

БЕРЕНДЕЕВ Е. А.,  
ИВАНОВ А. В.,  
ЛАЗАРЕВА Г. Г.,  
СНЫТНИКОВ А. В.

## ЭФФЕКТИВНОЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СУПЕРЭВМ ДЛЯ РЕШЕНИЯ БОЛЬШИХ ЗАДАЧ ФИЗИКИ ПЛАЗМЫ МЕТОДОМ ЧАСТИЦ В ЯЧЕЙКАХ

Рассмотрены задачи взаимодействия релятивистского электронного пучка с плазмой и динамики плазменных электронов в ловушке с инверсными магнитными пробками и мультипольными магнитными стенками. Модели построены на основе метода частиц в ячейках. Такие задачи требуют большого объема вычислений и могут быть решены только с применением мощных суперЭВМ. Для равномерной и полной загрузки вычислительных узлов выполнена смешанная эйлерово-лагранжевая декомпозиция. Такой подход позволяет достичь высокой масштабируемости параллельного алгоритма. В результате вычислительных экспериментов удалось воспроизвести модуляцию плотности плазмы при взаимодействии с релятивистским электронным пучком и получить траектории плазменных электронов в магнитной ловушке.

Two problems of computational plasma physics are considered. The first is the interaction of relativistic electron beam with plasma. The second is plasma electron dynamics in the magnetic trap with inverse magnetic mirrors and multipole magnetic walls. The models are built on the basis of Particle-In-Cell method. The problems of this sort require large amount of computations. Thus they are feasible only with supercomputers. In order to achieve uniform and complete workload of the computational nodes of a supercomputer mixed Eulerian-Lagrangian decomposition is used. As a result of computational experiments on the interaction of relativistic electron beam with plasma the density modulation was reproduced that occurs also in real experiments. For the problem of plasma electron dynamics in the magnetic trap the trajectories of electrons were obtained.

### 1. Введение

Полноценное исследование физических процессов в плазме может быть проведено только при комплексном подходе, сочетающем как экспериментальные исследования, так и исследования вычислительными методами, адекватно описывающими эти процессы. Для того чтобы избежать упрощений и получить качественно правильную физическую картину, необходимо построить максимально полную математическую модель. Обычно принято, что хорошей исходной моделью полностью ионизованной бесстолкновительной плазмы является система уравнений, состоящая из кинетических уравнений Власова [1] для функций распределения ионов и электронов и уравнений Максвелла с самосогласованными электромагнитными полями:

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{r}} + \vec{F}_\alpha \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{p}} = 0, \quad (1)$$

$$\text{rot} \vec{H} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad (2)$$

$$\text{rot} \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}, \quad (3)$$

$$\text{div} \vec{E} = 4\pi\rho, \quad (4)$$

$$\text{div} \vec{H} = 0. \quad (5)$$

Здесь индексом  $\alpha$  обозначается сорт частиц (ионы и электроны);  $f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t)$  – функция распределения частиц сорта  $\alpha$ ;  $q_\alpha$  – заряд;  $m_\alpha$  – масса частицы;  $\vec{j}$  – плотность тока;  $\rho$  – плотность пространственного заряда;  $\vec{E}$  – напряжённость электрического поля;  $\vec{H}$  – напряжённость магнитного поля. При этом

$$\vec{F}_\alpha = \frac{q_\alpha}{m_\alpha} (\vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{v}, \vec{H}]), \quad (6)$$

$$\vec{j} = \sum_\alpha q_\alpha \int f_\alpha \vec{v} d\vec{v}, \quad (7)$$

$$\rho = \sum_\alpha q_\alpha \int f_\alpha d\vec{v}. \quad (8)$$

Наиболее универсальным и широко применяемым методом для решения этих уравнений является метод частиц в ячейках [2]. Общая схема этого метода состоит в том, что плазма представляется набором достаточно большого числа модельных частиц, движущихся в соответствии с законами классической механики в

самосогласованном электромагнитном поле. При этом каждая модельная частица характеризует движение многих реальных частиц и становится носителем некоторого набора характеристик среды, таких как заряд, масса, импульс, кинетическая энергия и т.д. Часто для исследования тонких физических эффектов, а также для уменьшения уровня нефизических шумов необходимо использовать до  $10^9 - 10^{11}$  частиц и  $10^6 - 10^8$  узлов сетки.

Несмотря на внутренний параллелизм метода частиц – траектории модельных частиц могут быть вычислены независимо друг от друга – построение параллельного масштабируемого алгоритма представляет собой нетривиальную задачу и может зависеть от рассматриваемого физического процесса. В настоящей работе построение такого алгоритма рассматривается для двух различных физических задач – взаимодействия релятивистского электронного пучка с плазмой и динамика плазменных электронов в магнитной ловушке.

Обе задачи рассматриваются в двумерной постановке.

## 2. Решение основных уравнений

Решение уравнения Власова производится в лагранжевых координатах – характеристики этого уравнения описывают движение модельных частиц:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{q_\alpha}{m_\alpha} (\vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{v}, \vec{H}]), \quad \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}. \quad (9)$$

В этом случае для определения траектории частиц можно использовать следующую схему:

$$\frac{\vec{p}_i^{m+1/2} - \vec{p}_i^{m-1/2}}{\tau} = \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \left( \vec{E}_i^m + \frac{1}{c} \left[ \frac{\vec{v}_i^{m+1/2} + \vec{v}_i^{m-1/2}}{2}, \vec{H}_i^m \right] \right), \quad (10)$$

Здесь  $\tau$  – шаг по времени; верхний индекс указывает на момент времени, в который вычисляется искомая функция. Индекс  $i$  указывает на номер частицы, для которой производятся вычисления.

Уравнения Максвелла решаются в эйлеровых переменных. Необходимые для их решения плотности заряда и тока определяются по скоростям и координатам отдельных частиц:

$$\rho(\vec{r}, t) = \sum_j q_j R(\vec{r}, \vec{r}_j(t)), \quad (11)$$

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \sum_j q_j \vec{v}_j(t) R(\vec{r}, \vec{r}_j(t)). \quad (12)$$

Здесь  $q_j$  – заряд частицы с номером  $j$ ; функция  $R(\vec{r}, \vec{r}_j(t))$  (функция ядра) характеризует форму, размер частицы и распределение в ней заряда.

В настоящей работе плотности заряда и плотности тока вычисляются по формулам, предложенным Вилласенором и Бунеманом [3]. При таком подходе разностный аналог уравнения (4) выполняется автоматически, что позволяет существенно сократить время вычислений.

Для нахождения электрических и магнитных полей обычно используется схема, предложенная Лэнгдоном и Лазинским [4] в 1976 г., в которой которых поля определяются из разностных аналогов законов Фарадея и Ампера:

$$\frac{\vec{H}^{m+1/2} - \vec{H}^{m-1/2}}{\tau} = -c \operatorname{rot}_h \vec{E}^m, \quad (13)$$

$$\frac{\vec{E}^{m+1} - \vec{E}^m}{\tau} = -4\pi \vec{j}^{m+1/2} + c \operatorname{rot}_h \vec{H}^{m+1/2}. \quad (14)$$

Таким образом, схема решения задачи на одном шаге разбивается на два этапа. На первом (лагранжевом) этапе по схеме (10) вычисляются скорости и координаты частиц. Здесь же определяются компоненты плотности тока  $\vec{j}^{m+1/2}$  и плотности заряда  $\rho^{m+1}$ . На втором (эйлеровом) этапе по схеме (13)-(14) решаются уравнения Максвелла, т.е. определяются значения функций  $\vec{H}^{m+1/2}$  и  $\vec{E}^{m+1}$  в узлах сетки. Значения электрических и магнитных полей, действующих на каждую частицу, вычисляются с помощью билинейной интерполяции.

## 3. Параллельная реализация алгоритма

Существует несколько параллельных реализаций метода частиц в ячейках – равномерное распределение частиц по процессорам, эйлерова декомпозиция области и распределение частиц по процессорам в зависимости от их положения, смешанная эйлерово-лагранжевая декомпозиция, распределение частиц в зависимости от времени расчёта одного шага на каждом процессоре. В настоящей работе используется смешанная эйлерово-лагранжевая декомпозиция. Область делится на несколько подобластей вдоль одного измерения. На рисунке 1 приведена иллю-

страция используемого метода – с каждой подобластью связана группа процессоров и частицы в каждой подобласти разделены между всеми процессорами группы. Различные символы, обозначающие частицы: круг, квадрат, треугольник, ромб означают принадлежность частиц к разным группам процессоров, цвет фигуры выделяет принадлежность к разным процессорам в группе. Каждая группа решает уравнения Максвелла только в своей подобласти. В этом случае происходит обмен граничными значениями полей между группами, также группы должны обмениваться частицами, перелетевшими в соответствующую подобласть. Внутри группы происходит обмен значениями плотности тока (как и в первом варианте распараллеливания).

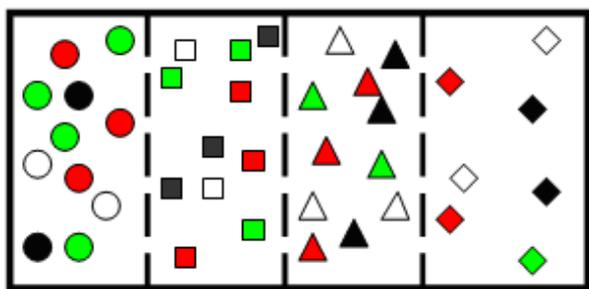


Рис. 1. Декомпозиция области.

Как было показано в работе [5], использование эйлерово-лагранжевой декомпозиции может дать существенное ускорение расчёта по сравнению с другими реализациями – это связано с уменьшением объёма пересылаемых данных и более эффективным использованием кэш-памяти процессорных ядер. В то же время из-за декомпозиции области может возникать дисбаланс по количеству частиц на разных процессорах, что приводит к неравномерной загрузке вычислительных ядер. Использо-

вание одномерной декомпозиции отчасти помогает решить эту проблему.

#### 4. Эффективность распараллеливания. Масштабируемость.

Для определения оптимального распределения процессоров по области, нами был проведён ряд вычислительных экспериментов. Расчёты проводились на следующих вычислительных системах

- Суперкомпьютер «Ломоносов». Научно-исследовательский вычислительный центр МГУ имени М.В.Ломоносова, г. Москва. Процессоры Intel Xeon 5570 2932 МГц, Cache 8 Mb
- Суперкомпьютер «МВС-100К» Межведомственный Суперкомпьютерный Центр РАН, г. Москва. Процессоры Intel Xeon X5450 2932 МГц, Cache 12 Mb
- Суперкомпьютер «НКС-30Т» (НКС-G6) Сибирского Суперкомпьютерного Центра ИВМиМГ СО РАН, г. Новосибирск. Процессоры Intel Xeon E5540 2530 МГц, Cache 8 Mb
- Кластер Информационно-вычислительного центра «Новосибирский государственный университет», г. Новосибирск. Процессоры Intel Xeon E5540 2530 МГц, Cache 8 Mb / Intel Xeon X5670 2932 МГц, Cache 12 Mb

Рассматривалась следующая задача:

Число узлов 1024x1024, общее число процессорных ядер 128

Число частиц в ячейке 250 (Всего 262 144 000 частиц)

Область делится 16,32,64 или 128 подобластей.

На рисунке 2 показано время выполнения десяти шагов алгоритма (в секундах) в зависимости от варианта разбиения области для различных вычислительных систем.

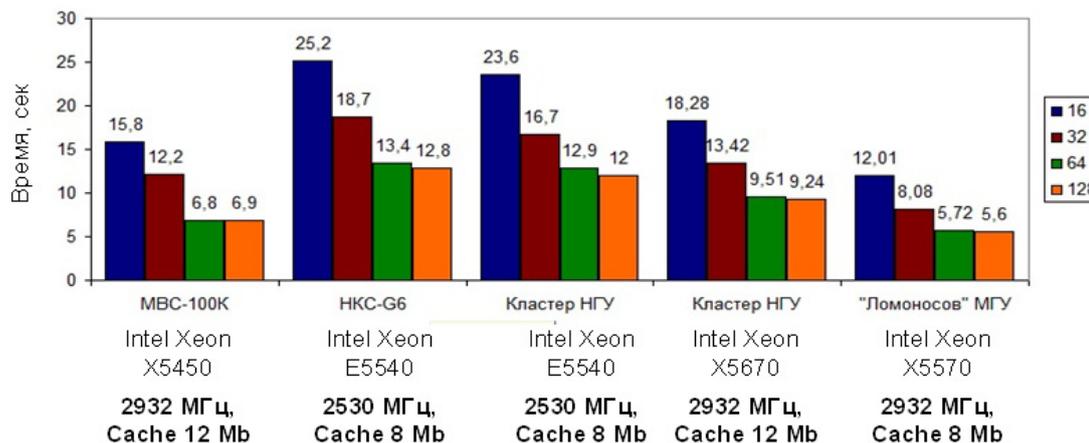


Рис. 2. Время расчёта задачи

Как видно из рисунка 2, оптимальным разбиением используемой сетки по процессорам является декомпозиция области на 64 подобласти. Такое разбиение обеспечивает наиболее полную загрузку вычислительных ядер (меньше времени тратится на пересылки, больше на вычисления). При этом полученный результат справедлив для всех рассматриваемых суперЭВМ

Также проведено исследование масштабируемости параллельного алгоритма на суперкомпьютере «Ломоносов».

В таблицах 1 и 2 представлено время расчёта одного шага (в секундах) при использовании различного количества процессорных ядер, а также полученное при этом ускорение. В связи с большим объёмом требуемой оперативной памяти, масштабируемость рассматривается относительно 256 (621 440 000 частиц) и 1024 (5 242 880 000 частиц) процессорных ядер. Использование меньшего количества процессорных ядер не представляет собой интереса с точки зрения реальных задач.

**Табл.1. Время счёта одного шага (в секундах) для различного числа процессоров и полученное ускорение.**

Общее количество используемых процессорных ядер	Число процессорных ядер на подобласть	Время расчёта одного шага, сек.	Ускорение по сравнению с 256 процессорными ядрами
256	4	2,737	1
512	8	1,448	1,89
1024	16	0,763	3,58

**Табл.2. Время счёта одного шага (в секундах) для различного числа процессоров и полученное ускорение.**

Общее количество используемых процессорных ядер	Число процессорных ядер на подобласть	Время расчёта одного шага, сек.	Ускорение по сравнению с 1024 процессорными ядрами
1024	16	1,411	1
2048	32	0,778	1,81
4096	64	0,362	3,87
8192	128	0,183	7,71

Как видно из таблиц 1 и 2, увеличение числа процессоров внутри каждой подобласти практически не добавляет дополнительных пересылок, что обеспечивает высокую масштабируемость алгоритма – до нескольких тысяч вычислительных ядер. Существенное сокращение времени выполнения одного шага алгоритма – до 0,183 с. на 8192 процессорных ядрах – позволяет решить реальные задачи, для которых необходимо рассчитать динамику частиц до 1000 000 шагов, за разумное время – порядка нескольких суток.

### **5. Взаимодействие релятивистского электронного пучка с плазмой**

В настоящей работе рассматриваются две различные задачи, требующие больших вычислительных ресурсов – взаимодействие релятивистского электронного пучка с плазмой и динамика плазменных электронов в магнитной ловушке. Использование суперЭВМ позволяет решить общую систему уравнений (1)-(5), описывающую исследуемые физические

процессы, не прибегая к дополнительным упрощениям. Это даёт возможность изучить эти две задачи с единых позиций.

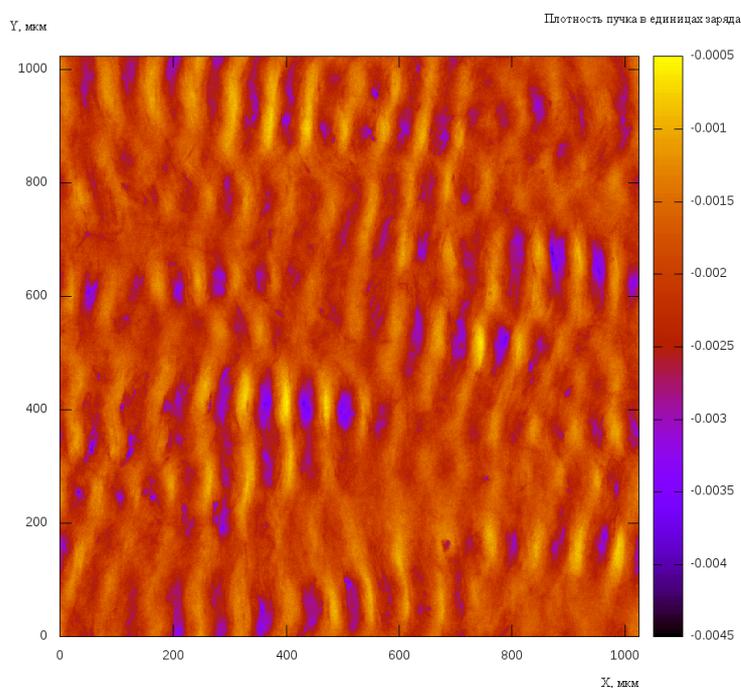
Одной из важнейших задач физики плазмы является нагрев высокотемпературной плазмы в термоядерных установках. В настоящей работе на основе численного моделирования исследуются процессы установления и нелинейной эволюции квазистационарной плазменной турбулентности, возбуждаемой мощным электронным пучком в установках УТС. Данная проблема имеет важное значение не только для экспериментов по турбулентному нагреву плазмы в открытых ловушках, где электронный пучок напрямую инжектируется в плазму, но и для схем инерциального термоядерного синтеза, где мощные электронные потоки в мишенях генерируются лазерным излучением. При этом наибольший интерес представляют параметры пучка и плазмы, которые характерны для экспериментов по нагреву

плазмы в открытой ловушке ГОЛ-3 (ИЯФ СО РАН) [6]. Рассматривается следующая задача:

в области, имеющей форму прямоугольника, находится полностью ионизованная плазма, состоящая из электронов и ионов. Дополнительно в область вводится пучок заряженных частиц – набор электронов, движущихся в одном направлении с достаточно большой относительно остальных частиц скоростью; предполагается, что пучок уже полностью вошёл в моделируемую область. Модельные электроны пучка имеют меньшую массу, нежели модельные электроны плазмы (отношение их масс равно отношению плотности плазмы и плотности пучка [7]). Все частицы (как плазмы, так и пучка) распределены по области равномерно. Условия на границах области берутся периодическими.

Характеристики задачи: температура плазмы 500 эВ, отношение плотности пучка к плотности плазмы  $2 \cdot 10^{-3}$ . Размер области 1024 микрометра по каждому направлению. Сетка 1024x1024 узла, общее число модельных частиц 5 242 880 000. Расчёты проводились на суперкомпьютере «Ломоносов» с использованием до 8192 процессорных ядер.

Была исследована эволюция плотности заряда электронного пучка с развитием плазменной турбулентности. В начальный момент времени заряд электронов пучка распределен по области равномерно. При взаимодействии с плазмой в результате резонансных колебаний образуются участки модуляции плотности – от -0,0008 до -0,0037 (при начальной плотности заряда -0,002), т.е. модуляция составляет более 200% (рисунок 3)

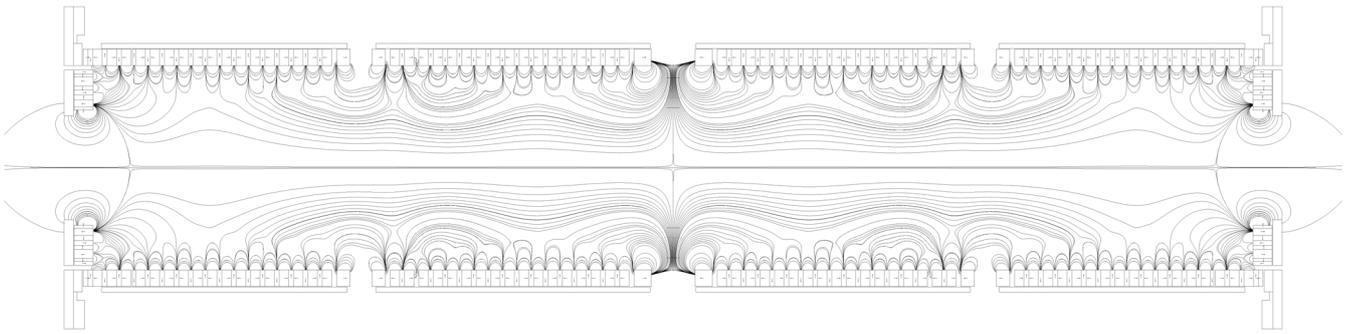


*Рис. 3. Плотность заряда электронного пучка в единицах заряда электрона.*

## 6. Динамика плазменных электронов в ловушке с инверсными магнитными пробками и мультипольными магнитными стенками.

Другой, не менее важной задачей физики плазмы, является получение мощных нейтральных пучков для установок управляемого термоядерного синтеза. Наиболее эффективным методом получения таких пучков является нейтрализация пучков отрицательных ионов в плазменной ловушке – мишени. В ИЯФ СО РАН предложена линейная ловушка

с инверсными пробками (с обратным магнитным полем). Для ограничения радиальных потерь плазмы используются мультипольные магнитные стенки кольцевой геометрии. В осесимметричной ловушке с кольцевым магнитным полем отсутствует азимутальный компонент поля, а так же отсутствует стационарное азимутальное электрическое поле. На рисунке 4 представлена геометрия системы кольцевых магнитов с железными экранами с магнитным полем, представляющим ловушку мишенной плазмы



**Рис. 4. Геометрия магнитной системы плазменной ловушки-мишени и силовые линии магнитного поля.**

Оценка и минимизация потерь плазмы в широко апертурные проходные отверстия в торцах, в которых находятся инверсные магнитные пробки, а также через цилиндрические мультипольные магнитные стенки ловушки на ее вакуумную камеру, может быть исследована только с помощью математического моделирования. При этом, наиболее полно динамика плазменных электронов может быть описана уравнением Больцмана

$$\frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \vec{r}} + \vec{F}_{\alpha} \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \vec{p}} = St\{f_{\alpha}\}, \quad (15)$$

и системой уравнений Максвелла (2)-(5).

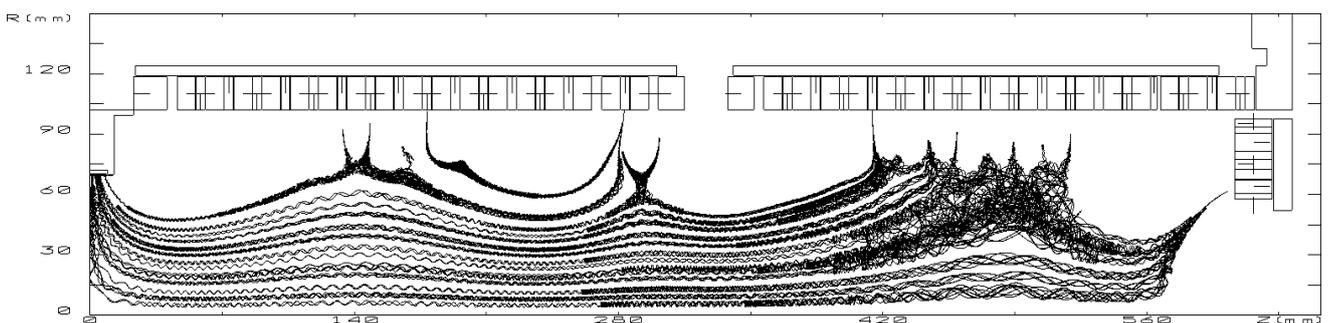
Здесь  $St\{f_{\alpha}\}$  – функция, описывающая рассеяние плазменных электронов.

Решение уравнения Больцмана можно свести к решению уравнения Власова (1) и корректировке траекторий частиц с учётом рассеяния, используя методы Монте-Карло. В

настоящей работе рассеяние не учитывается и будет являться предметом дальнейшего исследования. Таким образом, решается система (1)-(5) в цилиндрической системе координат. Особенностью данной задачи является движение частиц под воздействием магнитных полей с большими градиентами. Для ускорения расчёта траекторий частиц использовался динамический шаг по времени, обеспечивающий изменение напряжённости магнитного поля не более 20% за один шаг.

Характеристики задачи: температура плазмы 5 эВ, размер области 6.1 см x 1.2 см. Сетка 4096x128 узлов, общее число модельных частиц 5 242 880 000. Расчёты проводились на суперкомпьютере «Ломоносов» с использованием до 8192 процессорных ядер.

На рисунке 5 показаны траектории некоторых электронов плазмы.



**Рис. 5. Траектории движения электронов мишени плазмы под воздействием магнитного поля**

Из рисунка 5 видно, что инверсные магнитные пробки на торцах достаточно хорошо удерживают плазму в ловушке, в то же время присутствуют потери плазмы на стенках ловушки и границе инверсных пробок. Для количественного описания потерь плазмы в дальнейшем будет учтено влияние рассеяния электронов плазмы.

## 7. Заключение

В работе показано, что использование современных суперЭВМ позволяет решать рассмотренные задачи физики плазмы методом частиц в ячейках, что даёт возможность с единых позиций изучать физические процессы. Обе рассмотренные задачи достаточно ресурсоёмки, для их решения необходимо использовать миллиарды модельных частиц и доста-

точно подробную сетку. Даже в двумерном случае это представляет огромную вычислительную сложность. Тем не менее, использование масштабируемого параллельного алгоритма, обеспечивающего равномерную загрузку вычислительных ядер, позволяет максимально эффективно применять всю мощь современных суперЭВМ для решения больших задач. В частности, для задачи взаимодействия релятивистского электронного пучка с плазмой удалось воспроизвести модуляции плотности плазмы. Для задачи о плазменной ловушке-мишени рассчитана динамика дви-

жения плазменных электронов, что позволит в дальнейшем оценить потери частиц на стенки камеры и оптимизировать магнитную систему ловушки.

## 8. Благодарности

Работа выполнена при поддержке интеграционного проекта СО РАН № 105 и грантов РФФИ № 11-01-00178, 11-01-00249, 12-07-00065. Также коллектив авторов выражает благодарность Вшивкову В.А., Месяц Е.А. и Федоруку М.П.

## Список литературы

1. Власов А.А. Теория многих частиц. М.-Л.: ГИТТЛ, 1950, 348 с.
2. Березин Ю.А., Вшивков В.А. Метод частиц в динамике разреженной плазмы. – Новосибирск: "Наука", 1980.
3. Villasenor J., Buneman O. Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solver. // *Computer Phys. Comm.* – 1992. – Vol. – 69, P.306-316.
4. Langdon A.B, Lasinski B.F. Electromagnetic and relativistic plasma simulation models. // *Meth. Comput. Phys.* – 1976. – Vol.16. – P.327-366,.
5. Берендеев Е.А., Ефимова А.А.: Реализация эффективных параллельных вычислений при моделировании больших задач физики плазмы методом частиц в ячейках. // Сборник трудов Международной научной конференции «Параллельные вычислительные технологии 2012». – 2012, – С.380-385,
6. Бурдаков А.В., Воропаев С.Г., Губер А.Ф., Карюкин А.В., Койдан В.С., Лебедев С.В., Меклер К.И., Мельников П.И., Никифоров А.А., Поступаев В.В., Чикунов В.В., Щеглов М.А. // Эксперименты по двуступенчатому нагреву плотной плазмы на установке ГОЛ-3. Новосибирск: Препринт ИЯФ СО РАН, 1992, – № 12, – С. 3-10, ,
7. Вшивков В.А., Снытников А.В. Вычисление температуры при моделировании высокотемпературной плазмы методом частиц-в-ячейках на суперЭВМ. // *Научный вестник НГТУ*, Новосибирск 2010. – №3 (40). – С:61-68.