

УДК 539.12

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНОВ В ВЕЩЕСТВЕ НА ГИБРИДНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ

М. Е. Жуковский¹, С. В. Подоляко¹, Р. В. Усков¹

На основе использования данных для сечений упругих и неупругих процессов взаимодействия электронов с веществом строятся распределения характеристик электронов для моделирования их переноса в веществе. Построенная модель не использует распространенные приближения непрерывного замедления и теории многократного рассеяния для описания переноса электронов. Разработаны алгоритмы статистического моделирования переноса электронов для проведения вычислительных экспериментов на гибридных суперкомпьютерах, в частности с использованием технологии NVIDIA[®] CUDA. Проведена серия расчетов для исследования взаимодействия электронов с веществом мишени рентгеновской трубки на кластере МВС-Экспресс (<http://www.kiam.ru/MVS/resources/mvse.html>) и на новом суперкомпьютере К-100. Статья рекомендована к публикации Программным комитетом Международной научной конференции "Параллельные вычислительные технологии" (ПАВТ-2011; <http://agora.guru.ru/pavt2011>).

Ключевые слова: математическое моделирование, перенос электронов, метод Монте-Карло, гибридные суперкомпьютеры, технология NVIDIA[®] CUDA.

1. Введение. К настоящему времени разработано много моделей и численных алгоритмов для математического моделирования переноса электронов в веществе. Созданы мощные программные комплексы для исследования взаимодействия ионизирующего излучения с веществом. Среди них: MCNP (Monte Carlo N-Particle Transport Code System for Multiparticle and High Energy Applications, RSICC Computer Code, LANL, Los Alamos), GEANT (<http://geant4.web.cern.ch/geant4/>), PENELOPE (PENetration and Energy LOSS of Positrons and Electrons, a code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport, NEA-OECD, Paris). Эти программные продукты нашли широкое применение в различных отраслях науки и техники. К числу их несомненных достоинств, прежде всего, относится богатое константное обеспечение. Используемые численные алгоритмы надежны и точны, особенно в части моделирования столкновений квантов с большой передачей импульса. В то же время для моделирования ряда столкновительных эффектов указанные программные комплексы используют приближенные подходы. В основном это относится к процессам с малой передачей импульса, которые наиболее вероятны при столкновениях электронов с атомами и молекулами вещества. В основе этих подходов лежат такие развитые приближения, как теория многократного рассеяния, теория Ландау с различными поправками и уточнениями, приближение непрерывного замедления и др. Эти приближения имеют достаточную точность, если рассматривается область с однородными на масштабе тормозного пути электрона рассеивающими свойствами.

Моделирование процессов взаимодействия излучения с веществом объектов, имеющих сложную разномасштабную структуру, включающую в себя микроструктурные элементы, требует рассмотрения более точных моделей без использования указанных приближенных теорий. Для этого необходима современная гибридная вычислительная техника и применение соответствующих ее архитектуре технологий распараллеливания. Это, главным образом, обусловлено тем, что моделирование десятков тысяч электронных столкновений с малой, в среднем, передачей энергии требует огромного объема вычислений. В этой связи, применение существующих программных комплексов для объектов, включающих в себя изделия микроэлектроники, затруднительно.

В последнее время появились разработки, посвященные моделированию переноса излучения на графических процессорах с использованием технологии NVIDIA[®] CUDA. Так, например, для решения задач рентгеновской медицины создан проект MC-GPU [1], в основе которого лежит методика моделирования переноса рентгеновского излучения методом Монте-Карло.

Авторами настоящей статьи разработаны параллельные алгоритмы моделирования переноса гамма-излучения на гибридных кластерах с применением технологии NVIDIA[®] CUDA [2]. Ниже описаны подходы к моделированию переноса электронов методом Монте-Карло на гибридных вычислительных системах.

¹ Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, Миусская пл., д. 4, 125047, Москва; М. Е. Жуковский, вед. науч. сотр., e-mail: zhuk@kiam.ru; С. В. Подоляко, науч. сотр., e-mail: psv66@mail.ru; Р. В. Усков, мл. науч. сотр., e-mail: roman.uskov@gmail.com

2. Физическая модель взаимодействия электронов с веществом. Сложный процесс прохождения частицы через вещество можно представить в виде последовательности элементарных процессов взаимодействия этой частицы с веществом. К этим процессам относятся рассеяние, торможение или гибель частицы в результате поглощения или вылета из рассматриваемой системы. Упругое рассеяние электронов описывается обычно в рамках приближенной теории многократного рассеяния Гоудсмита–Саундерсона, а неупругие взаимодействия электронов с веществом описываются в большинстве известных работ с использованием различных модификаций приближения непрерывного замедления.

Ниже описывается модель процессов взаимодействия электронов, построенная на основе использования табулированных данных для сечений указанных процессов. Основным источником этих данных является база данных Национального центра ядерных данных США [3], а именно Evaluated Nuclear Data File [4].

Основная цель построения указанной модели — получение вероятностных распределений характеристик электронов, изменяющихся в процессе их взаимодействия с веществом. К таким характеристикам относятся углы отклонения направления движения электронов в результате упругого рассеяния и потери энергии в результате неупругих взаимодействий.

Фундаментальную роль при моделировании процессов переноса частиц играют распределения характеристик частиц, изменяющихся в моделируемых процессах. Эти распределения вычисляются с помощью сечений (дифференциальных сечений) рассматриваемых процессов.

Пусть x — значения величины ξ , характеризующей состояние частицы. Если известна (нормированная на 1) плотность распределения $f(x)$ этой величины в данном физическом процессе, то распределение этой величины $F(x)$ определяется интегралом $F(x) = \int_{-\infty}^x f(t) dt$. Величина $F(x)$ равна вероятности того, что значение ξ будет меньше x : $F(x) = P(\xi < x)$.

Для моделирования (разыгрывания) случайной величины ξ наиболее общим методом является метод обратной функции [5]. Этот метод основан на теореме о том, что если $\gamma \in (0, 1)$ — равномерно распределенная случайная величина, а значения x случайной величины ξ удовлетворяют уравнению $\int_{-\infty}^x f(t) dt = \gamma$, $\gamma \in (0, 1)$, то ξ имеет плотность распределения $f(x)$. Следовательно, x вычисляется как значение функции, обратной к $F(x)$: $x = F^{-1}(\gamma)$.

Таким образом, для получения (путем розыгрыша случайной величины) характеристик частиц в процессе их переноса основным является уравнение:

$$\int_{-\infty}^x f(t) dt = \gamma, \quad \gamma \in (0, 1). \tag{1}$$

Функция распределения косинуса полярного угла упругого рассеяния $y = \cos \theta$ строится с использованием данных для плотности распределения этого угла: $f_{el}(y|E) = \frac{1}{\sigma_{el}^o} \frac{d\sigma_{el}}{dy}$, $\sigma_{el}^o = \int_{-1}^1 \frac{d\sigma_{el}}{dy} dy$.

Для качественного анализа искомого распределения воспользуемся формулой Резерфорда для дифференциального сечения упругого рассеяния: $\frac{d\sigma}{dy} \sim \frac{1}{E^2(1-y)^2}$. Проводя интегрирование $\int_{-1}^y \frac{d\sigma}{dt} dt$ и решая уравнение (1), получим, что $y \sim E^2\gamma - 1$ при $\gamma \rightarrow 0$.

С учетом вышесказанного можно сделать вывод о том, что наиболее удобной с точки зрения моделирования процесса упругого рассеяния является величина $F_{el}(y) \equiv \lg(1+y) = F(\lg \gamma)$, поскольку для ее хранения можно использовать равномерные по $\lg \gamma$ сетки, не зависящие от энергии электрона. С использованием табулированных значений величины $\frac{d\sigma_{el}}{dy}$ были получены соответствующие распределения $F_{el}(\lg \gamma)$.

Дифференциальное по энергии фотона сечение тормозного излучения обратно пропорционально энергии фотона [6, 7]: $\frac{d\sigma_{br}}{dE_{ph}} \sim \frac{1}{E_{ph}}$. Проводя соответствующие преобразования, получим $\lg(E_{ph}) \sim \gamma$, т.е. логарифм от потерь энергии электроном на тормозное излучение (E_{ph}) ведет себя как функция γ по закону, близкому к линейному. Поэтому моделирование процесса тормозного излучения оказывается удобным

проводить с помощью функции $F_{br} = \lg(E_{ph})$.

Моделирование процесса ионизации атомов гораздо сложнее моделирования упругого рассеяния и тормозного излучения, поскольку ионизация атома может происходить путем “отрыва” электрона с разных оболочек атома, на каждой из которых электрон имеет свою энергию связи. Кроме того, дифференциальное по потерянной энергии сечение ионизации также зависит от того, с какой оболочки выбивается атомный электрон.

Когда электрон с энергией E_o налетает на атом, имеющий N_{sh} оболочек, он может потерять энергию на ионизацию (“отрыв” атомного электрона с оболочки) некоторой оболочки и на передачу части своей кинетической энергии соответствующему атомному электрону. Плотность распределения потери энергии $f_n(\varepsilon|E_o)$ налетающим электроном с энергией E_o на “ионизацию” имеет вид

$$f_n(\varepsilon|E_o) = \sigma_n(E_o) \left(\sum_{n=1}^{N_{sh}} \sigma_n(E_o) \right)^{-1} \delta(\varepsilon - E_n), \quad (2)$$

где $\sigma_n(E_o)$ — сечение ионизации на n -й оболочке, E_n — энергия связи и ε — потеря энергии.

Плотность распределения переданной вторичному электрону энергии выражается формулой

$$f_n^{sec}(\varepsilon|E_o) = \sigma_n \left(\sum_{n=1}^{N_{sh}} \sigma_n \right)^{-1} \frac{d\sigma_n}{d\varepsilon} \eta(E_o - E_n). \quad (3)$$

После ионизации образуются два электрона. Вторичным называют электрон с меньшей энергией. Поэтому переданная вторичному электрону энергия может изменяться от 0 до $\frac{E_o - E_n}{2}$. Суммируя (2) и (3) и интегрируя по переданной энергии, получим

$$F_{ion}(\varepsilon|E_o) = \sum_{n=1}^M \eta(E_o - E_n) \frac{\sigma_n(E_o)}{S(M)} \left\{ \eta \left(\frac{E_o - E_n}{2} - \varepsilon \right) \int_0^\varepsilon \frac{d\sigma_n}{dt} dt + 1 \right\}, \quad (4)$$

где первое слагаемое в фигурных скобках — распределение энергии, переданной вторичному электрону,

а второе — распределение потерь энергии на “отрыв” этого электрона от атома; $S = \sum_{n=1}^M \sigma_n(E_o)$; η —

единичная функция Хевисайда; $M = \sum_{n=1}^{N_{sh}} \eta(E_o - E_n)$.

С помощью (4) построены распределения ионизационных потерь для моделирования процесса переноса электронов. Отметим, что дифференциальное сечение ионизации обратно пропорционально квадрату переданной вторичному электрону энергии [8]. Проведя соответствующие вычисления, получим, что уравнение (1) принимает вид $\frac{1}{\varepsilon} \sim \gamma$. Отсюда видно, что для моделирования процесса ионизации удобно использовать переменные $\lg \varepsilon$ и $\lg y$.

Описанная модель может быть использована при построении алгоритмов решения различных задач переноса электронов, ориентированных на современную и перспективную (в том числе гибридную) вычислительную технику. Важной особенностью разработанной модели является то, что при уточнении и дополнении данных по сечениям рассматриваемых процессов построенные распределения могут быть без труда перестроены и уточнены.

3. Алгоритмы моделирования переноса электронов. Моделированию процессов трансформации проникающего излучения в материалах объектов посвящено большое число публикаций. В одних работах используются и развиваются сеточные методы решения уравнения переноса излучения [9, 10]. В других разрабатываются вычислительные алгоритмы, основанные на статистическом моделировании методом Монте-Карло процессов переноса и взаимодействия излучения с веществом [11, 12]. Преимущество метода Монте-Карло перед альтернативными методами, основанными на численном решении кинетического уравнения, определяется удобством и приспособленностью этого метода к решению сложных граничных задач в многокомпонентных средах.

Эффективность применения метода Монте-Карло определяется в настоящее время, во-первых, развитием способов уменьшения статистической погрешности результатов расчетов и, во-вторых, прогрессом в области создания быстродействующих многопроцессорных вычислительных систем, в том числе гибридных. В работе [13] построена эффективная модель переноса электронов, относящаяся к классу моделей

вложенных траекторий. Эта модель (модель утолщенных траекторий) не использует приближение теории многократного рассеяния, а энергетические потери в неупругих соударениях учитываются в приближении непрерывного замедления, причем флуктуации этих потерь рассчитываются по теории Ландау.

Как указывалось выше, в настоящей статье описывается подход к построению алгоритмов моделирования взаимодействия электронов с веществом без использования указанных приближений. Ниже в этом разделе рассмотрены основные особенности разработки таких алгоритмов для проведения моделирования на гибридных вычислительных системах.

Статистическая оценка математического ожидания искомого функционала, который соответствует измеряемой в эксперименте величине, с помощью моделирования случайных траекторий электронов методом Монте-Карло подразумевает последовательное независимое моделирование заданного числа таких траекторий и определение аддитивного вклада каждой траектории в общий результат, причем вычислительная схема моделирования на каждом “звене” траектории одинакова.

Такие алгоритмы, имеющие большое число независимых вычислительных ветвей (в данном случае электронных траекторий), легко параллелятся и масштабируются (больше траекторий — выше точность результатов), причем на любых архитектурах, в том числе на тех, в которых присутствуют лишь минимальные способы взаимодействия между параллельными ветвями. К таковым, как было показано в [2], относится и технология NVIDIA[©] CUDA, реализуемая на аппаратных средствах, изначально предназначенных для совершения большого числа однотипных независимых операций.

3.1. Особенности реализации алгоритмов на гибридных системах. Алгоритмы моделирования траекторий частиц для конкретных задач могут иметь значительные отличия, однако при адаптации и эффективной реализации этих алгоритмов на гибридных вычислительных комплексах можно указать ряд общих особенностей.

Во-первых, при разработке параллельных алгоритмов моделирования электронных траекторий естественным является подход, при котором отдельные вычислительные потоки моделируют отдельные траектории, поскольку вычисления большей частью являются независимыми и не требуют синхронизации. Кроме того, вычислительная схема моделирования каждой траектории одинакова. Такая организация вычислений отлично подходит для параллельных архитектур типа SIMD (Single Instruction Multiple Data), характерных для современных графических ускорителей (GPU — Graphics Processor Unit).

Во-вторых, одним из важнейших условий построения эффективной реализации алгоритма для проведения вычислений на GPU является правильная организация хранения и работы с данными в памяти видеоадаптера [14, 15].

При моделировании траекторий электронов, в общем случае, работа ведется с тремя основными типами данных: параметрами моделируемых частиц; табличными значениями коэффициентов взаимодействия излучения с веществом и вероятностных распределений характеристик процессов; параметрами объектов.

Параметрами моделируемых частиц являются координаты, направление движения, энергия, статистический вес и т.д. С точки зрения однопроцессорной реализации расчетного алгоритма естественным является расположение этих параметров в памяти друг за другом для каждой частицы (рис. 1).

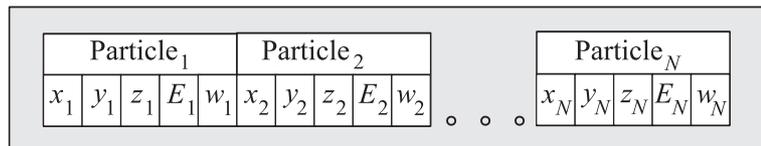


Рис. 1. Оптимальная для выполнения на центральном процессоре структура хранения параметров электронов

Как показано в [16], такой подход не является эффективным при реализации для GPU, так как не обеспечивает связности запросов к памяти. Связанностью запросов к памяти называется объединение “логических” запросов к ячейкам памяти от различных вычислительных потоков в один “физический” запрос. Такое объединение значительно повышает производительность памяти и является практически необходимым условием работы с достаточно медленной глобальной памятью видеоадаптера.

Более эффективным является подход, когда одни и те же параметры частиц хранятся в памяти друг за другом для всех моделируемых частиц (рис. 2). Такой подход хорошо подходит для вычислений на GPU, однако в случае гибридного распараллеливания подобное хранение параметров частиц может замедлять вычисления на CPU. Размер фрагмента памяти, содержащего совокупность параметров частицы, которая обрабатывается центральным процессором, может превышать размер кэша CPU. Это приводит к постоянному обращению к оперативной памяти, что снижает эффективность расчетов.

Компромиссным является способ, при котором частицы группируются в блоки, число которых выбирается исходя из условия размещения всех данных блока внутри кэша CPU, а внутренняя структура строится с учетом требования связности запросов при обращении к памяти GPU.

Такой способ позволяет обеспечить как близость данных для частиц внутри блока для выполнения требования связанности запросов на GPU, так и попадание всех характеристик одной частицы в кэш центрального процессора для уменьшения количества обращений к оперативной памяти (рис. 3).

Далее, в отличие от параметров частиц, распределения характеристик процессов взаимодействия электронов с веществом являются данными со случайным доступом. Поэтому, в случае использования их на GPU, следует по возможности помещать их в быструю разделяемую память, не столь чувствительную к отсутствию возможности связывания [5]. Зачастую, однако, объем памяти, необходимый для хранения этих данных, значительно превышает доступный объем быстрой памяти либо накладные расходы на загрузку данных в быструю память превышают выигрыш от ее использования. В таком случае использование глобальной памяти является предпочтительным.

Для современных архитектур графических процессоров требования, выполнение которых необходимо для обеспечения “связанности” запросов, стали менее жесткими, а также появилась возможность частичного связывания (т.е. объединения логических запросов от части потоков в один физический). Эти возможности позволяют увеличить производительность памяти при работе с данными со случайным доступом путем обеспечения частичного связывания.

В-третьих, сложность реализации вычислительных алгоритмов на гибридных вычислительных комплексах связана с тем, что в силу особенностей архитектуры графического адаптера условные переходы являются самым тяжелым видом операций для GPU. Более того, графический процессор в принципе не выполняет условные переходы. Всегда выполняются обе ветви алгоритма, результаты одной из которых затем аннулируются. Это приводит к необходимости построения максимально линейных алгоритмов или “выпрямления” уже существующих.

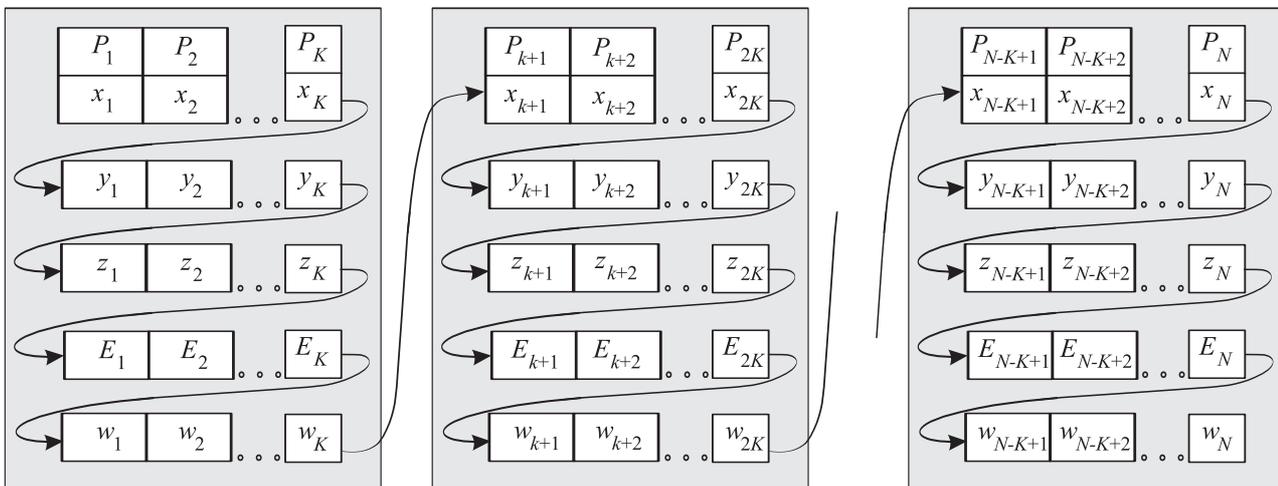


Рис. 3. Компромиссная структура хранения характеристик электронов

Стандартный метод моделирования переноса частиц подразумевает проверку попадания электрона в детектор для регистрации частицы и вычисления ее вклада в соответствующий функционал. Такой подход может оказаться неэффективным, когда на каждом звене электронной траектории необходимо проверять факт попадания электрона в детектор, что может случиться не более одного раза за всю траекторию.

Гораздо более эффективными являются алгоритмы, относящиеся к классу “весовых” модификаций метода Монте-Карло [17], когда на каждом звене траектории считается, что “часть” электрона достигает детектора (одного или нескольких), а статистический вес этой “части” приравнивается к вероятности электрону попасть в данный детектор. Такой способ позволяет значительно снизить дисперсию результатов, поскольку приводит к эффективному увеличению “источников” электронов, а также уменьшает

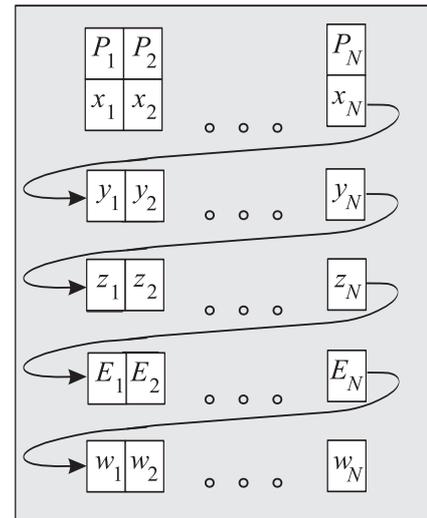


Рис. 2. Оптимальная для выполнения на графическом процессоре структура хранения параметров электронов

количество условных переходов в алгоритме.

3.2. Пример расчета с использованием гибридных кластеров. Рассмотрим задачу о спектральном распределении электронов в мишени, облучаемой потоком электронов, в зависимости от глубины проникновения электронов. Такие задачи актуальны, например, при исследовании свойств мишеней рентгеновских аппаратов.

В качестве детекторов будем рассматривать набор параллельных плоскостей, первая из которых является граничной поверхностью мишени. Искомой величиной для каждой такой плоскости будет энергетическое распределение электронов, пересекающих ее в “прямом” и в “обратном” направлении.

Ниже схематично рассмотрен способ построения алгоритма для моделирования переноса электронов в веществе мишени с учетом описанных выше особенностей гибридного распараллеливания с использованием технологии NVIDIA® CUDA.

Состояние частицы в каждой точке фазового пространства описывается набором $\{E, \Omega, r, w\}$, в котором указаны энергия, направление движения, координаты и статистический вес соответственно. Для всех K электронов из блока (рис. 3) эти данные помещаются в глобальную память видеоадаптера непосредственно перед запуском ядра в соответствии с условием “связывания”.

Вероятностные распределения величин, характеризующих процессы взаимодействия электронов с веществом (см. раздел 2), полученные путем обработки дифференциальных сечений этих процессов, табулированы и задаются в виде массивов. Объем этих массивов минимизируется путем введения неравномерных сеток по соответствующим переменным и размещается в “быстрой” памяти графического ускорителя.

Расчетный алгоритм состоит из следующих основных частей:

- розыгрыш длины пути до очередной точки взаимодействия согласно плотности распределения $f_s = \frac{1}{\mu} \exp\left(-\int_0^s \mu(x) dx\right)$ и вычисление координат искомой точки;

- розыгрыш типа взаимодействия (упругого рассеяния, возбуждения, ионизации, тормозного излучения);

- розыгрыш характеристик электрона после соответствующего процесса (угла изменения направления движения, потерь энергии в неупругих столкновениях) согласно распределениям рассмотренной выше модели переноса электронов;

- вычисление вклада очередного звена электронной траектории в искомую величину;
- продолжение траектории электрона до тех пор, пока его энергия не станет ниже заранее выбранного порога.

Вклад частицы в конечный результат определяется в результате случайного события: попадание частицы в детектор. Для моделирования процесса регистрации частиц (расчета показаний детектора) был построен алгоритм, в котором вклад электрона в искомую величину рассчитывается аналитически на каждом звене траектории, причем вес регистрируемого электрона умножается на вероятность попасть в данный детектор. Тем самым повышается информационная ценность каждого звена траектории частицы, что снижает дисперсию результатов и значительно уменьшает количество условных переходов в

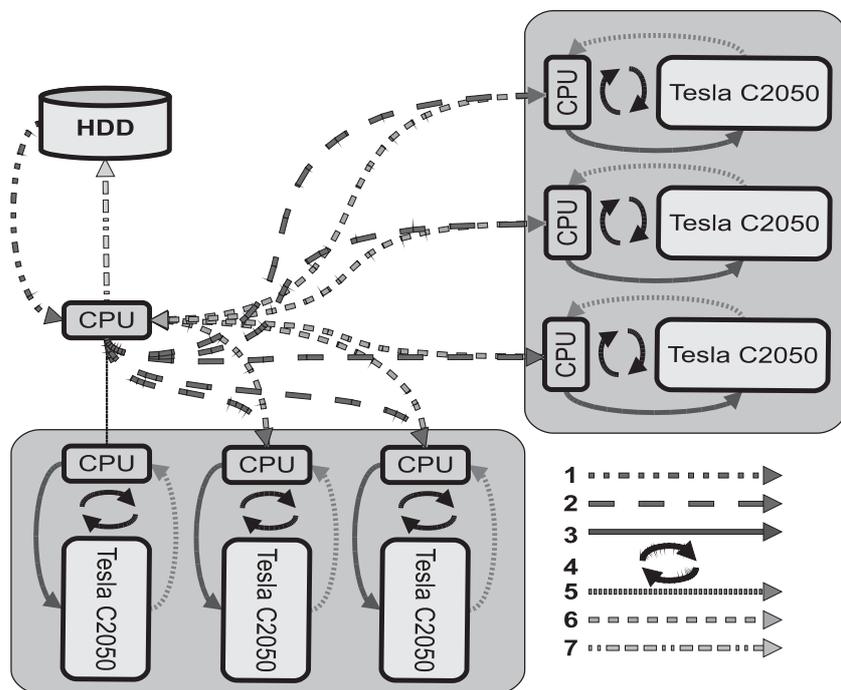


Рис. 4. Схема проведения вычислений на K-100: 1) загрузка и обработка параметров расчета главным CPU; 2) рассылка начальных данных центральным процессорам; 3) “подъем” данных на GPU; 4) итерационный запуск “ядер” для моделирования электронных траекторий; 5) “спуск” результатов на CPU; 6) сбор результатов главным CPU; 7) сохранение результатов

алгоритме.

Расчетная величина $F_e(E)$ определяется следующим образом.

Пусть $\{E_k\}_{k=0}^K = \{E_0 = E_{\min}, E_1, \dots, E_K = E_{\max}\}$ — заданная сетка по энергии, а $\{P_n\}_{n=0}^N$ — набор регистрирующих плоскостей. Вклад текущего электрона в k -ю энергетическую ячейку на n -й плоскости вычисляется по формуле $F_n^+(E_k) = \omega_n \eta(E - E_{k-1}) \eta(E_k - E)$, $k = 1, \dots, N$. В этой формуле ω_n равна вероятности достичь электрону n -й плоскости без взаимодействия: $\omega_n = \exp(-\mu(E)s_n)$, где μ , s_n — полное макроскопическое сечение взаимодействия электрона с веществом мишени и расстояние от очередной точки взаимодействия до n -й плоскости соответственно. Пусть F_n^+ — вклад от электрона, движущегося в “прямом” направлении (вглубь мишени). Аналогично определяется величина F_n^- вклада от электронов, движущихся в обратном направлении. Искомое спектральное распределение f_n^\pm определяется с помощью нормировки: $f_n^\pm = F_n^\pm \left(\text{trapz} \left(\{F_{nk}^\pm\}, \{E_k\} \right) \right)^{-1}$. Функция $\text{trapz} \left(\{F_{nk}^\pm\}, \{E_k\} \right)$ обозначает интегрирование по формуле трапеций на сетке $\{E_k\}_{k=0}^K$.

Описанный расчетный алгоритм реализован в виде параллельного кода для проведения моделирования первоначально на кластере МВС-Экспресс (<http://www.kiam.ru/MVS/resources/mvse.html>), а затем адаптирован для проведения расчетов на разработанном совместно ИПМ им. М.В. Келдыша и ФГУП “Квант” гибридном суперкомпьютере К-100. Схема проведения вычислений представлена на рис. 4.

Программный комплекс реализован на языке C/C++ с использованием библиотек shmem, MPI, CUDA. Комплекс состоит из трех компонентов. Первый компонент осуществляет загрузку исходных параметров и их обработку, а также сохраняет результаты. Второй компонент отвечает за организацию межпроцессорных взаимодействий (MPI, shmem). Третий компонент занимается непосредственной работой с данными GPU и выдачей вычислительных заданий (запуском “ядер”).

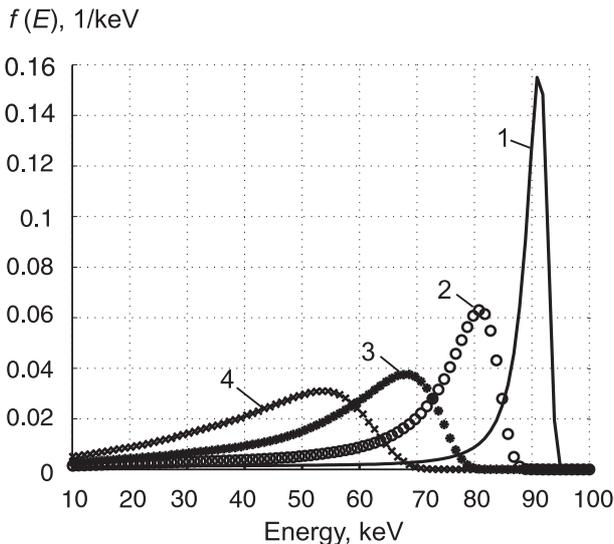


Рис. 5. Спектр электронов, движущихся вглубь мишени

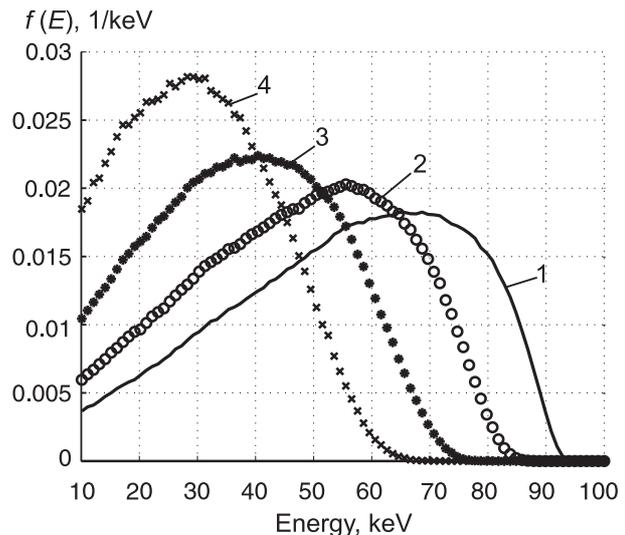


Рис. 6. Спектр электронов, движущихся к граничной поверхности мишени

С помощью разработанного программного кода проведены исследования спектральных распределений электронов внутри мишени рентгеновского аппарата по заказу Федерального института исследования и контроля материалов (Берлин, Германия). На рис. 5 изображены графики спектра электронов, пересекающих детекторные плоскости в прямом направлении, а на рис. 6 — в обратном для различных глубин в мишени из алюминия. На рисунках видна деградация спектра электронов с увеличением расстояния от граничной поверхности мишени, на которую падает поток электронов с энергией 100 кэВ. Номерами обозначены следующие кривые: 1 — $h = 0.001$ см, 2 — $h = 0.002$ см, 3 — $h = 0.003$ см, 4 — $h = 0.004$ см. Результаты проведенных расчетов позволяют оценить градиент деградации электронного спектра, что является полезной информацией при оценке эффективности использования исследуемой мишени рентгеновской трубки.

Полученные результаты сравнивались с аналогичными результатами, рассчитанными с применением пакета MCNP [13]. Сравнение показало совпадение результатов в пределах статистической погрешности, при этом эффективность моделирования на К-100 почти на два порядка превысила эффективность рас-

четов с использованием пакета MCNP на обычном многопроцессорном кластере.

4. Заключение. Анализ результатов моделирования переноса электронов на гибридном суперкомпьютере К-100 и прототипе МВС-Экспресс показал высокую эффективность разработанных методов и алгоритмов моделирования процессов взаимодействия излучения с веществом на компьютерах с гибридной архитектурой. Ускорение вычислений по сравнению с параллельными системами с обычной линейной архитектурой может достигать двух порядков. Это дает возможность сделать вывод о перспективности суперкомпьютеров с гибридной архитектурой для проведения математического моделирования процессов переноса электронов в веществе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Monte Carlo simulation of x-ray transport in a GPU with CUDA (<http://code.google.com/p/mcgpu/>).
2. *Жуковский М.Е., Усков Р.В.* О применении графических процессоров видеоускорителей в прикладных задачах. Часть II. Моделирование поглощения гамма-излучения. Препринт ИПМ им. М.В.Келдыша РАН. № 20. М., 2010.
3. National Nuclear Data Center (<http://www.nndc.bnl.gov/>).
4. Evaluated Nuclear Data File (ENDF, <http://www.nndc.bnl.gov/exfor/endl00.jsp>).
5. *Соболь И.М.* Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973.
6. *Stephen M.S.* Cross sections for bremsstrahlung production and electron impact ionization // Monte Carlo Transport of Electrons and Photons / ed. by Jenkins T.M., Nelson W.R., and Rindi A. New York: Plenum Press, 1988, 81–114.
7. *Bethe H.A., Heitler W.* On stopping of fast particles and on the creation of positive electrons // Proc. Roy. Soc. London. 1934. **A 146.** 83–112.
8. *Ландау Л.Д.* О потерях энергии быстрыми частицами на ионизацию. Собр. тр. Т. 1. М.: Наука, 1969.
9. *Шагалиев Р.М. и др.* Математическое моделирование и методики решения многомерных задач переноса частиц и энергии, реализованные в комплексе САТУРН-3 // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Матем. моделирование физических процессов. 1999. Вып. 4. 20–26.
10. *Сушкевич Т.А.* Математическое моделирование переноса излучения. М.: Бином, 2005.
11. *Аккерман А.Ф.* Моделирование траекторий заряженных частиц в веществе. М.: Энергоатомиздат, 1991.
12. *Briesmeister J.F. (ed.)* MCNP — a general Monte Carlo N-particle transport code. LANL Report LA-13709-M. Los Alamos, 2000.
13. *Жуковский М.Е., Скачков М.В.* О статистических методах моделирования переноса электронов в веществе // Вест. МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2009. № 1. 31–46.
14. NVIDIA CUDA Programming Guide, Version 2.3.1. 2009.
15. *Боресков А.В., Харламов А.А.* Основы работы с технологией CUDA. М.: ДМК Пресс, 2010.
16. *Жуковский М.Е., Усков Р.В.* О применении графических процессоров видеоускорителей в прикладных задачах. Препринт ИПМ им. М.В.Келдыша РАН. № 2. М., 2010.
17. *Михайлов Г.А.* Весовые методы Монте-Карло. Новосибирск: Изд-во Сиб. отд. РАН, 2000.

Поступила в редакцию
09.03.2011
