

УДК 004.382.2; 004.272; 519.6; 536.2; 539.4; 539.3

FRIC3D — ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ КОД ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

В. Г. Султанов¹, Д. А. Григорьев¹, В. В. Ким¹, И. В. Ломоносов¹,
А. В. Матвейчев¹, А. В. Острик¹, А. В. Шутов¹

Рассматривается программный комплекс FRIC3D (finite-size particles in cell, метод конечно-размерных частиц в ячейке) для моделирования высокоэнергетических воздействий на конденсированные среды. Обсуждаются методы распараллеливания используемых в нем численных схем и результаты тестирования на российских суперЭВМ. Изложены результаты моделирования действия пучков тяжелых ионов на мишени. Работа выполнена при финансовой поддержке программы № 14 Президиума РАН “Фундаментальные проблемы информатики и информационных технологий”, подпрограммы 14.1 “Интеллектуальные технологии и математическое моделирование”. Статья подготовлена по материалам доклада авторов на международной конференции “Параллельные вычислительные технологии” (PaVT-2009; <http://agora.guru.ru/pavt2009>).

Ключевые слова: параллельное программирование, пучки ионов, параллельный алгоритм энергоклада ионов, уравнение теплопроводности, модели реальных термодинамических, упругопластических и прочностных свойств.

1. Введение. Современные ускорители заряженных частиц — LHC, Cern (large hadron collider, большой адронный коллайдер) и FAIR, Darmstadt (facility for anti-proton and ion research, установка для ионных и антипротонных исследований) — представляют собой наиболее сложные и дорогостоящие из созданных и проектируемых в XXI веке устройств. Планируемые с их помощью эксперименты позволяют достичь рекордных для физики высоких энергий параметров и ответить на ряд фундаментальных вопросов: синтез новых элементов и их изотопов, поиск “острова стабильности” тяжелых элементов, генерация экзотических состояний вещества (кварк-глюонной плазмы), соответствующих, согласно современным представлениям, моменту рождения Вселенной при “Большом взрыве”, реализация управляемого термоядерного синтеза и многих других. К ним также следует отнести возможность использования пучков ионов для генерации неидеальной плазмы.

Вопросы безопасного функционирования ускорителей (например, при сбое системы фокусировки пучок LHC способен расплавить 500 кг меди), а также долговременного использования ионных источников и мишеней крайне важны. Очевидно, что при решении указанных задач на первое место выступают методы численного прогнозирования последствий взаимодействия пучков ионов с элементами конструкций и установок.

При воздействии интенсивных пучков ионов на вещество в нем происходят различные физические процессы: поглощение энергии ионов и нагрев, приводящий, в зависимости от величины вложенной энергии, к плавлению, испарению и даже ионизации. В мишени при этом формируется газодинамическое течение с большими градиентами плотности, давления и температуры — от горячей плотной жидкости и неидеальной плазмы при температуре до $300\text{--}400 \times 10^3$ К и давлении до 100 ГПа по оси пучка до разреженного газа по краям. При проектировании ионных источников и мишеней для задач исследования ядерного вещества важно сохранение объекта при длительном воздействии, и для этих задач актуальными являются уже эффекты упругопластического деформирования, разрушения и теплопроводности. Указанные физические процессы происходят в объектах с характерными размерами порядка 0.1–10 см за интервалы времени от 5×10^{-8} до 10^{-3} с.

Таким образом, для прогнозирования и обработки пучковых экспериментов необходимо численное моделирование процессов в объектах трехмерной геометрии, которое должно учитывать особенности энер-

¹ Институт проблем химической физики (ИПХФ) РАН, просп. акад. Н. Н. Семенова, д. 1, 142432, Московская обл., Ногинский р-н, г. Черноголовка; В. Г. Султанов, ст. науч. сотр., e-mail: sultan@icp.ac.ru; Д. А. Григорьев, мл. науч. сотр., e-mail: grad@icp.ac.ru; В. В. Ким, науч. сотр., e-mail: kim@icp.ac.ru; И. В. Ломоносов, зав. лабораторией, e-mail: ivl143@yahoo.com; А. В. Матвейчев, науч. сотр., e-mail: matveichev@icp.ac.ru; А. В. Острик, вед. науч. сотр., e-mail: ostrik@icp.ac.ru; А. В. Шутов, ст. науч. сотр., e-mail: shutov@icp.ac.ru

говклада ионов в веществе, а также реальные термодинамические, реологические и транспортные свойства. Во всей полноте это возможно только с применением техники массивных параллельных вычислений на суперЭВМ.

В настоящей статье рассматривается программный код FPIC3D (finite-size particles in cell, метод конечно-размерных частиц в ячейке), реализующий параллельный трехмерный метод для численного моделирования процессов нестационарного высокоэнергетического воздействия [1, 2]. Численный алгоритм метода и его параллельная реализация являются оригинальной авторской разработкой, выполненной в ИПХФ РАН.

2. Численный алгоритм. Как и в методе частиц Харлоу, в применяемом алгоритме сплошная среда представляется в виде ансамбля дискретных подвижных частиц — индивидуальных объемов, которые хранят и переносят полную информацию о параметрах течения в данной точке расчетного поля. В отличие от этого метода, где лагранжев перенос реализуется точечными массами, в FPIC3D-коде используются конечно-размерные частицы. Разработаны алгоритмы дробления и объединения частиц, использование которых в трехмерном случае не приводит к побочным эффектам искажения формы ненагруженных тел при их перемещениях.

Система уравнений в частных производных, описывающая движение идеальной сжимаемой среды, интегрируется численно. Неизвестные значения пространственных производных давления и компонент скорости в частице рассчитываются с использованием неподвижной в пространстве прямоугольной регулярной эйлеровой сетки. Совокупность центров частиц, в которых определены их параметры, представляет собой подвижную нерегулярную лагранжеву сетку. По известным термодинамическим параметрам — плотности и энергии — для каждой частицы рассчитывается давление. Определенное таким образом в узлах лагранжевой сетки поле давления, как и известное поле скоростей, интерполируется в узлы эйлеровой сетки, на которой и происходит вычисление необходимых пространственных производных. Затем осуществляется обратная интерполяция значений производных с эйлеровой на лагранжеву сетку частиц. По полученным в узлах лагранжевой сетки (т.е. в центрах частиц) параметрам течения и пространственным производным с помощью конечно-разностных аналогов исходной системы уравнений — неразрывности, сохранения импульса и энергии — происходит расчет параметров частиц на новом временном слое. Процесс расчета состоит из многократного повторения шагов по времени.

Интегрирование системы уравнений на каждом временном шаге производится поэтапно.

1. Эйлеров этап, при реализации которого пренебрегается перемещениями элементарной ячейки-частицы (потока массы через границы ячеек нет) и учитываются лишь эффекты ускорения жидкости за счет давления.

2. На лагранжевом этапе вычисляются конвективные потоки сохраняемых величин через границы ячеек, возникающие при движении жидкости.

3. Заключительный этап — на новом временном слое определяются окончательные значения всех газодинамических параметров потока.

2.1. Общая схема расчетной процедуры. Первоначально в расчетном поле в соответствии с начальными данными размещаются тела, которые разбиваются на отдельные частицы. Частицы имеют форму куба (в общем случае — форму прямоугольного параллелепипеда), совпадающего по размерам с ячейкой эйлеровой сетки. Каждая частица представляет собой индивидуальный объем, состоящий из одних и тех же молекул среды, и характеризуется набором параметров, таких как маркер тела, пространственные координаты центра масс и линейные размеры. Кроме того, внутри частицы определены все термодинамические и кинематические параметры (плотность, удельная полная энергия, давление, изэнтропическая скорость звука, компоненты вектора скорости и т.д.).

В трехмерной декартовой системе координат для каждой из частиц интегрируется система уравнений газовой динамики:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \mathbf{u}, \quad \rho \frac{d\left(e + \frac{u^2}{2}\right)}{dt} = -\nabla(p\mathbf{u}) + I_{\text{source}}, \quad \rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\nabla p.$$

Система уравнений замыкается уравнением состояния вещества в общем виде: $p = EOS(\rho, e)$.

Решение системы вычисляется последовательно во времени с некоторым временным шагом Δt . Условно процедура расчета решения на $(n + 1)$ -м временном слое разбивается на предварительный и основной этапы, а также этап дробления/объединения частиц. Кроме того, на каждом расчетном шаге по необходимости производится выполнение служебных процедур записи промежуточных (для отображения) и полных (для перезапуска задачи) результатов, а в случае параллельного режима работы — коммуникационных процедур MPI.

2.1.1. Предварительный шаг. На предварительном шаге для каждой частицы находятся новые значения компонент скорости из конечно-разностной аппроксимации уравнений движения из системы уравнений газовой динамики. Далее определяются пространственные производные давления с использованием билинейной интерполяции параметров из центров частиц в узлы расчетной эйлеровой сетки. Для сглаживания осцилляций, возникающих на фронтах сильных разрывов, используется псевдовязкостное давление (искусственная вязкость): $q_m = -Q_l [\rho \cdot c_s \cdot \nabla \mathbf{u}]_m^n \Delta x + Q_q^2 [\rho \cdot (\nabla \mathbf{u})^2]_m^n (\Delta x)^2$.

Одновременно с вычислением давления и компонент вектора скорости на предварительном этапе производится процедура реконструкции свободных и контактных границ на эйлеровой сетке. Для этого каждая из частиц оставляет в узлах сетки свой идентификатор тела *id*. После их анализа в каждом узле сетки определяется маркер, указывающий на принадлежность узла к одному из четырех типов: “вакуумный” узел (ни в одной из примыкающих к нему ячеек нет частиц), внутренний узел (в примыкающих к узлу ячейках содержатся лишь частицы одного сорта с одним идентификатором *id*), узел на контактной границе (внутри примыкающих к узлу ячеек содержатся частицы двух и более сортов) и узел на свободной границе (один из соседних узлов является “вакуумным”). Узел, который одновременно является узлом на контакте и узлом на свободной поверхности, считается узлом на свободной поверхности.

После определения принадлежности ячеек и узлов сетки тому или иному телу определяется ориентация свободных и контактных границ для постановки граничных условий проскальзывания материалов вдоль контактных границ и на свободных поверхностях при наличии сред с нешаровым тензором напряжений. Для этого в каждом из узлов свободной/контактной поверхности вычисляется единичный вектор нормали.

2.1.2. Основной шаг. На основном шаге определяются обновленные значения координат центра масс частиц, их линейных размеров, плотности и удельной полной энергии:

$$x_m^{n+1} = x_m^n + \mathbf{u}_m^{n+1} \Delta t, \quad \rho_m^{n+1} = \frac{\rho_m^n}{1 + \Delta t \cdot \nabla [\mathbf{u}^{n+1}]_m}, \quad e_m^{n+1} = e_m^n - \frac{\Delta t}{\rho_m^n} \nabla [\tilde{p}^n \mathbf{u}^{n+1}]_m.$$

После вычисления нового положения и размеров частиц на предыдущем этапе может возникнуть такая ситуация, когда в одной эйлеровой ячейке окажутся центры нескольких частиц с одинаковыми идентификаторами (т.е. частицы одного и того же сорта) и информация о течении в данной ячейке будет избыточной. В областях же расширения вещества из-за сильного увеличения объема и линейных размеров частиц некоторые ячейки могут оказаться пустыми (т.е. в них не содержится ни один из центров частиц). Во избежание таких ситуаций, а также с целью увеличения степени однородности данных, хранящихся в памяти ЭВМ, вводится этап дробления и объединения частиц.

После того как станут известными координаты центров масс и размеры частиц, происходит дробление частиц по границам-плоскостям эйлеровых ячеек. Их параметры (удельные) равны параметрам исходной частицы за исключением координат центров и геометрических размеров, которые пересчитываются из очевидных соотношений.

Объединение частиц с одинаковыми идентификаторами, центры которых расположены в одной ячейке, производится попарно с удовлетворением условий сохранения “центра объемов”, объема, массы, импульса и полной энергии.

2.2. Модели термодинамических свойств, упругопластического деформирования и разрушения. Используемое в расчетах многофазное широкодиапазонное уравнение состояния (УРС) вещества [3, 4] определяется термодинамически полным потенциалом свободной энергии в практически важной области фазовой диаграммы. Модель УРС учитывает свойства вещества в твердом, жидком и плазменных состояниях, включая двухфазные области плавления и испарения. Численные значения коэффициентов находятся с привлечением многочисленной справочной информации и имеющимися данными теоретических расчетов и экспериментов при высоких давлениях и температурах. На предварительном этапе расчета однозначно определяются параметры холодной кривой и фазовых границ — областей плавления и испарения.

Далее рассчитываются термодинамические характеристики металла в процессах изотермического и изэнтропического сжатия и расширения. Алгебраические и интегральные соотношения для автомодельных газодинамических течений (ударные волны и центрированные волны разрежения) используются для вычисления параметров кинематических характеристик, экспериментально измеряемых при высоких и сверхвысоких давлениях: параметров скоростей падающей и отраженной волн, а также скоростей изэнтропической разгрузки. Учитывается влияние эффектов плавления и испарения на получаемые результаты. Для построения уравнения состояния привлекается следующая информация при высоких давлениях и температурах: измерения изотермической сжимаемости в алмазных наковальнях, данные по плотно-

сти и скорости звука в жидких металлах, P - T измерения фазовых диаграмм в статических условиях, результаты исследований по изобарическому расширению, регистрации ударной сжимаемости сплошных и пористых образцов в падающей и отраженной волнах, исследования сравнительной ударной сжимаемости в подземных ядерных взрывах, данные по изэнтропическому расширению ударно-сжатых металлов и оценки параметров критической точки. Кроме того, используются расчетные результаты, полученные в соответствии с теорией Томаса-Ферми по различным зонным методам и моделям неидеальной плазмы. Непосредственный расчет многофазного УРС внутри газодинамического кода приводит к неоправданно высоким вычислительным затратам. По этой причине в расчетную программу описанная модель УРС загружается в виде таблиц, при этом в координатах V - T вдоль фазовых границ строится адаптивная сетка, из узлов которой интерполяцией определяются параметры УРС в необходимых точках фазовой диаграммы.

Для описания упругопластических свойств материала используется уравнение пластического течения Прандтля-Рейсса $\rho \frac{ds_{ij}}{dt} = 2G \left[\frac{d}{dt} \left(\varepsilon_{ij} - \frac{1}{3} \varepsilon_{kk} \delta_{ij} \right) - \lambda s_{ij} \right]$, где δ_{ij} — символ Кронекера, ε_{ij} — компоненты тензора деформаций и G — модуль сдвига, при этом в системе уравнений сохранения производится переход от давления к тензору напряжений:

$$\rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \nabla \hat{P}, \quad \rho \frac{d \left(e + \frac{u^2}{2} \right)}{dt} = \nabla (\hat{P}\mathbf{u}), \quad \hat{P} = \begin{pmatrix} s_{xx} - p & s_{xy} & s_{xz} \\ s_{yx} & s_{yy} - p & s_{yz} \\ s_{zx} & s_{zy} & s_{zz} - p \end{pmatrix}.$$

Здесь \hat{P} — тензор напряжений, компоненты которого определяются средним давлением p и девиатором тензора напряжений s_{ij} .

Пусть $J = s_{ij}s_{ij}$ и Y_0 — предел текучести. Используется условие текучести в формулировке Мизеса с процедурой нормировки напряжений Уилкинса:

$$\sigma_{ij} = \begin{cases} \sigma_{ij}, & J < \frac{2}{3} Y_0^2, \\ \sigma_{ij} \frac{\sqrt{\frac{2}{3} Y_0^2}}{\sqrt{J}}, & J > \frac{2}{3} Y_0^2. \end{cases}$$

Откольные эффекты описываются континуальной кинетической моделью разрушения [5]. В ней степень сплошности среды характеризуется удельным объемом пор, который зависит от истории и степени нагружения и растяжения материала: $V_p^{n+1} = \sqrt[1-\beta]{(V_p^n)^{1-\beta} + (1-\beta) \frac{\sigma}{\tau\sigma_p} \left(\frac{\sigma_{\max}}{\sigma_p} \right)^{\alpha-1} dt}$, где σ_{\max} — максимальное растягивающее напряжение, когда-либо действовавшее на данную частицу; σ — текущее среднее напряжение, действующее на частицу; α , β , τ , σ_p — эмпирические коэффициенты материала. При достижении пористостью критического значения считается, что в частице образовалась свободная поверхность, при этом на вновь образованной поверхности происходит релаксация напряжений.

2.3. Воздействие интенсивных пучков ионов. В уравнение, выражающее закон сохранения энергии, входит член I_{source} , отвечающий за энерговклад внешних источников; в рассматриваемом случае вклад энергий связан с торможением в веществе ионного пучка и $I_{\text{source}} = I_{\text{ion}}$. Решение системы уравнений совместно с уравнением состояния вещества, начальными и граничными условиями производится с использованием схемы расщепления по физическим процессам в два этапа. На первом газодинамическом этапе решаются обычные уравнения сохранения без учета источника I_{ion} . На втором этапе среда считается неподвижной и учитывается лишь энерговклад ионов в “замороженном” веществе.

В экспериментах по изучению высоких плотностей энергии в веществе измеряются следующие характеристики ионного пучка: интенсивность пучка (т.е. полное число ионов в пучке); временной профиль импульса; положение фокуса и огибающая пучка; размер фокального пятна и поперечное распределение интенсивности пучка в районе мишени; энергия налетающих ионов.

При расчете энерговклада ионов делаются следующие предположения. Ионы в пучке движутся по прямолинейным траекториям, взаимодействие частиц внутри пучка отсутствует. Ионный пучок представляется набором прямолинейных траекторий-лучей, каждый из которых задан в трехмерном пространстве координатами начальной точки и направляющим вектором. Ионы имеют нормальное распределение в

фазовом пространстве, параметры которого берутся из ионно-оптических расчетов реальной системы финальной фокусировки. Таким образом, в модели учитываются реалистичные особенности геометрии ионного пучка. При численном моделировании использование экспериментальных записей перечисленных параметров пучка позволяет детально описать постановку каждого отдельного эксперимента.

Доля энергии, потерянная ионом на отрезке траектории l_{cell} при прохождении через вещество с плотностью ρ_{cell} , определяется в виде $E_s = \left[\frac{\partial E}{\partial(\rho x)} \right] \rho_{\text{cell}} l_{\text{cell}}$, где выражение в квадратных скобках — тормозная способность вещества. Аппроксимация обширного массива экспериментальных данных по измерению тормозной способности для большого числа веществ осуществляется с помощью программы SRIM [6].

Трассировка производится последовательно через все ячейки вдоль траектории и завершается в тот момент, когда ион теряет всю свою энергию либо когда трассер выходит за пределы расчетной области. Таким образом, задача сводится к решению геометрической задачи о нахождении пересечения регулярной прямоугольной сетки и прямой в трехмерном пространстве.

3. Параллелизм расчетного алгоритма. Разнообразие и сложность физических процессов, протекающих при высокоэнергетических воздействиях, отличие характерных времен, наличие больших градиентов и т.д. накладывают существенные ограничения на численные методики, используемые для решения соответствующих дифференциальных уравнений, и, следовательно, на методики распараллеливания.

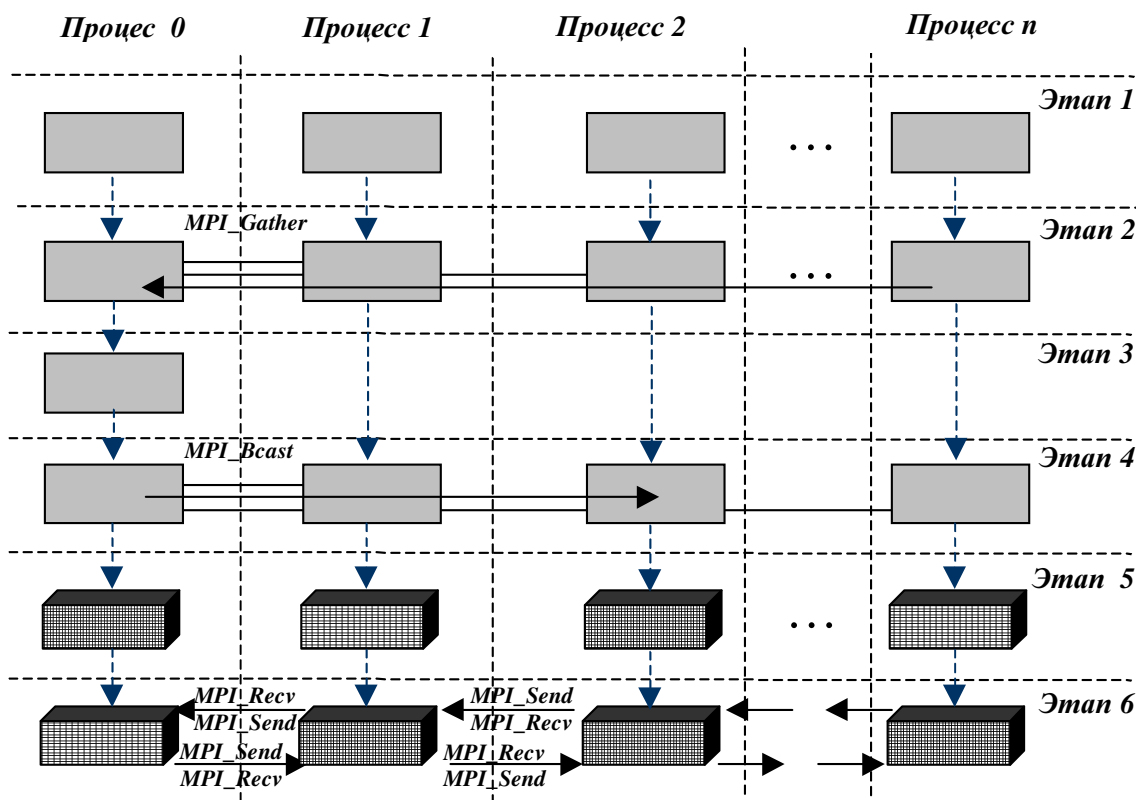


Рис. 1. Структура расчетной программы, блок-схема алгоритма

В программном комплексе FPIC3D можно выделить три основных схемы распараллеливания, причем две из них являются точным повторением классических: параллелизм по данным (решение явной схемы метода, блок-схема представлена на рис. 1) и параллелизм по вычислениям (энерговклад пучков заряженных частиц (ионов, протонов)). Методика, используемая для решения уравнения теплопроводности, основана на исходной крупноблочной схеме распределения данных по процессам и на параллельном методе циклической прогонки.

Для программной реализации используется объектно-ориентированный подход и базовые объекты (классы собственной разработки: распределенные массивы и списки) на языке C++ с использованием коммуникационного пакета MPI.

Эффективность используемого подхода продемонстрирована на рис. 2, на котором показаны результаты тестирования ускорения работы расчетной программы в параллельном режиме работы на системе

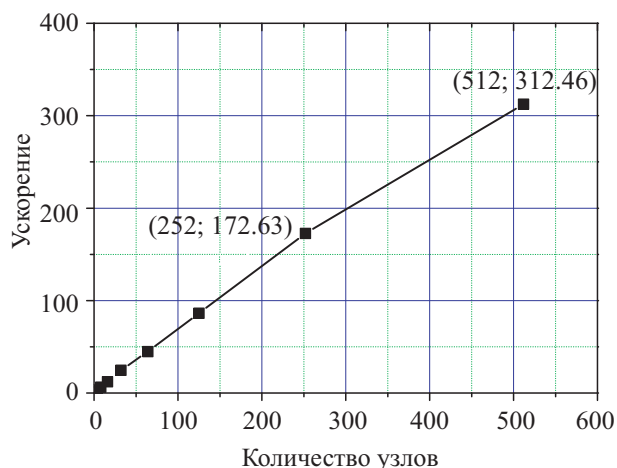


Рис. 2. Ускорение расчетной программы на MBC-1000M

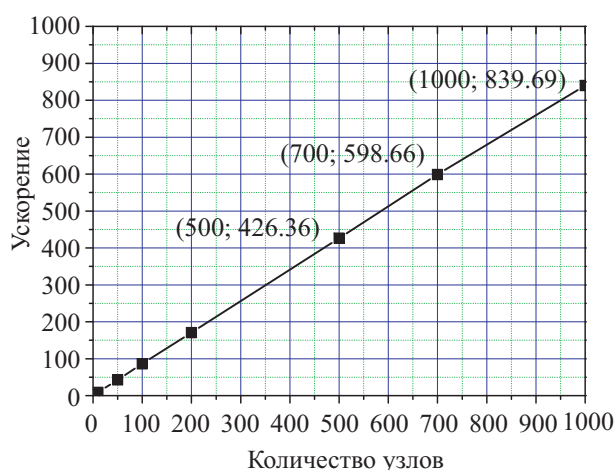


Рис. 3. Ускорение расчетной программы на SKIF-MGU

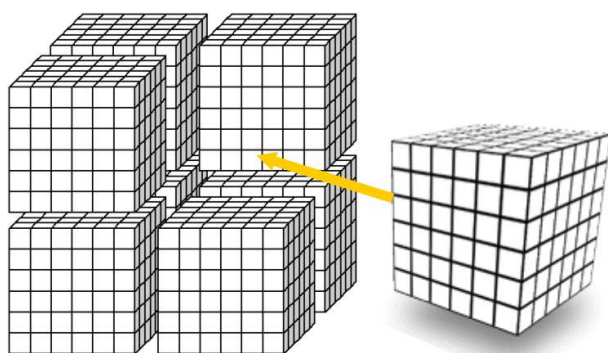


Рис. 4. Крупноблочная декомпозиция данных. Распределение трехмерного сеточного массива на отдельные процессоры

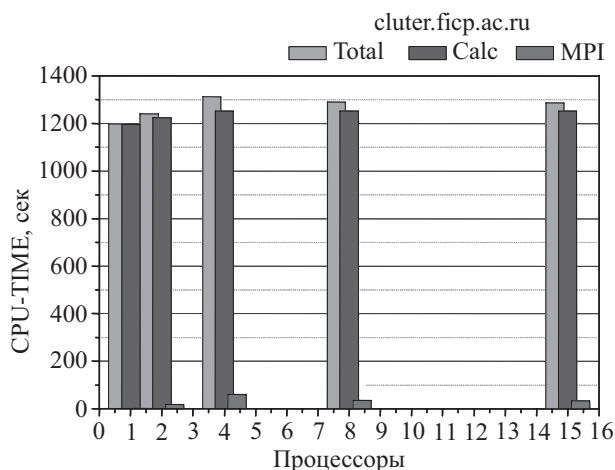


Рис. 5. Профилирование времени выполнения программы в параллельном режиме на кластере из 16 рабочих станций P-III 667 МГц. Показана зависимость времени выполнения расчета от числа используемых процессоров; отдельно показана доля времени, затраченная на расчет (Calc) и на коммуникации (MPI)

MBC-1000M. Тестовая задача — распад разрыва с полным заполнением расчетной области частицами. В каждом тесте число расчетных ячеек на процесс берется равным миллиону, ускорение оценивается пересчетом времени расчета для общей области задачи, как если бы она считалась на одном процессе.

Комплекс FPIC3D (в предыдущей модификации, без теплопроводности) активно использовался на MBC-15000, в настоящее время апробирован на SKIF-MGU, тестовые запуски показали хорошие результаты по производительности (рис. 3).

3.1. Крупноблочная декомпозиция данных для решения уравнений Эйлера. Для параллельной реализации расчетной процедуры метода FPIC3D [1] используется крупноблочная декомпозиция данных. В начальный момент производится нарезка сеточных массивов данных (поля координат, компонент скорости, плотности и т.д.) на отдельные независимые блоки (рис. 4). Каждая подобласть закрепляется за одним процессорным элементом, и все вычисления в течение одного временного шага интегрирования производятся каждым процессором независимо. Согласование данных на границах подобластей производится с использованием механизма ячеек перекрытия, “фиктивных” ячеек, число которых определяется пространственным конечно-разностным шаблоном (четыре ячейки в нашем случае).

Результаты профилирования времени выполнения программы в параллельном режиме на кластере

из 16 рабочих станций Р-III 667 МГц приведены на рис. 5.

3.2. Решение уравнения теплопроводности на основе неявной схемы. Учитывая неявность схемы решения уравнения теплопроводности, в качестве метода решения используется параллельный метод циклической прогонки. Из-за особенности разбиения расчетной области (крупноблочная декомпозиция данных) в методе циклической прогонки используется тот же принцип.

Каждый процесс ведет расчет прямого хода прогонки независимо от других. После прямого хода полученные коэффициенты собираются на первом процессе (или на процессе, объявленном главным). Этот процесс решает систему уравнений, порядок которой равен числу используемых процессов (по данному направлению, так как для решения уравнения теплопроводности используется метод переменных направлений; для 3D-задачи с числом используемых процессов 1000 размерность по каждому направлению будет порядка 10), и рассылает значения первой и последней переменной на каждый процесс. Далее осуществляется обратный ход циклической прогонки.

Ниже приведена схема решения системы уравнений $a_i y_{i-1} - c_i y_i + b_i y_{i+1} = -f_i$ для общего числа процессов, равного трем (индексы K, M, N — последние на процессе; кроме того, последнее уравнение является первым на следующем процессе).

Первый процесс рассчитывает коэффициенты $b_N^{(i)}, c_N^{(i)}, f_N^{(i)}, \alpha_i, \beta_i$ и γ_i по формулам

$$\begin{aligned} b_N^{(1)} &= b_N, & c_N^{(1)} &= c_N, & f_N^{(1)} &= f_N; \\ b_N^{(i)} &= b_N^{(i-1)} \beta_N, & c_N^{(i)} &= c_N^{(i-1)} - b_N^{(i-1)} \alpha_i, & f_N^{(i)} &= f_N^{(i-1)} - b_N^{(i-1)} \gamma_i, \end{aligned}$$

где $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$ — коэффициенты циклической прогонки:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \frac{a_1}{c_1}, & \beta_1 &= \frac{b_1}{c_1}, & \gamma_1 &= \frac{f_1}{c_1}, \\ \alpha_i &= \frac{a_i \alpha_{i-1}}{c_i - a_i \beta_{i-1}}, & \beta_i &= \frac{f_i - a_i \beta_{i-1}}{c_i - a_i \beta_{i-1}}, & \gamma_i &= \frac{f_i - a_i \gamma_{i-1}}{c_i - a_i \beta_{i-1}}, & y_i &= \alpha_i y_N + \beta_i y_{i+1} + \gamma_i. \end{aligned}$$

В результате на главном процессе мы собираем коэффициенты, полученные после прямого хода циклической прогонки: $b_N^{(K)}, c_N^{(K)}, f_N^{(K)}, \alpha_{K-1}, \beta_{K-1}, \gamma_{K-1}$ с первого процесса, $b_K^{(M)}, c_K^{(M)}, f_K^{(M)}, \alpha_{M-1}, \beta_{M-1}, \gamma_{M-1}$ — со второго и $b_M^{(N)}, c_M^{(N)}, f_M^{(N)}, \alpha_{N-1}, \beta_{N-1}, \gamma_{N-1}$ — с третьего, что для первого процесса аналогично системе

$$\begin{aligned} a_N^{(K)} y_{N-1} - c_N^{(K)} y_N + b_N^{(K)} y_K &= -f_N^{(K)}, \\ y_{K-1} &= \alpha_{K-1} y_N + \beta_{K-1} y_K + \gamma_{K-1}. \end{aligned}$$

После несложных преобразований получаем систему уравнений, связывающих y_K, y_M и y_N :

$$\begin{aligned} a_N^{(K)} \alpha_{N-1} y_M - (c_N^{(K)} - a_N^{(K)} \beta_{N-1}) y_N + b_N^{(K)} y_K &= -f_N^{(K)} - a_N^{(K)} \gamma_{N-1}, \\ a_K^{(M)} \alpha_{K-1} y_N - (c_K^{(M)} - a_K^{(M)} \beta_{K-1}) y_K + b_K^{(M)} y_M &= -f_K^{(M)} - a_K^{(M)} \gamma_{K-1}, \\ a_M^{(N)} \alpha_{M-1} y_K - (c_M^{(N)} - a_M^{(N)} \beta_{M-1}) y_M + b_M^{(N)} y_N &= -f_M^{(N)} - a_M^{(N)} \gamma_{M-1}. \end{aligned}$$

Эта система решается методом Гаусса с выбором главного элемента. Результаты тестирования и профилирования решения уравнения теплопроводности совместно с основными уравнениями газовой динамики показали эффективность и масштабируемость данной методики (тестирование проводилось до 64 процессов).

3.3. Декомпозиция данных для распределенного энергоклада. При расчете энергоклада (стопинга) пучка ионов имеется неупорядоченный набор траекторий, вдоль которых производится трассировка; для расчета необходимо знать параметры вещества во всех ячейках вдоль траектории. Для этого в начале

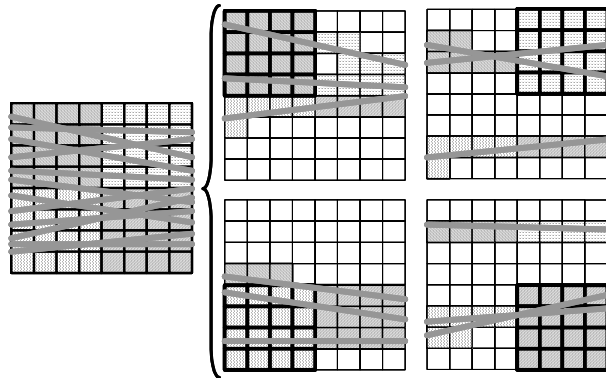


Рис. 6. Схема декомпозиции данных (двумерный случай)

расчета траектории пучка равномерно распределяются по всем процессам, причем в настоящее время это делается без какого-либо анализа прохождения внутри подобласти луча, использование которого может оптимизировать счет (рис. 6). На этом рисунке расчетная область 8 на 8 ячеек распределяется на четыре процесса; пучок содержит 12 траекторий. Слева показан общий вид расчетной сетки и траекторий-лучей, справа — распределение ячеек сетки и траекторий по четырем процессам. Жирной линией выделены ячейки декомпозиции, связанной с газодинамической частью расчета; остальные заштрихованные ячейки — “чужие”.

Далее, каждый процесс маркирует ячейки всей области, через которые проходит хотя бы одна из хранящихся на нем траекторий. Для помеченных ячеек, расположенных вне локальной подобласти, т.е. хранящихся на других процессах (“чужие” ячейки), заранее выделяется место в памяти; в начале каждого шага расчета стопинга их параметры обновляются посредством коммуникационных обменов с соответствующими соседними процессами. Затем следует регулярный счет, после которого данные об энерговыкладе в “чужих” ячейках рассылаются соответствующим процессам.

Мощность современных установок по генерации ионных пучков доходит до 10^{10} и более ионов на пучок. Численный расчет траекторий и энерговыделения такого большого числа частиц даже на современной вычислительной технике занял бы неприемлемо большое время. Кроме того, при моделировании каждой конкретной задачи применяется вполне определенное пространственное разрешение (в конечно-разностных методах — это размер ячеек расчетной сетки) и использование пучка с более высоким разрешением оказывается избыточным. Вычислительная нагрузка значительно сокращается группировкой ионов с близкими траекториями при сохранении общего распределения параметров частиц в пучке. В наших расчетах использовалось до 10^5 траекторий, что позволило хорошо аппроксимировать распределение энерговыклада.

4. Моделирование воздействия интенсивных пучков ионов. С помощью разработанного кода FPC3D был решен ряд интересных и практически важных задач для перспективных направлений физики высоких плотностей энергии. К ним относятся численные оценки областей экстремальных состояний вещества, индуцированных интенсивными пучками заряженных частиц, и параметры функционирования мишеней и источников ионов в пучковых экспериментах проектируемого ускорителя SIS100.

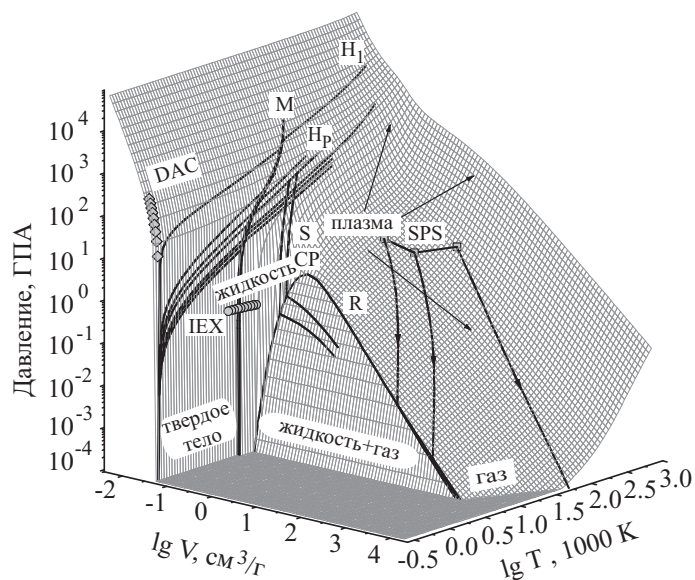


Рис. 7. Диаграмма давление–удельный объем–температура вольфрама. Линии SPS показывают области неидеальной плазмы, доступные для пучковых экспериментов на ускорителе LHC согласно [9]

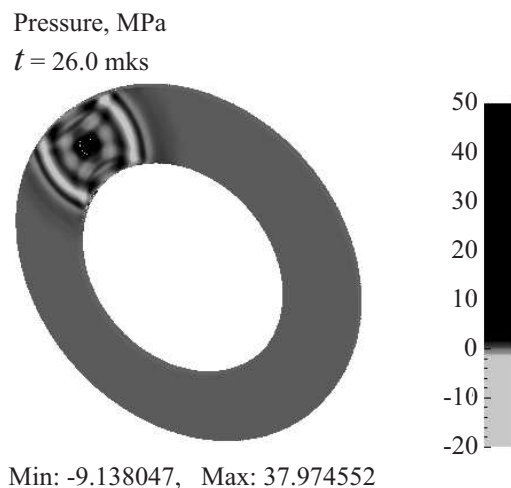


Рис. 8. Распределение давления в SuperFRS-мишени на 26 мкс [12]

С помощью разработанной методики расчета трехмерного энерговыклада пучков тяжелых ионов и протонов была проведена верификация и корректировка аналогичного численного алгоритма для двумерного кода по методу Годунова. Полученные численные оценки показали возможность генерации и экспериментального изучения экзотических состояний неидеальной плазмы при воздействии на металлические среды проектируемых ускорителей SIS100, GSI и LHC [7–9]. Типичные области фазовых диаграмм вольфрама, реализуемых в пучковых экспериментах, показаны на рис. 7.

Процессы энерговыделения в веществе для проекта FAIR (ускоритель SIS100, GSI) характеризуются высокими энергиями ускоряемых тяжелых ионов до 2 ГэВ/нуклон. Связанные с этим вопросы длительного, порядка месяцев, функционирования мишеней и ионных источников для исследований ядерного вещества оказались слабоизученными. Авторами настоящей статьи были выполнены численные расчеты мишеней SuperFRS и источников антипротонов. При моделировании для пучков с интенсивностью 10^{10} – 10^{11} ионов U^{28+} и энергией до 1–2 ГэВ/нуклон были исследованы различные профили энерговыклада, приводящие к упругим и упругопластическим деформациям в экспериментальных сборках. Показано существование режимов, при которых нагреваемое вещество сборки мишени (рис. 8) либо источника антипротонов оставалось в упругом режиме [10–12].

5. Заключение. Разработан трехмерный по пространственным переменным код FPIC3D для решения задач мощного импульсного энерговыделения в конденсированных средах, в котором учитываются современные модели термодинамических свойств, упругопластического деформирования и разрушения, процесса теплопроводности и энерговыклада заряженных частиц. Численные алгоритмы решения уравнений газовой динамики, энерговыклада ионов и теплопроводности реализованы для режима массивных параллельных вычислений. На числе процессоров до 1000 показана эффективность параллельных алгоритмов, получено практически линейное ускорение. С помощью кода выполнено численное моделирование задач, актуальных для физики высоких энергий.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ким В.В., Ломоносов И.В., Острик А.В., Фортвов В.Е.* Метод конечно-размерных частиц в ячейке для численного моделирования высокоэнергетических импульсных воздействий на вещество // Математическое моделирование. 2006. **18**, № 8. 5–11.
2. *Fortov V.E., Kim V.V., Lomonosov I.V., Matveichev A.V., Ostrik A.V.* Numerical modeling of hypervelocity impacts // Int. J. Imp. Eng. 2006. **33**. 244–253.
3. *Fortov V.E., Lomonosov I.V.* Thermodynamics of extreme states of matter // J. Pure and Appl Chem. 1997. **69**. 893–904.
4. *Lomonosov I.V.* Multi-phase equation of state for aluminum // Laser and Particle Beams. 2007. **26**. 567–584.
5. *Канель Г.И., Разоренов С.В., Уткин А.В., Фортвов В.Е.* Ударно-волновые явления в конденсированных средах. М.: Янус-К, 1996.
6. *Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U.* The stopping and range of ions in solids. New York: Pergamon Press, 1985.
7. *Tahir N.A., Deutsch C., Fortov V.E., Gryaznov V., Hoffmann D.H.H., Kulish M., Lomonosov I.V., Mintsev V., Ni P., Nikolaev D., Piriz A.R., Shilkin N., Spiller P., Shutov A., Temporal M., Ternovoi V., Udrea S., Varentsov D.* Proposal for the study of thermophysical properties of high-energy-density matter using current and future heavy-ion accelerator facilities at GSI Darmstadt // Phys. Rev. Letters. 2005. **95**, № 3. 035001-1–035001-4.
8. *Tahir N.A., Kain V., Schmidt R., Shutov A., Lomonosov I.V., Gryaznov V., Piriz A.R., Temporal M., Hoffmann D.H., Fortov V.E.* The CERN large hadron collider as a tool to study high-energy density matter // Phys. Rev. Letters. 2005. **94**, № 13. 135004-1–135004-4.
9. *Tahir N.A., Schmidt R., Brugger M., Lomonosov I.V., Shutov A., Piriz A.R., Udrea S., Hoffmann D.H.H., Deutsch C.* Prospects of high energy density physics research using the CERN super proton synchrotron (SPS) // Laser and Particle Beams. 2007. **25**. 639–647.
10. *Tahir N.A., Kim V., Lomonosov I.V., Grigoriev D.A., Piriz A.R., Weick H., Geissel H., Hoffmann D.H.H.* High-energy density physics problems related to liquid jet lithium target for Super-FRS fast extraction scheme // Laser and Particle Beams. 2007. **25**. 295–304.
11. *Tahir N.A., Kim V.V., Matveichev A.V., Ostrik A.V., Shutov A.V., Lomonosov I.V., Piriz A.R., Lopez Cela J.J., Hoffmann D.H.H.* High-energy density and beam induced stress related issues in solid graphite Super-FRS fast extraction targets // Laser and Particle Beams. 2008. **26**. 273–286.
12. *Tahir N.A., Weick H., Shutov A., Kim V., Matveichev A., Ostrik A., Sultanov V., Lomonosov I.V., Piriz A.R., Lopez Cela J.J., Hoffmann D.H.H.* Simulations of a solid graphite target for high intensity fast extracted uranium beams for the Super-FRS // Laser and Particle Beams. 2008. **26**. 411–423.

Поступила в редакцию
20.02.2009