

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕНТГЕНОВСКОЙ ОПТИКИ НА СУПЕРКОМПЬЮТЕРЕ СКИФ-БГУ

Ю. Р. Яскевич, О. И. Кравченко, И. Л. Мудрецов, И. И. Сороко,
Н. Н. Кольчевский, П. В. Петров, Н. В. Серикова

Белорусский государственный университет, Минск
E-mail: kolchevsky@bsu.by

Основными проблемами при создании рентгенооптических систем и элементов является: сложность их изготовления и недолговечность многих конструкций. Большое количество разнообразных конструкций линз показывают, что работы направлены на создание преломляющих линз и их оптимизация является важной задачей.

Программа «Xray-SKIF» предназначена для моделирования распределения интенсивности излучения в многоэлементных преломляющих линзах. За основу для моделирования взяты микрокапиллярные преломляющие линзы [1] и адиабатические линзы [2]. Программа «Xray-SKIF» написана на языке программирования C++. Для распараллеливания программы применялся интерфейс MPI, в частности библиотека MPICH2. Запуск и выполнение программы производились удаленно, из локальной сети БГУ, на суперкомпьютере СКИФ-БГУ. СКИФ-БГУ имеет следующие характеристики:

- Пиковая производительность, Гфлопс – 1267,2;
- Реальная производительность, Гфлопс – 1016;
- Число вычислительных узлов/процессоров – 144/288;
- Тип процессоров – AMD Opteron 248 (2.2 ГГц);
- Оперативная память на узле, 4 Гб.

Процесс работы программы «Xray-SKIF» состоит из 3 этапов:

- Инициализация используемых процессоров и выделение памяти для хранения результатов;
- Задание начальных данных (количество линз, коэффициент поглощения материала линзы, количество лучей, габариты линзы);
- Расчет лучей прошедших через составную линзу и сохранение выходных векторов и интенсивностей в динамический массив;
- Расчет распределения интенсивности на экране параметры которого задаются динамически.

Наибольшее время затрачивается на расчеты массива векторов рентгеновских лучей. Время построения распределения интенсивности занимает несколько секунд для количества лучей более 10^8 . Количество лучей, используемое в расчетах, варьировалось от 10^3 до 10^8 , количество процессоров – от 1 до 30. На основе полученных данных были

построены графики зависимости времени от количества лучей (рис 1, а) и зависимости времени от количества процессоров (рис 1, б). Зависимость времени расчета от количества лучей является линейной, а зависимость количества лучей от числа процессоров – гиперболической, что говорит об эффективности применения параллельных алгоритмов расчета и позволяет заранее оценить время расчета заданного количества лучей.

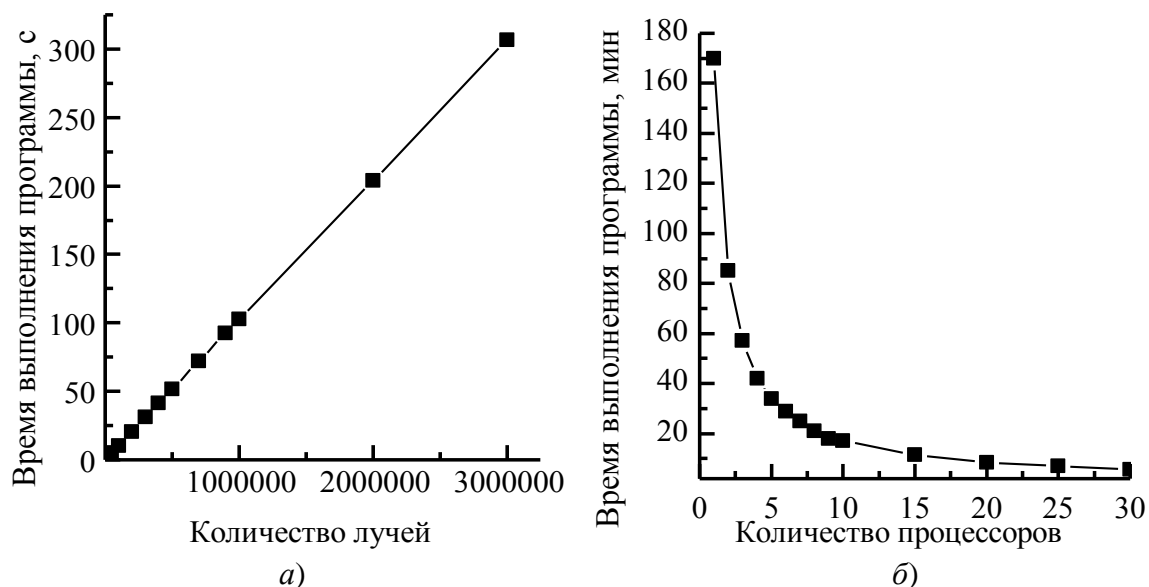


Рис. 1. Зависимость времени: а) от количества лучей на одном процессоре, б) от количества процессоров при количестве лучей равном 10^8

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 разработанной параллельной программы «Xray-SKIF» были рассчитаны распределения интенсивности излучения в преломляющей рентгеновской линзе в приближении геометрической оптики для 10^8 лучей. Полученные данные позволяют восстанавливать распределение поля рентгеновской составной линзы на детекторе с разрешением 10нм. Можно ожидать, что применения суперкомпьютера с характеристикой производительности 10 PFlop/s программа «Xray-SKIF» позволит выполнить расчеты поля для 10^{13} лучей, что соответствует разрешению 0.1А.

1. *Dudchik Yu. I. and Kolchevsky N. N.*// Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 1998. vol. A 421. P. 361.
2. *Schroer C. G., Lengeler B.* // Phys. Rev. Lett. 2005. P.94, 054802.