Применение кода CEPTRE для задач по SGEMP кабеля

Дж.Л.Лискум-Пауэлл, Ш.Д. Паутц, С.Р. Драмм, У.С. Фан, У.Дж. Бонхофф и Л.Дж. Лоренц
Департамент технологии методов моделирования
Сандийские Национальные Лаборатории

Конференция пяти лабораторий
Вена, Австрия
19-23 июня 2005 г.

SAND 2005-3222C
Сандия – многопрограммная лаборатория, оперируемая Корпорацией Сандия компании Локхид-Мартин для министерства энергетики США по контракту DE-AC04-94AL85000.

Sandia National Laboratories

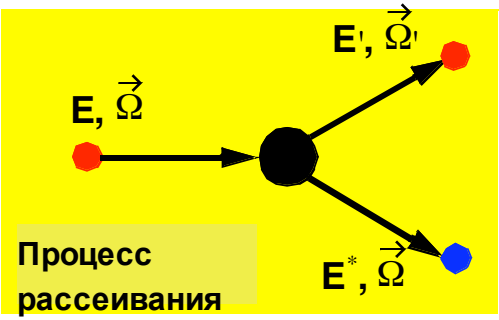
Обзор

- Обзор кода CEPTRE
- Введение в моделирование SGEMP кабеля
- Численные затруднения с CEPTRE
- Стратегии ускорения CEPTRE
- Результаты моделирования RG402
- Выводы

Код CEPTRE

(**C**oupled **E**lectron **P**hoton **T**ransport for **R**adiation **E**ffects = связанный электронно-фотонный перенос для радиационных эффектов)

- Зависящий от времени, детерминистический код связанного электронно-фотонного переноса на неструктурированной сетки
- Численные решения уравнения переноса Больцмана, описывающего распределение частиц в фазовом пространстве (r, E, Ω)
- Физические параметры взаимодействия частиц со средой правильно описаны поперечным сечением
- Дискретизация фазового пространства
  - *Много-групповое* приближение энергии по расширению Лежандра рассеивающихся поперечных сечений
  - Приближение *дискретных ординат* по направлению
  - Приближение *конечных элементов* в пространстве



Sandia National Laboratories

Характеристики кода CEPTRE

- Многогрупповая дискретизация энергии
- Дискретные ординаты угловой дискретизации
- Произвольный порядок анизотропного рассеивания
- Конечные элементы Галеркина для неструктурированной сетки
- Формы второго порядка для уравнения переноса
  - SAAF **(S**elf-**A**djoint **A**ngular **F**lux= самовыравнивающийся угловой поток)
  - EOPF **(E**ven-**O**dd **P**arity **F**lux = поток четной-нечетной четности)
- Параллельное внедрение с пространственной декомпозицией интервала
- Объектно-ориентированная программа на C++
- Интегрирована в архитектурную структуру (Невада)
- Построена на библиотеках параллельных решений Крылова (Трилинос, Ацтек ОО)
- Одновременное решение для пространства и направления

Свойства формы второго порядка

$$\left[-\hat{\Omega}\cdot\nabla\Re^{-1}\hat{\Omega}\cdot\nabla+\Re\right]\psi\left(\vec{r},\hat{\Omega}\right)=Q\left(\vec{r},\hat{\Omega}\right)-\hat{\Omega}\cdot\nabla\left[\Re^{-1}Q\left(\vec{r},\hat{\Omega}\right)\right]$$

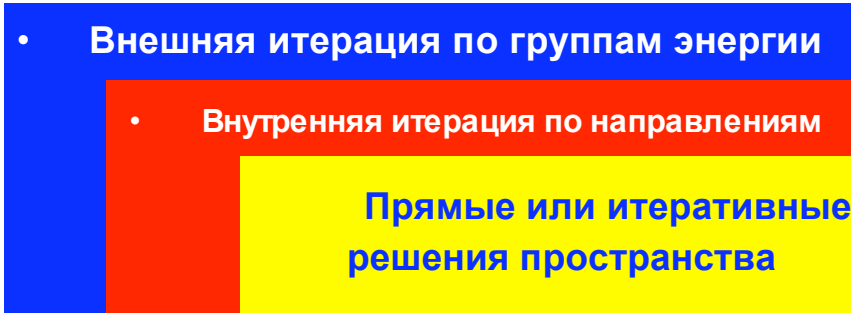
- Оператор переноса слева - самосопряженный
- Оператор удаления служит поперечным сечением – появляется обратное значение
- Рассеивание включено в оператор переноса
- Правая сторона зафиксирована в группе энергии

Sandia National Laboratories

CEPTRE использует уникальную стратегию решения

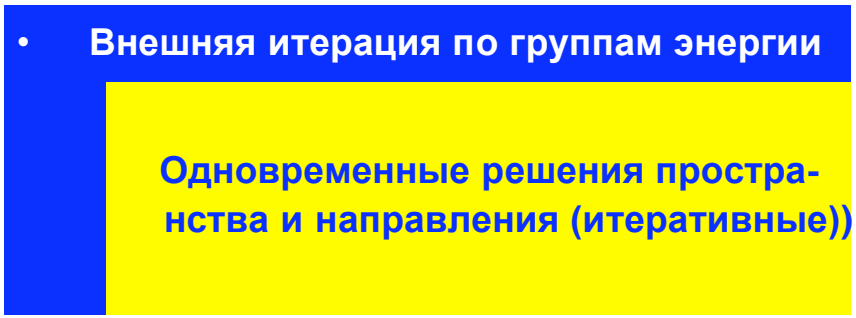
- Низкий уровень сходимости для электронного переноса
- Малая параллельная эффективность из-за связи в направлениях от рассеивания

- **Обычная итерация источника**



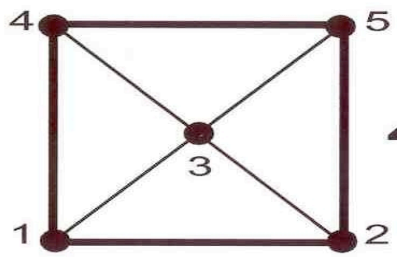
- Высокий уровень сходимости для электронного переноса
- Хорошая параллельная эффективность
- Большие требования к накопителям

- **CEPTRE**

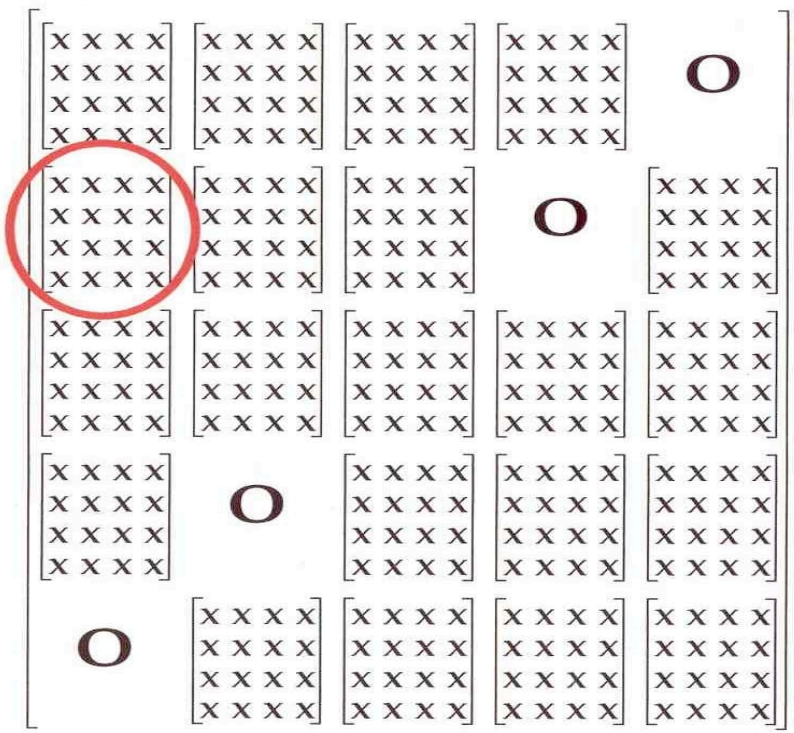


Sandia National Laboratories

Алгоритм одновременного решения по пространству и направлению



4 направления



- Матрица рассеянных блоков
- Симметричная положительно определенная система
- Число рядов блоков:
  - $N_{узлов}$
- Размер блока
  - $N_{направлений} x N_{направлений}$
- Блоки полны из-за связи от рассеивания
- Специально сделаны для формата данных VBR
- Хранение ~$(N_{направлений})^2 x N_{узлов}$
- Время прохода ~$(N_{направлений})^2 x (N_{узлов})^{1.5}$

Sandia National Laboratories

Алгоритм параллельных итераций

- Предусловленный метод сопряженных градиентов с разложением интервала
- Широкое применение существующих библиотек решений параллельных итераций (Трилинос, АцтекОО)
- Высокая сходимость для электронов
- Низкая сходимость для фотонов на сетках FE с измельченными ячейками (90% времени прохода)

Sandia National Laboratories

Анализ SGEMP в кабеле

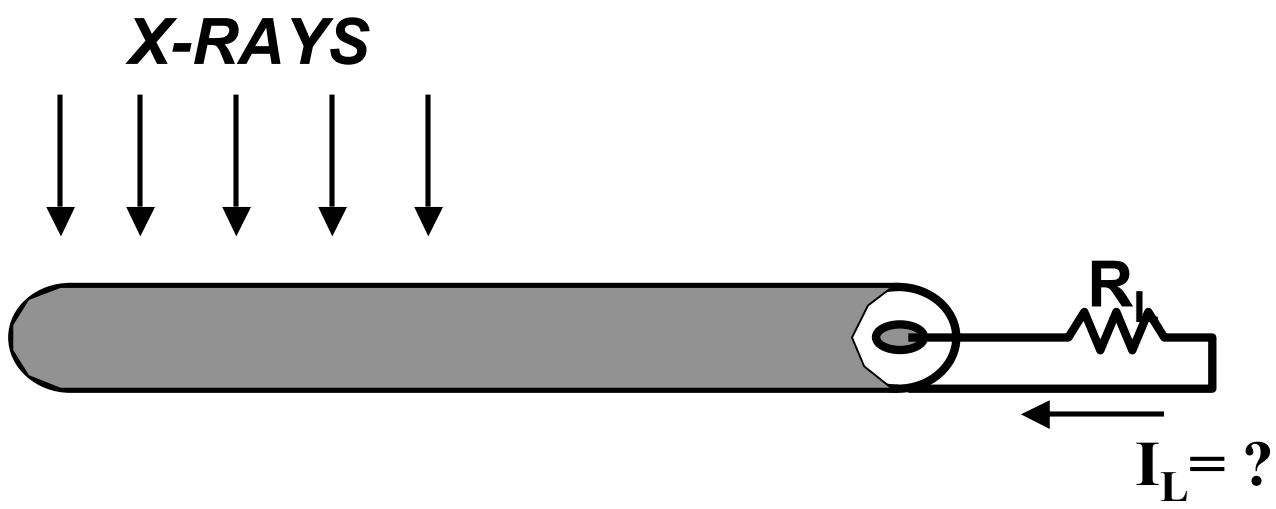
- Будет ли электроника нарушена или повреждена случайным рентгеновским источником, который вызовет Комптоновскую фотоэмиссию электронов с поверхности материала и отложение энергии и заряда внутри материала?

- Генерация электрического поля на изоляции и проводниках в кабеле – явление, именуемое SGEMP (System Generated Electromagnetic Pulse =системно-генерируемый электромагнитный импульс)

Sandia National Laboratories

Процесс моделирования SGEMP

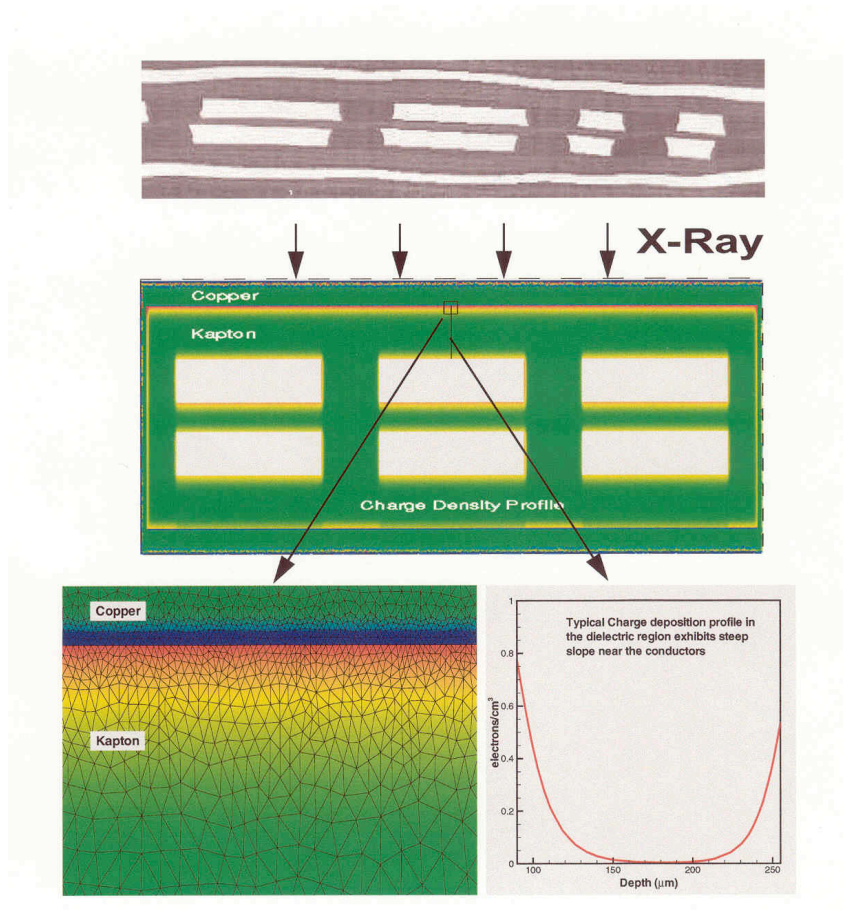
- Возможность компьютерного моделирования процесса SGEMP в кабеле состоит из двух раздельных вычислений:
  - CEPTRE выполняет моделирование переноса излучения
  - CABANA выполняет моделирование электрического реагирования
- CEPTRE дает программе CABANA данные об отложении энергии, профилях тока и заряда, вызываемых излучением



Sandia National Laboratories

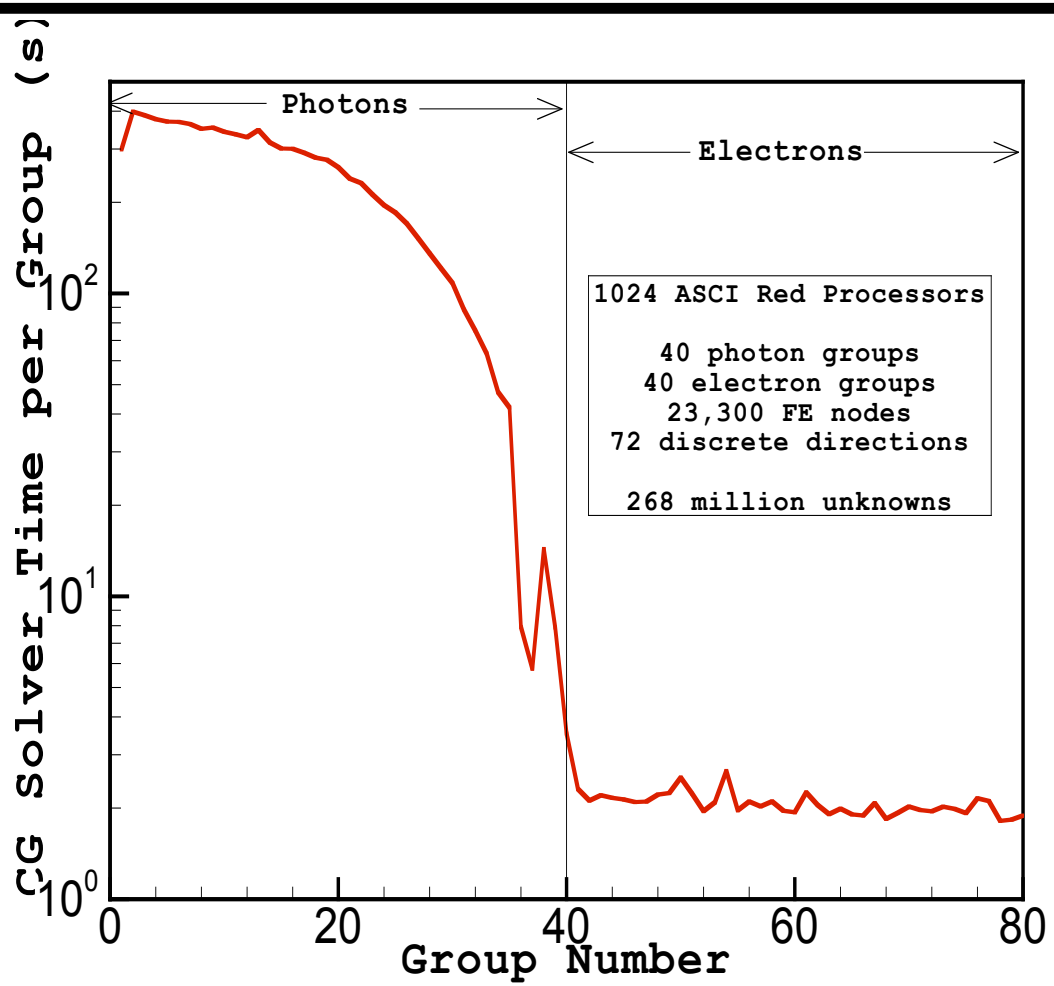
Потребности моделирования SGEMP

- Требуется точное значение увеличения дозы и профилей заряда вблизи поверхности перехода проводник/диэлектрик
  - В результате получаются чрезвычайно малые ячейки сетки вблизи поверхностей перехода между материалами
  - Используются конечные элементы более высокого порядка
  - Плохо скоординированная матрица для переноса фотонов



Sandia National Laboratories

Численные затруднения CEPTRE



- Мелкая сетка почти прозрачна для фотонов
- Матрица очень плохо обусловлена
- Медленная сходимость CG
- Необходимо эффективное предобусловливание

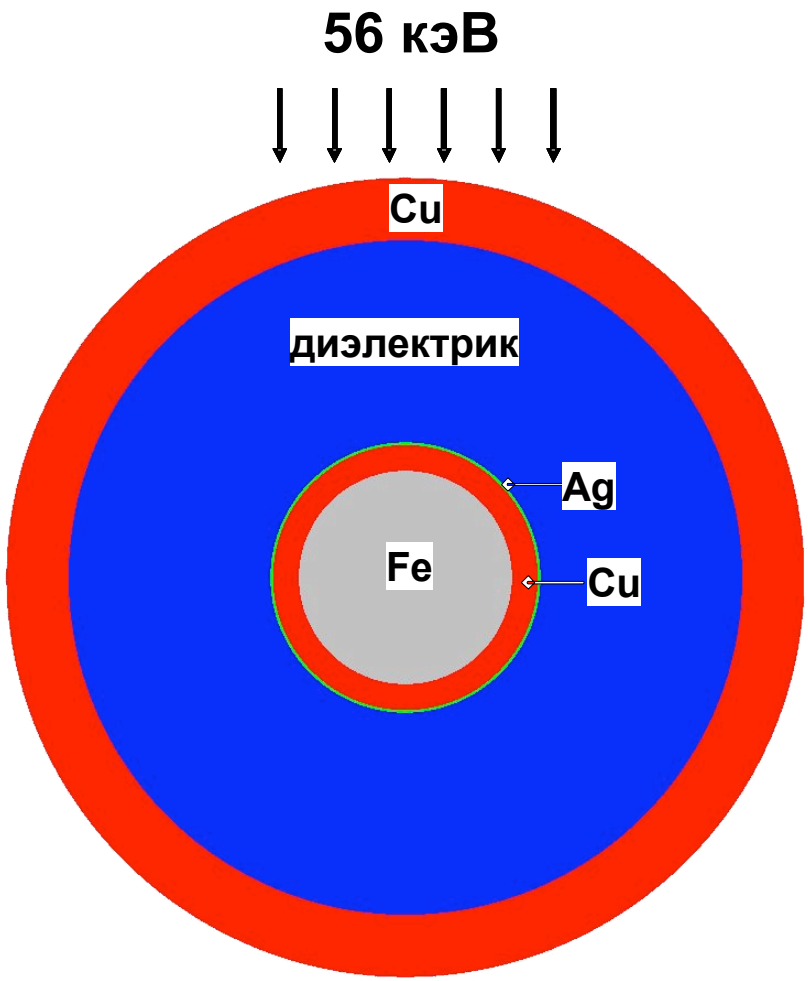
Sandia National Laboratories

Стратегии ускорения CEPTRE

- Решение по фотонам на линейной МКЭ (*матрице конечных элементов*) и по электронам на квадратичной МКЭ (различные средние свободные пути и расстояния)
- Более низкий порядок квадратуры и расширения Лежандра для поперечных сечений по фотонам (рассеивание более изотропное, чем для электронов)
- Используется предобусловливатель диагоналей блоков
- Используется перемещение Sn 1го порядка для фотонов
- Повысит ли это точность результата?
  - В переносе излучения (вброс заряда на переходе проводник/диэлектрик)
  - В электрическом реагировании (заряд окончательной нагрузки)

Sandia National Laboratories

Рассмотрим коаксиальный кабель RG402

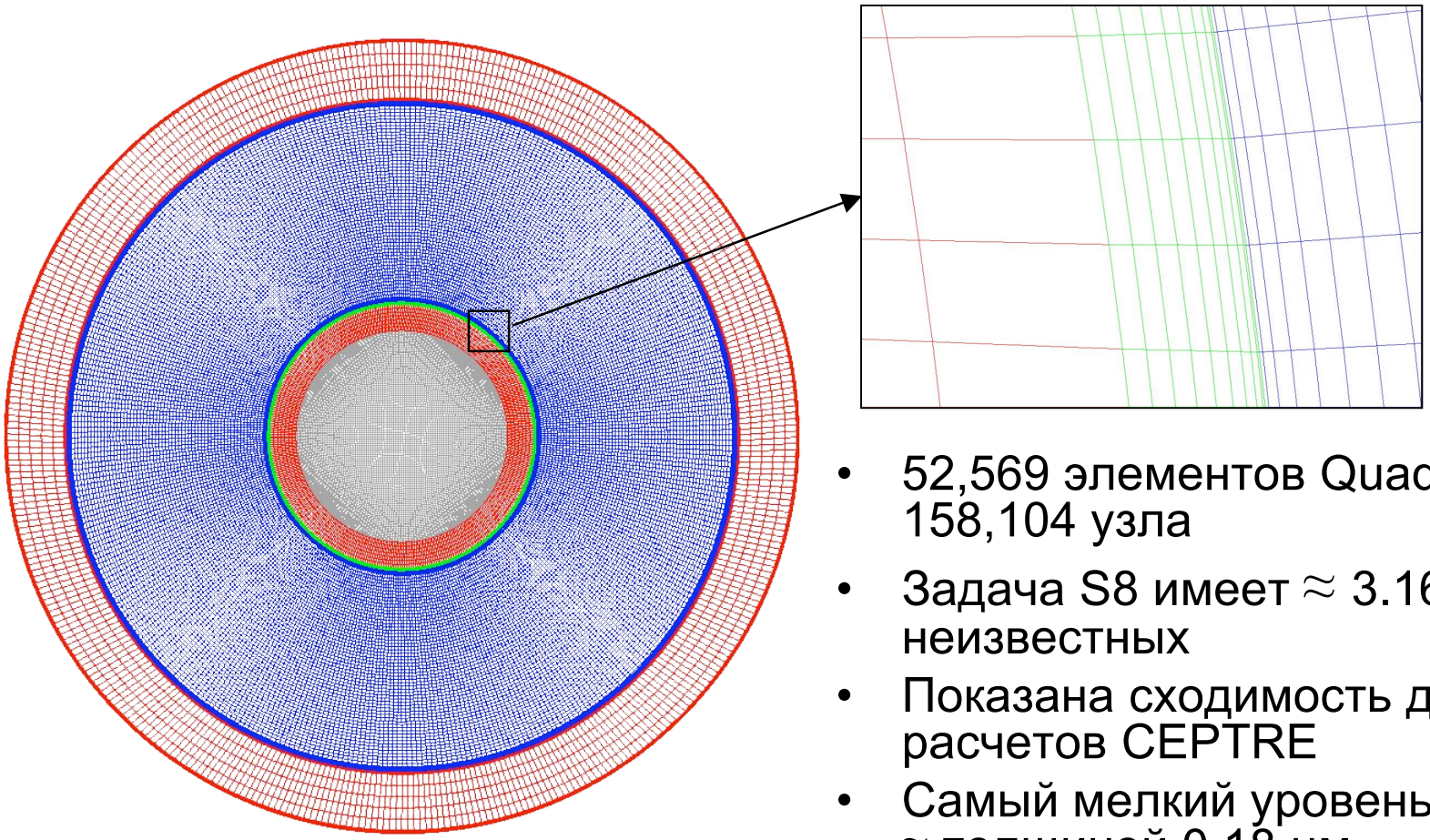


- Средняя энергия спектра событий = 56кэВ
- Квадратура S8
- Расширение Лежандра P5 для поперечных сечений рассеивания

материал	Внешний радиус (см)
Сталь	0.04780
Медь	0.05940
Серебро	0.06060
Диэлектрик	0.15113
Медь	0.17907

Sandia National Laboratories

Измельченная сетка RG402



- 52,569 элементов Quad8 и 158,104 узла
- Задача S8 имеет ≈ 3.16 млн. неизвестных
- Показана сходимость для расчетов CEPTRE
- Самый мелкий уровень ячеек ≈ толщиной 0.18 μм

Sandia National Laboratories

Ускорение решения по фотонам

- 32 процессора на ICC
- Решение по электронам использует S8, расширение Лежандра P5 на квадр. МКЭ

Фотон. Sn / PL	Q сброса (электрон/см)	SGEMP (nC/см)	Время решения - фотонам (часы)	Тип конечного элемента фотонной сетки
S8 / P5	3.39e-04	6.57e-17	65.75	Квадратичный
S8 / P5	3.47e-04	8.14e-17	5.21	Линейный
S8 / P3	3.04e-04	8.25e-17	5.33	Линейный
S4 / P3	3.04e-04	8.07e-17	0.88	Линейный

Точность и ускорение по сравнению с S8, P5 фотонного решения на кв. сетке:

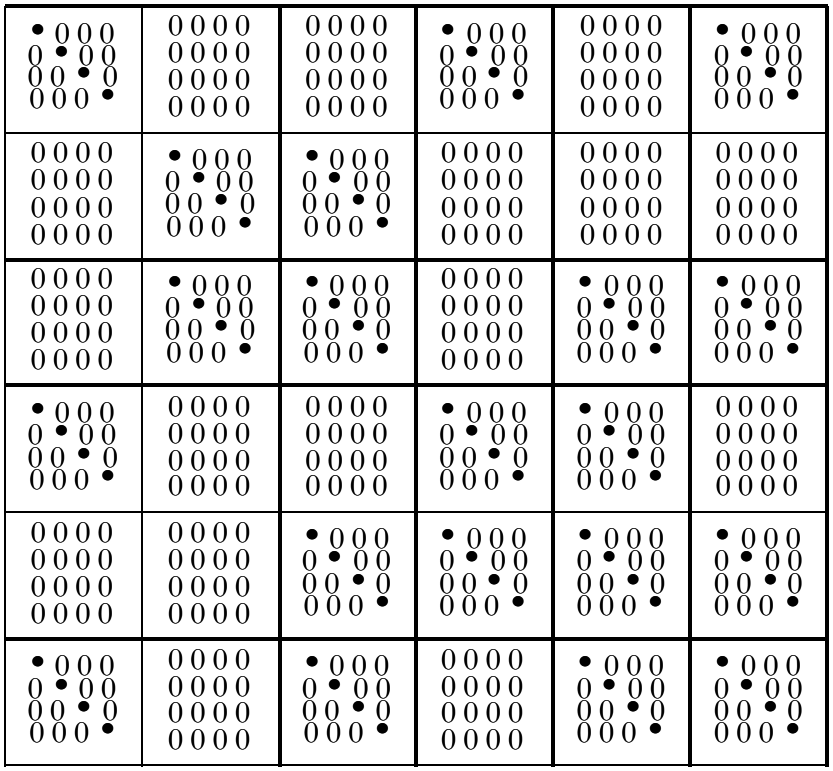
Sn/PL	результат Ceptre	Реакция SGEMP	Ускорение
S8/P5	2.3 %	24 %	12.6
S8/P3	10.3 %	26 %	12.3
S4/P3	10.3 %	23 %	74.7

Sandia National Laboratories

Предобусловливатель диагональных блоков

Предобусловленная линейная система $M^{-1}Ax=M^{-1}b$

M=



- Уравнение переноса *без* рассеивания
- Структура редких блоков
- Число рядов блоков:
  - $N_{узлов}$
- Размер блока:
  - $N_{расстояний} x N_{расстояний}$
  - Диагональные блоки
- Направления развязаны
- Симметричная система
- Гораздо проще решать, чем исходное уравнение переноса

Sandia National Laboratories

Ускорение предобусловливателя диагональных блоков

- Вне сети Невады и с использованием специальной модифицированной версии Ацтек, предобусловливатель диагональных блоков показал ускорение на RG402:
  - Наблюдалось ускорение S8 до 4.3
  - Наблюдалось ускорение S16 до 8.0
  - 80 процессоров «ASCI-Red»
- Мы выполняем внедрение этого предобусловливателя в версии Ceptre для сети Невады, использующей Трилинос и АцтекОО
- Использование предобусловливателя не должно влиять на электрическое реагирование кабеля

Sandia National Laboratories

Перенос Sn первого порядка для фотонов

- Перенос Sn первого порядка для фотонов эффективен
  - Параллельное многомерное внедрение сложно вследствие введение циклов в «проходах»
  - Ведется разработка для его внедрения с помощью новых методов выполнения этих параллельных проходов
- Позволяет получать решение по фотонам на той же сетке конечных элементов, что и для электронов
- Связан с переносом Sn второго порядка для электронов

Sandia National Laboratories

Выводы

- Анализ SGEMP кабеля требует очень точного определения повышения дозы и заряда на поверхностях материалов
- Измельченная сетка, необходимая для соблюдения этого условия, делает определение переноса фотонов с формой 2-го порядка очень дорогостоящим
- Ускорение может быть достигнуто с минимальным воздействием на результаты переноса излучения
- Электрическое реагирование кабеля очень чувствительно к результатам переноса излучения
  - Изменение на 2.3% в переносе излучения приводит к изменению на 30% в реагировании кабеля
- Последующая работа по снижению времени прогона CEPTRE выглядит многообещающей