

文章编号: 2095-4980(2016)04-0574-08

## 新型电荷守恒算法在大规模粒子模拟中的应用

董 焯<sup>a,b</sup>, 董志伟<sup>a,b</sup>, 周海京<sup>a,b</sup>, 杨温渊<sup>a</sup>

(中国工程物理研究院 a.北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094; b.高性能数值模拟软件中心, 北京 100088)

**摘 要:** 介绍了一种粒子沿折线(zigzag-line)运动的守恒型 PIC 算法在自编三维全电磁粒子模拟大规模并程序 NEPTUNE3D 中的实现与应用情况。相对于经典 PIC 算法, 该算法不需要修正电场, 可以避免大型矩阵求逆问题, 使得程序鲁棒性更高; 相对其他守恒型算法, 该算法不需判断语句, 代码执行效率更高, 更适合大规模并行计算环境。通过与经典 PIC 算法对比, 给出采用 zigzag-line 守恒型 PIC 算法的 NEPTUNE3D 程序对磁绝缘线振荡器天线一体化模型与太赫兹折叠波导行波管 2 个实际算例的验证测试结果、应用效果, 结果表明: zigzag-line 守恒型 PIC 算法模拟结果正确可靠, 相对经典 PIC 算法, 大大缩短了计算时间, 显著提升了器件模拟设计效率。

**关键词:** 高功率微波; 全电磁粒子模拟; 束波相互作用; 电荷守恒型算法; 大规模并行计算

**中图分类号:** TN102

**文献标识码:** A

**doi:** 10.11805/TKYDA201604.0574

## Application of a novel charge-conservation method used in large-scale parallel computation for fully electromagnetic Particle-In-Cell simulation

DONG Ye<sup>a,b</sup>, DONG Zhiwei<sup>a,b</sup>, ZHOU Haijing<sup>a,b</sup>, YANG Wenyuan<sup>a</sup>

(a.Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, China Academy of Engineering Physics, Beijing 100094, China; b.Software Center for High Performance Numerical Simulation, China Academy of Engineering Physics, Beijing 100088, China)

**Abstract:** A novel charge-conservation method with particle zigzag-line moving is introduced and it is implemented and applied in a large-scale parallel code named NEPTUNE3D for fully electromagnetic Particle-In-Cell(PIC) simulation programmed by authors. Compared with the classical PIC method, this zigzag-line charge-conservation method does not need Boris-correction which involves large linear-equations for solving problem, so it has a better robustness. Compared with other charge-conservation methods, this zigzag-line charge-conservation method does not need any judgment sentence, so its code executive efficiency is higher and it is suitable for massively parallel computation. Compared with the classical PIC method, two real devices are simulated and tested by using NEPTUNE3D with zigzag-line charge-conservation method, one is the entire high power microwave tube including magnetic transmission line oscillator and antenna, the other one is a terahertz folded waveguide travelling-wave-tube. The zigzag-line charge-conservation method simulation results are correct and agree with the classical PIC method well. Moreover, as computation duration being shortened notably, device-design and simulation efficiency could be boosted obviously by using this new zigzag-line charge-conservation method.

**Key words:** high power microwave; fully electromagnetic Particle-In-Cell simulation; beam-wave interaction; charge-conservation method; large-scale parallel computation

近年来, 高功率微波(HPM)由于其可能的军事和工业应用前景而迅速被人们关注<sup>[1]</sup>。源器件的设计和研制, 无疑是 HPM 系统的核心问题。理论、数值模拟与实验, 是当代科学技术领域并驾齐驱的 3 种重要研究手段。HPM 源器件中, 电子束与电磁波相互作用属于强非线性物理过程, 无法给出解析解; 另一方面, 实验费用昂贵且耗时费力。随着计算机与并行计算技术的迅速发展, 数值模拟逐渐成为一项不可或缺的重要手段, 并有望

收稿日期: 2015-05-06; 修回日期: 2015-06-15

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11305015,11475155,61201113,11371067); 中国工程物理研究院太赫兹科学技术研究中心基金资助项目(T2014-06-0309)

代替传统实验, 给出置信度内的数值实验结果。目前, 利用粒子模拟(PIC)技术<sup>[2-3]</sup>设计 HPM 器件成为一个不可替代的发展方向。面向我国 HPM 源设计模拟仿真需求, 基于我所自研的并行自适应结构网格应用支持软件框架 JASMIN<sup>[4]</sup>, 研制了三维全电磁粒子模拟大规模并行程序 NEPTUNE3D<sup>[5-6]</sup>, 其具备三维实体复杂几何结构建模能力, 可在数千个 CPU 上运行, 已成功模拟了返波管、速调管、磁绝缘线振荡器等典型 HPM 器件。但随着应用需求牵引的拓展, 计算网格规模和粒子规模不断攀升。目前应用牵引下, 网格和粒子规模均已达到千万量级, NEPTUNE3D 程序由于使用的是经典 PIC 算法<sup>[2-3]</sup>, 所以需要求解泊松方程修正电场, 在网格规模较大时, 将会导致一些问题的出现。如: 采用红黑排序超松弛迭代(SOR)方法<sup>[7]</sup>, 在网格规模较大时, 将会出现收敛速度变慢或不收敛; 而采用代数多重网格(AMG)方法<sup>[8]</sup>, 虽可收敛, 但计算速度较慢。使用电荷守恒 PIC 算法, 可避免大型矩阵求逆(求解泊松方程), 提升计算速度, 增强程序鲁棒性。最基本的电荷守恒算法, 由 Villasenor 和 Buneman 提出, 其假设粒子在时间步内做直线运动, 顺着运动连线并利用有限尺寸的电荷云, 便可计算通过网格分界面的电流流量<sup>[9]</sup>; Eastwood 提出根据粒子运动起点和终点计算电流流量, 若粒子跨越网格, 则把整个运动分解成一系列网格内运动计算<sup>[10-11]</sup>; Esirkepov 提出了密度分解法计算电流量<sup>[12]</sup>。上述算法都能保证电荷守恒, 但是不可避免地引入诸多判断语句, 导致代码执行效率低下, 并不适用于大规模并行计算。日本京都大学的 Umeda 和 Omura 提出了一种粒子沿折线(zigzag-line)运动的守恒型 PIC 算法, 该算法计算简单, 不需判断语句, 代码执行效率高, 适合大规模并行计算环境<sup>[13]</sup>。

本文针对自编三维全电磁粒子模拟程序 NEPTUNE3D, 分析了经典 PIC 方法与 zigzag-line 新型电荷守恒 PIC 算法各自特点和不同之处, 并结合具体应用, 给出了 2 种 PIC 算法模块在磁绝缘线振荡器与天线一体化设计、太赫兹折叠波导行波管 2 个实际算例的模拟、测试结果和应用效果。

## 1 经典 PIC 算法

所谓经典 PIC 算法, 是指电流密度的计算与电场、磁场、电荷密度的计算方法相同, 均采用线性插值的方法进行(一阶情况), 二维采用双线性插值, 三维采用三线性插值。NEPTUNE3D 程序使用三线性插值的经典 PIC 算法。为与新型电荷守恒 PIC 算法对比, 这里以二维为例, 介绍经典 PIC 算法特点和计算格式。

### 1.1 基于线性插值的电流密度计算

首先, 计算出带电粒子  $\Delta t$  内运动产生的流量:

$$F_x = \frac{q(x^{n+1} - x^n)}{\Delta t}, \quad F_y = \frac{q(y^{n+1} - y^n)}{\Delta t} \quad (1)$$

其次, 计算出粒子在  $n+1/2$  时刻处于的网格标号  $(i, j)$ , 将流量分配到所在网格内的 4 个节点上, 计算节点上电流密度增量为:

$$\Delta J_m(i, j) = \frac{(1-W_x)(1-W_y)F_m}{\Delta x \Delta y}, \quad \Delta J_m(i+1, j) = \frac{W_x(1-W_y)F_m}{\Delta x \Delta y}, \quad \Delta J_m(i, j+1) = \frac{(1-W_x)W_y F_m}{\Delta x \Delta y}, \quad \Delta J_m(i+1, j+1) = \frac{W_x W_y F_m}{\Delta x \Delta y} \quad (2)$$

式中:  $m = x, y$  代表 2 个方向上的分量;  $W_x = [(x^n + x^{n+1})/2 - i\Delta x]$ ;  $W_y = [(y^n + y^{n+1})/2 - i\Delta y]$ 。

最后, 将节点位置的电流密度增量匹配到网格的 4 条棱心位置, 如:

$$\Delta J_x(i+1/2, j) = (\Delta J_x(i, j) + \Delta J_x(i+1, j))/2 \quad (3)$$

图 1 给出了经典 PIC 算法的计算网格数据依赖关系, 可以看出: 经典 PIC 算法计算电流密度时, 仅需要与电流密度分量正交方向上的一层紧邻网格的粒子量信息, 因此并行计算时粒子量数据片的影像区厚度为 1 即可, 计算简单、高效。

### 1.2 电场修正计算

经典 PIC 算法简单且易于实现, 但是却不能保证电荷守恒。所以, NEPTUNE3D 程序采用 Boris 修正方法对电场计算结果进行修正, 以保证其满足电荷守恒及计算精确度的要求。Boris 修正方法可以表示为:

$$\mathbf{E}_{\text{new}} = \mathbf{E} - \nabla \delta \phi \quad (4)$$

式中:  $\mathbf{E}$  为电场强度计算结果;  $\delta \phi$  为 Boris 修正电势;  $\mathbf{E}_{\text{new}}$  为修正后的电场强度。

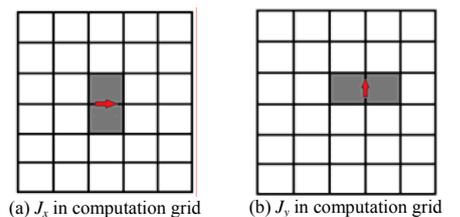


Fig.1 Scheme of current density calculation in 2-D classical Particle-In-Cell algorithm  
图 1 二维经典非守恒型 PIC 算法电流密度计算网格依赖关系

$E_{\text{new}}$  满足高斯定律:

$$\nabla \cdot \epsilon E_{\text{new}} = \rho \tag{5}$$

$\delta\phi$  可以表示为:

$$\nabla^2 \delta\phi = \nabla \cdot E - \rho / \epsilon \tag{6}$$

NEPTUNE3D 程序使用 2 种解算器求解上述椭圆方程, 一种是红黑排序超松弛迭代(Successive Over Relaxation, SOR)解算器, 另一种是代数多重网格(Algebraic Multi-Grid, AMG)解算器, 求出修正电势  $\delta\phi$  后即可求出  $E_{\text{new}}$ 。红黑排序超松弛迭代(SOR)解算器的特点是: 求解线性方程组速度快, 但是网格规模较大时会导致迭代收敛速度慢或不收敛, 因此不适合千万量级以上网格规模问题的求解; 而代数多重网格(AMG)解算器的特征是: 适合较大网格规模问题求解, 适应性好, 但对于网格规模较小的问题求解速度不如 SOR 方法快。

### 2 基于 zigzag-line 运动的新型电荷守恒 PIC 算法

器件三维整管设计和整体联算的现实需求, 客观上已将问题模拟规模上升到千万量级水平, 因此采用守恒型 PIC 算法避免大型矩阵求逆(求解泊松方程)势在必行。但一般的守恒型 PIC 算法, 并不适合。Villasenor 和 Buneman 提出的守恒型算法, 粒子噪声较大, 且只适用于一阶权重; 其他守恒型算法, 逻辑判断分支复杂, 代码执行效率低下。直到 2003 年, Umeda 和 Omura 提出了一种 zigzag-line 守恒型 PIC 算法, 才改变了现状, 该算法简单, 不需判断语句, 代码执行率高, 适合大规模并行计算。

所谓 zigzag-line 电荷守恒 PIC 算法, 最基本的思想有 2 条: 一是假设时间步长内, 粒子沿着折线(zigzag-line)运动, 并把折线段分为 2 段直线段; 二是使用 Eastwood 的“起点—终点”电荷守恒算法处理 2 段直线段上的电流流量计算, 并分别对相关网格单元的电流密度增量做权重。

#### 2.1 二维 zigzag-line 守恒型 PIC 算法电流密度计算

假设时刻从  $t$  到  $t + \Delta t$ , 粒子由坐标  $(x_1, y_1)$  所属网格  $(i, j)$  运动到坐标  $(x_2, y_2)$  所属网格  $(i_2, j_2)$ , 对于二维情况, 图 2 拓扑关系图给出了  $\Delta t$  内粒子运动可能轨迹共 9 种。对于(a),  $\Delta t$  内粒子未能运动出一个网格, 可以采用 Eastwood 的“起点—终点”电荷守恒算法直接处理; 其他情况, 需要引入中间变量  $(x_r, y_r)$ , 并假定粒子运动轨迹为折线  $(x_1, y_1) \rightarrow (x_r, y_r) \rightarrow (x_2, y_2)$ , 再采用 Eastwood 的电荷守恒算法分而治之。

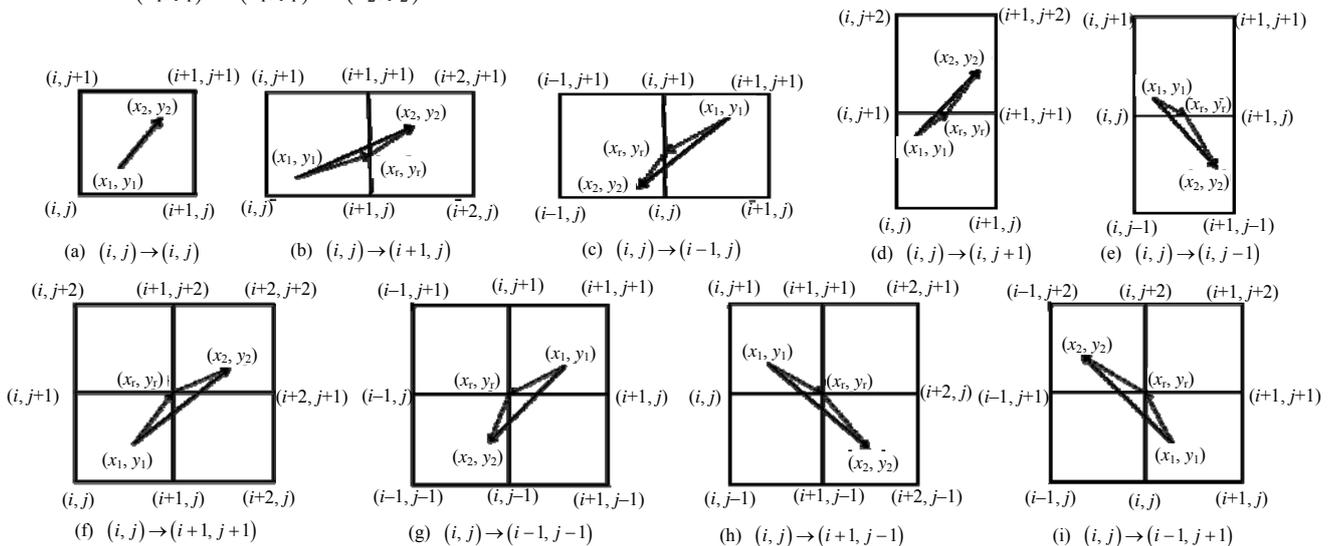


Fig.2 Scheme of particle movement in 2-D zigzag-line Particle-In-Cell algorithm  
图 2 二维 zigzag-line 电荷守恒 PIC 算法中  $\Delta t$  内粒子运动轨迹图

二维 zigzag-line 电荷守恒 PIC 算法电流密度计算可以采用下列公式统一描述:

$$x_r = \begin{cases} (x_1 + x_2)/2 & i_1 = i_2 \\ \max(i_1 \Delta x, i_2 \Delta x) & i_1 \neq i_2 \end{cases}, \quad y_r = \begin{cases} (y_1 + y_2)/2 & j_1 = j_2 \\ \max(j_1 \Delta y, j_2 \Delta y) & j_1 \neq j_2 \end{cases} \tag{7}$$

$$F_{x1} = q(x_r - x_1)/\Delta t, \quad F_{y1} = q(y_r - y_1)/\Delta t, \quad F_{x2} = q(x_2 - x_r)/\Delta t, \quad F_{y2} = q(y_2 - y_r)/\Delta t \tag{8}$$

$$W_{x1} = (x_1 + x_r)/2\Delta x - i_1, \quad W_{y1} = (y_1 + y_r)/2\Delta y - j_1, \quad W_{x2} = (x_2 + x_r)/2\Delta x - i_2, \quad W_{y2} = (y_2 + y_r)/2\Delta y - j_2 \tag{9}$$

令  $l=1,2$ ，电流密度增量可由下列公式表示：

$$\Delta J_x(i_l+1/2, j_l) = \frac{F_{xl}(1-W_{yl})}{\Delta x \Delta y}, \Delta J_x(i_l+1/2, j_l+1) = \frac{F_{xl}W_{yl}}{\Delta x \Delta y}, \Delta J_y(i_l, j_l+1/2) = \frac{F_{yl}(1-W_{xl})}{\Delta x \Delta y}, \Delta J_y(i_l+1, j_l+1/2) = \frac{F_{yl}W_{xl}}{\Delta x \Delta y} \quad (10)$$

图 3 给出了 zigzag-line 守恒型 PIC 算法的计算网格数据依赖关系，可以看出：经典 PIC 算法计算电流密度时，需要与电流密度分量相邻的 2 层网格的粒子量信息，因此并行计算时粒子量数据片的影像区厚度为 2，比经典 PIC 算法粒子量数据片的存储量大，且计算格式较经典 PIC 算法更加复杂。

## 2.2 三维 zigzag-line 守恒型 PIC 算法电流密度计算

采用类似二维的方法，可以推出三维的 zigzag-line 守恒型 PIC 算法。对于三维情况， $\Delta t$  内粒子运动可能轨迹共 27 种，拓扑关系图可仿照二维情况推出，这里不再给出。假设时刻从  $t$  到  $t+\Delta t$ ，粒子由坐标  $(x_1, y_1, z_1)$  所属网格  $(i_1, j_1, k_1)$  运动到坐标  $(x_2, y_2, z_2)$  所属网格  $(i_2, j_2, k_2)$ ，引入中间位移变量  $(x_r, y_r, z_r)$ ，假定粒子运动轨迹为折线  $(x_1, y_1, z_1) \rightarrow (x_r, y_r, z_r) \rightarrow (x_2, y_2, z_2)$ 。

三维 zigzag-line 电荷守恒 PIC 算法电流密度计算可以采用下列公式统一描述：

$$x_r = \begin{cases} (x_1+x_2)/2 & i_1 = i_2 \\ \max(i_1\Delta x, i_2\Delta x) & i_1 \neq i_2 \end{cases}, y_r = \begin{cases} (y_1+y_2)/2 & j_1 = j_2 \\ \max(j_1\Delta y, j_2\Delta y) & j_1 \neq j_2 \end{cases}, z_r = \begin{cases} (z_1+z_2)/2 & k_1 = k_2 \\ \max(k_1\Delta z, k_2\Delta z) & k_1 \neq k_2 \end{cases} \quad (11)$$

$$F_{x1} = q(x_r - x_1)/\Delta t, F_{y1} = q(y_r - y_1)/\Delta t, F_{z1} = q(z_r - z_1)/\Delta t, F_{x2} = q(x_2 - x_r)/\Delta t, F_{y2} = q(y_2 - y_r)/\Delta t, F_{z2} = q(z_2 - z_r)/\Delta t \quad (12)$$

$$W_{x1} = \frac{(x_1+x_r)}{2\Delta x} - i_1, W_{y1} = \frac{(y_1+y_r)}{2\Delta y} - j_1, W_{z1} = \frac{(z_1+z_r)}{2\Delta z} - k_1, W_{x2} = \frac{(x_2+x_r)}{2\Delta x} - i_2, W_{y2} = \frac{(y_2+y_r)}{2\Delta y} - j_2, W_{z2} = \frac{(z_2+z_r)}{2\Delta z} - k_2 \quad (13)$$

令  $l=1,2$ ，电流密度增量可由下列公式表示：

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta J_x(i_l + \frac{1}{2}, j_l, k_l) = \frac{F_{xl}(1-W_{yl})(1-W_{zl})}{\Delta x \Delta y \Delta z} \\ \Delta J_x(i_l + \frac{1}{2}, j_l+1, k_l) = \frac{F_{xl}W_{yl}(1-W_{zl})}{\Delta x \Delta y \Delta z} \\ \Delta J_x(i_l + \frac{1}{2}, j_l, k_l+1) = \frac{F_{xl}(1-W_{yl})W_{zl}}{\Delta x \Delta y \Delta z} \\ \Delta J_x(i_l + \frac{1}{2}, j_l+1, k_l+1) = \frac{F_{xl}W_{yl}W_{zl}}{\Delta x \Delta y \Delta z} \end{array} \right\}, \left\{ \begin{array}{l} \Delta J_y(i_l, j_l + \frac{1}{2}, k_l) = \frac{F_{yl}(1-W_{xl})(1-W_{zl})}{\Delta x \Delta y \Delta z} \\ \Delta J_y(i_l+1, j_l + \frac{1}{2}, k_l) = \frac{F_{yl}W_{xl}(1-W_{zl})}{\Delta x \Delta y \Delta z} \\ \Delta J_y(i_l, j_l + \frac{1}{2}, k_l+1) = \frac{F_{yl}(1-W_{xl})W_{zl}}{\Delta x \Delta y \Delta z} \\ \Delta J_y(i_l+1, j_l + \frac{1}{2}, k_l+1) = \frac{F_{yl}W_{xl}W_{zl}}{\Delta x \Delta y \Delta z} \end{array} \right\}, \left\{ \begin{array}{l} \Delta J_z(i_l, j_l, k_l + \frac{1}{2}) = \frac{F_{zl}(1-W_{xl})(1-W_{yl})}{\Delta x \Delta y \Delta z} \\ \Delta J_z(i_l+1, j_l, k_l + \frac{1}{2}) = \frac{F_{zl}W_{xl}(1-W_{yl})}{\Delta x \Delta y \Delta z} \\ \Delta J_z(i_l, j_l+1, k_l + \frac{1}{2}) = \frac{F_{zl}(1-W_{xl})W_{yl}}{\Delta x \Delta y \Delta z} \\ \Delta J_z(i_l+1, j_l+1, k_l + \frac{1}{2}) = \frac{F_{zl}W_{xl}W_{yl}}{\Delta x \Delta y \Delta z} \end{array} \right\} \quad (14)$$

## 3 应用实例

将三维 zigzag-line 电荷守恒 PIC 算法引入到 NEPTUNE3D 程序中，使用并行自适应结构网格应用支持软件框架 JASMIN 的粒子量数据结构组织并行计算，编制 zigzag-line 守恒型 PIC 算法核心模块，完成模块测试和验证。结合实际模拟问题需求，通过与 NEPTUNE3D 程序经典 PIC 算法模拟结果对比的方法，给出采用 zigzag-line 守恒型 PIC 算法核心模块的 NEPTUNE3D 程序对 2 个实际问题算例的验证、测试结果以及应用效果。

### 3.1 磁绝缘线振荡器与天线一体化整体模拟设计

算例为典型高功率微波源磁绝缘线振荡器(MILO)的整管一体化模型<sup>[5]</sup>，器件工作频率 1.3 GHz，二极管工作电压 500 kV~700 kV，输入电功率 30 GW~40 GW，二极管采用天鹅绒化纤材料爆炸发射，包括：注入脉冲功率源、二极管、束波相互作用区、收集极、模式变换器、喇叭天线。以往的设计都是分开进行，不能考虑各部件结构之间的影响，如模式变换器和天线对束波相互作用的影响等，实际需求牵引要求进行整管一体化模拟。由于该模型计算网格规模太大，约 1 200 万(180×180×350，分辨力为 2 mm×2 mm×2 mm)，一般商业软件无法模拟；采用浪潮 TS10K 集群，利用三维全电磁粒子模拟大规模并程序 NEPTUNE3D 对该算例进行并行模拟，模拟物理时间为 50 ns(18 175 个时间步)，粒子规模约 1 000 万。

器件结构建模结果如图 4(a)所示。图 4(b)给出了模式变换器的细致结构，介质填充材料为陶瓷，相对介电常数 9.2，采用 3 根支撑杆固定加持，实现 3 个区域微波相速度的调整，由 TEM 模式转变为 TE<sub>11</sub> 模式在轴向

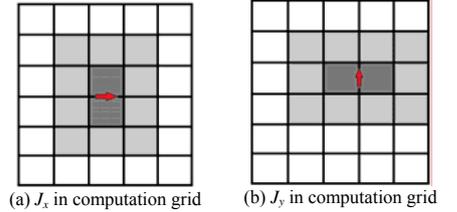


Fig.3 Scheme of current density calculation in 2-D zigzag-line Particle-In-Cell algorithm

图 3 二维 zigzag-line 守恒型 PIC 算法电流密度计算网格依赖关系

定向输出。图 4(c)和 4(d)给出了 118 个处理器核上并行计算时的结构网格区域分割情况和粒子量区域分割情况。图 4(e)给出了器件内部电场的分布情况,可以看出:扼流片起到了较好的射频阻断效果,微波能量很少由输入口漏出;慢波叶片附近的场强的间隔交替分布表面器件很好地工作在  $\pi$  模状态;电磁能量主要由天线末端输出,收集极内筒渐变段附近的微波场强较强。器件内电子实空间及相空间分布,分别如图 4(f)~4(g)所示,可以看出:电子束轮辐凸显,群聚效果明显,表明电子束得到了充分的调制,束波相互作用效果显著。图 4(h)给出天线末端口径电场分布矢量图,可以看出:电场基本为线极化,模式趋于  $TE_{11}$ ,表明器件内部相互作用模式  $TM_{00}$  通过介质填充插板模式变换器再到喇叭天线末端已成功转换为远场方向图为定向端射所需要的  $TE_{11}$  模式。

通过对比宏观诊断物理量的方法,比对验证经典 PIC 算法和 zigzag-line 守恒 PIC 算法的模拟结果。红色曲线代表 zigzag-line 守恒 PIC 算法,蓝色曲线代表经典 PIC 算法。图 4(i)给出了二极管电压监测波形,可以看出:电压脉冲稳定时达到 650 kV 左右,2 种 PIC 算法计算结果吻合。图 4(j)给出了二极管注入电功率的时域波形,可以看出:脉冲功率波形稳定时达到 34 GW 左右,2 种 PIC 算法计算结果吻合。综上,二极管电压和注入电功率均在设计参数范围之内。图 4(k)给出了器件末端输出功率时域波形监测,可以看出:器件输出功率稳定, zigzag-line 守恒 PIC 算法计算所得平均功率在 2.8 GW 左右,经典 PIC 算法计算所得平均功率 3.3 GW 左右,相对误差 15%左右,由于 MILO 属于振荡器,经典 PIC 算法的初始数值噪声较大,较大的数值噪声扰动有利于器件起振且输出功率振幅较大,所以 zigzag-line 守恒 PIC 算法计算所得的功率略低于经典 PIC 算法且起振时间略长,但在合理范围之内。图 4(l)给出了器件输出功率频谱信息,可以看出:功率频谱对应 2.6 GHz(信号频率即 1.3 GHz),与设计工作频率一致,2 种 PIC 算法的频谱计算结果相吻合。

除了对模拟结果正确性的验证外,还对 2 种 PIC 算法的计算时间、加速比、并行效率等性能参数进行了比较。使用经典 PIC 算法核心模块计算中,由于计算网格规模达到千万量级,基于红黑排序的超松弛迭代方法在 1 000 步迭代门限内无法收敛,采用了 JASMIN 框架的代数多重网格(AMG)解法器求解泊松方程。分别比较了 44,71,118 个处理器核上的并行计算效能,图 4(m)给出了并行计算时间与处理器核数关系,图 4(n)给出了并行效率、加速比与处理器核数关系,可以看出: zigzag-line 守恒 PIC 算法计算速度明显快于经典 PIC 算法,加速比可以达到 2 倍左右,并行效率较经典 PIC 算法无明显变化,采用 zigzag-line 守恒 PIC 算法在 118 处理器核上不足 7 h 就可完成一组整体设计模拟,大大提高了器件整管设计效率。

### 3.2 太赫兹折叠波导行波管模拟

NEPTUNE3D 程序 zigzag-line 守恒 PIC 算法核心模块,不仅应用于高功率微波源器件的模拟,还将其用于太赫兹波段折叠波导行波管(Folded Waveguide Traveling Wave Tube, FWTWT)的设计模拟中<sup>[14-15]</sup>,提升计算速度,提高设计效率。图 5 给出 0.22 THz 折叠波导行波管的设计模拟结果。模拟中,利用有限电导率模块考虑了壁面电导率和粗糙度对太赫兹波的损耗与衰减过程,利用 PML 模块对输出端太赫兹波进行吸收和截断避免数值自激振荡。采用浪潮 TS10K 集群,利用三维全电磁粒子模拟大规模并行程序 NEPTUNE3D 对该算例进行并行模拟,该算例网格规模约为 760 万( $64 \times 42 \times 2\ 852$ ,分辨力为  $0.02\text{ mm} \times 0.02\text{ mm} \times 0.01\text{ mm}$ ),模拟物理时间 0.6 ns (44 000 个时间步),粒子规模约 100 万。

器件结构建模结果如图 5(a)所示,其由一个弯曲折叠的矩形波导和一个位于轴心位置用于电子束传输的圆柱波导联合构成,太赫兹波沿弯曲的矩波导传输相当于其在轴向上的速度减慢,以便与轴向传输的电子束同步,发生束波相互作用,吸收电子动能以获得增益和放大。图 5(b)和图 5(c)给出了 24 个处理器核上并行计算时的结构网格区域分割情况和粒子量区域分割情况。图 5(d)为输入端监测到的注入信号功率时域波形,可以看出注入信号有效功率为 3.3 mW,信号频率 0.22 THz。图 5(e)为  $0.1\ \mu\text{m}$  粗糙度无氧铜(材料电导率  $5.8 \times 10^7\text{ S/m}$ )材料金属壁面下冷腔信号输出功率,可看出:信号衰减至 0.95 mW,损耗高达 -5.41 dB。图 5(f)~图 5(g)给出了束压 17.3 kV、束流 50 mA 及 0.4 T 引导磁场环境的热腔模拟结果,可以看出:注入信号场强沿轴向弯曲方向得到了明显放大和增强,电子束轴向动量得到了有效调制,电子束与太赫兹波发生了有效相互作用能量交换过程。

如图 5(h)~图 5(i)所示,通过对比输出功率时域波形和频谱信息,比对经典 PIC 和 zigzag-line 守恒 PIC 算法的模拟结果。红色曲线代表 zigzag-line 守恒 PIC 算法,蓝色曲线代表经典 PIC 算法,由于 FWTWT 属于放大器,器件初始噪声被输入信号压制,噪声信号影响可以忽略,因此 2 种算法计算结果非常吻合,器件有效输出功率约为 1.6 W,增益约为 26.8 dB,束波转换效率约为 0.19%,输出功率频谱中心频率为 0.44 THz(对于信号频率 0.22 THz),且具备一定带宽。

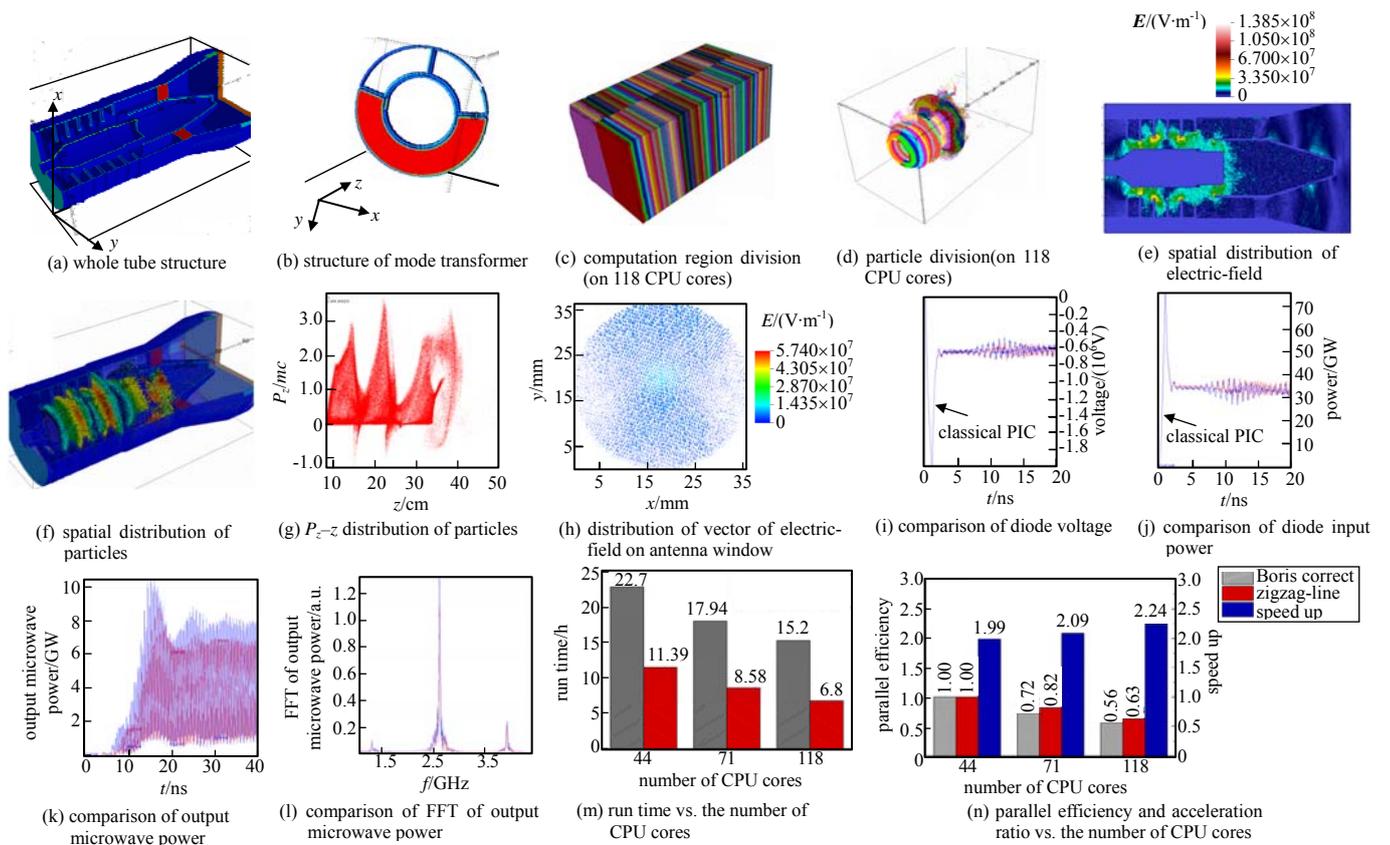


Fig.4 Simulation results of entire model of MILO and antenna by massively parallel computation

图 4 磁绝缘线振荡器与天线一体化整体模拟的并行计算结果

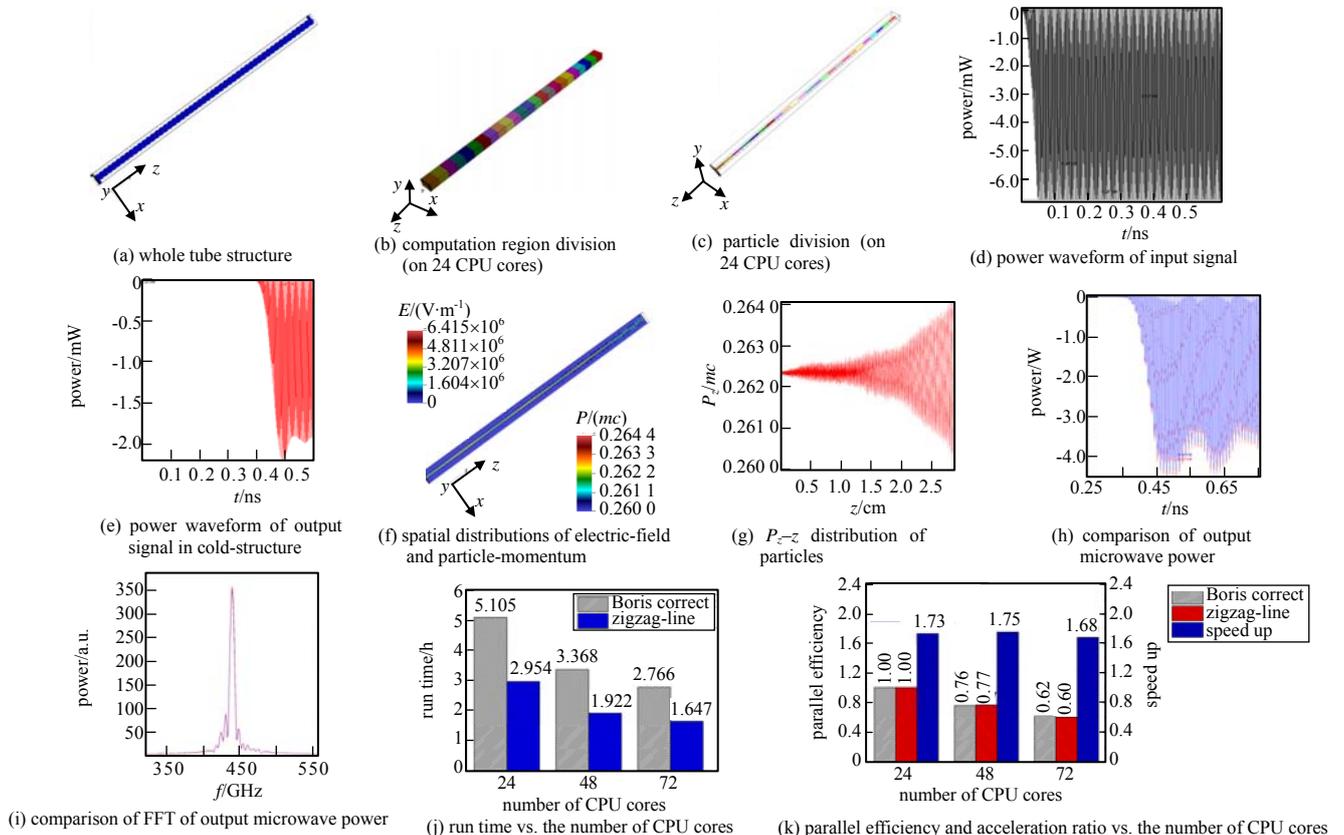


Fig.5 Simulation results of terahertz FWTWT by massively parallel computation

图 5 太赫兹折叠波导行波管的并行模拟结果

除了对模拟结果正确性的验证外,还对 2 种 PIC 算法的计算时间、加速比、并行效率等性能参数进行了比较。使用经典 PIC 算法核心模块计算中,采用基于红黑排序的超松弛迭代方法求解泊松方程。分别比较了 24,48,72 个处理器核上的并行计算效能,图 5(j)给出了并行计算时间与处理器核数关系,图 5(k)给出了并行效率、加速比与处理器核数关系,可以看出:zigzag-line 守恒 PIC 算法计算速度明显快于经典 PIC 算法,加速比可以达到 1.7 倍左右,并行效率较经典 PIC 算法没有明显变化,采用 zigzag-line 守恒 PIC 算法在 72 个处理器核上不足 2 h 就可以完成一组器件结构的设计模拟,大大提高了器件设计效率。

#### 4 结论

本文首先介绍了自编三维全电磁粒子模拟大规模并行程序 NEPTUNE3D 使用的经典 PIC 算法,该算法虽简单且易于实现,但不能保证电荷守恒,需要求解泊松方程对电场进行修正,目前 NEPTUNE3D 采用基于红黑排序的超松弛迭代法(SOR)和代数多重网格(AMG)2 种方法完成线性方程组求解,当计算网格规模达到较大规模时,会出现 SOR 方法不收敛以及 AMG 方法计算速度较慢问题。由于守恒型 PIC 算法不需要修正电场,可以避免大型矩阵求逆问题,对多种守恒型 PIC 算法进行了比对和遴选,最终将日本京都大学 Umeda 和 Omura 提出的粒子沿折线(zigzag-line)运动的守恒型 PIC 算法引入到 NEPTUNE3D 程序中,该算法计算简单,不需判断语句,代码执行效率高,适合大规模并行计算环境。最后,通过与经典 PIC 算法模拟结果对比,给出采用 zigzag-line 守恒型 PIC 算法核心模块的 NEPTUNE3D 程序对磁绝缘线振荡器天线一体化整体模型与太赫兹折叠波导行波管 2 个实际算例的应用效果、验证和测试结果,结果表明:采用 zigzag-line 守恒型 PIC 算法核心模块所得模拟结果正确、可靠,相对经典 PIC 算法模块,大大缩短了计算时间,明显提升了器件模拟设计效率;此外,由于避免了大型矩阵求逆,消除了迭代不收敛的可能性,程序的鲁棒性也得到了显著提升。

#### 参考文献:

- [1] BARKER R J, SCHAMLOGLU E. High-Power Microwave Sources and Technologies[M]. New York:Wiley-IEEE Press, 2001.
- [2] BIRDSALL C K, LANGDON A B. Plasma Physics via Computer Simulation[M]. New York:McGraw-Hill, 1985.
- [3] EASTWOOD J W, HOCKNEY R W. Computer Simulation Using Particles[M]. New York:McGraw-Hill, 1981.
- [4] MO Z, ZHANG A, CAO X, et al. JASMIN: a parallel software infrastructure for scientific computing[J]. Frontiers of Computer Science in China, 2010,4(4):480-488.
- [5] YANG W, DONG Y, CHEN J, et al. Brief introduction and recent applications of a large-scale parallel three-dimensional PIC code named NEPTUNE3-D[J]. IEEE Transactions on Plasma Science, 2012,40(7):1937-1944.
- [6] 董焯,陈军,杨温渊,等. 三维全电磁粒子模拟大规模并行程序 NEPTUNE[J]. 强激光与粒子束, 2011,23(6):1607-1615. (DONG Ye, CHEN Jun, YANG Wenyuan, et al. Massively parallel code named NEPTUNE for 3-D fully electromagnetic and PIC simulations. High Power Laser and Particle Beams, 2011,23(6):1607-1615.)
- [7] 陈军. 不规则区域上并行求解 Poisson 方程[J]. 计算物理, 2010,27(3):369-374. (CHEN Jun. Parallel solution of Poisson's equation on irregular domains. Chinese Journal of Computational Physics, 2010,27(3):369-374.)
- [8] 徐小文,莫则尧. 并行代数多重网格算法可扩展性能分析[J]. 计算物理, 2007,24(4):387-394 (XU Xiaowen, MO Zeyao. Scalability analysis for parallel algebraic multigrid algorithm[J]. Chinese Journal of Computational Physics, 2007,24(4):387-394.)
- [9] EASTWOOD J W. The virtual particle electromagnetic particle-mesh method[J]. Computer Physics Communications, 1991, 64(2):252-266.
- [10] EASTWOOD J W, ARTER W, BREALEY N J, et al. Body-fitted electromagnetic PIC software for use on parallel computers[J]. Computer Physics Communications, 1995,87(1):155-178.
- [11] VILLASENOR J, BUNEMAN O. Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solvers[J]. Computer Physics Communications, 1992,69(2):306-316.
- [12] ESIRKEPOV T Z. Exact charge conservation scheme for particle-in-cell simulation with an arbitrary form-factor[J]. Computer Physics Communications, 2001,135(2):144-153.
- [13] UMEDA T, OMURA Y, TOMINAGA T, et al. A new charge conservation method in electromagnetic particle-in-cell simulations[J]. Computer Physics Communications, 2003,156(1):73-85.

(下转第 585 页)