هشتمین کنفرانس مهندسی و فیزیک پلاسما (PEP2021)
دانشگاه مازندران ۲۳ و ۲۴ تیرماه ۱۴۰۰

انجمن علوم و مهندسی پلاسمای ایران

افزایش سرعت روش شبیه سازی PIC-MMC بوسیله مدیریت حافظه بر اساس تغییر تعداد و اندازه ابرذرات

سیدمحمدباقر ملک حسینی
[1] دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان
*آدرس رایانامه نویسنده مسئول malekhosseini@vru.ac.ir

کلید واژه:ذره در سلول ، شبیه سازی ذره ای ، پلاسما، PIC-MCC

چکیده

کند بودن و بالا بودن هزینه محاسبات، اصلی‌ترین چالش در روش PIC-MCC است. در این پژوهش یک راهکار ساده و موثر برای افزایش سرعت محاسبات ارائه شده است. این راهکار مبتنی بر افزاش و کاهش جرم ابرذره‌ها در گام‌های زمانی شبیه سازی است. این روش برحذف ذرات در زمانی که تعداد ذرات و به تبع آن هزینه محاسبات بیشتر از توان ماشین است و افزایش تعداد در زمان‌هایی که کم بودن ذرات باعث گسستگی در حل می‌شود استوار است. فرآیند حذف و اضافه به گونه‌ای سامان داده شده است که قوانین بنیادی پایستگی نقض نشوند. مقایسه نتیجه اعمال این روش برای یک پلاسمای شبه جرقه‌ای نشان داد که زمان حل از ۴ روز به ۳۰ دقیقه کاهش می‌یابد.

Speed up the PIC-MMC simulation method, by memory management based on changing the number and size of superparticles

Seyyed Mohammad Bagher Malek Hosseini [1]
[1] vali-e-asr University of rafsanjan
*corresponding e-mail:malekhosseini@vru.ac.ir

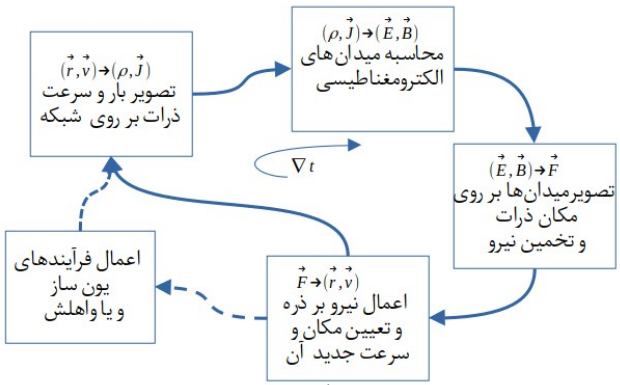
Abstract

The low speed and the high calculation cost are the main challenges in the PIC-MCC method. In this research, a simple and effective solution to increase the computing speed is presented. This solution is based on increasing and decreasing the mass of superparticles at simulation steps. This method is based on the removal of particles in steps that the number of particles and therefore the cost of calculations is more than the power of the machine, and increase their number when the lack of particles causes the solution to rupture. The process of increasing and decreasing is organized in such a way that the Survival Laws are not violated. Comparison of the results of this method for a spark-like plasma showed that the computing time was reduced from 4 days to 30 minutes.

Keywords: particle in cell, plasma simulation, PIC_MCC

مقدمه

به جرات می توان گفت که روش شبیه سازی «ذره در سلول»[1] (PIC)بهترین و کاراترین روش شبیه سازی برای پلاسما است[۱]. در این روش در یک گام زمانی، پلاسما دقیقاً بر اساس جزئیات میکروسکوپی آن بررسی می‌شود و سعی می‌شود دقیقاً تک تک ذرات باردار و یا حتی گاز خنثی زمینه به صورت ذره‌ای بررسی شده و تک تک ذرات باردار ، بر اساس نیروی وارد بر آن ها جابجا شوند و بر این اساس مکان و سرعت جدید آنها تعیین شده و دوباره میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی در محیط بدست آید. بر اساس این میدان‌های جدید، دوباره نیروی وارد بر ذرات تعیین شده و الگوریتم تکرار می‌شود(شکل ۱). نیروی‌های وارد بر ذرات بوسیله حل معادلات ماکسول به درستی قابل محاسبه هستند.



شکل ۱. طرح واره کلی الگوریتم شبیه ساز ذره در سلول

اولین قدم در حل معادلات ماکسول تعیین ρ و J است. ایده اصلی در PIC این است که چگالی جریان و بار روی نقاط شبکه، به‌وسیله درون‌یابی اطلاعات ذرات، انباشته شوند.برای این کار از روش درون‌یابی خطی استفاده می‌شود. مثلا" برای یک بعد، با

[1] Particle in cell

تقسیم بندی مکانی یکنواخت با گام Δ؛ سهم چگالی بار ناشی از ذره jام که بین نقاط iام و (i+1)ام مکان که $x_l \le x_i \le x_{l+1}$

$$\rho(x_l) = q_j\left(1 - \frac{x_j - x_l}{\Delta}\right)$$

$$\rho(x_{l+1}) = q_j\left(\frac{x_j - x_l}{\Delta}\right)$$

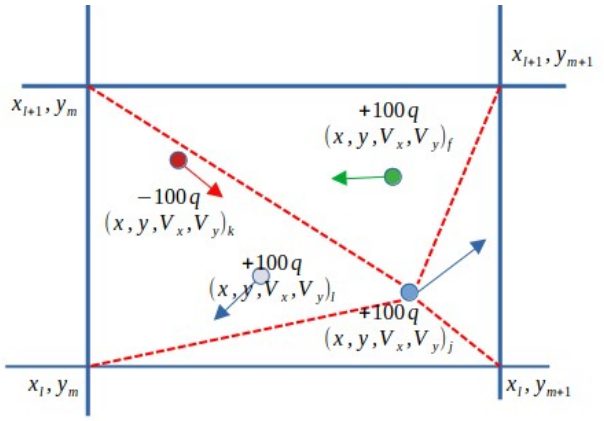
به‌صورت زیر به‌دست میآید:

که در این معادلات x_j مکان ذره ی jام که بین نقاط با مختصات x_l و x_{l+1} قرار دارد[۱-٤].

ترفندهای و محدودیت های روش ذره در سلول:

۱-تقریب ابرذره

محاسبه حرکت همه ذرات باردار حتی در یک پلاسمای بسیار رقیق و در ابعاد بسیار کوچک کار غیر ممکنی است. برای پردازش اطلاعات هر ذره، همه مولفه های سرعت و مکان ذره باید توسط ماشین ذخیره شود. فرض ابرذره این است که تعدادی ذره از محیط واقعی همواره همراه با هم حرکت می کنند. مثلاً یک ابرذره الکترون در میتواند جرمی برابر با ۱۰ برابر جرم الکترون و باری برابر با ۱۰ برابر بار الکترون داشته باشد.



شکل ۱. تصویر کردن داده های ابر ذرات بر نقاط شبکه

۲-نسبت دادن چگالی بار و جریان به محیط به جای ذرات

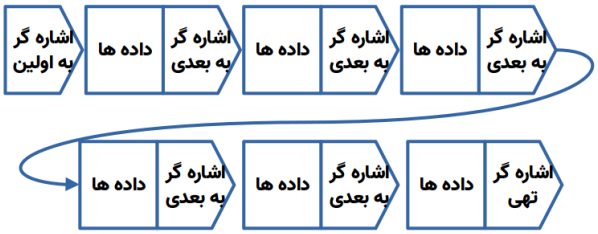
محاسبه نیروی تک تک ذرات بر روی همدیگر کاری غیر ممکن است چون تعداد نیروهای قابل محاسبه برابر با فاکتوریل تعداد ذرات است. به جای آن که نیروهای ناشی از ذرات بر روی همدیگر محاسبه شود، محیط به صورت گسسته به شبکه هایی تقسیم میشود(شکل۲). در نقاط شبکه چگالی بار و جریان و به تبع آن، میدانها محاسبه و ذخیره می‌شوند. با این کار یک تصویر گسسته از چگالی بار و جریان در محیط به دست می آید. محاسبه میدانها بر اساس میدانهای خارجی و چگالی بار و جریان در این نقاط می‌باشد. هر ذره در درون فضای یک سلول قرار دارد و نیروی وارده بر آن ذره به‌صورت بر هم نهی نیروی ناشی ازمیدانها در چهار نقطه شبکه در چهار گوشه سلول محاسبه می‌شود.

اگر تعداد ذرات را بسیار کاهش دهیم و جرم ابر ذرات را زیاد کنیم محیط پیوستگی واقعی خود را از دست داده و شدیداً گسسته می‌شود و این گسستگی تمام نتیجه شبیه سازی را نامعتبر می‌کند. بر عکس اگر جرم ابر ذرات را بسیار کم در نظر بگیریم منابع ماشین محاسبات سریعاً مصرف شده و زمان محاسبات نیز بسیار طولانی خواهد شد. واهلش پلاسما باعث حذف ذرات باردار از محیط شده و میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی داخلی و یا خارجی می‌تواند باعث یونیزاسیون گاز زمینه شده و ذرات باردار جدیدی ایجاد کند. بنابراین تعداد ذرات باید مدیریت شود.

مدیریت حافظه مهمترین عامل در افزایش سرعت شبیه سازی مدل

فرمدیریت حافظه مهمترین عامل در افزایش سرعت شبیه سازی مدل

همه زبان‌های رایانه‌ای برای آدرس دهی آرایه‌ها محدودیت‌هایی دارند. در شبیه سازی ذره‌ای پلاسما نیز معمولا تعداد ذرات آنقدر زیاد است که نمی‌توان از آرایه های برای نگه داری داده‌های آنها استفاده کرد. اگر بخواهیم هم کلیت حافظه به خوبی مدیریت شود و هم اطلاعات کاملی از تک‌تک ابر ذره ها به صورت جداگانه در دسترس باشد، استفاده از ساختمان داده «لیست پیوندی» یکی از بهترین مدل های ذخیره سازی اطلاعات است. بزرگترین ایراد لیست پیوندی این است که دستیابی به داده ها به صورت ترتیبی است و نمی‌توان عملیات مقایسه‌ای بر روی داده‌های ذرات مختلف نسبت به هم انجام داد. دلیل این امر آن است که هیچ نوع شمارنده و یا نمایه‌ای برای دسترسی مستقیم به آدرس حافظه برای یک متغیر وجود ندارد. برای ذخیره داده‌های ذرات، هر ابر ذره باید به صورت یک شئ و یا داده از نوع « ساختار» در برنامه تعریف شود. در داده‌های هر ذره یک اشاره گر حافظه به آدرس ذره بعدی جای داده می‌شود. به این ترتیب هر گره از داده های لیست پیوندی شامل داده های یک ابر ذره به علاوه یک اشاره گر به ابر ذره بعدی می باشد اگر لیست پیوندی به صورت دوطرفه تعریف شود نیاز به یک اشاره گر به گره قبلی نیز وجود دارد ولی در الگوریتم PIC-MCC نیازی نیست که پس از محاسبه داده های یک ابر ذره و رفتن به ابر ذره بعدی دوباره به داده های ابر ذره قبل دسترسی داشته باشیم.به صورت کلی در ساختمان داده لیست پیوندی تنها باید آدرس اولین داده را همواره نگه داری کرد و آدرس هرداده بعدی همیشه در داده قبلی وجود دارد.



برای آنکه شبیه سازی به روش ذره در سلول به واقعیت نزدیک شود باید تعداد ابر ذره ها را حداکثر ممکن در نظر گرفت. حداکثر تعداد ابر ذره ها حالتی است که جرم هر ابر ذره با یک ذره باردار در محیط واقعی برابر باشد مثلاً یک ابر ذره که ذرات الکترون را نمایندگی می کند باید جرمی دقیقاً برابر با یک الکترون داشته باشد اگر جرم ابر ذره ها را افزایش دهیم تعداد ابر ذره های مورد نیاز برای شبیه سازی کاهش می یابد مثلاً به ازاء هر ۱۰ الکترون یک ابر ذره الکترون قرار دهیم که بار الکتریکی آن برابر با بار ۱۰ الکترون و جرم آن نیز برابر با جرم ۱۰ الکترون باشد در این حالت ما فرض کردیم که هر ده ذره الکترون همراه هم در یک جهت حرکت می کنند این فرض باعث انحراف در روند حل مسئله می شود. اما اگر چگالی ذرات به اندازه کافی بالا باشد مشکلی ایجاد نخواهد شد. بنابراین به نظر می رسد که افزایش جرم ابر ذره ها راهکار مناسبی باشد

این راهکار در پلاسماهای چگال با چگالی بالا و یکنواخت بسیار کارآمد است اما اگر چگالی پلاسما (ذرات باردار) در محیط یکنواخت نباشد این راهکار مناسبی نخواهد بود همچنین اگر چگالی ذرات کم باشد اعمال این راهکار باعث ایجاد گسستگی در در روند حل مسئله می شود نکته دیگر این است که اگر مسئله مورد نظر یک مسئله سیال پلاسما نباشد و چگالی پلاسما به وسیله اعمال انرژی به محیط زیاد شود و یا اینکه در طی مدت زمان شبیه سازی واهلش پلاسما باعث ترکیب یون های مثبت و منفی شود نیز کارایی نخواهد داشت.

ایده استفاده شده در این مقاله این است که جرم ابر ذرات به صورت پویا، در طی مدت زمان شبیه سازی افزایش و یا کاهش داده شود به طوری که هم حجم داده‌های ذرات در اندازه مناسبی قرار داشته باشند که حافظه سامانه محاسباتی سرریز نشود و هم تعداد در حدی باشد که زمان محاسبات چندان زیاد و غیرمعقول نگردد. نکته دیگر در تغییر جرم ابر ذرات در طی شبیه سازی این است که با تغییر تعداد ذرات در محیط، چگالی ذرات تغییر خواهد کرد.

فرایند حذف هر ابرذره

چالش این است که کدام ابر ذره را حذف کنیم و کدام را نگه داریم. جرم و بار ذرات حذف شده باید بر روی ذرات باقیمانده تقسیم شود. راه حل این است که تعیین شانس حذف شدن ذره بر اساس تولید یک عدد تصادفی باشد. انتساب چگالی بار و جریان به نقاط شبکه گسسته عاملی برای ایجاد خطا است. در هر گام محاسبات نباید بیشتر از یک تا دو درصد ذرات حذف شوند تا اطلاعات محیط دچار پرشهای تصادفی نشود. حتی اگر حافظه سامانه محاسباتی نزدیک به پر شدن است نباید تعداد ذرات حذف شده در هر گام را زیاد در نظر گرفت. برای این کار به ازای هر ذره یک عدد تصادفی بین صفر تا صد تولید می‌شود اگر کمتر از ۲ باشد آن ذره را حذف می‌کنیم و در لیست پیوندی داده‌های آن را از بین برده و دو گره لیست را به وسیله اشاره گرهای حافظه مجدداً به هم وصل می کنیم. در نهایت تعهدی نداریم که دقیقاً ۲ درصد ذرات را حذف کنیم.

افزایش تعداد ابر ذرات

زمانی که تعداد ذرات در محیط بسیار کاهش پیدا می‌کند میدان های الکترومغناطیسی محاسبه شده در محیط بسیار گسسته می شوند در این حالت باید ابر ذرات سنگین شکسته و ذرات سبک تری ایجاد شود و بار الکتریکی، سرعت و جرم بین آنها تقسیم شود. چالش این است که سرعت ابر ذرات پس از شکستن ابر ذره اولیه چگونه محاسبه شود. کافی است که اصل پایستگی انرژی و پایستگی تکانه رعایت شود.

اساس روش این است که هر ابر ذره تنها به دو ذره کوچکتر با جرم نصف ابر ذره اولیه شکسته شود. ابتدا انرژی جنبشی و مالفه های تکانه برای ابر ذره اولیه محاسبه میشود.

$$E_0=\frac{1}{2}MV_0^2=E_1+E_2$$

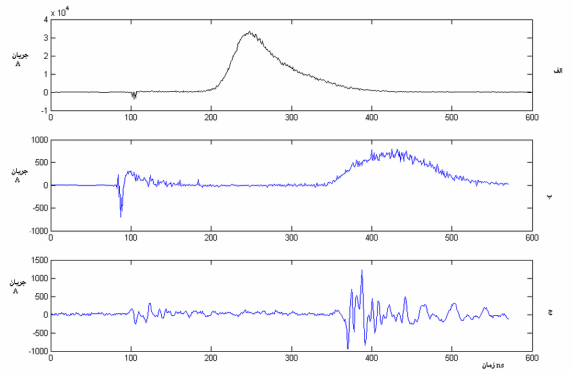
$$P_{0x}=MV_{0x}=\frac{M}{2}(V_{1x}+V_{2x})$$

$$P_{0y}=MV_{0y}=\frac{M}{2}(V_{1y}+V_{2y})$$

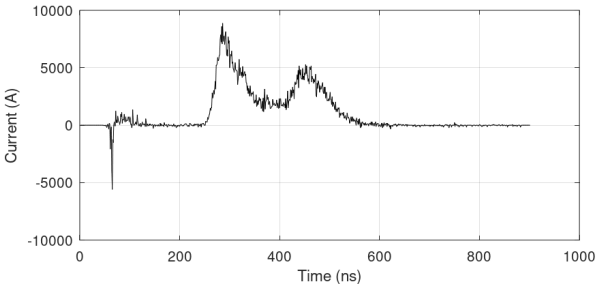
شاید بنظر برسد که تنها کافی است که در مکان هر ذره، دو ذره با جرم برابر با نصف جرم ذره اول قرار داد و سرعت آنها را با ذره قبلی یکسان در نظر گرفت. در این حالت قطعا اصول بقا نقض نمی‌شوند ولی چون ذرات دقیقا مانند هم هستند پس در همه گامهای بعدی محاسبات، نیروی یکسانی را تحمل خواهند کرد و در نتیجه تغییرات حالات آنها دقیقا یکسان بوده و همواره در یک مکان و سرعت یکسان باقی می‌مانند یعنی ابرذره اولیه فقط به ظاهر شکسته شده است.بنابراین باید سرعت ذرات جدید متفاوت باشد.دو رویکرد می‌توان در پیش گرفت. اول اینکه سرعت ذرات جدید را به صورت کاملا تصادفی انتخاب کرد و تنها اصول پایستگی را مد نظر قرار داد. حالت دوم این است که مولفه‌های سرعت ذرات تنهابه اندازه یک عدد تصادفی در محدوده کمتر از چند درصد مولفه‌های سرعت ابرذره قبلی با هم متفاوت باشند. در هر دو رویکرد ابتدا مولفه‌های سرعت برای اولین ذره جدید محاسبه می‌شود و سپس با حل معادلات پایستگی انرژی و تکانه سرعت ذره دوم محاسبه می شود. هر چند در مسئله خاص مورد آزمایش، این دو رویکرد نتایج مشابهی داشتند ولی به نظر میرسد استفاده از رویکرد دوم منطقی‌تر باشد.

آزمایش روش و نتیجه گیری

شکل شماره ۳ نشان دهنده نتایج بدست آمده در مرجع شماره ۵ است. در این مرجع که کاری قدیمی‌تر از مالف است، یک کلید شبه جرقه‌ای ساخته شده و سپس توسط روش ذره در سلول شبیه سازی شده است. در این شکل کاملا مشخص است که نتایج شبیه سازی با آزمایش منطبق است.



شکل ۳ الف نشان دهنده جریان محاسبه شده برای حالتهای: الف- با ولتاژ اعمالی ۸۰۰۰ ولت ب-ولتاژ ٦۰۰ ولت. ج-جریان اندازه‌گیری شده توسط سنجه روگوفسکی[۲](مشتق جریان) در آزمایشگاه برای ولتاژ٦۰۰ است[۵].



شکل٤ : نتیجه شبیه سازی برای حذف بیش از ۱۰ درصد ذرات در هر گام.

پس از اعمال الگوریتم حذفی نتایج تقریبا بدون تغییر باقی ماند ولی سرعت حل مسئله بسیاز زیاد شد به طوری که نتایج اعمال الگوریتم حذف و اضافه کردن یک درصد ذرات در طی ۳۰ دقیقه نتایج مشابه با یک شبیه سازی بدون حذف بسیار کند در مدت ٤ روز را بدست آورد.

شکل ٤ نتایج تغییرات فاحشی را نشان داده است. شکل نتیجه اعمال حذف بیش از ۱۰ درصد ذرات در الگوریتم حذف است. مقایسه نتایج نشان می‌دهد که اگر درصد ذرات حذفی در گامهای محاسبات را در محدوده کمتر از یک درصد کل ذرات نگه داریم با آنکه سرعت شبیه سازی بسیار زیاد می‌شود ولی نتایج اعتبار خود را از دست نمی‌دهند.

مرجع ها

[1.] C. K. Birdsall, Life Fellow Particle-in-Cell Charged-Particle Simulations,Plus Monte Carlo Collisions With Neutral Atoms, PIC-MCC, IEEE(Invited Paper)

[2.] Philip L.Pritchett ,Particle-in-Cell Simulation of Plasmas . Space Plasma simulation, (Springer-Verlag, Heidelberg 2002) page 1 to 23

[3.] J. P. Verboncoeur Plasma Theory and Simulation Group Department of Nuclear Engineering Department of Electrical Engineering and Computer Science University of California Berkeley, CA 94720-1770”Particle-in-Cell Techniques”

[4.] J. Christiansen and C. Schultheill, "Production of high current particle beams by low pressure spark discharge," *Z.* Phys., vol. A290, p. 35,1979.

[.5] پایان نامه کارشناسی ارشد. سیدمحمدباقر ملک حسینی دانشگاه ولی عصر رفسنجان. بهمن ۱۳۸۵

2**Rogowski coils**