

· 物理电子学 ·

基于高层数据模型库的三维粒子模拟程序研究

周俊, 彭凯, 刘大刚

(电子科技大学物理电子学院 成都 610054)

【摘要】在高层数据模型库JADLib基础上,研究和开发了三维电磁粒子模拟程序,为具有统一数据接口的高性能粒子模拟计算提供铺垫作用。给出了程序的详细设计思路和实现方法,并使用该程序对多种典型的微波器件进行了模拟计算。结果表明,基于高层数据模型库进行三维粒子模拟程序是有效和实用的。

关键词 高性能计算; JADLib; 微波器件; 粒子模拟

中图分类号 TP301.6

文献标志码 A

doi:10.3969/j.issn.1001-0548.2014.04.010

Three-Dimensional Particle-in-Cell Code Based on Advanced Data Model Library

ZHOU Jun, PENG Kai, and LIU Da-gang

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

Abstract A three-dimensional electromagnetic particle-in-cell (PIC) simulation code is investigated and developed based on JADLib, an advanced data model library. This work provides preparation for the high-performance computation of PIC simulation with unified data interface. The detailed considerations and methods for design and realization of this code are given. Various typical microwave devices are simulated by using this code. The results show that it is an efficient and practical way for the investigation of PIC simulation.

Key words high-performance computation; JADLib; microwave device; PIC simulation

目前,模拟各类复杂物理现象的科学计算程序的研制不断取得成功,但是随着程序数据的复杂性和规模日益增加,一些潜在的数据管理问题变得更加突出。一方面,由于没有统一数据存储格式,程序之间的交换非常困难,并且难以使用通用的数据分析及处理工具;另一方面,并行程序对支持复杂并行数据结构和确保数据存取效率的I/O方式也提出了更高的要求^[1-3]。

粒子模拟方法^[4]作为研究带电粒子与电场和磁场相互作用过程的重要数值模拟方法,近年来已经被广泛应用到多个研究领域^[5-6]。随着高速大容量计算机性能的进一步提高,必将进一步推动粒子模拟方法研究及其应用领域的发展,扩大研究和应用范围,缩短研究和应用周期,促进一些新兴学科的发展^[7-8]。由于粒子模拟方法所研究物理现象的复杂性,它所涉及的数据类型复杂多样,导致在数据管理方面存在很大的难度和挑战性。因此,需要借助

通用的高层数据模型库,把耗费在数据管理方面的工作量降到最小,把更多的精力用在算法的研究上,由此提高研发效率。

本文介绍了在高层数据模型库JADLib基础上研究和开发三维电磁粒子模拟程序的详细设计思路和实现方法,并使用所编写的程序对两种典型的微波器件进行了模拟计算,给出了详细的模拟结果。结果显示,JADLib为粒子模拟研究提供了非常实用的数据管理、数据分析和数据处理平台,基于JADLib进行开发是粒子模拟研究的一种有效途径。

1 高层数据模型库基础

本文使用的高层数据模型库JADLib由北京应用物理与计算数学研究所研制,其目标是设计面向计算物理领域的高层语义数据对象,支持多网格、多物理量、多介质及组份量数据的表示与操作,为用户提供直观的科学数据读写应用程序接口(API),

收稿日期: 2013-06-06; 修回日期: 2014-03-02

基金项目: 中央高校基本科研业务费(ZYGX2011J037)

作者简介: 周俊(1980-),男,博士,副教授,主要从事电磁场数值模拟方法方面的研究。

确保计算程序可以统一的HDF5存储格式输出文件, 促进应用程序间的数据共享。同时, JADLib集成了数据自压缩、并行I/O、跨平台二进制文件等先进I/O功能, 实现了与JaVis等可视化系统的无缝连接, 通过JADLib输出的数据文件可以被并行可视化系统JaVis直接实施可视化^[1]。

JADLib在数据管理方面设计提供了多种数据对象, 包括网格、网格块、网格区域、几何量、物理量、介质量、组份量和曲线量等, 基本上考虑到了科学计算中可能会用到的所有数据类型。其中, 网格对象支持5种类型: 均匀网格、直线网格、折线网格、点网格和非结构网格, 可根据不同计算方法进行选择。使用中最为重要的物理量定义在网格上, 也支持多种类型: 按张量的阶数可分为0阶张量(即标量)、1阶张量(即向量或矢量)和2阶张量; 按在网格上的位置可分为结点上、单元中心量(简称单元量)、棱心量、面心量等; 按物理量值的分布可分为常量和变量。

使用JADLib进行应用程序编制需要遵循一定规范, 程序应包括: 初始化JADLib、创建文件、注册数据对象、输出数据、c关闭文件和关闭JADLib共6个部分。每个部分的具体功能都通过调用相应的JADLib库函数来实现。通过对这些库函数的灵活使用, 可以输出各种有用的数据文件(包括计算摘要文件、曲线数据文件、JaVis可视化入口文件和分进程分时刻的物理量数据文件等)。这些数据文件可以由JaVis直接读入, 从而进行数据可视化分析。

2 程序的设计与实现

在JADLib基础上研究和开发三维电磁粒子模拟程序时, 首先需要充分利用JADLib丰富的数据对象类型对算法中所用到的数据对象进行设计。然后, 根据JADLib应用程序编制规范, 对程序流程进行综合考虑。另外, 为了利用JaVis强大的数据可视化功能, 需要根据电磁粒子模拟的特点和实际需要专门对数值诊断进行设计。在程序实现上, 还需要考虑易用性和扩展性。

2.1 数据对象设计

电磁粒子模拟方法的算法可大致分为电磁场计算、带电粒子计算和场与粒子的耦合3个部分。考虑到数据定义的条理性, 对用到的数据对象分别进行设计。

在电磁场计算部分, 首先需要定义适用于时域有限差分法(FDTD)^[9]的网格对象类型。由于采用非

均匀网格FDTD, 基本上可以确定直角坐标系使用直线网格、圆柱坐标系使用折线网格最为合适。但考虑到程序的统一性, 并且折线网格也可以用来表示直线网格, 所以最后确定使用折线网格类型, 如图1所示。然后, 依托于所定义的网格来定义物理量。由于FDTD算法的基础是Yee元胞模型, 这也决定了它用到的各种离散量非常适合用JADLib物理量来定义, 如图2所示。离散电场可定义为棱心矢量, 离散磁场可定义为面心矢量, 离散电位可定义为节点标量, 材料的介电常数和磁导率可定义为单元2阶张量, 材料的电导率可定义为单元标量。另外, 材料的属性标识(如导体、介质、真空)也可以用单元标量来定义。

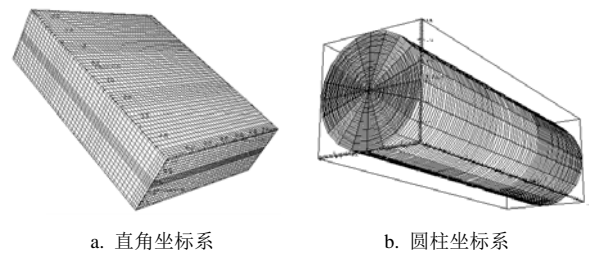


图1 程序的三维折线网格

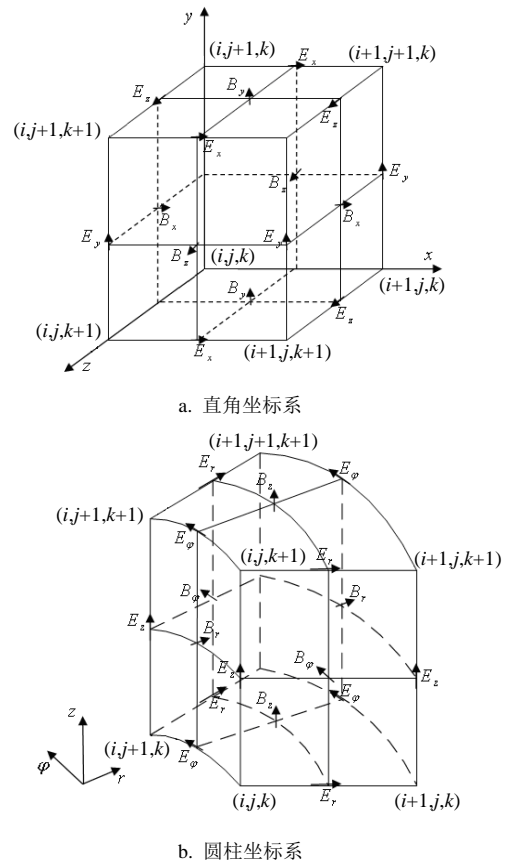


图2 程序的物理量数据定义

在带电粒子计算部分, 网格对象的定义直接使用JADLib提供的点网格类型。对于和带电粒子相关

的物理量,如电荷、质量、荷质比、受力、位置、速度、动量和相对论因子等,则是根据它们各自的属性,分别定义为点网格节点上的标量或矢量。

在场与粒子的耦合部分,不需要另外定义网格对象,但要定义一些计算所需的物理量。其中,计算场对粒子的作用时,离散的电磁场是通过权重得到的作用场来推动带电粒子的。计算作用场最直接和最易理解的方法就是通过平均场来权重,分为两个步骤:1)计算平均场,把分布在Yee元胞各条棱心的电场分量和各个面心的磁场分量都先权重到Yee元胞各个顶点上;2)计算作用场,把各个顶点上的平均场权重到Yee元胞内部带电粒子所处的位置。所以,还需要在前面定义的折线网格上添加节点矢量平均场的定义。带电粒子在作用场的推动下,速度和位置发生改变,就会引起空间分布的电流密度场和电荷密度场的变化,而这些场的变化又将作为源项耦合到Maxwell方程组中,反作用于电磁场的计算。带电粒子的运动是连续分布的,而产生的电流密度场和电荷密度场必须是离散分布的形式,才能自然地耦合到离散的Maxwell方程组中。所以,还需要在前面定义的折线网格上添加棱心矢量电流密度场和节点标量电荷密度场两个物理量。

2.2 程序流程设计

按照电磁粒子模拟方法的基本思路^[10],程序的计算流程如图3所示。在程序初始化之后,先产生非均匀离散网格,并根据电磁场和带电粒子的初始条件,在网格上设置或计算初始电磁场的值,在模拟区域内放置初始粒子;然后进入主循环,在每一个迭代步,先用FDTD方法求解Maxwell方程组,得到离散的电磁场分布,再通过权重方法计算粒子所在位置的作用场,由此推动粒子运动,最后计算粒子引起的电荷密度场和电流密度场。当一个迭代步结束时,判断是否结束,如果没有结束,则时间上前进一个步长,继续进行下一个迭代步的计算;如果运行结束,则退出主循环,结束程序。

根据JADLib应用程序编制规范,需要调用相应的JADLib库函数才能完成模拟结果的输出。经过分析,应在以上计算流程中插入3处JADLib库函数调用:1)在程序初始化部分,插入JADLib相关的初始化函数,包括MPI初始化、JADLib初始化和设置程序运行说明信息;2)在主循环中需要输出数据的时间步里,在完成时间步数值计算后,插入对计算结果的输出函数,包括创建文件、注册数据对象、输出数据和关闭文件,以及对各类曲线量的输出;

3)在主循环完成后,程序结束前,插入JADLib相关的关闭函数,包括JADLib关闭和MPI关闭。这3处函数调用可归纳为3个模块^[1],如图4所示。

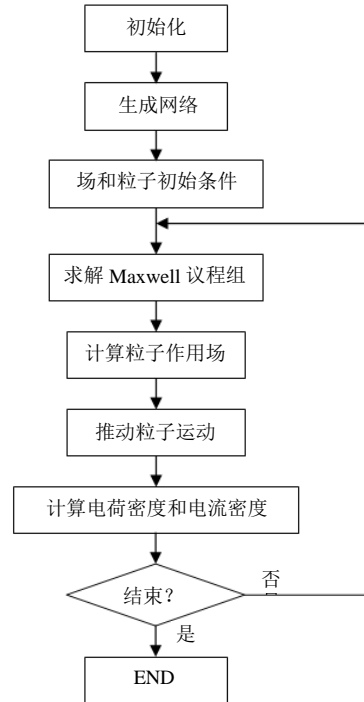


图3 程序的计算流程

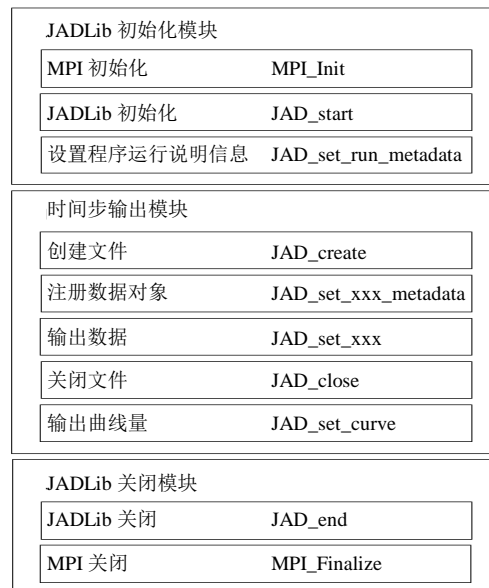


图4 JADLib应用程序流程

需要说明的是,程序要在初始化过程中读取模型输入文件,并将所有的模型信息存储到内存里,以供后面的计算使用。所以,需要提供一组接口来解析这个模型输入文件。其中,为了让用户能够灵活控制输出数据的类型、包含信息和输出时间点,就要有一个专用于设置JADLib输出的接口,这个接口对数值诊断非常重要。

2.3 数值诊断设计

数值诊断是科学计算中非常重要的一部分。JADLib在数据管理方面的优势与JaVis强大的数据可视化功能相结合, 为科学计算的数值诊断提供了有力的手段。为了充分利用这一点, 有必要对数值诊断设计专门进行讨论。

根据电磁粒子模拟的特点和实际需要, 应该尽量将最有价值的信息从计算结果中提取出来, 从而得到对物理问题更深入的认识或新的发现。数值诊断中要观测的物理量是非常繁多的, 本文给出了经过归纳后的数值诊断观测类型以及分类的层次结构, 如图5所示。

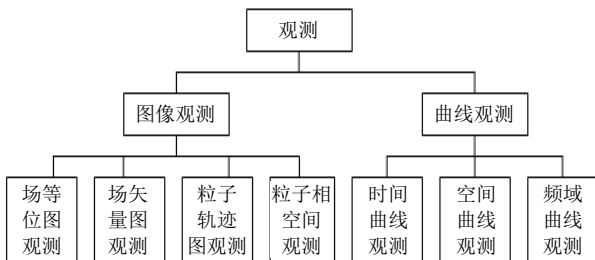


图5 数值诊断观测的层次结构

首先将各种观测分为图像观测和曲线观测两类。前者给出物理量在空间上的二维或三维图像分布, 通过这些图像可以对物理量的整体变化趋势有一个宏观的认识; 后者给出物理量随时间、空间和频率变化的曲线, 通过这些曲线可以对物理量的值进行定量分析。

电磁粒子模拟所需的图像观测主要包括场等位图、场矢量图、粒子轨迹图和粒子相空间图等。场等位图用于抽取数据场中数值相等的区域, 可以先通过JADLib输出标量场或矢量场的某些分量值, 再通过JaVis绘制得到; 场矢量图是用箭矢来描述矢量场的瞬时状态, 可以先通过JADLib输出矢量场, 再通过JaVis绘制得到; 粒子轨迹图是用三维点来描述粒子空间坐标分布的, 可以先通过JADLib输出粒子对应的点网格, 再通过JaVis绘制得到; 粒子相空间图是用二维点来描述粒子任意两个相空间变量(如位置、速度、动量)的关系, 可以先通过JADLib输出为点网格形式, 再通过JaVis绘制得到。

电磁粒子模拟所需的曲线观测主要包括时间曲线、空间曲线和频域曲线等。时间曲线是指物理量随时间变化的曲线, 空间曲线是指物理量随空间坐标变化的曲线, 频域曲线是指物理量经过傅里叶变换得到频谱分布图。这些曲线涉及到统计和计算, 可以先在程序内部直接提取或者进行数学计算得到

的一系列配对的值, 再通过JADLib输出曲线量, 最后通过JaVis绘制得到。

在实际数据分析中, 所观测的每一种图像和曲线功能各不相同, 对物理现象描述全面, 而且具有很大的灵活性。这些观测数据也可以随时存储下来, 为数据后处理所用。

按照模块化软件设计思想, 核心计算程序的主要部分由网格生成器、电磁场求解器、粒子求解器、对象管理器和数据管理器构成, 如图6所示。这样设计的目的是为了模块化分离, 降低代码的复杂度, 以便于以后的维护、管理和升级。

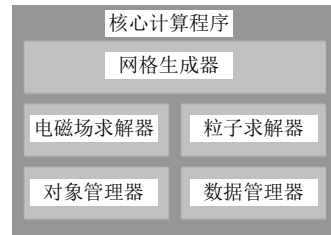


图6 核心计算程序结构框图

网格生成器用于生成一个非均匀的、用于FDTD计算的网格, 该网格由多个连续排列的Yee元胞组成。它能生成直角坐标系和圆柱坐标系下的三维网格。在进行模拟之前, 只需指定大致的网格步长, 并标注必须放在全网格点位置的区域顶点, 网格生成器就会自动生成非均匀网格。如果某两个区域所指定的网格步长不同, 则会对两个区域连接处的几个Yee元胞采用渐变的网格步长, 以保证平滑过渡。

电磁场求解器用于在每个时间步更新整个模拟区域内的电磁场值, 并处理各种电磁场边界条件。在对电磁场边界条件的处理上, 也采用模块化设计的思想, 针对每一种边界都提供功能实现部分和接口调用部分, 并且尽量考虑到今后扩展的需要, 形成功能实现和接口调用的文件规范。

粒子求解器用于在每个时间步先计算带电粒子的作用场, 再推动粒子运动, 然后计算粒子引起的电荷密度场和电流密度场, 并处理各种带电粒子边界条件。在对带电粒子边界条件的处理上, 也采用模块化设计的思想, 形成文件规范。

对象管理器用于存储和管理所有已定义的对象信息, 包括点、线、面、体等结构, 还有变量、函数、电磁场分量、其他场分量、材料定义参数、粒子信息、粒子种类定义、边界条件参数、发射过程参数、一些实用模型参数、观测定时器、诊断设置参数等。

数据管理器用于存储和管理所有需要观测或导

出的数据,包括任意观测时刻和导出时刻的场数据、粒子数据、以及这些数据在空间上和时间上的积分值等。

3 程序的应用实例

根据以上分析与设计,本文在Linux环境下基于JADLib实现了三维电磁粒子模拟程序。作为应用实例,以下给出两种典型微波器件的模拟计算结果。其中,相对论返波管振荡器(RBWO)是典型的O型器件,虚阴极振荡器(Vircator)是典型的空间电荷器件。

3.1 相对论返波管振荡器(RBWO)

本文所模拟的波纹波导相对论返波管振荡器结构参考了文献[11],采用了环形空心电子束和波纹波导慢波结构,慢波结构采用9个周期的波纹,波纹内外半径分别为1.3 cm和1.7 cm,波纹周期为1.6 cm,慢波结构前端截止波导半径为1.1 cm,输出端波导半径为2.5 cm。环形空心电子束的内外半径分别为0.95 cm和1 cm,二极管电压为500 kV。轴向引导磁场为2.8 T。

图7给出了模拟得到的一些三维视图。由图可以看出,电子束在经过慢波结构区域后被偏转收集,产生的微波以TM₀₁模式输出。



图7 RBWO三维视图

图8给出了稳态阶段粒子的 (Z, U_z) 相空间图。可以看出,相对论电子束的纵向速度获得了较好的调制,部分电子动能转化成微波能。

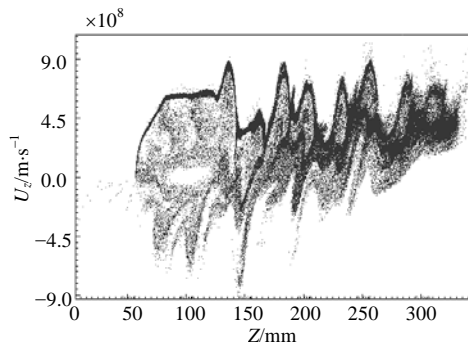
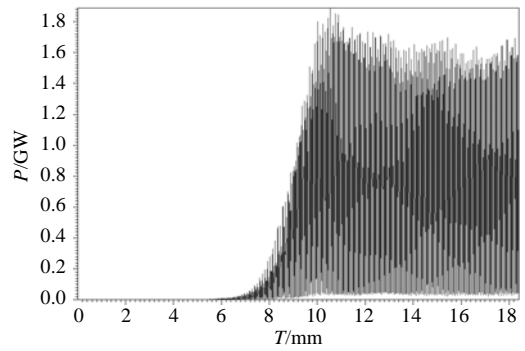


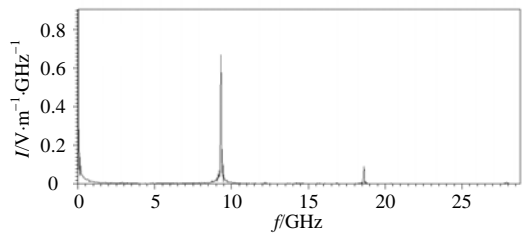
图8 RBWO稳态阶段的粒子 (Z, U_z) 相空间图

图9给出了一些物理量的观测曲线。输出功率随时间变化的曲线如图9a所示,稳定后的平均功率约为750 MW。输出信号的频谱如图9b所示,主频为

9.38 GHz。



a. 输出功率



b. 信号频谱

图9 RBWO的观测曲线图

表1给出了详细结果与KARAT软件^[13]模拟结果的对比。可以看出,两者吻合地非常好。

表1 本文软件与KARAT软件模拟结果对比

软件	二极管电压 / kV	二极管电流 / kA	输出功率 / MW	频率 / GHz	效率
本文软件	700	5.5	750	9.38	19.5
KARAT	730	5.6	805	9.30	20

3.2 虚阴极振荡器(Vircator)

本文所模拟的向内发射同轴虚阴极振荡器结构参考了文献[12],采用了同轴结构和向内发射的电子束。同轴输入波导的内外半径分别为6.7 cm和10 cm,圆柱输出波导半径为5 cm,阳极薄膜的半径与圆柱输出波导相同。波导端口处加载一个直流电压,电压从零值开始增加,经过2 ns的上升沿,达到600 kV,之后维持稳定。阴极电子发射区域的半径为6.5 cm,长度为3 cm。

图10给出了模拟得到的一些三维视图。由图可以看出,由于电子的空间电荷效应形成虚阴极振荡,产生的微波主要以TM₀₁模式输出。

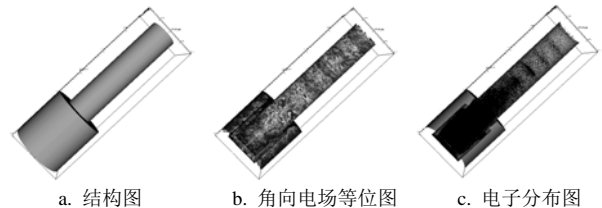


图10 Vircator三维视图

图11给出了稳态阶段粒子的 (R, U_r) 相空间图。由图可以看出,电子的径向动量在阳极薄膜位置达到

最大, 随着离开阳极逐渐减速, 有些电子在虚阴极附近停止运动, 然后以负的径向动量返回二极管间隙, 由于阳极薄膜中的能量损失, 这些电子无法到达阴极; 有些电子穿过虚阴极后继续向内传播, 可以看出它们具有很宽的径向动量分布。

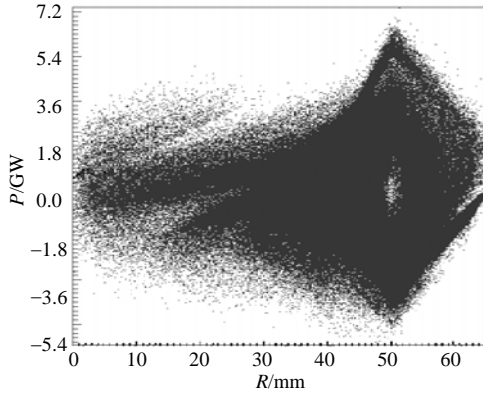
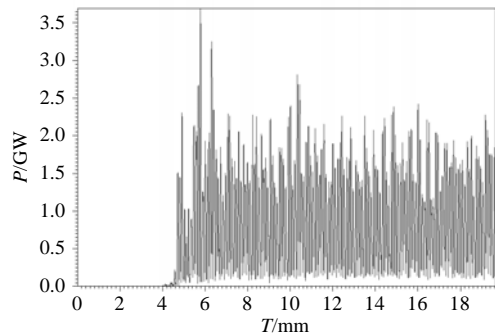


图11 Vircator稳态阶段的粒子(R, U_r)相空间图

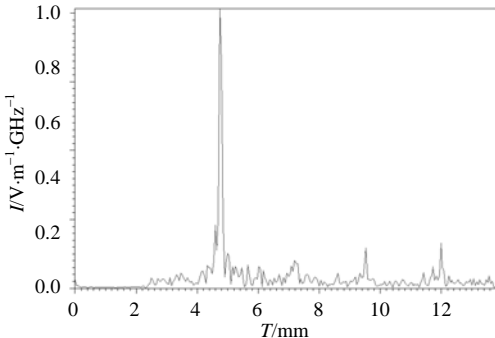
图12给出了一些物理量的观测曲线。输出功率随时间变化的曲线如图12a所示, 稳定后的平均输出功率约为950 MW。输出信号的频谱如图12b所示, 主频为4.7 GHz。表2给出了详细结果与KARAT软件^[13]模拟结果的对比。可以看出, 两者吻合地非常好。

表2 本文软件与KARAT软件模拟结果对比

软件	二极管电压 /kV	二极管电流 /kA	输出功率 /MW	频率 /GHz	效率
本文软件	500	30	950	4.7	6.3
KARAT	490	30	970	4.6	6.6



a. 输出功率



b. 信号频谱

图12 Vircator的观测曲线图

4 结束语

本文在高层数据模型库JADLib基础上研究和开发了三维电磁粒子模拟程序, 并使用所编写的程序对RBWO和Vircator两种典型的微波器件进行了模拟计算。实践证明, JADLib为粒子模拟研究提供了非常实用的数据管理、数据分析和数据处理平台, 基于JADLib进行开发是粒子模拟研究的一种有效的途径。

本文研究工作得到北京应用物理与计算数学研究所高性能计算中心的技术指导, 在此表示感谢。

参 考 文 献

- [1] 高性能计算中心. JADLib用户指南[M]. 北京: 北京应用物理与计算数学研究所, 2007. High Performance Computing Center. User's manual for JADLib[M]. Beijing: Beijing Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, 2007.
- [2] 高性能计算中心. JaVis用户指南[M]. 北京: 北京应用物理与计算数学研究所, 2006. High Performance Computing Center. User's manual for JaVis[M]. Beijing: Beijing Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, 2006.
- [3] 夏芳, 陈虹, 宋磊, 等. JADLib-科学计算数据高层I/O软件库[J]. 计算机工程与科学, 2009, 31(A1): 227-230. XIA Fang, CHEN Hong, SONG Lei, et al. JADLib a high level I/O library for scientific computing data[J]. Computer Engineering and Science, 2009, 31(A1): 227-230.
- [4] BIRDSALL C K, LANGDON A B. Plasma physics via computer simulation[M]. New York: McGraw-Hill Book Company, 1985.
- [5] 马燕云, 常文蔚, 银燕, 等. 三维面向对象的并行粒子模拟程序PLASIM3D[J]. 计算物理, 2004, 21(3): 305-311. MA Yan-yun, CHANG Wen-wei, YIN Yan, et al. Three dimensional object oriented parallel particle simulation code2PLASIM3D[J]. Chinese Journal of Computational Physics, 2004, 21(3): 305-311.
- [6] 陈民, 盛政明, 郑君, 等. 粒子模拟程序的发展及其在激光等离子体相互作用研究中的应用[J]. 计算物理, 2008, 25(1): 43-50. CHEN Min, SHENG Zheng-ming, ZHENG Jun, et al. Development and application of mult-idimensional particle-in-cell codes for investigation of laser plasma interactions[J]. Chinese Journal of Computational Physics, 2008, 25(1): 43-50.
- [7] 曹小林, 郑春阳, 张爱清, 等. 面向数千处理器的三维等离子体粒子模拟程序研制[J]. 自然科学进展, 2009, 19(5): 544-550. CAO Xiao-lin, ZHENG Chun-yang, ZHANG Ai-qing, et al. Program development of 3D plasma particle simulation for thousands of processor[J]. Progress in Natural Science, 2009, 19(5): 544-550.
- [8] 曹小林, 张爱清, 莫则尧. 基于面向对象的粒子类模拟并行计算研究[J]. 计算机研究与发展, 2007, 44(10):

- 1647-1651.
CAO Xiao-lin, ZHANG Ai-qing, MO Ze-yao. Parallel computation for particle simulations based on object-oriented design[J]. Journal of Computer Research and Development, 2007, 44(10): 1647-1651.
- [9] 葛德彪, 闫玉波. 电磁波时域有限差分方法[M]. 第二版. 西安: 西安电子科技大学出版社, 2005.
GE De-biao, YAN Yu-bo. Finite-difference time-domain method for electromagnetic wave[M]. 2nd ed. Xi'an: Xi'an Electronic Science and Technology University Press, 2005.
- [10] VERBONCOEUR J P. Particle simulation of plasmas: review and advances[J]. Plasma Physics and Controlled Fusion, 2005, 47(4): A231-A260.
- [11] 陈昌华, 刘国治, 宋志敏, 等. 相对论返波管慢波结构的起始端设计[J]. 强激光与粒子束, 2005, 17(8): 1121-1125.
CHEN Chang-hua, LIU Guo-zhi, SONG Zhi-min, et al. Design of start part of slow wave structure in relativistic backward wave oscillator[J]. High Power Laser and Particle Beams, 2005, 17(8): 1121-1125.
- [12] SHAO H, LIU G, CHEN C, et al. Characterization of modes in coaxial vircator[J]. IEEE Trans Plasma Science, 2006, 34(1): 7-13.
- [13] TARAKANOV V P. User's manual for code KARAT[M]. Springfield, USA: Berkeley Research Associates, 2001.

编辑 黄 莘