

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
им. М.В. Ломоносова
Кафедра квантовой статистики и теории поля

На правах рукописи

Перепелкин Евгений Евгеньевич

**КОМПЛЕКСНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ
УСКОРИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ НА ГРАФИЧЕСКОМ ПРОЦЕССОРЕ
(GPU)**

Специальность: **05.13.18** - математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ.

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва, 2013 г.

Работа выполнена на кафедре квантовой статистики и теории поля физического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова.

Официальные

оппоненты:

Петров Игорь Борисович,
член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук,
профессор, Национальный исследовательский университет
Московский физико-технический институт (государственный
университет) - НИУ-МФТИ, заведующий кафедрой
информатики.

Поляков Сергей Владимирович,
доктор физико-математических наук, старший научный
сотрудник, Федеральное государственное бюджетное учреждение
науки Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша
Российской академии наук, заведующий сектором.

Ильин Вячеслав Анатольевич,
доктор физико-математических наук, Научно исследовательский
институт ядерной физики им. Д.В. Скобельцына, Московского
государственного университета им. М.В. Ломоносова (НИИЯФ
МГУ), заместитель директора института.

Ведущая организация: Петербургский институт ядерной физики
им. Б.П. Константинова, г. Гатчина Ленинградской области

Защита состоится "___" _____ 2013 г., в _____ часов
на заседании диссертационного совета Д-002.024.03 в Институте прикладной
математики им. М.В. Келдыша РАН по адресу: 125047, Москва, Миусская пл., д.4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института прикладной
математики им. М.В. Келдыша РАН.

Автореферат разослан "___" _____ 2013 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета Д-002.024.03,

доктор физико-математических наук Змитренко Н.В.

Общая характеристика работы

Актуальность темы

В современных физических исследованиях как в области фундаментальной, так и прикладной физики используют ускорители заряженных частиц. Одним из таких ускорителей является LHC (CERN, Женева) [1], в состав которого входит детектор частиц ATLAS, построенный для проверки Стандартной модели теории поля. Другим представителем ускорительных систем является циклотрон [2], получивший широкое распространение в различных сферах деятельности человека таких, как протонная и углеродная терапия, обнаружение взрывчатых веществ на таможне, промышленное применение, фундаментальные исследования в области ядерной физики.

Поэтому создание и проектирование ускорительных систем такого типа является актуальной задачей. Существенная самосогласованность рассматриваемых ускорительных систем требует комплексного математически выверенного и обоснованного подхода к проведению высоко реалистичного моделирования и оптимизации указанных систем.

Цель диссертации

Целью диссертационной работы является построение комплексного математически выверенного и обоснованного подхода к проведению высоко реалистичного моделирования и оптимизации ускорительных систем с использованием современных компьютерных технологий – вычислений на графических процессорах (GPU) [3]. Достижение указанной цели реализуется решением следующих проблем:

1. формулировка математических постановок и решение задач:
 - задачи учета потерь частиц в пучке на структурных элементах установки;
 - задачи обратной трассировки частиц;
 - задачи о гладком сопряжении центральной траекторий инфлектора и циклотрона;
 - задачи определения формы инфлектора с учетом краевого электрического поля;
 - задачи центрирования центральной траектории пучка;
 - оценка точности решения задачи учета эффекта пространственного заряда пучка;
 - задачи определения воздействия конструкций в секторах 12-14 на основное магнитное поле установки ATLAS (LHC, CERN);

2. разработка численных алгоритмов, обладающих высокой эффективностью и простотой в реализации с целью повышения надежности получаемого результата. Тестирование численных алгоритмов на аналитических решениях;
3. программная реализация комплексного моделирования и оптимизации системы в целом с высокой степенью детализации ее параметров и скоростью вычислений. Коммуникация программного комплекса с различными CAD-системами с привлечением современных вычислительных систем, обладающих наилучшим соотношением производительность/потребляемая мощность.

Научная новизна

- предложен принципиально новый подход к решению проблемы учета потерь частиц в пучке на структурных элементах установки (триангуляционный подход);
- сформулирована новая постановка задачи обратной трассировки частиц;
- получено аналитическое решение задачи о гладком сопряжении центральной траекторий инфлектора и циклотрона;
- сформулирована и решена новая постановка задачи определения формы инфлектора с учетом краевого электрического поля;
- сформулирована новая постановка задачи центрирования центральной траектории пучка;
- предложен метод оценки точности решения задачи учета эффекта пространственного заряда пучка;
- впервые было проведено комплексное моделирование сложной конфигурации магнитной системы секторов 12-14, наиболее насыщенных магнитными элементами детектора ATLAS эксперимента LHC, CERN, Женева;
- впервые была применена современная технология параллельного программирования на графическом процессоре GPU для решения проблемы комплексного моделирования и оптимизации динамики пучка в циклотроне;
- разработан программный комплекс **CBDA (Cyclotron Beam Dynamics Analysis)**, реализующий все основные численные алгоритмы комплексного подхода моделирования и оптимизации, предложенные в диссертационной работе, с использованием современной компьютерной технологии – параллельных вычислений на графических процессорах (GPU).

Научная и практическая значимость работы

1. предложен подход комплексного моделирования и оптимизации динамики пучка в циклотроне;
2. разработан программный комплекс CBDA, использующий параллельные вычисления на графическом процессоре (GPU), что позволило достичь прироста производительности вычислений на 1.5-2 порядка по сравнению с реализацией на одном ядре стандартной x86 архитектуры;
3. предложена и реализована на практике новая геометрия центральных электродов и формы инфлектора AVF RIKEN циклотрона для второй гармоники;
4. получена карта вкладов магнитных элементов в основное магнитное поле в секторах 12-14 установки ATLAS, LHC, CERN (Женева), используемая в эксперименте по проверке Стандартной модели теории поля.

Достоверность полученных результатов

Достоверность полученных результатов обеспечивается применением современных методов моделирования физических процессов, хорошим согласием полученных результатов моделирования с экспериментальными данными и результатами, ранее полученными другими авторами.

Достоверность полученных результатов также подтверждается тестированием и согласием с имеющимися аналитическими решениями, а также применением результатов моделирования на практике.

Апробация работы

Результаты исследований, вошедшие в содержание глав диссертации, неоднократно докладывались и обсуждались на семинарах, школах, конференциях.

Приглашенные доклады:

1. CNS-RIKEN Workshop on Upgrade of AVF Cyclotron, RIKEN, Wako, Japan, 2008.
2. The GPU Computing event by APC trainers, September 5-7, 2011 Belgrade, Serbia.
3. Семинар по программированию на CUDA, 5-9 ноября 2009, Межведомственный супер-компьютерный центр РАН, Москва.
4. Семинар, посвященный персональным суперкомпьютерам NVIDIA Tesla и среде программирования на GPU — CUDA, 25 февраля 2010, Институт космических исследований РАН (ИКИ РАН), Таруса.

5. II Российско-британский семинар "Потоковая обработка данных и программирование", Институт вычислительных технологий СО РАН", с 12 по 15 сентября 2011, Новосибирск.
6. Семинар "Решение инженерных и научных задач на гибридных вычислительных системах, графические процессоры и архитектура CUDA", Институт нефтегазовой геологии и Геофизики СО РАН, 21 апреля 2011, Новосибирск.
7. Семинар по программированию в среде CUDA, Национальный Исследовательский Центр Курчатовский институт, 22 января 2010, Москва.
8. Школа по массивным параллельным вычислениям на GPU, Саровский государственный физико-технический институт, с 11 по 15 апреля 2011, Саров.
9. Школа по вычислениям на GPU в центре высокопроизводительных вычислений МГУ, 29 августа - 2 сентября 2011, Москва.
10. Семинар НИЯУ МИФИ и компаний «Открытые Технологии» и «NVIDIA» «Решение инженерных и научных задач на гибридных вычислительных системах. Графические процессоры и архитектура CUDA», 18 октября 2011, Москва.
11. Семинар «Решение инженерных и научных задач на гибридных вычислительных системах, графические процессоры и архитектура CUDA», 23 марта 2001, Екатеринбург.
12. Семинар «Решение инженерных и научных задач на гибридных вычислительных системах, графические процессоры и архитектура CUDA», Казанский федеральный университет, 16 марта 2011, Казань.
13. Семинар по вычислениям на графических процессорах. Калининградский государственный университет им. Э. Канта. 29 октября 2011, Калининград.
14. Школа высокопроизводительных вычислений, 29 июня 2010, Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород.
15. Семинар, посвященный персональным суперкомпьютерам NVIDIA Tesla и среде программирования на GPU — CUDA, 28 мая 2010, Якутский Государственный университет (ЯГУ), Якутск.
16. University Tesla tour, Омский государственный университет совместно с компанией NVIDIA, 11 марта 2010, Омск.
17. Семинар, посвященный персональным суперкомпьютерам NVIDIA Tesla и среде программирования на GPU — CUDA. 11 февраля 2010, Харьков (Харьковский институт сцинтилляционных материалов НАН Украины).
18. Семинар мастер-класс по программированию на CUDA, 2-4 декабря 2009, Томский Государственном Университете (ТГУ), Томск.

19. Курс лекций «Массивно-параллельные процессы, архитектура и среда программирования CUDA», компания «Открытые технологии», 11 июля 2011, Москва.

Доклады на семинарах:

1. 6-й Международный семинар памяти профессора В.П.Саранцева, ОИЯИ, Научный совет РАН по проблемам ускорителей заряженных частиц, Алушта, Украина, Крым.
2. XIX International Baldin Seminar on High Energy physics problems “Relativistic nuclear physics & Quantum Chromodynamics”, JINR, Dubna, Russia, 2008.
3. XVIII International Baldin Seminar on High Energy Physics Problems: Relativistic Nuclear Physics and Quantum Chromodynamics, JINR, Dubna, 2006.
4. NATO Advanced Research Workshop. Detection of Liquid Explosives and Flammable Agents in Connection with Terrorist Actions, St. Petersburg, Russia, 2007.
5. Семинар в ЛИТ, ОИЯИ, Постановка задачи об учете эффекта пространственного заряда пучка, Дубна, 10 февраля 2011.
6. Моделирование спирального инфлектора и центрирования орбит в компактном циклотроне, ОИЯИ, ЛИТ, Дубна, 22 октября 2006.
7. Использование CUDA в некоторых физических приложениях, ОИЯИ, ЛИТ, Дубна, 23 октября 2009.
8. Компьютерное моделирование спектрометрического магнита для экспериментальной установки МАРУСЯ, ОИЯИ, ЛИТ, 15 ноября 2007.
9. ATLAS Magnetic Field Workshops, CERN, Geneva, CERN, Switzerland, March 7, 2006.

Основное содержание диссертации опубликовано в 28 отечественных и международных изданиях и представлено в докладах на российских и международных конференциях:

1. The Particle Accelerator Society of Japan (PASJ), Annual meeting, 5 - 7 August 2009, Tokai, Japan.
2. The 18th International Conference on Cyclotrons and their Applications Cyclotrons 2007, Laboratori Nazionali del Sud, Giardini Naxos, Italy.
3. The 35th European Cyclotron Progress Meeting (ECPM 2006), Nice, France.
4. The 34th European Cyclotron Progress Meeting (ECPM 2005), VINCA, Belgrade, Serbia.
5. UNISA-JINR Symposium, Skukusa, South Africa, 2007.

6. Параллельные вычислительные технологии (ПАВТ), 29 марта-2 апреля, 2010, Уфа, Россия.
7. XXII Russian Particle Accelerator Conference, Russian Academy of Science, Russian Foundation for Basic Research, Scientific Council of RAS on Charged Particle Accelerators, Federal State Unitary Enterprise, 2010.
8. 8 Mathematical Modeling and Computational Physics (MMCP'2009), Laboratory of Information Technologies, JINR, Dubna, Russia.
9. RuPAC'04, Dubna, Russia.
10. The XX Russian Accelerator Conference (RuPAC2006), Novosibirsk, Russia.
11. The XXI Russian Accelerator Conference (RuPAC2008), Zvenigorod, Russia.
12. Конференция по высокопроизводительным вычислениям, 12 октября 2010, U-Star, Киев.
13. BDO-2006, St.-Petersburg, Russia, BDO2002, Saratov, SSU, Russia.
14. XI Международная конференция "Математика, компьютер, образование", ОИЯИ, Дубна, Россия, 2004.
15. XIII Международная конференция "Математика, компьютер, образование", ОИЯИ, Дубна, Россия, 2006.
16. International Conference "Stability and Control Processes", St.-Petersburg, 2005, Russia.
17. Hadron Collider Physics Symposium, Isola d'Elba, Italy, 2007.

Публикации

Вошедшие в диссертацию результаты опубликованы в работах автора, список которых приведен в конце автореферата. В работах с соавторами вклад автора диссертации является определяющим: им была дана постановка задачи, предложен метод исследования и проведены основные вычисления в рамках задач, поставленных в диссертации. Вклад соавторов заключался в проверке некоторых вычислений, предложениях по установлению связей с работами других авторов на ту же тему и обсуждении результатов работы.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения и списка литературы. Материал изложен на 418 страницах, включает 22 таблицы, 379 рисунков, содержит 250 библиографических ссылок.

Краткое содержание работы

Во **введении** дано обоснование актуальности темы диссертации и формулируется цель диссертации, а также приводится ее краткое содержание.

В **Главе 1** описан предложенный автором метод параллельной реализации на графическом процессоре (GPU) моделирования и оптимизации динамики пучка в циклотроне. В **§ 1-2 главы 1** дается описание архитектуры графических процессоров (GPU) и программная модель CUDA (Compute Unified Device Architecture). В **§3 главы 1** автором произведено распараллеливание алгоритмов четырех основных вычислительных методов:

- метода оценки потерь частиц пучка на структурных элементах установки (триангуляционный подход);
- метода учета эффекта пространственного заряда пучка;
- метода трассировки частиц пучка во внешних электромагнитных полях;
- метода расчета задач электростатики и магнитостатики.

Суммарное ускорение, полученное в результате применения метода массивно-параллельных вычислений при моделировании динамики пучка с использованием стандартного набора параметров моделирования, составило два порядка. Таким образом одна итерация моделирования динамики пучка в циклотроне, занимающая на центральном процессоре (CPU) 2 дня 9 часов стала занимать на графическом процессоре Tesla C1060 - 30 минут.

В **Главе 2** диссертации предложены методы оптимизации динамики пучка в циклотроне. В **§1 главы 2** сформулирована новая постановка задачи отыскания центрированной центральной траектории пучка (1). Задача сведена к минимизации функционала, содержащего в себе информацию о качестве центрирования. Численное решение задачи (1) ищется с использованием параллельных вычислений на GPU. Для поиска глобального минимума функционал вычисляется параллельно в N точках $(\vec{r}_0^{(i)}, \vec{v}_0^{(i)}, t_0^{(i)})$, $i = 1, \dots, N$.

$$\min_{\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0} F(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0),$$
$$F(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0) = \sum_{\substack{i \neq j \neq k \\ 1 \dots 4}} R_{i,j,k}(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0) + \alpha (N_0 - N(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0))^2, \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned}
 R_{i,j,k}(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0) &= \sqrt{x_{i,j,k}^2(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0) + y_{i,j,k}^2(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0)}, \\
 x_{i,j,k} &= \frac{(y_j - y_k)(x_i^2 - x_j^2 + y_i^2 - y_j^2) - (y_i - y_j)(x_j^2 - x_k^2 + y_j^2 - y_k^2)}{(x_i - x_j)(y_j - y_k) - (x_j - x_k)(y_i - y_j)}, \\
 y_{i,j,k} &= \frac{(x_i - x_j)(x_j^2 - x_k^2 + y_j^2 - y_k^2) - (x_j - x_k)(x_i^2 - x_j^2 + y_i^2 - y_j^2)}{(x_i - x_j)(y_j - y_k) - (x_j - x_k)(y_i - y_j)},
 \end{aligned} \tag{2}$$

$$x_s = x_s(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0), \quad y_s = y_s(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0), \quad s = i, j, k,$$

$$\vec{r} = \vec{r}(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0, t), \quad \vec{v} = \vec{v}(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0, t),$$

$$\vec{r}_s(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0) = \vec{r}(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0, t_s) - \frac{\vec{r}(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0, t_s)}{|\vec{r}(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0, t_s)|} \Delta r_s = \begin{pmatrix} x_s(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0) \\ y_s(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0) \end{pmatrix}, \quad |\vec{r}_s| \geq R_{\max},$$

$$\Delta r_s = R_W(W_s, \vec{B}(\vec{r})) - R_W(W_i, \vec{B}(\vec{r})), \quad W_s = m_0 c^2 (\gamma(v_s) - 1), \quad \gamma(v) = 1 / \sqrt{1 - v^2/c^2},$$

$$v_s = v(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0, t_s),$$

$$\varphi_i(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0) = \text{angle}(x_i(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0), y_i(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0)), \quad \varphi_{i+1} - \varphi_i = \frac{\pi}{2}, \quad \varphi_5 = \varphi_1, \quad i = 1, \dots, 4,$$

где $\vec{r} = \vec{r}(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0, t)$, $\vec{v} = \vec{v}(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0, t)$ - решения задачи Коши (3).

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}(\gamma(v)\vec{v}) = \frac{q}{m_0} \{ \vec{E}(\vec{r}, t) + [\vec{v}, \vec{B}(\vec{r})] \}, & \vec{r} \in V, \quad t_0 < t \leq T \\ \frac{d}{dt} \vec{r} = \vec{v} \\ \vec{r}|_{t=t_0} = \vec{r}_0, \quad \vec{v}|_{t=t_0} = \vec{v}_0 \end{cases} \tag{3}$$

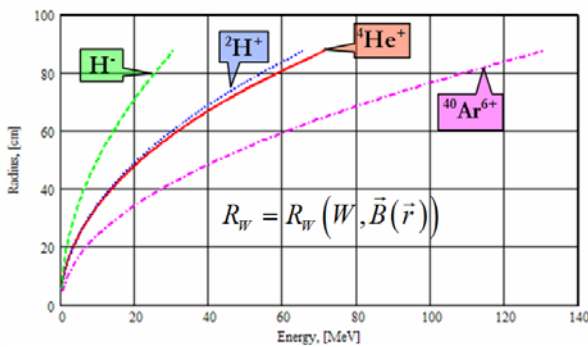


Рис. 1 Зависимость среднего радиуса равновесной орбиты от энергии.

зависимость $R_W = R_W(W, B)$ в (2)

определяется численно для каждого режима

из графиков на рис.1. Величина $N_0 = \frac{W_0}{W_{Max}^{Turn}}$, -

задает минимально возможное число

оборотов, а величина $N(\vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0)$ -

показывает численно получаемое число

оборотов частицы при решении задачи Коши

(3).

В §2 главы 2 найдено решение задачи (4) о гладком сопряжении центральной траектории инфлектора и циклотрона (см. рис. 2).

$$\begin{cases} \vec{R}_{\text{inf}}(E_u, k) = \vec{R}_{\text{track}}(\varphi) \\ \text{Pr}_{\text{inf}}(E_u, k) = \text{Pr}_{\text{track}}(\varphi), \end{cases} \quad (4)$$

где

$$\vec{R}_{\text{inf}}(E_u, k) = \left(x(T(E_u), E_u, k), y(T(E_u), E_u, k) \right)^T,$$

$$x(t, E_u, k) = \frac{A(E_u)}{2} \left(\frac{\sin[(2K(E_u, k) - 1)b(t, E_u)]}{2K(E_u, k) - 1} - \frac{\sin[(2K(E_u, k) + 1)b(t, E_u)]}{2K(E_u, k) + 1} \right),$$

$$y(t, E_u, k) = \frac{A(E_u)}{2} \left(\frac{\cos[(2K(E_u, k) - 1)b(t, E_u)]}{2K(E_u, k) - 1} - \frac{\cos[(2K(E_u, k) + 1)b(t, E_u)]}{2K(E_u, k) + 1} + \frac{2}{1 - 4K(E_u, k)} \right),$$

$$K(E_u, k) = \frac{1}{2} \left(\frac{A(E_u)}{\rho} + k \right), \quad A(E_u) = \frac{mv^2}{qE_u}, \quad b(t, E_u) = \frac{vt}{A(E_u)}, \quad T(E_u) = \frac{\pi}{2} \frac{A(E_u)}{v}, \quad \rho = \frac{mv}{qB_c},$$

$$\vec{R}_{\text{track}}(\varphi) = \left(x_c - \rho \cos(\varphi), y_c - \rho \sin(\varphi) \right)^T, \quad x_c = x_p + \rho \frac{v_y^p}{v}, \quad y_c = y_p - \rho \frac{v_x^p}{v},$$

$$\text{Pr}_{\text{inf}}(E_u, k) = \frac{\pi}{2} - \arccos \left(\frac{\vec{v}_{\text{inf}} \cdot \vec{R}_{\text{inf}}}{v R_{\text{inf}}} \right), \quad \vec{v}_{\text{inf}}(E_u, k) = \left(\frac{d}{dt} x(T(E_u), E_u, k), \frac{d}{dt} y(T(E_u), E_u, k) \right)^T,$$

$$\text{Pr}_{\text{track}}(\varphi) = \frac{\pi}{2} - \arccos \left(\frac{\vec{n}_v(\varphi) \cdot \vec{R}_{\text{track}}(\varphi)}{R_{\text{track}}(\varphi)} \right), \quad \vec{\rho}(\varphi) = -\rho (\cos(\varphi), \sin(\varphi))^T, \quad \vec{n}_v = \frac{\vec{\rho}(\varphi) \times \vec{e}_z}{|\vec{\rho}(\varphi) \times \vec{e}_z|}.$$

Решение поставленной задачи (4) в работе было сведено к трансцендентному уравнению (5) относительно K, которое решается численно, а на рис.3 показана геометрическая интерпретация решения. Зная K, по полученной формуле (6) можно определить A, и следовательно, все остальные параметры инфлектора.

На рис.4 из пересечения области Ω_{inf} допустимых параметров инфлектора и области Ω_{track} , соответствующей центральной траектории, видно, существует ли решение поставленной задачи (4) и геометрически виден диапазон возможных изменений параметра φ для оптимизации.



Рис. 2 Сопряжение траекторий

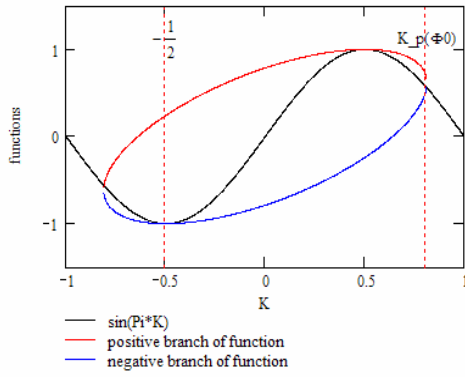


Рис. 3 «Графический вид» решения уравнения (4)

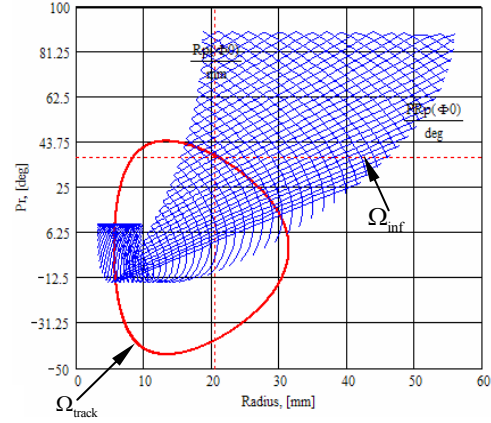


Рис. 4 Выбор решения задачи

$$\sin(\pi K) = 2K \sin^2(\text{Pr}_{\text{inf}}) \pm \cos(\text{Pr}_{\text{inf}}) \sqrt{1 - 4K^2 \sin^2(\text{Pr}_{\text{inf}})} \quad (5)$$

$$A = -\frac{(4K^2 - 1)R_{\text{inf}} \sin(\text{Pr}_{\text{inf}})}{\cos(\pi K)} \quad (6)$$

В §3 главы 2 сформулирована новая постановка задачи Коши (7) для центральной траектории инфлектора (см. рис. 5) с электрическим полем, не являющимся постоянным (см. рис.6).

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dv_x}{dt} = \frac{q}{m} \left(E_u(x, y, z) \frac{-v_x v_z}{V \sqrt{v_x^2 + v_y^2}} + v_y B \right), \\ \frac{dv_y}{dt} = \frac{q}{m} \left(E_u(x, y, z) \frac{-v_y v_z}{V \sqrt{v_x^2 + v_y^2}} - v_x B \right), \\ \frac{dv_z}{dt} = \frac{q}{m} E_u(x, y, z) \frac{\sqrt{v_x^2 + v_y^2}}{V}, \\ \frac{dx}{dt} = v_x, \quad x|_{t=0} = 0, \quad v_x|_{t=0} = 0, \\ \frac{dy}{dt} = v_y, \quad y|_{t=0} = 0, \quad v_y|_{t=0} = 0, \\ \frac{dz}{dt} = v_z, \quad z|_{t=0} = A, \quad v_z|_{t=0} = -V. \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \Delta \varphi = 0 \\ \varphi|_{\Gamma} = \varphi_0, \quad \vec{E} = -\nabla \varphi, \\ (\vec{e}_u, \vec{e}_v, \vec{e}_h) : \left(\frac{[[\vec{v}, \vec{B}], \vec{v}]}{[[[\vec{v}, \vec{B}], \vec{v}]]}, \frac{\vec{v}}{|\vec{v}|}, \frac{[\vec{v}, \vec{B}]}{[[[\vec{v}, \vec{B}], \vec{v}]]} \right) \end{array} \right. \quad (7)$$

Применяя конформное отображение (8) области $W(u, v)$ на область $Z(x, y)$ (см. рис.7), найдена аналитическая аппроксимация (9) решения краевой задачи о

распределении электрического поля вдоль центральной траектории инфлектора, входящей в постановку (7).

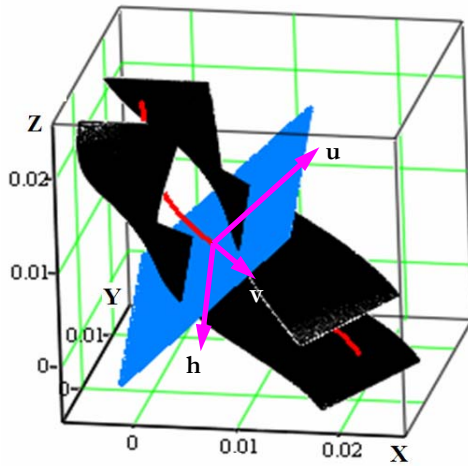


Рис. 5 Инфлектор и центральная траектория

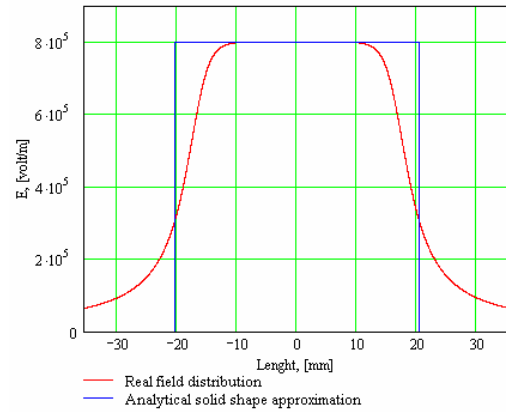


Рис. 6 E_u – компонента электрического поля в инфлекторе

$$z = w + e^w \quad (8)$$

$$E^{(y)} = \frac{1}{1 + e^u} \quad (9)$$

$$x - u = e^u$$

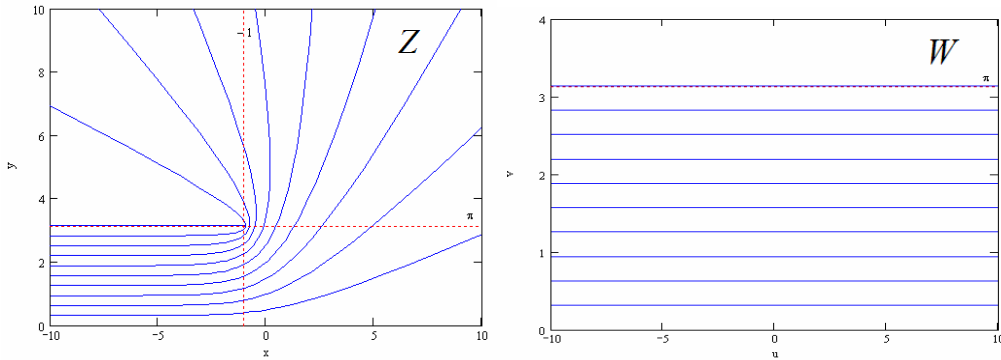


Рис. 7 Конформное отображение области W на область Z

Зависимость $u(x)$ в (9) является однозначной, так как определяется пересечением прямой $x - u$ и экспоненты e^u . На рис. 9 показано сравнение аппроксимации (9) (черный цвет) с численным решением (красный цвет) трехмерной задачи электростатики для случая обрезания концов электродов инфлектора на 4 мм (см. рис.8).

Используя полученное выражение для электрического поля (9), было найдено решение задачи (7) в виде (10).

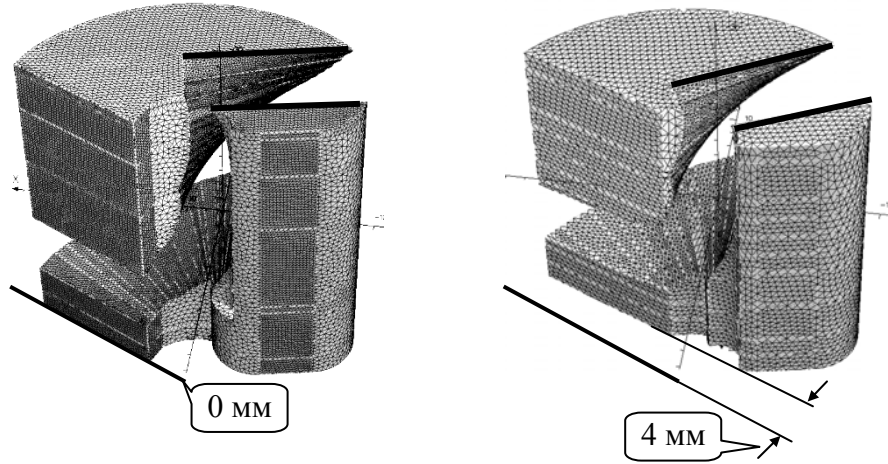


Рис. 8 Конфигурация инфлектора с величиной обрезания электродов инфлектора: 0 мм и 4 мм

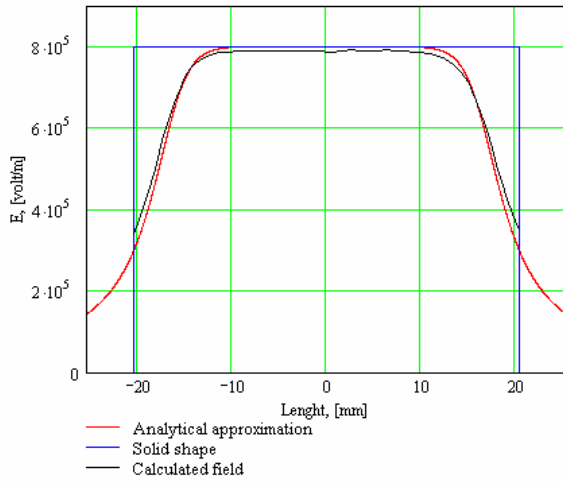


Рис. 9 Сравнение электрических полей

$$\vec{v}(t) = V \begin{pmatrix} \sin(\Phi(Vt)) \sin(\beta t) \\ \sin(\Phi(Vt)) \cos(\beta t) \\ -\cos(\Phi(Vt)) \end{pmatrix} \quad (10)$$

$$\vec{r}(t) = \vec{r}_0 + \int_0^t \vec{v}(\tau) d\tau$$

где $\Phi(s) = \frac{q}{mV^2} \int_0^s E_u dl$, $\beta = \frac{qB}{m}$. Отметим, что

$$\int_{x_0}^x E_u dl = u(x) - u(x_0).$$

В §4 главы 2 сформулирована новая постановка задачи обратной трассировки частиц (11)-(13):

$$\min_{\vec{R}_{i+1}, \Phi_{i+1}, \psi_{i+1}} F_{i+1}, \quad i = 0, \dots, N_{gaps},$$

$$F_{i+1}(\vec{R}_{i+1}, \Phi_{i+1}, \psi_{i+1}) = \left| \Delta W_{i+1}(\vec{R}_{i+1}, \Phi_{i+1}, \psi_{i+1}, \lambda_{i+1}, \vec{v}_i, \vec{r}_i, t_i) - ZU_{Dee} \right|,$$

$$\Delta W_{i+1}(\vec{R}_{i+1}, \Phi_{i+1}, \psi_{i+1}, \lambda_{i+1}, \vec{v}_i, \vec{r}_i, t_i) = \frac{m_0}{2} (\gamma(v_{i+1}) v_{i+1}^2 - \gamma(v_i) v_i^2), \quad \gamma(v) = 1 / \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}, \quad (11)$$

$$\vec{v}_{i+1} = \vec{v}(\vec{R}_{i+1}, \Phi_{i+1}, \psi_{i+1}, \lambda_{i+1}, \vec{v}_i, \vec{r}_i, t) \Big|_{t=t_{i+1}}, \quad \vec{r}_{i+1} = \vec{r}(\vec{R}_{i+1}, \Phi_{i+1}, \psi_{i+1}, \lambda_{i+1}, \vec{v}_i, \vec{r}_i, t) \Big|_{t=t_{i+1}},$$

$$\vec{r}_{i+1} = \{r_{i+1} \cos \varphi_{i+1}, r_{i+1} \sin \varphi_{i+1}, z_{i+1}\}^T, \quad \varphi_{i+1} = \varphi_i + \frac{\pi}{2} = \varphi \Big|_{t=t_{i+1}}, \quad \vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0 - \text{известны},$$

где $\vec{v}(\vec{R}_{i+1}, \Phi_{i+1}, \psi_{i+1}, \lambda_{i+1}, \vec{v}_i, \vec{r}_i, t)$, $\vec{r}(\vec{R}_{i+1}, \Phi_{i+1}, \psi_{i+1}, \lambda_{i+1}, \vec{v}_i, \vec{r}_i, t)$ - решения задачи Коши (12)

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}(\gamma(v)\vec{v}) = \frac{q}{m_0} \left\{ \vec{E}_{gap}(\vec{R}_{i+1}, \Phi_{i+1}, \psi_{i+1}, \lambda_{i+1}, \vec{r}, t) + [\vec{v}, \vec{B}(\vec{r})] \right\}, \vec{r} \in V, t_i < t \leq t_{i+1}, \\ \frac{d}{dt} \vec{r} = \vec{v}, \\ \vec{r}|_{t=t_i} = \vec{r}_i, \vec{v}|_{t=t_i} = \vec{v}_i. \end{cases} \quad (12)$$

Суммарное электрическое поле в центральной области представимо в виде:

$$\vec{E}_{central}(\vec{r}, t) = \sum_{i=0}^{N_{gaps}} \vec{E}_{gap}(\vec{R}_{i+1}, \Phi_{i+1}, \psi_{i+1}, \lambda_{i+1}, \vec{r}, t), \quad (13)$$

Важным отличием новой постановки (11) - (13) от классического алгоритма обратной трассировки является построение численной базы данных реалистичных трехмерных электрических полей \vec{E}_{gap} ускоряющих зазоров различной конфигурации (см. рис.10).

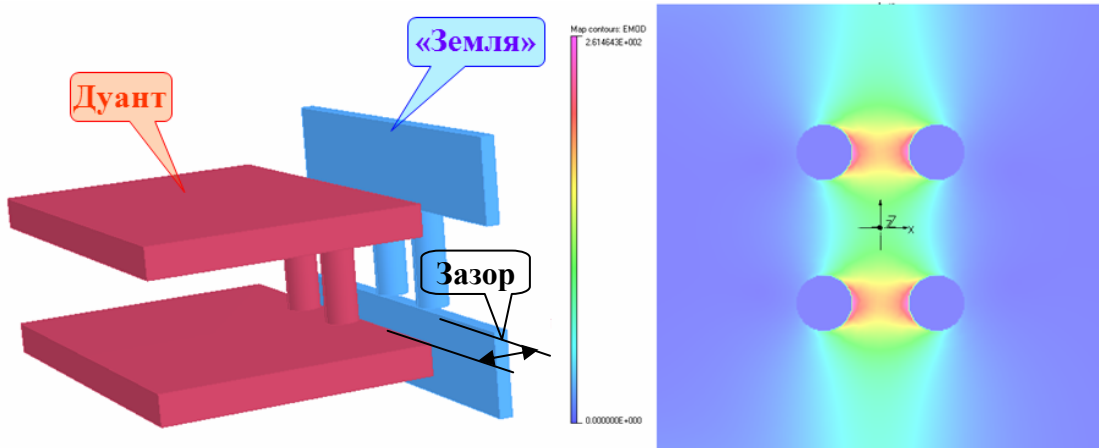


Рис. 10 Конфигурация ускоряющего зазора и соответствующее ему распределение модуля электрического поля в медианной плоскости

На рис. 11 показан результат решения задачи (11)-(13) для установки VINCY (Белград, Сербия). Для каждого режима ускорения: H^- , H_2^+ , He_4^+ , Ar_{40}^{6+} находится оптимальное положение ускоряющих зазоров, после чего находится усредненное положение зазоров по всем ускорительным режимам. Следующий шаг - создается

трехмерная геометрия (см.рис.12). По данной геометрии вычисляется электрическое поле и производится трассировка всех режимов ускорения. На рис. 13 дано сравнение новой и старой конфигурации центральной области.

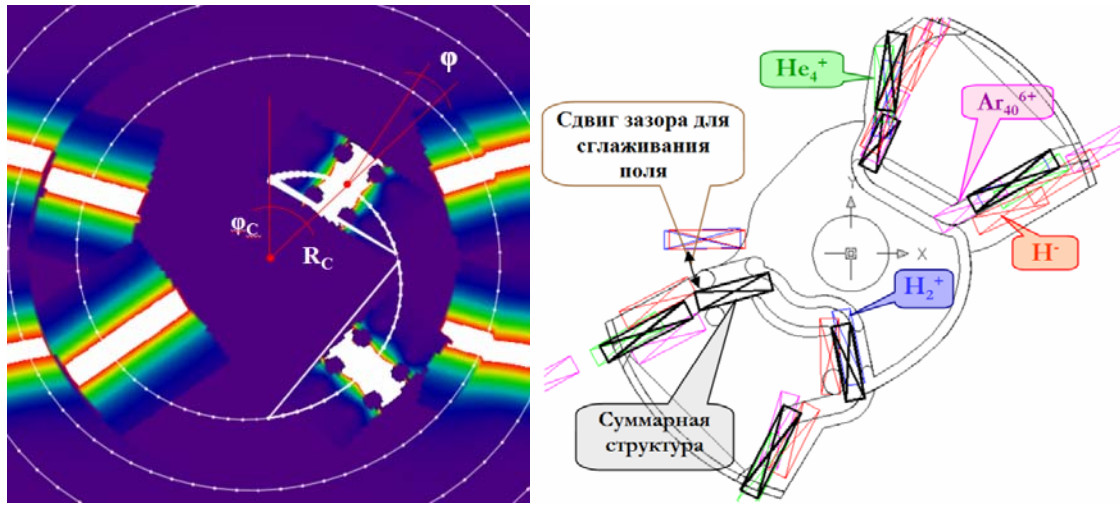


Рис. 11 Построение геометрии центральных электродов

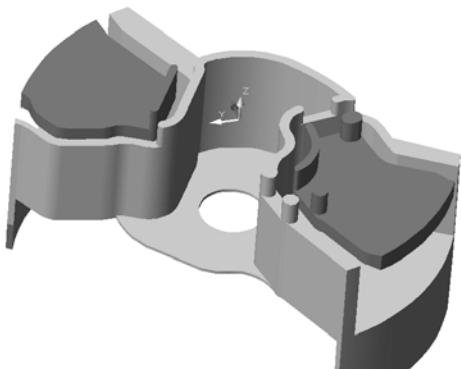


Рис. 12 Новая оптимизированная геометрия центральной зоны

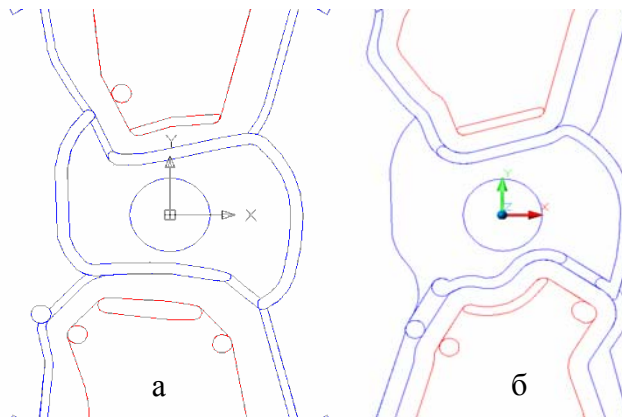


Рис.13 а,б Сравнение конфигураций:
а) до оптимизации б) после оптимизации

В **Главе 3** рассматриваются различные варианты тестирования и оценки точности численного решения нелинейной задачи учета эффекта пространственного заряда пучка. При численном решении используется метод «частица в ячейке» (PIC) или «частица на частицу» (PP). В случае однородно заряженного шара с нулевой начальной скоростью на рис. 14 приведено сравнение численного и аналитического решения (14):

$$t = \frac{R_0^{3/2}}{\sqrt{2\gamma}} \left(\sqrt{\left(\frac{\rho_0}{\rho}\right)^{1/3} \left(\left(\frac{\rho_0}{\rho}\right)^{1/3} - 1 \right)} + \frac{1}{2} \operatorname{arcch} \left(2 \left(\frac{\rho_0}{\rho}\right)^{1/3} - 1 \right) \right), \quad (14)$$

где ρ_0 - начальная плотность частиц в шаре радиуса R_0 , $\gamma = \frac{q}{m\varepsilon_0} \frac{R_0^3}{3} \rho_0$ Уравнение (14)

описывает эволюцию функции плотности заряда внутри шара.

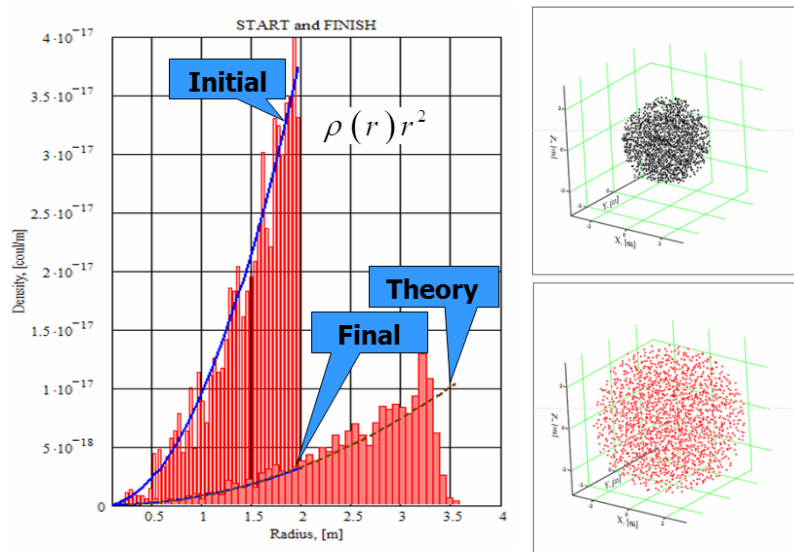


Рис. 14 Начальное и конечное распределение плотности частиц в шаре

В главе 4 произведены расчеты электромагнитных полей, используемых при моделировании динамики пучка в ускорительных системах. В §1 главы 4 получено распределение магнитного поля в секторах 12-14 установки ATLAS, LHC, CERN (Женева). В §2 главы 4 произведены расчеты электромагнитных полей линии инжекции пучка в установке AVF RIKEN циклотрон (RIKEN, Япония). Рассчитано электрическое поле банчера, магнитные поля глейзеровских линз (Glazer lens), электрическое поле инфлектора, электрическое поле центральных электродов ускоряющей системы для второй гармоники. В §3 главы 4 получены распределения магнитных полей спектрометрических магнитов установок: NIS, MARUSYA (ОИЯИ, Дубна, Россия).

Глава 5 содержит описание созданной автором программы CBDA (Cyclotron Beam Dynamics Analysis). Программа CBDA написана для моделирования динамики пучка в циклотроне, она имеет дружественный интерфейс и включает в себя моделирование основных узлов циклотрона:

- линии инжекции
- инфлектора
- циклотрона
- выводной системы
- оптимизацию центральной области

Все расчеты используют реальную геометрию установки, трехмерные карты электрических и магнитных полей. Производится учет эффекта пространственного заряда пучка, а также учет потерь частиц на структурных элементах установки на основе предложенного автором триангуляционного подхода.

В §1 главы 5 приведено описание структуры программы CBDA, а также основных численных алгоритмов, реализованных в программе. Приведены примеры тестовых расчетов-сравнений с известными программами. В §2 главы 5 создан параллельный вариант программы CBDA, позволивший реализовать предложенный в работе метод массивно-параллельных вычислений на GPU в комплексной оптимизации динамики пучка в циклотроне.

В Главе 6 рассмотрена комплексная оптимизация динамики пучка в ускорительных установках и сформулированы полученные результаты по ее применению. В §1 главы 6 на основе предложенного в работе оптимизационного подхода получена и реализована на практике новая геометрия центральных электродов ускоряющей системы для AVF RIKEN циклотрона (RIKEN, Япония) для второй гармоники. Полученная конфигурация рассчитана на ускорение в четырех режимах: $^{14}\text{N}^{5+}$ (7МэВ/нукл.), $^{16}\text{O}^{7+}$ (11 МэВ/нукл.), $^{16}\text{O}^{7+}$ (12 МэВ/нукл.), $^{16}\text{O}^{7+}$ (14 МэВ/нукл.). В §2 главы 6 получена оптимальная геометрия центральной области для циклотрона VINCY (Белград, Сербия). В §3 главы 6 проведено моделирование динамики пучка таможенного циклотрона Custom Cyclotron (Лос-Аламос, США) для обнаружения взрывчатых веществ на таможне. В данной работе была получена геометрия центральной области и произведен расчет линии транспортировки заряженных частиц в накопительное кольцо. В §4 главы 6 на основе метода массивно параллельных вычислений на GPU получены параметры линии инжекции медицинского синхротрона (ЛФВЭ, ОИЯИ, Россия) для проведения пучка углерода с током от 0 до 100 мА.

Основные результаты, полученные в диссертации:

1. Предложен новый подход комплексного моделирования и оптимизации ускорительных систем, обеспечивающий принципиально новый уровень реалистичности моделирования.
2. Сформулированы и решены новые математические постановки задач комплексного моделирования и оптимизации динамики пучка в циклотроне:
 - учета потерь частиц (предложен новый подход - триангуляционный подход)
 - новая задача обратной трассировки частиц

- задача о гладком сопряжении траекторий инфлектора и циклотрона (получено аналитическое решение)
 - новая задача определения формы инфлектора (получено аналитическое решение с учетом краевого электрического поля инфлектора)
 - задача центрирования центральной траектории пучка (новая математическая постановка)
3. Создан программный комплекс CBDA для комплексного моделирования и оптимизации динамики пучка в циклотроне на основе современных параллельных вычислений на графических процессорах GPU.
4. На основе предложенного подхода произведено комплексное моделирование и оптимизация установок:
- Секторов 12-14, ATLAS, LHC, CERN, Женева;
 - AVF RIKEN Cyclotron (RIKEN, Япония);
 - VINCY Cyclotron (Белград, Сербия);
 - Custom Cyclotron (Лос-Аламос, США);
 - NIS и MARUSYA (ЛФВЭ, ОИЯИ, Дубна).

Список публикаций автора по теме диссертации

1. Перепелкин Е.Е. Аналитическая модель краевого поля инфлектора в циклотроне. Журнал "Математическое моделирование", т.24, №3, с.48-64, 2012.
2. Перепелкин Е.Е. 3-х мерная математическая модель оптимизации центральных электродов циклотрона. Вестник РУДН, "Математика. Информатика. Физика.", №4, с. 96-106, 2011.
3. Перепелкин Е.Е., Юдин И.П.,. Использование параллельных вычислений на графических процессорах при исследовании пропускной способности канала транспортировки пучка ионов с учетом пространственного заряда. Вестник СПбГУ, т.10, №3, с.103-112, 2012
4. Перепелкин Е.Е., Юдин И.П., Тютюнников С.И., Использование среды программирования CUDA при моделировании линии инжекции пучка ионов с учетом пространственного заряда. Письма в ЭЧАЯ, т.8, №6(169), с. 989-995, 2011.
5. Перепелкин Е.Е., Смирнов С.Л., Ворожцов С.Б., Использование технологии NVIDIA CUDA для расчета динамики пучков заряженных частиц, Вестник РУДН, "Математика. Физика. Информатика", с.76-82, N1, 2010.

6. Жидков Е.П., Перепелкин Е.Е., Ворожцов С.Б., Моделирование спирального инфлектора и центрирования орбит в компактном циклотроне. Журнал "Математическое моделирование", pp. 704-711, Vol. 1, No 6, 2009.
7. Thomas J. T. Kwan, Richard E. Morgado, Tai-Sen F. Wang, B. Vodolaga, V. Terekhin, L. M. Onischenko, S. B. Vorozhtsov, E. V. Samsonov, A. S. Vorozhtsov, Yu. G. Alenitsky, E. E. Perpelkin, A. A. Glazov, D. L. Novikov, V. Parkhomchuk, V. Reva, V. Vostrikov, V. A. Mashinin, S. N. Fedotov, S. A. Minayev. The development of enabling technologies for producing active interrogation beams. Rev. Sci. Instrum. 81, 103304, 2010.
8. Р.В.Полякова, Е.Е.Перепелкин, Т.В.Шаврина, И.П.Юдин, Расчеты распределения поля спектрометрического магнита, Письма в ЭЧАЯ, т.3, №7(136), с. 74-77, 2006.
9. A.A.Baldin, E. E. Perepelkin, V. L. Smirnov, and I. P. Yudin, Mathematical Modeling of Field Distribution of SP_57 Magnet for MARUSYA Experiment, ISSN 1547_4771, Physics of Particles and Nuclei Letters, Vol. 7, No. 1, pp. 51–56, 2010.
10. I.P. Yudin, I.G. Voloshina, E.E. Perepelkin, and N.S. Rossiyskaya, Numerical Experiment for Obtaining the Field Distribution of the NIS Spectrometric Magnet, ISSN 1547-4771, Physics of Particles and Nuclei Letters, Vol. 4, No. 4, pp. 367–376, 2007.
11. E. P. Zhidkov, R. V. Poljakova, I. G. Voloshina, E. E. Perepelkin, N. S. Rossiyskaya, T. V. Shavrina, and I. P. Yudin, Computer Simulation of Spectrometer Magnets for Some Experimental Installations, ISSN 1547-4771, Physics of Particles and Nuclei Letters, Vol. 6, No. 2, pp. 177–179, 2009.
12. Arnaud, M. Commissioning of the Magnetic Field in the ATLAS Muon Spectrometer / M.Arnaud, E.Perepelkin, A.Vorozhtsov, S.Vorozhtsov [a.o.], HCP 2007: Proceedings of the Hadron Collider Physics Symposium 2007, La Biodola, Isola d'Elba, Italy, May 20-26, 2007/ Ed.: Castaldi R. [et al.] .- Amsterdam: Elsevier Science B.V., 2008.-p.265-266 .- Bibliogr.:3.
13. A.A.Baldin, I. G. Voloshina, E. E. Perepelkin, R. V. Polyakova, N. S. Rossiyskaya, T. V. Shavrina, and I. P. Yudin, Numerical Simulation of the Field Distribution Produced by the SP-40 Magnet of the MARUSYA Setup and Comparison of Simulation Results with Experimental Data, ISSN 1063-7842, Technical Physics, Vol. 52, No. 11, pp. 1397–1406, 2007.
14. Perepelkin E. and ATLAS collaboration, Commissioning of the magnetic field in the ATLAS muon spectrometer, Nucl.Phys.Proc.Suppl., ISSN:0920-5632, vol. 177-178, pp. 265-266, 2008.

15. T. J. T. Kwan, R. E. Morgado, T. F. Wang, B. K. Vodolaga, V. A. Terekhin, L. M. Onischenko, S. B. Vorozhtsov, A. S. Vorozhtsov, E. E. Perepelkin, E. V. Samsonov, V. Parkhomchuk, V. Reva, V. Vostrikov, V. Shirokov, A. Burdakov, V. A. Mashinin, S. A. Minaev, S. N. Fedotov, Detection of Explosives Using Nuclear Resonance Absorption of Gamma Rays in Nitrogen: A Russian/US Collaboration, Detection of Liquid Explosives and Flammable Agents in Connection with Terrorism, NATO Science for Peace and Security Series B: Physics and Biophysics, 2008, pp 97-116.
16. S.Vorozhtsov, ...A.Vorozhtsov, ...E.Perepelkin, ...etc, The ATLAS Experiment at the CERN Large Hadron Collider, Aad, JINST 2008, S08003, vol.3, p.437.
17. E. E. Perepelkin, A. S. Vorozhtsov, S. B. Vorozhtsov, P. Beličev, V. Jocić, N. Nešković, B. Rađenović, M. Rajčević, SPIRAL INFLECTORS AND ELECTRODES IN THE CENTRAL REGION OF THE VINCY CYCLOTRON, Cyclotrons and Their Applications 2007, pp.400-402, Eighteenth International Conference, Laboratori Nazionali del Sud, Giardini Naxos, Italy.
18. S. B. Vorozhtsov, A. S. Vorozhtsov, E. E. Perepelkin, S.Watanabe, S. Kubono, T. Mitsumoto, A. Goto, CALCULATIONS OF THE BEAM TRANSMISSION AND QUALITY IN THE RIKEN AVF CYCLOTRON, Proceedings of RuPAC 2008, pp.51-53, Zvenigorod, Russia
19. E. E. Perepelkin and S. B. Vorozhtsov, CBDA - CYCLOTRON BEAM DYNAMICS ANALYSIS CODE, Proceedings of RuPAC 2008, pp.41-42, Zvenigorod, Russia
20. E.E. Perepelkin, A.S. Vorozhtsov, S.B. Vorozhtsov and L.M. Onischenko, BEAM DYNAMICS SIMULATIONS FOR THE CUSTOMS CYCLOTRON, Proceedings of RuPAC 2006, pp. 348-350, Novosibirsk, Russia
21. S.B.Vorozhtsov, E.E.Perepelkin, A.S.Vorozhtsov, DYNAMICAL PROPERTIES OF THE ELECTROMAGNETIC FIELD OF THE CUSTOMS CYCLOTRON, Proceedings of RuPAC XIX, pp.135-137, Dubna 2004
22. S. B. Vorozhtsov, E. E. Perepelkin, A. S. Vorozhtsov, P. Beličev, N. Nešković, M. Rajčević, ION BEAM DYNAMICS SIMULATIONS FOR THE VINCY CYCLOTRON, Proceedings of RuPAC 2006, pp.316-318, Novosibirsk, Russia
23. S.B.Vorozhtsov, L.M, Onischenko and E.E.Perepelkin, CUSTOMS CYCLOTRON AND BEAM DELIVERY SYSTEM, Cyclotrons and Their Applications 2007, pp.421-423, Eighteenth International Conference
24. Sergey Vorozhtsov, Evgeny Perepelkin, Alexey Vorozhtsov, Shin-ichi Watanabe, Shigeru Kubono, Akira Goto, BEAM SIMULATIONS IN COMPUTER-MODELLED

- 3D FIELDS FOR RIKEN AVF CYCLOTRON UPGRADE, Proceedings of Particle Accelerator Society Meeting 2009, JAEA, pp.240-243, Tokai, Naka-gun, Ibaraki, Japan
25. S. B. Vorozhtsov, A. S. Vorozhtsov, E. E. Perepelkin, S. Watanabe, S. Kubono, Y. Ohshiro, T. Mitsumoto and A. Goto, Beam Simulation of RIKEN K78 AVF Cyclotron ISSN:1343-2230, pp.57-78, CNS-REP-76, 2006, University of Tokyo.
 26. Perepelkin E. and RIKEN collaboration RIKEN, Computer modelling of the Nitrogen, Oxygen, and Proton acceleration in RIKEN AVF Cyclotron, Accelerator Progress Report, vol.42, 2009.
 27. Perepelkin E. and RIKEN collaboration RIKEN Accelerator, Calculations of the beam transmission and quality in the RIKEN AVF Cyclotron, Progress Report, vol.41,p.92, 2007.
 28. Российская Н. С., Перепелкин Е. Е., Полякова Р. В., Шаврина Т. В., Юдин И. П., Математическое моделирование поля спектрометрического магнита установки «МАРУСЯ», XI Международная конференция "Математика, компьютер, образование", МКО — 2006, т. 2, стр. 178–186.

Цитируемая литература

1. ATLAS Technical Proposal for a General-Purpose pp Experiment at the Large Hadron Collider at CERN. CERN/LHCC/94-43. LHCC/P2. 15 December 1994.
2. E. O. Lawrence and M. L. Livingston. Phys. Rev., 37, 1707, 1931.
3. <http://www.nvidia.com>, официальный сайт компании NVIDIA.