

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 143 за 2018 г.</u>



ISSN 2071-2898 (Print) ISSN 2071-2901 (Online)

Ольховская О.Г., Гасилов В.А., Котельников А.М., Якобовский М.В.

Параллельный алгоритм трассировки лучей для анализа поля излучения и построения обскурограмм излучающего газа

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Параллельный алгоритм трассировки лучей для анализа поля излучения и построения обскурограмм излучающего газа / О.Г.Ольховская [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 143. 16 с. doi:10.20948/prepr-2018-143

URL: http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-143

Ордена Ленина ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ имени М.В.Келдыша Российской академии наук

О. Г. Ольховская, В. А. Гасилов, А. М. Котельников, М. В. Якобовский

Параллельный алгоритм трассировки лучей для анализа поля излучения и построения обскурограмм излучающего газа

Ольховская О. Г., Гасилов В. А., Котельников А. М., Якобовский М. В.

Параллельный алгоритм трассировки лучей для анализа поля излучения и построения обскурограмм излучающего газа

Построен оригинальный алгоритм, позволяющий выполнять трассировку лучей и расчет переноса излучения по характеристикам на трехмерных сетках нерегулярной структуры использующих геометрический В задачах, параллелизм и разбиение на подобласти. Тем самым обеспечивается учет направленности излучения в сложных многомасштабных 3D магнито-гидродинамических расчетах. Алгоритм реализован на С++. Расчет пересечений лучей с сеточными элементами выполняется посредством точных вычислений в рациональных числах. Трассировка всех используемых в расчетах лучей в пределах одного МРІ-процесса осуществляется параллельно с использованием ОрепМР-нитей. Исследованы ускорение и масштабируемость реализованных алгоритмов, в том числе сравнение с другими солверами в рамках МГД-кода. Рассмотрены возможные приложения разработанной методики.

Ключевые слова: трассировка лучей, трехмерная сетка нерегулярной структуры, перенос излучения, моделирование высокотемпературной плазмы, магнитная гидродинамика, вычисления в рациональных числах, целые числа произвольной разрядности, MPI, OpenMP

Olga Gourgenovna Olkhovskaya, Vladimir Anatolievich Gasilov, Alexey Mikhailovich Kotelnikov, Mikhail Vladimirovich Yakobovskiy

Parallel ray tracing algorithm for radiation field analysis and pinhole imaging of radiative gas

An original algorithm was developed for ray tracing across unstructured 3D grid, and grid-characteristic computation of radiative energy transfer using MPI parallel technique and grid decomposition. The developed algorithm provides accounting the anisotropy of the radiation field in complex multiscale 3D magneto hydrodynamic simulations. The algorithm is implemented as a C++ code. Accurate rational calculations are applied for the intersection of rays with grid elements. Tracing of different rays within a single MPI-process is carried out in parallel with the use of OpenMP threads. Acceleration and scalability of the implemented algorithms were investigated including a comparison with other solvers within MHD code. Proposed applications are considered.

Key words: ray tracing, unstructured 3D grid, radiation transport, high-temperature plasma simulations, magneto hydrodynamics, rational calculations, integers of unlimited range, MPI, OpenMP

Расчеты проводились на высокопроизводительной вычислительной системе MBC-10П в Межведомственном суперкомпьютерном центре Российской академии наук (МСЦ РАН)

Введение

Лучистый перенос энергии играет существенную роль В высокотемпературных газодинамических процессах. Принято считать, что характерной температурой газа, при которой его тепловое излучение начинает заметно влиять на теплообмен, является температура около 10⁴ К. При очень высоких температурах излучение вещества влияет и на его динамику. К таким явлениям относятся, например, процессы в звездных атмосферах, вхождение летательных аппаратов в атмосферу, сильноточные электрические разряды, лазерная плазма [1, 2]. В настоящее время актуальным является создание мощных источников ультрафиолетового и мягкого рентгеновского излучения технологий наноиндустрии, для проектирования новых управляемого термоядерного синтеза, лабораторной астрофизики и фундаментальных исследований свойств вещества в экстремальных условиях. Для всех этих задач востребованным является высокоточное предсказательное моделирование, учитывающее геометрию конструкций и реальные свойства материалов. При выполнении такого рода расчетов в большинстве случаев необходимо решать радиационно-газодинамические задачи, т.к. связанные газодинамические параметры формируются под влиянием радиационного теплопереноса, а поле теплового излучения зависит от лучеиспускательной способности газа и его прозрачности. Точный расчет радиационно-газодинамических (РГД) полей методом сеток (наиболее широко применяемым в настоящее время) является весьма трудоемким вычислительным процессом из-за большой размерности решаемых сеточных систем уравнений. Повсеместное активное внедрение высокопроизводительной вычислительной техники позволяет сделать такие расчеты серийными и тем самым является важным фактором успешного практического использования РГД-моделей в анализе экспериментальных данных об излучающих средах и при разработке новых технологий с применением источников излучений.

Обычно для анализа процессов теплообмена излучением в радиационной плазмодинамике используется стационарное уравнение переноса [2] для спектральной интенсивности излучения $I_{\nu}(\vec{r}, \Omega) d\nu d\Omega = h\nu c \cdot f(\vec{r}, \nu, \Omega, t) d\nu d\Omega$, которое можно записать в виде:

$$(\mathbf{\Omega} \nabla) I_{\nu}(\vec{r}, \mathbf{\Omega}) = \kappa_{\nu}'(\vec{r}) (I_{\nu p}(\vec{r}) - I_{\nu}(\vec{r}, \mathbf{\Omega})), \qquad (1)$$

где f – функция распределения фотонов в зависимости от радиус-вектора точки наблюдения \vec{r} , их частоты v, направления полета Ω и времени t, κ'_v – эффективный коэффициент поглощения (исправленный на вынужденное испускание), а I_{vp} – излучательная способность единицы объема вещества (количество энергии, испускаемой в единицу времени в один стерадиан). Излучательная способность и оптические свойства среды зависят от ее температуры и плотности, а также от частоты излучаемых и поглощаемых фотонов.

Общее решение уравнения переноса (1) приведено в [3]:

$$I_{\nu}(s) = \int_{s_0}^{s} \kappa'_{\nu} I_{\nu p} \exp[-\int_{s'}^{s} \kappa'_{\nu} ds''] ds' + I_{\nu 0} \exp[-\int_{s_0}^{s} \kappa'_{\nu} ds''].$$
(2)

Здесь $I_{\nu}(s)$ – интенсивность $I_{\nu}(\vec{r}, \Omega)$ как функция координаты *s* вдоль характеристики – "луча", $I_{\nu 0}$ – константа интегрирования (интенсивность входящего излучения на границе). Нахождение интенсивности излучения в любой точке сводится к квадратуре – интегрированию вдоль луча. Если излучающее тело имеет ограниченные размеры, интегрировать следует от границы тела *s*₀ до точки *s*.

Непосредственное численное решение уравнения (1) требует значительных вычислительных ресурсов. Оно зависит от трех пространственных координат, двух угловых, а также от частоты фотонов.

Для учета различия оптических свойств плазмы в разных частях спектра используется многогрупповое спектральное приближение. Изучаемый диапазон частот разбивается на конечное число интервалов – "групп", и уравнение (1) решается для каждой группы из этого разбиения независимо от всех остальных. Расчетные формулы для всех спектральных групп одинаковы и различаются только значениями κ'_{v} и I_{vp} , которые предполагаются в пределах каждой группы не зависящими от энергии фотонов. Полная интенсивность лучистой энергии вычисляется суммированием по спектральных задач достаточно нескольких десятков спектральных групп. Однако, когда объектом изучения является спектр излучения, для его точного воспроизведения может потребоваться от нескольких сотен до нескольких тысяч спектральных групп.

Задачи плазмодинамики, как правило, включают моделирование существенно нелинейных и нестационарных физических процессов, имеющих сильно различающиеся характерные масштабы в пространстве и во времени. Для численного решения таких задач используются трехмерные расчетные сетки нерегулярной структуры с переменными размерами ячеек. Расчеты на регулярных равномерных сетках нужного разрешения потребуют ресурсов, недоступных даже на наиболее мощных современных суперкомпьютерах. Для решения уравнения переноса излучения сеточно-характеристическим методом необходимо построить дополнительную сетку лучей (характеристик) и организовать интерполяцию данных между двумя сетками. Обе эти задачи являются нетривиальными, особенно в случае распределенных вычислений на многопроцессорной системе, где расчетная область представлена в виде набора подобластей, хранящихся и обрабатываемых на разных вычислительных узлах.

Процесс переноса энергии излучением имеет существенно нелокальный характер (каждая точка расчетной области оказывает влияние на любую другую). При интегрировании интенсивности излучения по формуле (2) необходимо обеспечить синхронизацию по участкам характеристики, проходящим через разные подобласти, и, по возможности, балансировку вычислительной нагрузки.

В настоящей работе представлен оригинальный алгоритм, позволяющий эффективно выполнять трассировку лучей и расчет переноса излучения по характеристикам при работе с трехмерными распределенными расчетными сетками большой размерности на современных высокопроизводительных ЭВМ.

Описание алгоритма трассировки

Современный уровень развития техники трассировки лучей

Трассировка лучей широко используется в компьютерной графике для рендеринга сцен. Всестороннее обсуждение соответствующих алгоритмов можно найти в [4]. В любом случае целью является создание двумерного изображения трехмерного объекта, основанное на его математическом описании и/или дискретизации. В РГД расчетах нам требуется существенно трехмерное взаимодействие лучей с сеткой с интенсивным обменом данными.

Что касается физических приложений, на данный момент основная сфера применения трассировки лучей – геометрическая оптика. Примером хорошо разработанного продукта такого рода является раздел Ray Optics Module в программном пакете COMSOL Multiphysics® Software Product Suite [5]. Этот модуль предназначен для моделирования трассировки лучей в оптически больших системах и включает много физических моделей (например, поглощающую среду, оценку аберрации, замедлители круговых и линейных волн, диэлектрические пленки, дифракционные решетки, диффузное рассеяние, идеальные деполяризаторы, линейные поляризаторы, матрицы Мюллера, отражение и преломление при разрывах материала, зеркальное отражение, поляризованное и частично когерентное излучение и т. д.). Область применения пакета весьма широкая. Тем не менее лучевая модель теплового излучения (как описано выше) в нем не реализована, и комплексные расчеты включают только теплопередачу, но не газовую динамику.

Необходимо также рассмотреть работу [6], описывающую алгоритм параллельной трассировки лучей для распространения лазерного излучения. Алгоритм был включен в лагранжево-эйлеров гидрокод с адаптивной сеткой. Авторы указывают на некоторые вычислительные проблемы. Во-первых, может при решении возникать неоднозначность квадратных И биквадратных уравнений для пересечений траекторий параболических лучей с гранями гексаэдральных ячеек. Если луч проходит близко к ребрам и/или вершинам, неправильный выбор выходной грани приведет к потере луча в следующей ячейке, так как не будет найдена действительная точка выхода. Мы это препятствие с помощью рациональной арифметики, преодолеваем обеспечивающей точное решение.

Другая трудность связана с задачей балансировки нагрузки. Некоторые процессоры могут обрабатывать подобласти, через которые проходит всего несколько лучей или вообще ни одного, и будут простаивать во время данного этапа трассировки лазерного луча. В двумерном случае расчет поля теплового излучения методом характеристик (лучей) на сетке нерегулярной структуры был успешно реализован [7] и применялся в составе модели радиационной магнитной гидродинамики (РМГД) для практических расчетов плазменных течений. Однако в указанной работе не использовалась декомпозиция сеток, а посредством МРІ-параллелизма были реализованы многогрупповые вычисления. В данной работе мы предлагаем сбалансированную технологию трассировки лучей с использованием ОрепМР и МРІ.

Использование рациональной арифметики

Рассматриваются сетки, состоящие из невырожденных полиэдров, обладающих свойством звёздчатости (наличия внутренней точки, которую можно соединить с каждой вершиной отрезком, полностью лежащим внутри полиэдра). Для реализации алгоритма трассировки каждый полиэдр предварительно разбивается на множество тетраэдров, объединение которых совпадает с исходным полиэдром. Далее рассматривается задача построения пересечения прямой, заданной двумя точками, с множеством тетраэдров.

Ее решение при использовании стандартной машинной арифметики с плавающей точкой сопряжено с невозможностью в общем случае точного определения принадлежности произвольной точки отрезку или треугольнику. Из-за этого простые математические выражения, описывающие пересечения геометрических примитивов, могут приводить к нарушениям топологии луча:

- неверному порядку отрезков пересечения;
- сдвигу отрезков пересечения вдоль прямой с образованием пустот и взаимных наложений отрезков.

Также возможны ошибки определения длин отрезков пересечения при плохой обусловленности системы линейных уравнений, описывающих взаимное положение прямой и треугольника [8].

Естественным выходом является переход от арифметики с плавающей запятой к арифметике рациональных чисел произвольной точности. Точные вычисления в рациональных числах позволяют переносить математические формулы в код, не исследуя точность вычислений результата и всех промежуточных значений, что радикально сокращает размер программы и делает тривиальной её отладку, фактически гарантируя правильность написанного кода.

Результат решения системы линейных уравнений в рациональных числах, как и факт несуществования решения, абсолютно точен и не зависит от порядка выполнения операций, что дает одинаковый результат для всех эквивалентных систем линейных уравнений. Данный результат может быть округлен для получения числа машинной точности с погрешностью, не превышающей погрешность самого типа данных и не зависящей от исходной системы уравнений.

Оба типа ошибок округления могут привести к неправильной топологии луча, а именно к неправильному порядку отрезков и/или сдвинутым отрезкам с зазорами и перекрытиями. Неточный расчет длины отрезка также возможен в случае плохо обусловленной линейной системы, описывающей относительное положение линии и треугольника. Из-за этого нельзя использовать напрямую математическое выражение, определяющее пересечение простое геометрических примитивов. Нужно рассматривать различные особые случаи, что приводит к расширению кода и значительному усложнению отладки. в [6] такие неоднозначности устраняются путем Например, введения стохастической процедуры, слегка возмущающей точку входа луча внутри входной грани.

Наше решение состоит В использовании рациональных чисел произвольной точности вместо арифметики с плавающей запятой. Точные рациональные вычисления позволяют переносить математические формулы в код без проверки точности результата расчета и всех промежуточных значений. уменьшается размер программы, Тем самым радикально ee отладка упрощается, правильность кода практически гарантирована. Это связано с устранением многих дополнительных проверок. Результат решения линейной системы рациональных числах, а также отсутствие решения В точно не зависят от порядка операций. Вырожденная система определены и ЭТО означает, игнорируется, потому ЧТО что линия параллельна рассматриваемому треугольнику и решение будет найдено для какой-либо другой грани.

Разрядность длинных чисел, необходимых для хранения точного решения системы из трех линейных уравнений для трех неизвестных, ограничена сверху величиной, зависящей только от разрядности коэффициентов. Исходные координаты точек хранятся в формате *double*, что ограничивает разрядность их рационального представления. Если начальная разрядность числителя n, а знаменателя – m, то разрядность решения будет равна 6 + 3n + 57m. Для расчетов использовалась формула решения невырожденной линейной системы через детерминанты, при этом коэффициенты матрицы вычисляются как разность двух рациональных чисел, полученных непосредственно из исходных данных и имеющих указанную выше разрядность.

Случай вырожденной системы может означать либо отсутствие пересечений прямой и плоскости, либо принадлежность прямой к плоскости, что дает бесконечное число решений. Данные решения игнорируются, так как их наличие означает, что существуют пересечения между прямой и некоторыми из соседних граней, которые будут найдены в процессе дальнейшей работы программы.

Для операций с числителями и знаменателями рациональных чисел использовалась библиотека работы с целыми числами произвольной разрядности *cbignum* [9]. В рациональной арифметике каждая операция более трудоемка и требует большего объема оперативной памяти, чем операции с

плавающей точкой, однако с увеличением доступных ресурсов современных высокопроизводительных вычислительных систем актуальность и эффективность предлагаемого решения существенно возросли.

Параллельные технологии

Результатом работы алгоритма трассировки одного луча на каждом МРІпроцессе является неупорядоченный набор отрезков – пересечений данной прямой с ячейками трехмерной расчетной сетки в подобласти, принадлежащей данному процессу. Алгоритм предусматривает работу с распределенными сетками и параллельную независимую обработку каждой пары (тетраэдр – прямая). Трассировка всех используемых в расчетах лучей в пределах одного MPI-процесса осуществляется параллельно с использованием орепMP-нитей путем раздачи каждой нити своего набора прямых. Данный подход дает высокую степень параллелизма отдельных нитей, требуемую для эффективной работы процедуры параллельной трассировки на графических платах.

После окончания трассировки производится обмен фрагментами лучей (соответствующими наборами отрезков) между процессами. Построенные лучи распределяются между процессами, на каждом равномерно процессе собирается свой набор лучей, для чего выполняется обмен данными каждого МРІ-процесса с каждым путем неблокирующей отправки сообщения. В простейшем случае на всех процессах размещается одинаковое количество лучей. Если предполагается многократное выполнение интегрирования по характеристикам, для более тщательной балансировки нагрузки между МРІпроцессами необходимо учитывать количество отрезков на лучах. Это потребует дополнительного обмена данными между процессами (Allreduce) на этапе распределения лучей, однако в результате позволит существенно увеличить эффективность расчета.

При выполнении интегрирования (2) вдоль луча мы полагаем свойства среды постоянными в пределах каждого отрезка. Тогда решение для *n*-й спектральной группы на отрезке $[s_i, s_{i+1}]$ выражается формулой $I_n(s_{i+1}) = I_{np} + (I_n(s_i) - I_{np}) \exp[-\kappa_n(s_{i+1} - s_i)], I_n(s_0) = 0.$

Значения κ_n и I_{np} зависят от рассчитанных плотности и температуры вещества (и через них – от времени в случае нестационарной задачи). Поскольку в общем случае на каждом MPI-процессе могут быть размещены лучи, содержащие отрезки из внешних по отношению к нему подобластей, на данном этапе также требуется обмен данными каждого процесса с каждым. Передаются только значения плотности и температуры, расчет спектральных характеристик выполняется на каждом MPI-процессе. Этот обмен данными самый большой по объему, именно он определяет эффективность алгоритма.

Алгоритм многогруппового спектрального приближения соответствует классической схеме "один поток команд – множественные потоки данных"

(SIMD – Single Instruction Multiple Data stream processing), что позволяет эффективно использовать для его распараллеливания конвейерные ускорители.

Исследование масштабируемости алгоритмов

Тестирование алгоритма построения сетки лучей выполнялось в составе программного комплекса РМГД MARPLE_3D [10]. Тестовый солвер был включен в общую схему счета. Сведения о времени выполнения отдельных операций выводились в файл журнала для каждого MPI-процесса. Испытания проводились на кластерах К-100 (ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, [11]) и MBC-10П (МСЦ РАН [12]). Исследовалось масштабирование процедуры построения лучей в зависимости от

- количества лучей (от 10 до 10000),
- размера сетки (от 10К до 10М ячеек),
- типа элементов (кубы, тетраэдры),
- количества МРІ-процессов (от 1 до 1000).

На графике рис. 1 приведены оценки сильной масштабируемости на сетке с общим числом тетраэдров 37М. Выполнена трассировка 3200 лучей, после чего полученные одномерные сетки равномерно распределялись между всеми процессами.



Рис. 1. Масштабируемость построения лучей

Эффективность алгоритма не очень высокая (~0,2), но стабильная. При числе процессов ≥20 наблюдается линейное ускорение, насыщение не достигнуто.

На втором этапе тестирования сравнивалось время построения лучей и время расчета переноса излучения по лучам со временем выполнения других солверов, в которых реализованы разные схемы интегрирования по времени: явная (бездиссипативная МГД) и неявная (теплопроводность). Вычисления выполнялись на сетке из 2М ячеек (гексаэдров и треугольных призм), разделенной на 256 субдоменов. Трассировалось 6000 лучей. В каждом из 256 МРІ-процессов было запущено 32 потока ОрепМР. На рисунке 2 приведены результаты профилирования трассировки лучей и РМГД солверов. Числа сверху столбцов – значения времени выполнения в секундах.



Рис.2. Сравнение времени выполнения лучевых и сеточных алгоритмов

Существует ресурсоемкая фаза подготовки данных («первый шаг»), характерная для большинства алгоритмов с использованием нерегулярных сеток. Профилирование этой фазы показано на рисунке 2 слева («GRID» и «RAYS»). GRID – время всех предварительных расчетов на сетке (метрики, коэффициенты разностных схем, портреты матриц и т.д.), а RAYS – время трассировки лучей. Временная стоимость трассировки лучей приемлема, она приблизительно вдвое больше, чем подготовка всех других данных. Правая сторона гистограммы представляет собой сравнение времени работы различных физических солверов в течение одного временного шага расчета: IMHD – бездиссипативная МГД, EMP – диффузия электромагнитного поля, HEAT – теплопроводность, RAD – диффузия излучения (36 спектральных групп), SRC – внешний источник энергии. RAYS – перенос излучения вдоль лучей для тех же 36 спектральных групп. Видно, что радиационный обмен энергией является самым трудоемким солвером. Ускорения можно достичь с помощью

параллельного расчета спектральных групп, который здесь не применялся. В любом случае интегрирование по лучам оказалось даже немного быстрее, чем решение уравнений диффузии излучения. Несмотря на то что число лучей в данном тесте было не очень большим, это многообещающий результат.

Использование трассировки лучей в прикладных задачах

Постобработка результатов расчетов, допускающая непосредственное сопоставление с экспериментальными данными

моделирование Математическое плазменных процессов позволяет получить трехмерные пространственные распределения таких характеристик, как плотность и температура плазмы, непосредственно не измеряемых в эксперименте. В то же время регистрация излучения плазмы является одним из основных методов диагностики в современной экспериментальной физике [13]. сопоставление В ЭТИМ актуальным является результатов связи с вычислительного и натурного эксперимента.

Экспериментальные исследования пространственных характеристик ультрафиолетового, вакуумного ультрафиолетового и мягкого рентгеновского излучения плазмы проводятся с использованием изображающих систем, основой которых является камера-обскура [13], представляющая собой отверстие небольшого диаметра в непрозрачном для рентгеновского излучения Регистрация изображения осуществляется экране. на рентгеновской фотопленке. Для определения спектрального состава И абсолютной интенсивности излучения плазмы применяются фильтры, этот метод позволяет получить данные по пространственному изменению электронной температуры плазменного объекта. С использованием описанного выше алгоритма камеры-обскуры, трассировки лучей была создана численная модель для построения двумерного изображения плазменного предназначенная объекта на основании расчетных данных о его температуре и плотности. Такое изображение использоваться прямого сравнения может для С экспериментальными обскурограммами.

Другой практически важный метод постобработки результатов численного моделирования – оценка мощности выходящего излучения с учетом его направленности. Она осуществляется посредством трассировки лучей и расчета поля интенсивности излучения по насчитанным распределениям газодинамических параметров в различные моменты времени. Полученные значения сопоставляются с показаниями вакуумных рентгеновских диодов (ВРД) с различными фильтрами.

Данные средства постобработки применялись для расчетно-теоретического сопровождения экспериментов по токовому сжатию многопроволочных лайнеров на установке АНГАРА-5-1 (ФГУП ТРИНИТИ) [14].

Моделирование переноса лазерного излучения

Проблема расчета поглощения лазерного излучения возникает в связи с исследованиями как фундаментального, так и прикладного характера: инерциальный термоядерный синтез, кильватерное ускорение частиц, лазерные технологии обработки материалов, монохроматические источники коротковолнового излучения для нанотехнологий.

При расчете распространения лазерного излучения в приближении геометрической оптики падающий на вещество пучок излучения аппроксимируется некоторым набором лучей, каждый из которых несёт определённую долю энергии [15]. Проходя через плазму, лучи преломляются и теряют часть своей энергии за счёт поглощения в веществе.

Уравнения, определяющие траекторию луча и изменение его энергии:

$$\frac{d\vec{r}}{d\tau} = n\vec{s}, \quad \frac{d(n\vec{s})}{d\tau} = \frac{1}{2}\nabla n^2, \quad \frac{dP}{d\tau} = -n\mu P.$$
(3)

Здесь \vec{r} – радиус-вектор вдоль луча, \vec{s} – единичный вектор в направлении распространения луча, $n = \text{Re}\sqrt{\varepsilon}$ – показатель преломления среды (n > 0), P – мощность на луче, $\mu = \frac{\omega}{2c} \text{Im}\sqrt{\varepsilon}$ – коэффициент поглощения, τ – координата вдоль луча, ω – круговая частота излучения, c – скорость света в вакууме, $\varepsilon(\vec{r},t,\omega)$ – комплексная диэлектрическая проницаемость среды. На каждом входящем в вещество луче ставятся граничные условия, определяемые из постановки конкретной задачи и применяемой дискретизации пучка излучения системой лучей.

Основная трудность, возникающая при решении системы (3) методом трассировки, связана с изменением траектории лучей из-за рефракции и, следовательно, необходимостью их динамической перестройки. Она может быть преодолена посредством использования т.н. коротких характеристик, когда траектория луча строится из отрезков фиксированных направлений в каждой ячейке расчетной сетки.

Расчет поля теплового излучения

Как уже отмечалось, для адекватного моделирования высокотемпературных газодинамических и магнито-газодинамических процессов необходимо совместное решение системы уравнений ГД/МГД и уравнения переноса излучения. Построенный алгоритм трассировки лучей и интерполяции на них газодинамических параметров можно использовать для решения этого уравнения сеточно-характеристическим методом. Однако для достижения хорошего качества такого расчета требуется связать лучами все пары ячеек в расчетной области, в противном случае существует опасность возникновения т.н. "эффекта луча" [1], когда некоторые ячейки не участвуют во взаимном энергообмене. В этом случае радиационные потоки из "горячих" областей могут не войти в баланс энергии некоторых контрольных объемов в более "холодных" областях. Экспериментальные оценки показывают, что для расчетных сеток нерегулярной структуры приемлемое по точности число угловых направлений таково, что вычислительная сложность решения задачи методом характеристик оказывается приблизительно квадратичной по числу ячеек сетки.

Таким образом, для реализации данного подхода потребуется очень большой объем вычислений, критичный даже для современных суперкомпьютеров, а также значительный объем межпроцессорных обменов по схеме "каждый с каждым" дважды за шаг по времени: при передаче плотности и температуры на лучи и последующей раздаче потока энергии в контрольные объемы. При постобработке данных эти операции выполняются только один раз, а при моделировании лазерного излучения в расчете участвует только одна спектральная группа.

Эффективный численный алгоритм расчета переноса лучистой энергии, понижающий размерность системы уравнений и сохраняющий, тем не менее, некоторую информацию об угловом распределении интенсивности излучения, можно построить на основе квазидиффузионной модели [1]. К уравнению переноса лучистой энергии (1) применяется метод моментов. Нулевой момент дает уравнение баланса энергии

 $\operatorname{div} W_{v} + \kappa c U_{v} = \kappa c I_{vp},$ где $U_{v} = \int I_{v} d\Omega$ – спектральная плотность лучистой энергии, $W_{v} = \int I_{v} \Omega d\Omega$ – плотность спектрального потока лучистой энергии, Ω – единичный вектор телесного угла, интегрирование выполняется по полному телесному углу.

Уравнение для первого момента имеет следующий вид:

grad($\int \Omega^2 I_v d\Omega$) = $-\kappa \int \Omega I_v d\Omega$.

Правая часть здесь равна ($-\kappa W$), а левая представляет собой градиент неизвестного второго момента M_2 . Введя множитель $D = M_2/M_0$, получим квазидиффузионное уравнение в форме

$$-\operatorname{div}\frac{c\boldsymbol{D}}{\kappa}\operatorname{grad}U_{v}+\kappa cU_{v}=\kappa cI_{vp}.$$

Тензор **D**, называемый в зарубежной литературе тензором (фактором) Эддингтона, вычисляется интегрированием интенсивности лучистой энергии $I_{\nu}(\vec{r}, \Omega)$:

 $\boldsymbol{D} = \int \boldsymbol{\Omega}^2 \boldsymbol{I}_{\mathrm{v}} \, \mathrm{d}\boldsymbol{\Omega} \, / \int \boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{I}_{\mathrm{v}} \, \mathrm{d}\boldsymbol{\Omega}.$

Поле интенсивности $I_{\nu}(\vec{r}, \Omega)$ необходимо получить в результате прямого решения уравнения переноса (1). Поскольку **D** – это интегральный параметр,

для его вычисления не нужна подробная сетка по телесному углу Ω , обязательно только точное воспроизведение баланса энергии. Другое преимущество данного метода связано с тем, что **D** изменяется во времени относительно медленно, и поэтому можно вычислять его с достаточно большим шагом по времени, определяемым скоростью физических изменений поля лучистой энергии, а не численными ограничениями [1].

Заключение

Предложен оригинальный алгоритм трассировки системы лучей на исходной неструктурированной, вообще говоря, разностной сетке, заданной в трехмерной области. Трассировка состоит в построении наборов отрезков, образующихся при пересечении лучами границ ячеек исходной сетки. Построенный таким образом набор одномерных сеток вдоль системы лучей дает основу для реализации сеточно-характеристического расчета переноса излучения при моделировании высокотемпературных сред на параллельной технике с использованием MPI-параллелизма и геометрической декомпозиции расчетной сетки. Для трассировки лучей исходная сетка, представленная набором сеток в подобластях расчетной области, представляется в виде набора тетраэдров (дополнительные построения выполняются в случае, если в исходной сетке содержатся элементы других типов, например гексаэдры или призмы). Алгоритм реализован в виде С++ кода. Расчет пересечений лучей с тетраэдрами выполняется посредством точных вычислений в рациональных числах. Трассировка всех используемых в расчетах лучей в пределах одного МРІ-процесса осуществляется параллельно с использованием орепМР-нитей. Исследованы ускорение и масштабируемость реализованных алгоритмов, в том числе сравнение с другими солверами в рамках МГД-кода.

Построенный алгоритм обеспечивает учет направленности (анизотропии) излучения в комплексных многомасштабных 3D МГД-расчетах. Рассмотрены возможные приложения разработанной методики: 1) постобработка результатов 3D расчетов: моделирование камеры-обскуры, оценка выхода излучения в заданном направлении; 2) моделирование переноса лазерного излучения; 3) использование для расчета поля теплового излучения на основе квазидиффузионной модели (уточнение фактора Эддингтона для расчетов на основе диффузионной модели теплообмена излучением).

Библиографический список

- 1) Четверушкин Б. Н. Математическое моделирование задач динамики излучающего газа. М.: Наука, 1985 304 с.
- 2) Mihalas D., Mihalas B. W. Foundations of radiation hydrodynamics. New York:, Oxford University Press, 1984, 731 c.
- 3) Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Физматлит, 2008.
- 4) Wald I. et al. State of the Art in Ray Tracing Animated Scenes, Computer Graphics Forum, Vol. 28, Is. 6 (September 2009), 1691–1722.
- 5) Ray Optics Software [Электронный ресурс]. Режим доступа: URL: https://www.comsol.com/ray-optics-module
- 6) Masters N. D. et al. Laser Ray Tracing in a Parallel Arbitrary Lagrangian-Eulerian Adaptive Mesh Refinement Hydrocode, Journal of Physics: Conference Series 244 (2010) 032022.
- Gasilov V. A. et al. Object-Oriented Programming and Parallel Computing in Radiative Magnetohydrodynamics Simulations. Advances in Parallel Computing. 2008. T. 15. C. 475-482.
- 8) Quarteroni A., Sacco R., Saleri F. Numerical mathematics. Springer-Verlagn New York, Berlin, Heidelberg, 2000 656 c.
- 9) Шакиров Р. Н. Применение методов обнаружения и компенсации ошибок в целочисленном классе cBigNumber // Программирование. 2010. № 1. С. 50-65 (R.N.Shakirov C++ class for integers of unlimited range URL: http://www.imach.uran.ru/cbignum) [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://www.imach.uran.ru/cbignum
- Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. Программный комплекс MARPLE / Гасилов В. А., Багдасаров Г. А., Болдарев А. С., Дьяченко С. В., Карташева Е. Л., Ольховская О. Г.; правообладатель ИПМ им. М. В. Келдыша РАН. – № 2012660911; заявл. 11.10.2012; зарег. 30.12.2012.
- 11) Гибридный вычислительный кластер К-100 [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://www.kiam.ru/MVS/resourses/k100.html
- 12) Межведомственный суперкомпьютерный центр Российской академии наук [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://www.jscc.ru/
- 13) Пергамент М. И. Методы исследований в экспериментальной физике: учеб. пособие. Долгопрудный: Интеллект, 2010. - 300 с.
- 14) Котельников А. М., Ольховская О.Г., Багдасаров Г. А., Якобовский М. В. Развитие средств численной диагностики в коде MARPLE // XLIII Международная Звенигородская конференция по физике плазмы и УТС (8 – 12 февраля 2016 г., г. Звенигород): Сб. тезисов докладов – М., 2016, С. 173.
- 15) Цыгвинцев И. П. и др. Сеточно-лучевая модель и методика расчета поглощения лазерного излучения // Математическое моделирование. 2015. Т. 27. № 12. С. 96-108.

Оглавление

Введение	3
Описание алгоритма трассировки	5
Современный уровень развития техники трассировки лучей	5
Использование рациональной арифметики	6
Параллельные технологии	8
Исследование масштабируемости реализованных алгоритмов	9
Использование трассировки лучей в прикладных задачах	11
Постобработка результатов расчетов, допускающая непосредственное	
сопоставление с экспериментальными данными	11
Моделирование переноса лазерного излучения	12
Расчет поля теплового излучения	12
Заключение	14
Библиографический список	15