 0$$

на каждой n -й итерации по объемному заряду (1). Ее решение состоит из двух этапов: вычисление вектора $b^{(n)}$; проведение внутренних итераций (8), имеющих индекс ξ , для расчета $v^{(n)}$ и $\phi^{(n)}$.

На каждом из этих этапов проводятся следующие действия.

А. Решение краевых задач в подобластях с заданными значениями потенциала на внутренней границе γ .

В. Вычисление нормальных производных на γ .

С. Расчет разности производных вида (5).

Этапы А, В являются параллельными и не требуют пересылки информации с других процессоров. На этапе С необходимы производные из смежных подобластей.

Вычисление напряженности электрического поля проводится параллельно численным дифференцированием потенциала, не требуя пересылок.

Шаг 2. Вычисление траекторий осуществляется по следующим этапам.

А. Каждый t -процессор рассылает массивы напряженности на все остальные процессоры, в результате чего на каждом из них будет получена информация, необходимая для расчета траекторий.

В. На p -м процессоре вычисляются траектории частиц p -й группы и их вклад в объемный заряд. Данные расчеты проводятся параллельно без пересылок информации.

Шаг 3. Суммирование объемного заряда.

Суммирование объемного заряда необходимо для вычисления потенциала электрического поля в подобластях и проводится за два этапа.

А. На p -й t -процессор со всех остальных процессоров засылается объемный заряд подобластей p -й группы в специально отведенный для этих целей массив.

В. Проводится суммирование объемного заряда p -й группы на p -м процессоре. В результате суммирования на каждом процессоре будет получен объемный заряд, необходимый для вычисления потенциала.

В предлагаемом алгоритме минимизируется объем пересылаемой информации. Во всех межпроцессорных обменах число единиц пересылаемой информации не превосходит числа сеточных узлов в группе подобластей. Такой объем минимально необходим для работы алгоритмов решения самосогласованной задачи во всех подобластях.

Работа выполнена при финансовой поддержке
РФФИ (проект № 08-01-00526) и СО РАН
(проекты ИП 26, ИП 59).

Л и т е р а т у р а

1. Ильин В. П. // Прикладная физика. 2004. № 1. С. 14.
2. Василевский Ю. В., Ольшанский М. А. Краткий курс по многосеточным методам и методам декомпозиции области. — М.: МГУ, 2007.
3. Quarteroni A., Valli A. Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations. — Oxford Science Publications, 1999.
4. Свешников В. М. // Прикладная физика. 2004. № 1. С. 55.
5. Ильин В. П. Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений. — г. Новосибирск: ИВМиМГ (ВЦ) СО РАН, 2001.
6. Свешников В. М. // Сиб. Ж. Индустр. Мат. 2009. Т. 12. № 3(39). С. 99.
7. Свешников В. М. // Вычислительные технологии. 2004. Т. 9. № 3. С. 90.

З а к л ю ч е н и е

Parallel algorithms and technologies for calculation of intensive charged particles beams on multiprocessing super computers

V. M. Sveshnikov

Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics,
6 Lavrent'ev av., Novosibirsk, 630090, Russia
E-mail: victor@lapasrv.sccc.ru

Parallel algorithms and technologies for calculation of intensive charged particle beams are under consideration. They are based on decomposition of computational domain on the subdomains interfaced without overlapping. Calculation technologies are stated.

PACS: 41.85.-p

Keywords: algorithm, particle, volume charge, trajectory, potential.

Bibliography — 7 references.

Received 18 November 2009