

Сравнение схем вычисления токов при моделировании плазмы методом частиц в ячейках

А.И. Розанов

Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

В работе представлен сравнительный анализ схем вычисления токов при моделировании плазмы методом частиц в ячейках. Рассмотрены следующие схемы: «облако в ячейке» (cloud-in-cell, CIC), схема Вилласенора – Бунемана, «Зигзаг» первого порядка, «треугольное облако» (triangle-shaped cloud, TSC), «Зигзаг» второго порядка и схема Есиркепова. Реализация выполнена в рамках программного комплекса PICADOR. Приведены результаты вычислительных экспериментов для сравнения производительности программных реализаций указанных схем в системах с общей памятью.

Ключевые слова: вычисление токов, метод частиц в ячейках, численное моделирование, PICADOR, параллельные вычисления.

1. Введение

Численное моделирование лазерной плазмы – один из признанных способов изучения процессов, происходящих при облучении лазерами мишеней различной геометрии и структуры. Метод частиц в ячейках (метод макрочастиц, Particle-In-Cell, PIC) [1] является одним из распространенных методов численного моделирования плазмы. Данный метод был впервые предложен в 1967 году Харлоу [2] для решения задач гидродинамики. В дальнейшем метод был модифицирован Кейном Йи для решения уравнений электродинамики [3].

В настоящее время существует и активно используется целый ряд программных реализаций метода. В ННГУ и ИПФ РАН с 2010 года разрабатывается и применяется программный комплекс PICADOR. Данный программный комплекс сравним с аналогами по функциональности и составу реализованных численных схем, а по производительности демонстрирует близкие к лидирующим показатели [4].

Важной особенностью метода частиц в ячейках является наличие большого потенциала для использования параллельных вычислений. Эта особенность во многом определила саму возможность применения метода для решения актуальных научных задач, требующих моделирования поведения до 10^{10} частиц, расположенных в до 10^9 ячейках прямоугольной вычислительной сетки. Одним из наиболее вычислительно трудоемких этапов метода является вычисление токов, создаваемых движением заряженных частиц. Особенность состоит в том, что на данном этапе возникает зависимость между положением частиц в пространстве и индексами узлов сетки, в которые вносит вклад рассматриваемая частица. Нерегулярность данной зависимости составляет проблему для организации вычислений и существенно ограничивает производительность всего цикла моделирования.

В данной работе будет проведен анализ корректности, производительности и масштабируемости нескольких наиболее распространенных схем вычисления токов: «облако в ячейке» (cloud-in-cell, CIC) [5], схема Вилласенора – Бунемана [6], «Зигзаг» первого порядка [7], «треугольное облако» (triangle-shaped cloud, TSC) [1], «Зигзаг» второго порядка [8] и схема Есиркепова [9]. Реализация была выполнена в рамках программного комплекса PICADOR. Автор благодарит С.И. Бахракова и И.Б. Меерова за полезные обсуждения и внимание к работе.

2. Краткое описание метода частиц в ячейках

Область моделирования (расчетная область) имеет форму прямоугольного параллелепипеда

да, со сторонами, параллельными осям координат: $\{(x, y, z): a_x \leq x \leq b_x, a_y \leq y \leq b_y, a_z \leq z \leq b_z\}$. Расчетная область заполнена вакуумом, в котором находится N частиц, описываемых своей массой m , зарядом q , положением \vec{r} и импульсом \vec{p} . На каждую частицу действует электромагнитное поле, которое характеризуется напряженностью электрического поля \vec{E} и индукцией магнитного поля \vec{B} . Движение заряженных частиц создает плазменные токи, которые характеризуются плотностью тока \vec{J} .

Изменения положения и импульса частицы описываются вторым законом Ньютона в релятивистской формулировке:

$$\begin{cases} \frac{\partial \vec{p}}{\partial t} = \vec{F} = q \cdot \left(\vec{E}(\vec{r}) + \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{B}(\vec{r}) \right) \\ \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} = \vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} \left(1 + \left(\frac{\vec{p}}{mc} \right)^2 \right)^{-\frac{1}{2}} \end{cases},$$

где \vec{F} – сила Лоренца, действующая на частицу.

Изменение электромагнитного поля во времени описывается уравнениями Максвелла, которые в Гауссовой системе единиц имеют следующий вид:

$$\begin{cases} \text{rot } \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{J} + \frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \\ \text{rot } \vec{E} = -\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \end{cases}$$

На каждой итерации метода рассчитывается состояние системы в следующий момент времени. Каждая итерация состоит из четырех основных этапов: интегрирование уравнений Максвелла, интерполяция полей в точке нахождения каждой частицы и вычисление силы Лоренца, действующей на частицу, интегрирование уравнений движения частиц и вычисление («взвешивание») токов. Подробное описание метода представлено в [1].

3. Описание этапа вычисления токов

Для представления электромагнитного поля расчетная область покрывается равномерной сеткой, содержащей n_x , n_y , n_z ячеек. Шаги сетки равны $\Delta x = \frac{b_x - a_x}{n_x}$, $\Delta y = \frac{b_y - a_y}{n_y}$, $\Delta z = \frac{b_z - a_z}{n_z}$. Используется широко применяемая при моделировании плазмы сетка Йи (Yee) [10], в соответствии с которой плотность тока задается в следующих точках физического пространства:

$$\begin{aligned} J_x(i, j, k) &\rightarrow (a_x + i \cdot \Delta x, a_y + (j + 0.5) \cdot \Delta y, a_z + (k + 0.5) \cdot \Delta z) \\ J_y(i, j, k) &\rightarrow (a_x + (i + 0.5) \cdot \Delta x, a_y + j \cdot \Delta y, a_z + (k + 0.5) \cdot \Delta z) \\ J_z(i, j, k) &\rightarrow (a_x + (i + 0.5) \cdot \Delta x, a_y + (j + 0.5) \cdot \Delta y, a_z + k \cdot \Delta z) \end{aligned}$$

При использовании метода частиц в ячейках каждая частица в моделировании соответствует облаку близко расположенных реальных частиц и обладает их суммарной массой и зарядом. Форма и способ распределения частиц в облаке определяются форм-фактором частицы.

Аналитически, плотность тока в точке для конкретной частицы равна произведению плотности заряда в этой точке на скорость частицы. На этапе взвешивания плотность тока, создаваемая каждой частицей, распределяется по сеточным значениям с некоторыми весами, сумма которых равна единице. Токи, вносимые всеми частицами, суммируются.

Для выполнения этого этапа моделирования разработан ряд численных схем. Наиболее важными характеристиками схемы взвешивания являются используемый форм-фактор частицы и обеспечивается ли выполнение законов сохранения заряда [5]. От выбранного форм-фактора зависит, в какие узлы сетки и с какими весами будет распределяться плотность тока каждой частицы. Чем выше порядок форм-фактора, тем точнее происходит моделирование. Выполнению закона сохранения заряда в локальной дифференциальной форме соответствует выполнение уравнения непрерывности [9]:

$$\frac{\rho^{t+1}(i, j, k) - \rho^t(i, j, k)}{\Delta t} + \frac{J_x(i, j, k) - J_x(i-1, j, k)}{\Delta x} + \frac{J_y(i, j, k) - J_y(i, j-1, k)}{\Delta y} + \frac{J_z(i, j, k) - J_z(i, j, k-1)}{\Delta z} = 0,$$

где $\rho(i, j, k)$ – плотность заряда в точке $(a_x + (i + 0.5) \cdot \Delta x, a_y + (j + 0.5) \cdot \Delta y, a_z + (k + 0.5) \cdot \Delta z)$.

4. Численные схемы

Схема взвешивания «облако в ячейке» [5] является одной из базовых схем взвешивания. Данная схема не сохраняет заряд и имеет первый порядок форм-фактора. Форм-фактором первого порядка будем называть прямоугольный параллелепипед размером с ячейку с центром в положении частицы. Плотность заряда частицы в форм-факторе первого порядка распределена равномерно и равна $\frac{q}{\Delta x \Delta y \Delta z}$. Плотность тока в схеме СИС распределяется в узлы, образующие ячейку сетки компонента тока, в которой находится частица в середине движения (рис. 1).

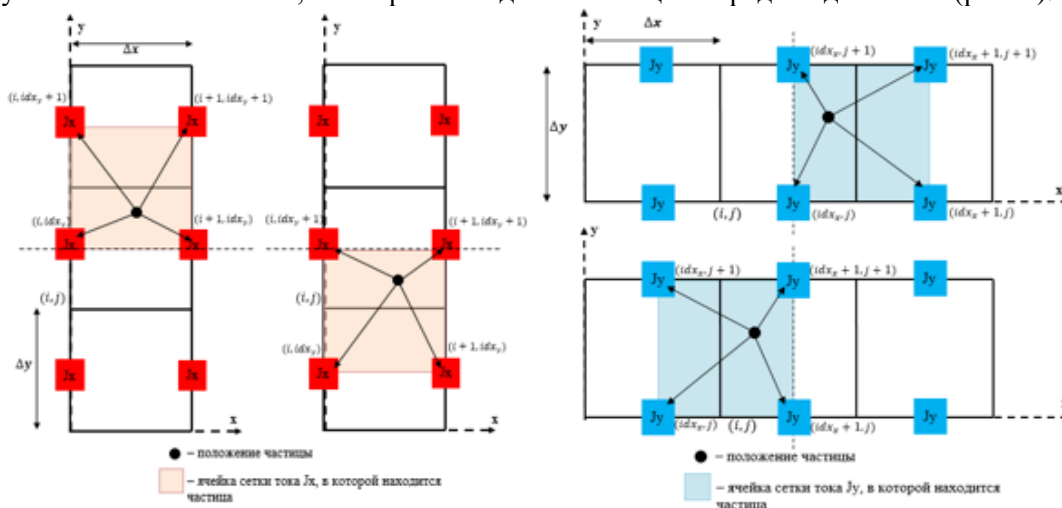


Рис. 1. Распределение плотности тока в схеме СИС. Рассмотрен двумерный случай

Одним из недостатков схемы СИС является то, что она не обеспечивает выполнение законов сохранения заряда. Это обуславливается тем, что узлы, в которые распределяется плотность тока, определяются только по положению частицы в середине своего движения. Но возможны случаи, когда частица в разных точках своей траектории вносит вклад в разные узлы сетки.

В 1991 году Джон Вилласенор и Оскар Бунеман разработали сохраняющую заряд схему взвешивания с форм-фактором первого порядка [6]. Во время движения частицы ее форм-фактор будет пересекать некоторые ребра сетки. В схеме Вилласенора – Бунемана частица вносит вклад в значения плотности тока на тех ребрах, которые были пересечены ее форм-фактором. Частица будет вносить вклад в узлы, отличные от тех, в которые она вносила вклад в начале своего движения, в тех случаях, когда частица перелетает из одной ячейки в другую. В этих случаях в точке пересечения траектории частицы с границей ячейки исходная частица «расщепляется» на две частицы. В двумерном случае частица за один временной шаг может пересекать до двух границ ячеек. Таким образом, получаем несколько «расщепленных» частиц, каждая из которых на всем своем пути вносит вклад в одни и те же узлы сетки.

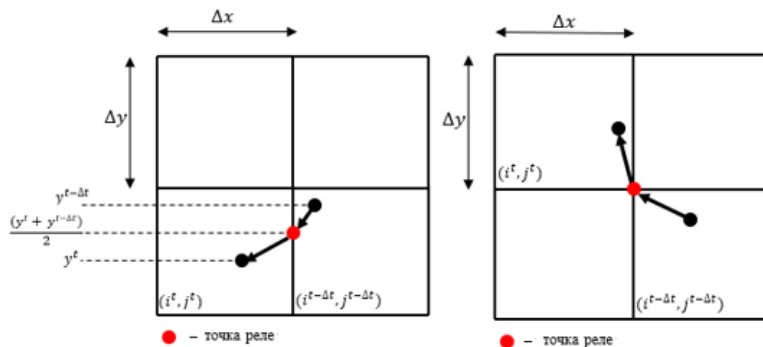


Рис. 2. Расщепление частицы в схеме «Зигзаг» второго порядка

Схема «треугольное облако» [1] является аналогом схемы СИС, а схема Есиркепова [9] –

аналог схемы Вилласенора – Бунемана при использовании форм-фактора второго порядка. Форм-фактор второго порядка – прямоугольный параллелепипед размером с две ячейки с центром в положении частицы. В отличие от форм-фактора первого порядка, в форм-факторе второго порядка плотность заряда частицы распределена неравномерно.

В вышеперечисленных схемах предполагалось, что за один временной шаг траекторией частицы является прямая линия. В сохраняющих заряд схемах «Зигзаг» первого и второго порядка [7, 8] предполагается, что траекторией частицы может являться зигзагообразная линия. Данное предположение позволяет выбрать точку пересечения траектории частицы с границей ячейки таким образом, чтобы в любом случае исходная частица «расщеплялась» только на две частицы (рис. 2).

5. Результаты вычислительных экспериментов

Эксперименты проводились на одном вычислительном узле шведского суперкомпьютера «Triolith». Один вычислительный узел имеет следующую архитектуру: два 8-ядерных процессора Intel Xeon E5-2660 2,2 ГГц.

5.1 Подтверждение корректности реализации схем

Для анализа корректности получаемых результатов были проведены эксперименты на задаче моделирования Ленгмюровских колебаний холодной плазмы. Полученные результаты при использовании разных схем взвешивания сравнивались с результатами, полученными при использовании реализованной ранее в комплексе PICADOR схемы Есиркепова, так как для этой схемы Есиркеповым было теоретически доказано сохранение заряда. При моделировании использовалась сетка размера $64 \times 8 \times 8$ и была задана 122 841 частица. Для каждой схемы было выполнено 3 600 шагов по времени. Ниже приведена полученная конфигурация плотности тока в конце расчета вдоль оси ОХ в середине расчетной области (рис. 3).

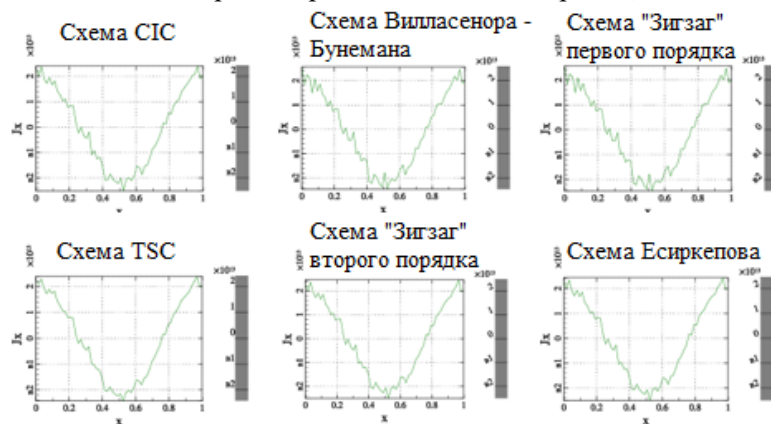


Рис. 3. Результаты моделирования Ленгмюровских колебаний холодной плазмы

Сравнение данных графиков показывает отсутствие качественных отличий. Для количественного анализа измерялась кинетическая энергия частиц в конце расчета. Отличия при использовании разных схем находятся в рамках 0,14%. С помощью Фурье-анализа измерялась частота колебаний. Было установлено, что отличие результатов разных схем находятся в пределах погрешности измерения. Это свидетельствует о корректности полученных результатов.

Для проверки выполнения закона сохранения заряда был проведен тест по перемещению одной частицы. В начальный момент времени частица с нулевой скоростью находится в центре ячейки. Далее частица начинает движение в плоскости под углом $\alpha = \pi/5$. В конце расчета частица принудительно останавливается. Согласно теории, в конце расчета электрическое поле должно присутствовать только в окрестности точки, в которой находится частица. Ниже показана зависимость нормы электрического поля от координат расчетной области (рис. 4).

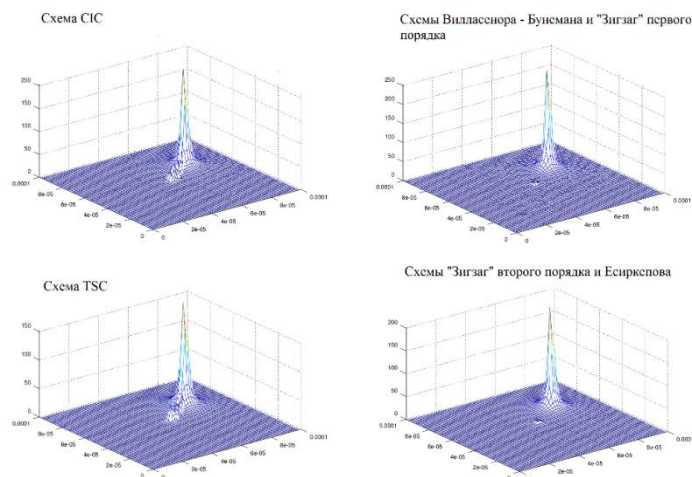


Рис. 4. Результаты теста с одной частицей

Для схем CIC и TSC на пути движения частицы остается электрическое поле. Это связано с тем, что эти схемы не обеспечивают выполнение закона сохранения заряда. Для сохраняющих заряд схем этого не наблюдается, но электрическое поле остается в начале движения частицы. Это объясняется нефизичностью начала теста. Ниже представлены графики зависимости нормы остаточного электрического поля в начале движения частицы от угла ее движения (рис. 5).

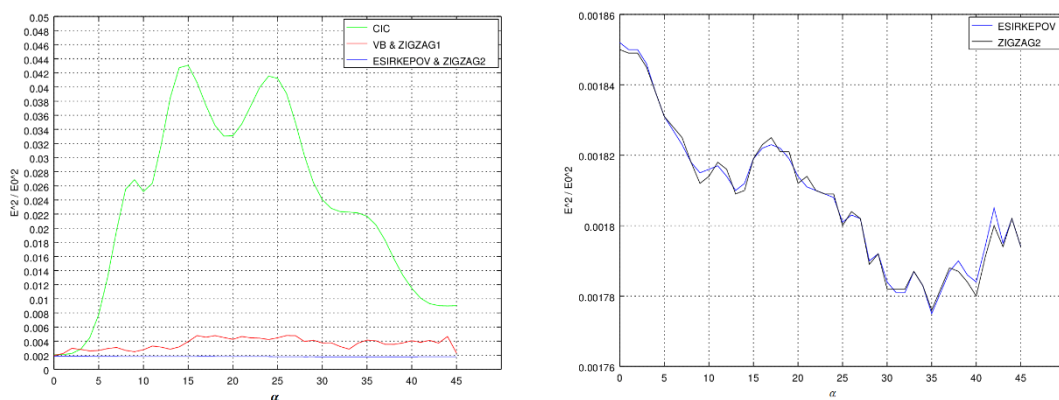


Рис. 5. Зависимость остаточного электрического поля от угла движения частицы

Остаточная норма электрического поля для схем CIC, TSC, Вилласнора – Бунсмана и «Зигзаг» первого порядка больше при тех углах движения, которые не параллельны осям координат. Для схем Есиркепова и «Зигзаг» второго порядка остаточная норма электрического поля практически не зависит от угла движения частицы.

5.2 Результаты масштабируемости

Проведение экспериментов для анализа масштабируемости выполнялось на задаче ленгмюровских колебаний плазмы. В программном комплексе PICADOR для каждого этапа моделирования реализовано распараллеливание на общей памяти с помощью технологии OpenMP. На этапе взвешивания распараллелена обработка ячеек сетки. Ниже приведено время работы параллельной версии этапа взвешивания (таблица 1). Время работы этапа взвешивания при использовании схемы Есиркепова в 7,4 раза больше, чем при использовании схемы Вилласнора – Бунсмана, при которой программа работает быстрее, чем при остальных схемах. Основной причиной этого является использование форм-фактора второго порядка, которое повышает точность моделирования, но увеличивает количество арифметических операций.

Использование предположения о зигзагообразной траектории частицы позволило ускорить этап взвешивания при использовании форм-фактора второго порядка в 2,6 раза. Это связано с меньшим количеством создаваемых «расщепленных» частиц, а также с менее трудоемким вы-

числением точки пересечения траектории частицы с границей ячейки. Для форм-фактора первого порядка данное предположение не дало никакого ускорения – реализация схемы Вилласенора – Бунемана работает на 20% быстрее, чем реализация схемы «Зигзаг» первого порядка. Это связано с тем, что в рассматриваемой задаче частицы имеют низкую температуру, вследствие чего и низкую скорость. Из-за этого за один временной шаг частицы редко перелетают из одной ячейки в другую (3% от общего числа частиц).

Таблица 1. Время работы параллельной версии программы, с.

	1 поток	2 потока	4 потока	8 потоков
Схема CIC	37,9	23,5	16,2	11,2
Схема Вилласенора – Бунемана	31,6	18,6	10,8	7,1
Схема «Зигзаг» первого порядка	38,5	23,5	13,3	7,9
Схема TSC	88,6	59,2	37,8	25,8
Схема «Зигзаг» второго порядка	90,3	58,9	37,9	26,1
Схема Есиркепова	233,4	122,7	66,7	41,5

6. Заключение

В работе выполнена реализация нескольких схем вычисления токов для моделирования плазмы методом частиц в ячейках. Показана корректность выполненной реализации. Продемонстрировано, что масштабируемость реализаций при переходе от 1 к 8 потокам составляет от 42% до 70% в зависимости от схемы. Результаты интегрированы программный комплекс PIC-ADOR и используются в научных расчетах [4, 11]. Далее планируется изучить вопрос об эффективности разработанных реализаций при вычислениях на ускорителях Xeon Phi.

Литература

1. Бэдсел Ч., Ленгдон А. Физика плазмы и численное моделирование: Пер. с англ. М.: Энергоатомиздат, 1989. 452 с.
2. Харлоу Ф. Численный метод частиц в ячейках для задач гидродинамики, М.: Мир, 1967. 460 с.
3. Yee. K. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media // IEEE Transactions on Antennas and Propagation. 1966. Vol. 14. P. 302–307.
4. Surmin I.A. et al. Particle-in-Cell laser-plasma simulation on Xeon Phi coprocessors // Computer Physics Communications. 2016. Vol. 202. P. 204–210.
5. Birdsall C.K., Fuss D. Clouds-in-Cells, Clouds-in-Cells Physics for Many-Body Plasma Simulation // Journal of Computational Physics. 1969. Vol. 3. P. 494–511.
6. Villasenor J., Buneman O. Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solvers. 1992.
7. Umeda T., Omura Y., Tominaga T., Matsumoto H. A new charge conservation method in electromagnetic particle simulation // Computer Physics Communications. 2003. Vol. 156. P. 73-85.
8. Umeda T., Omura Y., Tominaga T., Matsumoto H. Charge conservation methods for computing current densities in electromagnetic particle-in-cell simulations // Proceedings of ISSS-7, 2005.
9. Esirkepov T. Exact charge conservation scheme for Particle-in-Cell simulation with an arbitrary form-factor // Computer Physics Communications. 2001. Vol. 135, No 2. P. 144–153.
10. Taflove A. Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method. London: Artech House, 1995.
11. Мееров И.Б. и др. Трехмерное моделирование плазмы методом частиц в ячейках на Intel Xeon Phi: оптимизация вычислений и примеры использования // Вычислительные методы и программирование, 2015. Т. 16. С. 486–500.

Comparison of current deposition schemes for Particle-in-Cell plasma simulation

A.I. Rozanov

National research Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod

This paper presents a comparison and analysis of current deposition schemes for Particle-in-Cell plasma simulation. We consider the following schemes: cloud-in-cell (CIC), Villasenor – Buneman, first-order zigzag, triangle-shaped cloud (TSC), second-order zigzag and Esirkepov. The implementation is done as part of PICADOR code. Results of computational experiments to compare performance of the developed implementations on shared memory are given.

Keywords: current deposition, Particle-in-Cell method, numerical simulation, PICADOR, parallel computing.

References

1. Birdsall C. K., Langdon A. B. Plasma physics via computer simulation. – CRC Press, 2004.
2. Harlow F.H. The particle-in-cell method for numerical solution of problems in fluid dynamics. Los Alamos Scientific Lab., N. Mex., 1962. №. LADC-5288.
3. Yee. K. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media // IEEE Transactions on Antennas and Propagation. 1966. Vol. 14. P. 302–307.
4. Surmin I.A. et al. Particle-in-Cell laser-plasma simulation on Xeon Phi coprocessors // Computer Physics Communications. 2016. Vol. 202. P. 204–210.
5. Birdsall C.K., Fuss D. Clouds-in-Cells, Clouds-in-Cells Physics for Many-Body Plasma Simulation // Journal of Computational Physics. 1969. Vol. 3. P. 494–511.
6. Villasenor J., Buneman O. Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solvers. 1992.
7. Umeda T., Omura Y., Tominaga T., Matsumoto H. A new charge conservation method in electromagnetic particle simulation // Computer Physics Communications. 2003. Vol. 156. P. 73-85.
8. Umeda T., Omura Y., Tominaga T., Matsumoto H. Charge conservation methods for computing current densities in electromagnetic particle-in-cell simulations // Proceedings of ISSS-7, 2005.
9. Esirkepov T. Exact charge conservation scheme for Particle-in-Cell simulation with an arbitrary form-factor // Computer Physics Communications. 2001. Vol. 135, No 2. P. 144–153.
10. Taflove A. Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method. – London: Artech House, 1995.
11. Meyerov I.B., et al. Three-dimensional particle-in-cell plasma simulation on Intel Xeon Phi: performance optimization and case study, 2015. Vol. 16. P 486–500. (In Russian)