

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ПРЕЛОМЛЯЮЩИХ СТРУКТУРАХ МЕТОДОМ МОНТЕ–КАРЛО НА СУПЕРКОМПЬЮТЕРЕ СКИФ

Ю.Р. Яскевич, О.И. Кравченко, И.И. Сорока, А.Г. Чембровский, А.С. Колесник, Н.В. Серикова,
П.В. Петров, Н.Н. Кольчевский

Белорусский государственный университет, kolchevsky@bsu.by

Разработано программное обеспечение «Xray-SKIF» для моделирования распространения рентгеновского излучения в преломляющих структурах методом Монте-Карло на суперкомпьютере СКИФ БГУ. Программа генерирует большое число лучей от источника в преломляющую структуру. По законам геометрической оптики выполняется расчет траектории луча, определяется путь луча в веществе линзы и поглощение луча вдоль траектории. Результаты расчета многих лучей сохраняются в динамический массив, что позволяет при заданных параметрах источника и преломляющей линзы восстанавливать распределение поля в произвольном сечении за линзой. Установлено, что увеличение числа процессоров ведет к пропорциональному уменьшению времени расчетов: при расчете 10^8 лучей и числа процессоров от 1 до 30 время выполнения программы уменьшилось с 3 часов до 6 минут. С использованием разработанного программного обеспечения были рассчитаны распределения интенсивности излучения в преломляющей рентгеновской линзе для 10° лучей. Полученные данные позволяют восстанавливать распределение поля сформированного линзой с разрешением 1мкм.

Введение

Применением мощных вычислительных машин и их комплексов позволяют моделировать и решать научно-технические задачи, которые, в одних случаях, оставались не исследованы из-за сложности и дороговизны экспериментальных установок, а в других, из-за отсутствия возможности проведения экспериментальных исследований обусловленных масштабностью пространства параметров системы: сверхмалые или сверхбольшие геометрические размеры объектов и систем, сверхкороткими или сверхдлинными характерными временами процессов, сверхбольшим количеством изменяемых параметров системы и т.д. Применение численных экспериментов позволяет эффективно решать задачи оптимизации, моделировать поведение сложных систем и предсказывать результаты реальных экспериментов на основе построения физико-математической модели объектов, процессов и систем. Высокопроизводительные вычислительные системы применяются в машиностроении, в химической и фармацевтической, аэрокосмической и электронной промышленности. Расчеты применяют при создании новых материалов, поиске лекарственных средств, разработке нанотехнологий, оптимизации управления сложными системами и др. [1]

Прогресс в создании производительных вычислительных устройств описывается законом Мура, в соответствии с которым, производительность техники удваивается каждые 1,5-2 года. Рост производительности техники достигается технологическим уменьшением линейных размеров транзисторов и увеличением числа процессоров в вычислительной машине. Однако увеличение количества процессоров не влечет за собой пропорционального увеличения производительности программ, работающих по законам линейного программирования. Для решения ресурсоемких задач применяется параллельное про-

граммирование, способное задействовать большое количество процессоров, вычислительных машин и комплексов на их основе. К технологиям параллельных вычислений можно отнести применение: облачных вычислений, суперкомпьютеров, кластеров.

Четыре основных направления развития облачных вычислений являются Internet-сервисы: IaaS (Infrastructure as a Service), PaaS (Platform as a Service) и SaaS (software as a Service). Данные сервисы предоставляют пользователям системы хранения и программное обеспечение посредством веб-браузера.

Суперкомпьютер — вычислительная машина, представляющая собой большое число высокопроизводительных серверных компьютеров, соединённых друг с другом локальной высокоскоростной магистралью. На ноябрь 2012 года максимальная производительность суперкомпьютеров превысила 10 PFlop/s. Самые производительные суперкомпьютеры находятся в США, Японии, Германии, Китае. [2] Самыми производительными отечественными суперкомпьютерами являются СКИФ-ОИГИ и СКИФ-ГРИД с производительностью 4-6 TFlop/s. [3,4]

Кластер — это группа компьютеров, которые работают вместе и составляют единый унифицированный вычислительный ресурс. Хотя кластер и состоит из множества машин, операционных систем и приложений, пользователи используют его как единую систему [5]. Объединение в кластеры позволяет создавать высокопроизводительные и надежные системы с использованием стандартных структурных компонентов. Распространенность вычислительных машин и развитая инфраструктура сетей интернет делают возможным создание огромных кластеров для решения сверхсложных многопараметрических задач.

Преломляющая рентгеновская оптика

Преломляющая рентгеновская оптика явля-

ется перспективной основой для создания методов неразрушающего контроля в жестком рентгеновском диапазоне (энергия фотонов более 5 кэВ, длина волны менее 1А). Возможности преломляющей оптики, экспериментально продемонстрированные в 1996 году [6], позволяют надеяться на создание эффективных преломляющих линз, имеющих фокусное расстояние менее 1см, радиус более 1 мм и пропускание порядка 10% в диапазоне энергий фотонов 5-150кэВ. В настоящее время, основные усилия направлены на увеличение пропускания и оптической силы преломляющей линзы. Современная преломляющая линза содержит более 1000 преломляющих поверхностей распределенных в объеме вещества. Основные экспериментальные исследования ведутся на уникальных синхротронах третьего поколения (ESRF, SPring-8, APS) характеризующихся мощным квазимонохроматичным пучком рентгеновского излучения в диапазоне энергий фотонов 5-150кэВ. Экспериментальные исследования с использованием синхротронного излучения являются дорогостоящими, что делает численный эксперимент и численные расчеты параметров преломляющих структур актуальной задачей.

Расчеты для рентгенооптических систем ведутся в приближении геометрической оптики (длина волны существенно меньше линейных размеров системы), справедливость такого подхода подтверждается многочисленными экспериментальными результатами [7]. В данной работе рассматриваются возможности моделирования распространения рентгеновского излучения в преломляющих структурах методом Монте-Карло на суперкомпьютере СКИФ для решения задач проектирования и оптимизации параметров рентгеновских преломляющих линз.

Программа «Xray-SKIF»

Программа «Xray-SKIF», предназначенная для моделирования распределения интенсивности излучения в многоэлементных преломляющих линзах, написана на языке программирования C++. Для распараллеливания программы применяется интерфейс MPI, библиотека MPICH2. Запуск и выполнение программы производились в БГУ на суперкомпьютере СКИФ-K1000-2 [6]. Пиковая производительность СКИФ-K1000-2 2534,4 Гфлопс, количество узлов 288, тип процессора- Opteron 2,8 ГГц.

Программа на основе начальных данных (параметры преломляющей линзы, характеристики источника и детектора) генерирует большой массив рентгеновских лучей. По законам геометрической оптики выполняется расчет траектории луча и поглощение интенсивности луча вдоль траектории луча. Результаты расчета многих лучей сохраняются в динамический массив, что позволяет при заданных источнике и преломляющей линзе восстанавливать распределение поля в произвольном сечении за линзой.

Структура расчета содержит программную часть управляющей программы и программы для совокупности процессоров суперкомпьютера. Каждый процессор рассчитывает свой уникальный

набор сгенерированных лучей и по запросу передает распределение интенсивности в управляющую программу. Центральная программа суммирует результаты из каждого процессора и формирует конечный результат.

Для анализа эффективности параллельных вычислений данной программы применялась функция библиотеки MPICH2 MPI_Wtime(), позволяющая определить время выполнения основных частей программы, а также обнаружить код вызывающий замедление работы.

Было произведено большое количество запусков программы «Xray-SKIF», количество лучей менялось от 10^3 до 10^9 , а процессоров – от 1 до 30 (рис. 1, 2).

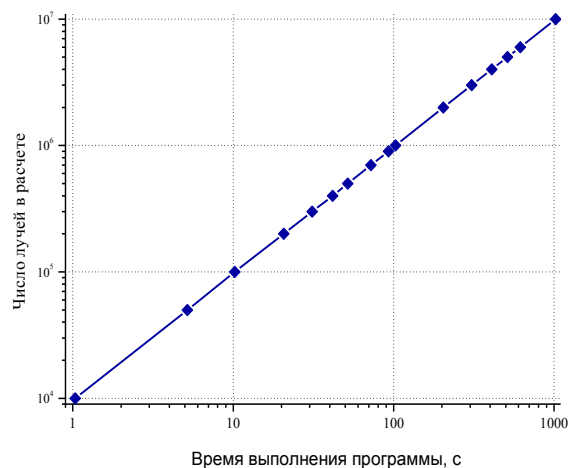


Рис. 1. Зависимость времени от количества лучей на одном процессоре

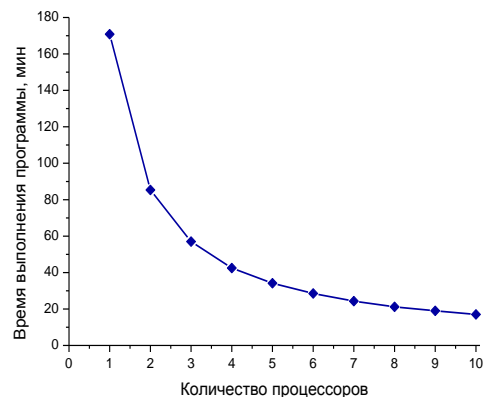


Рис. 2. Зависимость времени выполнения программы от количества процессоров при количестве лучей 10^8

Зависимость времени расчета от количества лучей имеет линейную форму, а зависимость количества лучей от числа процессоров – гиперболическую, что говорит об эффективности применения параллельных алгоритмов расчета, позволяет оценивать время расчета и определять оптимальное соотношение количество лучей к числу процессоров. Анализировалось количество лучей необходимых для построения распределения интенсивности на детекторе. Статистические

оценки и расчеты показывают, что для построения гладких распределений требуется порядка 10^3 лучей на отдельную ячейку детектора.

При радиусе линзы порядка 100 мкм и разрешении детектора 1 мкм требуется генерировать и рассчитывать порядка 10^9 лучей для получения статистически достоверных распределений интенсивности рентгеновского излучения в области фокусного пятна. Результаты расчета для преломляющей линзы для 10^9 лучей показаны на рис. 3.

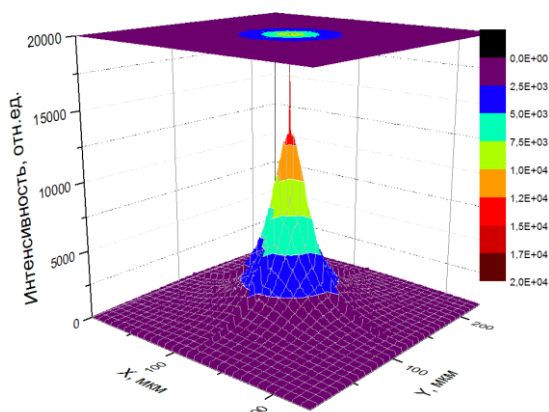


Рис. 3. Распределение интенсивность рентгеновского излучения сформированного программой «Xray-SKIF», количество лучей 10^9

Начальная интенсивность отдельного луча равна 1. Как видно из рисунка, фоновое распределение интенсивности содержит порядка 10^3 единиц интенсивности, что с учетом поглощения соответствует более чем 10^4 лучей в отдельной ячейке распределения. Пик содержит порядка 10^4 - 10^5 единиц интенсивности или 10^6 - 10^7 лучей на ячейку, что объясняется эффектом фокусировки. Увеличение разрешения в нанометровом диапазоне возможно лишь при уменьшении ли-

нейных размеров детектора. Для выполнения расчетов с когерентным разрешением требуется выполнять расчет для ячейки детектора размером $\lambda/10$, что по оценкам требует расчета порядка 10^{15} - 10^{17} лучей на выходе преломляющей линзы радиусом 100 мкм.

Заключение

Установлено, что увеличение числа процессоров ведет к пропорциональному уменьшению времени расчетов: при расчете 10^8 лучей и числа процессоров от 1 до 30 время выполнения программы уменьшилось с 3 часов до 6 минут. С использованием разработанного ПО были рассчитаны распределения интенсивности излучения в преломляющей рентгеновской линзе в приближении геометрической оптики для 10^9 лучей. Полученные данные позволяют восстанавливать распределение поля сформированного линзой с разрешением 1 мкм. Можно ожидать, что применения суперкомпьютера с характеристикой 10 PFlop/s позволит выполнить расчеты поля для 10^{13} лучей и выше с разрешением 10 нм.

Список литературы

1. Суперкомпьютерные технологии в науке, образовании и промышленности / под ред. акад. В.А. Садовниченко, акад. Г.И. Савина, чл.-корр. РАН Вл.В. Воеводина. – М.: Изд-во МГУ, 2009. – 232 с.
2. TOP500 Supercomputing Sites [Электронный ресурс]. – <http://www.top500.org>
3. SKIF ОИПИ НАН Беларуси [Электронный ресурс]. – <http://uiip.bas-net.by>
4. Суперкомпьютерные конфигурации SKIF / С.В. Абламейко [и др.]. – Минск: ОИПИ НАН Беларуси, 2005. – 170 с.
5. Объединение серверов в кластеры [Электронный ресурс]. – <http://n-t.ru/tp/ts/os.htm>
6. Snigirev A., Kohn V., Snigireva I. and Lengeler B. // Nature (London). -1996. - 384.- P.49.
7. Dudchik Yu.I., Kolchevsky N.N. // Nucl.Instrum. Meth. A.-1999.- Vol. 421.

SIMULATION OF X-RAYS IN REFRACTIVE STRUCTURE BY THE MONTE CARLO METHOD USING THE SUPERCOMPUTER SKIF

Y.R. Jaskevich, O.I. Kravchenko, I.I. Soroka, A.G. Chembrovsky, A.S. Kolesnik, N.V. Serikova,
P.V. Petrov, N.N. Kolchevsky¹⁾
Belarusian State University, kolchevsky@bsu.by

Software «Xray-SKIF» for the simulation of the X-rays in refractive structures by the Monte-Carlo method using the supercomputer SKIF BSU are developed. The program generates a large number of rays propagated from a source to the refractive structure. The ray trajectory under assumption of geometrical optics is calculated. Absorption is calculated for each ray inside of refractive structure. Dynamic arrays are used for results of calculation rays parameters, its restore the X-ray field distributions very fast at different position of detector. It was found that increasing the number of processors leads to proportional decreasing of calculation time: simulation of 10^8 X-rays using supercomputer with the number of processors from 1 to 30 run-times equal 3 hours and 6 minutes, respectively. 10^9 X-rays are calculated by software «Xray-SKIF» which allows to reconstruct the X-ray field after refractive structure with a special resolution of 1 micron.