

Численное моделирование движения пылевых частиц в тракте ускорителя

А.В. Пияков^а, Д.В. Родин^а, М.А. Родина^а, А.М. Телегин^а

^а Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Московское шоссе, 34, Самара, Россия

Аннотация

Представлена модель движения частицы в тракте электростатического ускорителя микронных заряженных частиц. Приведены описание программного обеспечения, обеспечивающего формирование пакетов частиц с заданными статистическими характеристиками, и результаты моделирования, полученные на суперкомпьютере Сергей Королев. Рассмотрено быстрое действие реализации программного обеспечения для суперкомпьютера, параллельной реализации для персонального компьютера и реализации для GPU. Проведено сравнение с экспериментальными данными, показана сходимость натурального и численного экспериментов.

Ключевые слова: расчет траекторий; электростатический ускоритель; суперкомпьютер; GPU; CUDA

1. Введение

Космический мусор остается одной из главных причин деградации элементов конструкций космических аппаратов. При этом сохраняется тенденция к увеличению концентрации техногенных пылевых частиц на околоземной орбите [1]. Учитывая современный тренд на увеличение длительности работы космических аппаратов, а также на уменьшение их массы и габаритов, необходимы наземные экспериментальные установки, позволяющие проводить исследования новых материалов в условиях взаимодействия с потоками высокоскоростных пылевых частиц.

Для проведения таких исследований разработаны ускорители различных типов, в частности, ускоритель Ван де Граафа, а также электростатические и электромагнитные ускорители. Наиболее широко для ускорения крупных частиц (от 1 мм и выше) используются электромагнитные ускорители, работающие по принципу релеевского [2]. Для исследования же деградации материалов в потоке высокоскоростных микронных частиц применяются электростатические ускорители, содержащие трубки дрейфа, к которым приложено ускоряющее напряжение. Синфазность переключения ускоряющих напряжений с ростом скорости частицы может быть обеспечена двумя путями: 1) увеличением длины дрейфовых трубок; 2) увеличением частоты ускоряющего напряжения. Второй способ является более предпочтительным, поскольку обеспечивает большую гибкость настройки такого ускорителя [3].

Основными характеристиками подобных экспериментальных установок являются диапазон выходных скоростей и плотность потока частиц на выходе из ускорительного тракта. Задачей, стоящей при разработке таких ускорителей, является максимизация этих параметров. Решение данной задачи осложнено тем, что натурное моделирование конструкций в значительной степени затруднено их большими геометрическими размерами, использованием больших напряжений и необходимостью создания вакуумной системы под каждую конструкцию. Единственным путем проектирования таких установок остается математическое моделирование. Для оценки характеристик частиц на выходе тракта ускорителя с заданными параметрами, а именно: количеством трубок дрейфа, ускоряющим напряжением и геометрическими параметрами трубок, – авторами было разработано программное обеспечение, решающее поставленную задачу.

2. Подготовка исходных данных

В лабораторной установке инжектор формирует поток заряженных частиц с вероятностным распределением скоростей, а также вероятностным радиальным и угловым распределением частиц в пакете. Затем частицы попадают на вход электростатического ускорителя.

С целью математического моделирования траекторий частиц в тракте ускорителя необходимо сформировать модельные пакеты частиц с вероятностными характеристиками, соответствующими характеристикам реальных пакетов. Для этого был написан программный модуль, обеспечивающий генерацию случайных величин с требуемыми законами распределения.

Для генерации модельного пакета частиц с распределением, сходным с реальным, использовалось преобразование Бокса-Мюллера с последующим суммированием составляющих вектора скорости и нормировкой по наиболее вероятной энергии, соответствующей 450 м/с.

Алгоритм работы генератора модельного пакета частиц можно представить в следующем виде:

- 1) формирование двух случайных значений U_1 и U_2 на отрезке $(0;1]$ с помощью генератора равномерно распределенных случайных величин;
- 2) получение двух случайных величин, распределенных нормально, в соответствии с выражением:

$$x = \sqrt{-2\ln U_2} \cos(2\pi U_1);$$

$$y = \sqrt{-2\ln U_2} \sin(2\pi U_1);$$

- 3) повторение пунктов 1 и 2 позволяет получить три нормально распределенных величины, чья геометрическая сумма является вектором скорости в трехмерном пространстве:

$$V = V_x^2 + V_y^2 + V_z^2;$$

- 4) нормировка суммарного вектора скорости с помощью масштабного коэффициента, полученного из наиболее вероятной скорости.

Распределение скоростей заряженных частиц на выходе из инжектора приведено на рис. 1. Распределение модельного пакета частиц по скоростям показано на этом же рисунке.

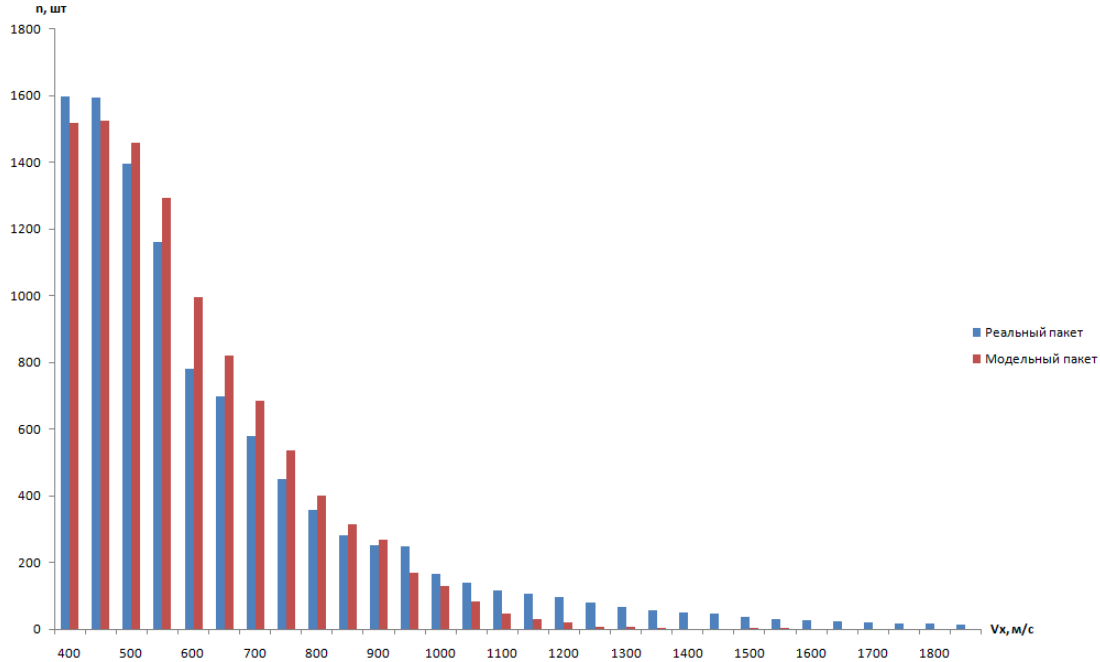


Рис. 1. Распределение реального и модельного пакетов частиц по осевым скоростям.

Генерация радиальных координат модельного пакета частиц также основана на преобразовании Бокса-Мюллера. Распределение модельного пакета по радиальной координате показано на рис. 2.

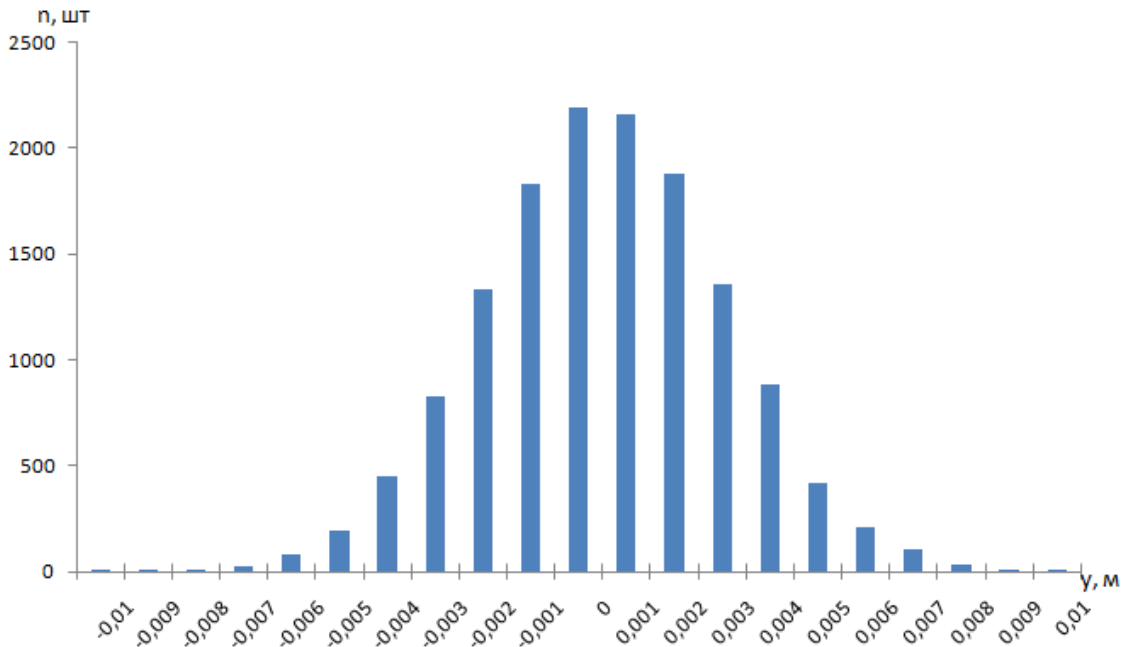


Рис. 2. Распределение модельного пакета частиц по радиальным координатам.

Благодаря соотношению размера отверстия на выходе из инжектора и расстояния до зарядной иглы на вход электростатического ускорителя поступают заряженные частицы в телесном угле, равном 2° . При формировании распределения модельного пакета частиц по радиальным скоростям (рис. 3) из рассмотрения исключаются частицы с неподходящим соотношением радиальной и осевой составляющих скоростей.

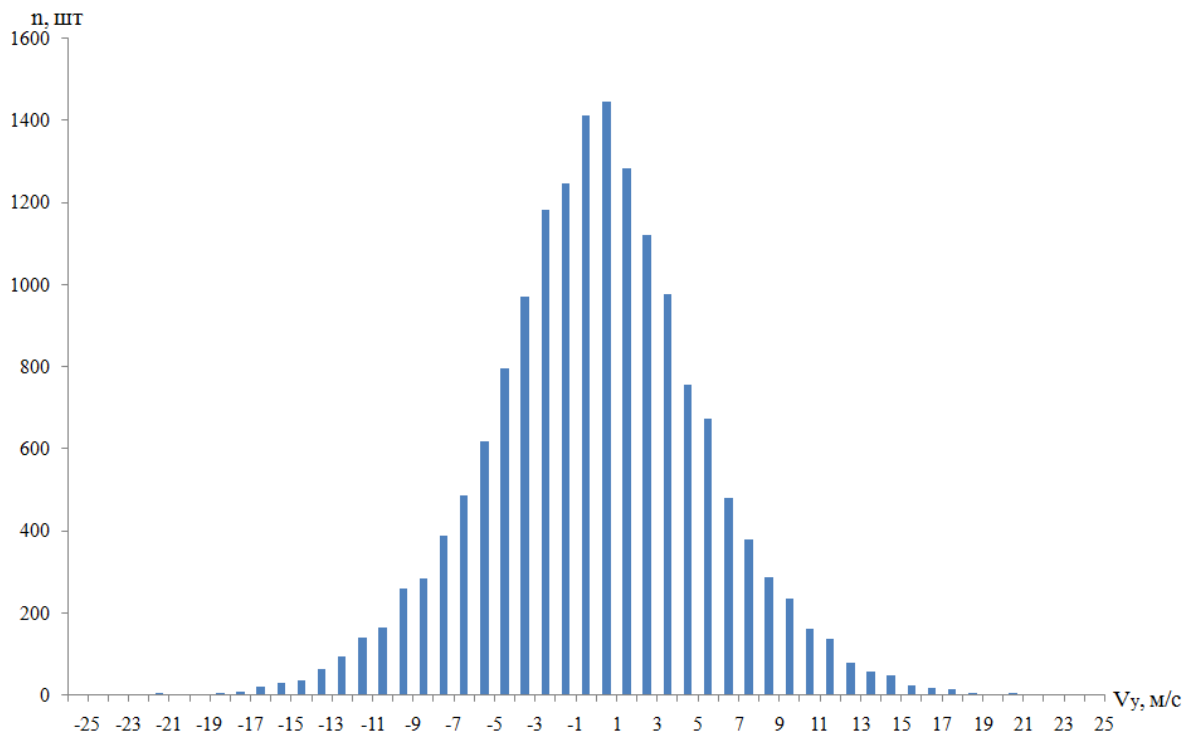


Рис. 3. Распределение модельного пакета частиц по радиальным скоростям.

Ускорение, получаемое частицей внутри тракта, в значительной степени определяется соотношением массы и заряда. Поэтому генератор модельных пакетов также формировал вероятностное распределение соотношения массы к заряду. Исходная форма распределения для натурального эксперимента получена косвенным путем, исходя из априорных знаний об ускоряющем потенциале, а также скоростях частиц на входе и выходе тракта. Реальное и модельное распределения приведены на рис. 4.

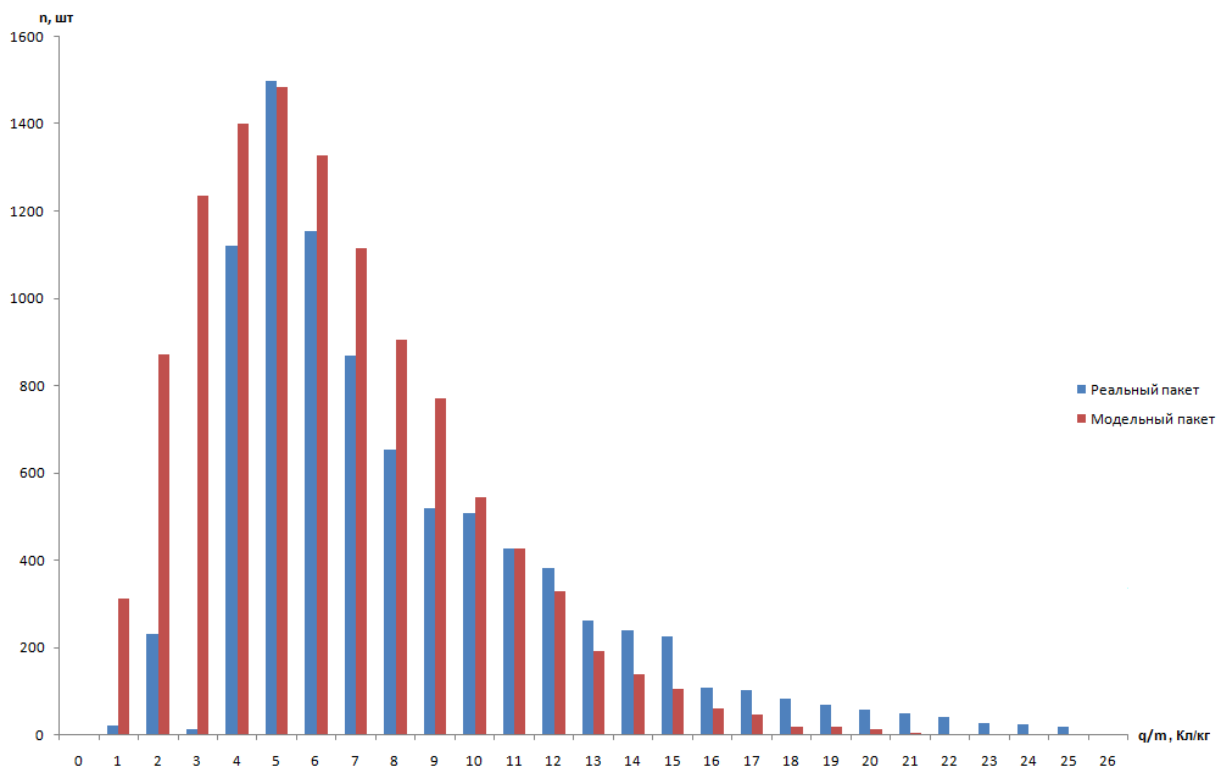


Рис. 4. Распределение реального и модельного пакетов частиц по отношению массы к заряду частиц в пакете.

Моделирование движения заряженных частиц производилось на двумерной прямоугольной сетке в виду осесимметричности задачи. В узлах сетки содержатся значения электростатической напряженности. С помощью численного расчета распределения потенциалов для пяти ускоряющих трубок с 10 кВ разностью потенциалов между соседними трубками, что соответствует реальным параметрам ускорителя, получены значения поля в узлах. Сетка ячейки имеет шаг $9,775 \cdot 10^{-5}$ м, что соответствует разбиению 10 см участка на 1023 интервала или 1024 узла.

3. Расчет траектории частиц в тракте линейного ускорителя с использованием однопроцессорного персонального компьютера

Программа расчета траекторий заряженных частиц в тракте линейного электростатического ускорителя с использованием линейного однопроцессорного персонального компьютера была написана на языке программирования C#.

Пакет модельных частиц содержит 16384 штук и формировался согласно алгоритмам, описанным в пункте 2. Все частицы стартуют с координаты $x = 0$ м, радиальная координата подчиняется нормальному закону распределения и лежит в диапазоне от $-0,01$ до $0,01$ м. Составляющие вектора скорости частиц отвечают параметрам реального распределения заряженных частиц после инжектора. Для сохранения состояния частиц использовался класс Particle, обладающий необходимыми полями для хранения двух координат, двух составляющих вектора скорости, а также кванта времени и общего времени пролета.

Интерполяция поля производилась, исходя из предположения, что частицы имеют только положительную координату по радиальной оси. Для этого в функции интерполятора добавлена операция взятия модуля от радиальной координаты частицы. Интерполяция происходила для участка поля $1 \text{ см} \times 10 \text{ см}$, соответственно координата x всегда должна лежать в пределах $0 \div 0,1$ м.

После непосредственной операции интерполирования для частиц, имеющих отрицательную радиальную координату, радиальная составляющая поля также должна быть проинвертирована, для чего использовался флаг отрицательной радиальной координаты.

Трассировка частиц производилась методом Рунге-Кутты четвертого порядка. Расчет для каждой из частиц завершался по наступлению одного из двух событий: частица вышла за предел $-0,01$ м или $0,01$ м по радиальной координате, что соответствует осаждению частицы на ускорительной трубке, или частица вышла за предел 1 м по продольной координате, что соответствует прохождению частицей всей ускорительной секции.

Каждые $0,025$ м строился срез всех характеристик частиц. После каждой из итераций происходила корректировка значения кванта времени для каждой из частиц из условия минимального количества шагов, приходящихся на одну ячейку сетки.

Все исходные параметры, такие как набор частиц и значения поля, были сохранены для последующего использования на суперкомпьютере Сергей Королев и для вычислений с использованием GPU ускорителя.

Результаты моделирования пролета пакета частиц через тракт ускорителя показаны на рис. 5 – 7.

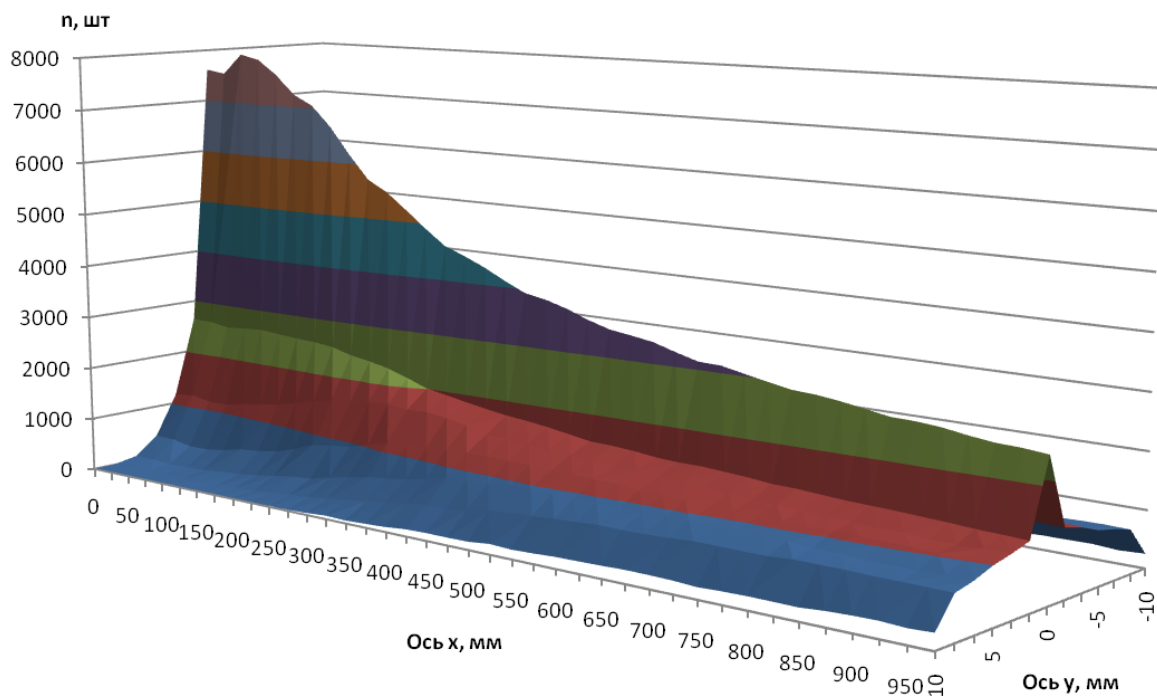


Рис. 5. Распределение частиц в тракте ускорителя на срезах по радиальной и продольной осям.

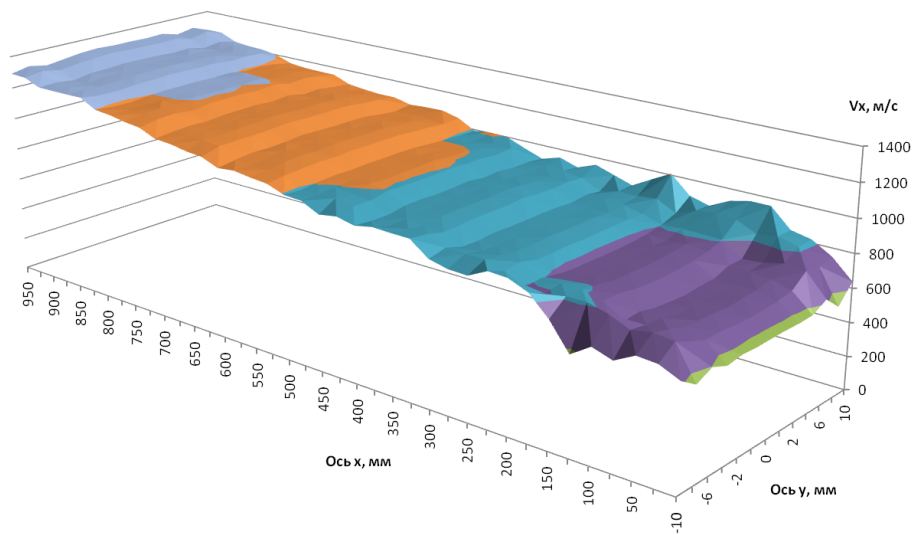


Рис. 6. Распределение средней продольной скорости в тракте ускорителя на срезах по радиальной и продольной осям.

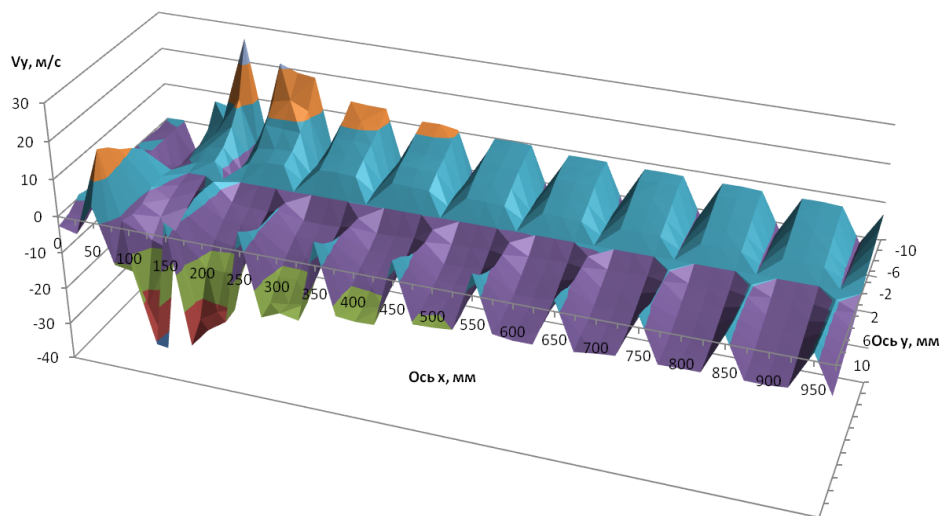


Рис. 7. Распределение средней радиальной скорости в тракте ускорителя на срезах по радиальной и продольной осям.

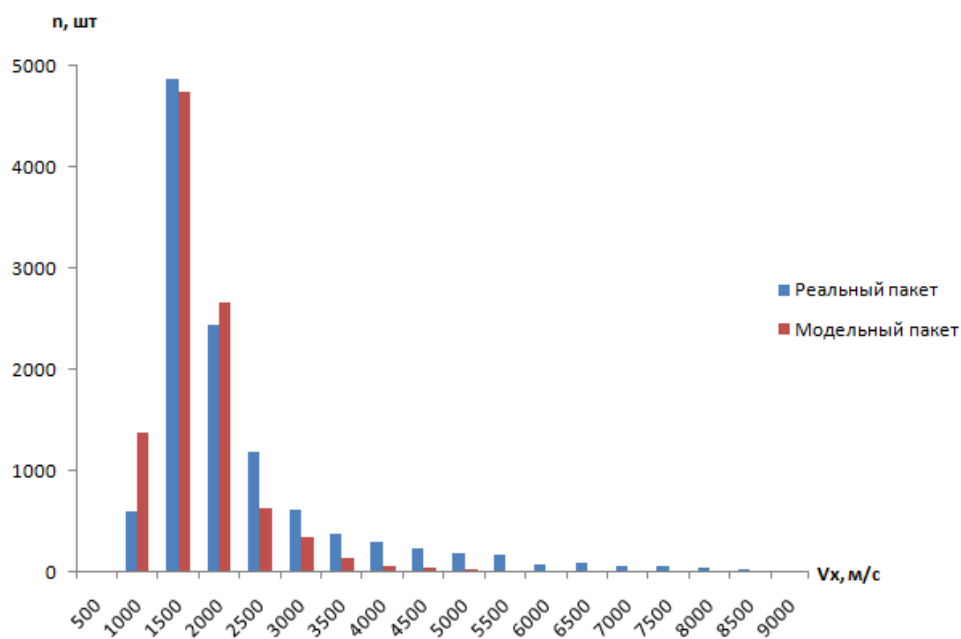


Рис. 8. Распределение реального и модельного пакетов частиц по продольным скоростям.

Можно видеть, что на выходе из тракта ускорителя средняя скорость частиц увеличивается более чем в два раза, количество частиц на оси тракта уменьшается, примерно, в $2,5 \div 3$ раза, однако количество частиц на периферии увеличивается.

График распределения средней радиальной скорости позволяет сделать вывод об эффекте фокусировки в радиальной плоскости, поскольку большую часть времени пролета тракта ускорителя скорость частиц по радиальной координате имеет знак, противоположный знаку их радиальной координаты, т.е. частицы стремятся к оси прибора.

Основной характеристикой электростатического ускорителя является диапазон скоростей, получаемых на выходе его тракта. Данные, полученные путем численного моделирования и на реальном ускорителе, приведены на рис. 8.

Приведенные выше графики показывают хорошую сходимости результатов численного и натурального экспериментов. В частности, наиболее вероятная скорость частиц на выходе из тракта составляет, примерно, $1,5 \div 2$ км/с, а количество частиц, долетающих до выхода из тракта, для реального ускорителя равно 69,9 %, а для модели – 71,3 %.

4. Расчет траектории частиц в тракте линейного ускорителя с использованием суперкомпьютера Сергей Королев

Для расчета траекторий на суперкомпьютере Сергей Королев была подготовлена версия программы для запуска на 16 процессорах. Реализация программы написана на языке C, для хранения параметров частиц использовалась структура, аналогичная классу Particle из пункта 3.

Матрица электростатического поля, а также массив с параметрами частиц подключались как внешние header файлы с описанными внутри двумерными массивами. Реализация многопоточности обеспечивалась подключением библиотеки MPI. Другим отличием реализации программы для суперкомпьютера Сергей Королев являлось то, что для интерполяции поля использовалось два отдельных метода, поскольку массивы поля были подключены как два отдельных заголовочных файла.

Аналогично программе для однопроцессорного варианта расчет для каждой из частиц производился методом Рунге-Кутты четвертого порядка до вылета за пределы тракта. Срезы состояния пакета частиц также строились каждые 0,025 м путем вывода данных в поток вывода.

После окончания работы программы программное обеспечение суперкомпьютера Сергей Королев автоматически собирало данные с каждого из 16 узлов в один файл на головном узле. Результат выполнения – набор состояний частиц на срезах, который требовалось отсортировать по индексу частицы.

Результаты моделирования пролета пакета частиц через тракт ускорителя с использованием суперкомпьютера Сергей Королев практически полностью совпадают с графиками на рис. 5 – 7, построенным по данным, полученным на однопроцессорном персональном компьютере.

5. Расчет траектории частиц в тракте линейного ускорителя с использованием GPU ускорителя

Данная реализация программы для расчета траекторий заряженных частиц в тракте линейного электростатического ускорителя была написана на языке C# с использованием библиотек CUDA.

Отличие от двух других реализаций заключается в вычислении траекторий частиц на GPU ускорителе, что требует специальной подготовки данных.

Исходные данные для расчета загружались из файлов, сохраненных программой из пункта 3. Далее все переменные размерности double сохранялись в массивы длиной равной количеству частиц. В host памяти создавались массивы данных векторного типа int2 для хранения 64-битных переменных, далее происходила конвертация данных и данные векторного типа копировались в GPU память, где и производился расчет. Значения поля в узлах сетки сохранялись в текстурной памяти, значения характеристик частиц в surface памяти.

Расчет траекторий производился методом Рунге-Кутты четвертого порядка, выгрузка данных с GPU производилась при пролете очередных 0,025 м, либо по вылету за пределы тракта. Аналогично двум другим реализациям строились распределения характеристик частиц на срезах тракта.

Результаты моделирования пролета пакета частиц через тракт ускорителя с использованием GPU ускорителя совпадают с результатами, полученными на однопроцессорном персональном компьютере и суперкомпьютере (рис. 5 – 7), с небольшими отличиями, полученными для средней радиальной скорости. Данные отличия будут объяснены в пункте 6.

6. Сравнение результатов расчетов для трех версий программного обеспечения

Для сравнения результатов вычислений, полученных тремя версиями программного обеспечения, была построена траектория отдельно взятой частицы, не выходящей за пределы тракта ускорителя. Затем были построены зависимости относительной погрешности радиальной координаты, относительной погрешности продольной скорости и относительной погрешности радиальной скорости от продольной координаты, приведенные на рис. 9 – 11.

Для расчета относительной ошибки в качестве референсных значений использовались данные, полученные с суперкомпьютера Сергей Королев.

Относительные погрешности для данных, полученных при расчете на однопроцессорном персональном компьютере, не превышают 10^{-10} % и, фактически, являются погрешностью округления. Данные же, полученные на GPU ускорителе,

обладают большей относительной погрешностью, что связано с особенностями представления чисел двойной точности в памяти GPU ускорителя. Особенно это заметно в точках перехода графика радиальной координаты и радиальной скорости через ноль. В этих точках относительная погрешность вычислений является максимальной.

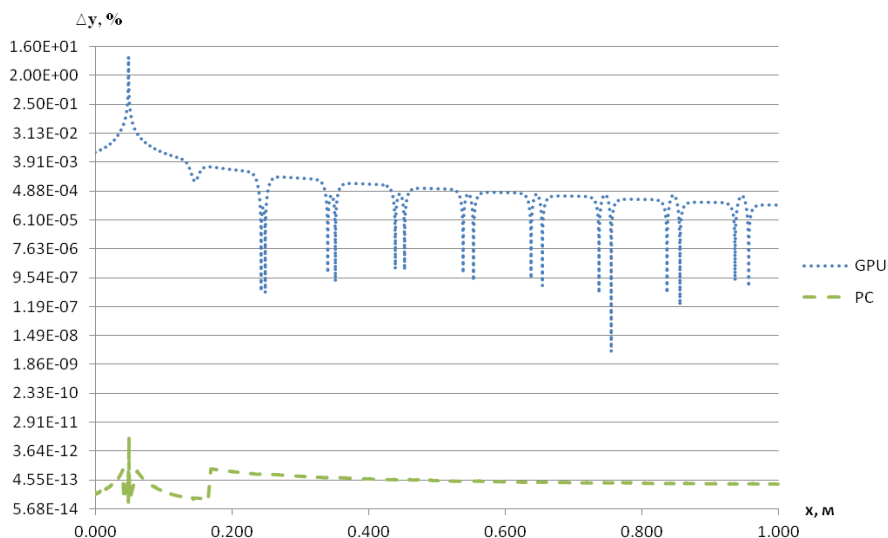


Рис. 9. Зависимости относительной погрешности радиальной координаты от продольной для отдельно взятой частицы, рассчитанные с использованием GPU ускорителя (GPU) и однопроцессорного персонального компьютера (PC).

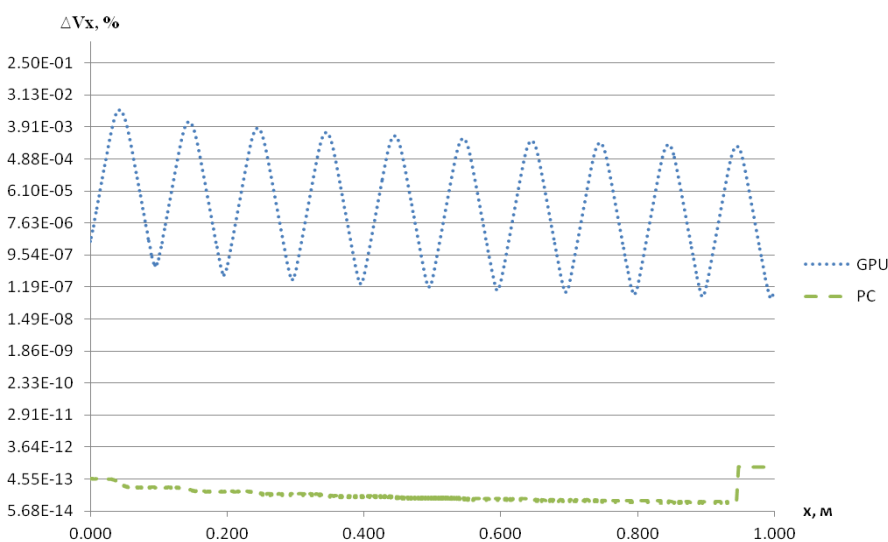


Рис. 10. Зависимости относительной погрешности продольной скорости от координаты x для отдельно взятой частицы, рассчитанные с использованием GPU ускорителя (GPU) и однопроцессорного персонального компьютера (PC).

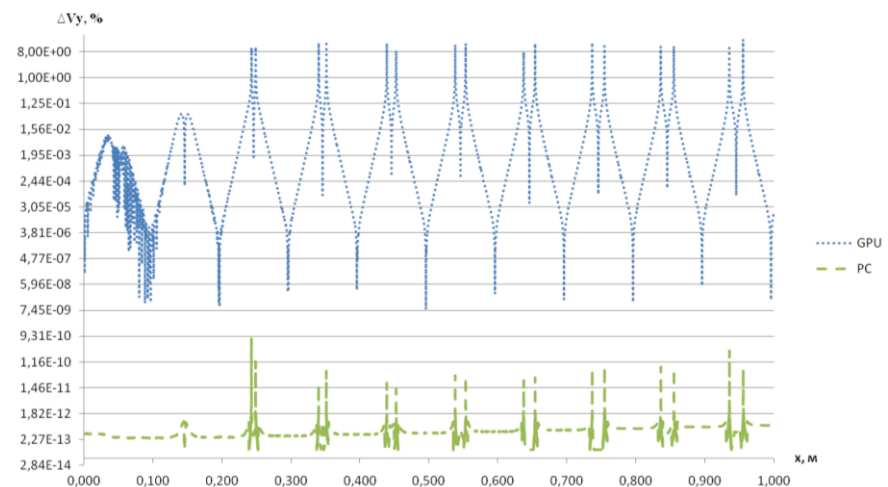


Рис. 11. Зависимости относительной погрешности радиальной скорости от координаты x для отдельно взятой частицы, рассчитанные с использованием GPU ускорителя (GPU) и однопроцессорного персонального компьютера (PC).

7. Заключение

Показанная точность для всех трех методов является вполне достаточной, чтобы адекватно моделировать поведение потока частиц.

К преимуществам версии программного обеспечения для суперкомпьютера и однопроцессорного персонального компьютера можно отнести большую точность. Однако время выполнения программ в этом случае сильно зависит от количества доступных процессорных ядер. Так, на 16 узлах суперкомпьютера Сергей Королев пакет из 16384 частиц обчислялся 4 мин 17 с, а на однопроцессорной машине в однопоточном режиме расчет занял 46 мин 34 с.

Версия программного обеспечения для GPU ускорителя (2880 ядер по 1020 МГц) обладает несколько меньшей точностью вычислений. Однако этот недостаток не является существенным, поскольку наибольшая относительная погрешность возникает для околонулевых скоростей для очень малого количества итераций и, в конечном счете, практически не влияет на результат. Например, для вышеприведенной частицы за 250000 итераций разница возникает только в 9 значащем разряде. К тому же, этот недостаток в значительной мере компенсируется скоростью работы данной версии программного обеспечения: тот же самый пакет на GPU ускорителе обчислялся за 40,64 с.

Поскольку алгоритм решения данной задачи является параллельным по входным параметрам благодаря тому, что траектории частиц не зависят друг от друга, скорость вычислений масштабируется пропорционально как количеству частиц, так и количеству задействованных процессоров. Таким образом, наиболее оптимальным является подход, при котором первичная проработка различных вариантов конструкции происходит с использованием GPU ускорителя, финальная же проверка выбранной конструкции осуществляется суперкомпьютером.

Литература

- [1] Семкин, Н.Д. Многослойные пленочные структуры в условиях воздействия микрометеороидов и частиц космического мусора / Н.Д. Семкин, М.П. Калаев, А.М. Телегин, А.В. Пияков, Д.В. Родин // Прикладная физика. –2012. – № 2. – С. 104-115.
- [2] Сухачев, К.И. Рельсовый электромагнитный ускоритель с внешним магнитным полем / К.И. Сухачев // Вестник Самарского государственного аэрокосмического университета. –2015. – Т. 14, № 1. – С. 177-189. DOI: 10.18287/1998-6629-2015-14-1-177-189.
- [3] Семкин, Н.Д. Линейный ускоритель для моделирования микрометеоритов / Н.Д. Семкин, А.В. Пияков, К.Е. Воронов, Н.Л. Богоявленский, Д.В. Горюнов // Приборы и техника эксперимента. –2007. – № 1. – С. 1-8.