

三维电磁粒子模拟并行计算的研究*

廖 臣† 刘大刚 刘盛纲

(电子科技大学物理电子学院, 成都 610054)

(2009 年 2 月 23 日收到 2009 年 6 月 2 日收到修改稿)

三维电磁粒子模拟基于时域有限差分算法(FDTD)和 PIC (particle-in-cell)方法. 根据 FDTD 和 PIC 方法的特点, 可以将整个模拟区域分割为多个子区域, 每个计算进程模拟计算一个子区域, 通过消息传递交换子区域的边界数据从而实现并行计算. 这一基本思路, 完成了并行算法的设计, 并分析了并行加速比的影响因素. 在三维电磁粒子模拟软件 CHIPIC3D 上实现了该并行算法并验证了算法的正确性. 最后应用 CHIPIC3D 并行版本对磁绝缘线振荡器和相对论速调管两种典型的高功率微波源器件进行了模拟, 证明了该并行算法能取得较好的加速比和效率.

关键词: 电磁粒子模拟, 时域有限差分, 并行计算, 高功率微波源

PACC: 0270, 4170, 5265

1. 引 言

伴随着计算机技术的发展, 基于时域有限差分算法(FDTD)^[1]和 PIC (particle-in-cell)方法^[2]的电磁粒子模拟方法已被广泛应用于高功率微波源器件^[3]的设计和研制, 缩短了器件的研制周期, 节省了实验开支, 改进和提高了器件性能. 但对复杂器件的三维模拟往往需要数十小时甚至数周的时间, 因此, 有必要采用并行计算技术. 美国空军实验室于二十世纪九十年代开始了大规模并行电磁粒子模拟软件 ICEPIC^[4]的研制, MAGIC^[5]软件 7.0 版本以上也开始支持并行计算.

本工作首先设计了三维电磁粒子模拟的并行算法, 然后在电磁粒子模拟软件 CHIPIC3D 上实现了该并行算法, 并对磁绝缘线振荡器(MILO)^[6,7]、相对论速调管(RKA)^[8]进行了并行模拟, 在八台计算机组成的集群系统下, 加速比分别达到 2.93 和 5.23.

2. 并行算法设计

2.1. 电磁粒子模拟并行计算的基本思路和基本假定

电磁粒子模拟的基本原理是: 采用 YEE 差分网

格^[9]划分模拟区域, 粒子模型为宏粒子, 时间步进采用“蛙跳”格式, 即先由麦克斯韦方程组求出各网格的电场和磁场, 然后根据洛伦兹力方程和粒子运动方程求出下一时刻每个粒子的位置和速度, 进而求得每个网格的电流密度和电荷密度, 如此循环进行. 粒子模拟的基本流程如图 1 所示.

由图 1 可知, 电磁场求解和粒子运动求解两个计算过程占用了电磁粒子模拟几乎所有的计算时间. 因此, 要有效地提高计算效率, 减少计算时间, 就应该在这两个计算过程实现并行计算. 电磁粒子模拟的电磁场计算基于时域有限差分算法, 而时域有限差分算法的电磁场递推只需要周围网格点的场信息; 又根据 Courant 稳定性条件^[2], 一个迭代计算时间步内, 粒子运动的距离不可能超过一个网格长度. 因此, 可以考虑将整个模拟区域划分为多个子区域, 每个子区域由一个计算进程进行计算.

为了描述的方便, 在此引入网格面的概念, z 向网格坐标相等的所有网格组成一个网格面. 如图 2 所示, 将模拟区域沿分界面分为两个子模拟区域, 每个子区域由一个进程模拟计算(进程 0 模拟计算分界面左边的子区域, 进程 1 模拟计算分界面右边的子区域). 不妨作出以下并行计算基本假定: 保证进程 0 所计算出的 B 网格面及其左边的网格面的所有变量(包括电场分量、磁场分量、电荷密度、电流密

* 国家自然科学基金重点项目(批准号: 10676110)、国家重点基础研究发展计划(批准号: 2007CB310401)资助的课题.

† E-mail: liaochen@uestc.edu.cn

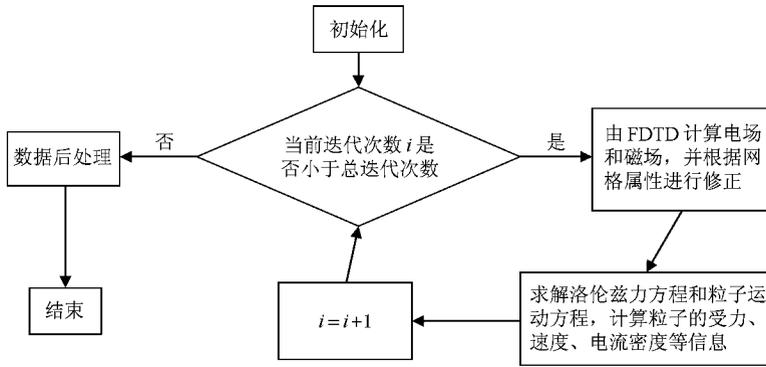


图 1 电磁粒子模拟流程图

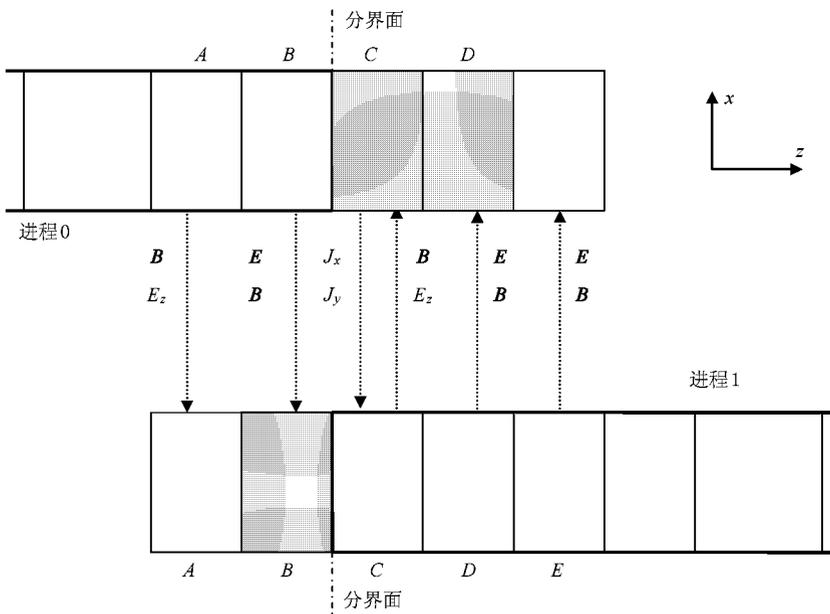


图 2 粒子模拟并行计算边界信息交换示意图

度、粒子信息), C 网格面 x 向和 y 向的电流密度 J_x, J_y 都是准确值, 保证进程 1 所计算出的 C 网格面(不包括 J_x 和 J_y)及其右边的网格面的所有变量都是准确值. 接下来对时域有限差分算法和粒子运动求解算法进行分析, 确定怎样才能保证以上假定成立.

2.2. 电磁场计算的并行算法

电磁场的变化满足如下麦克斯韦方程组:

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{E} &= -\partial \mathbf{B} / \partial t, & \nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho, \\ \nabla \times \mathbf{H} &= \mathbf{J} + \partial \mathbf{D} / \partial t, & \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

另外, 有如下关系:

$$\mathbf{D} = \boldsymbol{\epsilon} \mathbf{E} = \boldsymbol{\epsilon}_r \epsilon_0 \mathbf{E},$$

$$\mathbf{B} = \boldsymbol{\mu} \mathbf{H} = \boldsymbol{\mu}_r \mu_0 \mathbf{H}, \quad (2)$$

其中 \mathbf{E} 是电场强度, \mathbf{B} 为磁感应强度, \mathbf{H} 是磁场强度, \mathbf{J} 为电流密度, \mathbf{D} 为电位移矢量, ρ 是电荷密度, $\boldsymbol{\epsilon}$ 是介质的电容量, $\boldsymbol{\epsilon}_r$ 是相对电容量, ϵ_0 为真空电容量, $\boldsymbol{\mu}$ 是磁导率, $\boldsymbol{\mu}_r$ 是相对磁导率, μ_0 是真空磁导率. 为简单起见, 不考虑磁性介质, 即 $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$, 对于相对介电容量 $\boldsymbol{\epsilon}_r$, 只考虑如下情形:

$$\boldsymbol{\epsilon}_r = \begin{bmatrix} \epsilon_{r1} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{r2} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{r3} \end{bmatrix}. \quad (3)$$

采用 YEE 差分网格和中心差分格式, 得到电场和磁场 x 向分量的蛙跳格式的如下迭代关系式:

$$\begin{aligned}
 B_x^{n+\frac{1}{2}}\left(i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}\right) &= B_x^{n+\frac{1}{2}}\left(i, j+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}\right) + \left(-\frac{\Delta t}{\epsilon_{r2} \Delta z}\right) \epsilon_{r2} E_y\left(i, j+\frac{1}{2}, k\right) \\
 &+ \left(\frac{\Delta t}{\epsilon_{r2} \Delta z}\right) \epsilon_{r2} E_y\left(i, j+\frac{1}{2}, k+1\right) + \left(\frac{\Delta t}{\epsilon_{r3} \Delta y}\right) \epsilon_{r3} E_z\left(i, j, k+\frac{1}{2}\right) \\
 &+ \left(-\frac{\Delta t}{\epsilon_{r3} \Delta y}\right) \epsilon_{r3} E_z\left(i, j+1, k+\frac{1}{2}\right), \tag{4a}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \epsilon_{r1} E_x\left(i+\frac{1}{2}, j, k\right) &= \epsilon_{r1} E_x\left(i+\frac{1}{2}, j, k\right) + \left(-\frac{\Delta t}{\epsilon_0}\right) J_x^{n+\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2}, j, k\right) \\
 &+ \left(-c^2 \Delta t \frac{1}{\Delta x}\right) B_z^{n+\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}, k\right) + \left(c^2 \Delta t \frac{1}{\Delta x}\right) B_z^{n+\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}, k\right) \\
 &+ \left(c^2 \Delta t \frac{1}{\Delta z}\right) B_y^{n+\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2}, j, k-\frac{1}{2}\right) + \left(-c^2 \Delta t \frac{1}{\Delta z}\right) B_y^{n+\frac{1}{2}}\left(i+\frac{1}{2}, j, k+\frac{1}{2}\right). \tag{4b}
 \end{aligned}$$

y 向和 z 向迭代关系式可类似得出. 分析迭代关系式 (4a) 和 (4b), 要保证进程 0 所计算出的 B 网格面及其左边的网格面的所有电场值和磁场值都是准确值, 以及进程 1 所计算出的 C 网格面及其右边的网格面的所有电场值和磁场值都是准确值. 可以采用如下边界场信息交换技术^[10]: 如图 3 所示, 每个时间步迭代计算之前, 进程 0 将网格面 B 的 x 向和 y 向的磁场分量 H_x 和 H_y 传递给进程 1, 进程 1 将

网格面 C 的 H_x 和 H_y 传递给进程 0, 这样网格面 C 的电场切向分量 E_x 和 E_y 需要在进程 0 和进程 1 中都计算一次. 由并行算法的基本假定, 进程 1 并不能计算准确的 C 网格面的 J_x 和 J_y . 因此, 在每个时间迭代步计算之前, 进程 0 还需要将网格面 C 的 J_x 和 J_y 传递给进程 1. 经过这样的边界信息交换, 可以保证每个迭代步初始条件相同的情况下, 并行计算和串行计算迭代计算出的电场值和磁场值完全一致.

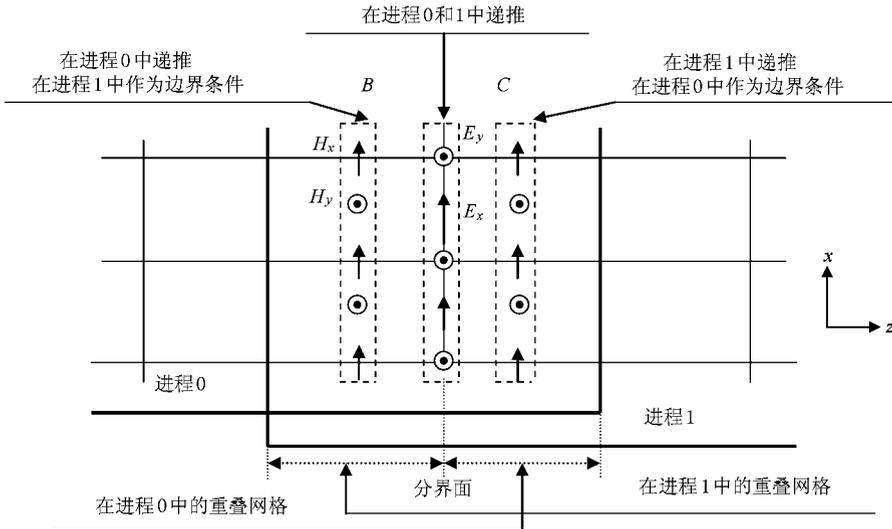


图 3 场交换示意图

2.3. 粒子运动求解的并行计算

迭代循环的第二个步骤是通过洛伦兹力方程和粒子运动方程的求解, 求得粒子的动量变化和下一个时刻的位置, 进一步求得由于粒子运动导致的各网格的电流密度和电荷密度变化.

粒子运动方程的求解方法如下:

PIC 方法的粒子模拟模型为宏粒子^[11]. 离散化洛伦兹力方程, 得到粒子动量 $P_\alpha^{n+1/2}$ 的计算表达式

$$P_\alpha^{n+\frac{1}{2}} = P_\alpha^{n-\frac{1}{2}} + \Delta t q_\alpha \left(E_\alpha^n + \frac{P_\alpha^n}{\gamma_\alpha^n m_\alpha} \times B_\alpha^n \right), \tag{5}$$

其中 α 表示带电粒子, γ 为相对论因子, m 为带电

粒子静止质量. 计算粒子动量用到的 E_{α}^n 和 B_{α}^n 是由整点网格的电场值和磁场值采用体积权重法求得的. 而 YEE 网格中, 电场分量和磁场分量都放在半网格上, 所以在求动量之前, 必须先由半网格点上的电场值和磁场值计算整点网格的电场值和磁场值, x 向计算关系如下:

$$\begin{aligned} E_x(i, j, k) &= (E_x(i + 1/2, j, k) \\ &\quad + E_x(i - 1/2, j, k))/2, \\ B_x(i, j, k) &= (B_x(i, j + 1/2, k + 1/2) \\ &\quad + B_x(i, j + 1/2, k - 1/2) \\ &\quad + B_x(i, j - 1/2, k + 1/2) \\ &\quad + B_x(i, j - 1/2, k - 1/2))/4. \end{aligned} \quad (6)$$

y 向和 z 向的计算关系可类似得出.

假定一个粒子在 n 时刻运动到网格 (i, j, k) , 根据粒子位置, 可以将粒子所在的网格分割成八个部分, 如图 4 所示. 则粒子周围 8 个整网格点对粒子所在位置电场和磁场的贡献量正比于该网格整点对应的对角体积. 设粒子 α 在 n 时刻距离 YOZ 平面, XOZ 平面, XOY 平面分别为 s_x, s_y, s_z , 令

$$w_x = s_x/\Delta x, w_y = s_y/\Delta y, w_z = s_z/\Delta z, \quad (7)$$

则粒子所在位置 x 向的电场强度和磁感应强度计算式为

$$\begin{aligned} E_{\alpha x} &= (1 - w_x)(1 - w_y)(1 - w_z)E_x(i, j, k) \\ &\quad + w_x(1 - w_y)(1 - w_z)E_x(i + 1, j, k) \\ &\quad + (1 - w_x)w_y(1 - w_z)E_x(i, j + 1, k) \\ &\quad + (1 - w_x)(1 - w_y)w_z E_x(i, j, k + 1) \\ &\quad + w_x w_y(1 - w_z)E_x(i + 1, j + 1, k) \\ &\quad + w_x(1 - w_y)w_z E_x(i + 1, j, k + 1) \\ &\quad + (1 - w_x)w_y w_z E_x(i, j + 1, k + 1) \\ &\quad + w_x w_y w_z E_x(i + 1, j + 1, k + 1), \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} B_{\alpha x} &= (1 - w_x)(1 - w_y)(1 - w_z)B_x(i, j, k) \\ &\quad + w_x(1 - w_y)(1 - w_z)B_x(i + 1, j, k) \\ &\quad + (1 - w_x)w_y(1 - w_z)B_x(i, j + 1, k) \\ &\quad + (1 - w_x)(1 - w_y)w_z B_x(i, j, k + 1) \\ &\quad + w_x w_y(1 - w_z)B_x(i + 1, j + 1, k) \\ &\quad + w_x(1 - w_y)w_z B_x(i + 1, j, k + 1) \\ &\quad + (1 - w_x)w_y w_z B_x(i, j + 1, k + 1) \\ &\quad + w_x w_y w_z B_x(i + 1, j + 1, k + 1). \end{aligned} \quad (9)$$

y 方向和 z 方向的计算式可类似得出.

得到 $\mathbf{P}_{\alpha}^{n+\frac{1}{2}}$, 可以进而求得 $\mathbf{v}_{\alpha}^{n+\frac{1}{2}}$. 又

$$\frac{d\mathbf{r}_{\alpha}}{dt} = \mathbf{v}_{\alpha}, \quad (10)$$

其中 \mathbf{v}_{α} 表示粒子 α 的速度, \mathbf{r}_{α} 表示粒子 α 的位移. 从而可求得

$$\begin{aligned} r_{\alpha x}^{n+1} &= r_{\alpha x}^n + \Delta t v_{\alpha x}^{n+\frac{1}{2}}, \\ r_{\alpha y}^{n+1} &= r_{\alpha y}^n + \Delta t v_{\alpha y}^{n+\frac{1}{2}}, \\ r_{\alpha z}^{n+1} &= r_{\alpha z}^n + \Delta t v_{\alpha z}^{n+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (11)$$

因此, 要准确求解一个网格面内的粒子受力、动量增量和位置变化, 例如求解图 2 所示的网格面 B 内的粒子受力、动量增量和位置变化, 则需要网格面 B 和网格面 C 内所有的电场值和磁场值, 以及网格面 A 的 E_z, B_x 和 B_y .

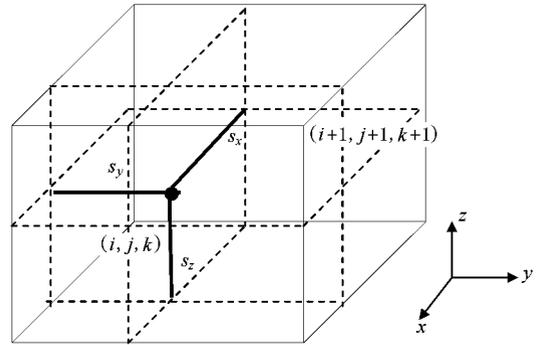


图 4 n 时刻粒子的位置

电荷密度的求解依然采用体积权重算法, 假定一个粒子在 n 时刻运动到网格 (i, j, k) , 如图 4 所示. 则粒子对周围 8 个网格整点电荷增量为

$$\begin{aligned} \Delta q(i, j, k) &= (1 - w_x)(1 - w_y)(1 - w_z)q_{\alpha}, \\ \Delta q(i + 1, j, k) &= w_x(1 - w_y)(1 - w_z)q_{\alpha}, \\ \Delta q(i, j + 1, k) &= (1 - w_x)w_y(1 - w_z)q_{\alpha}, \\ \Delta q(i, j, k + 1) &= (1 - w_x)(1 - w_y)w_z q_{\alpha}, \\ \Delta q(i + 1, j + 1, k) &= w_x w_y(1 - w_z)q_{\alpha}, \\ \Delta q(i + 1, j, k + 1) &= w_x(1 - w_y)w_z q_{\alpha}, \\ \Delta q(i, j + 1, k + 1) &= (1 - w_x)w_y w_z q_{\alpha}, \\ \Delta q(i + 1, j + 1, k + 1) &= w_x w_y w_z q_{\alpha}. \end{aligned} \quad (12)$$

而各网格整点电荷密度的增量 $\Delta\rho$ 为

$$\Delta\rho = \frac{\Delta q}{\Delta x \Delta y \Delta z}. \quad (13)$$

电流密度的求解方法^[12]如下. 如图 5 所示, 粒子从 A 点运动到 B 点, 可以假定粒子只沿直线运动, 则有图示 6 种路径, 每次随机选择一种路径作为粒子的运动路径. 然后根据该运动路径来分配电流密度. 由

FDTD 数值计算稳定性条件, 粒子单个时间步长运动的距离不可能超过一个网格长度. 考虑粒子跨越网格最多的情况, 如图 6 所示, 粒子从网格 (i, j, k) 运动

到网格 $(i + 1, j + 1, k + 1)$, 假设随机路径为第一种, 设 $r_x(i, j, k), r_y(i, j, k), r_z(i, j, k)$ 分别表示网格 (i, j, k) 的 x, y, z 方向的真实坐标.

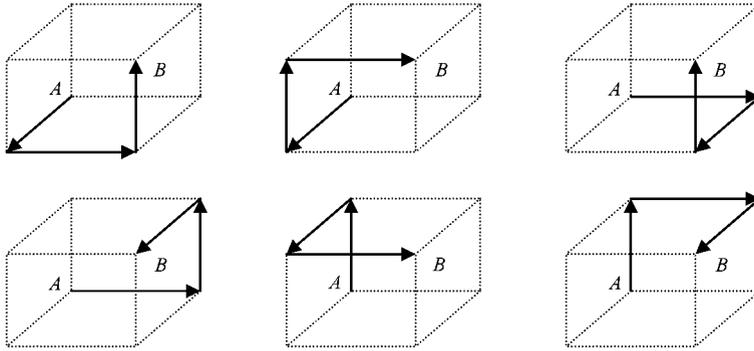


图 5 粒子运动分解示意图

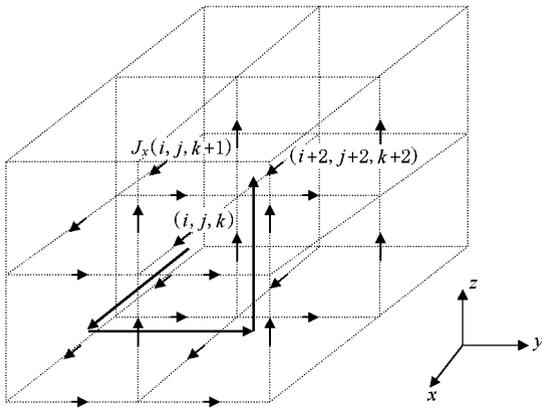


图 6 电流分配示意图

首先考虑粒子沿 x 方向运动产生的电流, 则时间步长 Δt 内粒子从 n 时刻位置运动到网格 $(i + 1, j, k)$ YOZ 面产生的电流密度为

$$J_{xi} = \frac{q_\alpha (r_x(i + 1, j, k) - r_{ax}^n)}{\Delta x \Delta y \Delta z \Delta t}, \quad (14)$$

从网格 $(i + 1, j, k)$ YOZ 面运动到 $n + 1$ 时刻产生的电流密度为

$$J_{xi} = \frac{q_\alpha (r_{ax}^{n+1} - r_x(i + 1, j, k))}{\Delta x \Delta y \Delta z \Delta t}. \quad (15)$$

然后采取如下方法将电流 J_{xi} 和 J_{xi} 分别权重到网格上去, 图 7 为网格 $(i + 1, j, k)$ 的 YOZ 截面图. 依然令

$$w_y = s_y / \Delta y, \quad w_z = s_z / \Delta z, \quad (16)$$

得到 J_{xi} 分配关系如下:

$$\begin{aligned} \Delta J_x(i, j, k) &= (1 - w_y)(1 - w_z)J_{xi}, \\ \Delta J_x(i, j + 1, k) &= w_y(1 - w_z)J_{xi}, \end{aligned}$$

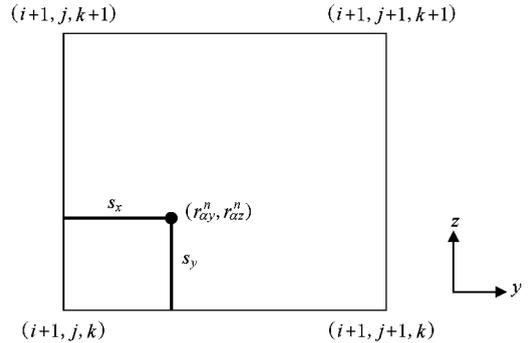


图 7 x 方向电流分配截面示意图

$$\Delta J_x(i, j, k + 1) = (1 - w_y)w_z J_{xi}, \quad (17)$$

$$\Delta J_x(i, j + 1, k + 1) = w_y w_z J_{xi}.$$

J_{xi} 的分配关系可类似得出, 类似还可得到粒子运动在 y 向和 z 向的电流密度分配关系式.

从以上对粒子运动方程的求解和电荷密度、电流密度的求解分析, 可以得出以下结论:

1) 求解第 N 个网格面内粒子的运动方程, 需要第 $N - 1$ 个网格面内的 E_z, B_x 和 B_y , 需要第 N 个网格面的 E_x, E_y, E_z, B_x, B_y 和 B_z , 需要第 $N + 1$ 个网格面内的 E_x, E_y, E_z, B_x, B_y 和 B_z .

2) 第 N 个网格面内粒子的运动可能会使第 $N - 1, N, N + 1$ 和 $N + 2$ 个网格面的整点网格的电荷密度产生变化; 可能会使第 $N - 1, N$ 和 $N + 1$ 个网格面的 J_x, J_y 和 J_z 以及第 $N + 1$ 个网格面的 J_z 产生变化.

因此, 要保证并行算法的基本假定成立, 每个迭代计算步计算粒子运动之前必须作以下处理 (见图 2):

1) 进程 0 将网格面 A 的 E_z, B_x, B_y , 网格面 B 的 E_x, E_y, E_z, B_x, B_y 和 B_z 发送给进程 1; 同时, 进程 1 将网格面 C 的 E_z, B_x, B_y, B_z , 网格面 D 和网格面 E 的 E_x, E_y, E_z, B_x, B_y 和 B_z 发送给进程 0.

2) 进程 0 将网格面 B 的上个迭代时间步计算所得的粒子信息(包括粒子的电荷量、实际位置和网格位置)发送给进程 1, 进程 1 将网格面 C 和网格面 D 的粒子信息发送给进程 0.

然后, 各进程完成各自子区域的粒子运动计算. 通过上述处理, 即可使并行计算的基本假定成立, 从而使并行计算的计算结果与串行计算一致. 利用消息传递接口(MPI)标准^[13]在 CHIPIC3D 上实现了该并行算法, 并对图 8 所示器件结构分别进行了串行计算和并行计算(将粒子运动路径选择等随机函数取固定值), 将所有网格的电场值和磁场值输出进行比较, 结果完全一致, 表明并行算法正确.

2.4. 并行加速比分析

假定第 n 个时间步长串行计算的迭代计算时间为 T_s^n , 其中计算电磁场的时间为 T_{s1}^n , 计算粒子运动相关变量时间为 T_{s2}^n , 则 $T_s^n = T_{s1}^n + T_{s2}^n$; 假定第 n 个时间步长并行计算的迭代计算时间为 T_p^n , 其中计算电磁场时, 消耗时间最多的进程的计

间为 T_{p1}^n , 计算粒子运动相关变量时, 消耗时间最多的进程的计算时间为 T_{p2}^n , 进程间交换边界信息的时间为 T_t^n , 则 $T_p^n = T_{p1}^n + T_{p2}^n + T_t^n$, 设模拟总的时间迭代步为 m 步; 从而加速比为

$$\psi = \frac{\sum_{n=1}^m T_s^n / \sum_{n=1}^m T_p^n}{\sum_{n=1}^m (T_{s1}^n + T_{s2}^n) / \sum_{n=1}^m (T_{p1}^n + T_{p2}^n + T_t^n)} \quad (18)$$

一般在电磁粒子模拟计算过程中, 粒子运动相关变量的计算时间占到整个模拟时间的百分之九十以上, 因此由(18)式可知, 要提高并行计算的加速比, 就要尽量减小 T_{p2}^n 的值; 所以, 根据各种器件的不同, 选择合适的子区域分段点, 使各进程的负载尽量平衡对提高并行加速比和效率最为重要.

另外, 在选定子区域分段点后, 网格大小和发射网格发射的粒子数对并行加速比也有一定的影响. 下面将以如图 8 所示的器件(矩形腔的一端发射一束粒子打到另一端)来定性讨论上述两个因素对并行加速比的影响.

对于图 8 所示器件, 当粒子发射出来到达另一端后, 可以粗略地认为长度相等的任意两端区间每个迭代步消耗的计算时间相等, 所以划分子区域时, 采用均分的策略. 计算结果如表 1 所示(P 表示进程数, N 表示每个发射网格每次发射的粒子数目).

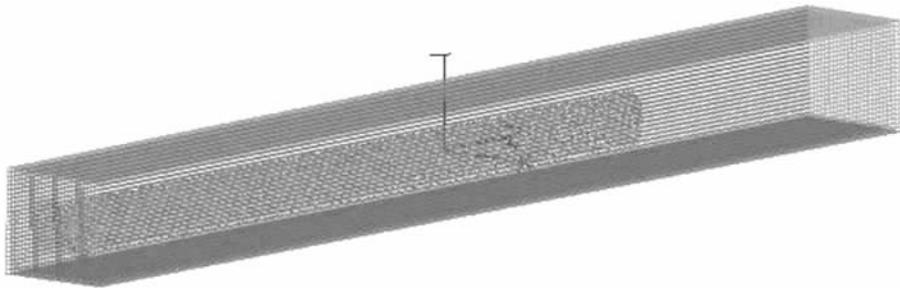


图 8 器件结构示意图

表 1 不同网格数和进程数的加速比

网格数 ($x \times y \times z$)	发射网格 的数目	加速比							
		$N = 1$				$N = 2$			
		$P = 1$	$P = 2$	$P = 4$	$P = 6$	$P = 1$	$P = 2$	$P = 4$	$P = 6$
$24 \times 24 \times 240$	6×6	1	1.30	1.61	1.85	1	1.30	1.48	1.54
$24 \times 24 \times 480$	6×6	1	1.55	2.23	2.65	1	1.79	2.04	2.53
$48 \times 48 \times 480$	12×12	1	1.37	2.18	2.82	1	1.61	2.46	3.54

由表 1 可以定性地得出以下结论：在发射网格数和 N 不变的情况下（即模拟区域内粒子数基本不变的情况下），沿 z 向网格数越多，加速比越高。这是因为沿 z 向网格数越多，每个进程对电磁场的计算量越大，而交换边界信息时，所需要交换的粒子信息越少。

增加模拟区域的粒子数（粒子数与发射网格数和 N 成正比）对加速比的影响根据增加粒子数的多少而有所不同。当增加的粒子数较小时，对加速比的影响不明显，因为增加的粒子计算量与增加的边界信息交换量的比值与原来的加速比接近甚至更小；而当粒子数增加到一定程度后，加速比会有显著提

高，因为随着粒子数的增加，增加的粒子计算量与增加的边界信息交换量的比值会逐渐增大。

3. 应 用

以下我们将应用 CHIPIC3D 并行版本对一种典型的“M”型器件 MILO 和一种典型的“O”型器件 RKA 进行并行模拟。

MILO 截面示意图如图 9 所示，主要参数如下^[6,14]：阳极筒内径为 14.3 cm，阴极半径为 5.75 cm，收集极内半径和外半径分别为 8.6 和 9.65 cm。模拟时间为 90 ns。粒子发射面沿 z 向位于 44.7—76 cm 区间。

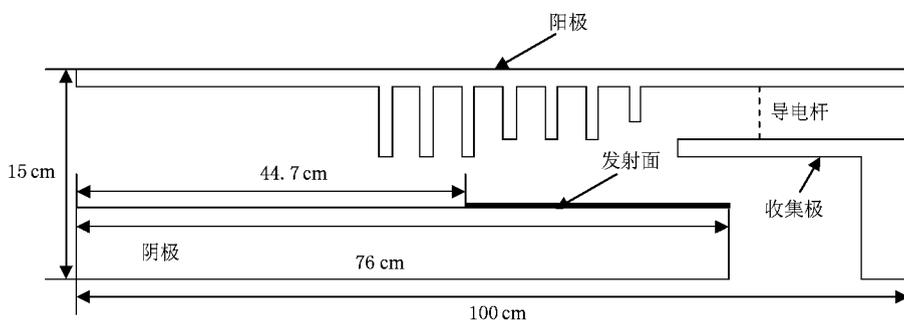


图 9 MILO 截面结构示意图

为保证并行计算时，各计算进程的计算量大体相当，并行计算分段位置的选取如表 2 所示。（ S_1 — S_7 表示分段位置）。在输入端注入幅值为 1 MV 的 TEM 波，图 10 为 38 ns 时的电子相空间图，表明此时最后几个叶片区产生了稳定的电子轮辐。测得稳定后二极管阴阳极电压为 560 kV，电流为 57 kA，平均输出功率大约为 2.77 GW（如图 11 所示），转换效率为 8.7%。从图 10 和图 11 可以看出，不同进程数的电子相空间和平均输出功率曲线有细微的差别，这是由于粒子运动轨迹以及粒子发射初始位置与随机函数有关，并不会改变器件的物理特性。

表 2 子区域分段位置

进程数	S_1/cm	S_2/cm	S_3/cm	S_4/cm	S_5/cm	S_6/cm	S_7/cm
$P=2$	60						
$P=4$	52	60.5	69				
$P=6$	49.5	55	60.5	66	71		
$P=8$	46.5	51	55.5	60	64.5	69	73.5

为定量考察这些随机因素对并行计算输出功率的影响，定义

$$\eta = \left| \frac{\sum_{i=M}^N (P_n^i - P_1^i)}{\sum_{i=M}^N P_1^i} \right|, \quad (19)$$

其中 M 为输出功率稳定时的迭代步数， N 为模拟的总迭代步数， P_n^i 为 n 个进程并行计算时第 i 个迭代步的功率值， P_1^i 为串行计算时第 i 个迭代步的功率值。由 (19) 式求得进程数为 2、4 和 8 的 η 值均为 0.01，表明随机因素不会改变器件的物理特性和参数指标，同时也证明了并行算法的正确性。不同进程数的并行计算时间、加速比和效率如表 3 所示。

表 3 不同进程数的计算时间、加速比和效率

进程数	$P=1$	$P=2$	$P=4$	$P=6$	$P=8$
计算时间/min	557	320	249	212	190
加速比	1	1.74	2.24	2.63	2.93
效率	1	0.87	0.56	0.44	0.37

RKA 截面图如图 12 所示，主要参数如下^[15]：输入腔内半径 $R_1 = 4.8$ cm，中间腔内半径 $R_2 = 4.4$ cm，输出腔内半径 $R_3 = 4.8$ cm，漂移管内半径 $R_4 = 2.4$ cm，模拟时间为 50 ns；并行计算时选取的

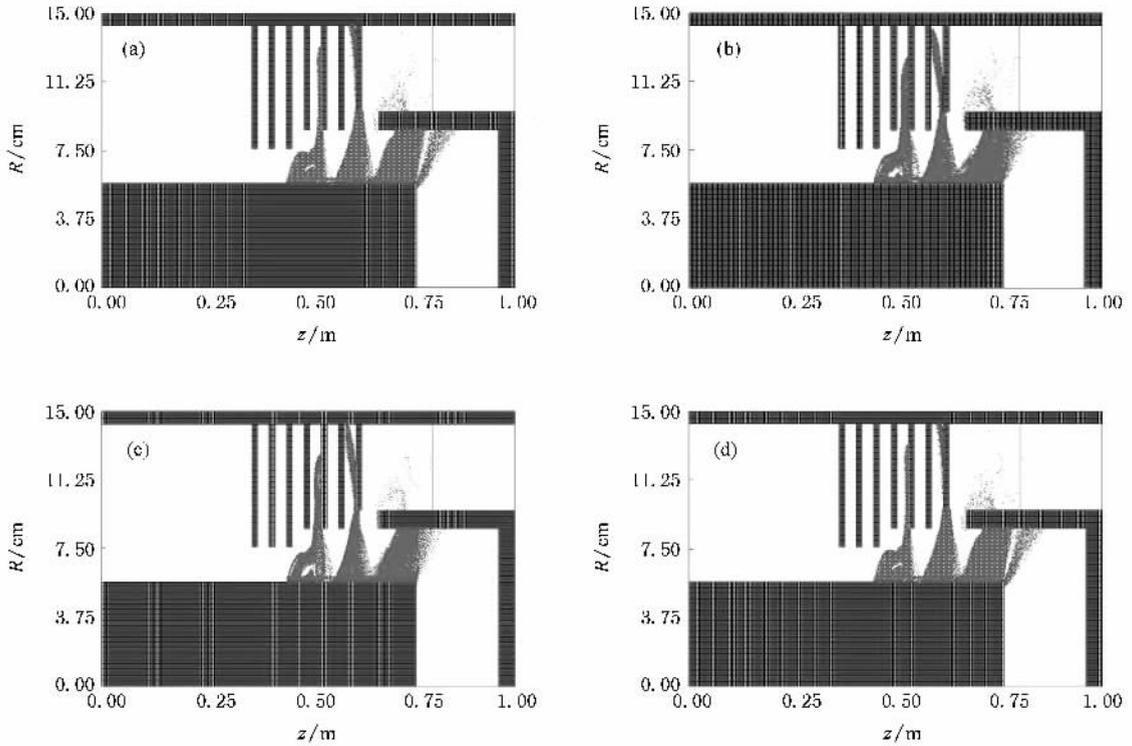


图 10 38 ns 时 MILO 电子相空间图 (a) $P=1$, (b) $P=2$, (c) $P=4$, (d) $P=8$

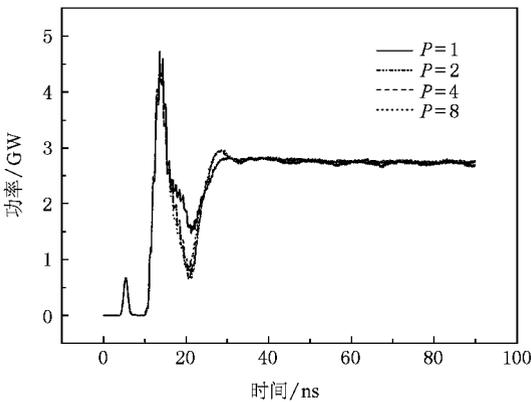


图 11 不同进程数的 MILO 平均输出功率曲线

分段位置如表 4 表示.图 13 为 49 ns 时的 (z, P_z) 电子相空间图(其中 $P_z = \gamma v_z$, γ 为相对论因子)可以看出电子出现了明显的调制.注入 3 kA, 380 kV 的环形强流电子束,测得输出功率大约为 285 MW(见图 14) 转换效率为 25%. 同样采用(19)式求得进程数为 2, 4 和 8 的 η 值分别为 0.011, 0.002 和 0.013, 表明并行算法正确.不同进程数的并行计算时间、加速比和效率如表 5 所示.

通过对 MILO 和 RKA 的并行计算模拟,可以看出并行算法设计正确,并且取得了较好的加速比和效率.另外可以看出,RKA 的加速比和效率优于 MILO,主要是因为速调管的粒子沿纵向分布较为均

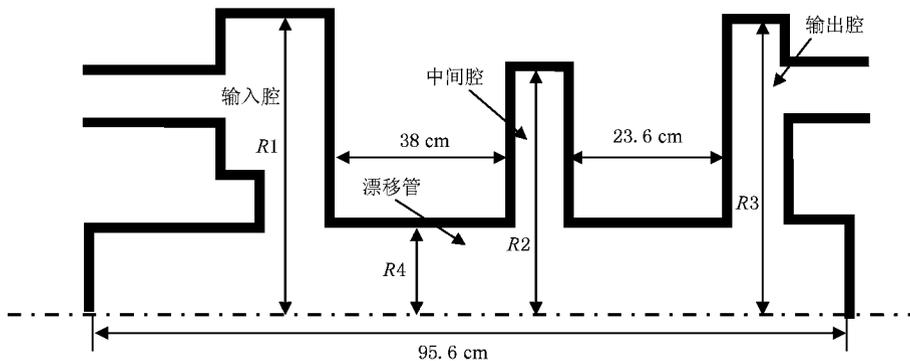


图 12 RKA 截面示意图

表 4 子区域分段位置

进程数	S1/cm	S2/cm	S3/cm	S4/cm	S5/cm	S6/cm	S7/cm
P=2	50						
P=4	25	49	73				
P=6	16	32	49	66	83		
P=8	12.5	25	37.5	50	63	75	87

表 5 不同进程数的计算时间、加速比和效率

进程数	P=1	P=2	P=4	P=6	P=8
计算时间/min	727	393	208	157	139
加速比	1	1.85	3.50	4.63	5.23
效率	1	0.93	0.88	0.77	0.65

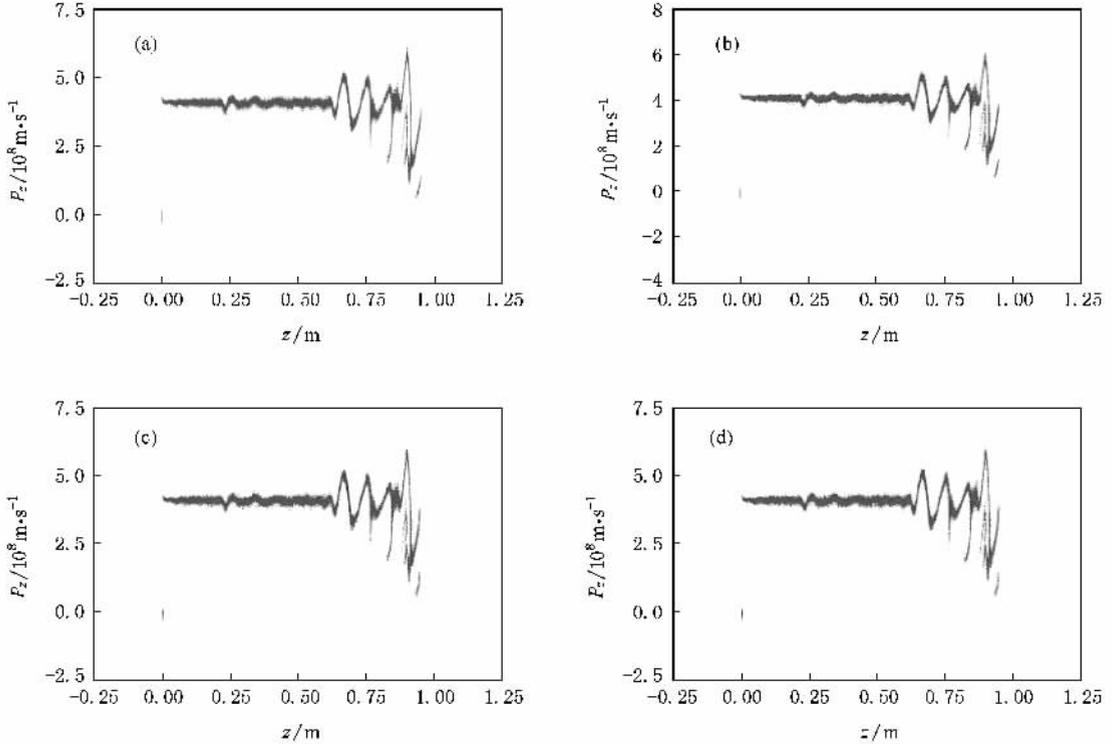


图 13 49 ns 时 RKA 电子相空间图 (a)P=1 (b)P=2 (c)P=4 (d)P=8

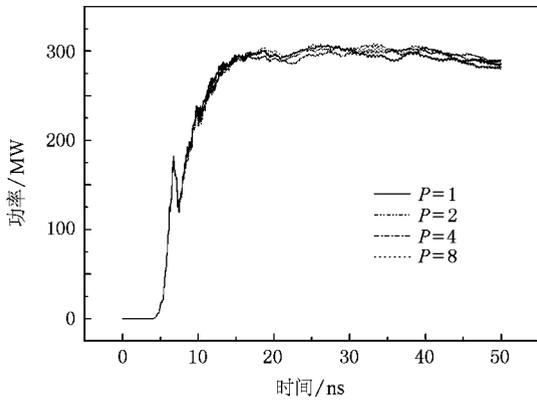


图 14 不同进程数的 RKA 平均输出功率曲线

4. 结 论

本文对基于 FDTD 和 PIC 方法的三维电磁粒子模拟并行算法的设计进行了深入的讨论,分析了算法的加速比,验证了算法的正确性;并在 CHIPIC3D 上实现了该并行算法.在由 8 台计算机组成的集群系统下,运用 CHIPIC3D 并行版本对一种典型的“M”型器件 MILO 和一种典型的“O”型器件 RKA 进行了进程数为 2,4,6,8 的并行计算模拟,在进程数为 8 的情况下分别取得了 2.93 和 5.23 的加速比.这一工作对高功率微波源器件的设计和研究工作有着重要的意义.

匀,并行计算时各进程负载更为平衡.

- [1] Taflove A 2005 *Computational Electrodynamics : The Finite-Difference Time-Domain Method* (3rd ed.)(Boston : Artech House)
- [2] Birdsall C K ,Langdon A B 1985 *Plasma Physics via Computer Simulation*(New York : McGraw-Hill)
- [3] Barker J R ,Schamiloglu E 2001 *High-Power Microwave Sources and Technologies* (New York : Wiley-IEEE Press)
- [4] Smith B J ,Havranek J J 1996 *Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* , 34th , Reno ,USA , January 15-18 1996 PAIAA-1996-835
- [5] Goplen B ,Ludeking L ,Smith D ,Warren G 1995 *Comp. Phys. Comm.* **87** 54
- [6] Guo Y H ,Fan Z K ,He H 2005 *High Power Laser and Particle Beams* **17** 436(in Chinese)(郭焱华、范植开、何 琥 2005 强激光与粒子束 **17** 436]
- [7] Fan Y W ,Zhong H H ,Li Z Q ,Shu T ,Yang H W ,Yang J H ,Wang Y ,Luo L ,Zhao Y S 2008 *Chin. Phys. B* **17** 1804
- [8] Huang H ,Fan Z K ,Tan J ,Ma Q S ,Gan Y Q ,Chang A B 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1129(in Chinese)(黄 华、范植开、谭 杰、马乔生、甘延青、常安碧 2004 物理学报 **53** 1129]
- [9] Yee K S 1966 *IEEE Trans. Antennas Propagat.* **14** 302
- [10] Yu W H ,Liu Y ,Su T 2005 *IEEE Antennas and Propagation Magazine* **47** 39
- [11] Birdsall C K ,Langdon A B 1969 *J. Comp. Phys.* **3** 494
- [12] Villasenor J ,Buneman O 1992 *Comp. Phys. Comm.* **69** 306
- [13] Chen G L ,An H ,Chen L 2004 *Parallel Algorithm Practice*(Beijing : Higher Education Press) p105 (in Chinese)(陈国良、安 虹、陈 2004 并行算法实践(北京 :高等教育出版社)第 105 页]
- [14] Liu D G ,Zhou J ,Liu S G 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 6924(in Chinese)(刘大刚、周 俊、刘盛纲 2007 物理学报 **56** 6924]
- [15] Zhou Y H 2007 *Theory Research and Simulation of Relativistic Klystron Amplifier* (M. S. Dissertation)(Chengdu : UESTC)(in Chinese)(周一环 2007 相对论速调管的理论研究及数值模拟(硕士学位论文)(成都 :电子科技大学)]

Three-dimensional electromagnetic particle-in-cell simulation by parallel computing^{*}

Liao Chen[†] Liu Da-Gang Liu Sheng-Gang

(School of Physical Electronics , University of Electronic Science and Technology of China , Chengdu 610054 , China)

(Received 23 February 2009 ; revised manuscript received 2 June 2009)

Abstract

Three-dimensional electromagnetic particle-in-cell (PIC) simulation is based on FDTD (finite-differential time-domain) and PIC methods . Based on the characteristics of these methods , the parallel algorithm was designed , which divided the whole simulation domain into a number of subdomains , and every computing process simulated a subdomain and transferred the boundary information . Then the influencing factors of speedup were analyzed . Finally , the parallel algorithm was implemented in CHIPIC3D software and the parallel version of CHIPIC3D was used to simulate a kind of magnetically insulated transmission line oscillator and the relative klystron amplifier . The results show that the parallel algorithm is correct and the speedup is increased .

Keywords : electromagnetic particle-in-cell simulation , finite-differential time-domain , parallel computing , high power microwave source

PACC : 0270 , 4170 , 5265

^{*} Project supported by the Key Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10676110) and the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2007CB310401) .

[†] E-mail : liaochen@uestc.edu.cn