

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАСС-СПЕКТРОМЕТРА НА ОСНОВЕ МЕТОДА РАЗДЕЛЕНИЯ ОБЛАСТИ

А.В. Позднеев

ВВЕДЕНИЕ

Работа посвящена численному моделированию экспериментов по измерению масс, проводимых при помощи масс-спектрометра ионного циклотронного резонанса с преобразованием Фурье (Fourier transform ion cyclotron resonance, FTICR) [1]. Целью является нахождение траекторий ионов и вычисление масс-спектра. Измерение массы в FTICR масс-спектрометре основано на явлении циклотронного резонанса и применении формулы для лармовской частоты

$$\omega_c = \frac{qB}{m}.$$

Разрешающая способность прибора определяется временем, в течение которого осуществляется детектирование. Это значит, что для моделирования реального эксперимента нужно выполнить миллионы шагов интегрирования уравнений движения (в действительности численный код должен позволять моделировать еще большие временные интервалы, что необходимо для проектирования новых инструментов). Кроме того, нужно уметь рассчитывать электрические поля при сложных конфигурациях электродов и учитывать кулоновское ион-ионное взаимодействие и влияние зарядов, индуцированных на стенках ионной ловушки.

В данной работе предлагается применить подход «частиц в ячейке» для расчета кулоновского взаимодействия частиц, при этом полевые уравнения решаются с помощью метода конечных элементов, а распараллеливание процедуры решения уравнения Пуассона осуществляется на основе метода разделения области FETI-DP.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Движение p -го иона с зарядом q_p и массой m_p в магнитном поле \mathbf{B} определяется действием силы Лоренца:

$$\begin{cases} m_p \dot{\mathbf{v}}_p = q_p \mathbf{E}(\mathbf{r}_p, t) + q_p [\mathbf{v}_p \times \mathbf{B}], \\ \dot{\mathbf{r}}_p = \mathbf{v}_p, \end{cases}$$

где $\mathbf{r}_p = \{x_p, y_p, z_p\}$ — радиус-вектор p -го иона, \mathbf{v}_p — его скорость, и электрическое поле $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ определяется потенциалом $\Phi^{\text{tr}}(\mathbf{r})$ удерживающего поля ловушки, потенциалом $\Phi^{\text{rf}}(\mathbf{r}, t)$ радиочастотного возбуждающего поля и потенциалом $\Phi^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t)$ кулоновского поля:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla \Phi(\mathbf{r}, t) = -\nabla \left(\Phi^{\text{tr}}(\mathbf{r}) + \Phi^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t) + \Phi^{\text{rf}}(\mathbf{r}, t) \right).$$

Удерживающее поле возникает за счет приложения постоянного потенциала V^{tr} к торцевым электродам, возбуждающее поле определяется потенциалами $\pm V^{\text{rf}} \cos \gamma t$, приложенными к противоположным продольным пластинам. Кулоновское поле создается ионами анализируемого вещества и зарядами, которые они индуцируют на стенках ловушки:

$$\Phi^{\text{cl}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{p=1}^{N_p} \frac{q_p}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_p(t)|} + \Phi^{\text{wall}}(\mathbf{r}, t).$$

Здесь N_p — общее число частиц, $\Phi^{\text{wall}}(\mathbf{r}, t)$ — потенциал поля индуцированных зарядов, $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м — электрическая постоянная. Если ввести пространственную плотность $\rho(\mathbf{r}, t)$ заряда и учесть, что потенциалы $\Phi^{\text{tr}}(\mathbf{r})$ и $\Phi^{\text{rf}}(\mathbf{r}, t)$ удовлетворяют уравнению Лапласа, то потенциал $\Phi(\mathbf{r}, t)$ поля внутри ловушки можно искать как решение первой краевой задачи для уравнения Пуассона с неоднородными граничными условиями:

$$\begin{cases} \Delta \Phi = -\rho / \epsilon_0, \\ \Phi |_{trapping\ electrodes} = V^{tr}, \\ \Phi |_{excitation\ electrodes} = \pm V^{rf} \cos \gamma t, \\ \Phi |_{other\ electrodes} = 0. \end{cases}$$

Математическая постановка задачи сводится к интегрированию уравнений движения ионов и вычислению заряда, индуцированного на детектирующих пластинах.

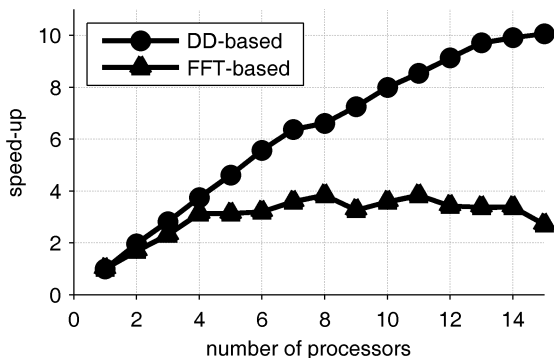
МЕТОД РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ

Для решения поставленной задачи был выбран метод «частиц в ячейке»: уравнения движения решаются в непрерывном фазовом пространстве, а поля вычисляются с помощью метода конечных элементов на введенной в области сетке. Потенциалы и силы, действующие на ионы, находятся посредством интерполяции по массиву сеточных значений; сеточная плотность заряда находится взвешиванием частиц на сетке. Для интегрирования уравнений движения применяется центрированная по времени разностная схема Бунемана с коррекцией циклотронной частоты. Разделение быстрого циклотронного движения и медленного дрейфа в электрическом поле проводится по алгоритму, предложенному Борисом [2]. Подробное изложение подхода к решению задачи было изложено ранее [3].

Для ускорения решения уравнения Пуассона был использован метод декомпозиции области FETI-DP [4]: область разбивается на конечное число непересекающихся подобластей, для выполнения условий сопряжения на границах вводятся множители Лагранжа, относительно них задача решается итерационно методом сопряженных градиентов, а для решения соответствующих локальных задач на каждой итерации применяется прямой метод.

ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Было проведено сравнение производительности разработанного кода с предложенным ранее подходом на основе быстрого преобразования Фурье (БПФ) [3]. Вычисления проводились на сетке, состоящей из 10^6 узлов, на симметричном мультипроцессоре IBM pSeries 690 Regatta (ВМК МГУ). Из приведенного рисунка видно, что даже на системе с общей памятью метод, основанный на БПФ, проигрывает в масштабируемости алгоритму FETI-DP. При этом сфера применения БПФ ограничена задачами с прямоугольной геометрией ловушек, а FETI-DP пригоден для произвольной конфигурации электродов.



ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработан параллельный трехмерный код, с помощью которого становится возможным моделировать полномасштабный физический эксперимент по измерению масс. Одновременное применение метода «частиц в ячейке», метода конечных элементов и техники декомпозиции области позволяет моделировать широкий класс устройств за приемлемое время. Дальнейшие исследования будут посвящены адаптации кода для запуска на системе IBM Blue Gene/P (ВМК МГУ; в процессе установки).

Работа выполнена в рамках проектов РФФИ 08-07-12081-офи, 08-07-00445-а, 08-01-00721-а.

ЛИТЕРАТУРА:

1. A.G. Marshall, C.L. Hendrickson, G.S. Jackson «Fourier transform ion cyclotron resonance mass spectrometry: a primer» // Mass Spectrom. Rev. — 1998. — 17. — с. 1-35.
2. Р. Хокни, Дж. Иствуд Численное моделирование методом частиц. — М.: Мир. — 1987.

3. Nikolaev E.N., Heeren R.M.A., Popov A.M., Pozdnev A.V., Chingin K.S. «Realistic modeling of ion cloud motion in a Fourier transform ion cyclotron resonance cell by use of a particle-in-cell approach» // Rapid Commun. in Mass Spectrom. — 2007. — 21(22). — с. 3527-3546.
4. А.В. Позднеев, Н.Н. Попова, В.Ю. Воронов, М.А. Медведев Труды Всероссийской научной конференции «Научный сервис в сети Интернет», Новороссийск, 24-29 сентября 2007. — М.: МГУ. — с. 209-212.