ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ В ЗАДАЧЕ ПОИСКА ЭДМ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

А.Н. Иванов

Санкт-Петербургский госуниверситет, Россия
Institute for Nuclear Physics, Forschungszentrum Juelich, Germany

Приводится формулировка проблемы длительного моделирования спин-орбитального взаимодействия заряженных частиц в электромагнитных полях для задачи поиска электрического дипольного момента элементарных частиц. Обосновывается необходимость разработки специальных численных методов интегрирования дифференциальных уравнений. Наряду с анализом существующих подходов приводится описание разработанного параллельного метода решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений, основанного на численной реализации нелинейного матричного формализма теории групп Ли. Описанный метод обладает свойством естественного параллелизма, что делает возможным его реализацию на специализированных матричных GPU-ускорителях.

Введение

Наличие электрического дипольного момента (ЭДМ) элементарных частиц свидетельствует о нарушении как пространственной, так и временной четности, что, в рамках CPT-теоремы, свидетельствует о нарушении CP-инвариантности. Ненулевой ЭДМ в этом случае может служить сигналом для развития «новой физики» за пределами Стандартной модели [1].

Одним из подходов в измерении ЭДМ является изучение спиновой динамики заряженных частиц при движении в накопительном кольце [2]. Такой подход основывается на анализе поляризованных пучков в течение длительных интервалов времени. Ввиду маленького ожидаемого значения ЭДМ ($10^{-26} e \cdot cm$), а как следствие – и его влияния на динамику частиц необходимо обеспечить время жизни пучка на уровне 1000 секунд, что соответствует миллиардам оборотов частиц в накопительном кольце. Исследования, посвященные данной тематике, в настоящее время ведутся в научно-исследовательском центре Юлих Германии.

Отметим, что традиционные пошаговые методы интегрирования динамических систем в данном случае неприменимы. Во-первых, они не обеспечивают приемлемое время вычислений, во-вторых, глобальная ошибка таких методов растет с каждым шагом интегрирования. Причем общее число необходимых шагов для одной частицы оценивается величиной 10^{12} и зависит от задаваемой локальной ошибки. Кроме того, на таких длительных временных интервалах интегрирования решающим фактором является сохранение физических свойств рассматриваемой системы. В физике частиц это в основном условие симплектичности ввиду гамильтонова характера динамики. Существующие симплектические методы пошагового интегрирования описываются неявными схемами [3], что в разы увеличивает затраченное время расчетов.

В рамках данного проекта для решения указанных задач используются методы интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), основанные на построении отображений. Такие подходы позволяют оценивать нелинейное отображение, переводящее множество начальных состояний в конечное, которое соответствует полному обороту частицы в накопительном кольце.

1. Обзор известных решений

Впервые теория групп Ли для решения обыкновенных дифференциальных уравнений была применена Алексом Драгтом [4], профессором университета Мэрилэнда. Им была написана программа MARYLIE, предназначенная для проектирования и моделирования ускорителей заряженных частиц.

В Европейской организации по ядерным исследованиям (CERN) была разработана программа MAD, предназначенная для моделирования динамики частиц в магнитной оптике. Данная программа использует подмодуль TRANSPORT, написанный К. Брауном для построения отображения до второго порядка нелинейности, и собственную реализацию для четвёртого порядка нелинейности. Решение также основано на построении отображения Ли в виде разложения в ряд Тейлора.

В данных программах не реализовано моделирование спиновой динамики, что делает невозможным их использование в исследовании. Единственной на сегодняшний день программой общего пользования для численного расчета спин-орбитального взаимодействия является COSY Infinity [5], разработанная профессором Мартином Берцем в Мичиганском университете. Решение системы ОДУ строится в виде тензорного представления разложения в ряд Тейлора до заданного порядка нелинейности. Программа также предоставляет MPI-интерфейс для запуска ее на кластерных вычислительных системах.

Реализация COSY Infinity основывается на методах дифференциальной алгебры, что позволяет решать систему дифференциальных уравнений до высоких порядков нелинейности. В целом данная программа и методы, заложенные в ее работу, удовлетворяют требованиям, предъявляемым к производительности, однако имеют ряд недостатков. Так, используемые математические модели нигде не описаны, и в логике работы программы применяется ряд спорных с физической точки зрения подходов (например, перестроение опорной кривой). Это делает затруднительным ее использование для задач учета систематических ошибок и реализации нестандартных управляющих полей.

Отметим, что на начальном этапе исследований программа COSY Infinity может быть успешно применена для численных расчетов. В частности, в настоящее время с использованием этой программы моделируется длительная эволюция динамики пучка частиц на вычислительных ресурсах научно-исследовательского центра Юлих в рамках исследований, проводимых в международной коллаборации JEDI.

Указанные ограничения на существующие программы и методы делают очевидной необходимость разработки нового высокопроизводительного метода интегрирования систем ОДУ, дальнейшая реализация которого подразумевает использование современных суперкомпьютерных технологий. В данной работе описана численная реализация матричного формализма. Теоретические основы этой идеологии развиваются профессором С.Н. Андриановым (СПбГУ) и основаны на применении теории групп Ли [6]. Каждый коэффициент отображения в данном случае представляет собой аналитическую формулу и описывает общее решение системы ОДУ. Численная реализация упрощает и унифицирует процесс построения отображения. Достоинством такого подхода является универсальность метода, который может быть построен на основе любого пошагового алгоритма интегрирования. К недостаткам можно отнести значительный рост времени вычисления коэффициентов отображения при повышении порядка нелинейности. Однако следует иметь в виду, что отображение для системы уравнений строится один раз, после чего оно в неизменном виде применяется для вычисления динамики целого множества начальных состояний динамической системы.

Спин-орбитальная динамика заряженных частиц описывается системой ОДУ, состоящей из уравнений Ньютона – Лоренца и Т-БМТ-уравнения [7]. Далее будем рассматривать задачу построения отображения для решения системы ОДУ в общем виде.

2. Постановка задачи

В настоящее время все численные подходы построения отображения, так или иначе, основываются на разложении нелинейных правых частей дифференциального уравнения и искомого решения в ряд Тейлора до заданного порядка нелинейности. Систему нелинейных ОДУ

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \vec{F}(t, \vec{X})$$

и ее решение при определенных предположениях [6] можно представить в виде

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \sum_{k=0}^{n} P_k(t)\vec{X}^{[k]}, \tag{1}$$

$$\vec{X} = \sum_{k=0}^{n} R_k(t)\vec{X}_0^{[k]}, \tag{2}$$

где n – заданный порядок нелинейности; $P_k(t)$, $R_k(t)$, – матрицы коэффициентов разложения правых частей уравнения и решения в ряд Тейлора. Под оператором $(\cdot)^{[k]}$ понимается кронекеровская степень с редуцированием размерности [6].

Формула (2) задает решение задачи Коши системы (1) для произвольного вектора начального состояния X_0 на интервале интегрирования $[0;\ t]$. При вычисленных коэффициентах разложения (2) вычисление нового вектора состояния по начальному производится лишь с использованием операций умножения и сложения числовых двумерных матриц и векторов. В отличие от пошаговых методов интегрирования в данном случае отображение строится сразу для всей системы, оно одинаковое для разных начальных состояний. Кроме того, нет необходимости разбиения интервала интегрирования на шаги, а точность метода определяется лишь порядком нелинейности n и точностью вычисления матриц $R_k(t)$.

3. Матричное интегрирование системы ОДУ

Для вычисления матриц $R_k(t)$ будем использовать следующий подход. Дифференцируя уравнение (2) по времени

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \sum_{k=0}^{n} \frac{d}{dt} R_k(t)\vec{X}_0^{[k]}$$

и сравнивая полученное соотношение с (1), имеем

$$\begin{aligned} \frac{dR_0(t)}{dt} &= \sum_{k=0}^{n} P_k(t)\big(R_k(t)\big)^{[k]}, \\ \frac{dR_j(t)}{dt} &= \sum_{k=0}^{n} P_k(t)\frac{\partial\big(\vec{X}(t)\big)^{[k]}}{\partial\big(\vec{X}_0^{[j]}\big)^T}, \end{aligned} \tag{3}$$

где $j=1,\ldots,n;$ вектор $X(t)$ задается равенством (2); под $(\cdot)^T$ понимается операция транспонирования.

Система уравнений (3) описывает динамику отображения на заданном интервале интегрирования и может быть записана в виде $dR/dt = \widetilde{F}(t, R)$. Вычисление коэффициентов матриц $R_k(t)$ может вестись любым подходящим пошаговым методом интегрирования. Общий алгоритм решения системы ОДУ может быть записан в виде следующей последовательности действий.

1. Разложение нелинейных правых частей системы уравнений (1) в ряд (2).
2. Построение вспомогательной системы ОДУ (3) для коэффициентов отображения.
3. Решение задачи Коши: вычисление вектора состояния X, соответствующего начальному состоянию системы X_0.

4. Реализация матричных алгоритмов

Матричный подход интегрирования систем ОДУ предоставляет существенный выигрыш по производительности в сравнении с классическими пошаговыми алгоритмами. На рис. 1 представлено сравнение данного подхода со схемой Рунге–Кутта 4-го порядка точности. Матрицы нелинейного отображения строились также до 4-го порядка нелинейности. Здесь следует отметить, что если не учитывать время, затраченное на построение отображения (решение системы уравнений (3)), время, затраченное на вычисление конечного решения при использовании отображений, не зависит от величины интервала интегрирования. В случае использования пошагового интегрирования время растёт пропорционально.

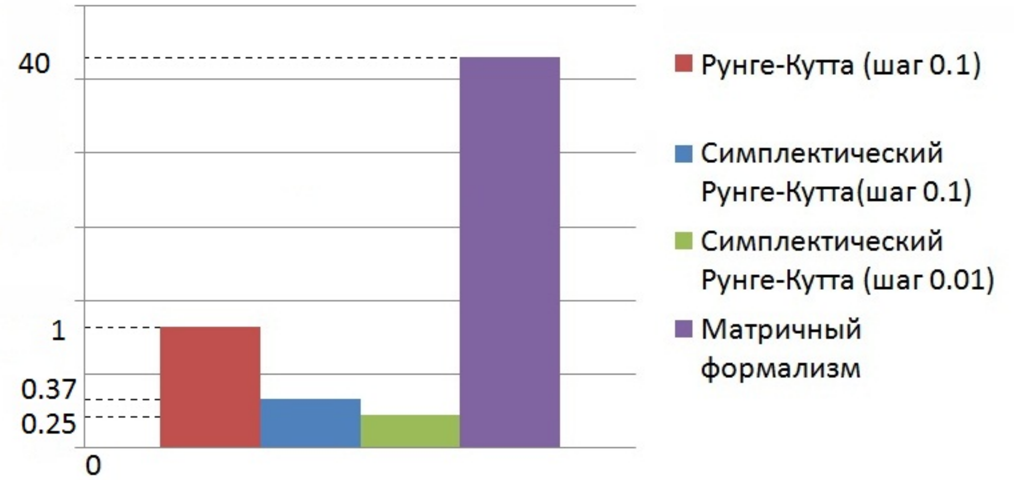

Рис. 1. Относительная производительность численных методов

На втором месте после длительности интервала интегрирования в изучении динамики стоит проблема большого количества частиц в ансамбле пучка. При использовании пошагового интегрирования каждую частицу приходится «просчитывать» отдельно. Использование матричного подхода существенно упрощает задачу, при этом формула (2) для множества частиц преобразуется в

$$\vec{X} = \sum_{k=0}^{n} R_k(t) \left(\vec{X}_0^1 \quad \vec{X}_0^1 \quad \ldots \quad \vec{X}_0^N \right)^{[k]},$$

где N – число частиц в пучке. Все операции в этом случае выполняются в виде перемножения числовых матриц. Размерность матриц $R_k(t)$ зависит от вектора состояния и равняется 9 для спин-орбитальной динамики, а также от порядка нелинейности n. Размерность матрицы, описывающей начальное состояние пучка, зависит от количества частиц.

Ввиду того, что предлагаемый метод использует в конечном итоге только линейные операции над числовыми матрицами больших размерностей, наилучшим решением для его реализации является использование архитектуры GPU. Построенный численный метод, подчиняясь парадигме естественного распараллеливания, полностью отображается в конвейерную архитектуру таких вычислительных систем.

Развитие описанного подхода ведется в двух направлениях. Во-первых, совершенствуются алгоритмы, специфические для предметной области [8, 9]. Во-вторых, исследуется и оптимизируется реализация метода на конкретных вычислительных системах.

5. Заключение

В настоящее время численные расчеты по моделированию длительной эволюции заряженных частиц в рамках проекта JEDI ведутся в основном в суперкомпьютерном центре JUROPA, расположенном в научно-исследовательском центре Юлих. В основном используется MPI-интерфейс программы COSY Infinity. К недостаткам этой программы можно отнести неудачный выбор формализма при реализации вычислительных алгоритмов. В COSY Infinity используются тензорные операции, что делает ее распараллеливание затруднительным даже на традиционных кластерных системах. Матричный формализм, описанный в данной работе, записывается в конечном итоге в виде операторов линейной алгебры и может быть реализован на любой архитектуре высокопроизводительных вычислений.

Для целей тестирования и верификации алгоритма и методов в настоящее время используется гибридный кластер Санкт-Петербургского государственного университета на базе процессоров NVIDIA Tesla. Полномасштабные расчеты планируется проводить в вычислительном центре JuDGE, который также построен на основе гибридной GPU-архитектуры.

А
втор выражает благодарность профессору Ю.В. Сеничеву за постановку задач в области ускорительной физики и обсуждение результатов численного моделирования, Д.В. Зюзину за помощь в проведении сравнительных расчетов на программе COSY Infinity, своему научному руководителю профессору С.Н. Андрианову, а также профессору Мартину Берцу за плодотворные дискуссии в области методов решения дифференциальных уравнений на основе построения отображений.

Литература

1. Fukuyama T. Searching for New Physics beyond the Standard Model in Electric Dipole Moment. – [pdf] (http://arxiv.org/pdf/1201.4252v7.pdf), 2013.
2. Senichev Yu. Storage Ring EDM Simulation: Methods and Results // Proc. of ICAP2012, Rostock, Germany, 2012. – P. 99–103.
3. Oevel W., Sofroniou M. Symplectic Runge-Kutta Schemes II: Classification of Symmetric Methods. – [pdf] (http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi= 10.1.1.46.5060 & rep=rep1&type=pdf).
4. Dragt A., Douglas D. Particle tracking using Lie algebraic methods // Computing in Accelerator Design and Operation, 1984. – P. 122–127.
5. COSY Infinity (http://www.bt.pa.msu.edu/index_cosy.htm).
6. Андрианов С.Н. Динамическое моделирование систем управления пучками частиц. – СПб.: Изд-во С.-Петерб. ун-та, 2002. – 376 с.
7. Balandin V., Golubeva N. Hamiltonian methods for the study of polarized proton beam dynamics in accelerators and storage rings. – [pdf] (arxiv.org/pdf/physics/9903032).
8. Ivanov A., Andrianov S., Kulabukhova N., Maier R., Senichev Yu., Zuyzin D. Testing of Symplectic Integrator of Spin-orbit motion based on Matrix Formalism // Proc. of IPAC2013, Shanghai, China, 2013. – P. 2582–2584.
9. Ivanov A., Andrianov S. Matrix Formalism for Long-term Evolution of Charged Particle and Spin Dynamics in Electrostatic Fields // Proc. of ICAP2012, Rostock, Germany, 2012. – P. 187–189.