Е. Е. Перепёлкин, А. Д. Коваленко, А. А. Тарелкин, Р. В. Полякова, Н. Г. Иноземцева, М. Б. Садовникова

# Комплексный подход в моделировании и оптимизации элементов ускорительных установок

Проектирование современных ускорительных установок требует использования комплексного подхода при моделировании и оптимизации параметров системы [1]. Такой подход подразумевает высокую степень детализации (реалистичности) математической модели с возможностью быстрого процесса численной оптимизации, что требует использования современных гибридных вычислительных архитектур, включающих в себя массивно-параллельные вычисления на графических процессорах (GPU) [2].

Магнитные системы, ускорительные ВЧ-системы, различные типы детекторов частиц — неотъемлемые элементы ускорительных комплексов. Проектирование указанных элементов является нелинейной самосогласованной задачей, требующей многократного про-

## E. E. Perepelkin, A. D. Kovalenko, A. A. Tarelkin, R. V. Polyakova, N. G. Inozemtseva, M. B. Sadovnikova

# Integrated Approach in Modeling and Optimization of Accelerator Elements

The design of modern accelerator facilities requires the use of an integrated approach in modeling and optimization of the system parameters [1]. This approach implies a high degree of detail (realism) of the mathematical model with the possibility of a quick numerical optimization process that is impossible without the use of modern hybrid computing architectures, which include massively parallel computing on graphic processors (GPUs) [2].

Magnetic systems, RF accelerator systems, and various types of particle detectors are integral elements of accelerator complexes. The design of these elements is a nonlinear self-consistent task requiring a multiple process of optimization of the accelerator system parameters. For example, in order to obtain a given distribution of the magnetic field in

28

цесса оптимизации параметров ускорительной системы. Например, чтобы получить заданное распределение магнитного поля в детекторе частиц, необходимо подобрать геометрическую конфигурацию магнитной системы, оптимизировать токи в обмотках, произвести прочностные расчеты. Если обмотка с током будет работать в режиме сверхпроводимости, то потребуется, по крайней мере, произвести оценку тепловых деформаций. Даже «заданное» распределение магнитного поля в детекторе частиц не всегда является именно заданным, так как само по себе требует выбора из множества различных конфигураций, обусловленных физическими процессами, которые планируется изучать на установке. В таких случаях приходится рассматривать связанные задачи, например, электромагнитный дизайн установки и моделирование динамики пучка или задачу распознавания треков частиц.

С математической точки зрения перечисленные проблемы сводятся к различным типам постановок нелинейных начально-краевых задач в сложных трехмерных геометрических областях, которые, как правило, могут быть решены только с использованием численных методов.

Для нелинейных систем вопросы сходимости, устойчивости, точности получаемых численных решений исследованы не так широко, как для линейных систем. Поэтому при написании собственного программного кода или при получении численного результата по известному стороннему программному комплексу возникает вопрос о корректности результата. В таких случаях важную роль играет наличие известных точных решений нелинейных задач, которые могут быть использованы как тесты численных алгоритмов, а также в качестве начальных приближений при поиске оптимальной конфигурации нелинейной системы.

Использование современных высокопроизводительных вычислительных архитектур является важным шагом для перехода на новый уровень «реалистичности» моделирования и оптимизации нелинейных систем. Нелинейность системы приводит к необходимости многократного решения одной и той же задачи с различными исходными данными. Эффективные алгоритмы распараллеливания программного кода, использование особенностей работы с различными типами памяти, балансировка загрузки вычислительных ядер на различных узлах может приводить к ускорению процесса оптимизации на порядки. Сокращение времени моделирования — это не только сокращение сроков проектирования установки, но и дополнительная возможность провести более точную

a particle detector, it is necessary to select the geometric configuration of the magnetic system, optimize the currents in the windings, and perform strength calculations. If the current winding operates in superconductivity, then at least an assessment of thermal deformations will be required. Even the "given" distribution of the magnetic field in the particle detector is not always predetermined, since it in itself requires a choice from many different configurations due to physical processes that are planned to be studied at the facility. In such cases, it is necessary to consider related problems, for example, the electromagnetic design of the setup and modeling of the beam dynamics or the problem of particle tracks recognizing.

From a mathematical point of view, the listed problems are reduced to various types of nonlinear initial-boundary tasks formulations in complex three-dimensional geometric areas, which, as a rule, can only be solved using numerical methods.

For nonlinear systems, the questions of convergence, stability, and accuracy of the obtained numerical solutions are not studied as widely as for the linear ones. Therefore, when writing our own program code or when obtaining a numerical result from the well-known third-party software package, the question of the correctness of the result arises. In such cases, the important role is played by the existence of known exact solutions of nonlinear problems, which can be used as tests of numerical algorithms, as well as initial approximations in the search for the optimal configuration of a nonlinear system.

The use of modern high-performance computing architectures is an important step to move to a new level of "realistic" modeling and optimization of nonlinear systems. The nonlinearity of the system makes it necessary to repeatedly solve the same task with different initial data. Effective algorithms for parallelizing of the program code, using of the features of working with various types of memory, and balancing of the loading of computing cores on various nodes can lead to accelerations of the optimization process by orders of magnitude. Reducing of the simulation time is not only a reduction of the setup design time, but also an additional opportunity to carry out more accurate optimization, to perform optimization with a greater level of detail (realism) over the initial time.

Since 2008 the staff of LIT, VBLHEP (JINR) and Lomonosov Moscow State University has been jointly

оптимизацию, произвести оптимизацию с бо́льшим уровнем детализации (реалистичности) за первоначальное время.

Сотрудниками ОИЯИ и МГУ им. М. В. Ломоносова с 2008 г. совместно развивается описанный комплексный подход в моделировании и оптимизации элементов ускорительных установок.

Создан программный движок на массивно-параллельной архитектуре графических процессоров (GPU) для моделирования динамики пучка в циклотроне и численного решения нелинейной задачи магнитостатики [1–3], указанные алгоритмы дали ускорение вычисления от одного до двух порядков на один GPU. Получены точные решения нелинейной задачи учета эффекта пространственного заряда пучка. На рис. 1 показано распределение функции плотности заряда вдоль радиуса в различные моменты времени. Возникающая ударная волна соответствует так назы-



Рис. 1. Возникновение ударной волны в задаче кулоновского взрыва

Fig. 1. The occurrence of a shock wave in the Coulomb explosion problem

ваемому кулоновскому взрыву. В гидродинамическом приближении описания пространственного заряда построены разностные схемы различных порядков аппроксимации, рассмотрена их устойчивость. На рис. 2 показано изменение плотности заряда в ускоряющем поле. На рис. 2, вверху разностная схема является устойчивой (число Куранта C < 1), а на рис. 2, внизу показано нарушение устойчивости в виде возникновения осцилляций (C > 1).





Fig. 2. Investigation of the stability of the difference scheme for the space charge problem

developing the described integrated approach in modeling and optimization of elements of accelerator facilities.

A software engine was created on the massively parallel architecture of GPUs for modeling beam dynamics in a cyclotron and numerical solving of the nonlinear magnetostatics problem [1-3]; these algorithms accelerated the calculation from one to two orders of magnitude per GPU. Exact solutions to the nonlinear problem accounting for the space charge effect of the beam are obtained. Figure 1 shows the distribution of the charge density function along the radius at different points in time. The arising shock wave corresponds to the so-called Coulomb explosion. In the hydrodynamic approximation of the space charge description, difference schemes of various approximation orders are constructed, and their stability is considered. Figure 2 shows the charge density motion in an accelerating field. In Fig. 2 (top) the difference scheme is stable (Courant number C < 1), and in Fig. 2 (bottom) the stability violation in the form of oscillations is shown (C > 1).

Exact solutions of some equations from the chain of the Vlasov equations are found. Figure 3 shows one of the obtained solutions in the form of a particle density distribution on a spherical surface. The particles flow along spiral paths from one pole of a sphere to another. For the nonlinear 2D magnetostatics problem in the field of a ferromagnet, exact solutions are obtained that are encapsulated in a difference scheme that increases the accuracy of the solution by an order of magnitude. The magnetic field growth in the vacuum region is estimated for the nonlinear

Найдены точные решения некоторых уравнений из цепочки уравнений Власова. На рис. 3 показано одно из полученных решений в виде распределения плотности частиц на сферической поверхности. По спиральным траекториям частицы перетекают с одного полюса сферы на другой полюс. Для нелинейной 2D-задачи магнитостатики в области ферромагнетика получены точные решения, инкапсулированные в разностную схему, повышающую точность решения на порядок. Произведена оценка роста магнитного поля в области вакуума для нелинейной 3D-задачи магнитостатики, когда функция магнитной проницаемости удовлетворяет асимптотике Вейсса.

С использованием полученной асимптотики предложен алгоритм построения адаптивной сетки в окрестности угловой точки, позволяющий существенно увеличить точность вычислений.

На рис.4 представлены различные виды конечно-элементной сетки в окрестности угловой точки ферромагнетика для магнитной системы детектора SPD Рис. 3. Распределение плотности частиц на сферической поверхности при решении уравнения Власова



Fig. 3. Particle density distribution on a spherical surface when solving the Vlasov equation

Рис. 4. Виды сетки в окрестности угловой точки: *a*) адаптивная сетка; *б*) равномерная сетка с таким же количеством узлов, как и в адаптивной сетке; *в*) равномерная сетка, дающая такой же результат, что и адаптивная сетка (*a*)



Fig. 4. Types of grid in the vicinity of a corner point: a) adaptive grid; b) a uniform grid with the same number of nodes as in an adaptive grid; c) a uniform grid yielding the same result as the adaptive grid depicted in (a)

3D magnetostatics problem, when the magnetic permeability function satisfies the Weiss asymptotics.

Using the obtained asymptotics, an algorithm for constructing an adaptive grid in the vicinity of a corner point is proposed, which allows one to significantly increase the accuracy of calculations.

Figure 4 presents various types of finite-element grid in the vicinity of the corner point of a ferromagnet for the magnetic system of the SPD detector of the NICA accelerator complex (JINR). Figure 5 shows the distributions of the magnetic field modulus along a line passing near the corner point for various types of grids (see Fig.4). In Fig. 4, *b*, the grid nodes are distributed uniformly (without taking into account the asymptotic behavior of the magnetic field in the vicinity of the corner point). In Fig. 4, *a*, the number of grid nodes is the same as in Fig. 4, *b*, but the nodes are distributed unevenly, taking into account the asymptotic behavior of the magnetic field.

In Fig. 4, c, a uniform grid is constructed that gives the same accuracy (see Fig. 5) in the magnetic field value as the adaptive grid in Fig. 4, a.

Figure 5 shows that the accuracy corresponding to the adaptive grid is achieved by a uniform grid if the number of nodes is 10 times more. When modeling the distribu-

ускорительного комплекса NICA (ОИЯИ). На рис. 5 показаны распределения модуля магнитного поля вдоль линии, проходящей вблизи угловой точки для различных типов сеток (см. рис. 4). На рис. 4,  $\delta$  узлы сетки распределены равномерно (без учета асимптотики магнитного поля в окрестности угловой точки). На рис. 4, a количество узлов сетки такое же, как и на рис. 4,  $\delta$ , но узлы распределены неравномерно с учетом асимптотики магнитного поля. На рис. 4, e построена равномерная сетка, дающая такую же точность (рис. 5) в значении магнитного поля, что и адаптивная сетка на рис. 4, a.

На рис. 5 видно, что точность, соответствующая адаптивной сетке, достигается равномерной сеткой, если число узлов будет больше в 10 раз. При моделировании распределений электрических полей в областях с негладкой границей задача является линейной. В линейном случае вид особенности известен в явном виде и представляется степенной и/или логарифмической функцией от радиуса.

Рис. 5. Распределение модуля магнитной индукции вдоль прямой, полученное на различных сетках



Fig. 5. Distribution of the magnetic induction modulus along a straight line obtained on various grids

tions of electric fields in regions with a non-smooth boundary, the problem is linear. In the linear case, the form of the singularity is known explicitly and is represented as a power and/or logarithmic function of the radius.

Note that sometimes a non-smooth boundary is created specifically to obtain a strong inhomogeneity of the electromagnetic field, for example, when designing electron guns or in the Stern–Gerlach experiment in studying the spin. This work was performed with support of the RFBR grant No. 18-29-10014. Заметим, что иногда негладкая граница создается специально для получения сильной неоднородности электромагнитного поля, например, при проектировании электронных пушек или в опыте Штерна–Герлаха при изучении спина. Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-29-10014.

#### Список литературы

1. Иноземцева Н. Г., Перепёлкин Е. Е., Садовников Б. И. Оптимизация алгоритмов задач математической физики для графических процессоров. М.: Из-во МГУ, 2012. 256 с.

2. Перепёлкин Е.Е., Садовников Б.И., Иноземцева Н.Г. Вычисления на графических процессорах в задачах теоретической и математической физики. М.: URSS, 2019. 240 с. Сер. «Классический учебник МГУ».

3. Перепёлкин Е. Е., Коваленко А. Д., Тарелкин А. А., Полякова Р. В., Садовников Б. И., Иноземцева Н. Г., Сысоев П. Н., Садовникова М. Б. Моделирование магнитных систем в области с углом // ЭЧАЯ. 2019. Т. 50, вып. 3. С. 360.

4. Перепёлкин Е. Е., Коваленко А.Д., Тарелкин А.А., Полякова Р.В., Иноземцева Н.Г., Сысоев П. Н., Садовникова М.Б. 3D расчеты вариантов магнитной системы детектора SPD комплекса NICA // Письма в ЭЧАЯ. 2019. Т.16, вып.2. С.167–180.

#### References

1. Inozemtseva N. G., Perepelkin E. E., Sadovnikov B. I. Optimization of Algorithms for Mathematical Physics Problems for Graphic Processors. Moscow: Moscow State Univ., 2012. 256 p.

2. Perepelkin E.E., Sadovnikov B.I., Inozemtseva N.G. Computations on Graphic Processors in Problems of Theoretical and Mathematical Physics. Moscow: URSS, 2019. 240 p. Ser. "Classical Textbook of Moscow State University".

3. Perepelkin E. E., Kovalenko A. D., Tarelkin A. A., Polyakova R. V., Sadovnikov B. I., Inozemtseva N. G., Sysoev P. N., Sadovnikova M. B. Modeling of Magnetic Systems in an Area with an Angle // Phys. Part. Nucl. 2019. V. 50, No. 3. P. 360.

4. Perepelkin E. E., Kovalenko A. D., Tarelkin A. A., Polyakova R. V., Inozemtseva N. G., Sysoev P. N., Sadovnikova M. B. 3D Calculations of the Options for the Magnetic System of the Detector SPIC of the NICA Complex // Phys. Part. Nucl. Lett. 2019. V. 16, No. 2. P. 140–152.