

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ ДЛЯ ПРОЕКТИРОВАНИЯ ИМПУЛЬСНОЙ КРИОГЕННОЙ ЯЧЕЙКИ

А. С. Айриян ^{а, 1}, Я. Буша (мл.) ^{а, б}, О. Григорян ^{а, в}, Е. Е. Донец ^а

^а Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

^б Институт экспериментальной физики Словацкой академии наук, Кошице

^в Ереванский государственный университет, Ереван

В работе рассматривается решение задачи оптимизации характеристик теплового источника криогенной ячейки — многослойной цилиндрической конфигурации сэндвичного типа, предназначенной для импульсной дозированной инъекции рабочих веществ в ионизационную камеру источника многозарядных ионов. Для решения задачи оптимизации разработан и программно реализован гибридный MPI+OpenMP алгоритм параллельных вычислений, основанный на методе перебора для нахождения максимума интеграла, пропорционального количеству испаренных с поверхности ячейки молекул газа. Решение оптимизационной задачи для конкретной конфигурации ячейки на суперкомпьютере «Говорун» продемонстрировало ускорение расчетов в десятки и сотни раз.

The paper considers the problem of optimization of the heat source characteristics of the cryogenic cell — a multilayer cylindrical configuration of sandwich type, intended for pulse dosed injection of the working gaseous species into the ionization chamber of the multiply charged ion source. For solving the optimization problem, a hybrid MPI+OpenMP parallel computation algorithm based on the brute force method for finding the maximum of the integral proportional to the number of the evaporated gas molecules from the surface of the cell has been developed and implemented. The solving of the optimization problem for the particular configuration of cells using the supercomputer “Govorun” has demonstrated the acceleration of calculations by tens and hundreds of times.

PACS: 07.05.Tp; 02.60.Pn; 02.70.Bf

ВВЕДЕНИЕ

Целью данной работы является разработка и реализация алгоритмов решения задачи оптимизации характеристик источника криогенной ячейки — многослойной цилиндрической конфигурации сэндвичного типа, предназначенной для дозированной импульсной инъекции рабочих веществ (например, радиоактивных короткоживущих изотопов) в ионизационную камеру источника многозарядных ионов [1]. Такая инъекция реализуется созданием необходимого температурного режима на поверхности ячейки, когда температура достигает заданного значения на несколько миллисекунд, а затем быстро снижается до следующего импульса.

¹E-mail: ayriyan@jinr.ru

Функционирование механических створок для импульсной инжекции газообразных смесей в миллисекундном диапазоне при криогенных температурах и в сильном внешнем магнитном поле технологически ненадежно, и поэтому реальной альтернативой может быть использование температурных свойств газов в криогенном диапазоне. Действительно, давление насыщающих паров различных газов сильно зависит от температуры и может меняться на несколько порядков в интервале между температурами жидкого гелия 4,2 К и жидкого азота 78 К [5]. В результате, при более низкой температуре, рабочее вещество просто заморожено на внешней цилиндрической поверхности ячейки, а при увеличении температуры всего на 5–15 К давление его насыщенных паров может достигать 10^{-6} Торр, что означает, что молекулы рабочего вещества эффективно инжектируются — проникают в область ионизации, которая должна располагаться в непосредственной близости от поверхности ячейки. Например, для криптона (см. [2]) необходимое для инжекции давление паров достигается при температуре 42,2 К. Этот механизм также предложен для криогенной сепарации газов [3].

Таким образом, используя указанную температурную зависимость давления насыщенных паров, можно выделить для каждого рабочего вещества два критических значения температуры, при одном из которых рабочее вещество практически заморожено — «температурные створки» закрыты для инжекции, а при другом, когда давление насыщенных паров не менее 10^{-6} Торр, «температурные створки» открыты для инжекции. Моделирование импульсных процессов изменения температуры в криогенной ячейке обеспечивается решением соответствующего уравнения теплопроводности в многослойной цилиндрической области.

Криогенная ячейка представляет собой многослойный цилиндр (рис. 1), сердечник которого на краях контактирует с термостатом (находящимся при температуре жидкого гелия 4,2 К), который обеспечивает теплосток для охлаждения ячейки. Поверхность нагревается при пропускании через внутренний проводящий слой импульсного электрического тока в течение времени t_{src} , затем ячейка охлаждается, отдавая тепло термостату. Такой процесс повторяется с периодом t_{prd} .

Дизайн такой криогенной ячейки был предложен и испытан в ЛФВЭ ОИЯИ [1]. Экспериментальные результаты продемонстрировали, что функционирование такой криогенной ячейки (для рабочего газа метана), будучи в целом удовлетворительным, тем не менее нуждается в дальнейшей оптимизации. В работе [4], в рамках рассматриваемой в

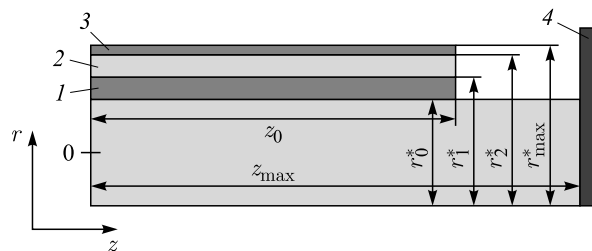


Рис. 1. Схематический вид четверти плоскости среза ячейки, проходящего через ось. Нижняя линия — ось цилиндра (ось симметрии), $r = 0$. 0 — сердечник (теплосъем), имеющий контакт с термостатом; 1 — электроизолятор между проводящим слоем и сердечником; 2 — проводящий слой (нагреватель); 3 — внешний изолятор; 4 — термостат (жидкий гелий)

ней модели, было проведено моделирование «температурных створок» для криогенной ячейки. В настоящей работе предлагаются задача оптимизации и алгоритм ее решения, которые позволяют повысить эффективность исследования и проектирования криогенной ячейки для эффективной импульсной инжекции рабочих веществ в область ионизации источников многозарядных ионов.

1. ОПИСАНИЕ ЗАДАЧИ

1.1. Начально-краевая задача. Рассмотрим уравнение теплопроводности в цилиндрических координатах [9], описывающее процесс эволюции температурного поля в замкнутой цилиндрической области $\bar{\Omega}$ ($r \in [0, r_{\max}(z)]$, $z \in [0, z_{\max}(r)]$):

$$\rho(r)c_V(T, r) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r\lambda(T, r) \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda(T, r) \frac{\partial T}{\partial z} \right) + X(T, t, r). \quad (1)$$

Здесь теплофизические коэффициенты нелинейно зависят от температуры и претерпевают разрывы первого рода при некоторых значениях радиуса r_d^* ($d = 1, 2, 3$), функцию источника можно представить в следующей форме:

$$X(T, t, r) = \chi(T) \frac{I^2(r)}{S_C} \sum_{n=0}^{\infty} [\theta(t - n t_{\text{prd}}) - \theta(t - n t_{\text{prd}} - t_{\text{src}})], \quad (2)$$

где $\theta(t)$ — функция Хевисайда; $n \in \mathbb{N}_0$ — индекс периода; $\chi(T)$ — зависящее от температуры удельное сопротивление проводящего слоя ячейки; $I(r)$ — амплитуда электрического тока, имеющая кусочно-постоянную зависимость по радиусу, она отлична от нуля и равна I_0 только в области проводящего слоя (нагревателя), через который пропускается ток; S_C — площадь поперечного сечения нагревателя; t_{prd} и t_{src} — время одного периода работы ячейки и время действия источника соответственно. Стоит отметить, что для численных расчетов была реализована модель переходного процесса [11] при «включении» и «выключении» источника, сглаживающая скачки функции источника (2).

Замыкающие соотношения для постановки начально-краевой задачи определяются из аксиальной симметрии и физических условий, а именно, начальное условие вытекает из предположения, что перед началом функционирования криогенная ячейка находится в равновесии с термостатом:

$$T(r, z, t = 0) = T_0, \quad (3)$$

где $T_0 \equiv 4,2$ К — температура жидкого гелия. Если учесть, что ячейка находится в вакуумной камере, и пренебрегая энергией, требующейся для испарения молекул газа с поверхность ячейки, предполагаем, что поток через границу равен нулю. Соответственно, условия на границе области формулируются следующим образом:

$$\begin{cases} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = 0 & \forall (r, z) \in \delta\Omega \setminus \{(r, z) : z = z_{\max}\}, \\ T = T_0 & \forall (r, z) \in \{(r, z) : z = z_{\max}\}, \end{cases} \quad (4)$$

где $\delta\Omega$ — граница области Ω , а \mathbf{n} — нормаль к границе области $\delta\Omega$. Нулевой поток через границу $\delta\Omega_{r=0} = \{(r, z) : r = 0\}$ вытекает из условия аксиальной симметрии.

Температура в правой части границы области всегда равна T_0 , так как она находится в контакте с термостатом. При этом условия сопряжения сред между слоями считаются идеальными, т. е. обеспечивается неразрывность температуры на границе сопряжения и потока через нее.

1.2. Численное решение. Начально-краевая задача (1)–(4) решается численно методом переменных направлений [7–10]:

$$\bar{\rho}_{i,j} \bar{c}_{V,i,j} \frac{\bar{T}_{i,j} - T_{i,j}}{0,5\tau_k} = \Lambda_r [\bar{T}_{i,j}] + \Lambda_z [T_{i,j}] + \bar{X}_{i,j}, \quad (5)$$

$$\bar{\rho}_{i,j} \bar{c}_{V,i,j} \frac{\bar{T}_{i,j} - \hat{T}_{i,j}}{0,5\tau_k} = \Lambda [\bar{T}_{i,j}] r + \Lambda [\hat{T}_{i,j}] z + \bar{X}_{i,j}, \quad (6)$$

где Λ_r и Λ_z — разностные операторы, а T , \bar{T} и \hat{T} — решения на текущем временном слое, на полуслое и на искомом временном слое соответственно. Разностная схема определена на следующей неравномерной сетке:

$$\bar{\omega} = \{(t, r, z) \mid \begin{aligned} 0 \leq t < \infty, \quad t_{k+1} = t_k + \tau_k, \quad k \in \mathbb{N}; \\ 0 \leq r \leq r_{\max}, \quad r_{i+1} = r_i + h_{i+1}, \quad i = 1, \dots, N_r(j); \\ 0 \leq z \leq z_{\max}, \quad z_{j+1} = z_j + \eta_{j+1}, \quad j = 1, \dots, N_z(i) \}. \end{aligned} \quad (7)$$

Схема (5), (6) является нелинейной, решается итерационно с адаптивным шагом по времени. В данной работе мы опустим такие подробности, как вывод разностной схемы, аппроксимация условий сопряжения сред и др.

1.3. Некоторые определения и обозначения. Введем обозначения. В точке ($r = r_{\max}$, $z = 0$) минимальная и максимальная температуры n -го периода $T_{\min}^{(n)}$ и $T_{\max}^{(n)}$ соответственно определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} T_{\min}^{(n)} &= \min_{n t_{\text{prd}} \leq t \leq (n+1) t_{\text{prd}}} [T(t, r = r_{\max}, z = 0)], \\ T_{\max}^{(n)} &= \max_{n t_{\text{prd}} \leq t \leq (n+1) t_{\text{prd}}} [T(t, r = r_{\max}, z = 0)]. \end{aligned} \quad (8)$$

Температурный режим считается установившимся, если для любого малого положительного значения δ найдется такое значение N , что для любого $n > N$ будут справедливы следующие условия:

$$\begin{cases} |T_{\min}^{(n+1)} - T_{\min}^{(n)}| < \delta, \\ |T_{\max}^{(n+1)} - T_{\max}^{(n)}| < \delta. \end{cases} \quad (9)$$

При выполнении условия (9) для заданного значения δ индекс периода отбрасывается; таким образом, минимальная и максимальная температура установившегося температурного режима обозначаются T_{\min} и T_{\max} соответственно.

Параметры t_{prd} и t_{src} являются свободными и могут варьироваться в некотором интервале. Амплитуда электрического тока, проходящего через проводящий слой I_0 , должна

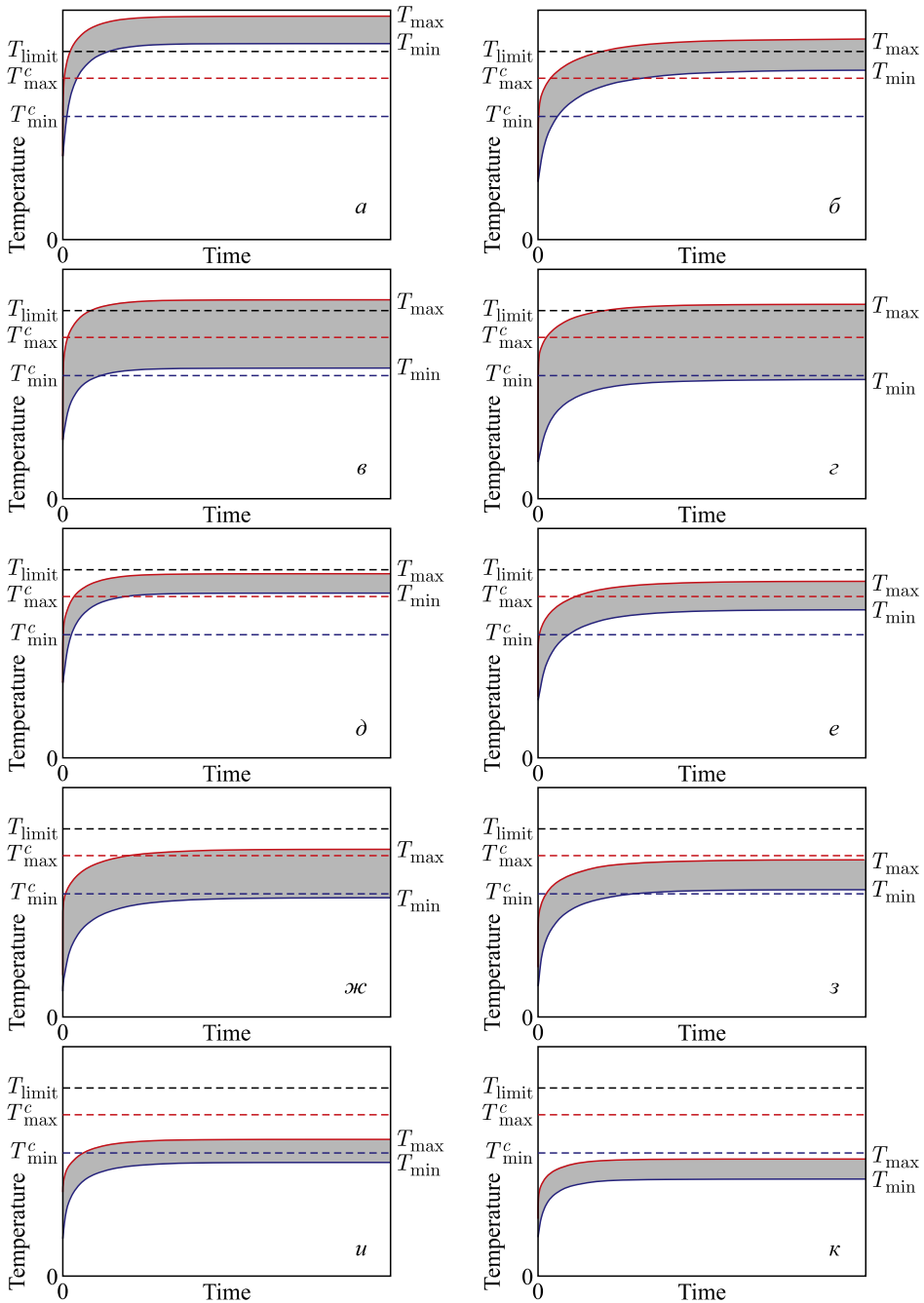


Рис. 2 (цветной в электронной версии). Возможные решения начально-краевой задачи в точке $(r = r_{\max}, z = 0)$. Красная и синяя линии — максимальная и минимальная температура соответственно. Штриховые линии: минимальная (синяя) и максимальная (красная) критическая температура, максимально допустимое значение температуры (черная)

быть вычислена так, чтобы установившийся температурный режим удовлетворял следующим условиям:

$$\begin{cases} T_{\min} < T_{\min}^c, & (10a) \\ T_{\max} > T_{\max}^c, & (10б) \\ T_{\max} \leq T_{\lim}, & (10в) \end{cases}$$

здесь T_{\min}^c и T_{\max}^c — заданные критические значения температуры. При выполнении условия (10а) «температурные створки» считаются «закрытыми», а при выполнении условия (10б) «открытыми». T_{\lim} — ограничение на значение температуры сверху. При выполнении условий (10) реализуются «температурные створки» (рис. 2, ж), при нарушении данных условий считается, что «температурные створки» не могут быть реализованы (см. рис. 2, а–е и рис. 2, з–к).

При этом очевидно, чем больше (с учетом условия (10в)) и чем дольше значение температуры будет превышать максимальное критическое значение на как можно большей поверхности ячейки, тем больше молекул требуемого газа будет испарено и попадет в область ионизации. Это позволяет сформулировать задачу оптимизации для нахождения таких значений t_{prd} , t_{src} и I_0 , которые максимизируют количество испаренных молекул за импульс.

2. ЗАДАЧА ОПТИМИЗАЦИИ

Для формулировки задачи оптимизации введем функционал, зависящий от распределения температурного поля на поверхности ячейки и пропорциональный количеству испаренных молекул, при условии, что «температурные створки» находятся в состоянии «открыто». Тогда задача оптимизации будет состоять в том, чтобы найти такие значения параметров t_{prd} , t_{src} и I_0 , которые обеспечивают максимум данного функционала:

$$\{t_{\text{prd}}, t_{\text{src}}, I_0\} = \arg \max \left(\int_n^{(n+1)t_{\text{prd}}} \iint_S F(t, z; I_0, t_{\text{prd}}, t_{\text{src}}) ds dt \right), \quad (11)$$

где S — площадь поверхности цилиндра с радиусом r_{\max} и длиной z_0 , а функция $F(t, z)$ выражается следующим образом:

$$F(t, z) = \begin{cases} 0, & T(t, r = r_{\max}, z) < T_{\max}^c, \\ T(t, r = r_{\max}, z) - T_{\max}^c & \text{иначе.} \end{cases} \quad (12)$$

График функции $F(t, z)$ представлен на рис. 3.

Для случая цилиндрической поверхности и аксиальной симметрии интеграл в (11) заменяется повторными интегралами и задача сводится к следующей:

$$\{t_{\text{prd}}, t_{\text{src}}, I_0\} = \arg \max \left(2\pi r_{\max} \int_n^{(n+1)t_{\text{prd}}} \int_0^{z_0} F(t, z; I_0, t_{\text{prd}}, t_{\text{src}}) dz dt \right), \quad (13)$$

где z_0 — длина нагреваемой поверхности (при $r = r_{\max}$).

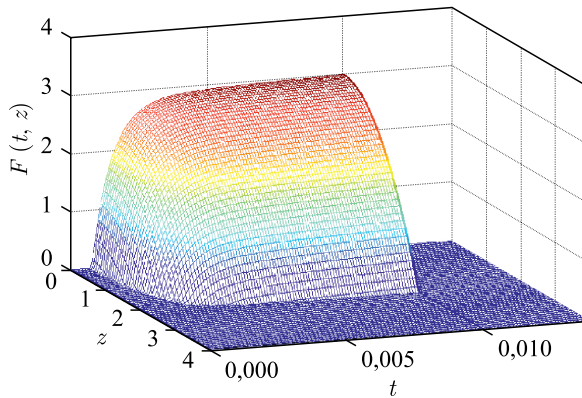


Рис. 3. График функции $F(t, z)$ при значениях параметров $I_0 = 0,5742$, $t_{src} = 0,01$, $t_{prd} = 0,10$

Значение двукратного интеграла в (13) (обозначим его I) определяется численно. Поскольку вследствие численного решения начально-краевой задачи (1)–(4) мы имеем температуру как сеточную функцию, $F(t, z)$ сама является сеточной функцией в узлах подмножества исходной сетки (7). Если выполняются условия (10), значение интеграла оценивается по формуле

$$I = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^{N_t-1} \sum_{j=1}^{N_z-1} (F_{k,j} + F_{k+1,j} + F_{k,j+1} + F_{k+1,j+1}) (t_{k+1} - t_k) (z_{j+1} + z_j), \quad (14)$$

где $F_{k,j} = F(t_k, z_j)$, а N_t — количество точек дискретизации по времени в одном периоде уже установившегося температурного процесса. Формула (14) суммирует частичные объемы как произведение площади ячейки сетки с индексами (k, j) и высоты функции в центре данной ячейки.

3. АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ

В теории оптимизации существует большое количество эффективных алгоритмов нахождения глобального экстремума: как детерминированные методы, зачастую требующие вычисления первой, а иногда и второй производной (гессиана), так и стохастические методы, например, такие как роевые или генетические.

Стохастические методы на каждой итерации требуют вычисления значения функции в большом множестве точек в пространстве поиска. Детерминированные методы требуют меньшего объема вычисления значения функции на итерацию, однако когда производные функции не могут быть аналитически выражены или же сама функция не выражается аналитически, как в нашем случае (если рассматривать интеграл в (11) как функцию от параметров), для оценки градиентов и гессиана требуются дополнительные вычисления значений функции. Можно выделить также класс нулевых методов [13], которые не требуют вычисления производных. И все же во всех из них следующая точка в пространстве поиска зависит от предыдущей.

Однако если имеется доступ к большому объему вычислительных ресурсов, то для класса задач, когда вычисление одного значения функции требует большого количества

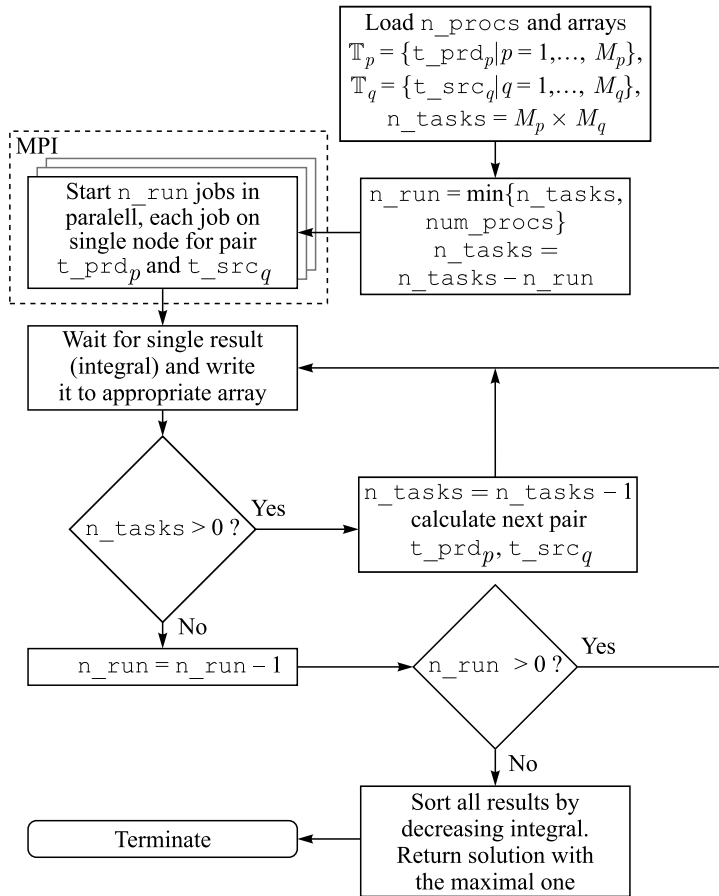


Рис. 4. Блок-схема решения оптимизационной задачи

времени, эффективнее использовать метод перебора: дискретизировать область поиска, вычислить значения функции параллельно на каждом узле сетки и, сравнивая полученные значения, найти оптимальное. Конечно, предполагается, что дискретизация достаточно плотная, а функция в области поиска не имеет дельтообразного поведения. Именно метод перебора был выбран для решения задачи (13).

Алгоритм решения задачи (13) состоит из следующих основных этапов (подробнее см. блок-схему на рис. 4):

1. Дискретизация области поиска в пространстве параметров $t_{\text{prd}} \times t_{\text{src}}$:

$$\mathbb{T} = \left\{ (t_{\text{prd}}, t_{\text{src}}) \mid t_{\text{prd}}^{\min} \leq t_{\text{prd}} \leq t_{\text{prd}}^{\max}, \quad t_{\text{prd}}^{(p+1)} = t_{\text{prd}}^{(p)} + \Delta t_{\text{prd}}^{(p)}, \quad p = 1, \dots, M_p; \right. \\ \left. t_{\text{src}}^{\min} \leq t_{\text{src}} \leq 0,5t_{\text{prd}}, \quad t_{\text{src}}^{(q+1)} = t_{\text{src}}^{(q)} + \Delta t_{\text{src}}^{(q)}, \quad q = 1, \dots, M_q \right\}. \quad (15)$$

В программной реализации алгоритма множество \mathbb{T} задается в виде таблицы во входном файле.

2. Для каждого элемента конечного множества \mathbb{T} методом дихотомии решается задача управления источником

$$I_0^{(p,q)} = \arg \max \left(2 \pi r_{\max} \int_{n t_{\text{prd}}}^{(n+1) t_{\text{prd}}} \int_0^{z_0} F(t, z; t_{\text{prd}}^{(p)}, t_{\text{src}}^{(q)}) dz dt \right). \quad (16)$$

На каждой итерации дихотомии решается прямая задача теплопроводности (1)–(4). При этом, если решение прямой задачи нарушает хотя бы одно из условий (10), интегралу в (16) присваивается значение ноль.

3. Из конечного множества решений задачи (16) выбирается максимальное значение интеграла, и записываются соответствующие ему параметры t_{prd} , t_{src} и I_0 . Выбор осуществляется путем сортировки таблицы $(t_{\text{prd}}, t_{\text{src}}, I_0, I^*)$ по убыванию значения интеграла (14).

На главном шаге алгоритма задача управления источником решается независимо для каждой пары индексов p и q ; соответственно, решение каждой задачи может быть выполнено параллельно. Параллельные вычисления были реализованы с использованием технологии Message Passing Interface (MPI) [17] (соответствующий блок в блок-схеме на рис. 4 выделен штриховой линией) и организованы по модели «мастер/рабочие» (master/slaves) [14]. Процесс-мастер не участвует в расчетах, а выполняет управляющие функции, такие как распределение задач по рабочим, мониторинг освободившихся процессов, чтобы назначить им расчеты для следующей пары параметров t_{prd} и t_{src} (что позволяет более эффективно распределить загрузку процессоров), сбор результатов, их сортировка и выбор оптимального решения.

Задача управления источником решается методом дихотомии с делением отрезка поиска пополам. Алгоритм решения представлен на блок-схеме на рис. 5 и состоит из следующих основных шагов:

1. На вход подается пара параметров t_{prd} и t_{src} .

2. Определяется область поиска решения $I_0 \in [\text{ampMin} = 0, \text{ampMax}]$, где значение ampMax есть решение уравнения (17). Таким образом, очевидно, что значение I_0 , обеспечивающее максимум интеграла в задаче (16), находится в промежутке между 0 и ampMax

$$T(r = r_{\max}, z = 0, t = t_{\text{src}}; I_0) = T_{\text{lim}}. \quad (17)$$

Здесь температура является решением начально-краевой задачи для уравнения теплопроводности с одной пространственной переменной, описывающего распространение тепла в радиальном направлении при $z = 0$ [6]. Уравнение (17) решается методом бисекции. Локализация корня проводится равномерным сканированием от нуля, при этом предполагается, что существует только одно решение на полуинтервале $[0, \infty)$.

3. Значению полусуммы ampMin и ampMax присваивается I_0 , и далее численно решается начально-краевая задача (1)–(4) методом переменных направлений с итерациями на временном слое и адаптивным временным шагом (5), (6). При решении используются параллельные вычисления, организованные с использованием технологии OpenMP [18] (см. блок-схему на рис. 5) таким образом, что параллельно вызывается метод прогонки [12] для нахождения значений неизвестной функции в одном и другом направлениях.

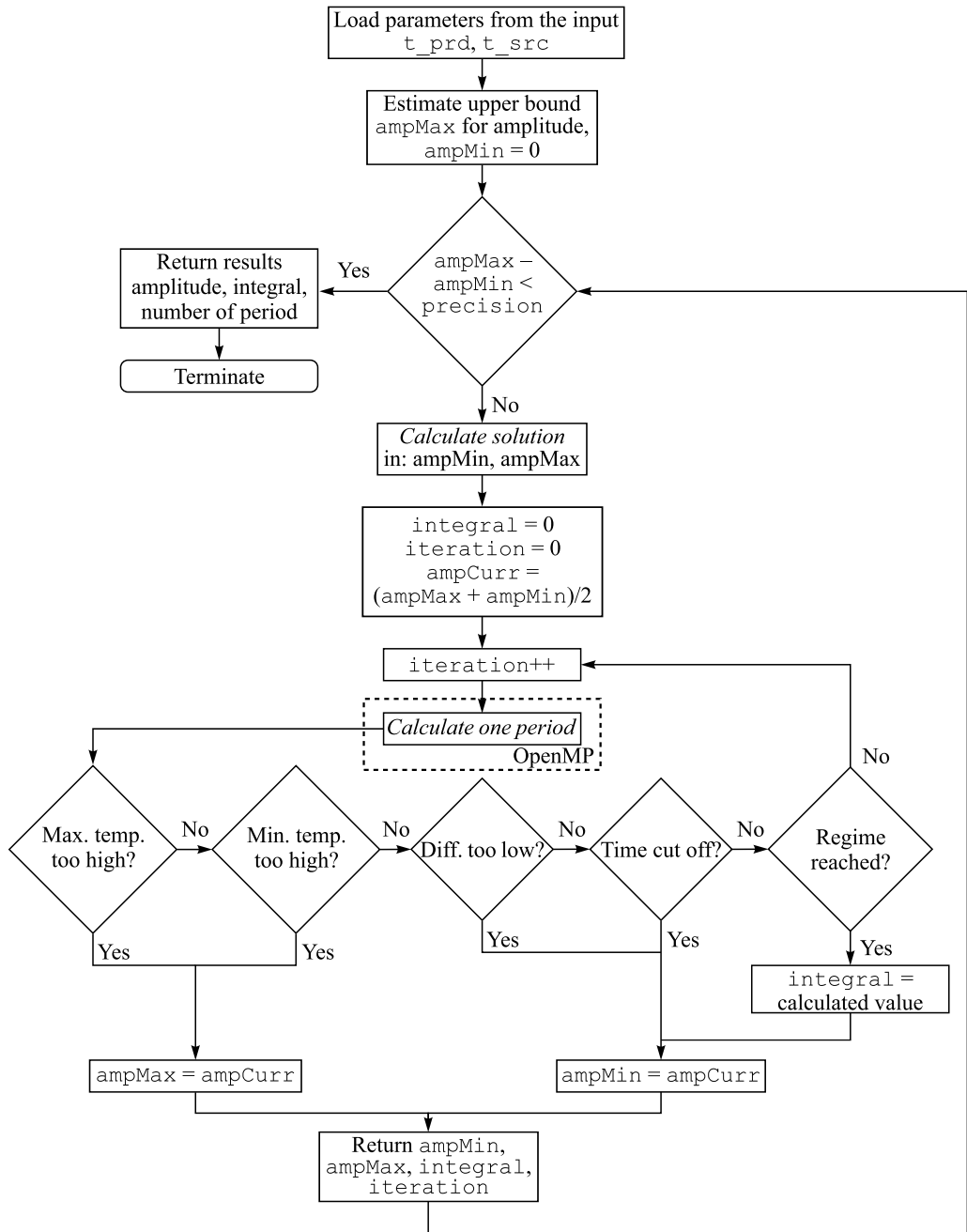


Рис. 5. Блок-схема решения задачи управления источником

4. Область поиска решения локализуется по следующим правилам:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Если } \left\{ \begin{array}{l} T(r = r_{\max}, z = 0, t) > T_{\text{lim}} \\ T_{\min}^{(n)} > T_{\min}^c \text{ для любого } n \end{array} \right\}, \\ \text{Если } \left\{ \begin{array}{l} t \geq t_{\text{lim}} \\ T_{\max}^{(n)} - T_{\min}^{(n)} < T_{\max}^c - T_{\min}^c \text{ для любого } n \end{array} \right\}, \\ \text{Если выполняются условия (10), т. е. } \left\{ \begin{array}{l} T_{\min} < T_{\min}^c \\ T_{\max} > T_{\max}^c \\ T_{\max} \leq T_{\text{lim}} \end{array} \right\}, \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{то ampMax} = I_0; \\ \text{то ampMin} = I_0; \\ \text{то ampMin} = I_0. \end{array}$$

При выполнении условий (10) вычисляется значение интеграла в (16) по формуле (14), иначе значению интеграла присваивается ноль.

5. Проверяется условие на точность найденного решения $|\text{ampMax} - \text{ampMin}| < \varepsilon$. Если точность не удовлетворительна, то повторяются шаги 3–4.

6. Возвращается значение I_0 и значение интеграла.

Первая пара условий в шаге 4 соответствует решениям начально-краевой задачи, представленным на рис. 2, а–е и 2, з. При этом очевидно, что в данном примере необходимо уменьшить амплитуду силы тока, поэтому правая граница области поиска смещается влево. Вторая пара условий выполняется для решений на рис. 2, а, б, 2, д, е и 2, з–к. Если разница между максимальным и минимальным значениями температуры меньше, чем разница между максимальным и минимальным критическими значениями, то необходимо увеличить амплитуду силы тока, соответственно, левая граница смещается вправо. Последний набор условий выполняется для решения на рис. 2, ж. Это означает, что для моделируемой конфигурации криогенной ячейки с заданными временными характеристиками источника реализуются «температурные створки»; в таком случае необходимо увеличить значение амплитуды тока для поиска «температурных створок» с наибольшим значением интеграла (14).

4. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Оптимизационная задача была решена для конфигурации ячейки, исследованной в [4, 6], включая теплофизические зависимости материалов слоев в криогенном диапазоне температур. Для решения задачи (13) на вход программе подавался следующий набор узлов $(t_{\text{prd}}, t_{\text{src}})$ в области поиска в пространстве $t_{\text{prd}} \times t_{\text{src}}$:

$$t_{\text{prd}} \in \{0,01, 0,02, 0,05, 0,06, 0,07, 0,08, 0,09, 0,10\}, \\ 0,001 \leq t_{\text{src}} \leq 0,5t_{\text{prd}}(p), \quad t_{\text{src}}^{(q+1)} = t_{\text{src}}^{(q)} + 0,001.$$

Значения критических температур были взяты следующими: $T_{\min} = 37$ К, $T_{\max} = 42$ К, максимально возможное значение температуры $T_{\text{lim}} = 45$ К.

Расчеты проводились на гетерогенном суперкомпьютере «Говорун» [15, 16], состоящем из следующих вычислительных ресурсов:

- ЦПУ: $40 \times 2 \times$ Intel Xeon Gold 6154 (SkyLake, 18 ядер, 36 потоков),
 $21 \times 1 \times$ Intel Xeon Phi 7290 (KNL, 72 ядра, 288 потоков),
- ГПУ: $5 \times 8 \times$ NVIDIA Tesla V100 (5120 ядер).

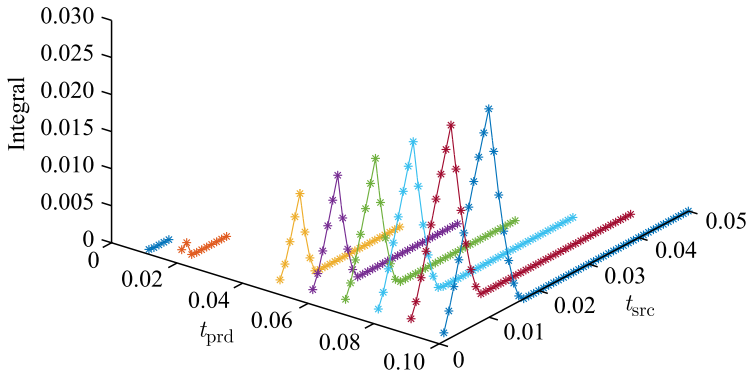


Рис. 6. Зависимость решения задачи управления источником от параметров t_{prd} и t_{src}

В вычисления были вовлечены 70 ЦПУ Intel Xeon Gold 6154 с использованием гиперпоточности, при этом дополнительное вычислительное ядро использовалось для управления в модели «мастер/рабочие».

На рис. 6 приведена зависимость максимального значения интеграла в (16) от параметров (t_{prd} и t_{src}). Из графика видно, что решение задачи (13) достигается при максимальном значении t_{prd} .

На рис. 7 представлено время расчетов. В правом столбце — время решения задачи (13). Это время, которое получено на MPI-процессе «мастер» от начала запуска программы до выдачи результата. Средний столбец — оценка решения задачи на одном процессоре Intel Xeon Gold 6154 (SkyLake) с 18 ядрами и многopotочностью (36 нитей). Данная оценка получается суммированием времени расчетов на рабочих MPI-процессах. Левый столбец — это оценка времени, полученная из произведения среднего времени ускорения решения с использованием 36 OpenMP-нитей рабочими MPI-процессами и оценки времени решения на одном процессоре.

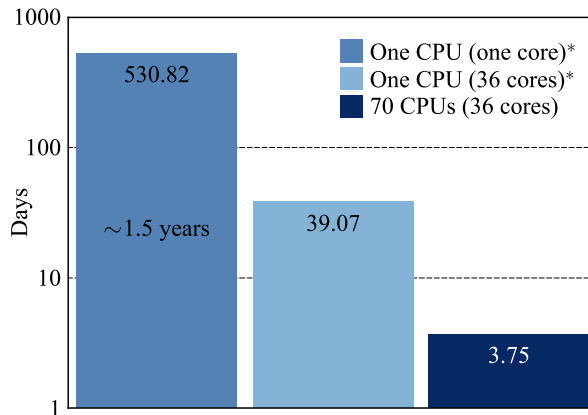


Рис. 7. Время расчетов и оценка времени расчетов на суперкомпьютере «Говорун». Звездочками указаны значения, которые были получены как оценка времени

5. ВЫВОДЫ

Разработан и программно реализован гибридный MPI+OpenMP алгоритм параллельных вычислений для решения задачи оптимизации характеристик источника для технологии «температурных створок». Такой инструмент дает возможность дальнейшего эффективного исследования и оптимизации устройств импульсной инжекции рабочих газов в ионизационную камеру источников ионов, реализующих «температурные створки». Вычисления для конкретной конфигурации ячейки на суперкомпьютере «Говорун» продемонстрировали хорошее ускорение расчетов.

Задача оптимизации решается методом перебора, который при наличии большого объема вычислительных ресурсов оказывается более эффективным в смысле времени вычислений при параллельной реализации. В идеальном случае, когда достаточно ресурсов, чтобы параллельно вычислить все значения функции в узлах сетки, заданной в области поиска, время численного решения задачи оптимизации практически сводится к максимальному времени вычисления значения функции в одной точке. Это особенно эффективно, когда вычисление одного значения функции требует длительного времени. Кроме того, метод перебора дает значения функции во всех узлах сетки (см. рис. 6), что позволяет сохранять и сортировать их по целевому значению. Это может дать исследователю возможность не только решать задачу оптимизации, но и проводить trade-off анализ, т. е. искать наилучшее, в некотором смысле, соотношение времени инжекции, его объема, периода и т. д.

Если решения в узлах сетки не найдено, то алгоритм возвращает ноль в качестве максимального значения интеграла пропорциональности количеству испаренных с поверхности импульсной криогенной ячейки молекул. Тогда либо решения в области поиска не существует, либо оно существует, но дискретизация области была недостаточно плотной. В этом случае следует поменять сетку и искать на ней решение, рекомендуется задать равномерную, более плотную сетку, насколько позволяют при этом вычислительные ресурсы.

Благодарности. Авторы выражают благодарность Э. А. Айрияну за обсуждения и постоянное внимание к данной работе, группе гетерогенной вычислительной платформы HybridIT за предоставленную возможность проводить расчеты на суперкомпьютере «Говорун». Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (гранты № 18-51-18005 и № 19-01-00645).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Donets D. E., Donets E. E., Honma T., Noda K., Ramzdorf A. Yu., Salnikov V. V., Shutov V. B., Donets E. D. Physics Research and Technology Developments of Electron String Ion Sources // *Rev. Sci. Instr.* 2012. V. 83. 02A512.
2. Boytsov A. Yu., Donets D. E., Donets E. D., Donets E. E., Katagiri K., Noda K., Ponkin D. O., Ramzdorf A. Yu., Salnikov V. V., Shutov V. B. Electron String Ion Sources for Carbon Ion Cancer Therapy Accelerators // *Rev. Sci. Instr.* 2015. V. 86. 083308.
3. Boytsov A. Yu., Donets D. E., Donets E. D., Donets E. E., Katagiri K., Noda K., Ponkin D. O., Ramzdorf A. Yu., Salnikov V. V., Shutov V. B. Cryogenic Molecular Separation System for Radioactive ^{11}C Ion Acceleration // *Ibid.* 123303.

4. Айриян А., Busa J., Jr., Donets E. E., Grigorian H., Pribis J. Algorithm and Simulation of Heat Conduction Process for Design of a Thin Multilayer Technical Device // Appl. Therm. Engin. 2016. V. 94. P. 151–158.
5. *Pobell F.* Matter and Methods at Low Temperatures. 3rd Ed. Berlin: Springer, 2007.
6. Айриян А. С. Model with One Spatial Variable for Design of a Technical Device // RUDN J. Math. Inform. Sci. Phys. 2013. Iss. 2. P. 89–93.
7. *Peaceman D. W., Rachford H. H., Jr.* The Numerical Solution of Parabolic and Elliptic Differential Equations // J. Soc. Industr. Appl. Math. 1955. V. 3, No. 1. P. 28–41.
8. *Birkhoff G., Varga R. S., Young D.* Alternating Direction Implicit Methods // Adv. Comp. 1962. V. 3. P. 189–273.
9. *Samarский А. А., Vabishchevich P. N.* Computational Heat Transfer. V. 1. Chichester: John Wiley & Sons Ltd., 1995.
10. *Samarsky A. A.* The Theory of Difference Schemes. New York: Marcel Dekker Inc., 2001.
11. *Gajic Z.* Linear Dynamic Systems and Signals. Upper Saddle River: Prentice Hall, 2002.
12. *Thomas L. H.* Elliptic Problems in Linear Differential Equations over a Network. Columbia Univ. Watson Sci. Comp. Lab. Report. New York, 1949.
13. *Рейзлин В. И.* Численные методы оптимизации: Учеб. пособие. Томск: Изд-во ТПУ, 2011.
14. *Воеводин В. В., Воеводин Вл. В.* Параллельные вычисления. СПб.: БХВ-Петербург, 2002.
15. Суперкомпьютер «Говорун». http://hlit.jinr.ru/about_govorun/http://hlit.jinr.ru (11.11.2018).
16. *Adam Gh., Bashashin M., Belyakov D., Kizakosyan M., Matveev M., Podgainy D., Sapozhnikova T., Streltsova O., Torosyan Sh., Vala M., Valova L., Vorontsov A., Zaikina T., Zemlyanaya E., Zuev M.* IT-Ecosystem of the Hybri-LIT Heterogeneous Platform for High-Performance Computing and Training of IT-Specialists // CEUR Workshop Proc. 2018. V. 2267. P. 638–644.
17. MPI: A Message-Passing Interface Standard. Version 3.1. <http://mpi-forum.org/docs/mpi-3.1/mpi31-report.pdf><http://mpi-forum.org/> (10.11.2018).
18. OpenMP Application Programming Interface. Version 5.0. <https://www.openmp.org/wp-content/uploads/OpenMP-API-Specification-5.0.pdf><https://www.openmp.org/> (10.11.2018).

Получено 24 декабря 2018 г.