

**Technická univerzita v Košiciach
Fakulta elektrotechniky a informatiky**

**Implementácia nových modelov do systému
COR**

Diplomová práca

2024

Bc. Ján Villim

**Technická univerzita v Košiciach
Fakulta elektrotechniky a informatiky**

**Implementácia nových modelov do systému
COR**

Diplomová práca

Študijný program: Informatika
Študijný odbor: 9.2.1. Informatika
Školiace pracovisko: Katedra počítačov a informatiky (KPI)
Školiteľ: Ing. Daniel Gecášek, PhD.
Konzultant: RNDr. Pavol Bobík, PhD.

Košice 2024

Bc. Ján Villim

Abstrakt v SJ

V tejto diplomovej práci sa zaoberáme refaktorizáciou a rozšírením existujúcej implementácie kódu v jazyku C pre simuláciu trajektórií častíc kozmického žiarenia v magnetosfére Zeme. Refaktorizácia spočívala v úprave kódu trasovania častice a zavedení jednotného rozhrania pre kód modelov geomagnetického poľa. Následne sme novú verziu kódu simulácie rozšírili o historické modely geomagnetického poľa a model externého geomagnetického poľa Tsyganenko (1996). Súčasťou práce bolo pridanie výpočtu krustálneho (litosférického) geomagnetického poľa modelom CHAOS-7. Ďalej sme skúmali vplyv krustálneho poľa na výsledky simulácie. Okrem pridania nových modelov geomagnetického poľa bola simulácia rozšírená o mód výpočtu individuálnej trajektórie častice a výpočet magnetickej indukcie geomagnetického poľa na sieti bodov. Časť práce sa venovala aj optimalizácii výpočtov. Optimalizácia bola predovšetkým zameraná na moduly implementované v rámci tejto záverečnej práce. V neposlednom rade boli overené výsledky všetkých módov simulácií v ich porovnaní s referenčnými výsledkami.

Kľúčové slová v SJ

kozmicke žiarenie, modely geomagnetického poľa, trajektórie, refaktorizácia, optimalizácia, COR

Abstrakt v AJ

In this thesis, we focus on refactoring and extending an existing C code implementation for simulating particle trajectories of cosmic radiation in the Earth's magnetosphere. Refactoring involved modifying the particle tracing code and introducing a unified interface for the geomagnetic field model code. Subsequently, we extended the new simulation code version by incorporating historical geomagnetic field models and the Tsyganenko (1996) external geomagnetic field model. We also drew attention on adding computation of crustal (lithospheric) geomagnetic field using the CHAOS-7 model. Furthermore, we investigated the influence of the crustal field on simulation results. In addition to incorporating new geomagnetic field models, the simulation was extended to include a mode for computing individual particle trajectories and calculating the magnetic induction of the geomagnetic field at a net of points. Part of the work was dedicated to code optimizations, primarily focusing on modules implemented within this thesis. Lastly, the results of all simulation modes were validated by comparing them with reference results.

Klíčové slová v AJ

cosmic rays, geomagnetic field models, trajectories, refactorization, optimization, COR

Bibliografická citácia

VILLIM, Ján. *Implementácia nových modelov do systému COR*. Košice: Technická univerzita v Košiciach, Fakulta elektrotechniky a informatiky, 2024. 96s. Vedúci práce: Ing. Daniel Gecášek, PhD.

TECHNICKÁ UNIVERZITA V KOŠICIACH
FAKULTA ELEKTROTECHNIKY A INFORMATIKY
Katedra počítačov a informatiky

**ZADANIE
DIPLOMOVEJ PRÁCE**

Študijný odbor: **Informatika**

Študijný program: **Informatika**

Názov práce:

Implementácia nových modelov do systému COR
Implementation of New Models into the COR System

Študent: **Bc. Ján Villim**

Školiteľ: **Ing. Daniel Gecášek, PhD.**

Školiace pracovisko: **Katedra počítačov a informatiky**

Konzultant práce: **RNDr. Pavol Bobík, PhD.**

Pracovisko konzultanta:

Pokyny na vypracovanie diplomovej práce:

1. Oboznámiť sa so vzťahmi medzi simulačnými modelmi systému COR a so základmi teórie pohybu častíc kozmického žiarenia v magnetosfére a geomagnetického poľa.
2. Pripraviť kód na jednoduché pridávanie nových modelov vytvorením jednotného rozhrania a pridanie existujúcich modelov využitím pripraveného rozhrania.
3. Prepísať model Tsyganenko (1996) z jazyka Fortran do jazyka C, optimalizovať novú implementáciu a integrovať ju do kódu.
4. Implementovať model na výpočet magnetickej indukcie litosférického geomagnetického poľa do kódu využitím vhodného algoritmu.
5. Overiť výsledky nových implementácií modelov porovnaním výsledkov s referenčnými výsledkami.
6. Vypracovať dokumentáciu podľa požiadaviek vedúceho práce.

Jazyk, v ktorom sa práca vypracuje: slovenský

Termín pre odovzdanie práce: 19.04.2024

Dátum zadania diplomovej práce: 31.10.2023



N. Z. Pukrová
.....
prof. Ing. Liberios Vokorokos, PhD.
dekan fakulty

Čestné vyhlásenie

Vyhlasujem, že som záverečnú prácu vypracoval samostatne s použitím uvedenej odbornej literatúry.

Košice, 19.4.2024

.....

Vlastnoručný podpis

Podakovanie

Za odborné vedenie a usmernenia, ktoré mi pomohli pri písaní diplomovej práce patrí podakovanie vedúcemu diplomovej práce Ing. Danielovi Gecášekovi, PhD. Za cenné rady a odborné informácie sa chcem poďakovať RNDr. Pavlovi Bobíkovi, PhD.

Podakovanie patrí aj firme Hicoria Hosting s. r. o. Rtyň v Podkrkonoší za sponzorské poskytnutie zdrojov pre kontrolné výpočty trajektórií kozmického žiarenia v rámci práce.

Za osobnú podporu a povzbudenie by som chcel vyjadriť úprimné poďakovanie mojej priateľke Andrei, ktorá mi bola oporou počas celého priebehu tvorby tejto práce.

Obsah

Úvod	1
1 Analýza systému COR	4
1.1 Simulácie v systéme COR	4
1.2 Modely výpočtov realizovaných v systéme	7
1.3 Softvérová architektúra modelov simulácie	8
1.3.1 Opis modulov C verzie	8
1.3.2 Opis kompilácie a spustenia	9
1.4 Opis podobných existujúcich riešení	10
1.4.1 MAGNETOCOSMIC	10
1.4.2 OTSO	11
1.4.3 Ďalšie riešenia	12
1.5 Nedostatky aktuálneho riešenia	13
2 Doterajšie metódy optimalizácie simulácie	15
2.1 Zhrnutie optimalizačných prístupov	15
2.2 Odhad chyby výpočtov v kontexte optimalizácie	16
3 Modely krustálneho geomagnetického poľa	20
3.1 Modely MF	21
3.2 Model LCS-1 a CHAOS-7	22
3.3 Aktuálny stav a možnosti implementácie výpočtu krustálneho geomagnetického poľa	23
3.4 Overenie výpočtov existujúcej implementácie	25
4 Návrh rozšírení a optimalizácie simulácie	32
4.1 Pridanie historických modelov	33
4.2 Prepis modelu Tsyganenko 1996	34
4.3 Pridanie výpočtu krustálneho poľa	35
4.4 Pridanie ďalších módov simulácie	35

4.4.1	Výpočet individuálnej trajektórie	36
4.4.2	Výpočet geomagnetického poľa	37
4.5	Spôsob špecifikácie volieb pri spustení výpočtu	39
4.6	Návrh optimalizácie simulácie	41
5	Implementácia a optimalizácia geomagnetických modelov a nových výpočtových módov	44
5.1	Refaktorizácia kódu simulácie v jazyku C	44
5.2	Úprava argumentov príkazového riadku pri spustení	49
5.3	Rozšírenie simulácie o historické modely	52
5.4	Prepis modelu T96 do jazyka C a jeho integrácia do kódu simulácie	54
5.5	Implementácia modelu CHAOS-7	55
5.6	Implementácia výpočtu individuálnej trajektórie častice kozmického žiarenia	57
5.7	Implementácia výpočtu geomagnetického poľa na sieti bodov	58
5.8	Optimalizácia simulácie	61
5.8.1	Profilácia kódu modelu T96	61
5.8.2	Implementácia optimalizácií	61
6	Vyhodnotenie a overenie správnosti implementácie rozšírení simulácie	64
6.1	Overenie správnosti simulácie s modelmi externého geomagnetického poľa TS05 a T96	65
6.2	Overenie správnosti simulácie s historickými modelmi geomagnetického poľa	67
6.3	Overenie správnosti implementácie modelu CHAOS-7	68
6.3.1	Realizácia kontrolných výpočtov	69
6.3.2	Vyhodnotenie kontrolných výpočtov	70
6.4	Overenie správnosti výpočtu individuálnej trajektórie častice a magnetického poľa	79
7	Vyhodnotenie optimalizácií	82
7.1	Prínos refaktorizácie kódu v súvislosti s rýchlosťou výpočtu	83
7.2	Výpočet odrezávacích rigidít s modelmi geomagnetického poľa IGRF a TS05	84
7.3	Výpočet odrezávacích rigidít s modelmi geomagnetického poľa IGRF a T96	86
7.4	Výpočet geomagnetického poľa modelom CHAOS-7	87
8	Záver	90

Literatúra	93
Zoznam skratiek	97
Slovník	99
Zoznam príloh	100
A Používateľská príručka programu pre simuláciu trajektórií častíc kozmického žiarenia	101
A.1 Zostavenie simulačného programu	102
A.2 Spustenie simulačného programu	104
A.3 Múd výpočtu odrezávacích rigidít	105
A.4 Múd výpočtu individuálnej trajektórie	107
A.5 Múd výpočtu magnetickej indukcie geomagnetického poľa na sieti bodov	109
A.6 Zoznam chybových správ programu	111

Zoznam obrázkov

1.1	Vizualizácia zakázanej trajektórie zo systému COR	5
1.2	Vizualizácia dovolenej trajektórie zo systému COR	6
1.3	Diagram zobrazujúci závislosti modulov aktuálnej implementácie simulácie v jazyku C	9
1.4	Princíp prepojenia jazykov Python a Fortran nástrojom <i>F2PY</i>	12
1.5	Ukážka webového rozhrania nástroja Cutoff2050	13
2.1	Výsledky merania odchýlky Larmorovského polomeru pri výpočte trajektórie (prebraté zo záverečnej práce [7])	18
2.2	Výsledky merania odchýlky Larmorovského polomeru pri výpočte trajektórie za použitia GCC prepínača <i>-march=native</i> (prebraté z [7])	18
2.3	Závislosť veľkosti kroku rigidity na geomagnetickom poli pre dosiahnutie 1 % chyby výpočtu efektívnej odrezávacej rigidity (prebraté z [26])	19
3.1	Ukážka výpočtu zložky θ vektora geomagnetického poľa v bode (r, θ, ϕ) prostredníctvom výpočtu magnetického potenciálu susedných bodov.	23
3.2	Percentuálny rozdiel vypočítaných hodnôt vertikálnej zložky vektora krustálneho geomagnetického poľa modelom <i>MF4</i> oproti referenčným hodnotám vo výške 58 km	27
3.3	Percentuálny rozdiel vypočítaných hodnôt vertikálnej zložky vektora krustálneho geomagnetického poľa modelom <i>MF4</i> oproti referenčným hodnotám vo výške 400 km	27
3.4	Percentuálny rozdiel vypočítaných hodnôt veľkosti vektora interného geomagnetického poľa modelom IGRF oproti referenčným hodnotám vypočítaným prostredníctvom implementácie <i>pyIGRF</i> na povrchu Zeme	28

3.5	Percentuálny rozdiel vypočítaného krustálneho geomagnetického poľa modelom CHAOS-7.16 oproti referenčným hodnotám poľa vypočítaným prostredníctvom knižnice <i>ChaosMagPy</i> na povrchu Zeme (rád 185)	30
3.6	Vizualizácia krustálneho geomagnetického poľa modelom CHAOS-7.16 s maximálnym rádom výpočtu 85	30
3.7	Vizualizácia krustálneho geomagnetického poľa modelom CHAOS-7.16 s maximálnym rádom výpočtu 185	31
4.1	Diagram zobrazujúci jednotné rozhranie modelov geomagnetického poľa	32
4.2	Hierarchia polí smerníkov 9. až 13. generácie koeficientov modelu IGRF (prebraté z [7])	34
4.3	Vývojový diagram algoritmu trasovania častice s vyznačenými úpravami pre výpočet individuálnej trajektórie	38
4.4	Vývojový diagram algoritmu pre výpočet geomagnetického poľa na sieti bodov	39
5.1	Prevody medzi systémami súradníc pri výpočte krustálneho geomagnetického poľa	57
5.2	Vývojový diagram znázorňujúci logiku spustenia módu výpočtu simulácie v závislosti od používateľom špecifikovanej voľby <i>-m</i>	59
5.3	Graf volaní funkcií modelu externého geomagnetického poľa T96	62
6.1	Vizualizácia dovolených a zakázaných rigidít vypočítaných s modelmi geomagnetického poľa IGRF a TS05 (Súradnice: 48,66°N 20,53°E, Dátum: 28.3.1980, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,01$ GV)	65
6.2	Vizualizácia dovolených a zakázaných rigidít vypočítaných refaktorizovanou verziou simulácie s modelmi geomagnetického poľa IGRF a TS05 (Súradnice: 48,66°N 20,53°E, Dátum: 28.3.1980, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,01$ GV)	66
6.3	Vizualizácia dovolených a zakázaných rigidít vypočítaných Fortran verziou simulácie s modelmi geomagnetického poľa IGRF a T96 (Súradnice: 48,66°N 20,53°E, Dátum: 28.3.1980, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,01$ GV)	66
6.4	Vizualizácia dovolených a zakázaných rigidít vypočítaných refaktorizovanou verziou simulácie s modelmi geomagnetického poľa IGRF a T96 (Súradnice: 48,66°N 20,53°E, Dátum: 28.3.1980, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,01$ GV)	66

6.5	Vizualizácia dovolených a zakázaných rigidít vypočítaných pôvodnou (Fortran) verziou simulácie s historickým modelom geomagnetického poľa <i>Historical (0-1968 CE)</i> (Súradnice: 48,66°N 20,53°E, Dátum: 28.3.1000, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,01$ GV)	67
6.6	Vizualizácia dovolených a zakázaných rigidít vypočítaných refaktorizovanou verziou simulácie s historickým modelom geomagnetického poľa <i>Historical (0-1968 CE)</i> (Súradnice: 48,66°N 20,53°E, Dátum: 28.3.1000, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,01$ GV)	67
6.7	Komunikácia medzi klientom a serverom v systéme pre distribúciu výpočtov	70
6.8	Vizualizácia krustálneho geomagnetického poľa vypočítaného C implementáciou kódu pre výpočet geomagnetického poľa s modelom CHAOS-7.16 pri ráde 185	71
6.9	Závislosť hodnôt pomeru medzi odrezávacími rigiditami vypočítanými v pôsobení geomagnetického poľa vypočítaného modelom IGRF a poľa vypočítaného kombináciou modelov IGRF a CHAOS-7 od zemepisnej šírky (Poludník: 37,66°, Dátum: 28.3.2000, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,01$ GV)	72
6.10	Závislosť hodnôt pomeru medzi odrezávacími rigiditami vypočítanými v pôsobení geomagnetického poľa vypočítaného modelom IGRF a poľa vypočítaného kombináciou modelov IGRF a CHAOS-7 od zemepisnej šírky (Poludník: 0°, Dátum: 28.3.2000, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,01$ GV)	72
6.11	Závislosť hodnôt pomeru medzi odrezávacími rigiditami vypočítanými v pôsobení geomagnetického poľa vypočítaného modelom IGRF a poľa vypočítaného kombináciou modelov IGRF a CHAOS-7 od zemepisnej šírky (Poludník: 37,66°, Dátum: 28.3.2000, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,001$ GV)	73
6.12	Závislosť hodnôt pomeru medzi odrezávacími rigiditami vypočítanými v pôsobení geomagnetického poľa vypočítaného modelom IGRF a poľa vypočítaného kombináciou modelov IGRF a CHAOS-7 od zemepisnej šírky (Poludník: 0°, Dátum: 28.3.2000, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,001$ GV)	73
6.13	Vizualizácia závislosti geomagnetického poľa vypočítaného modelom IGRF a kombináciou modelov IGRF a CHAOS-7 od rastúcej výšky v mieste anomálie Kursk (Súradnice: 51,25°N 37,66°E, Dátum: 28.3.2000, Čas: 16:00)	75

6.14	Vizualizácia závislosti geomagnetického poľa vypočítaného modelom IGRF a kombináciou modelov IGRF a <i>CHAOS-7</i> od rastúcej výšky v mieste so slabým vplyvom krustálneho poľa (Súradnice: 45°N 4°E, Dátum: 28.3.2000, Čas: 16:00)	76
6.15	Závislosť hodnôt pomeru medzi odrezávacími rigiditami vypočítanými v pôsobení geomagnetického poľa vypočítaného modelom IGRF a poľa vypočítaného kombináciou modelov IGRF a <i>CHAOS-7</i> od polomeru (Súradnice: 51,25°N 37,66°E, Dátum: 28.3.2000, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,01$ GV)	77
6.16	Závislosť hodnôt pomeru medzi odrezávacími rigiditami vypočítanými v pôsobení geomagnetického poľa vypočítaného modelom IGRF a poľa vypočítaného kombináciou modelov IGRF a <i>CHAOS-7</i> od polomeru (Súradnice: 51,25°N 37,66°E, Dátum: 28.3.2000, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,001$ GV)	77
6.17	Závislosť hodnôt pomeru medzi odrezávacími rigiditami vypočítanými v pôsobení geomagnetického poľa vypočítaného modelom IGRF a poľa zväčšeného o 1 nT od polomeru (Súradnice: 51,25°N 37,66°E, Dátum: 28.3.2000, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,001$ GV)	78
6.18	Vizualizácia zakázanej trajektórie častice s rigiditou 3,8 GV vypočítanej s modelmi geomagnetického poľa IGRF a TS05 (Fortran verzia)	79
6.19	Vizualizácia zakázanej trajektórie častice s rigiditou 3,8 GV vypočítanej s modelmi geomagnetického poľa IGRF a TS05 (nová C verzia)	80
6.20	Vizualizácia hlavného geomagnetického poľa modelom IGRF pre rok 2020 vypočítaného novou verziou simulačného programu	80
6.21	Vizualizácia hlavného geomagnetického poľa modelom IGRF pre rok 2020 (prebraté z článku [16])	81

Zoznam tabuliek

6.1	Porovnanie časov trvania výpočtu odrezávacích rigidít v kombinácii s rôznymi modelmi geomagnetického poľa (Súradnice: 48,66°N 20,53°E, Dátum: 28.3.2000, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,01$ GV)	69
7.1	Porovnanie rýchlosti výpočtu pôvodnej C verzie simulácie a refaktorizovanej C verzie bez zahrnutia výpočtu geomagnetického poľa .	83
7.2	Porovnanie rýchlostí výpočtu optimalizovaných verzií simulácie s modelmi geomagnetického poľa IGRF a TS05	85
7.3	Porovnanie rýchlostí výpočtu optimalizovaných verzií simulácie s modelom geomagnetického poľa IGRF	86
7.4	Porovnanie rýchlostí výpočtu optimalizovaných verzií simulácie s modelmi geomagnetického poľa IGRF a T96	88
7.5	Porovnanie rýchlostí výpočtu krustálneho geomagnetického poľa modelom <i>CHAOS-7</i> na celej Zemi s rozstupom 1° v zemepisnej šírke a dĺžke	89
7.6	Porovnanie rýchlosti výpočtu pôvodnej a novo implementovanej funkcie pre výpočet geomagnetického poľa na sieti bodov s rozstupom 0,25° na celej Zemi (model IGRF)	89

Úvod

Trajektórie častíc kozmického žiarenia boli predmetom výskumu od polovice 30-tych rokov. Jedným z prvých priekopníkov v oblasti pohybu nabitých častíc v magnetickom poli bol Carl Størmer, ktorý prvýkrát integroval rovnice pohybu častice a svoje zistenia zdokumentoval v publikáciách [1] a [2].

V priebehu desaťročí sa problematika trajektórií častíc kozmického žiarenia ďalej rozvíjala. V 50-tych rokoch bol na Univerzite v Chicagu prvýkrát použitý digitálny počítač AVIDAC pre výpočet trajektórie kozmického žiarenia, ako je uvedené v článku [3], ktorý podrobnejšie dokumentuje históriu tejto problematiky. Príchod novej „digitálnej“ doby rozšíril možnosti výskumu v oblasti výpočtu trajektórií kozmického žiarenia. Avšak aj napriek neustále rastúcemu výpočtovému výkonu počítačov, stále sú zmienené simulácie považované za výpočtovo náročné. S narastajúcim výkonom počítačov sa ďalej vyvíjajú a zdokonaľujú fyzikálne modely geomagnetického poľa Zeme s cieľom čo najpresnejšieho popisu magnetickej topológie Zeme. Benefit vyššej presnosti výpočtov sa však odzrkadľuje na komplikovanejších algoritmoch, a tým na časovo náročnejšej celkovej simulácii.

Pre účely výskumu kozmického žiarenia a jeho vplyvov na naše okolie vzniklo postupom rokov niekoľko softvérových nástrojov, ktorých podstatou je simulácia trajektórií častíc kozmického žiarenia v magnetosfére. Nástroj *GALPROP*¹ [4] slúži na simuláciu pohybu častíc kozmického žiarenia v galaxii, *CORSIKA*², ktorý sa používa pre výpočet spŕšok kozmického žiarenia a mnoho iných. Donedávna neexistoval žiaden aktívne vyvíjaný nástroj pre simuláciu trajektórie kozmického žiarenia v magnetickom poli Zeme. Z tohto dôvodu bol v spolupráci Technickej univerzity v Košiciach (TUKE) a Ústavom experimentálnej fyziky Slovenskej akadémie vied (ÚEF SAV) vyvinutý systém Cut-Off Rigidity (COR) [5].

Hlavným cieľom systému COR je spúšťanie simulácií na základe používateľom zadanej konfigurácie vo webovom rozhraní. Výpočtové „jadro“ systému

¹<https://galprop.stanford.edu/>

²<https://www.iap.kit.edu/corsika/>

tvorí niekoľko konzolových programov, ktoré implementujú rôznu kombináciu fyzikálnych modelov internej a externej zložky geomagnetického poľa. Väčšina programov bola napísaná v jazyku Fortran a sú udržiavané dodnes. V minulosti bol realizovaný prepis programu produkujúceho kalkulované hodnoty odrezávacích rigidít pre trajektórie kozmického žiarenia využívajúceho modely International Geomagnetic Reference Field (IGRF) a Tsyganenko-Sitnov 05 (TS05) do jazyka C s cieľom dosiahnutia väčšej rýchlosti výpočtu a lepšej udržiavateľnosti kódu [6]. Táto verzia bola ďalej optimalizovaná v rámci mojej bakalárskej práce [7], pričom boli taktiež navrhnuté metódy pre odhad chyby v produkovaných výsledkoch.

Cieľom tejto práce je z časti nadviazať na predchádzajúcu prácu vo forme vylepšenia a rozšírenia C verzie simulácie o ďalšie modely geomagnetického poľa. Po architektonickej stránke je potrebné navrhnuť a následne implementovať systém, ktorý bude umožňovať jednoduché rozšírenie kódu simulácie trajektórií kozmického žiarenia o nové modely geomagnetického poľa. Dôležitým kritériom nového simulačného programu je zachovanie, prípadne zlepšenie efektivity výpočtu po stránke rýchlosti. Rovnako je dôležité zachovať presnosť výsledkov simulácie. Motiváciou tejto práce je zároveň prispieť k vývoju systému COR a rovnako vo všeobecnosti prispieť k fyzikálnemu výskumu v oblasti kozmického žiarenia poskytnutím nástroja pre realizáciu výpočtu trajektórií častíc z ktorých pozostáva.

Formulácia úlohy

Táto diplomová práca sa zaoberá programom pre výpočet trajektórie kozmického žiarenia v magnetosfére Zeme. Ako prvé je dôležité zanalyzovať existujúce alternatívne nástroje, resp. systémy, ktoré realizujú podobné výpočty. Je potrebné rozlíšiť výhody a nevýhody týchto riešení, čo bude jedným z faktorov rozhodovania pri návrhu nového riešenia. Súčasťou analýzy je zhrnutie doterajších metód optimalizácie kódu simulácie, ktoré budú relevantné v procese optimalizácie nových súčastí kódu simulácie.

Ďalšiu časť práce tvorí návrh a implementácia nového programu, resp. konzolového nástroja, ktorým bude možné realizovať simuláciu trajektórie častice kozmického žiarenia a generovať dva rôzne výstupy z výpočtov – kalkulované hodnoty odrezávacích rigidít a trajektóriu častice. Podobne bude nástroj umožňovať výpočet geomagnetického poľa na miestach v zadanom rozsahu zemepisnej šírky a dĺžky. Podmienkou nového riešenia je možnosť jeho jednoduchého rozšírenia

pridaním ďalších modelov geomagnetického poľa spolu s možnosťou ich zahrnutia do výpočtov pred spustením.

Implementácia nového riešenia bude zahŕňať:

- refaktorizáciu aktuálneho C zdrojového kódu simulácie trajektórie kozmického žiarenia využívajúcu modely IGRF a TS05 s cieľom pridania univerzálneho rozhrania pre modely geomagnetického poľa,
- pridanie historických modelov geomagnetického poľa do simulácie,
- prepis modelu Tsyganenko 1996 (T96) do jazyka C a jeho pridanie do nového riešenia,
- pridanie modelu krustálneho (litosférického) geomagnetického poľa do nového riešenia,
- rozšírenie novej implementácie simulácie o mód výpočtu individuálnej trajektórie,
- rozšírenie novej implementácie simulácie o mód výpočtu geomagnetického poľa na definovanej sieti bodov.

Súčasťou úlohy je vypracovanie dokumentácie podľa požiadaviek vedúceho záverečnej práce.

1 Analýza systému COR

Systém COR je nástroj, ktorý umožňuje automatizované spúšťanie simulácií na výpočet trajektórií častíc kozmického žiarenia v magnetosfére Zeme. Ide o aplikáciu s webovým rozhraním, ktorá zároveň poskytuje prostredie pre realizáciu preliminárnej analýzy výsledkov simulácií v grafickej alebo surovej (číselnej) forme. Tento systém je verejne dostupný¹ a jeho súčasti² sú vyvíjané ako open-source pod licenciou GNU GPL-3.0³. V súvislosti so systémom COR bol vydaný článok [5], v ktorom je tento nástroj ešte viac priblížený z hľadiska používateľského rozhrania a rôznych druhov simulácií, ktorými sa bude táto práca v nasledujúcich častiach hlbšie zaoberať.

1.1 Simulácie v systéme COR

Simuláciu trajektórie kozmického žiarenia môžeme v kontexte systému COR chápať predovšetkým ako výpočet spodnej, hornej a efektívnej odrezávacej rigidity častice, ktorá vstupuje do magnetosféry Zeme z konkrétneho smeru. V publikácii [8] autori D. J. Cooke a kol. definovali odrezávaciu rigiditu ako energetickú hodnotu častice medzi poslednou zakázanou a prvou dovolenou rigiditou v možnom intervale rigidít častice kozmického žiarenia. Vo všeobecnosti môžeme pojem *rigidita častice* chápať ako jej energiu, ktorá sa vzťahuje na jej náboj.

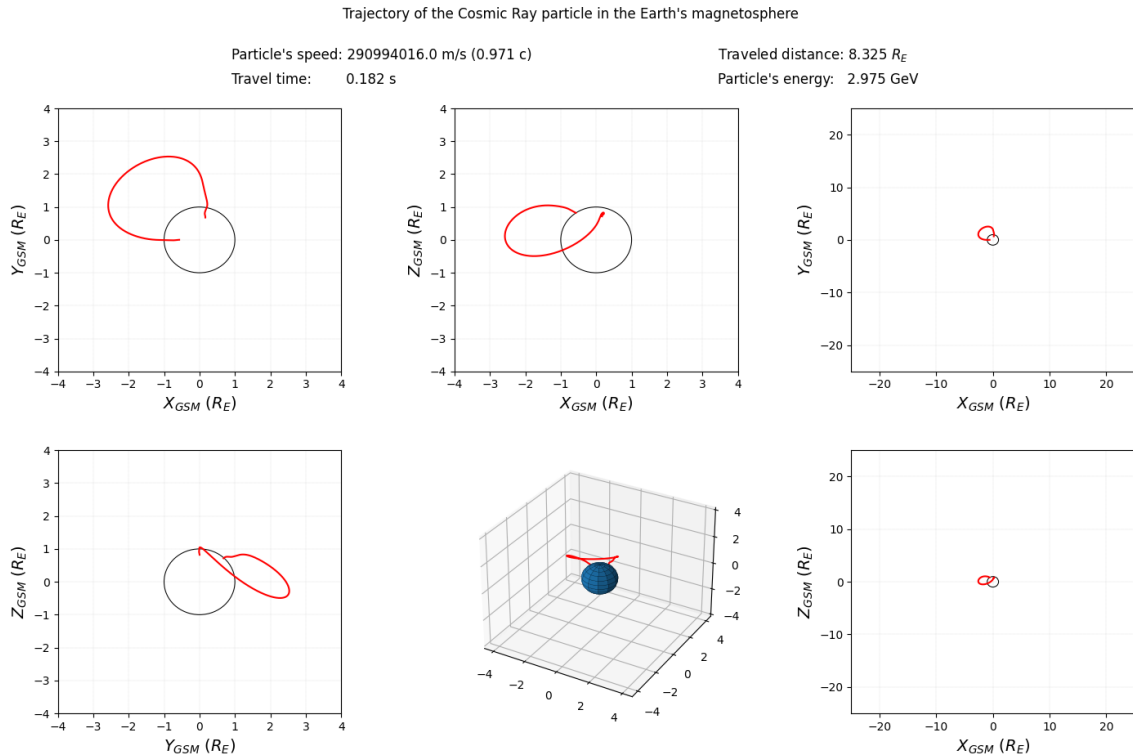
Zakázaná hodnota rigidity znamená, že trajektória častice s touto rigiditou bude odklonená pôsobením geomagnetického poľa – častica nedopadne na povrch Zeme [9]. Trajektóriu častice so zakázanou rigiditou môžeme vidieť na obrázku 1.1. Dôvod, prečo sa začiatok aj koniec trajektórie nachádza na zemskom povrchu vyplýva z princípu algoritmu výpočtu trajektórie, ktorý časticu trasuje od miesta dopadu po jej vstup do magnetosféry. Podobný algoritmus je opísaný v bakalárskej práci [7], ktorá sa taktiež zaoberala problematikou simulácie trajektórie kozmického žiarenia. Keďže častica so zakázanou hodnotou rigidity nikdy nedo-

¹COR systém dostupný na adrese: <https://cor.crmodels.org/>

²Zdrojové kódy sú dostupné na adrese: <https://github.com/COR-Cut-off-rigidity>

³Špecifikácia licencie dostupná na adrese: <https://www.gnu.org/licenses/gpl-3.0.html>

padne na zemský povrch, vo vizualizácii sa trajektória takejto častice prejavuje opätovným stretom so zemským povrchom.



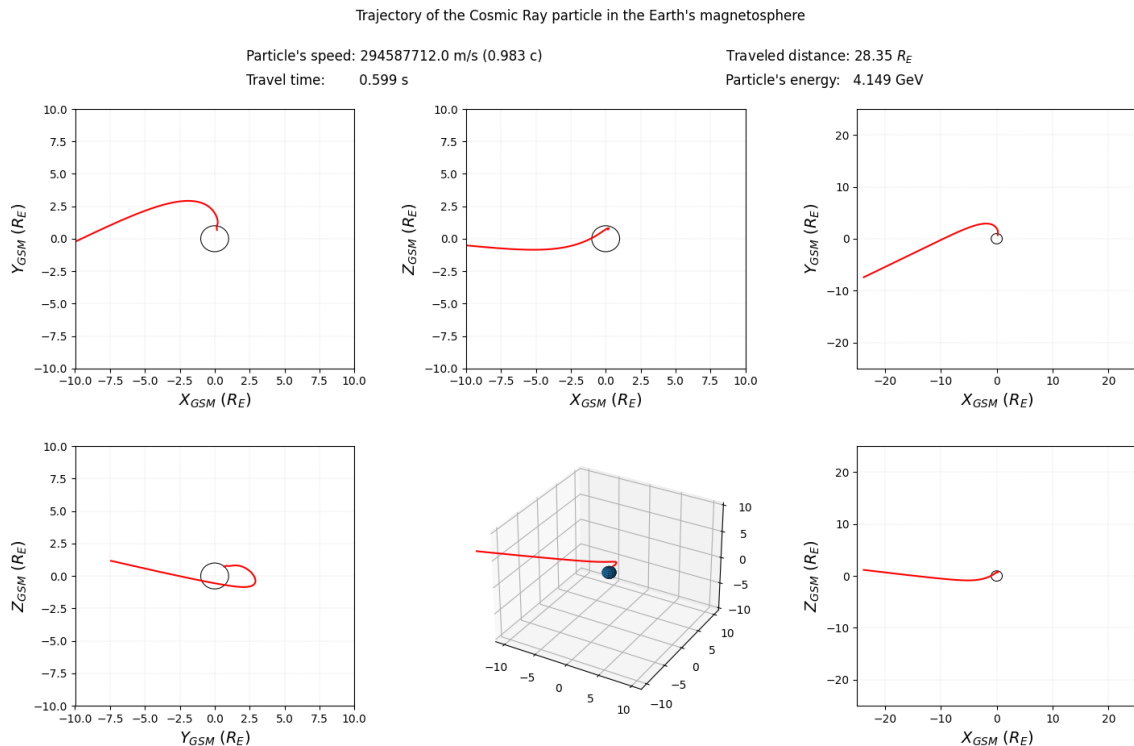
Obr. 1.1: Vizualizácia zakázanej trajektórie zo systému COR

Dovolená hodnota rigidity je energetická úroveň častice, ktorej trajektória prekoná vrstvu magnetosféry a dopadne na povrch Zeme [9]. Na obrázku 1.2 môžeme vidieť trajektóriu častice s dovolenou rigiditou. Výpočet trajektórie v tomto prípade skončil na úrovni tzv. *magnetopauzy* (na hranici magnetosféry).

Dolná odrezávacia rigidity je najnižšia možná rigidity častice, ktorej trajektória je dovolená. Horná odrezávacia rigidity je určená hranicou v rigiditnom (energetickom) intervale, za ktorou by všetky väčšie hodnoty rigidity častice znamenali dovolenú trajektóriu. Medzi týmito dvomi hodnotami odrezávacích rigidít sa nachádza interval, v ktorom trajektórie môžu byť dovolené alebo zakázané. V tomto intervale sa nachádza hodnota *efektívnej odrezávacej rigidity*. Opísanému intervalu hovoríme *polotieň*. Zmieným pojmom sa bližšie venujú autori v článku [8], prípadne v publikácii [10].

Momentálne je možné v systéme spustiť niekoľko typov simulácií:

- mnohosmerová simulácia trajektórie častice kozmického žiarenia pre celý rozsah rigidity,
- výpočet spodnej odrezávacej rigidity častice kozmického žiarenia,



Obr. 1.2: Vizualizácia dovolenej trajektórie zo systému COR

- simulácia trajektórie častice kozmického žiarenia v geomagnetickom poli s využitím historických modelov magnetosféry,
- výpočet geomagnetického poľa vo zvolenom rozsahu zemepisnej šírky a dĺžky s určitým počtom bodov,
- dávkové simulácie trajektórií častíc kozmického žiarenia vo zvolenom časovom intervale so špecifikovaným krokom v čase a v rozsahu súradníc s určitým počtom bodov,
- výpočet individuálnej trajektórie častice kozmického žiarenia na určitom mieste a určitom počiatočnom smere trajektórie častice.

Výpočet geomagnetického poľa a výpočet individuálnej trajektórie kozmického žiarenia sa líšia od ostatných tým, že ich výsledok nezahŕňa odrezávacie rigidity. V prípade výpočtu geomagnetického poľa sa nejedná o výpočet trajektórie. Tento typ simulácie produkuje zložky vektora indukcie geomagnetického poľa a jeho veľkosť na špecifikovanej sieti bodov.

Výsledkom simulácie individuálnej trajektórie je zoznam bodov, v ktorých sa častica nachádzala. Z týchto bodov je možné vizualizovať trajektóriu ako na obrázku 1.1, prípadne 1.2.

1.2 Modely výpočtov realizovaných v systéme

Výpočet trajektórie častice kozmického žiarenia sa v systéme realizuje rovnakým algoritmom pre všetky typy simulácií. Používateľ má vo webovom rozhraní možnosť výberu kombinácie modelu interného a externého geomagnetického poľa, ktoré sa použijú pri výpočte. Po zadaní výpočtu do systému sa vytvoria vstupné súbory výpočtov, ktoré obsahujú potrebné parametre a spustí sa konkrétny spustiteľný súbor, ktorý realizuje algoritmus trasovania častice v geomagnetickom poli na základe zvolených modelov. Problematikou spúšťania výpočtov v systéme sa zaoberá bakalárska práca [11], prípadne diplomová práca [12], v ktorej bol systém vylepšený.

Kód algoritmu pre výpočet trajektórie bol pôvodne vyvinutý na Ústave experimentálnej fyziky Slovenskej akadémie vied v Košiciach (ÚEF SAV). V priebehu posledných troch desaťročí boli vydané články v súvislosti s týmto algoritmom [13, 14, 15], zaoberajúcich sa výskumom v oblasti kozmického žiarenia. Preto je možné usúdiť, že výsledky z výpočtov realizovaných algoritmom trasovania častíc sú relevantné a korektné po fyzikálnej stránke. Kód algoritmu pozostáva z výpočtu bodu trajektórie častice riešením Lorentzovej rovnice, ako sa uvádza v článku [14]. Lorentzova rovnica je riešená numerickou metódou Runge-Kutta 6. rádu [11].

V rámci systému COR sú momentálne implementované programy využívajúce opísaný algoritmus v kombinácii s nasledujúcimi modelmi geomagnetického poľa:

- International Geomagnetic Reference Field (IGRF) - model interného geomagnetického poľa, ktoré podľa autorov článku [16], tvorí hlavnú zložku magnetického poľa Zeme,
- Tsyganenko 1996 (T96) - model externého geomagnetického poľa, opísaný v publikácii [17],
- Tsyganenko-Sitnov 05 (TS05) - model externého geomagnetického poľa, opísaný v publikácii [18],
- historický model interného geomagnetického poľa v čase rokov 0-1968 n. l., ktorým sa zaoberá článok [13],
- historický model interného geomagnetického poľa *CALS10k.2*, ktorý pokrýva obdobie posledných 10 000 rokov, uvedený v publikácii [19].

1.3 Softvérová architektúra modelov simulácie

Momentálne sú takmer všetky variácie programov implementované v jazyku Fortran. Každý program je napísaný v samostatnom súbore s počtom riadkov viac ako 4000. Takto implementovaný program je veľmi obtiažne udržiavať a rozširovať. To bolo jedným z dôvodov pre prepis verzie implementujúcej model IGRF a model TS05 do jazyka C v rámci diplomovej práce [6].

Prepísaná C verzia⁴ programu bola neskôr optimalizovaná v rámci mojej bakalárskej práce [7]. Súčasťou tejto práce bolo aj zavedenie štandardných metód pre odhad chyby vo výsledkoch. Kvantifikácia chyby (odchýlky) vo výsledkoch bola užitočná aj pri optimalizácii - porovnávaním výsledkov optimalizovanej a pôvodnej verzie, čo zaručovalo ich korektnosť. Doterajšia metodika pre odhad chyby je viac zdokumentovaná v kapitole 2.

1.3.1 Opis modulov C verzie

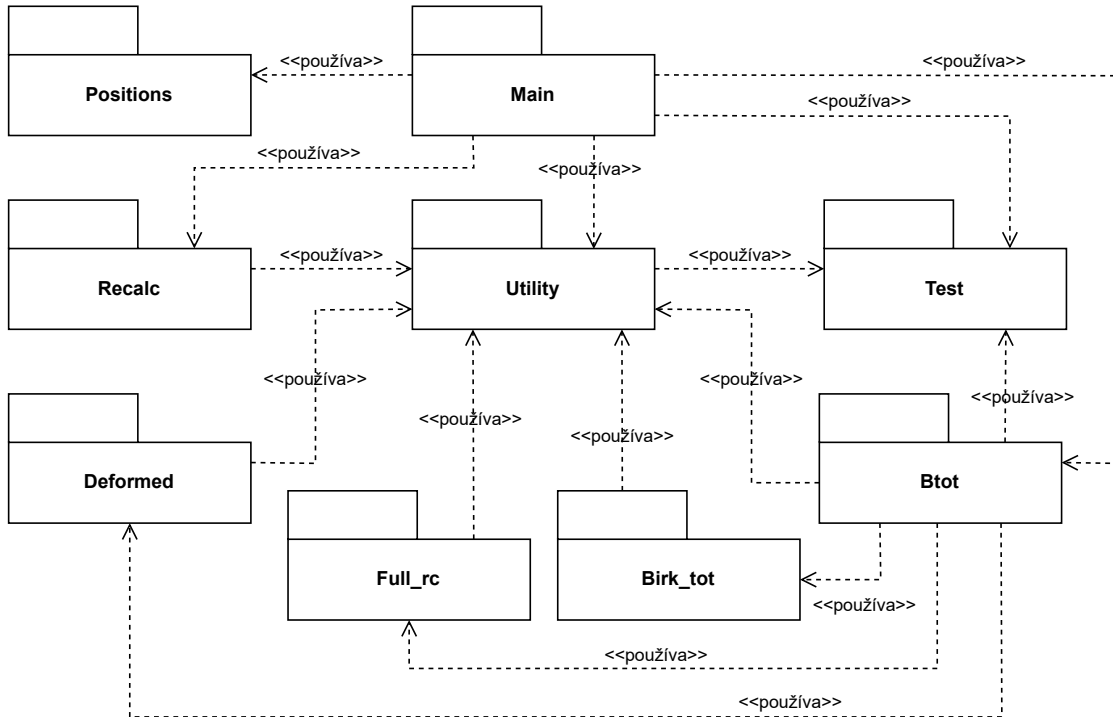
Aktuálna C verzia programu, využívajúca model TS05, je rozdelená na moduly, ktorých opis je uvedený v nasledovnom zozname:

- *birk_tot*: funkcie pre výpočet prúdových systémov (externé geomagnetické pole),
- *btot*: funkcie pre výpočet interného/externého magnetického poľa Zeme,
- *deformed*: funkcie pre výpočet chvosta magnetosféry (externé geomagnetické pole),
- *full_rc*: funkcie pre výpočet magnetického poľa prstencového prúdu (externé geomagnetické pole),
- *positions*: funkcie pre výpočet bodu trajektórie (Runge-Kutta),
- *recalc*: funkcie realizujúce operácie nad sférickými harmonickými koeficientmi (interné geomagnetické pole),
- *test*: definície makier, ktoré sa využívajú pri zostavení testovacej verzie programu pre odhad chyby,
- *utility*: pomocné funkcie pre výpočty,

⁴Zdrojový kód C verzie simulácie implementujúcej modely IGRF a TS05: https://github.com/COR-Cut-off-rigidity/Trajectories_IGRF_T04_C

- *main*: hlavný modul, výpočet trajektórie.

Na obrázku 1.3 je zobrazený diagram vzájomných závislostí jednotlivých modulov. Z obrázku je možné vidieť, že modul *utility* má najväčší počet závislostí.



Obr. 1.3: Diagram zobrazujúci závislosti modulov aktuálnej implementácie simulácie v jazyku C

1.3.2 Opis kompilácie a spustenia

Pre zostavenie C verzie programu je využitý nástroj *CMake*⁵, ktorý na základe konfigurácie v súbore *CMakeLists.txt* generuje natívne súbory pre zostavenie programu (MakeFiles). Program je vytvorený primárne pre operačný systém *Linux*. Kompilácia je realizovaná kompilátorom GNU Compiler Collection (GCC)⁶.

Vo výpise zdrojového kódu 1.1 sú uvedené príkazy potrebné pre zostavenie a spustenie programu. Alternatívne je možné skompilovať program spustením skriptu *build.sh*.

Zdrojový kód 1.1: Príkazy pre kompiláciu a spustenie C verzie programu

```

$ cmake -S ./src -B ./build
$ cmake --build ./build

```

⁵<https://cmake.org/>

⁶<https://gcc.gnu.org/>


```
$ ./build/Trajectories_IGRF_T04_C <infile> <outfile>
    <igrf_ver> <seq/par> <number of steps>
```

Význam jednotlivých argumentov príkazového riadku programu je opísaný v nasledovnom zozname. Štruktúra vstupného a výstupného súboru bola podrobne zdokumentovaná v rámci bakalárskej práce [7].

- *<infile>*: cesta k vstupnému súboru,
- *<outfile>*: cesta k výstupnému súboru, ktorý bude vytvorený,
- *<igrf_ver>*: generácia IGRF (hodnota v rozsahu 9 - 13),
- *<seq/par>*: mód výpočtu (*seq* - sekvenčný mód, *par* - paralelný mód),
- *<number of steps>*: maximálny počet krokov výpočtu jednej trajektórie.

Fortran programy nevyužívajú žiaden sofistikovanejší nástroj pre automatizáciu zostavenia ako v prípade opísanej C verzie. Fortran programy sú v rámci systému COR kompilované prostredníctvom kompilátora GNU Fortran (GFortran), ktorý je súčasťou GCC. Ukážku kompilácie a spustenia programu simulácie, ktorá využíva modely IGRF a T96 môžeme vidieť vo výpise zdrojového kódu 1.2.

Zdrojový kód 1.2: Ukážka kompilácie a spustenia Fortran verzie programu

```
$ f95 -fno-automatic -std=legacy T96.f -o T96
$ ./T96 <infile> <outfile>
```

1.4 Opis podobných existujúcich riešení

V tejto sekcii sa zameriame na opis podobných existujúcich riešení. Opis sa zameriava na výhody a nevýhody týchto riešení, ktoré budú neskôr zohľadnené pri návrhu a implementácii zmien v nástroji COR.

1.4.1 MAGNETOCOSMIC

Nástroj MAGNETOCOSMIC bol vyvinutý na Inštitúte fyziky Univerzity v Berne a jeho prvá verzia bola zverejnená v roku 2003. Na základe manuálu [20] ide rovnako o aplikáciu pre výpočet odrezávacích rigidít častice kozmického žiarenia. MAGNETOCOSMIC okrem toho umožňuje realizovať výpočet asymptotických smerov incidencie a generovať vizualizácie trajektórie kozmického žiarenia a siločiar geomagnetického poľa.

Nástroj využíva model IGRF pre simuláciu interného geomagnetického poľa a modely Tsyganenko 1989, Tsyganenko 1996 a Tsyganenko 2001 pre simuláciu externého geomagnetického poľa. Používateľ má možnosť voľby modelu externého poľa, prípadne má možnosť nezahrnúť externú zložku geomagnetického poľa do výpočtu. Koeficienty interného geomagnetického poľa sú špecifikované v samostatnom súbore, je načítaný pri spustení. Aktualizácia koeficientov je úlohou používateľa.

Po softvérovej stránke je nástroj MAGNETOCOSMIC postavený na platforme *Geant4*. Podľa publikácie [21] ide o softvérový nástroj pre simuláciu prechodu častice cez hmotu. MAGNETOCOSMIC využíva existujúce Fortran zdrojové kódy fyzikálnych modelov geomagnetického poľa.

Podľa dizertačnej práce [22] bolo možné získať zdrojový kód ako aj spustiteľný súbor zo stránok⁷. K dnešnému dňu sťahovanie súborov nie je funkčné. Preto možno usúdiť, že vývoj a podpora tohto nástroja je ukončená.

1.4.2 OTSO

Nástroj OTSO je vyvíjaný na Univerzite v Oulu vo Fínsku. Tento nástroj rovnako modeluje pohyb častíc kozmického žiarenia v magnetosfére s cieľom výpočtu odrezávacích rigidít pre rôzne miesta na Zemi. Ide o open-source riešenie⁸, ktoré má pomôcť vedeckej komunite v oblasti výskumu kozmického žiarenia.

Výpočtová časť tohto nástroja je napísaná v jazyku Fortran, tvoria ju modely interného a externého magnetického poľa s pomocnými funkciami a samotný výpočet trajektórie častice. Simulácia je spúšťaná pomocou Python kódu, ktorý priamo volá rutiny vo Fortrane. Toto prepojenie dvoch rôznych jazykov je docieľené využitím nástroja *F2PY*⁹.

Nástroj *F2PY* generuje rozhranie medzi jazykmi, čím umožňuje ich prepojenie a tým volanie rutín. *F2PY* je súčasť knižnice *NumPy*, ale je k dispozícii aj ako samostatný konzolový nástroj. Na základe článku [23] autora P. Petersona je možné princíp generovania rozhrania medzi jazykmi zhrnúť do 5 akcií v diagrame aktivít na obrázku 1.4.

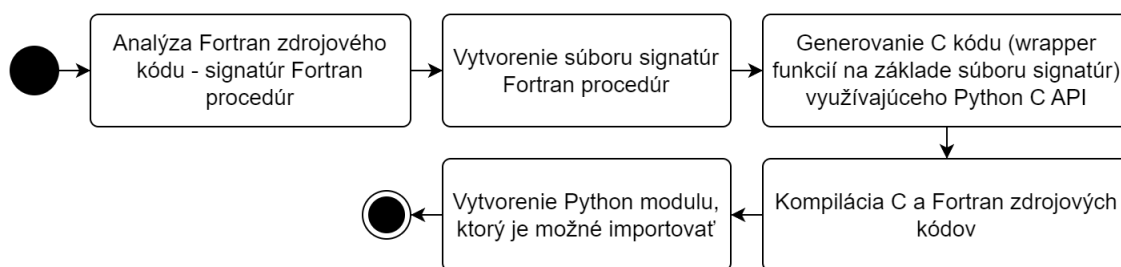
Spôsob použitia nástroja OTSO spočíva:

1. v kompilácii všetkých Fortran zdrojových kódov do objektových súborov,
2. vo vytvorení statickej knižnice z objektových súborov pomocou utility *ar*,

⁷<http://cosray.unibe.ch/~laurent/magnetocosmics/>

⁸Zdrojový kód nástroja je dostupný na adrese: <https://github.com/NLarsen15/OTSO>

⁹Dokumentácia nástroja *F2PY* dostupná na: <https://numpy.org/doc/stable/f2py/>

Obr. 1.4: Princíp prepojenia jazykov Python a Fortran nástrojom *F2PY*

3. vo vygenerovaní Python rozhrania Fortran rutín definovaných v súbore `MiddleMan.f95` utilitou *F2PY*, pričom sa zároveň nalinkuje vytvorená statická knižnica,
4. v spustení Python skriptu, ktorý volaním Fortran rutín realizuje výpočet.

Výhoda nástroja OTSO je, že umožňuje realizovať simuláciu s využitím rôznej kombinácie modelov interného a externého geomagnetického poľa. Kombináciu modelov má používateľ možnosť špecifikovať v Python súbore spolu s ďalšími fyzikálnymi parametrami.

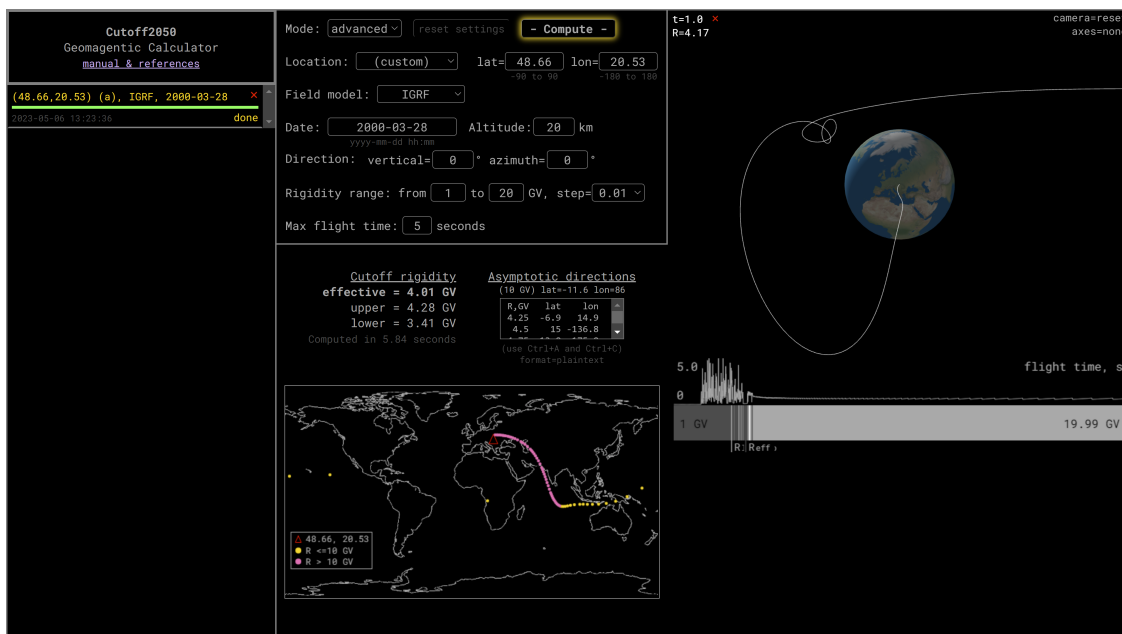
Skutočnosť, že celková konfigurácia výpočtov zahŕňa úpravu Python zdrojového kódu môže byť vnímaná ako nevýhoda. Pre používateľa môže byť máťúce zorientovať sa v zdrojovom kóde, ktorý okrem konfigurácie zahŕňa aj „obslužný“ kód - volania funkcií výpočtov. Na druhej strane, tento nástroj je určený pre používateľov, ktorí majú aspoň základnú skúsenosť s jazykom Python. Zároveň autori odbremenili používateľa od editácie a kompilácie Fortran zdrojových kódov, čím jednoznačne zjednodušili prácu s nástrojom.

1.4.3 Ďalšie riešenia

Existuje niekoľko ďalších nástrojov s podobnými funkcionalitami. Ide ale o nástroje, ktoré sú dostupné len ako webové aplikácie.

Jedným z takýchto nástrojov je *Cutoff2050*¹⁰, ktorý poskytuje kvalitné vizualizačné možnosti výsledkov simulácií, ako je možné vidieť na obrázku 1.5. Tento nástroj neumožňuje stiahnutie „surových“ výsledkov, ktoré by mohli byť využité pre ďalšiu analýzu. Možnosti práce s nástrojom sú tým pádom obmedzené len na implementované funkcionality vo webovom rozhraní. *Cutoff2050* podporuje výpočty s rovnakou možnosťou kombinácie modelov geomagnetického poľa, ako v prípade nástroja *MAGNETOCOSMIC*, opísanom v predchádzajúcej sekcii 1.4.1. Zdrojový kód tohto nástroja, ktorý realizuje simulácie nie je dostupný.

¹⁰<https://tools.izmiran.ru/cutoff/>



Obr. 1.5: Ukážka webového rozhrania nástroja Cutoff2050

Nástroj Spenvis¹¹ umožňuje štandardizovaný prístup k modelom pre simuláciu vesmírneho prostredia v okolí Zeme prostredníctvom webového rozhrania [24]. Spenvis taktiež disponuje možnosťou simulácie pohybu kozmického žiarenia v magnetosfére Zeme. Pre tento výpočet využíva model MAGNETOCOSMIC, ktorý bol opísaný v sekcii 1.4.1. Okrem toho umožňuje výpočet geomagnetického poľa využitím modelu IGRF a rôznych verzií modelov Tsyganenko. Nástroj Spenvis poskytuje radu ďalších možností a funkcionalít, ktoré už priamo nesúvisia s preberanou problematikou.

Nástroj Spenvis je dostupný verejnosti. Pre využitie všetkých funkcií sa musí používateľ registrovať a aktivovať účet prostredníctvom e-mailu [22].

1.5 Nedostatky aktuálneho riešenia

Ako bolo spomenuté v sekcii 1.2, aktuálne existuje niekoľko samostatných programov, ktoré sa v rámci systému spúšťajú podľa požiadavky používateľa. Toto riešenie spúšťania výpočtov v systéme COR bolo navrhnuté z dôvodu využitia už existujúcich simulačných programov, ktoré sa doposiaľ využívali len samostatne. V rámci systému je toto riešenie akceptovateľné.

Nevýhody sa prejavujú v prípade potreby implementácie nového modelu geomagnetického poľa. Pokiaľ sa jedná o pridanie napríklad ďalšej alternatívy výberu modelu externého geomagnetického poľa, bolo by potrebné vytvoriť samostatný

¹¹<https://www.spenvis.oma.be/intro.php>

program, ktorý by z väčšej časti implementoval rovnakú logiku simulácie. Toto riešenie nie je vhodné, nakoľko je potrebné aktualizovať a udržiavať niekoľko verzií programov.

Ako bolo spomenuté v sekcii 1.3, väčšina programov, ktoré sa využívajú je napísaná v jazyku Fortran. Nevýhoda aktuálneho riešenia je náročnosť udržiavania a rozšírenia ako bolo prezentované v diplomovej práci [6] a v bakalárskej práci [7].

Na obrázku 1.3 je zobrazené vzájomné prepojenie jednotlivých modulov v C implementácii programu s modelmi IGRF a TS05. Moduly sú navzájom úzko prepojené, čo zabraňuje vhodnej „čistej“ implementácii nových zmien.

V úvode kapitoly 1 bolo zmienené, že predmetné simulačné programy sú určené pre širšiu vedeckú komunitu a ich zdrojové kódy sú otvorené. Z používateľského hľadiska by preto bolo vhodné zlúčiť všetky verzie programov a vytvoriť sofistikovanejší nástroj, ktorý by pokrýval všetky možnosti výpočtov v systéme COR a zároveň bol jednoduchšie rozšíriteľný o ďalšie fyzikálne modely.

2 Doterajšie metódy optimalizácie simulácie

Problematike optimalizácie výpočtov z hľadiska času vykonávania sa v podstatnej miere zaoberala moja bakalárska práca [7]. Cieľom bakalárskej práce bolo optimalizovať C verziu simulácie trajektórií častíc kozmického žiarenia, ktorá využíva model IGRF pre výpočet internej zložky geomagnetického poľa a model TS05 pre výpočet externej zložky geomagnetického poľa.

V tejto kapitole budú zhrnuté doterajšie poznatky v oblasti optimalizácie kódu simulácie trajektórií častíc kozmického žiarenia a rovnako bude opísaný súvis optimalizácie simulácie s odhadom chýb vo výpočtoch.

2.1 Zhrnutie optimalizačných prístupov

Implementované optimalizácie kódu simulácie boli navrhnuté systematicky. Vychádzalo sa primárne z výsledkov profilácie kódu prostredníctvom nástroja *Gprof*, ktorým bolo možné identifikovať najpomalšie časti kódu na úrovni funkcií. Následne boli navrhnuté vylepšenia, ktoré boli opodstatnené odporúčaniami autora príručky [25] o písaní optimálneho kódu. Optimalizácie spočívali:

- v minimalizácii počtu volaní funkcie *custom_pow* pre výpočet mocniny čísla, nakoľko sa profiláciou preukázalo, že je táto časť kódu najpomalšia,
- v odstránení duplicitných výpočtov – v uchovávaní potrebných medzivýsledkov v samostatných premenných a ich znovupoužití,
- v prepise algoritmu vo funkciách *birk_shl* a *rc_shield* (súčasť modelu TS05) na základe výsledkov z profilácie – odstránenie vetvení a cyklov,
- v odstránení redundantného výpočtu geomagnetického poľa v algoritme trasovania častice kozmického žiarenia,
- v experimentovaní s rôznymi optimalizačnými prepínačmi kompilátora GCC.

V konečnom výsledku sa ukázalo, že najväčšie zrýchlenie programu bolo dosiahnuté odstránením redundantného výpočtu geomagnetického poľa, odstránením duplicitných medzivýpočtov a minimalizáciou volaní funkcie *custom_pow*. Celkovo bolo dosiahnuté viac ako 5,4-násobné zrýchlenie výpočtu oproti pôvodnej C verzii a takmer 6,5-násobné zrýchlenie oproti pôvodnej Fortran implementácii kódu simulácie.

Na základe zdokumentovaných výsledkov optimalizácií je možné vo všeobecnosti tvrdiť, že najväčšie zrýchlenie programu bolo dosiahnuté odstránením duplicitného nepotrebného kódu a prepisom kódu, ktorý bol výsledkom nevhodných programovacích praktík, čo sa následne prejavilo jeho zefektívnením z hľadiska rýchlosti vykonávania. V závere bakalárskej práce [7] sú navrhnuté ďalšie potenciálne problémy v kóde, ktoré môžu mať za následok spomalenie výpočtu. Jedná sa o časté konverzie medzi číslami s pohyblivou rádovou čiarkou s jednoduchou a s dvojitou presnosťou. Rovnako je zmienený problém v súvislosti s princípom lokálnosti. V programe sa často neopodstatnene využívajú smerníky na prenos hodnôt prostredníctvom argumentov funkcií. Smerníky môžu ukazovať na rôzne rozmiestnené miesta v pamäti čo môže mať za následok častý tzv. „cache miss“. O tomto probléme hovorí aj Agner Fog v príručke [25].

Jedným z cieľov tejto diplomovej práce je prepísať a implementovať do simulácie model externého geomagnetického poľa T96. Keďže ide o model od toho istého autora ako v prípade modelu TS05, ktorý bol v minulosti optimalizovaný, je predpoklad, že po priamom prepise kódu z jazyka Fortran sa vyskytnú rovnako problematické časti kódu. V tom prípade je pravdepodobnosť, že po identifikovaní pomalej časti kódu prostredníctvom profilátora bude možné kód zefektívniť po stránke rýchlosti vykonávania podobnými prístupmi ako boli vyššie opísané. Zároveň na základe naznačených problémov, ktoré môžu mať vplyv na výkon je možné usúdiť, že v aktuálnej implementácii sa vo všeobecnosti nachádza dostatok potenciálu pre optimalizáciu.

2.2 Odhad chyby výpočtov v kontexte optimalizácie

Súčasťou bakalárskej práce [7] bol taktiež odhad chyby výpočtov, ktoré sú realizované v simulácii. Motiváciou odhadu chyby bola snaha o jej kvantifikáciu v kombinácii s rôznymi fyzikálnymi parametrami, ktoré vstupujú do simulácie. Pre kvantifikáciu chyby boli navrhnuté 2 metódy, ktorých realizácia vyžadovala implementáciu požadovanej funkcionality priamo v programe, ale aj mimo programu vo forme skriptov pre automatizáciu spúšťania výpočtov a generovania vi-

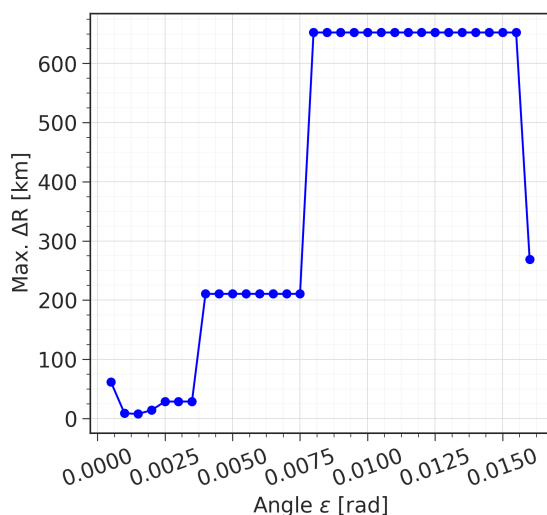
zualizácií.

Prvá metóda spočívala vo výpočte trajektórie častice v uniformnom magnetickom poli, pričom sa sledovala odchýlka v tzv. *Larmorovskom polomere* kruhovej trajektórie častice v každej iterácii výpočtu. Druhá metóda spočívala v spustení niekoľkých výpočtov s rozdielnym krokom v rigidite. Krok v rigidite je vstupný parameter simulácie, ktorý určuje rozdiel rigidity častice v dvoch po sebe nasledujúcich výpočtoch trajektórie. Výpočet odrezávacích rigidít s najmenšou veľkosťou kroku v rigidite bol považovaný za najpresnejší. Vychádzalo sa z logickej úvahy – čím menší je zvolený krok prechodu intervalom rigidity, tým presnejšie je možné detegovať prvú energetickú úroveň častice s dovolenou trajektóriou a tým aj odrezávaciu rigiditu. Cieľom bolo nájsť čo najväčší krok rigidity, kedy sa výsledok nelíši od referenčného (z výpočtu s najmenším krokom) o viac ako 1 %. Hranica 1 % bola stanovená ako postačujúca presnosť výpočtov pre účely výskumu.

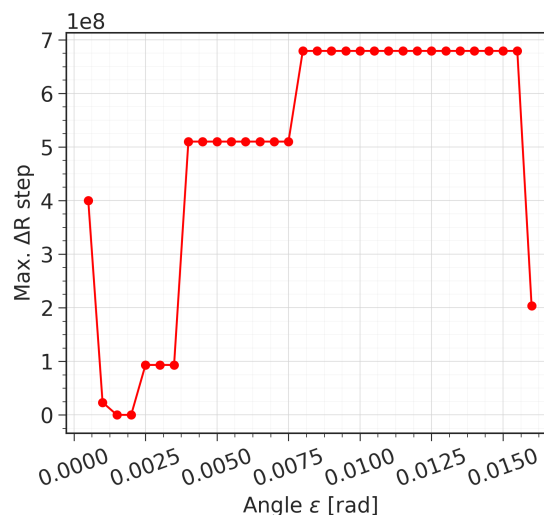
Odchýlky v chybe, resp. v presnosti boli porovnávané aj pri zavádzaní zmien v procese optimalizácie. Bolo zistené, že zostavenie programu simulácie s využitím prepínača `-march=native` kompilátora GCC spôsobí zrýchlenie výpočtov, avšak dôjde k zmene vo výsledkoch. Dôvod rozdielnosti výsledkov súvisí s aktivovaním tzv. Fused Multiply-Add (FMA) sady inštrukcií (ak ich konkrétny procesor podporuje), ktoré ovplyvňujú spôsob realizácie aritmetických operácií s desatinnými číslami. Zmena sa prejavila aj na charakteristikách nadobudnutia maximálnej odchýlky Larmorovského polomeru v závislosti od uhla ε , ktorý ovplyvňuje presnosť (hladkosť) opisu trajektórie častice (prvá metóda odhadu chyby). Pri porovnaní obrázkov 2.1 a 2.2 je vidieť, že pri využití prepínača `-march=native` bola dosiahnutá nižšia maximálna odchýlka (odhliadnuc od anomálie pri $\varepsilon = 0,002 \text{ rad}$) a bola prvýkrát dosiahnutá vo väčšom kroku pri výpočte trajektórie.

Druhá metóda odhadu chyby, ktorej podstatou bolo nájsť postačujúcej veľkosti kroku v rigidite pre dosiahnutie akceptovateľnej presnosti, bola ďalej rozvinutá a jej výsledky boli prezentované v rámci konferencie European Cosmic Ray Symposium (ECRS) v roku 2022 a následne zverejnené v publikácii [26]. Ako je možné vidieť z obrázku 2.3, v širokom páse v okolí rovníka, kde je pôsobenie geomagnetického poľa najsilnejšie, je postačujúca veľkosť kroku v rigidite 10^{-1} GV. Na rozdiel od toho, v stredných geografických šírkach sa ukazuje ako postačujúci krok 10^{-2} GV až 10^{-3} GV. V oblastiach blízko geomagnetických pólův je už vyžadovaný krok 10^{-4} GV až 10^{-5} GV pre dosiahnutie 1 % chyby.

Z hľadiska optimalizácie je dôležité podotknúť, že 10-násobné zníženie veľkosti kroku rigidity môže znamenať v priemere až 10-násobné zrýchlenie vý-

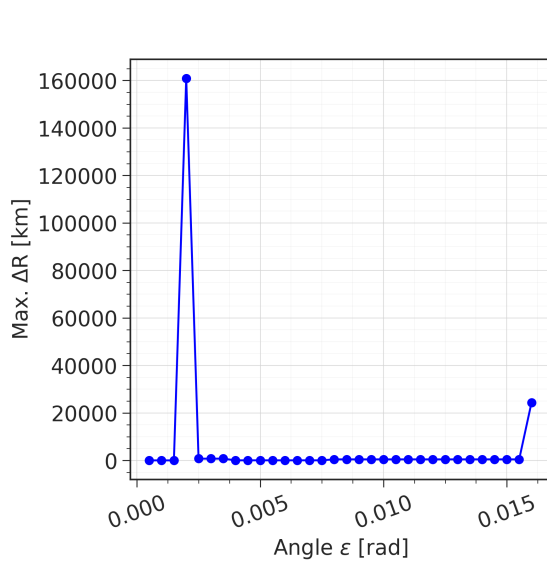


(a) Závislosť maximálnej odchýlky od uhla ε

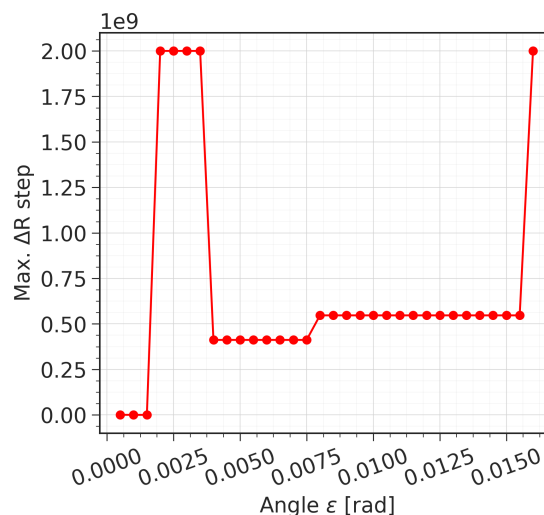


(b) Závislosť iterácie dosiahnutia maximálnej odchýlky od uhla ε

Obr. 2.1: Výsledky merania odchýlky Larmorovského polomeru pri výpočte trajektórie (prebraté zo záverečnej práce [7])



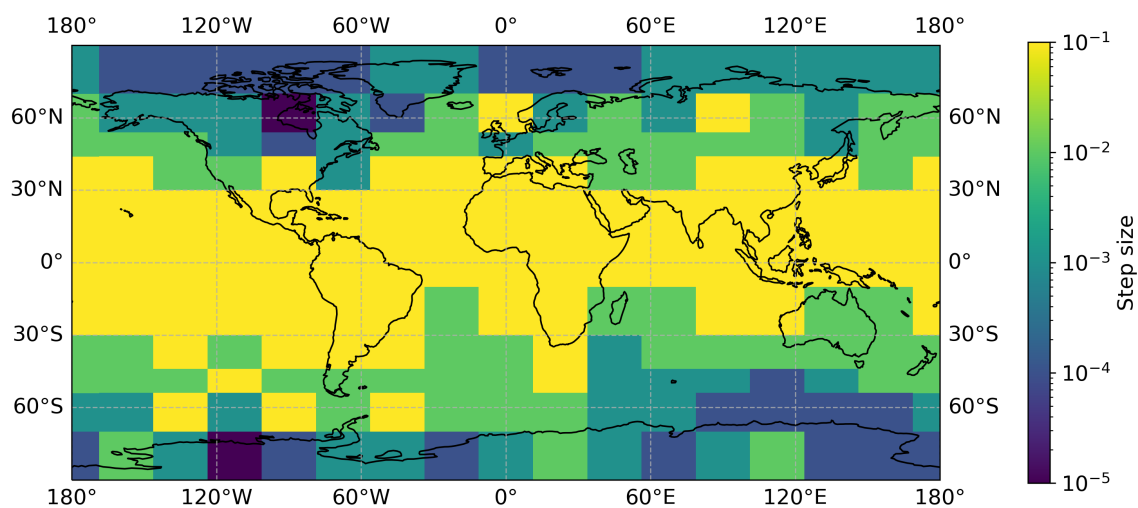
(a) Závislosť maximálnej odchýlky Larmor. polomeru a uhla ε



(b) Závislosť kroku prvého dosiahnutia maximálnej odchýlky Larmor. polomeru a uhla ε

Obr. 2.2: Výsledky merania odchýlky Larmorovského polomeru pri výpočte trajektórie za použitia GCC prepínača `-march=native` (prebraté z [7])

počtu. Z toho vyplýva, že v kontexte optimalizácie má zmysel uvažovať aj nad vplyvom zmien fyzikálnych parametrov simulácie na výsledkoch, ktoré v konečnom dôsledku môžu znamenať zrýchlenie celkového výpočtu. Našou prioritou je však predovšetkým zachovať správnosť a presnosť výpočtov.



Obr. 2.3: Závislosť veľkosti kroku rigidity na geomagnetickom poli pre dosiahnutie 1 % chyby výpočtu efektívnej odrezávacej rigidity (prebraté z [26])

3 Modely krustálneho geomagnetického poľa

Krustálne (litosférické) geomagnetické pole tvorí súčasť internej zložky geomagnetického poľa Zeme. Toto magnetické pole vzniká vo vrstve zemskej kôry, ktorej súčasťou sú rôzne zmagnetizované horniny. V porovnaní s interným – hlavným geomagnetickým poľom Zeme, vznikajúcim v jadre planéty má krustálne geomagnetické pole menšiu veľkosť.

Geomagnetické pole je možné aproximovať a následne simulovať prostredníctvom modelov. Modely interného geomagnetického poľa sú charakterizované množinou sférických harmonických koeficientov. Tieto koeficienty sú vstupom do sférických harmonických funkcií, ktorými je možné aproximovať magnetické pole na guli. To je dôvod, prečo v kontexte geomagnetického poľa často uvažujeme o tvare Zeme ako o dokonalej guli. Na rozvoji metodiky využitia sférických harmonických koeficientov na opis geomagnetického poľa má najvýznamnejšiu zásluhu Carl. F. Gauss [27].

Počet sférických harmonických koeficientov špecifikovaných pre model je úmerný maximálnemu rádu pre výpočet poľa, čo vyplýva zo vzťahu 3.1 pre magnetický potenciál V , kde g_n^m a h_n^m sú Gaussove koeficienty a N je maximálny rád rozvoja harmonických funkcií. Výpočet krustálneho geomagnetického poľa sa vyznačuje niekoľkonásobne vyšším rádom výpočtu N (v závislosti od konkrétneho modelu) oproti hlavnej – internej zložke geomagnetického poľa. V praxi sa to odzrkadľuje vo väčšej časovej náročnosti výpočtu.

$$V(r, \theta, \phi, t) = a \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^n \left(\frac{a}{r}\right)^{n+1} [g_n^m(t) \cos(m\phi) + h_n^m(t) \sin(m\phi)] P_n^m(\cos \theta) \quad (3.1)$$

Interné geomagnetické pole je v čase premenlivé. Preto aj modely opisujúce jeho pôsobenie podliehajú zmenám, vylepšeniam a novým revíziám. Situácia s krustálnym poľom a modelmi je podobná. Motiváciou pre implementáciu týchto modelov do modelu COR je možnosť skúmania vplyvu krustálneho geomagnetic-

keho poľa na pohyb častíc kozmického žiarenia v magnetosfére Zeme. V nasledujúcich častiach kapitoly budú analyzované najznámejšie modely krustálneho geomagnetického poľa a ich revízie, bude popísaný aktuálny stav implementácie výpočtu poľa využitím zmienených modelov a v neposlednom rade bude overená správnosť aktuálnej implementácie porovnaním výsledkov s ďalšími existujúcimi riešeniami.

3.1 Modely MF

Jedným z modelov pre výpočet krustálneho geomagnetického poľa je model *MF4*, ktorý je založený na meraniach z nemeckého satelitu Challenging Minisatellite Payload (CHAMP). Podľa autorov publikácie [28] bol CHAMP vynesený na orbit v júli roku 2000 a bol vybavený rôznymi prístrojmi pre výskum atmosféry, ionosféry ale aj geomagnetického poľa Zeme. Magnetické pole bolo merané prostredníctvom skalárneho a vektorového magnetometra. Podľa článku [29] bol pôvodný model *MF1* odvodený len na základe skalárnych meraní celkovej intenzity. Model *MF4* a rovnako aj jeho predchádzajúce revízie *MF2* a *MF3* sú založené už aj na vektorových dátach, ktoré boli postupne zbierané po dobu 5 rokov. Model bol zverejnený v zmienenej publikácii [29] v roku 2006.

Ďalšia revízia modelu *MF5* bola vydaná v roku 2007 a zdokumentovaná v článku [30]. Postup odvodenia modelu z dát bol podobný ako v predchádzajúcej verzii. Cieľom bolo pokúsiť sa redukovať „šum“ vo výsledkoch, hlavne na vyšších geografických šírkach. To bolo dosiahnuté výberom skalárnych a vektorových dát nameraných satelitom CHAMP v období predchádzajúcich troch rokov. Výhodou bolo, že v tomto čase sa satelit nachádzal na orbite s nižšou nadmorskou výškou. Model *MF5* pracuje so sférickými harmonickými koeficientmi do rádu 100, pričom jeho predchádzajúca verzia opisovala krustálne pole len do rádu 90. Vo všeobecnosti platí, že čím je rád výpočtu vyšší, tým je výpočet magnetického poľa náročnejší. So zvyšujúcim sa rádom však rastie aj presnosť modelu - je možné zachytiť väčšie detaily v štruktúre a veľkosti poľa.

O rok neskôr bol publikovaný model *MF6*. Na základe zistení a záverov z publikácie [31] je tento model prvým modelom založeným na dátach zo satelitu, ktorý umožňuje zistiť vekovú štruktúru oceánskej zemskej kôry. *MF6* počíta krustálne pole do rádu 120. Ďalšia verzia modelu *MF7* pracuje s koeficientmi do rádu 133 a v čase písania tejto práce je táto verzia modelu *MF* najaktuálnejšia. Z informácií dostupných na webových stránkach modelu *MF7*¹ je zrejmé, že pre vy-

¹<https://geomag.colorado.edu/magnetic-field-model-mf7.html>

tvorenie modelu *MF7* neboli zmenené žiadne modelovacie techniky oproti predchádzajúcej verzii. K tejto verzii modelu neexistuje žiadna oficiálna publikácia, prezentujúca nový model. Preto možno usúdiť, že sa pravdepodobne jedná len o novú revíziu, resp. vylepšenie predchádzajúceho modelu.

3.2 Model LCS-1 a CHAOS-7

V roku 2017 bol publikovaný článok [32], v ktorom je prezentovaný model *LCS-1*. Tento model je rovnako ako modely *MF* odvodený z dát získaných zo satelitu *CHAMP*. V tomto prípade sa však pracovalo s dátami nameranými v rozmedzí rokov 2006 až 2010, pričom autori modelu brali do úvahy aj dáta získané zo satelitov *Alpha* a *Charlie* misie *Swarm*. Podľa publikácie [33] sa jedná o misiu Európskej vesmírnej agentúry, ktorá pozostáva z troch satelitov špecializovaných pre čo najpresnejšie meranie geomagnetického poľa Zeme. Model *LCS-1* pracuje so sférickými harmonickými koeficientmi až do rádu 185.

Model *CHAOS-7* sa podľa tvrdení jeho autorov v článku [34] zhoduje s modelom *LCS-1* približne od sférického harmonického rádu 25. Do rádu 20 tento model simuluje časovo závislú internú zložku geomagnetického poľa. Model *CHAOS-7* je kombináciou modelov interného a krustálneho geomagnetického poľa. Pokiaľ zahrnieme do výpočtu len koeficienty od rádu 25, na základe informácií v publikácii [34], vieme modelovať len krustálne (litosférické) geomagnetické pole.

Autori modelu zverejňujú koeficienty modelu *CHAOS-7* oddelene pre interné a krustálne geomagnetické pole. Zaujímavosťou je, že koeficienty opisujúce krustálne geomagnetické pole zahŕňajú aj rád 21 až 24, čo nezodpovedá predchádzajúcemu tvrdeniu o zlúčení modelu *LCS-1* od rádu 25 a vyššie. Pravdepodobne je tu zachytený „prechod“ medzi poľami, ktorý autori zahrnuli už ku krustálnemu geomagnetickému poľu. Koeficienty sú voľne dostupné na stiahnutie z oficiálnych stránok modelu *CHAOS-7*² a rovnako sú k dispozícii aj implementácie modelu v podobe Python knižnice *ChaosMagPy* alebo Fortran a Matlab kódu.

Model *CHAOS-7* je v súčasnosti jeden z mála modelov krustálneho geomagnetického poľa, ktoré sú aktívne vyvíjané a ich implementácie sú voľne dostupné. V čase písania práce je vydaná najaktuálnejšia verzia modelu *CHAOS-7.16*.

²<https://www.spacecenter.dk/files/magnetic-models/CHAOS-7>

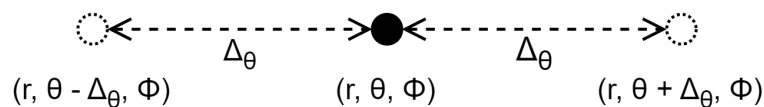
3.3 Aktuálny stav a možnosti implementácie výpočtu krustálneho geomagnetického poľa

V rámci výskumu ÚEF SAV, bol implementovaný algoritmus výpočtu interného geomagnetického poľa v jazyku Python. Výpočet aproximuje zemské magnetické pole vnútorných zdrojov prostredníctvom sférických harmonických funkcií. Vstupným parametrom týchto funkcií sú sférické harmonické koeficienty, ktoré sú špecifické pre každý model interného geomagnetického poľa. Pre každý model je definovaný maximálny rád výpočtu, ktorý zároveň udáva počet sférických harmonických koeficientov pre model. Tieto koeficienty sú po spustení programu načítané zo súboru.

Podstata získania zložky vektora geomagnetického poľa je výpočet rozdielu magnetického potenciálu dvoch susedných bodov. Tento rozdiel je následne predelený vzdialenosťou bodov, pre ktoré boli potenciály určené a vynásobený konštantou -1 . Tento spôsob je numerickou implementáciou vzťahu 3.2, kde B je indukcia geomagnetického poľa a V je potenciál poľa. Ide o implementáciu numerickej derivácie (numerickeho výpočtu gradientu potenciálu) na bodoch, ktoré sú rovnako vzdialené od bodu, pre ktorý sa určuje hodnota derivácie.

$$B = -grad V \quad (3.2)$$

Inými slovami je výsledkom zložka vektora geomagnetického poľa v bode, ktorý sa nachádza v strede úsečky medzi susednými bodmi. Obrázok 3.1 zobrazuje opísaný princíp výpočtu vo sférickej súradnici θ .



Obr. 3.1: Ukážka výpočtu zložky θ vektora geomagnetického poľa v bode (r, θ, ϕ) prostredníctvom výpočtu magnetického potenciálu susedných bodov.

Tento postup výpočtu zložiek sa opakuje aj pre polomer r a aj uhol ϕ , čím získame ďalšie dve zložky vektora geomagnetického poľa. Výsledkom je vektor geomagnetického poľa v 3D priestore. Príklad funkcie pre výpočet vektora poľa je zobrazený v zdrojovom kóde 3.1.

Zdrojový kód 3.1: Zjednodušený kód výpočtu vektora geomagnetického poľa v jazyku Python

```
1 def calculate_field(r: float, theta: float, phi: float):
```

```

2     delta: float = 0.01
3     p1x: float = potential(r, theta - delta, phi)
4     p2x: float = potential(r, theta + delta, phi)
5     p1y: float = potential(r, theta, phi - delta)
6     p2y: float = potential(r, theta, phi + delta)
7     p1z: float = potential(r - delta, theta, phi)
8     p2z: float = potential(r + delta, theta, phi)
9
10    bx: float = calculate_component(p1x, p2x)
11    by: float = calculate_component(p1y, p2y)
12    bz: float = calculate_component(p1z, p2z)
13    return bx, by, bz

```

Jedným z cieľov tejto práce je rozšíriť aktuálnu implementáciu simulácie trajektórií kozmického žiarenia o výpočet krustálneho geomagnetického poľa, ktoré sa počas výpočtu trajektórie kozmického žiarenia prirába k ostatným zložkám geomagnetického poľa. V úvode tejto kapitoly bolo zmienené, že krustálne geomagnetické pole tvorí súčasť internej - hlavnej zložky geomagnetického poľa Zeme. Preto aj jeho výpočet je založený na rovnakej aproximácii ako v prípade hlavného geomagnetického poľa. Rozdiel výpočtu krustálneho poľa spočíva vo väčšom počte sférických harmonických koeficientov, a teda vo väčšom maximálnom ráde výpočtu.

Načrtáva sa preto potenciálna možnosť rozšírenia, resp. úpravy aktuálneho kódu pre výpočet hlavnej zložky interného geomagnetického poľa o výpočet krustálneho geomagnetického poľa v simulácii. Zmena by spočívala v parametrizácii koeficientov a ich počtu. Pokusy o toto rozšírenie doposiaľ neboli úspešné kvôli implementovanému spôsobu výpočtu faktoriálu v algoritme z balíka Tsyganenkových aplikácií. Pri väčších rádoch výpočtu dochádzalo k pretečeniu použitých dátových typov. Tento problém bol vyriešený v opísanej Python implementácii pre výpočet poľa, ktorá na výpočet Schmidových semi-normalizovaných asociovaných Legendreových funkcií používa rekurentný vzťah (35) a (36) z knihy [35]. Alternatívnym potenciálnym riešením je prepis tejto verzie výpočtu geomagnetického poľa z existujúceho Python kódu do jazyka C a jeho integrovanie do simulácie.

Nevýhodou výpočtu geomagnetického poľa je, že algoritmus výpočtu magnetického potenciálu v jednom bode (volanie funkcie *potential* v zdrojovom kóde 3.1) má asymptotickú časovú zložitosť $O(N^2)$. Pre získanie troch zložiek vektora magnetického poľa je potrebné dokopy vypočítať magnetický potenciál v šiestich bodoch ako je tiež znázornené v zdrojovom kóde 3.1.

V rámci snahy o nájdenie lepšieho riešenia boli analyzované kódy existujúcich voľne dostupných implementácií výpočtov interného geomagnetického poľa. Bolo zistené, že implementácia *pyIGRF*³, ktorá počíta hlavnú – internú zložku geomagnetického poľa modelom IGRF, realizuje výpočet pomocou diferenciálnej formy rovnice potenciálu. Pri tomto spôsobe sa nepočíta numerický gradient funkcie potenciálu z viacerých vypočítaných magnetických potenciálov. Namiesto toho sa pre určenie zložiek vektora geomagnetického poľa používa derivovaná forma rovnice pre výpočet potenciálu.

V praxi to znamená, že pre získanie zložiek vektora geomagnetického poľa nie je potrebné 6-krát opakovať algoritmus s asymptotickou časovou komplexitou $O(N^2)$. Tento výpočet je komplikovanejší z matematického hľadiska, čo sa odzrkadľuje vo väčšom počte matematických operácií. Je ale možné predpokladať, že tento spôsob výpočtu bude efektívnejší, keďže časť kódu s kvadratickou časovou komplexitou nebude viackrát opakovaná.

3.4 Overenie výpočtov existujúcej implementácie

Pred vytvorením konkrétneho návrhu a následnej implementácie výpočtu krustálneho poľa do modelu COR je potrebné overiť správnosť existujúcej Python implementácie výpočtu interného geomagnetického poľa, ktorá bola opísaná v predchádzajúcej sekcii. Doterajšie experimenty s výpočtom krustálneho poľa boli v rámci výskumu ÚEF SAV postavené na modeloch *MF4* a *LCS-1*. Z tohto dôvodu sa pokúsime overiť správnosť výpočtu využitím predovšetkým týchto modelov.

Keďže neexistujú žiadne voľne dostupné implementácie týchto modelov (ani v podobe webových „kalkulačiek“, ako v prípade modelu interného poľa IGRF), jediný možný spôsob overenia je porovnanie výsledkov výpočtov so zverejnenými dátami. Na stránkach modelu *MF4*⁴ je možné okrem koeficientov získať aj hodnoty vertikálnej zložky krustálneho geomagnetického poľa na sieti bodov s rozstupom $0,25^\circ$ na zemepisnej dĺžke aj šírke vo výške 58 km a 400 km nad zemským povrchom. Tieto dáta sú dostupné v textovej podobe vo forme 3 stĺpcov, pričom prvé dva určujú zemepisnú dĺžku a šírku, tretí určuje hodnotu vertikálnej zložky poľa. Ako prvý krok je potrebné vypočítať na tej istej sieti bodov krustálne pole existujúcim Python kódom. Následne môžu byť hodnoty vertikálnej zložky porovnané so získanými hodnotami prostredníctvom výpočtu percentuálneho rozdielu.

³Implementácia *pyIGRF* je dostupná na: <https://www.ngdc.noaa.gov/IAGA/vmod/igrf.html>

⁴Webové stránky modelu *MF4*: <https://geomag.colorado.edu/magnetic-field-model-mf4>

Aktuálna verzia Python skriptu pre výpočet poľa vyžaduje pri spustení tri argumenty príkazového riadku: polomer (vzdialenosť od stredu Zeme), následne geografickú košíрку⁵ a dĺžku v stupňoch. Po spustení sú na štandardný výstup vypísané hodnoty zložiek vektora krustálneho poľa na mieste určenom špecifikovanými súradnicami. Tento mechanizmus bol pre účely kontroly výpočtov zmenený nasledovným spôsobom:

1. skript po spustení načíta súradnice bodov siete (prvé 2 stĺpce) zo získaného textového súboru,
2. pre každý bod vypočíta hodnoty zložiek vektora krustálneho geomagnetického poľa a vypočítané údaje zapíše do samostatného súboru,
3. vypočíta percentuálny rozdiel vypočítanej vertikálnej zložky poľa od získanej (referenčnej) spôsobom vo vzorci 3.3, kde B'_z je referenčná hodnota,
4. nakoniec zapíše rozdiely do samostatného súboru.

$$\frac{|B'_z - B_z|}{|B'_z|} \times 100 \quad (3.3)$$

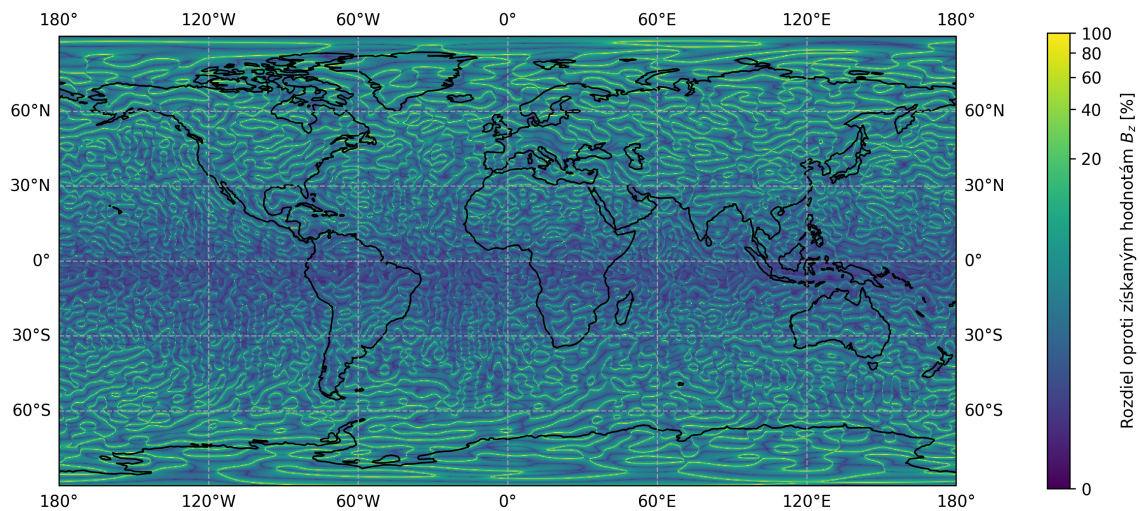
Celkový počet bodov v sieti s rozstupom $0,25^\circ$, ktoré pokrývajú celú Zem je viac ako 10 miliónov. Vzhľadom na veľké množstvo jednotlivých výpočtov magnetického poľa bol výpočet implementovaný paralelne využitím triedy *Pool* dostupnej v štandardnej Python knižnici *multiprocessing*. Tento mechanizmus poskytuje praktické prostriedky paralelizácie definovanej funkcie výpočtu naprieč množstvom vstupných údajov. V zdrojovom kóde 3.2 je prezentovaná ukážka paralelného spustenia funkcie *fun* výpočtu krustálneho poľa nad zoznamom jej argumentov v poli *data*. V konštruktoze triedy *Pool* je možné špecifikovať počet procesov, ktoré budú paralelne vykonávať telo požadovanej funkcie.

Zdrojový kód 3.2: Ukážka využitia triedy *Pool* Python knižnice *multiprocessing* pre paralelný výpočet

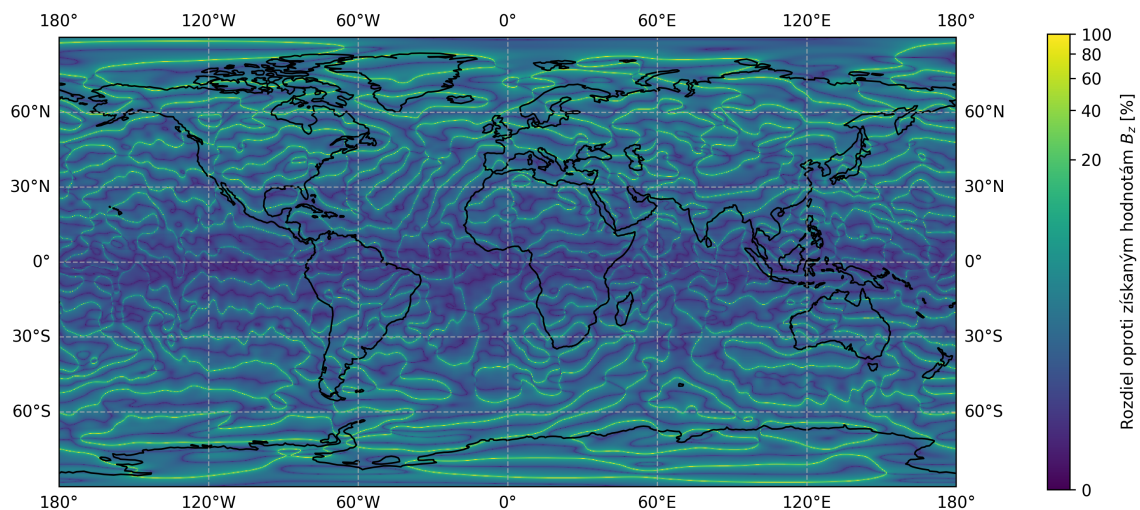
```
1 data: list[list[float]] = [[...], ...]
2 with multiprocessing.Pool(12) as pool:
3     result_data = pool.map(fun, data)
```

Získané percentuálne rozdiely boli vizualizované prostredníctvom knižnice *matplotlib* v kombinácii s knižnicou *cartopy*, ktorá umožňuje vykreslenie dát na mape. Výsledkom je teplotná mapa 3.2, ktorá zobrazuje percentuálne rozdiely vertikálnej zložky poľa vo výške 58 km. Postup výpočtu, porovnania a následnej vizualizácie bol opakovaný aj pre výšku 400 km 3.3.

⁵Geografická košíрка je v sférickej sústave súradníc komplementárny uhol ku geografickej šírke



Obr. 3.2: Percentuálny rozdiel vypočítaných hodnôt vertikálnej zložky vektora krustálneho geomagnetického poľa modelom *MF4* oproti referenčným hodnotám vo výške 58 km

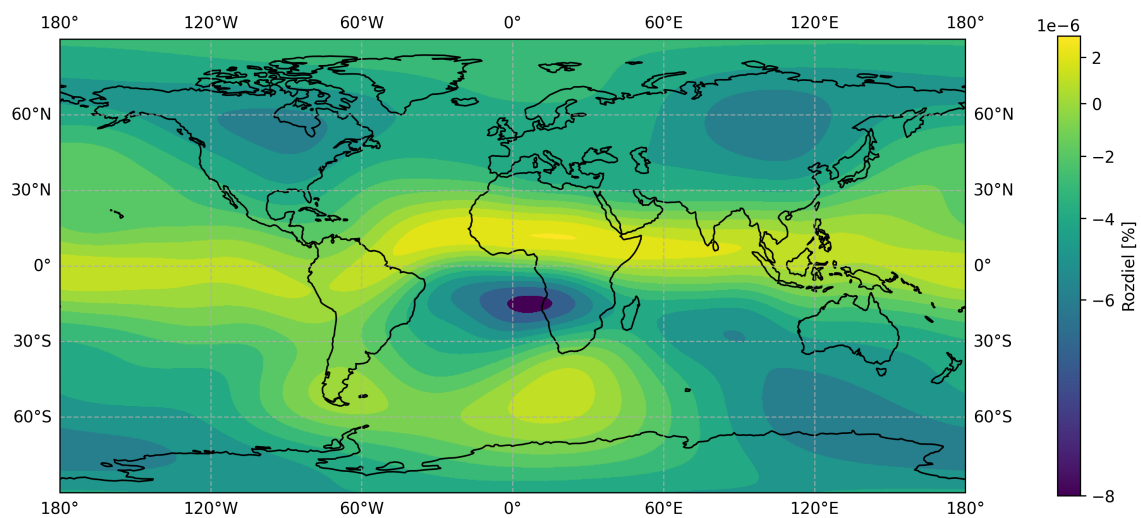


Obr. 3.3: Percentuálny rozdiel vypočítaných hodnôt vertikálnej zložky vektora krustálneho geomagnetického poľa modelom *MF4* oproti referenčným hodnotám vo výške 400 km

Z vizualizácií je evidentná značná diskrepancia hodnôt, pričom na určitých miestach rozdiel presahuje 100 %. Rozdiely väčšie ako 100 % sú v tomto prípade vykreslené rovnakou farbou. Tento výsledok presnosti nie je akceptovateľný. V rámci pokusu o elimináciu možných príčin nepresnosti bol rovnakým spôsobom realizovaný výpočet hlavnej – internej zložky geomagnetického poľa modelom IGRF (13. generácia). Tento model počíta magnetické pole len do rádu 13 na rozdiel od modelu *MF4*, ktorý pracuje s koeficientami do rádu 90. V praxi to znamená úpravu načítania koeficientov a zohľadnenia ich menšieho počtu pri výpočte magnetického potenciálu v kóde. Výpočet bol realizovaný na rovnakej sieti

bodov, pričom výsledky boli porovnávané s výsledkami referenčnej implementácie *pyIGRF*, ktorej kód bol analyzovaný a popísaný v predchádzajúcej sekcii. Kód *pyIGRF* bol upravený tak, aby výpočet poľa na jednotlivých bodoch mohol prebiehať paralelne a aby vypočítané výsledky boli v jednotnom formáte vhodnom pre vizualizáciu.

Nakoľko sme tentokrát mali k dispozícii referenčnú implementáciu výpočtu, bolo možné vypočítať a porovnať všetky zložky vektora geomagnetického poľa a rovnako aj jeho veľkosť. Výsledky oboch implementácií výpočtu geomagnetického poľa modelom IGRF sa zhodovali na viac ako tisíciný desiatinných miest, pričom percentuálne rozdiely veľkosti vektora geomagnetického poľa sa pohybovali na úrovni milióntin percent, ako je možné vidieť na obrázku 3.4.



Obr. 3.4: Percentuálny rozdiel vypočítaných hodnôt veľkosti vektora interného geomagnetického poľa modelom IGRF oproti referenčným hodnotám vypočítaným prostredníctvom implementácie *pyIGRF* na povrchu Zeme

Keďže rozdiel výsledkov v prípade IGRF je prakticky nulový, môžeme tvrdiť, že príčina diskrepancie hodnôt pri modeli *MF4* nespočíva v matematickej chybe, resp. v logickej chybe v implementácii výpočtu. Pozorovaný rozdiel môže byť spôsobený množstvom faktorov. Pravdepodobne sa ale jedná o diskrepanciu spôsobenú rozdielnym systémom súradníc. Naša implementácia výpočtu geomagnetického poľa pracuje s *geocentrickým* systémom súradníc, ktorý aproximuje tvar Zeme ako dokonalú guľu. Hodnoty vertikálnej zložky krustálneho poľa získané zo stránok modelu *MF4* môžu byť vypočítané v *geodetickom* systéme súradníc, ktorý aproximuje tvar Zeme ako elipsu. Táto skutočnosť žiaľ nie je zdokumentovaná. Situácia s ostatnými verziami tohto modelu je podobná, a preto je hľadanie zhody implementácie výpočtu využitím modelu *MF* neefektívne.

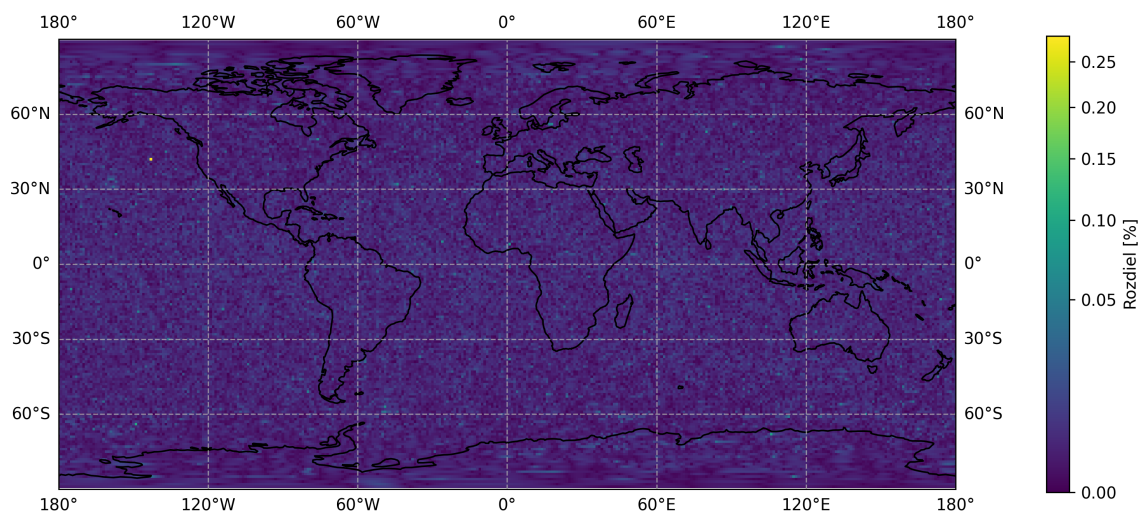
Pre model *LCS-1* neexistujú žiadne dostupné referenčné hodnoty magnetic-

kého poľa a rovnako neexistuje žiadny referenčný kód pre výpočet poľa týmto modelom. Najrelevantnejší z opísaných modelov sa ukazuje model *CHAOS-7*, nakoľko je najaktuálnejší a rovnako je dostupná oficiálna implementácia výpočtu geomagnetického poľa týmto modelom, ktorú je možné využiť pre overenie. Preto bola v rámci ďalšieho postupu zvolená úprava nášho programu pre prácu s koeficientmi modelu *CHAOS-7*.

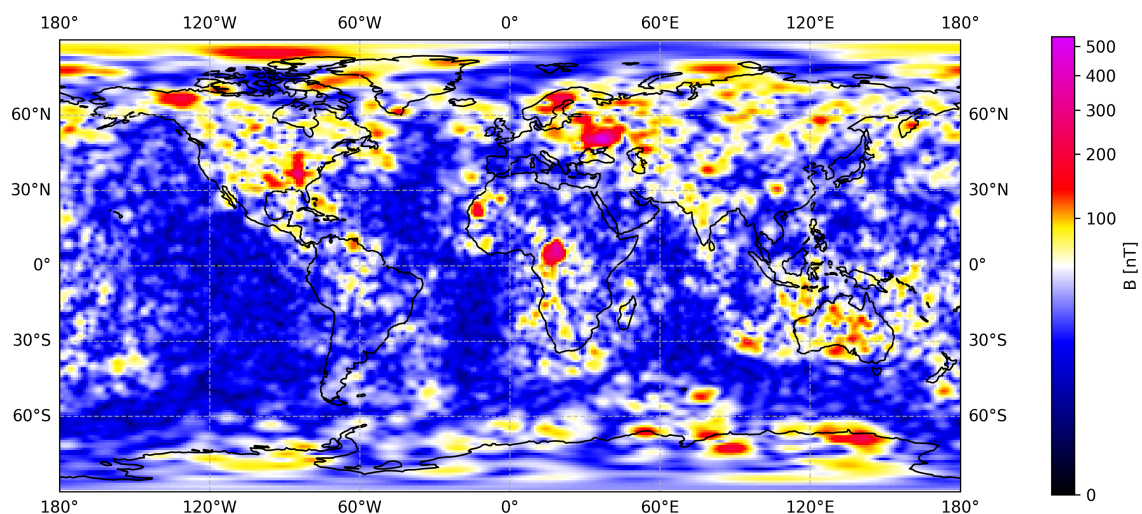
Kontrolný výpočet bol realizovaný na sieti bodov, tentokrát s redším rozstupom 1° . Táto hustota siete poskytne dostatočné rozlíšenie pre porovnanie výsledkov. Týmto kompromisom bol docielený 4-násobne rýchlejší celkový výpočet, nakoľko sa v sieti nachádza 16-násobne menej bodov. Rovnako ako v predchádzajúcom prípade bol výpočet spúšťaný paralelne využitím knižnice *multiprocessing*, ako je zobrazené v zdrojovom kóde 3.2. Na rovnakej sieti bodov bol následne spustený výpočet poľa s využitím knižnice *ChaosMagPy*, tiež paralelne pomocou knižnice *multiprocessing*.

Výsledkom bola teplotná mapa percentuálnych rozdielov výsledkov zobrazená na obrázku 3.5, ktorá vizualizuje rozdiely pri maximálnom ráde výpočtu 185. Je možné vidieť, že maximálny dosiahnutý percentuálny rozdiel medzi výsledkami oboch implementácií je 0,25 %. Maximálny rozdiel bol ešte menší s nižším rádom výpočtu. Pri ráde 85 bol maximálny rozdiel len 0,035 %. Pokiaľ rozdiel vo výpočtoch nepresahuje 1 %, považujeme výsledky za akceptovateľne podobné.

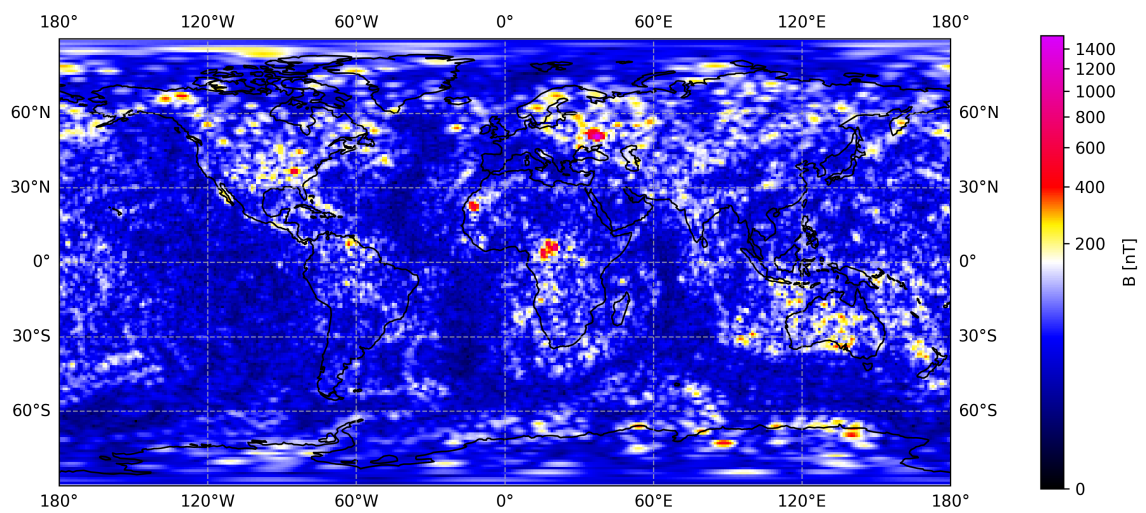
Na obrázku 3.6 je možné vidieť vizualizáciu krustálneho geomagnetického poľa pri ráde výpočtu 85 modelom *CHAOS-7.16*. Model jasne zachytáva litosférické geomagnetické anomálie – oblasti so zvýšeným pôsobením geomagnetického poľa. Najvýznamnejšie sú: stredoafriická anomália v Bangui a anomália v Kursku (Rusko). Obrázok 3.7 zachytáva krustálne geomagnetické pole vypočítané modelom *CHAOS-7.16* pri maximálnom ráde 185. Oproti prípadu zobrazenom na obrázku 3.6 je evidentná väčšia presnosť – hranice zmienaných anomálií sú presnejšie vymedzené. Z hľadiska fyzikálnej simulácie má preto zmysel využiť najvyšší možný rád výpočtu. Pri ráde 185 bola najvyššia intenzita magnetického poľa približne 1400 nT, zatiaľ čo v predchádzajúcom prípade bola vypočítaná najväčšia hodnota okolo 500 nT. Tento rozdiel pri výsledkoch je v prípade krustálneho geomagnetického poľa očakávaný.



Obr. 3.5: Percentuálny rozdiel vypočítaného krustálneho geomagnetického poľa modelom CHAOS-7.16 oproti referenčným hodnotám poľa vypočítaným prostredníctvom knižnice *ChaosMagPy* na povrchu Zeme (rád 185)



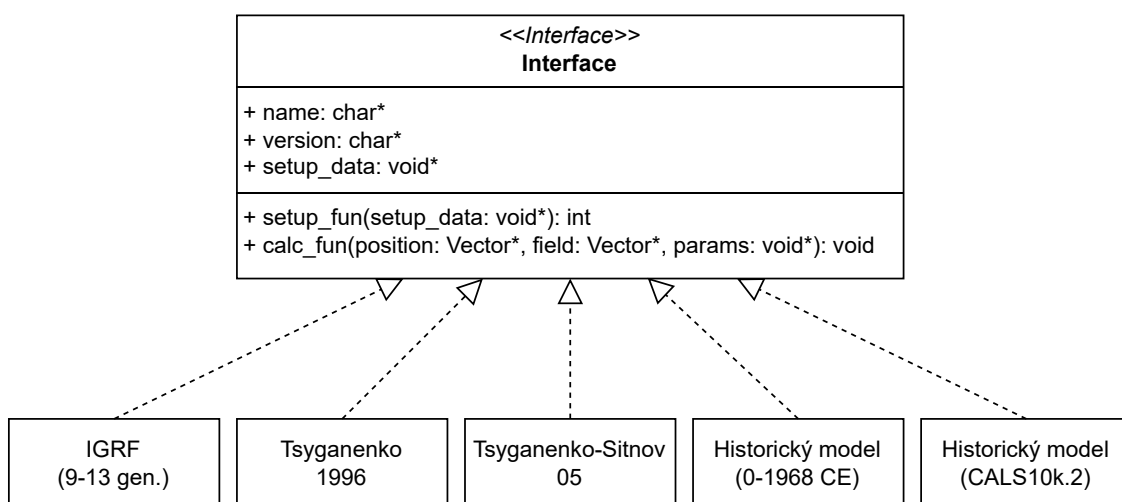
Obr. 3.6: Vizualizácia krustálneho geomagnetického poľa modelom CHAOS-7.16 s maximálnym rádom výpočtu 85



Obr. 3.7: Vizualizácia krustálneho geomagnetického poľa modelom CHAOS-7.16 s maximálnym rádom výpočtu 185

4 Návrh rozšírení a optimalizácie simulácie

Jedným z cieľov práce je rozšírenie aktuálnej simulácie trajektórií kozmického žiarenia v jazyku C o historické modely interného geomagnetického poľa, model externého geomagnetického poľa Tsyganenko 1996 (T96) a pridanie výpočtu krustálneho geomagnetického poľa. Súčasťou zmien je aj zavedenie jednotného rozhrania v kóde simulácie pre jednotlivé modely geomagnetického poľa. Zjednodušené rozhranie modelu je navrhnuté v diagrame na obrázku 4.1. V časti implementácie bude snahou priblížiť sa čo najviac k schéme rozhrania zobrazenej na diagrame aj napriek známym obmedzeniam v jazyku C, ktorý nepodporuje paradigmu OOP. V nasledujúcich sekciách kapitoly bude popísaný návrh implementácie rozšírení C verzie simulácie trajektórií kozmického žiarenia o zmienené modely.



Obr. 4.1: Diagram zobrazujúci jednotné rozhranie modelov geomagnetického poľa

V návrhu budú zároveň adresované nedostatky aktuálneho riešenia, ktoré boli spomenuté v sekcii 1.5 s cieľom vytvoriť nový simulačný nástroj, ktorý bude podporovať mód výpočtu odrezávacích rigidít častíc kozmického žiarenia, výpo-

čet geomagnetického poľa na špecifikovanej sieti bodov a výpočet individuálnej trajektórie častice kozmického žiarenia. Implementáciou týchto módov výpočtu bude nástroj pokrývať všetky požadované funkcionality systému COR po stránke výpočtu.

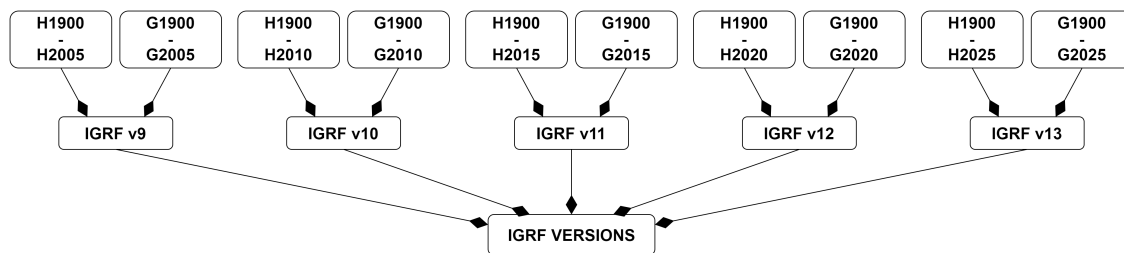
V poslednej sekcii tejto kapitoly budú navrhnuté prístupy optimalizácie kódu simulácie. Je potrebné podotknúť, že skutočné opodstatnenie týchto prístupov je možné zhodnotiť až po implementovaní predmetných funkcionalít a následnej profilácii, ktorou bude možné identifikovať problematickú časť kódu a následne pristúpiť k riešeniu. Avšak na základe znalosti existujúceho kódu a skúseností z predchádzajúcej práce budú navrhnuté postupy, ktorých zapracovanie by malo zefektívniť vykonávanie po stránke rýchlosti.

4.1 Pridanie historických modelov

V sekcii 1.2 bolo spomenuté, že historické modely opisujú interné – hlavné geomagnetické pole. Princíp výpočtu poľa týmito modelmi je teda totožný s výpočtom geomagnetického poľa prostredníctvom modelu IGRF. V sekcii 3.3 bolo spomenuté, že vstupom do výpočtu geomagnetického poľa sú sférické harmonické koeficienty, ktorých konkrétne hodnoty reprezentujú model poľa. Historické modely sú preto rovnako špecifikované sférickými harmonickými koeficientmi.

Nakoľko je algoritmus výpočtu hlavnej zložky interného geomagnetického poľa už v simulácii implementovaný, integrácia týchto modelov do kódu spočíva len vo výbere príslušných koeficientov modelu a ich využití v tom istom algoritme. V mojej bakalárskej práci [7] bol navrhnutý a implementovaný systém výberu konkrétnej generácie modelu IGRF prostredníctvom argumentu príkazového riadku, ako bolo zdokumentované v sekcii 1.3.2. Na základe argumentu bol vypočítaný index do poľa smerníkov jednotlivých množín koeficientov („IGRF VERSIONS“ na obrázku 4.2). Zmiený argument je vyžadovaný ako vstupný parameter výpočtu. Podobným spôsobom je možné implementovať výber ďalších modelov interného geomagnetického poľa.

Rozdiel medzi koeficientmi vybraných historických modelov (*CALS10k.2* a *0-1968 CE*) a koeficientmi modelu IGRF je, že historické koeficienty sú definované pre rozdielnu epochu rokov. Model IGRF špecifikuje koeficienty každých 5 rokov, zatiaľ čo modely *CALS10k.2* a *0-1968 CE* majú špecifikované koeficienty každých 50 rokov v kontexte systému COR (pre model *CALS10k.2* je možné vygenerovať koeficienty s rôznym časovým rozstupom – epochou). Bude potrebné upraviť systém iniciálneho spracovania koeficientov vo forme ich interpolácie, ktorý mo-



Obr. 4.2: Hierarchia polí smerníkov 9. až 13. generácie koeficientov modelu IGRF (prebraté z [7])

mentálne rozlišuje len iný počet epoch definovaných pre jednotlivé generácie modelu IGRF. Do procesu spracovania bude potrebné zobrať do úvahy veľkosť epochy a minimálny, resp. maximálny rok, ktorý model podporuje. Ďalší rozdiel je, že simulácia s historickými modelmi poľa nezahŕňa extrapoláciu koeficientov ako je to v prípade simulácie s modelom IGRF, ktorý v každej vydanej generácii špecifikuje predpokladané koeficienty pre nasledujúcu epochu. Bude preto potrebné, prispôbiť aj mechanizmus extrapolácie v procese spracovania koeficientov.

4.2 Prepis modelu Tsyganenko 1996

Ako bolo zmienené v sekcii 1.3, v aktuálnej C verzii simulácie je implementovaný model TS05. Tento model bol v minulosti prepísaný z jazyka Fortran od jazyka C spolu s kódom trasovania častice kozmického žiarenia. Verzia simulácie implementujúca model externého geomagnetického poľa T96 ostala dodnes v podobe Fortran kódu.

Prepis kódu nie je možné realizovať triviálne – prepisom každej funkcie a matematickej operácie priamo do C jazyka. Vo Fortran implementácii sú deklarované globálne premenné, ktoré sú vo viacerých funkciách (rutinách) aktualizované. Toto riešenie nebude možné realizovať v C verzii, kvôli implementovanej možnosti paralelného vykonávania výpočtu trajektórií prostredníctvom technológií OpenMP¹. Jednoduchým riešením je posunúť vyžadované hodnoty funkciám cez argumenty volania, prípadne posunúť smerníky na premenné deklarované lokálne v rámci funkcií. Je dôležité dbať na korektnosť prepísanej implementácie modelu a overiť jej výsledky s Fortran verzou.

Vo výslednom programe musí mať používateľ možnosť výberu modelu externého geomagnetického poľa, ktoré sa použije pri simulácii, podobne ako v prípade voľby modelu interného geomagnetického poľa. Z fyzikálneho hľadiska je

¹Viac o technológii OpenMP: <https://www.openmp.org/specifications/>

neprípustné realizovať výpočet modelmi TS05 a T96 súčasne. Externé geomagnetické pole môže byť počítané len prostredníctvom jedného modelu. Model T96 nevyžaduje špecifikáciu parametrov $W1 - W6$, ktorých účelom je opis prehistórie externého geomagnetického poľa modelom TS05. Tieto parametre sú štandardne súčasťou obsahu vstupného súboru simulácie. Túto skutočnosť bude potrebné zohľadniť pri načítavaní vstupného súboru v prípade modelu T96.

4.3 Pridanie výpočtu krustálneho poľa

Doteraz sa v rámci systému COR využívali len modely hlavného (interného) a externého geomagnetického poľa pre simulácie trajektórií častíc kozmického žiarenia v magnetosfére Zeme. Zahŕnutie výpočtu krustálneho poľa do simulácie znamená pripočítanie zložiek vektora geomagnetického poľa vypočítaného modelom krustálneho poľa do zložiek vektora celkového poľa.

Na základe analýzy existujúcich modelov krustálneho poľa v kapitole 3, ich aktuálnosti a dostupnosti referenčných výsledkov pre porovnanie bol pre implementáciu vybratý model *CHAOS-7.16*. Nakoľko rozšírenie aktuálnej implementácie algoritmu výpočtu interného geomagnetického poľa v simulácii nie je možné zrealizovať, ako bolo spomenuté v sekcii 3.3, je potrebné implementovať samostatný algoritmus pre tento výpočet. V sekcii 3.3 boli rovnako zmienené dva spôsoby implementácie, zahŕňajúce prepis existujúceho kódu v jazyku Python do jazyka C.

Predpoklad je, že druhá verzia výpočtu bude efektívnejšia na základe argumentácie v sekcii 3.3. Toto tvrdenie je potrebné overiť v skutočnej simulácii na cieľovej technológii. Preto má zmysel implementovať obe riešenia a experimentmi vybrať efektívnejší algoritmus.

Zároveň je potrebné, podobne ako v prípade interného a externého poľa, mať možnosť zvoliť model výpočtu krustálneho poľa pri spustení. Po dokončení implementácie bude v nástroji možnosť voľby len jedného modelu krustálneho poľa. Nie je však vylúčené, že v budúcnosti bude nástroj rozšírený o ďalšie modely. Preto by riešenie malo byť tiež jednoducho rozšíriteľné.

4.4 Pridanie ďalších módov simulácie

C verzia simulácie aktuálne umožňuje spustiť simuláciu len vo forme výpočtu dolnej, hornej a efektívnej odrezávacej rigidity častice na súradniciach špecifikovaných vo vstupnom súbore. Ako bolo zmienené v sekcii 1.1, v systéme COR

sa okrem výpočtu odrezávacích rigidít realizujú aj výpočty individuálnych trajektórií a výpočty geomagnetického poľa. Tieto typy výpočtov sa momentálne v systéme COR realizujú spúšťaním príslušných programov napísaných v jazyku *Fortran*. Jedným z cieľov tejto práce je rozšíriť C verziu simulácie pre podporu aj zmiených typov výpočtu.

V nasledujúcich sekciách budú opísané zmeny, ktoré je potrebné zapracovať do riešenia v prípade oboch zmiených módov výpočtu.

4.4.1 Výpočet individuálnej trajektórie

Výpočet individuálnej trajektórie spočíva v úprave existujúceho algoritmu pre výpočet odrezávacích rigidít častice kozmického žiarenia. Podstata výpočtu odrezávacích rigidít je prechod rozsahom rigidít častice s určitým krokom, pričom pre každú hodnotu rigidity je vypočítaná trajektória častice. Vývojový diagram zobrazený na obrázku 4.3 opisuje algoritmus trasovania častice s logikou pre výpočet odrezávacích rigidít. Pôvodne bol prezentovaný v rámci bakalárskej práce [7], ktorá sa zameriavala len na verziu simulácie, ktorá produkuje kalkulované hodnoty odrezávacích rigidít. Pre účely návrhu pridania výpočtu individuálnej trajektórie boli v diagrame 4.3 červenou farbou zvýraznené časti logiky, ktoré nie sú ďalej relevantné pre tento výpočet. Cieľom výpočtu individuálnej trajektórie je trasovať časticu s jednou konkrétnou hodnotou rigidity. Po ukončení výpočtu jednej trajektórie častice program skončí.

Súčasťou zmien je pridanie kroku zápisu súradníc častice do výstupného súboru v každej iterácii. V aktuálnej Fortran alternatíve tohto výpočtu sa vytvárajú dva súbory s názvami *tragsm* a *trasfer*. Súbor *tragsm* slúži pre zápis GSM súradníc častice a súbor *trasfer* slúži pre zápis sférických súradníc častice v geocentrickej sústave. Rovnaké správanie je potrebné pridať aj do novej verzie simulácie. V diagrame na obrázku 4.3 je zeleným vyznačený zmiený krok zápisu, ktorý je potrebné doplniť.

Pri výpočte individuálnej trajektórie je formát vstupného súboru zachovaný. Podmienkou je špecifikácia rovnakej počiatkovej a koncovej hodnoty rigidity v prvom riadku vstupného súboru. To znamená, že pre výpočet individuálnej trajektórie pre časticu s rigiditou 4,3 GV musí prvý riadok vstupného súboru vyzeráť tak, ako je znázornené v zdrojovom kóde 4.1.

Zdrojový kód 4.1: Ukážka časti vstupného súboru simulácie v prípade výpočtu individuálnej trajektórie

```
1          4.3000  -1.    4.3000
```

2	1.00	48.66	20.53
3	...		

4.4.2 Výpočet geomagnetického poľa

Výpočet geomagnetického poľa v kontexte systému COR znamená výpočet zložiek vektora magnetickej indukcie na sieti bodov v rozsahu bodov špecifikovanom vo vstupnom súbore. Vývojový diagram na obrázku 4.4 opisuje algoritmus výpočtu geomagnetického poľa na sieti bodov. Na diagrame je možné vidieť dva cykly – prechod rozsahom zemepisnej šírky a zemepisnej dĺžky s definovaným krokom. Po výpočte geomagnetického poľa na konkrétnom bode dôjde k zápisu zložiek vektora do výstupného súboru.

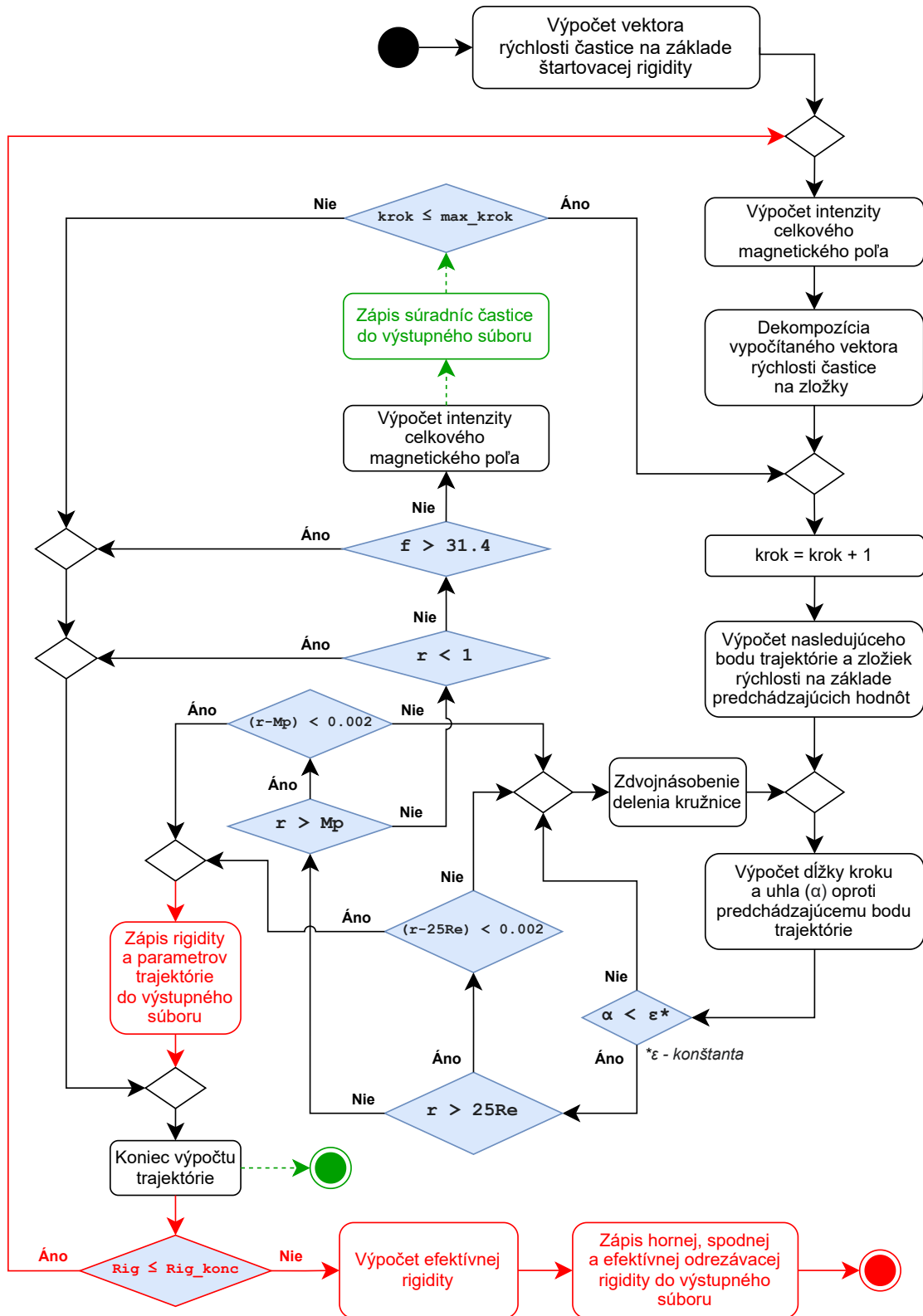
Podstatný rozdiel tohto módu výpočtu oproti ostatným je odlišný formát vstupného súboru. V zdrojovom kóde 4.2 je pre referenciu zobrazený príklad vstupného súboru pre mód výpočtu geomagnetického poľa. Význam jednotlivých riadkov vo vstupnom súbore je nasledovný:

1. riadok: polomer v násobkoch polomeru Zeme; počiatočná zemepisná šírka; počiatočná zemepisná dĺžka,
2. riadok: krok v zemepisnej šírke; krok v zemepisnej dĺžke; konečná zemepisná šírka; konečná zemepisná dĺžka,
3. riadok: rok; mesiac; deň; deň v roku; hodina; minúta; sekunda,
4. riadok: hodnota -1.00 , ktorá značí koniec vstupného súboru.

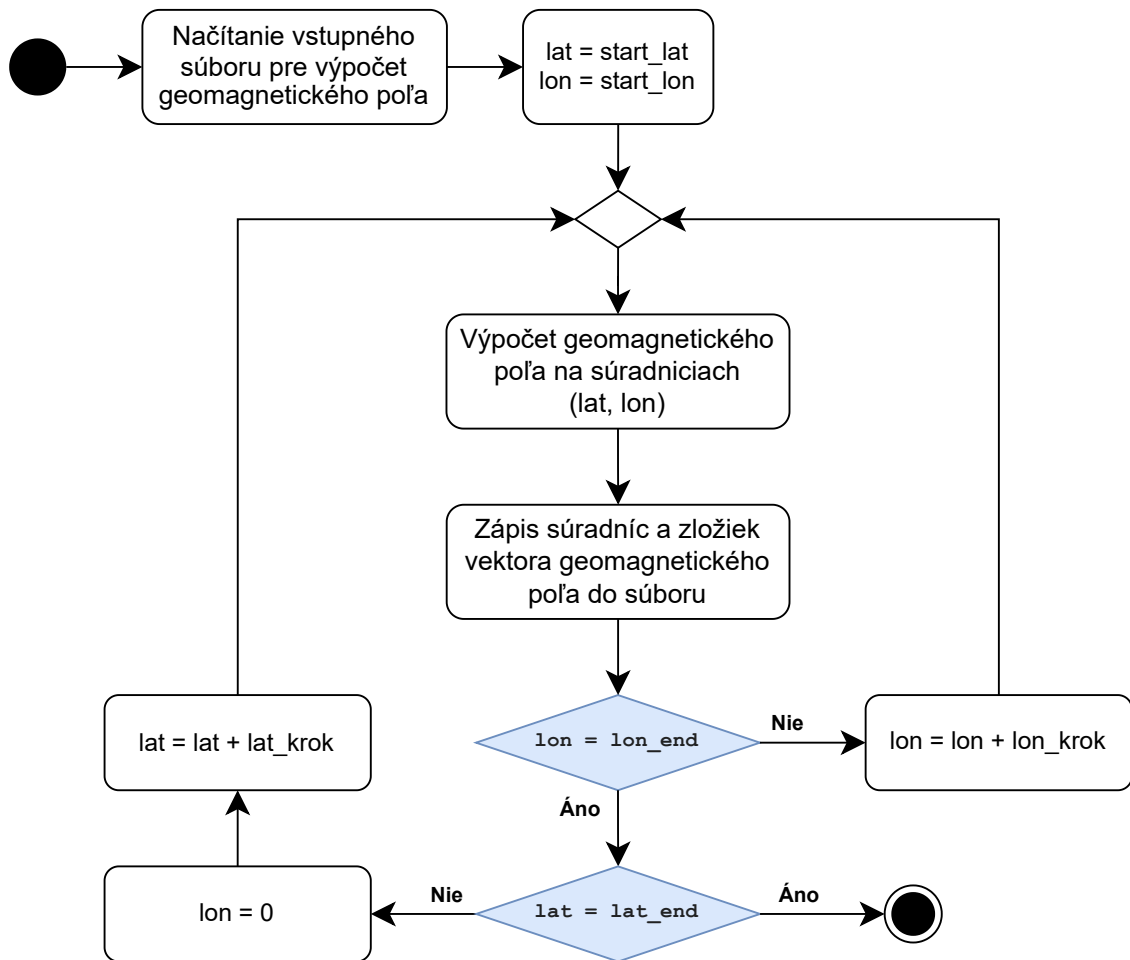
Zdrojový kód 4.2: Príklad obsahu vstupného súboru pre mód výpočtu geomagnetického poľa

1	1.00	0.00	-90.00
2	1.00	1.00	360.00 90.00
3	2000	3 28 88 16 00 00	
4	-1.00		

V závislosti od zvoleného modelu externého geomagnetického poľa môžu byť vyžadované ďalšie riadky vo vstupnom súbore pred značením konca súboru. V prípade modelu T96 sa jedná o parametre: DST index $[nT]$, dynamický tlak slnečného vetra v danom dátume a čase $[nPa]$, intenzita Y a Z zložky medziplanetárneho magnetického poľa v danom dátume a čase. V prípade modelu TS05 pribudne ešte navyše riadok s parametrami $W1$ až $W6$, ktoré opisujú prehistóriu externého geomagnetického poľa.



Obr. 4.3: Vývojový diagram algoritmu trasovania častice s vyznačenými úpravami pre výpočet individuálnej trajektórie



Obr. 4.4: Vývojový diagram algoritmu pre výpočet geomagnetického poľa na sieti bodov

4.5 Spôsob špecifikácie volieb pri spustení výpočtu

Aktuálna verzia C simulácie podporuje špecifikovanie volieb výpočtu pri spustení zdokumentovaných v sekcii 1.3.2 prostredníctvom argumentov príkazového riadku. Všetky argumenty sú vyžadované. Zmeny a rozšírenia navrhnuté v predchádzajúcich sekciách vyžadujú rozšírenie volieb pri spustení výpočtu. Okrem výberu modelov geomagnetického poľa pribudne aj voľba módu výpočtu.

Je preto potrebné zaviesť štandardný systém, ktorý by vylepšil používateľský zážitok s nástrojom v konzolovom rozhraní a zahrnul všetky opísané možnosti spustenia. Vhodným riešením je organizácia argumentov príkazového riadku prostredníctvom „prepínačov“, resp. „flagov“. Zároveň sa týmto spôsobom rozhranie priblíži k štandardným UNIX konzolovým nástrojom. Funkcia jednotlivých prepínačov bude nasledovná:

- *-m* <mód>: mod výpočtu (*cutoff* – výpočet odrezávacích rigidít (predvo-

lené), *field* – výpočet magnetického poľa, *trajectory* – výpočet individuálnej trajektórie),

- *-o <súbor>*: cesta k výstupnému súboru,
- *-p*: paralelný výpočet,
- *-s <počet krokov>*: maximálny počet krokov výpočtu jednej trajektórie,
- *-u <uhol>*: veľkosť uhla TU , ktorý ovplyvňuje presnosť výpočtu trajektórie,
- *-c <model>*: model krustálneho geomagnetického poľa (aktuálne len možnosť: *chaos7.16*),
- *-e <model>*: model externého geomagnetického poľa (*ts05, t96*),
- *-i <model>*: model interného geomagnetického poľa (*igrf9, igrf10, ..., igrf13, hist, cal510k.2*).

Okrem zmienených volieb bude vyžadovaný jeden povinný argument, a to vstupný súbor. Pri realizovaní návrhu bola zvážená alternatíva špecifikácie zmienených volieb vo vstupnom súbore, keďže vstupný súbor rovnako slúži na špecifikáciu vstupných hodnôt do výpočtu. Hodnoty vo vstupnom súbore sa však týkajú výlučne fyzikálnej časti a preto je vhodné tento vstup oddeliť od všeobecných vstupných parametrov a volieb výpočtu. Ako bolo spomenuté v kapitole 1, výpočty, ktoré program realizuje sú zakomponované do systému COR. Systém COR okrem spracovávania výsledkov simulácie generuje vstupné súbory a realizuje spúšťanie. Navrhnuté riešenie špecifikácie volieb prostredníctvom argumentov príkazového riadku je taktiež jednoduchšie integrovateľné do existujúceho systému a jeho plánovaných rozšírení.

Simulácie realizované programom vždy zahŕňajú výpočet internej – hlavnej zložky geomagnetického poľa. V prípade, že cieľom používateľa je skúmať vplyv geomagnetických búrok na trajektórie kozmického žiarenia, príslušnou voľbou spustenia môže špecifikovať model externého geomagnetického poľa, ktorého výsledky sa pripočítajú k hlavnej zložke poľa. Rovnakým spôsobom môže používateľ do výpočtu geomagnetického poľa zaradiť krustálnu zložku interného poľa. Z tohto dôvodu bude program predvolene počítať geomagnetické pole najaktuálnejším modelom IGRF. Verziu modelu IGRF bude možné prepísať voľbou *-i*. Najjednoduchšie spustenie programu je zobrazené vo výpise 4.3 so vstupným súborom *infile*. Výpis 4.4 znázorňuje spustenie výpočtu s predefinovaným modelom interného poľa IGRF na verziu 12 a zahrnutie modelu externého poľa TS05 do výpočtu.

Zdrojový kód 4.3: Ukážka najjednoduchšieho spustenia výpočtu

```
$ ./cor infile
```

Zdrojový kód 4.4: Ukážka spustenia výpočtu s prepísaným modelom interného geomagnetického poľa a zahrnutým modelom externého geomagnetického poľa

```
$ ./cor -iigrf12 -ets05 infile
```

4.6 Návrh optimalizácie simulácie

Na základe poznatkov z kapitoly 2 bude prvým krokom snaha o minimalizáciu využitia smerníkov, ktoré sa v kóde často využívajú pre sprístupnenie hodnoty premennej vo volanej funkcii aj v prípadoch, kedy nedochádza k aktualizovaniu jej hodnoty. Dereferencia smerníka môže vo všeobecnosti znamenať prístup k časti pamäte, ktorá sa nenachádza v cache. To môže ovplyvniť efektivitu vykonávania po stránke rýchlosti. Z teoretického hľadiska má zmysel využiť smerník len v prípade, keď je zámerom aktualizovať hodnotu premennej vo volanej funkcii a v prípade, keď je potrebné sprístupniť vo funkcii dátový typ (štruktúru), ktorá zaberá v pamäti viac ako je veľkosť adresy (smerníka), keďže dochádza ku kopírovaniu hodnoty. V ostatných prípadoch je využitie smerníka neopodstatnené a je preto vhodnejšie kopírovať hodnotu premennej v rámci argumentov funkcie. Platnosť tejto teórie však závisí od konkrétneho kódu a architektúry hardvéru. Faktom je, že problém v súvislosti so smerníkmi nemusí byť pri dnešných mikroprocesoroch a pokročilých kompilátoroch kódu relevantný. Stále je však na mieste zamyslieť sa nad využitím smerníka pri argumentoch funkcie minimálne z hľadiska dobrej praxe programovania.

Model externého geomagnetického poľa T96, ktorý je v rámci tejto práce pridaný do simulácie vyžaduje parameter PS , ktorým je možné špecifikovať uhol naklonenia geodipólu. V prípade predmetnej simulácie trajektórií kozmického žiarenia sa tento parameter nevyužíva, resp. jeho hodnota je vždy nastavená na hodnotu 0. Po analýze existujúceho Fortran kódu sa javí ako vhodná možnosť odstránenie tohto parametra z kódu výpočtu. V praxi to bude znamenať tiež odstránenie nepotrebných matematických operácií v spojitosti s týmto parametrom. Tieto matematické operácie v kombinácii s parametrom PS nastaveným na hodnotu 0 znamenajú vo väčšine prípadov násobenie číslom 1 alebo 0, prípadne pričítanie čísla 0 k určitej hodnote. Pre demonštráciu, zdrojový kód 4.5 obsahuje časť kódu modelu T96, ktorý je možné zjednodušiť na jeden riadok: $DXSX = 1.D0$, keďže $\sin(0) = 0$.

Zdrojový kód 4.5: Ukážka časti Fortran zdrojového kódu modelu T96 s nadbytočnými matematickými operáciami v kontexte simulácie

```

1  SPS = SIN(PS)
2  SPSC1 = SPS/C1
3  SPSS = SPSC1/R*C
4  CPSS = DSQRT(1.D0-SPSS**2)
5  DPSRR = SPS/(R*R)*(CS*R-C)/DSQRT((R*C1)**2-(C*SPS)**2)
6  DXSX = CPSS-X*ZSWW*DPSRR

```

Rovnaký spôsob optimalizácie je možné aplikovať aj na existujúci model externého geomagnetického poľa TS05. Tento model okrem parametra *PS* vyžaduje parametre *IOPGEN*, *IOPT*, *IOPB* a *IOPR*, ktoré sú rovnako v rámci simulácie konštantne nulové.

Ako bolo zmienené v kapitole 2, keďže model T96 pochádza od rovnakého autora (N. A. Tsyganenka), ako v prípade modelu TS05, bude teoreticky možné aplikovať rovnaké prístupy optimalizácie algoritmov vo funkciách ako v rámci bakalárskej práce [7]. Z tohto hľadiska má zmysel venovať sa ďalej tejto problematike po implementácii modelu do simulácie. Nasledovný postup bude potrebné zvážiť na základe výsledkov z profilácie kódu.

Ďalšia možnosť optimalizácie spočíva v experimentovaní so špeciálnymi prepínačmi – možnosťami kompilátora GCC²:

- *-O3*: aktivácia optimalizácií tretej úrovne,
- *-fno-math-errno*: nenastaví premennú *errno* po volaní matematických funkcií, ktoré sú vykonané v rámci jednej inštrukcie (napr. *sqrt*),
- *-fno-trapping-math*: počas behu programu nemôžu nastať prerušenia (výnimky) v súvislosti s číslami s pohyblivou rádovou čiarkou vo forme delenia nulou, pretečenie, podtečenie, ... ,
- *-march=native*: využitie všetkých dostupných rozšírení inštrukčnej sady konkrétneho procesora,
- *-ffp-contract=off*: vypnutie kontrakcie výrazov s číslami s pohyblivou rádovou čiarkou (zrušenie využitia FMA inštrukcií),
- *-finline-limit=n*: umožňuje špecifikovať maximálnu veľkosť funkcií, ktoré budú v mieste volania nahradené priamo kódom ich tela.

²<https://gcc.gnu.org/onlinedocs/gcc/Optimize-Options.html>

Na základe poznatkov z kapitoly 2 je známe, že voľba *-march=native* zrýchli výpočet ale spôsobí diskrepanciu vo výsledkoch v dôsledku využitia FMA inštrukcií. Využitie FMA inštrukcií je predvolene vypnuté, avšak v dôsledku aplikácie *-march=native* je ich využitie aktivované. Prostredníctvom voľby *-ffp-contract=off* je možné explicitne vypnúť využitie týchto inštrukcií.

5 Implementácia a optimalizácia geomagnetických modelov a nových výpočtových módov

Táto kapitola je zameraná na implementáciu rozšírení simulácie trajektórií kozmického žiarenia. V predchádzajúcej kapitole bol opísaný návrh rozšírení vo forme pridania nových modelov geomagnetického poľa a módov výpočtu. Tieto rozšírenia vyžadujú systematický prístup implementácie, hlavne kvôli potenciálnej možnosti pridania ďalších modelov geomagnetického poľa do nástroja v budúcnosti. Z tohto dôvodu sa pristúpilo k celkovej refaktorizácii existujúceho C kódu simulácie.

Najväčšou výzvou bolo vymyslieť vhodný spôsob implementácie po architektonickej stránke. Cieľom bolo adresovať nedostatok týkajúci sa aktuálnej organizácie modulov kódu opísanom v sekcii 1.5 a zachovať, prípadne zlepšiť efektívnosť výpočtu z hľadiska času. Predovšetkým bolo dôležité zaviesť zmeny tak, aby nový kód výpočtu generoval identické výsledky s existujúcimi verziami výpočtov v jazyku C a Fortran.

5.1 Refaktorizácia kódu simulácie v jazyku C

Modely geomagnetického poľa sú v simulačnom programe vnímané ako knižnice, ktoré boli zapracované do algoritmu trasovania častice kozmického žiarenia. To znamená, že časti kódu, ktoré realizujú výpočet geomagnetického poľa prostredníctvom určitého modelu neboli v minulosti vyvinuté priamo pre účely výpočtu trajektórií. Napriek tomu sú tieto logicky oddelené časti kódu súčasťou jedného celku a sú vzájomne prepojené závislosťami na pomocných funkciách, ktoré sú využívané naprieč celým kódom simulácie. Podstata refaktorizácie preto spočívala v oddelení kódu pre trasovanie častice kozmického žiarenia a kódu jednotlivých modelov geomagnetického poľa. Táto zmena bola nevyhnutná pre lep-

šiu udržiavateľnosť a rozšíriteľnosť kódu simulácie.

Rozdelenie kódu modelov a trasovania bolo docielené vytvorením samostatných knižníc pre jednotlivé modely, ktoré sa pri zostavení staticky nalinkujú s kódom trasovania. Kódy knižníc boli zároveň aj fyzicky oddelené do samostatných adresárov. Zmienový problém so závislosťami na pomocných funkciách bol riešený dvoma spôsobmi: odstránením volania funkcie alebo presunom jej volania do hlavného kódu simulácie – kódu trasovania častice.

Volania funkcie *custom_pow*, ktorá pôvodne realizovala vlastný algoritmus pre výpočet mocniny čísla boli nahradené priamym násobením čísel. Napríklad v prípade druhej mocniny čísla x bolo volanie *custom_pow*(x , 2) nahradené zápisom $x*x$. Vo väčšine prípadov sa jednalo o výpočet druhej alebo tretej mocniny. Táto zmena na základe zistení z mojej bakalárskej práce [7] nezapríčiní diskrepanciu vo výsledku. Volania pomocných funkcií pre konverziu medzi geocentrickými a Geocentric Solar Magnetospheric (GSM) súradnicami boli umiestnené pred, resp. po volaní príslušnej knižničnej funkcie pre výpočet geomagnetického poľa. Do funkcie pre výpočet geomagnetického poľa teda vstupujú súradnice v správnej sústave a ďalšie prevody pri výpočte poľa nie sú potrebné.

V prípade kódu modelu TS05 boli do samostatnej knižnice presunuté moduly *birk_tot*, *deformed* a *full_rc*, ktoré boli opísané v sekcii 1.3.1. Zároveň bol vytvorený modul *ts05*, v ktorom je implementovaná hlavná funkcia modelu. Kód modelu interného geomagnetického poľa IGRF, pozostáva len z jednej funkcie pre ktorú bol vytvorený modul *internal* v samostatnej knižnici. Rovnako boli presunuté hlavíčkové súbory, v ktorých sú definované sférické harmonické koeficienty modelu IGRF.

Ako bolo zdokumentované v kapitole 1.3.2, pre zostavenie programu je aktuálne využitý nástroj *CMake* s konfiguráciou definovanou v súbore *CMakeLists.txt*. Pre zostavenie oboch knižníc modelov geomagnetických polí boli v adresároch knižníc vytvorené samostatné konfigurácie *CMakeLists.txt*. Zdrojový kód 5.1 znázorňuje konfiguráciu pre model IGRF. Zostavenie knižnice je docielené príkazom *add_library()* na riadku 3, v ktorom je zahrnutý jeden zdrojový súbor *internal.c*.

Zvyšné riadky ďalej špecifikujú C štandard a nastavenia kompilátora (*-Wall* – zobrazenie všetkých výstražných správ, *-Werror* – všetky výstražné správy sú považované za chybu, *-O2* – zapnutie automatickej optimalizácie druhej úrovne). Konfigurácia *CMake* pre knižnicu modelu TS05 je zhotovená podobným spôsobom, oproti konfigurácii v zdrojovom kóde 5.1 sa líši počtom a názvom zdrojových súborov na riadku 3.

Zdrojový kód 5.1: CMake konfigurácia pre zostavenie knižnice modelu geomagnetického poľa v jazyku C

```
1 cmake_minimum_required(VERSION 3.10)
2 project(internal C)
3 add_library(${PROJECT_NAME} internal.c)
4 set_target_properties(
5     ${PROJECT_NAME} PROPERTIES C_STANDARD 17
6 )
7 target_compile_options(
8     ${PROJECT_NAME} PRIVATE -Wall -Werror -O2
9 )
```

Po oddelení kódu modelov geomagnetického poľa do samostatných knižníc bol refaktorizovaný kód trasovania častice kozmického žiarenia. Refaktorizácia spočívala:

- v prispôbení kódu vo forme vytvorenia jednotného rozhrania pre modely geomagnetického poľa,
- v minimalizácii počtu volaní jednoduchých pomocných funkcií,
- v minimalizácii využitia smerníkov na prenos hodnôt do pomocných funkcií prostredníctvom argumentov, na základe opodstatnení opísaných v sekcii 2,
- vo zvýšení čitateľnosti kódu.

Jednotné rozhranie modelov bolo vytvorené definíciou štruktúry zobrazenej v zdrojovom kóde 5.2. Táto štruktúra reprezentuje generický model geomagnetického poľa v kóde výpočtu trajektórií. Každý model je špecifikovaný názvom *name* a verziou *version* vo forme reťazca a hlavnou funkciou *calc_fun*, ktorá zrealizuje výpočet geomagnetického poľa – volanie knižničnej funkcie výpočtu poľa konkrétnym modelom. Vstupným parametrom pre výpočet poľa je bod, v mieste ktorého chceme získať vektor geomagnetického poľa. Tomu zodpovedá prvý parameter *gsm_position* typu *Vector* funkcie výpočtu poľa. Definícia typu *Vector* je zobrazená v zdrojovom kóde 5.3. Ide o *union* konštrukciu v jazyku C, ktorá reprezentuje buď karteziánske alebo sférické súradnice. Parameter *gsm_field* je smerník na vektor, do ktorého bude uložený výsledok výpočtu geomagnetického poľa.

Zdrojový kód 5.2: Definícia generickej štruktúry pre model geomagnetického poľa

```
1 typedef struct {
2     const char *name;
3     const char *version;
4     const void *setup_data;
5     int (*setup_fun) (
6         FILE* input_file,
7         const struct infile_header *infile_header,
8         struct models_params *model_params,
9         const void *setup_data
10    );
11    void (*calc_fun) (
12        Vector gsm_position,
13        Vector *gsm_field,
14        const struct models_params *params
15    );
16 } Model;
```

Zdrojový kód 5.3: Definícia dátového typu Vector

```
1 typedef union {
2     struct {
3         float x, y, z;
4     };
5     struct {
6         float r, theta, phi;
7     };
8 } Vector;
```

Pred začiatkom samotného výpočtu trajektórií je v aktuálnej C implementácii vykonaná inicializačná časť kódu. V tejto časti sa na základe údajov načítaných zo vstupného súboru inicializujú modely geomagnetického poľa. Inicializácia modelu interného geomagnetického poľa IGRF spočíva v interpolácii medzi sférickými harmonickými koeficientmi, ktoré sú v rámci verzie modelu definované pre epochy piatich rokov. Interpolácia je vykonaná na základe konkrétneho dátumu a času načítaného zo vstupného súboru. Výsledkom tohto procesu je množina spracovaných koeficientov, ktoré sú priamo aplikované pri výpočte. Model TS05 je inicializovaný načítaním šiestich parametrov $W1$ až $W6$ zo vstupného súboru, ktoré opisujú prehistóriu geomagnetického poľa. Vypočítané hodnoty z inicializačnej časti sú v aktuálnej implementácii uložené v lokálnych pre-

menných hlavnej funkcie *main()* a následne sú predané prostredníctvom argumentov volania do ďalších funkcií výpočtu.

Inicializačný kód modelov geomagnetického poľa v kóde trasovania častice je vykonaný volaním inicializačnej funkcie, ktorú v rámci štruktúry *Model* (definovanej v zdrojovom kóde 5.2) reprezentuje smerník *setup_fun*. Inicializačná funkcia spracuje a uloží výsledné hodnoty do štruktúry *models_params*. Smerník na túto štruktúru je následne vo výpočte predaný ako argument do funkcie výpočtu *calc_fun*. Posledný parameter inicializačnej funkcie *setup_fun* – smerník *setup_data* slúži na poskytnutie konštantných dát do inicializácie.

Definícia štruktúr reprezentujúcich modely geomagnetického poľa je zrealizovaná spôsobom zobrazeným na zdrojovom kóde 5.4. Pre každý model je definovaná samostatná statická konštanta typu *Model*. V prípade modelu IGRF boli vytvorené samostatné štruktúry pre každú generáciu modelu, ktoré sa líšia názvom, verzou a konštantnými inicializačnými dátami. Inicializačné dáta sú v prípade modelu IGRF vo forme sférických harmonických koeficientov špecifikovaných pre konkrétnu generáciu. Inicializačná funkcia a funkcia výpočtu sú v každej verzii tie isté. Model TS05 nevyžaduje žiadne statické inicializačné dáta, preto je v príslušnej štruktúre smerník inicializačných dát nastavený na hodnotu *NULL*. Okrem definície samotných štruktúr modelov sú zároveň definované polia smerníkov na tieto štruktúry samostatne pre modely interného a externého geomagnetického poľa (riadok 24 – 27 v zdrojovom kóde 5.4). Tieto polia sú predprípravou pre implementáciu mechanizmu výberu modelov prostredníctvom argumentov príkazového riadka.

Zdrojový kód 5.4: Deklarácia a definícia modelov geomagnetického poľa

```
1 static const Model igrf9 = {
2     .name = "IGRF-9",
3     .version = "igrf9",
4     .setup_data = &IGRF_9_COEFS,
5     .setup_fun = internal_setup,
6     .calc_fun = internal_calc
7 };
8 ...
9 static const Model igrf13 = {
10     .name = "IGRF-13",
11     .version = "igrf13",
12     .setup_data = &IGRF_13_COEFS,
13     .setup_fun = internal_setup,
14     .calc_fun = internal_calc
```

```
15 };
16 static const Model ts05 = {
17     .name = "Tsyganenko-Sitnov 05",
18     .version = "ts05",
19     .setup_data = NULL,
20     .setup_fun = ts05_setup,
21     .calc_fun = ts05_calc
22 };
23
24 const Model *in_models[] = { &igrf13, ..., &igrf9, NULL };
25 const Model *ext_models[] = { &ts05, NULL };
```

Ďalšou súčasťou refaktorizácie bolo nahradenie premenných reprezentujúcich súradnice a zložky vektora štruktúrou *Vector*. Toto rozhodnutie značne zlepšilo čitateľnosť kódu, pričom zároveň umožnilo znížiť počet argumentov pomocných funkcií. Ukázalo sa, že pri niektorých funkciách nebolo potrebné predávať ako argumenty smerníky na existujúce premenné, keďže nedochádzalo k modifikácii ich hodnôt. V rámci refaktorizácie boli preto upravené existujúce funkcie tak, aby boli premenné prenášané do funkcií prostredníctvom ich hodnoty. Smerník je využitý len v prípade, že funkcia modifikuje hodnotu premennej. Jednoduché funkcie, ktoré boli volané v kóde iba jedenkrát, boli zároveň odstránené a v mieste ich volania bolo vložené ich telo.

5.2 Úprava argumentov príkazového riadku pri spustení

Implementácia volieb výpočtu pri spustení programu, opísaných v sekcii 4.5, bola docielená využitím štandardnej (POSIX) knižnice *Argp*¹, ktorá je súčasťou GNU C knižnice. Tento spôsob implementácie parsovania argumentov umožnil jednoduchú kontrolu špecifikovaných volieb výpočtu spôsobom zobrazeným v zdrojovom kóde 5.5. Ako je možné vidieť, kontrola existencie konkrétnej voľby spočíva len v kontrole hodnoty smerníka na riadku 8. Pokiaľ sa vyžaduje kontrola konkrétnej hodnoty voľby, v prípade reťazca je potrebné porovnať znaky celého reťazca využitím napríklad štandardnej funkcie *strcmp* (riadok 9). V prípade predmetnej simulácie by zavedenie kontroly zvolených modelov geomagnetického poľa priamo v mieste volania príslušných funkcií mohlo znamenať spomalenie

¹Viac o knižnici *Argp*: https://www.gnu.org/software/libc/manual/html_node/Argp.html

výpočtu jednak kvôli vetveniu, ale aj kvôli samotnému porovnávaniu reťazcov. Vhodným riešením je preto spracovať argumenty príkazového riadku ešte pred začatím vykonávania kódu výpočtu.

Zdrojový kód 5.5: Spôsob kontroly argumentu (voľby) príkazového riadku

```
1 struct arguments {
2     char *volba;
3 };
4
5 int main(int argc, char **argv) {
6     struct arguments args = { 0 };
7     argp_parse(..., argc, argv, 0, NULL, &args);
8     if(args.volba != NULL) {
9         if(strcmp(args.volba, "...")) { ... }
10    }
11 }
```

Pre adresovanie opísaného potenciálneho problému bol výber modelov geomagnetického poľa v programe implementovaný spôsobom zobrazeným v zdrojovom kóde 5.6. Riadky 1 – 7 znázorňujú výber modelov špecifikovaných prostredníctvom argumentov. Funkcia *get_model* vráti smerník na konkrétnu štruktúru modelu na základe jeho skráteného názvu, resp. reťazca *version*, ktorý je špecifikovaný pre každú štruktúru modelu (zdrojový kód 5.4). Pole smerníkov *models* je postupne naplnené smerníkmi na používateľom vybrané modely geomagnetického poľa. Posledný prvok v poli má vždy hodnotu *NULL*, ktorá značí koniec. V sekcii 4.5 bolo zmienené, že výpočty realizované programom budú vždy zahŕňať výpočet internej zložky geomagnetického poľa. Teda prvý smerník v poli *models* bude vždy ukazovať na validnú štruktúru reprezentujúcu model pre výpočet internej – hlavnej zložky poľa. V prípade, že používateľ zahrnie do výpočtu externé geomagnetické pole, druhý smerník v poli bude ukazovať na model externého poľa. V opačnom prípade ostane druhý smerník nastavený na hodnotu *NULL* – koniec poľa.

Riadky 9 – 15 v zdrojovom kóde 5.6 demonštrujú inicializáciu modelov – volanie funkcie *setup_fun*, ktorá bola zdokumentovaná v sekcii 5.1. Implementácia inicializácie spočíva v iterácii cez pole zvolených modelov. Ak má model priradenú inicializačnú funkciu, funkcia je zavolaná s príslušnými argumentmi. Táto časť kódu je v kóde volaná iba jedenkrát, a to pred začiatkom samotného výpočtu v programe.

Riadky 17 – 19 v zdrojovom kóde 5.6 sú súčasťou kódu samotnej simulácie

v programe a znázorňujú výpočet geomagnetického poľa. Výpočet podobne ako v prípade inicializácie spočíva v iterácii cez pole *models*, v ktorom je nad každým modelom volaná funkcia *calc_fun*, ktorá je vždy pre model definovaná. Táto funkcia zavolá konkrétnu funkciu pre výpočet poľa z príslušnej knižnice modelu a pričíta vypočítané zložky vektora magnetického poľa do celkových zložiek. Po ukončení cyklu sa budú v štruktúre *field* nachádzať konečné hodnoty zložiek geomagnetického poľa, ktoré sa ďalej využijú vo výpočte nasledujúceho bodu trajektórie častice.

Zdrojový kód 5.6: Ukážka využitia štruktúr modelov v kóde trasovania častice kozmického žiarenia

```
1 int index = 0;
2 const Model *models[3] = { NULL };
3 ...
4 models[index++] = get_model(in_models, args.in_mod);
5 if(args.ext_mod) {
6     models[index++] = get_model(ext_models, args.ext_mod);
7 }
8 ...
9 for(int i = 0; models[i]; i++) {
10     if(!models[i]->setup_fun) {
11         continue;
12     }
13     const void* setup_data = models[i]->setup_data;
14     models[i]->setup_fun(f, &header, &params, setup_data);
15 }
16 ...
17 for(int i = 0; models[i]; i++) {
18     models[i]->calc_fun(pos, &field, &params);
19 }
```

Program simulácie bol okrem vyššie zdokumentovaných zmien doplnený o ďalšie potrebné funkcionality vo forme pridania kódu pre spracovanie ostatných volieb pri spustení špecifikovaných v kapitole 4.5. Tieto zmeny boli jednoduché a ľahko implementovateľné do refaktorizovaného kódu simulácie. Taktiež bolo implementované spracovanie chýb, hlavne v inicializačnej časti kódu pri načítaní údajov zo vstupného súboru a spracovaní argumentov príkazového riadku. Súčasťou tohto procesu bolo aj zavedenie výpisu zmysluplných chybových správ pre používateľa. Zmienené rozšírenia sú opísané v rámci používateľskej príručky v prílohe A.

Po dokončení posledných malých zmien bola prvá iterácia refaktorizovaného programu pre výpočet trajektórií kozmického žiarenia hotová. Oproti svojej predchádzajúcej verzii sa z hľadiska funkčnosti program líšil len možnosťou zahrnutia resp. nezahrnutia externého geomagnetického poľa do výpočtu. V tomto stave však bolo možné overiť jeho funkčnosť a správnosť generovaných výsledkov ich porovnaním s výsledkami z predchádzajúcej verzie programu. Tento krok bol nevyhnutný pre pokračovanie v ďalších fázach implementácie funkcionalít. Overenie výsledkov je bližšie opísané v kapitole 6.

5.3 Rozšírenie simulácie o historické modely

Na základe návrhu v sekcii 4.1 bolo spočiatku potrebné definovať a deklarovať v kóde poľa koeficientov historických modelov. To bolo docielené rovnakým spôsobom ako v prípade modelu IGRF, a to vytvorením samostatného hlavičkového súboru, ktorý obsahuje definície a deklarácie polí. V zdrojovom kóde 5.7 je znázornená deklarácia a definícia koeficientov pre historický model, ktorý opisuje geomagnetické pole v rozsahu rokov 0 – 1968 n. l. Zároveň bolo vytvorené pole smerníkov na jednotlivé epochy koeficientov, ktoré je v zdrojovom kóde 5.7 zobrazené na riadku 5. Toto pole bude neskôr využité v upravenom kóde spracovania koeficientov. Rovnaký postup bol zopakovaný pre koeficienty modelu *CALS10k.2*.

Zdrojový kód 5.7: Ukážka definície a deklarácie polí koeficientov historických modelov geomagnetického poľa

```
1 const float G50_H0[105] = {0., -46788., ..., 0.};  
2 const float H50_H0[105] = {0., 0., -2329., ..., 0.};  
3 const float G0_H0[105] = {0., -49182., ..., 0.};  
4 const float H0_H0[105] = {0., 0., -3202., ..., 0.};  
5 const float *_HIST[] = {G0_H0, H0_H0, G50_H0, H50_H0, ...};
```

Následne bola definovaná štruktúra znázornená v zdrojovom kóde 5.8, ktorá slúži pre uchovanie smerníka na pole koeficientov a ďalších údajov potrebných pre ich spracovanie v inicializačnej časti kódu. V zmienenom zdrojovom kóde na riadkoch 9 – 16 je možné vidieť konkrétnu definíciu a deklaráciu štruktúry koeficientov pre historický model interného geomagnetického poľa. Podobne bola vytvorená štruktúra koeficientov pre model *CALS10k.2*. Následne boli rovnakým spôsobom doplnené štruktúry koeficientov existujúceho modelu IGRF (pre všetky generácie).

Zdrojový kód 5.8: Definícia štruktúry koeficientov modelu interného geomagnetického poľa

```
1 struct internal_field_coefs {
2     const float **coefs;
3     uint32_t coefs_size;
4     uint32_t years_step;
5     uint32_t min_year;
6     uint32_t max_year;
7     bool extrapolate;
8 };
9 const struct internal_field_coefs HIST_COEFS = {
10    .coefs = _HIST,
11    .coefs_size = 82,
12    .years_step = 50,
13    .min_year = 0,
14    .max_year = 2000,
15    .extrapolate = false
16 };
```

V ďalšom kroku boli vytvorené štruktúry historických modelov spôsobom zobrazeným v zdrojovom kóde 5.4. Ako inicializačné dáta (*setup_data*) všetkých jednotlivých modelov boli poskytnuté smerníky na vytvorené štruktúry koeficientov. Týmto spôsobom bolo možné jednoducho implementovať úpravy v iniciálnom spracovaní koeficientov. Zmeny v spracovaní zahŕňali úpravu kódu, kde sa uvažovalo o fixnom 5-ročnom intervale medzi epochami, o minimálnom podporovanom roku 1900 a o maximálnom podporovanom roku, ktorý bol vypočítaný podľa počtu epoch, ktoré boli definované pre generáciu modelu IGRF. Po sprístupnení štruktúry koeficientov ako inicializačných dát bola úprava kódu triviálna.

Posledným krokom v implementácii historických modelov bolo otestovanie správnosti implementácie porovnaním výsledkov simulácie s výsledkami z pôvodnej Fortran verzie simulácie. Viac informácií v súvislosti s overením výsledkov výpočtov s historickými modelmi je zmienených v kapitole 6.

5.4 Prepis modelu T96 do jazyka C a jeho integrácia do kódu simulácie

Implementácia modelu T96 do jazyka C spočívala vo vytvorení samostatnej knižnice pre model rovnakým spôsobom ako bolo zdokumentované v sekcii 5.1. Rovnako bolo potrebné vytvoriť štruktúru modelu tak, ako bolo ukázané v zdrojovom kóde 5.4 pre model TS05 a zahrnúť ju do poľa dostupných modelov pre výpočet externej zložky poľa. Model T96 nevyžaduje žiadne konštantné dáta pre iniciálne spracovanie, preto boli nastavené na hodnotu *NULL*.

Po vytvorení kostry knižnice modelu a jednoduchom rozšírení kódu trasovania pre jej využitie sa pristúpilo k manuálnemu prepisu kódu modelu z jazyka Fortran do jazyka C. Cieľom bolo prepísať kód a ponechať logiku výpočtu v pôvodnej forme. Jediná zmena, ktorá bola postupne aplikovaná pri prepise kódu, bolo nahradenie globálnych premenných lokálnymi. Lokálne premenné boli následne sprístupnené prostredníctvom argumentov v jednotlivých funkciách, kde boli vyžadované. Zvyšok procesu prepisovania bol otázkou zorientovania sa v existujúcom Fortran kóde a správneho prepisu jednotlivých konštrukcií jazyka do jazyka C.

Po dokončení prepisu bol prepísaný C kód ladený využitím nástroja GNU Debugger (GDB). Pri prepise sa zaviedli do kódu chyby vo forme preklepov pri konštantných desatinných číslach a znamienkach, ktoré spôsobovali rozdielnosť v zložkách magnetického poľa vypočítaného novým a pôvodným kódom.

Ďalšie chyby, ktoré sa v prepísanom kóde vyskytli súviseli v rozdielnom spôsobe spracovania číselných literálov v jednotlivých jazykoch. Ako príklad je možné uviesť zdrojové kódy 5.9 a 5.10. Tieto zdrojové kódy sa na prvý pohľad môžu javiť identické. V skutočnosti sa výsledok Fortran a C verzie kódu líši. C kód v tomto prípade vypíše číslo -21.2765803575515733 , zatiaľ čo Fortran kód vypíše číslo -21.2765808105468750 . Dôvod tohto správania je, že v jazyku Fortran sú desatinné čísla – literály považované za čísla s pohyblivou rádovou čiarkou s jednoduchou presnosťou (ekvivalent typu *float* v jazyku C). Naopak v jazyku C sú tieto literály brané ako čísla s pohyblivou rádovou čiarkou s dvojitoú presnosťou (typ *double*). Pokiaľ chceme aby zdrojové kódy 5.9 a 5.10 produkovali rovnaký výsledok, je potrebné v jazyku C špecifikovať číselné literály so sufixom *f*. Rozdiel medzi demonštrovanými číslami je síce na úrovni 10 milióntin, avšak v simulácii aj takto malé rozdiely vo výpočte môžu spôsobiť kumulatívne veľkú odchýlku, ktorá výrazne ovplyvní celkové výsledky.

Zdrojový kód 5.9: Kód v jazyku Fortran pracujúci s literálmi desatinných čísel

```
1 REAL PDYN, B
2 REAL*8 RESULT
3 B = -13.0
4 PDYN = 0.699999988
5 RESULT = 0.8 * B - 13.0 * SQRT(PDYN)
6 WRITE(*, "(1F20.16)") RESULT
7 END
```

Zdrojový kód 5.10: Kód v jazyku C pracujúci s literálmi desatinných čísel

```
1 #include <math.h>
2 #include <stdio.h>
3
4 int main() {
5     float b = -13.0;
6     float pdyn = 0.699999988;
7     float result = 0.8 * b - 13.0 * sqrtf(pdyn);
8     printf("%.16f\n", result);
9     return 0;
10 }
```

Po odladení kódu modelu T96, sme získali funkčný kód modelu, ktorý produkoval rovnaké hodnoty zložiek poľa ako jeho pôvodná verzia v jazyku Fortran.

5.5 Implementácia modelu CHAOS-7

Pre implementáciu modelu *CHAOS-7* do simulácie bolo potrebné opäť vytvoriť samostatnú knižnicu, ktorá bola následne využitá v kóde simulácie. Vytvorenie knižnice spočívalo vo vytvorení samostatného súboru *CMakeLists.txt* pre jej zostavenie, podobným spôsobom ako v prípade konfigurácie zostavenia 5.1 pre model interného geomagnetického poľa.

Prvým krokom bola implementácia sférických harmonických koeficientov do C kódu. Koeficienty boli získané z oficiálnych stránok modelu² vo forme textového súboru. Následne bol vytvorený jednoduchý Python skript, ktorý po načítaní súboru koeficientov vygeneroval C kód – dvojicu polí koeficientov (G a H), podobne ako v prípade koeficientov modelu hlavného poľa. Zároveň bola definovaná štruktúra koeficientov modelu, ktorá je zobrazená na riadkoch 4 – 8 v zdrojovom kóde 5.11. Okrem smerníkov na konkrétne koeficienty modelu je v štruk-

²<https://www.spacecenter.dk/files/magnetic-models/CHAOS-7>

túre možné špecifikovať aj maximálny rád koeficientov. Tento údaj je vyžadovaný v kóde pre výpočet poľa a môže sa potenciálne s novou verziou modelu zmeniť. Riadky 10–14 reprezentujú konkrétnu definíciu a deklaráciu štruktúry koeficientov modelu *CHAOS-7* verzie 7.16.

Zdrojový kód 5.11: Implementácia koeficientov modelu *CHAOS-7* do C kódu

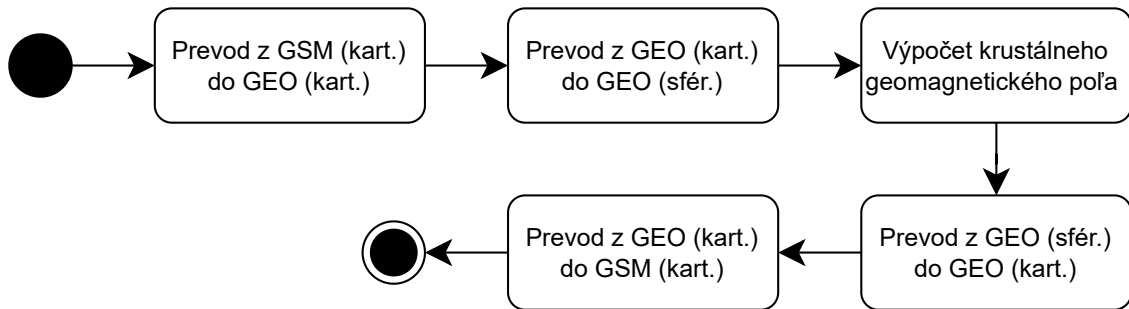
```
1 const double G_CHAOS_7_16 [186][186] = { { ... }, ... };
2 const double H_CHAOS_7_16 [186][186] = { { ... }, ... };
3
4 struct chaos_coefs {
5     const void *G;
6     const void *H;
7     uint32_t nm_max;
8 };
9
10 const struct chaos_coefs CHAOS_7_16_COEFS = {
11     .G = G_CHAOS_7_16,
12     .H = H_CHAOS_7_16,
13     .nm_max = 186
14 };
```

Na základe návrhu v sekcii 4.3 a analýze v súvislosti s existujúcim Python kódom pre výpočet geomagnetického poľa v sekcii 3.3 boli implementované dva rôzne algoritmy pre výpočet poľa, ktorých presnosť a optimálnosť bude ďalej porovnávaná.

Prvý spôsob realizuje výpočet poľa prostredníctvom výpočtu numerického gradientu funkcie magnetického potenciálu z potenciálov vypočítaných vo viacerých bodoch. Implementácia tohto spôsobu výpočtu bola zrealizovaná prepisom existujúceho Python kódu do jazyka C. Ako bolo zmienené v sekcii 3.3, alternatívny a potenciálne optimálnejší spôsob využíva diferenciálnu formu rovnice pre výpočet magnetického potenciálu. Na základe odborných konzultácií a podrobnej analýze kódu existujúcich implementácií výpočtu bol vlastný kód (spočiatku v jazyku Python) príslušne upravený a následne rovnako prepísaný do jazyka C.

V kóde simulácie trajektórií kozmického žiarenia vchádzajú do funkcií pre výpočet internej ale aj externej zložky geomagnetického poľa súradnice bodu, v ktorom sa má získať hodnota geomagnetického poľa. Tieto súradnice sú v karteziánskom Geocentric Solar Magnetospheric (GSM) systéme súradníc. V nových implementovaných funkciách pre výpočet geomagnetického poľa sa predpokladá,

že súradnice miesta budú zadané v sférickej geocentrickej sústave. Preto bolo potrebné doplniť prevody medzi sústavami pre zachovanie správnosti výpočtu. Postup prevodov medzi sústavami je znázornený diagramom na obrázku 5.1.



Obr. 5.1: Prevody medzi systémami súradníc pri výpočte krustálneho geomagnetického poľa

5.6 Implementácia výpočtu individuálnej trajektórie častice kozmického žiarenia

Na základe návrhu v sekcii 4.4.1 bol algoritmus výpočtu odrezávacích rigidít upravený tak, aby zodpovedal diagramu 4.3. V kóde bola vytvorená samostatná funkcia pre výpočet individuálnej trajektórie. Špecifickosťou tohto módu výpočtu je generovanie dvoch výstupných súborov. V rámci zachovania konzistencie medzi jednotlivými módmi výpočtov bolo pre výpočet individuálnej trajektórie upravené spracovanie voľby *-o* pri spustení, ktorá bola špecifikovaná v sekcii 4.5 a pôvodne implementovaná v rámci refaktorizácie originálnej implementácie simulácie v sekcii 5.2. Po spustení výpočtu individuálnej trajektórie dôjde k vytvoreniu dvoch výstupných súborov pod názvom, ktorý používateľ špecifikuje. Líšiť sa budú prefixom. Výstupný súbor s GSM súradnicami častice bude mať prefix *tragsm_* a súbor s geocentrickými súradnicami bude odlišný prefixom *trasph_*.

Súčasťou zavedených zmien bola aj validácia vstupného súboru, v ktorom na základe návrhu v sekcii 4.4.1 musí byť špecifikovaná rovnaká hodnota počiatkovej a koncovkej rigidity častice. V prípade, že táto podmienka nie je splnená, program skončí s chybovou správou informujúcou používateľa o nevalidnom vstupnom súbore.

V súvislosti s počiatkovou a koncovou hodnotou rigidity bola odstránená podpora spustenia paralelného výpočtu prostredníctvom OpenMP. Pôvodne bol výpočet paralelizovaný práve na tejto úrovni – program umožňoval výpočet niekoľkých trajektórií častice súčasne (s rôznou hodnotou rigidity). Nakoľko však

podstata výpočtu individuálnej trajektórie je práve výpočet jednej trajektórie častice s konkrétnou hodnotou rigidity, paralelizácia na tejto úrovni je z princípu nemožná. Zdrojový kód 5.12 znázorňuje paralelizáciu cyklu, ktorý prechádza definovaným rozsahom rigidít častice. V rámci výpočtu individuálnej trajektórie sa telo tohto cyklu efektívne vykoná iba jedenkrát.

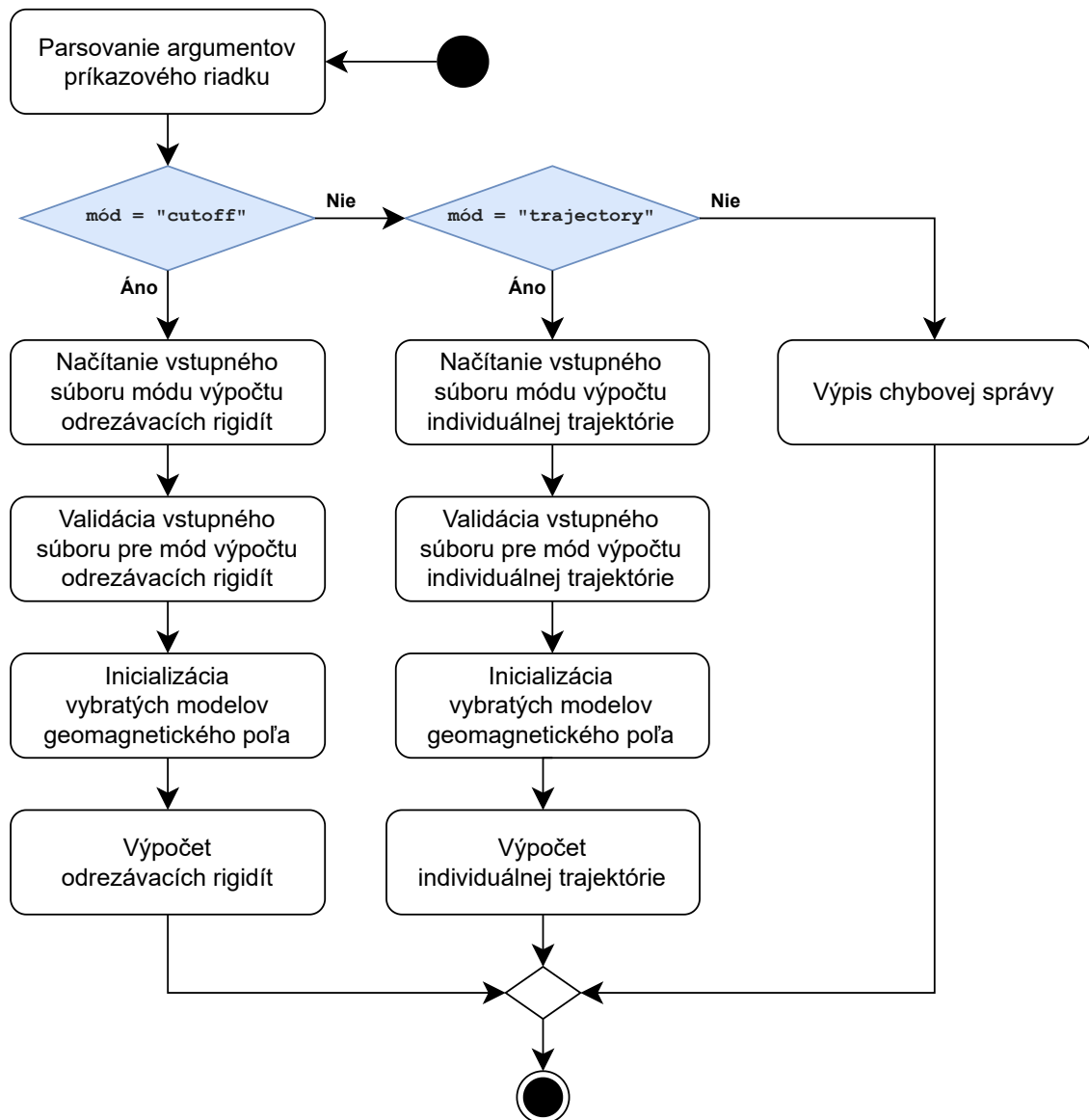
Zdrojový kód 5.12: Ukážka paralelizácie výpočtu prostredníctvom OpenMP

```
1 int count = (int) round((end_rig - start_rig) / rig_step);
2 ...
3 #pragma omp parallel for ordered schedule(dynamic, 1) \
4     reduction(+:nza) if (parallel)
5 for(int i = 0; i <= count; i++) {
6     double rigidity = start_rig + i * rig_step;
7     // trajectory simulation...
8 }
```

V rámci implementácie výpočtu individuálnej trajektórie bolo pridané spracovanie voľby *-m* pri spustení, ktorá bola zadaná v rámci návrhovej časti v sekcii 4.5. Touto voľbou bude používateľ môcť zadaný mód výpočtu simulácie. Diagram na obrázku 5.2 znázorňuje spôsob, akým bola voľba implementovaná. Spoločným menovateľom oboch módov výpočtu je inicializácia modelov geomagnetického poľa. V prípade, že používateľ špecifikuje neexistujúci mód výpočtu, okrem výpisu správy o nevalidnom móde výpočtu dôjde k skončeniu programu s chybou.

5.7 Implementácia výpočtu geomagnetického poľa na sieti bodov

Postup implementácie výpočtu geomagnetického poľa spočíval vo vytvorení samostatnej funkcie pre tento mód výpočtu, podobne ako v prípade výpočtu individuálnej trajektórie. Na základe vývojového diagramu na obrázku 4.4, ktorý bol opísaný v rámci návrhu v sekcii 4.4.2, bol implementovaný algoritmus výpočtu pozostávajúci z dvoch vnorených cyklov *for*. Vonkajší cyklus prechádza rozsahom zemepisnej šírky s definovaným krokom, vnútorný cyklus prechádza rozsahom zemepisnej dĺžky s určitým krokom. Zároveň bolo rozšírené spracovanie voľby *-m* (diagram 5.2 v predchádzajúcej sekcii). Pokiaľ používateľ špecifikuje mód výpočtu *field*, dôjde k načítaniu vstupného súboru pre tento typ výpočtu (zdrojový kód 4.2), následne k validácii načítaných údajov, inicializácii modelov geomagne-



Obr. 5.2: Vývojový diagram znázorňujúci logiku spustenia módu výpočtu simulácie v závislosti od používateľom špecifikovanej voľby $-m$

tického poľa a nakoniec k samotnému výpočtu indukcie magnetického potenciálu na konkrétnych miestach.

Špecifickosťou tohto typu výpočtu oproti ostatným je rozdielny formát vstupného súboru. Zo zdrojového kódu 5.2, na ktorom je zobrazená definícia štruktúry modelu geomagnetického poľa je možné vidieť závislosť inicializačnej funkcie modelu na štruktúre *infile_header*. Táto štruktúra priamo odzrkadľuje hodnoty špecifikované vo vstupnom súbore pre výpočet odrezávacích rigidít, resp. individuálnej trajektórie kozmického žiarenia. V rámci implementácie módu výpočtu geomagnetického poľa bola štruktúra rozšírená o dve premenné typu *float* reprezentujúce veľkosť kroku zemepisnej šírky a zemepisnej dĺžky. V zdrojovom

kóde 5.13 je zobrazená upravená štruktúra vstupného súboru. Zmena bola implementovaná s využitím konštrukcie *union*, pomocou ktorej boli oddelené premenné, ktoré sa v rámci jedného výpočtu nevyužívajú.

Zdrojový kód 5.13: Štruktúra vstupného súboru simulácie

```
1 struct infile_header {
2     float r0, the0, fi0, the1, fi1;
3     int iy, mes, ide, id, ih, min, is;
4     union {
5         struct {
6             float zn;
7             int nk1, iopt, ist;
8             double rig, del, rk;
9         };
10        struct {
11            float lat_step, lon_step;
12        };
13    };
14 };
```

Súčasťou implementácie bolo zavedenie paralelizácie výpočtu siete prostredníctvom technológie OpenMP. Ako je možné vidieť v zdrojovom kóde 5.14, paralelizovaný bol vnorený cyklus `for`, čo sa ukázalo byť z hľadiska rýchlosti dokončenia výpočtu najefektívnejšie. Bolo zvolené statické plánovanie. To znamená, že k prerozdeleniu iterácií medzi jednotlivé vlákna dôjde pred začatím paralelného vykonávania vnoreného cyklu. Statické prerozdelenie je opodstatnené na základe faktu, že výpočet zložiek vektora magnetickej indukcie trvá vždy rovnaký čas a nezávisí od súradníc.

Zdrojový kód 5.14: Ukážka paralelizácie módu výpočtu geomagnetického poľa na sieti bodov

```
1 for(int j = 0; j <= n_the; j++) {
2     float the0a = the0 + (float)(j*lat_step);
3
4     #pragma omp parallel for ordered \
5         schedule(static, 1) if (parallel)
6     for(int i = 0; i < n_phi; i++) {
7         float phi0a = fi0 + (float)(i*lon_step);
8         // field calculation
9     }
10 }
```

5.8 Optimalizácia simulácie

Prvým krokom na základe návrhu v sekcii 4.6 bolo vyriešenie problému v súvislosti s častým sprístupňovaním hodnôt premenných vo volaných funkciách prostredníctvom smerníkov. Tento krok bol už splnený po stránke kódu algoritmu trasovania častice kozmického žiarenia v rámci refaktorizácie existujúcej verzie programu, ku ktorej sa pristúpilo na začiatku implementačnej fázy tejto práce. V tomto prípade sa jednalo o pomocné funkcie (modul *utility*) a tiež o funkcie definované v module *positions*, ktoré realizujú výpočet bodu trajektórie.

Avizovaný problém sa však rovnako týkal všetkých funkcií v spojitosti s existujúcim kódom modelu TS05 (moduly *btot*, *birk_tot*, *deformed* a *full_rc*). Rovnako sa čiastočne týkal funkcií určených pre iniciálne spracovanie koeficientov modelu interného geomagnetického poľa. Preto sa v rámci tejto časti implementácie pristúpilo k úprave funkcií a oprave kompilačných chýb, ktoré v procese vznikali. Ostatné súčasti programu, ktoré boli implementované v rámci tejto práce nebolo potrebné upravovať. Pri implementácii navrhnutých funkcionalít sa už postupovalo v súlade s návrhom optimalizácií zmienených v sekcii 4.6.

5.8.1 Profilácia kódu modelu T96

V rámci optimalizácie kódu modelu T96 bola vykonaná profilácia kódu pomocou nástroja *Gprof*. Na obrázku 5.3 je zobrazený graf volaní funkcií modelu T96, ktorý bol vygenerovaný na základe výsledkov profilácie prostredníctvom utility *Graphviz*³ a skriptu *Gprof2Dot*⁴. Na jednotlivých vrchoch stromu je zobrazený názov funkcie, percento celkového času stráveného vykonávaním kódu funkcie, percento času stráveného vykonávaním kódu funkcie bez zahrnutia volaní ďalších funkcií a následne počet volaní funkcie.

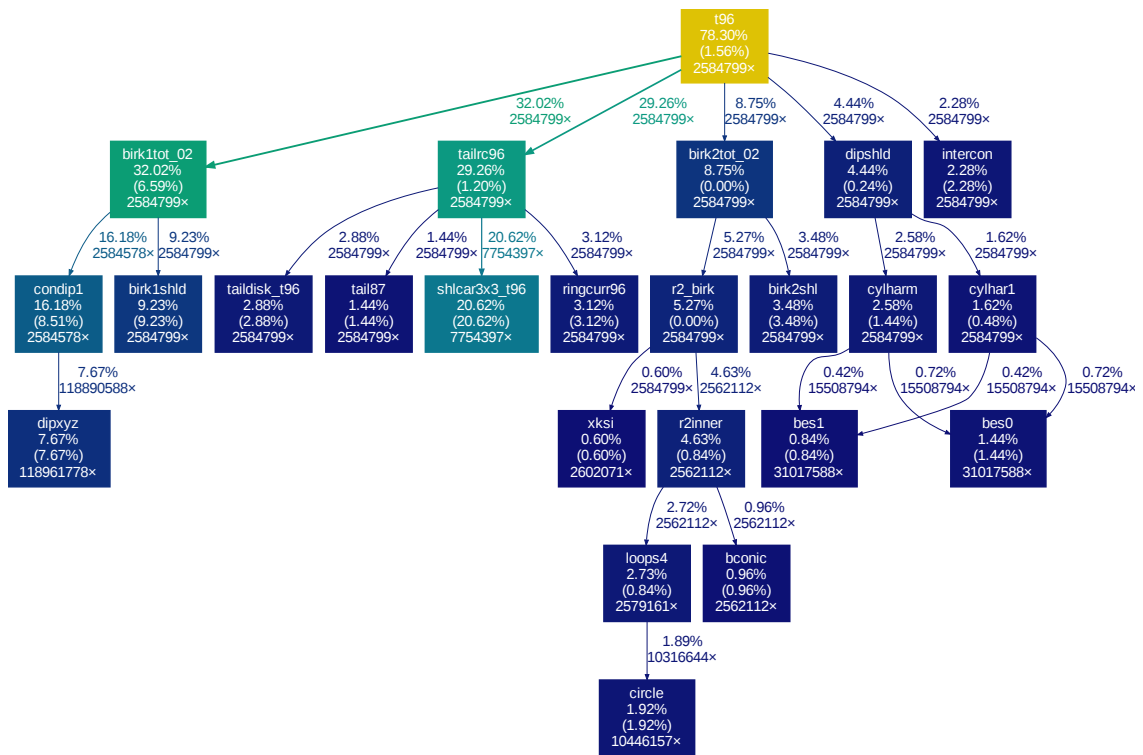
Porovnaním časov vykonávania najvnorenejších funkcií, ktoré sa vykonávajú v tomto výpočte najčastejšie je možné usúdiť, že funkcia *shlcar3x3_t96* je z hľadiska času vykonávania najproblematickejšia.

5.8.2 Implementácia optimalizácií

Na zdrojovom kóde 5.15 je znázornený skrátený kód funkcie *shlcar3x3_t96*. Je možné vidieť, že výpočet, ktorý funkcia realizuje pozostáva zo série vnorených cyklov, ktoré sa vykonávajú 2-krát alebo 3-krát a tiež z vetvenia v tele najvnore-

³Viac o nástroji Graphviz: <https://graphviz.org/>

⁴Viac o skripte Gprof2Dot: <https://github.com/jrfonseca/gprof2dot>



Obr. 5.3: Graf volaní funkcií modelu externého geomagnetického poľa T96

nejšieho cyklu. Takto implementovaný výpočet sa už prejavil ako problematický v procese optimalizácie modelu TS05 v rámci bakalárskej práce [7]. Zefektívnenie tohto typu kódu po stránke rýchlosti vykonávania spočívalo v prepise algoritmu funkcie – v odstránení vetvenia a cyklov, čím sa stal kód „lineárnejší“. Rovnaká praktika bola aplikovaná aj pre kód tejto funkcie. Následne bol podobný kód rovnakým spôsobom upravený aj vo funkciách *birk1shld* a *birk2shl*.

Zdrojový kód 5.15: Skrátenej kód funkcie *shlcar3x3_t96* modelu T96

```

1  for (int M = 0; M < 2; M++) {
2    for (int I~ = 0; I~ < 3; I~++) {
3      ...
4      for (int K~ = 0; K~ < 3; K~++) {
5        for (int N = 0; N < 2; N++) {
6          if (M == 0) {
7            if (N == 0) {
8              ...
9            } else {
10             ...
11          }
12        } else {
13          if (N == 0) {

```

```
14         ...
15         } else {
16         ...
17         }
18     }
19 }
20 }
21 }
22 }
```

Ďalším krokom v rámci implementácie optimalizácií bolo odstránenie nepotrebného kódu oboch modelov externého geomagnetického poľa na základe opodstatnenia zmieneného v druhom odstavci sekcie 4.6. Postup úpravy kódu spočíval v odstránení parametrov funkcií, ktoré nadobúdali vždy konštantnú hodnotu. Spočiatku sa jednalo o priamu špecifikáciu čísla 0 v argumente volaných funkcií. Následne vzniklo množstvo kompilačných chýb, v dôsledku odstránenia parametrov. Druhým krokom bola oprava týchto chýb, ktorá už zahŕňala odstránenie časti kódu. Po prvej iterácii odstraňovania vznikli ďalšie konštantné hodnoty v kóde, ktoré mohli byť ďalej redukované. Ako príklad je možné uviesť zdrojový kód 4.5, ktorého zjednodušením bola získaná hodnota $DXSX = 1.D0$. Tento proces sa opakoval dovtedy, kým sa neodstránili všetky výpočty, ktoré do istej miery záviseli na konštantných hodnotách.

Súčasťou optimalizácie bolo experimentovanie s prepínačmi kompilátora GCC, ktoré boli zdokumentované v sekcii 4.6. Tento krok pochopiteľne nevyžadoval žiadny zásah do kódu simulácie, jednalo sa len o úpravu konfigurácie zostavenia v súboroch *CMakeLists.txt*. Výsledky experimentovania budú spolu s výsledkami z ostatných krokov optimalizácie zhrnuté v rámci vyhodnotenia v kapitole 7.

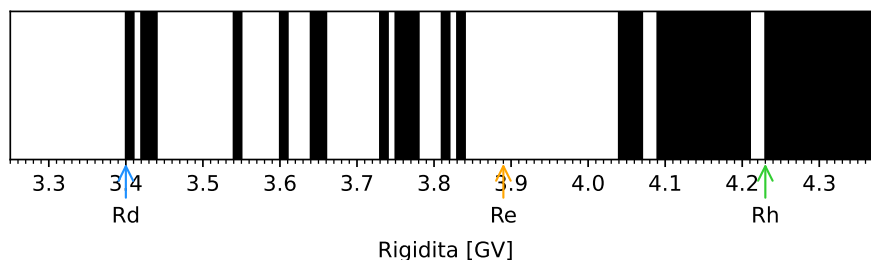
6 Vyhodnotenie a overenie správnosti implementácie rozšírení simulácie

Základný princíp overenia správnosti novej implementácie simulácie trajektórií kozmického žiarenia spočíval v porovnaní jej výsledkov s referenčnými výsledkami. Referenčné výsledky v kontexte tejto práce sú predovšetkým výsledky z predchádzajúcich verzií simulácie o ktorých vieme, že sú správne a korektné aj po fyzikálnej stránke. Porovnanie výsledkov znamenalo porovnanie obsahu výstupných súborov z jednotlivých verzií simulácií, ktoré boli spúšťané s rovnakým vstupným súborom. Ekvivalencia výstupných súborov značila správnosť novej verzie.

Súčasťou porovnania bola taktiež vizualizácia dovolených a zakázaných hodnôt rigidít z jednotlivých verzií výpočtov. Tieto pojmy boli v kontexte opisu podstaty výpočtu odrezávacích rigidít bližšie opísané v sekcii 1.1. V krátkosti však možno zhrnúť, že dovolená hodnota rigidity znamená, že častica prichádzajúca z daného smeru s touto hodnotou rigidity mala trajektóriu, ktorá viedla od hranice magnetosféry až na povrch Zeme. Naopak, zakázaná hodnota rigidity znamená, že častica s touto hodnotou rigidity prichádzajúca z konkrétneho smeru nemohla dopadnúť na povrch Zeme. Na základe určenia dovolených a zakázaných hodnôt rigidít sa vypočítajú odrezávacie hodnoty rigidity. Dolná odrezávacia rigidita je rovná prvej dovolenej hodnote rigidity v intervale. Horná odrezávacia rigidita je rovná poslednej zakázanej hodnote rigidity. Na základe týchto hodnôt sa vypočíta efektívna odrezávacia rigidita, ktorá sa bude nachádzať medzi hodnotou dolnej a hornej odrezávacej rigidity.

Obrázok 6.1 je príkladom zmienenej vizualizácie rigidít v bode so zemepisnou šírkou $48,66^\circ$ a zemepisnou dĺžkou $20,53^\circ$, pričom častica prichádzala na povrch Zeme z kolmého smeru. Biele intervaly značia hodnoty zakázaných rigidít častice. Naopak, čierne intervaly značia dovolené hodnoty. Odrezávacie rigidity sú vyznačené farebnými šípkami na osi x .

Pri implementácii nových funkcionalít do simulácie, ako je v prípade tejto



Obr. 6.1: Vizualizácia dovolených a zakázaných rigidít vypočítaných s modelmi geomagnetického poľa IGRF a TS05 (Súradnice: 48,66°N 20,53°E, Dátum: 28.3.1980, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,01$ GV)

práce pridanie možnosti výpočtu krustálneho geomagnetického poľa, nie je proces overenia triviálny, kvôli neexistencii referenčných výsledkov. V tomto prípade je vhodné zamerať sa na porovnanie s podobnými existujúcimi riešeniami alebo snažiť sa overiť správnosť aspoň čiastkových výsledkov, ak je to možné.

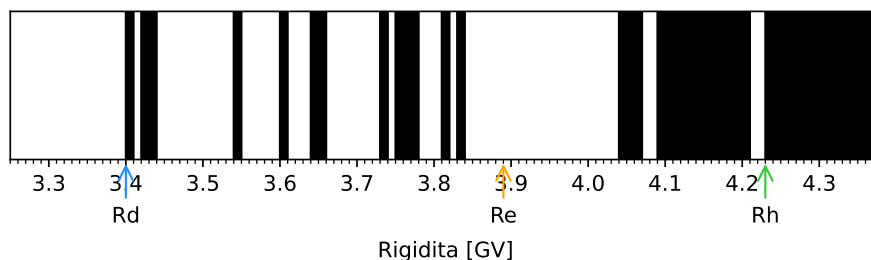
V rámci tejto kapitoly bude zhrnuté porovnanie výsledkov novej, refaktORIZOVANEJ verzie simulácie trajektórií kozmického žiarenia v jazyku C, ktorá bola rozšírená o nové funkcionality a následne optimalizovaná z hľadiska rýchlosti vykonávania.

6.1 Overenie správnosti simulácie s modelmi exter- ného geomagnetického poľa TS05 a T96

Prvotným krokom v implementačnej fáze bola refaktORIZÁCIA kódu existujúcej verzie implementácie v jazyku C, ktorá disponuje kódom pre výpočet geomagnetického poľa prostredníctvom modelov IGRF a TS05. Táto verzia simulácie bola východiskovou verziou pre túto prácu. Overenie správnosti refaktORIZOVANEJ alternatívy simulácie s touto kombináciou modelov geomagnetického poľa spočívalo v spustení výpočtov na vopred zvolených bodoch.

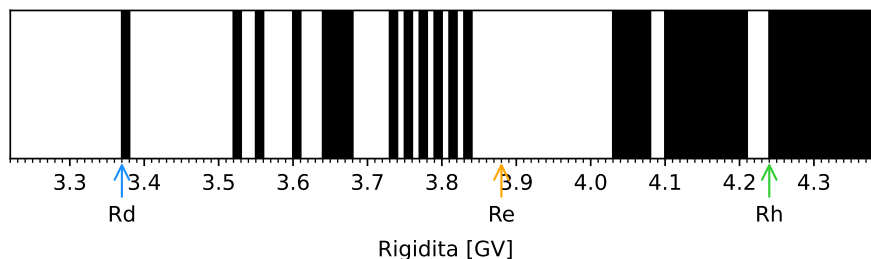
Súčasťou overenia bolo spustenie výpočtu s rovnakým vstupom ako v prípade obrázka 6.1. Na základe zhody tohto výsledku dovolených a zakázaných rigidít s výsledkom zobrazeným na obrázku 6.2 možno usúdiť, že implementácia je správna. Výsledky výpočtov sa zhodovali s výsledkami zo staršej verzie aj po zmenách vo vstupných parametroch – krok v rigidite, súradnice miesta, polomer a čas.

Zhodnosť vizualizácií dovolených a zakázaných rigidít na obrázkoch 6.3 a 6.4 potvrdzujú správnosť implementácie aj modelu T96, ktorý bol v rámci tejto práce prepísaný z jazyka Fortran do jazyka C a implementovaný do simulácie. Aj v tomto

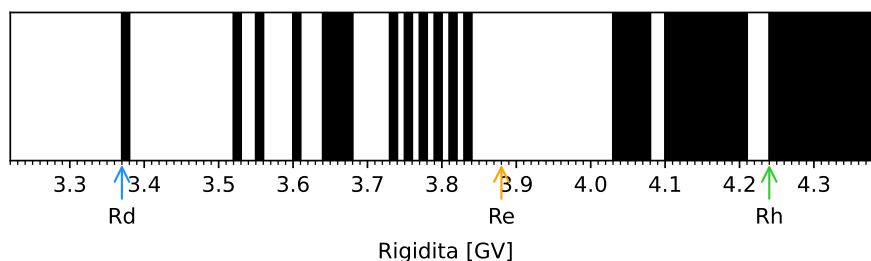


Obr. 6.2: Vizualizácia dovolených a zakázaných rigidít vypočítaných refaktori-
 zovanou verziou simulácie s modelmi geomagnetického poľa IGRF a TS05
 (Súradnice: 48,66°N 20,53°E, Dátum: 28.3.1980, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,01$ GV)

prípade bolo realizovaných viac kontrolných výpočtov s rôznou kombináciou
 hodnôt vstupných parametrov, pričom v každom prípade bola pozorovaná zhoda
 vo výsledkoch.



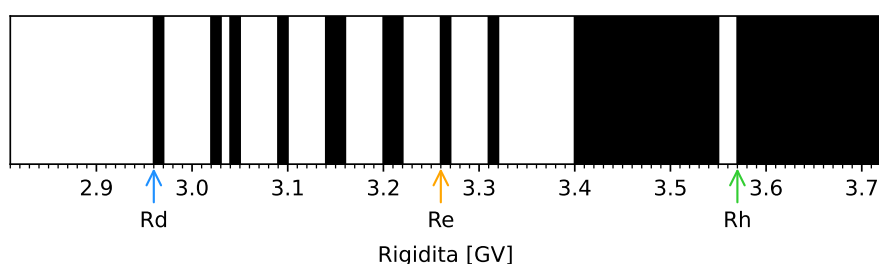
Obr. 6.3: Vizualizácia dovolených a zakázaných rigidít vypočítaných Fortran
 verziou simulácie s modelmi geomagnetického poľa IGRF a T96 (Súradnice:
 48,66°N 20,53°E, Dátum: 28.3.1980, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,01$ GV)



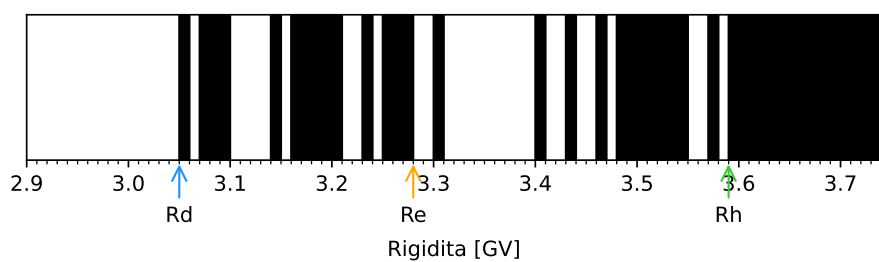
Obr. 6.4: Vizualizácia dovolených a zakázaných rigidít vypočítaných refaktori-
 zovanou verziou simulácie s modelmi geomagnetického poľa IGRF a T96 (Sú-
 radnice: 48,66°N 20,53°E, Dátum: 28.3.1980, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,01$ GV)

6.2 Overenie správnosti simulácie s historickými modelmi geomagnetického poľa

Po implementácii koeficientov historických modelov geomagnetického poľa do simulácie bolo rovnako realizované overenie výsledkov. V tomto prípade bola pozorovaná diskrepancia vo výsledkoch ako je demonštrované na obrázkoch 6.5 a 6.6, v prípade modelu *Historical (0-1968 CE)*. Po odladení kódov oboch verzií bolo zistené, že rozdiel vo výsledkoch je spôsobený odlišnou realizáciou interpolácie koeficientov modelu medzi dvoma epochami.



Obr. 6.5: Vizualizácia dovolených a zakázaných rigidít vypočítaných pôvodnou (Fortran) verziou simulácie s historickým modelom geomagnetického poľa *Historical (0-1968 CE)* (Súradnice: 48,66°N 20,53°E, Dátum: 28.3.1000, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,01$ GV)



Obr. 6.6: Vizualizácia dovolených a zakázaných rigidít vypočítaných refaktori-zovanou verziou simulácie s historickým modelom geomagnetického poľa *Historical (0-1968 CE)* (Súradnice: 48,66°N 20,53°E, Dátum: 28.3.1000, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,01$ GV)

Odlišnosť interpolácie spočívala v skutočnosti, že funkcia v C verzii simulácie interpoluje koeficienty na úrovni dní v roku. Pôvodná Fortran implementácia realizuje interpoláciu koeficientov len na úrovni rokov. Tento rozdiel je možné vidieť pri porovnaní riadku 1 v zdrojových kódoch 6.1 a 6.2. Je možné vidieť, že v prípade C verzie je k roku, s ktorým je výpočet spustený pripočítaná hodnota

$(iday-1)/365.25f$, čo je deň v roku prerátaný na rok. Zdrojový kód 6.2 znázorňuje interpoláciu medzi konkrétnou epochou roku 1250 a 1300. C zdrojový kód 6.1 je všeobecný pre všetky epochy.

Zdrojový kód 6.1: C kód realizujúci interpoláciu medzi epochami koeficientov interného geomagnetického poľa

```

1  const float F2 = (iyr + (iday-1)/365.25f - edge_y) / y_step;
2  const float F1 = 1.f - F2;
3  for (int i = 0; i < INTERNAL_COEFS_SIZE; ++i) {
4      G[i] = Gx[i] * F1 + Gy[i] * F2;
5      H[i] = Hx[i] * F1 + Hy[i] * F2;
6  }
```

Zdrojový kód 6.2: Fortran kód realizujúci interpoláciu medzi epochami koeficientov interného geomagnetického poľa

```

1  81      F2=(IYR-1250)/50.
2          F1=1.-F2
3          DO 82 N=1,66
4              G(N)=G1250(N)*F1+G1300(N)*F2
5  82      H(N)=H1250(N)*F1+H1300(N)*F2
```

Po úprave riadku 1 v zdrojovom kóde 6.1 na $(iyr - edge_y) / y_step$ sa výsledky výpočtu odrezávacích rigidít s historickým modelom zhodovali s výsledkami z pôvodnej Fortran verzie simulácie. Po odbornej konzultácii sa však dospelo k záveru, že interpolácia na úrovni dní v roku má svoje opodstatnenie a má zmysel ponechať tento spôsob interpolácie v novej verzii simulácie.

6.3 Overenie správnosti implementácie modelu

CHAOS-7

Do programu simulácie trajektórií kozmického žiarenia bol v rámci tejto práce implementovaný kód pre výpočet krustálneho geomagnetického poľa prostredníctvom modelu CHAOS-7.16. Implementácii predchádzalo dôkladné overenie korektnosti navrhnutých metód výpočtu aj z hľadiska fyziky, čo bolo zdokumentované v sekcii 3.4. Implementácia spočívala predovšetkým v prepise existujúceho kódu výpočtu geomagnetického poľa v jazyku Python do C kódu simulácie.

V rámci tejto sekcie bude zdokumentovaný spôsob realizácie a výsledky overenia výpočtov so zahrnutým modelom CHAOS-7.

6.3.1 Realizácia kontrolných výpočtov

V súvislosti s overením výsledkov simulácie s modelom krustálneho poľa CHAOS-7 boli realizované kontrolné výpočty. V tabuľke 6.1 sú pre referenciu uvedené časy výpočtu odrezávacích rigidít pre jeden bod v kombinácii s rôznymi modelmi geomagnetického poľa. Je možné vidieť, že zahrnutie modelu CHAOS-7 prinieslo značné spomalenie vo vykonávaní. Zároveň ale platí, že čas výpočtu sa môže líšiť v závislosti od súradníc.

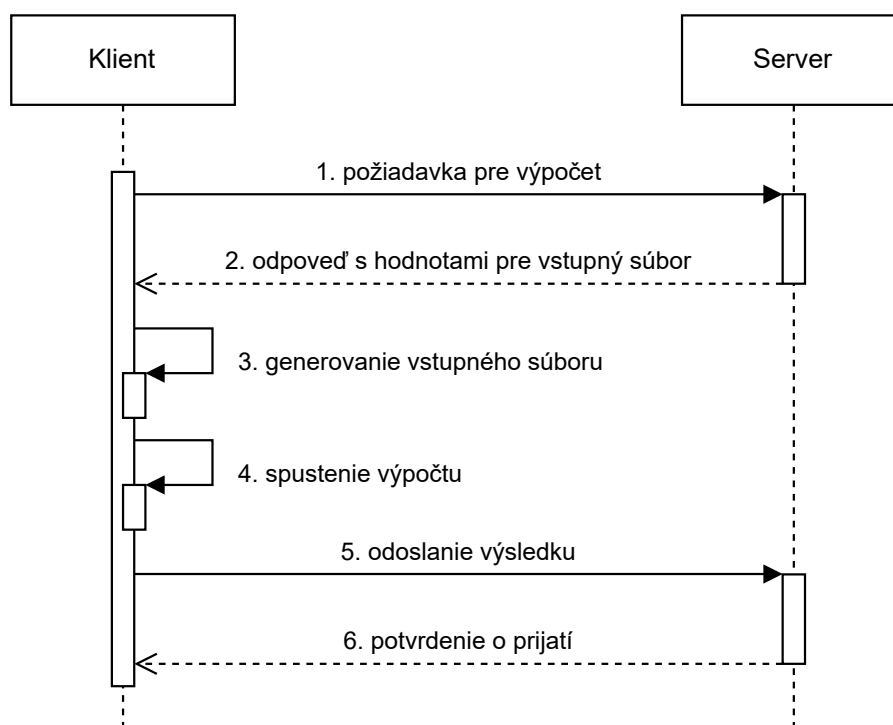
Vzhľadom k veľkému množstvu bodov, pre ktoré bolo potrebné realizovať kontrolné výpočty sa pristúpilo k vytvoreniu jednoduchého systému pre distribúciu výpočtov na viaceré počítače. Pri výpočte pozdĺž poludníku sa jednalo o 180 bodov a pri výpočte so zväčšujúcim sa polomerom išlo zhruba o 130 bodov. V oboch prípadoch boli výpočty opakované s rôznou kombináciou modelov geomagnetického poľa a s rôznym krokom v rigidite. Cieľom bolo získať aj výsledky odrezávacích rigidít z celého povrchu Zeme, to však z hľadiska dĺžky trvania celého procesu nebolo možné dokončiť v rozumnom čase s dostupnými zdrojmi.

Tabuľka 6.1: Porovnanie časov trvania výpočtu odrezávacích rigidít v kombinácii s rôznymi modelmi geomagnetického poľa (Súradnice: 48,66°N 20,53°E, Dátum: 28.3.2000, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,01$ GV)

Kombinácia modelov geomagnetického poľa	Čas trvania [s]
IGRF 13. generácie	2,03
IGRF 13. generácie + T96	6,33
IGRF 13. generácie + TS05	20,80
IGRF 13. generácie + CHAOS-7	1089,01
IGRF 13. generácie + T96 + CHAOS-7	916,24
IGRF 13. generácie + TS05 + CHAOS-7	1020,69

Systém distribúcie bol vytvorený využitím technológie gRPC¹ v jazyku Python. Ide o rámec umožňujúci realizovať vzdialené volanie procedúr prostredníctvom protokolu HTTP/2. Distribučný systém pozostával z viacvláknových klientov spúšťajúcich výpočty a servera, ktorý slúžil na prijímanie výsledkov a na rozposielanie parametrov potrebných pre spustenie výpočtu. Zjednodušená ukážka komunikácie, ktorá spočíva v získaní výpočtu a odoslaní výsledku klientom je zobrazená v sekvenčnom diagrame na obrázku 6.7.

¹Viac o technológii gRPC: <https://grpc.io/>

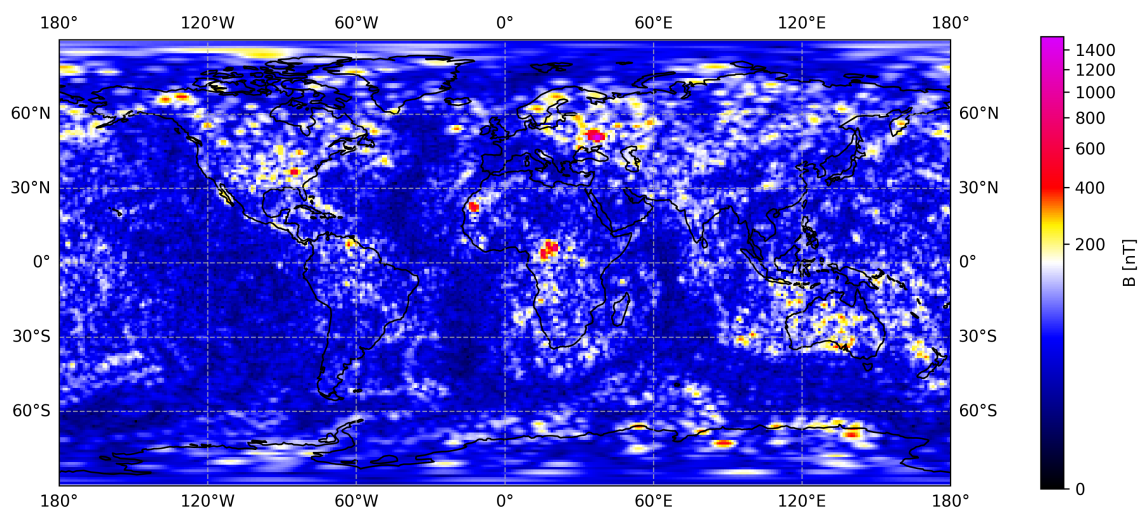


Obr. 6.7: Komunikácia medzi klientom a serverom v systéme pre distribúciu výpočtov

6.3.2 Vyhodnotenie kontrolných výpočtov

Správnosť výsledkov overená výpočtom krustálneho geomagnetického poľa na celej Zemi. Na obrázku 6.8 je možné vidieť vizualizáciu krustálneho geomagnetického poľa pri ráde výpočtu 185, ktoré bolo vypočítané prepísanou C implementáciou kódu. Pri porovnaní obrázku 6.8 s vizualizáciou na obrázku 3.7 je možné skonštatovať, že prepísaná verzia kódu je správna. Rozdiel v číselných hodnotách sa pohyboval na úrovni 4. až 5. čísla za desatinnou čiarkou. Malá zmena mohla byť spôsobená rozdielnym počtom desatinných miest konštanty π , prípadne rozdielnym algoritmom goniometrických funkcií (\cos , \sin , atan2) v štandardnej matematickej knižnici. Nakoľko sa však jedná o rozdiel menší ako 1 %, dôvod rozdielu nebol bližšie skúmaný.

Porovnanie výsledkov bolo realizované aj pri výpočte krustálneho geomagnetického poľa prostredníctvom diferenciálnej formy rovnice výpočtu magnetického potenciálu. Táto metóda výpočtu geomagnetického poľa bola navrhnutá ako potenciálne optimálnejšia alternatíva a bola taktiež implementovaná do simulácie. Rozdiel vo výsledných hodnotách sa aj v tomto prípade pohyboval na úrovni 4. až 5. čísla za desatinnou čiarkou. Výsledky boli teda považované za totožné. Porovnanie efektívnosti oboch metód z hľadiska rýchlosti je zdokumentované v kapitole 7. Všetky ďalšie experimenty boli realizované optimálnejšou metódou.

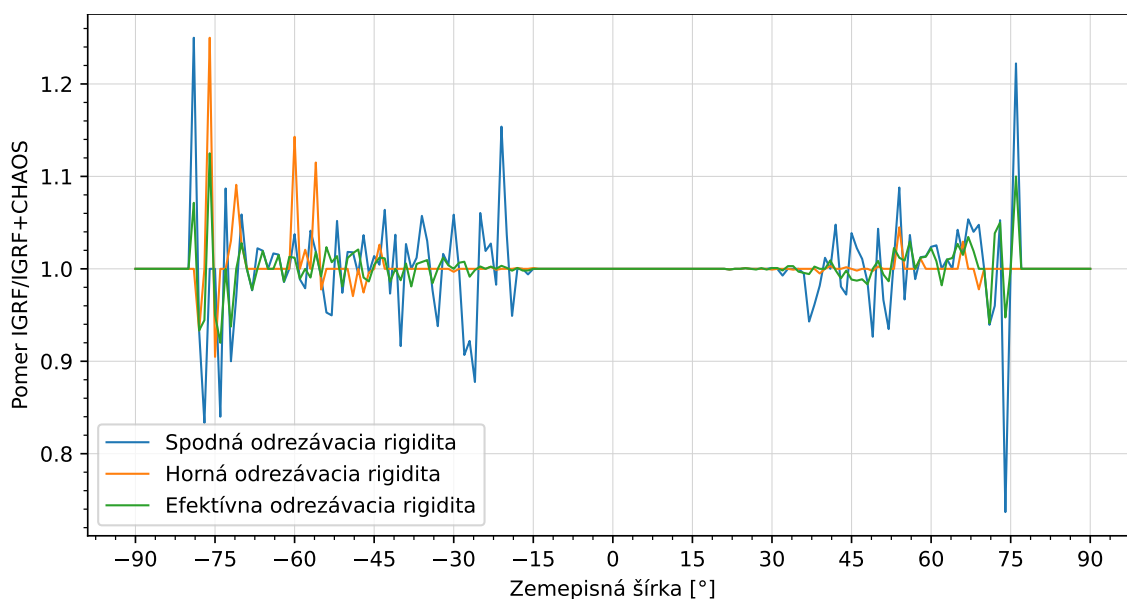


Obr. 6.8: Vizualizácia krustálneho geomagnetického poľa vypočítaného C implementáciou kódu pre výpočet geomagnetického poľa s modelom CHAOS-7.16 pri ráde 185

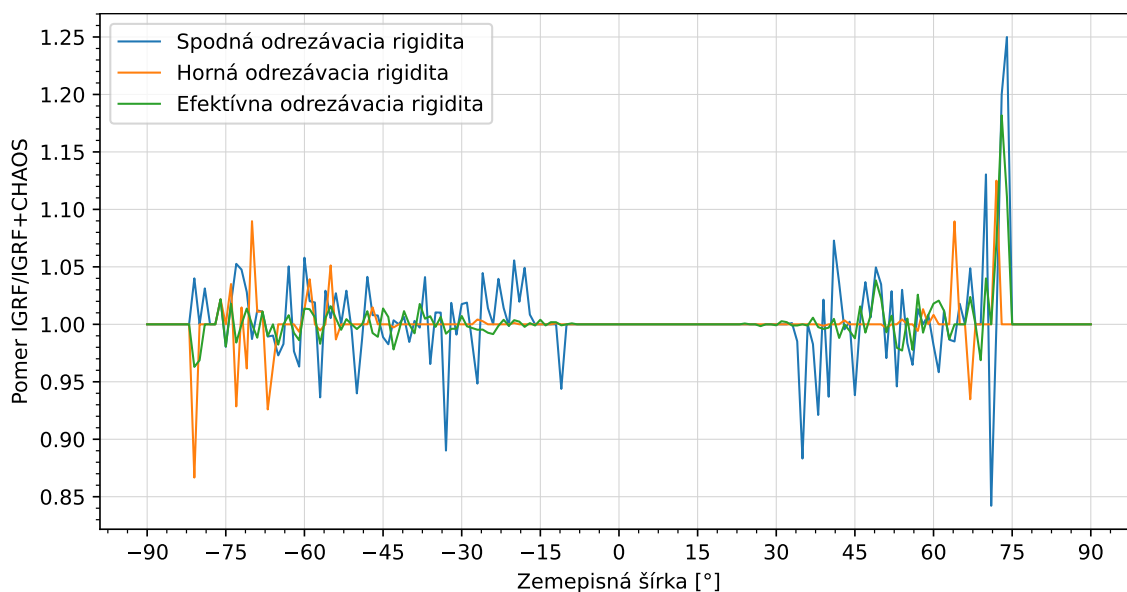
Súčasťou overenia implementácie kódu modelu *CHAOS-7* bola realizácia výpočtov odrezávacích rigidít v kombinácii s modelom interného geomagnetického poľa IGRF. Kontrolné výpočty boli vykonané aj v mieste geomagnetickej anomálie v oblasti Kursk (Rusko). Pre porovnanie boli výpočty realizované aj v mieste so slabým pôsobením krustálneho geomagnetického poľa – okolie nultého poludníka v Európe. Predpokladalo sa, že hodnoty odrezávacích rigidít budú v mieste geomagnetickej anomálie rozdielne pri porovnaní výsledkov výpočtu so zahrnutým krustálnym geomagnetickým poľom a bez (len model IGRF). Naopak, v mieste so slabým pôsobením krustálneho poľa bol očakávaný rovnaký výsledok ako v prípade výpočtu odrezávacích rigidít bez krustálneho poľa.

Obrázok 6.9 znázorňuje závislosť hodnôt pomeru odrezávacích rigidít vypočítaných využitím len modelu IGRF a odrezávacích rigidít vypočítaných využitím modelov IGRF a *CHAOS-7* od zemepisnej šírky. Výpočty boli v tomto prípade spúšťané so súradnicami pozdĺž poludníka $37,66^\circ$, ktorý prechádza stredom anomálie v Kursku. Táto anomália sa nachádza na zemepisnej šírke 51° . Obrázok 6.10 znázorňuje rovnakú závislosť hodnôt odrezávacích rigidít na poludníku 0° . V oboch prípadoch je zachytená odchýlka hodnôt odrezávacích rigidít v oblastiach strednej zemepisnej šírky. Tieto výsledky nie sú v súlade s predpokladmi, ktoré boli vyššie zmienené. Predpokladalo sa, že odchýlka v pomere odrezávacích rigidít bude pozorovaná len v mieste anomálie.

V rámci snahy o nájdenie príčiny potenciálneho problému boli výpočty opakované so súradnicami pozdĺž rovnakých poludníkov (0° a $37,66^\circ$) ale s 10-krát menším krokom v rigidite, ktorým by malo byť možné dosiahnuť vyššiu presnosť

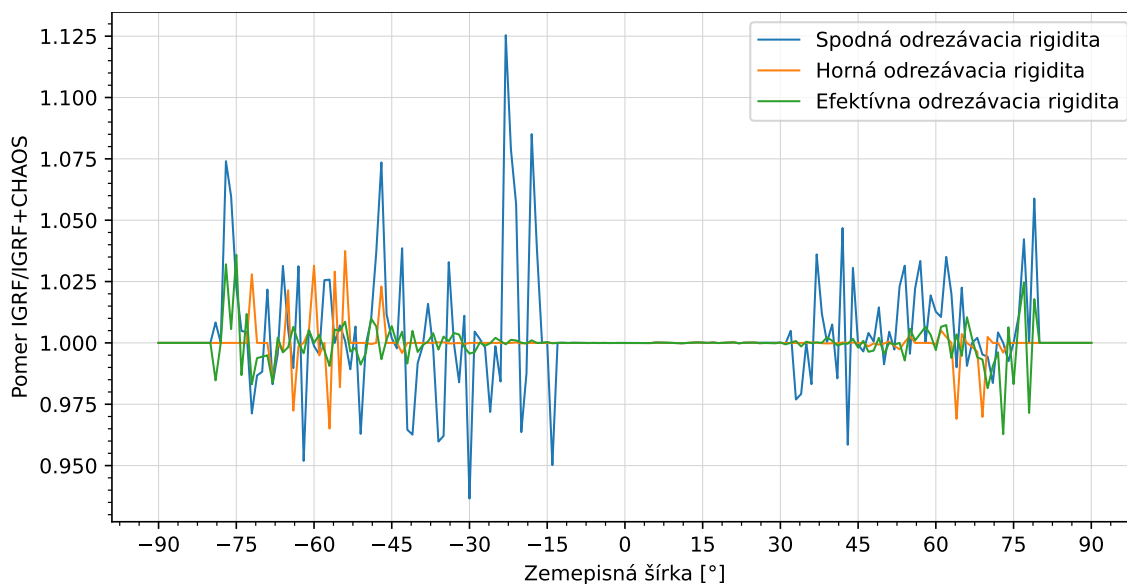


Obr. 6.9: Závislosť hodnôt pomeru medzi odrezávacími rigiditami vypočítanými v pôsobení geomagnetického poľa vypočítaného modelom IGRF a poľa vypočítaného kombináciou modelov IGRF a CHAOS-7 od zemepisnej šírky (Poludník: 37,66°, Dátum: 28.3.2000, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,01$ GV)



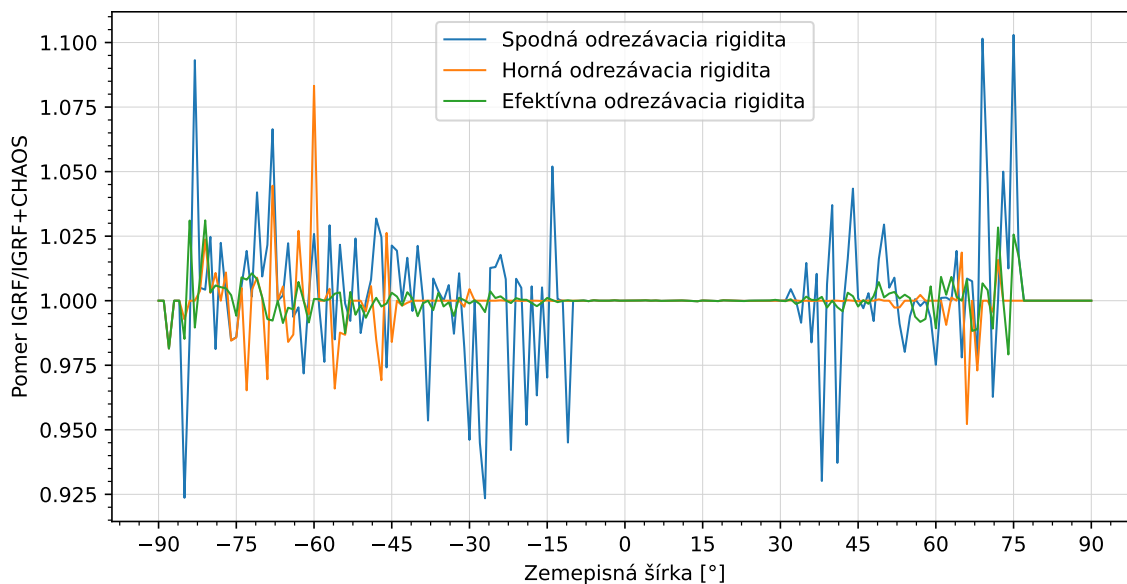
Obr. 6.10: Závislosť hodnôt pomeru medzi odrezávacími rigiditami vypočítanými v pôsobení geomagnetického poľa vypočítaného modelom IGRF a poľa vypočítaného kombináciou modelov IGRF a CHAOS-7 od zemepisnej šírky (Poludník: 0°, Dátum: 28.3.2000, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,01$ GV)

určenia hodnôt odrezávacích rigidít, čo bolo zmienené aj v rámci publikácie [26]. Výsledné závislosti sú vizualizované na obrázkoch 6.11 a 6.12. Z týchto výsledkov je zrejma pozorovateľne menšia odchýlka v porovnaní s výsledkami z predchádzajúcich výpočtov. Stále je však evidentné zašumenie hodnôt odrezávacích ri-



Obr. 6.11: Závislosť hodnôt pomeru medzi odrezávacími rigiditami vypočítanými v pôsobení geomagnetického poľa vypočítaného modelom IGRF a poľa vypočítaného kombináciou modelov IGRF a *CHAOS-7* od zemepisnej šírky (Poludník: 37,66°, Dátum: 28.3.2000, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,001$ GV)

gidít v stredných zemepisných šírkach bez náznaku vplyvu geomagnetickej anomálie na výsledky.



Obr. 6.12: Závislosť hodnôt pomeru medzi odrezávacími rigiditami vypočítanými v pôsobení geomagnetického poľa vypočítaného modelom IGRF a poľa vypočítaného kombináciou modelov IGRF a *CHAOS-7* od zemepisnej šírky (Poludník: 0°, Dátum: 28.3.2000, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,001$ GV)

Taktiež bol v rámci overenia realizovaný výpočet geomagnetického poľa s rôznou hodnotou polomeru – v rôznej výške nad aproximovaným povrchom Zeme.

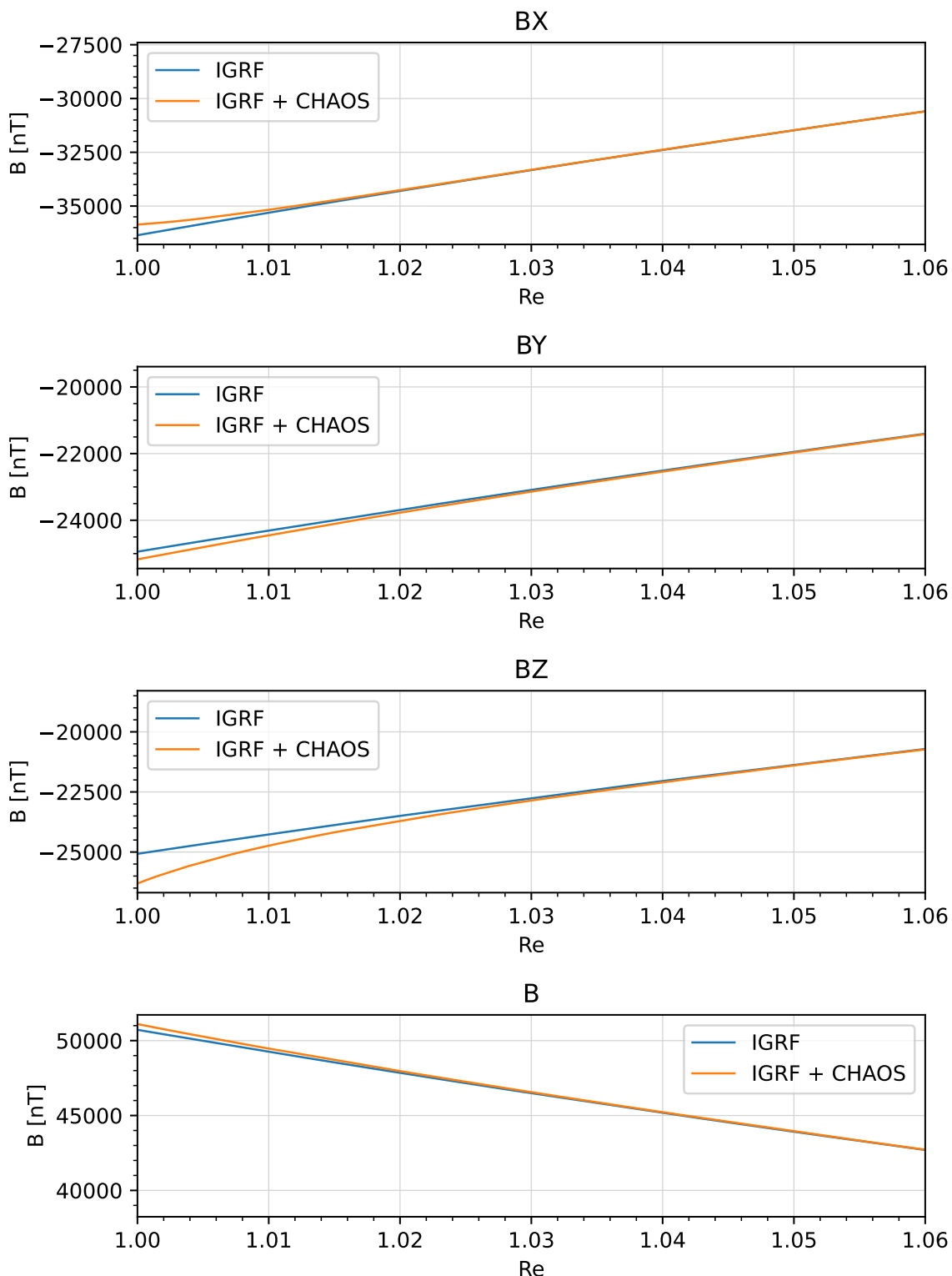
Tento výpočet bol vykonaný so súradnicami stredu anomálie v Kursku a bodu 45°N 4°E (Európa), kde je pôsobenie krustálneho poľa slabé. Výsledkom sú vizualizácie závislostí zložiek vektora indukcie geomagnetického poľa od rastúceho polomeru na obrázku 6.13 a 6.14.

Na obrázku 6.13, na ktorom je zobrazená závislosť indukcie geomagnetického poľa od rastúceho polomeru v mieste anomálie Kursk je vidieť, že všetky zložky vektora magnetickej indukcie poľa s krustálnou zložkou sú v blízkosti povrchu Zeme odlišné oproti zložkám hlavného poľa. Rozdiel v zložkách sa následne prejavuje aj na celkovej indukcii (B) geomagnetického poľa. Efekt anomálie s narastajúcou výškou klesá a postupne sa geomagnetické pole so zarátanou krustálnou zložkou vyrovnáva hodnote hlavného geomagnetického poľa. Toto správanie je očakávané. Magnetická indukcia krustálneho poľa môže na povrchu Zeme dosiahnuť až 1400 nT, ako je zobrazené na obrázku 6.8. S narastajúcou výškou však jeho pôsobenie rýchlo klesá. Na obrázku 6.14 je demonštrovaný prípad na mieste so slabým pôsobením krustálneho poľa. V tomto prípade sa indukcia geomagnetického poľa s krustálnou zložkou neodchyľuje ani na povrchu Zeme. Toto potvrdzuje skutočnosť, že výpočet krustálneho geomagnetického poľa modelom *CHAOS-7* je v simulácii realizovaný správne aj v súvislosti s jeho pričítaním do celkového geomagnetického poľa.

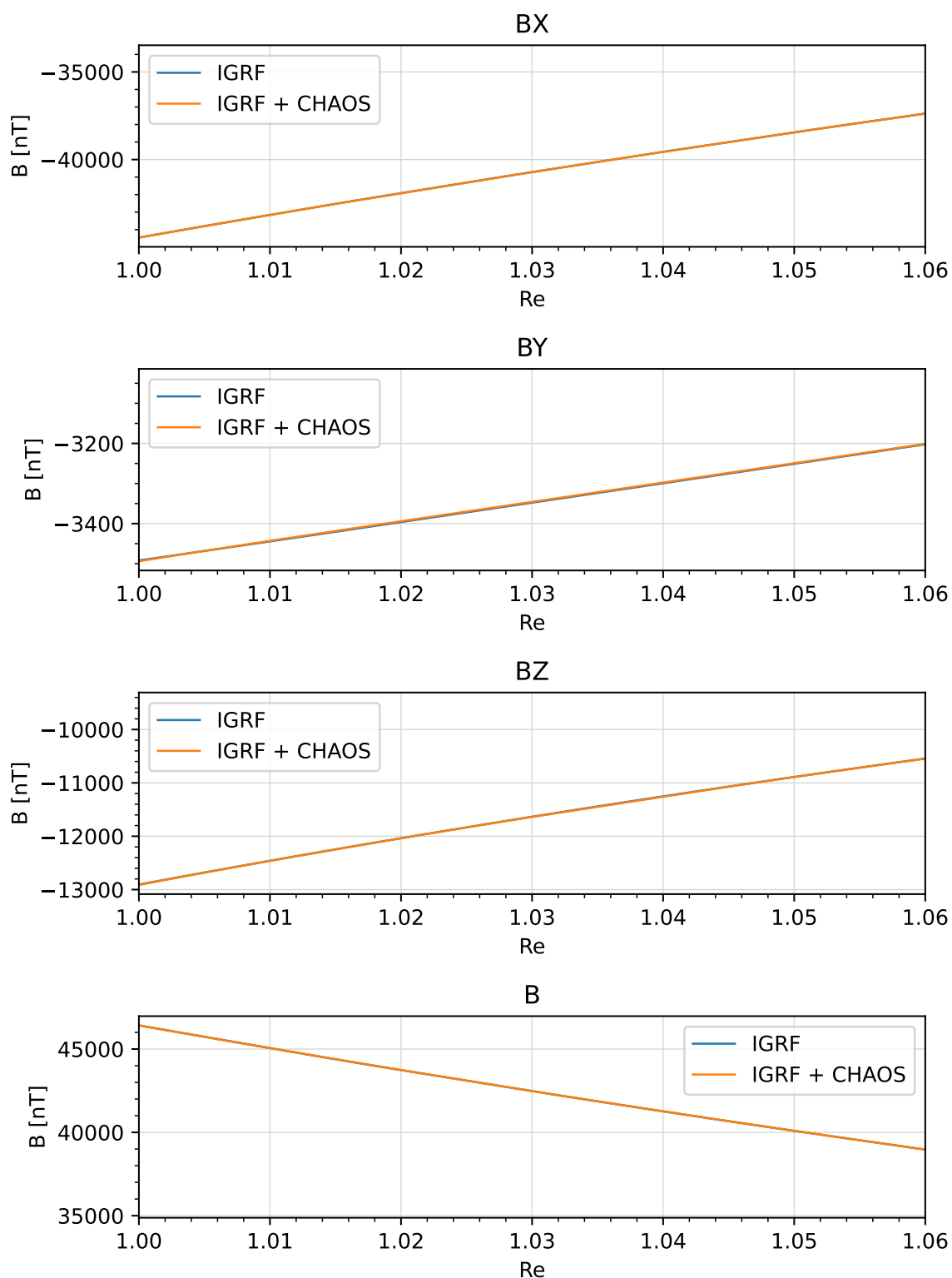
V súvislosti s experimentovaním a snahou o nájdenie príčiny „šumu“ v hodnotách odrezávacích rigidít boli realizované ďalšie kontrolné výpočty. Tentokrát bolo cieľom spustiť výpočty odrezávacích rigidít s postupne zväčšujúcim sa polomerom, podobne ako v predchádzajúcom prípade pri výpočte len magnetickeho poľa. Výpočty boli spúšťané opäť so súradnicami stredu anomálie v Kursku a miesta so slabým pôsobením krustálneho geomagnetického poľa.

Obrázky 6.15 a 6.16 znázorňujú pomer odrezávacích rigidít v závislosti od zväčšujúceho sa polomeru. Pomer bol aj v tomto prípade získaný na základe výsledkov výpočtov odrezávacích rigidít s modelom geomagnetického poľa IGRF a s modelmi IGRF + *CHAOS-7*. Obrázok 6.15 reprezentuje závislosť pri výpočtoch s krokom v rigidite 0,01 GV, zatiaľ čo obrázok 6.16 zobrazuje závislosť pri výpočtoch s krokom v rigidite 0,001 GV. Aj v tomto prípade sa ukazuje, že pri výpočte s krokom v rigidite 0,001 GV je šumenie menšie. Taktiež sa ukazuje, že pozorovaný „šum“ je najväčší v hodnotách spodnej odrezávacej rigidity, ktorá zároveň ovplyvňuje aj hodnotu efektívnej odrezávacej rigidity. So zväčšujúcim sa polomerom však nie je pozorované žiadne očakávané ustálenie hodnôt, ktoré by naznačovalo vplyv krustálneho poľa v nižšej výške.

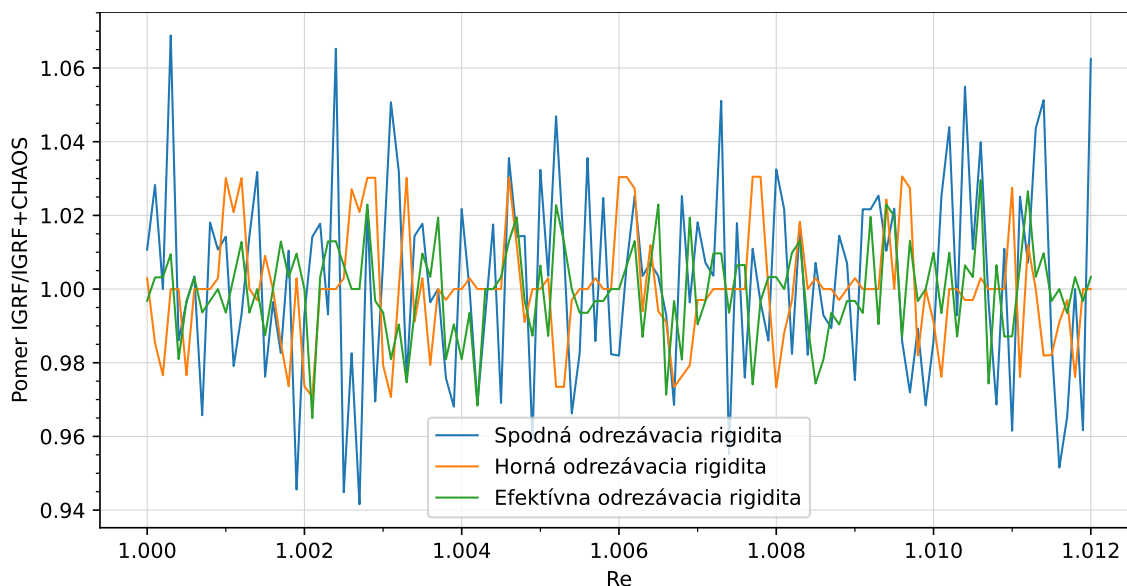
Z doterajších výsledkov možno skonštatovať, že započítanie krustálnej zložky



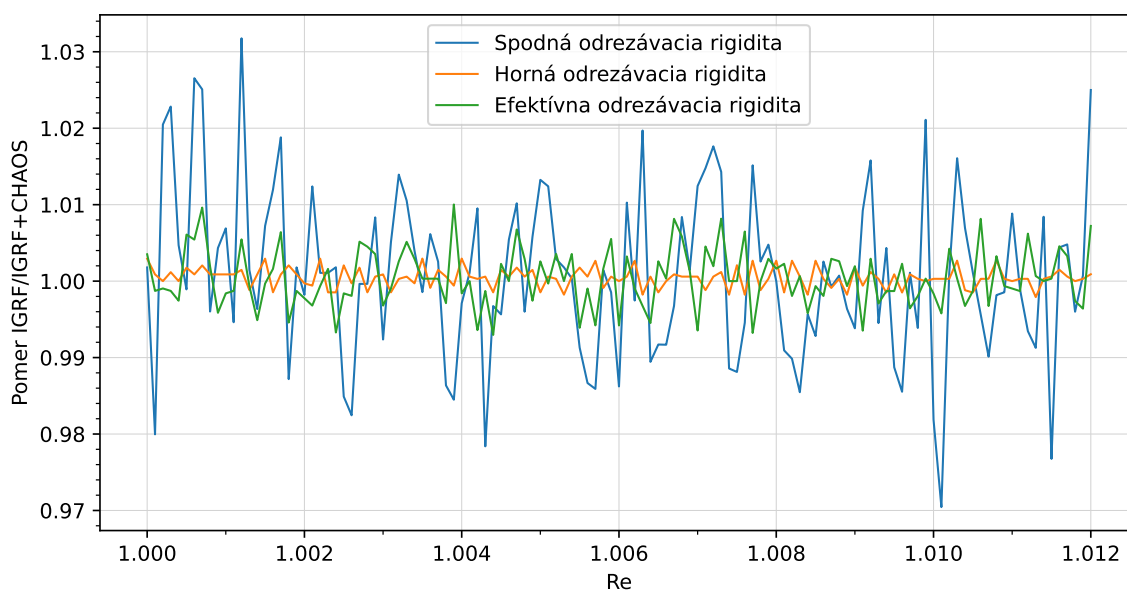
Obr. 6.13: Vizualizácia závislosti geomagnetického poľa vypočítaného modelom IGRF a kombináciou modelov IGRF a *CHAOS-7* od rastúcej výšky v mieste anomálie Kursk (Súradnice: 51,25°N 37,66°E, Dátum: 28.3.2000, Čas: 16:00)



Obr. 6.14: Vizualizácia závislosti geomagnetického poľa vypočítaného modelom IGRF a kombináciou modelov IGRF a *CHAOS-7* od rastúcej výšky v mieste so slabým vplyvom krystalného poľa (Súradnice: 45°N 4°E, Dátum: 28.3.2000, Čas: 16:00)



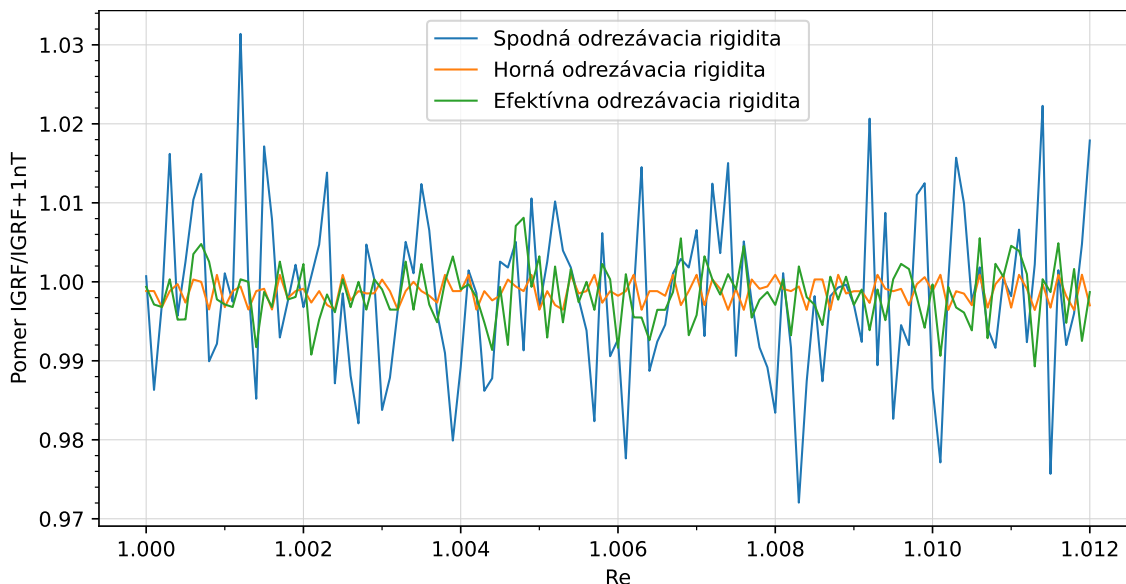
Obr. 6.15: Závislosť hodnôt pomeru medzi odrezávacími rigiditami vypočítanými v pôsobení geomagnetického poľa vypočítaného modelom IGRF a poľa vypočítaného kombináciou modelov IGRF a *CHAOS-7* od polomeru (Súradnice: 51,25°N 37,66°E, Dátum: 28.3.2000, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,01$ GV)



Obr. 6.16: Závislosť hodnôt pomeru medzi odrezávacími rigiditami vypočítanými v pôsobení geomagnetického poľa vypočítaného modelom IGRF a poľa vypočítaného kombináciou modelov IGRF a *CHAOS-7* od polomeru (Súradnice: 51,25°N 37,66°E, Dátum: 28.3.2000, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,001$ GV)

geomagnetického poľa pri výpočte trajektórií kozmického žiarenia zavádza do výsledkov „šum“, ktorý nie je spôsobený vplyvom samotného krustálneho poľa. Skutočnosť, že vo výsledkoch nie je pozorovaný vplyv krustálnej zložky poľa potvrdzuje podobné zašumenie vo výsledkoch aj v mieste, na ktorom sa nenachádza

geomagnetická anomália. Pre overenie tohto tvrdenia bol realizovaný výpočet s modelom IGRF, v ktorom bola ku všetkým zložkám vektora magnetickej indukcie pripočítaná konštantná hodnota 1 nT. Výsledok v prípade výpočtu s krokom v rigidite 0,001 GV je zobrazený na obrázku 6.17.



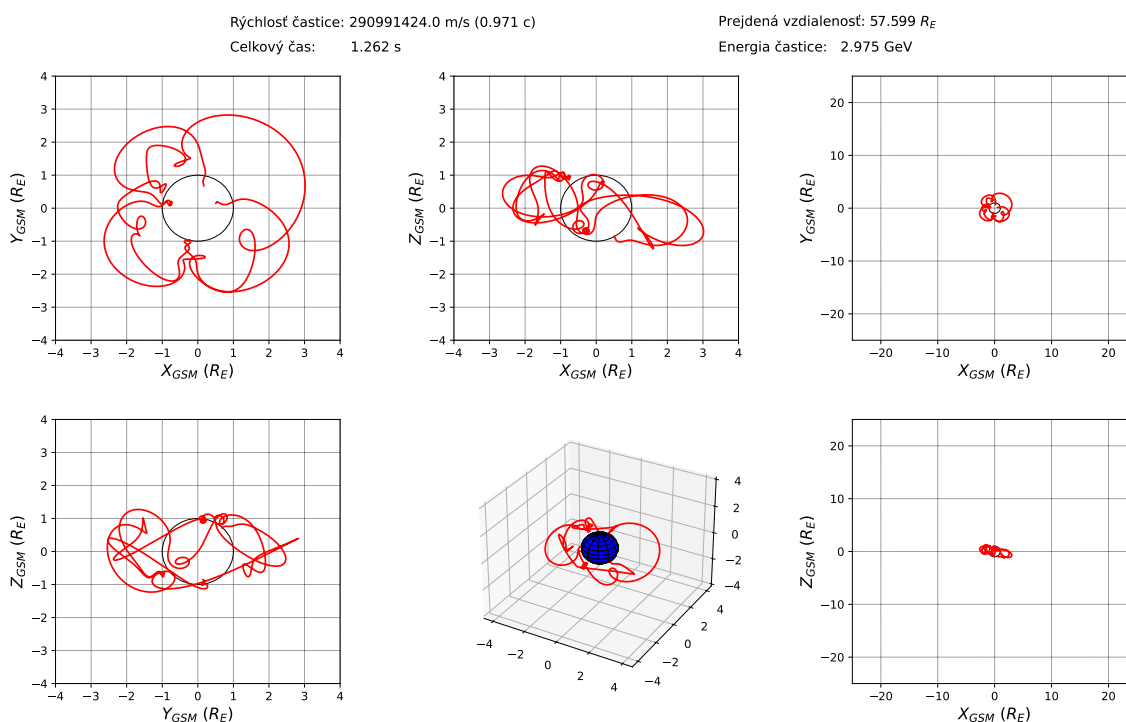
Obr. 6.17: Závislosť hodnôt pomeru medzi odrezávacími rigiditami vypočítanými v pôsobení geomagnetického poľa vypočítaného modelom IGRF a poľa zväčšeného o 1 nT od polomeru (Súradnice: 51,25°N 37,66°E, Dátum: 28.3.2000, Čas: 16:00, $\Delta R = 0,001$ GV)

Pri porovnaní závislostí na obrázkoch 6.17 a 6.16 je možné vidieť, že aj v prípade pripočítania 1 nT ku zložkám geomagnetického poľa sa prejavuje rovnaké zašumenie v pomere odrezávacích rigidít. Na základe týchto výsledkov možno skonštatovať, že bola objavená doteraz nezdokumentovaná chyba v kóde simulácie trajektórií kozmického žiarenia, ktorá sa objavuje už pri malých zmenách geomagnetického poľa. Chyba sa prejavuje šumením v pomere medzi rigiditami, ktoré závisí od veľkosti kroku v rigidite pri výpočte. Efekt krustálneho poľa na hodnotách odrezávacích rigidít je pravdepodobne zakrytý v pozadí „šumu“. Rovnako je možné, že krustálne geomagnetické pole neovplyvňuje hodnoty odrezávacích rigidít v dôsledku jeho slabého pôsobenia v porovnaní s hlavnou zložkou geomagnetického poľa a v dôsledku faktu, že s rastúcou výškou od povrchu Zeme jeho pôsobenie rýchlo klesá.

6.4 Overenie správnosti výpočtu individuálnej trajektórie častice a magnetického poľa

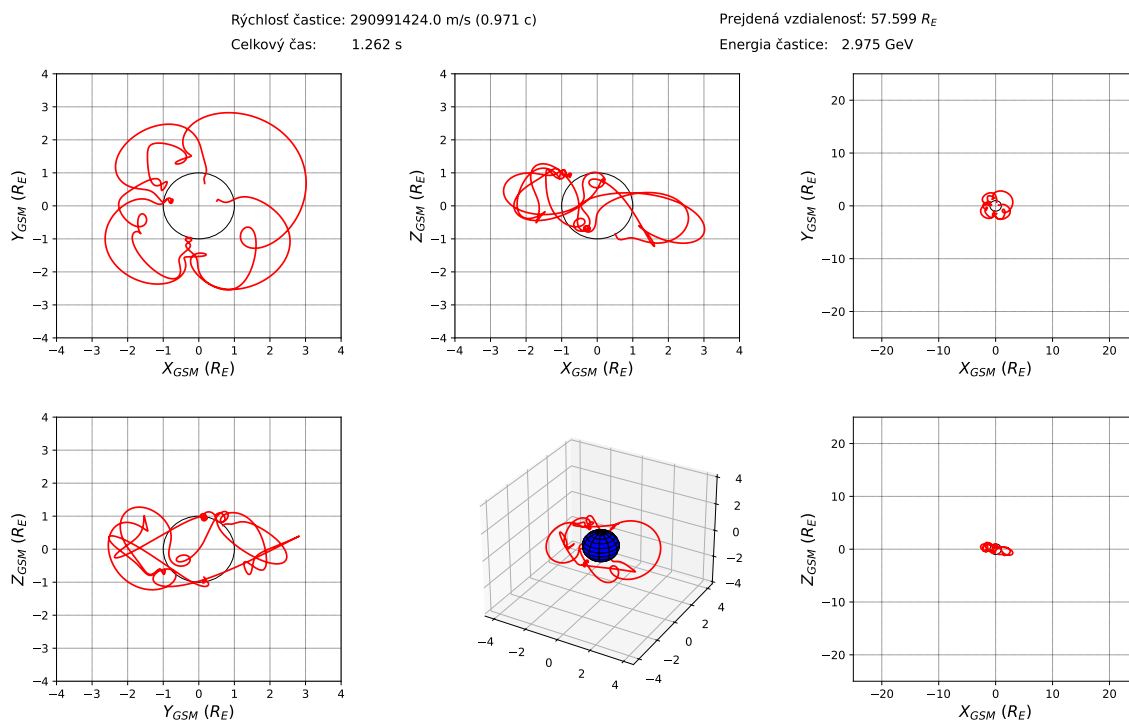
V rámci tejto práce bola refaktorizovaná C verzia simulácie rozšírená o možnosť výpočtu individuálnej trajektórie častice kozmického žiarenia. V prípade tohto typu výpočtu existoval doposiaľ samostatný program v jazyku Fortran, s výsledkami ktorého boli výstupy z novej implementácie porovnávané.

Pre účely vizualizácie trajektórie bol využitý existujúci skript pre vykreslenie trajektórie častice kozmického žiarenia v sústave GSM, ktorý je súčasťou systému COR. Na obrázku 6.18 je možné vidieť komplikovanú zakázanú trajektóriu častice vypočítanú pôvodnou Fortran verziou programu. V tomto prípade bol realizovaný výpočet trajektórie častice s rigiditou 3,8 GV v geomagnetickom poli počítanom modelmi IGRF a TS05. Na obrázku 6.19 je vizualizovaná rovnaká trajektória častice vypočítaná novou C implementáciou programu. Pri porovnaní s obrázkom 6.18 možno skonštatovať, že trajektórie častice sú totožné, čo potvrdzuje korektnosť novej implementácie výpočtu individuálnej trajektórie.



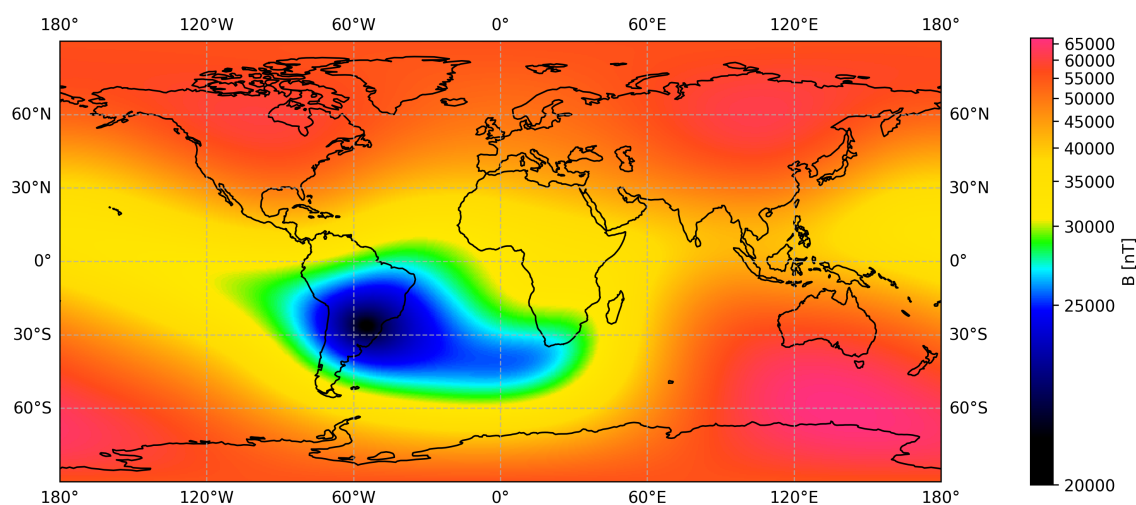
Obr. 6.18: Vizualizácia zakázanej trajektórie častice s rigiditou 3,8 GV vypočítanej s modelmi geomagnetického poľa IGRF a TS05 (Fortran verzia)

Súčasťou práce bola implementácia módu pre výpočet geomagnetického poľa na definovanej sieti bodov. Pre účely overenia správnosti bolo vypočítané geomagnetické pole na celej Zemi s rozstupom $0,5^\circ$ v zemepisnej šírke aj dĺžke. Na ob-

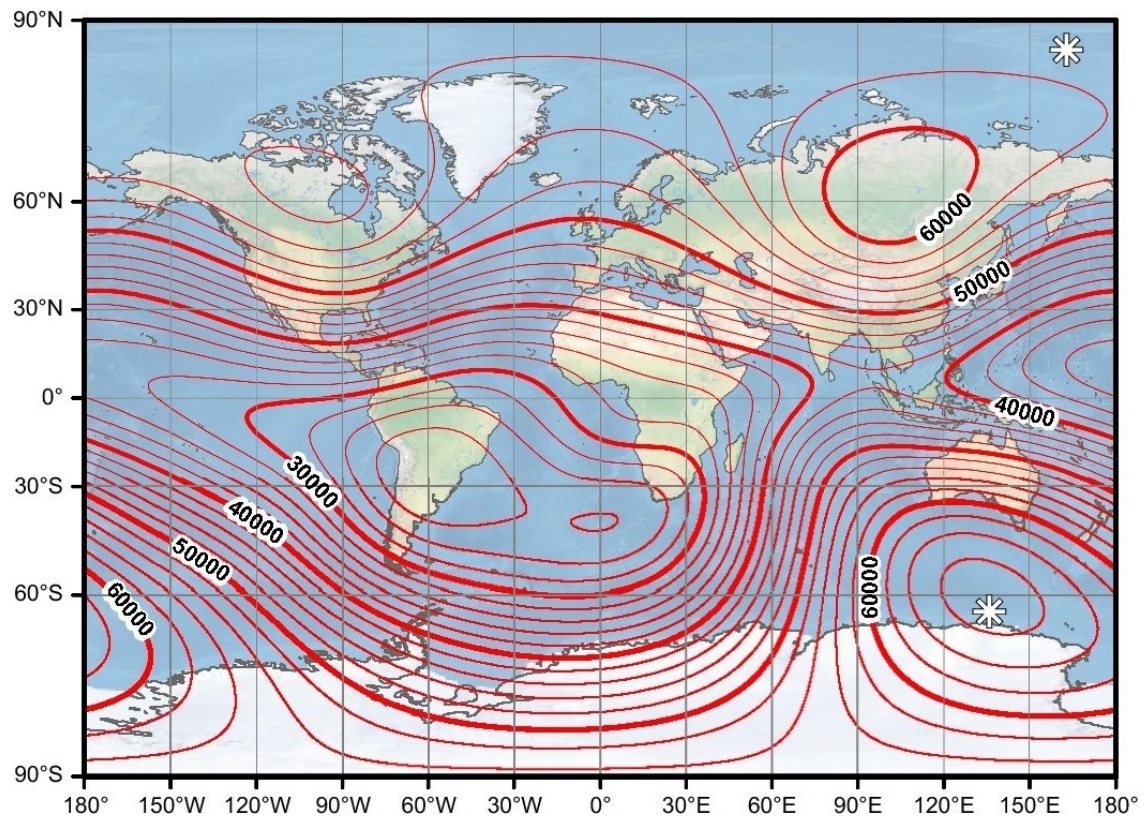


Obr. 6.19: Vizualizácia zakázanej trajektórie častice s rigiditou 3,8 GV vypočítanej s modelmi geomagnetického poľa IGRF a TS05 (nová C verzia)

rázku 6.20 je možné vidieť vizualizované celkové geomagnetické pole. V okolí miesta so súradnicami 30°N a 60°W je tmavomodrou farbou zvýraznená známa Juhoatlantická anomália, ktorá potvrdzuje správnosť výpočtu hlavného geomagnetického poľa. Správnosť potvrdzujú aj podobné štruktúry vyobrazené na obrázku 6.21 z článku [16], v súvislosti s ktorým bol vydaný model interného geomagnetického poľa IGRF.



Obr. 6.20: Vizualizácia hlavného geomagnetického poľa modelom IGRF pre rok 2020 vypočítaného novou verziou simulačného programu



Obr. 6.21: Vizualizácia hlavného geomagnetického poľa modelom IGRF pre rok 2020 (prebraté z článku [16])

7 Vyhodnotenie optimalizácií

V tejto kapitole budú zhrnuté výsledky optimalizácií, ktoré boli implementované do kódu simulácie trajektórií častíc kozmického žiarenia v rámci sekcie 5.8. Pre účely porovnania bola meraná predovšetkým rýchlosť výpočtu odrezávacích rigidít, nakoľko sa jedná o najpodstatnejší typ výpočtu v kontexte systému COR, v ktorom sa simulačný program využíva. Zároveň ide o najkomplexnejší typ výpočtu v porovnaní s výpočtom individuálnej trajektórie a výpočtom geomagnetického poľa na sieti bodov, ktorých implementácia bola tiež súčasťou tejto práce. Vo všeobecnosti však platí, že optimalizácie kódu modelov geomagnetického poľa sa odzrkadlia na všetkých typoch výpočtu, ktoré program realizuje, nakoľko sa jedná o najpomalšiu časť výpočtu.

Výnimkou bude porovnanie rýchlostí dvoch alternatív kódu pre výpočet internej zložky geomagnetického poľa, ktoré boli pôvodne zmienené v sekcii 3.3 a následne implementované v sekcii 5.5. Motiváciou pre implementáciu tohto kódu bolo pridanie výpočtu krustálneho – listosferického geomagnetického poľa do simulácie. Toto porovnanie bude realizované na základe výpočtu geomagnetického poľa na celej Zemi. Táto práca sa však nezaoberala optimalizáciou tejto časti kódu. Porovnanie bolo vykonané pre účely výberu lepšej – rýchlejšej alternatívy výpočtu.

Meranie rýchlosti bolo realizované na systéme s procesorom *Intel Core i7-9750H* so základným taktom 2,6 GHz a s technológiou *Turbo Boost*, ktorá umožňuje krátkodobo dosiahnuť frekvenciu 4,5 GHz. Program bol spúšťaný na operačnom systéme *Ubuntu 22.04* (WSL 2 – Windows 11). Čas bol zaznamenávaný prostredníctvom príkazu *time*, ktorý je súčasťou príkazového interpretéra *Bash*¹. Pre upresnenie, nejedná sa o utilitu */usr/bin/time*, ktorá je samostatným štandardným programom v distribúciách systému Linux. Celkovo bolo realizovaných 50 meraní, z ktorých bol získaný priemerný čas. Percentuálne zrýchlenie medzi jednotlivými verziami simulácií bolo následne získané spôsobom: $(T_1 - T_2)/T_1 \times 100$, kde T_1 je čas staršej (menej optimálnej) verzie a čas T_2 je čas novej (optimálnejšej) verzie.

¹<https://www.gnu.org/software/bash/>

7.1 Prínos refaktorizácie kódu v súvislosti s rýchlosťou výpočtu

V tabuľke 7.1 je zhrnuté porovnanie rýchlosti pôvodného kódu trasovania častice kozmického žiarenia v uniformnom magnetickom poli oproti refaktorizovanej verzii, ktorej implementácia bola opísaná v sekcii 5.1. Kód simulácie nebol pôvodne refaktorizovaný s cieľom dosiahnutia väčšej rýchlosti výpočtu. Zámerom bolo prispôbiť kód pre jeho jednoduché rozšírenie o ďalšie modely geomagnetického poľa. V meraniach sa však ukázalo, že refaktorizovaná verzia kódu je o 8,7 % rýchlejšia oproti pôvodnej verzii.

Tabuľka 7.1: Porovnanie rýchlosti výpočtu pôvodnej C verzie simulácie a refaktorizovanej C verzie bez zahrnutia výpočtu geomagnetického poľa

Verzia	Popis zmien	Výkonnosť	
		Priem. čas [s]	Zrýchlenie [%]
C	Pôvodná C verzia simulácie	8,77	–
C-1	Refaktorizovaná C verzia simulácie	8,00	8,71

Toto porovnanie bolo realizované spustením výpočtu v uniformnom magnetickom poli. To znamená, že pri výpočte trajektórie častice nedochádzalo k výpočtu geomagnetického poľa, jeho hodnota bola konštantná. Výpočet trajektórie častice skončil po dosiahnutí maximálneho počtu krokov trasovania, ktorý bol stanovený na 25 000. Trasovanie častice v uniformnom magnetickom poli nikdy nedosiahne stav, kedy by bol výpočet ukončený – dopadom častice späť na povrch Zeme (zakázaná trajektória) alebo dosiahnutím hranice magnetopauzy (dovolená trajektória). Častica sa v uniformnom poli bude donekonečna pohybovať po kružnici a preto je maximálny počet krokov trasovania dôležitý pre ukončenie výpočtu.

V rámci refaktorizácie kódu bolo zavedených viacero zmien, ktoré mohli ovplyvniť efektivitu vykonávania. Najväčší vplyv malo pravdepodobne odstránenie volania jednoduchých pomocných funkcií, pričom v mieste volania týchto funkcií bolo priamo vložené ich telo. Redukcia volania funkcií v kóde simulácie sa už v minulosti prejavila ako vhodné riešenie pre dosiahnutie zrýchlenia, ako bolo zmienené v kapitole 2. Zároveň je to v súlade s tvrdeniami Agnera Foga v optimalizačnej príručke [25], kde sa uvádza, že delenie kódu do viacerých funkcií

má negatívny dopad na efektivitu vykonávania. Dôvody spočívajú v nutnosti skoku na adresu kódu funkcie, čo môže narušiť efektívnosť využitia cache inštrukcií, taktiež v nutnosti prípravy aktivačného záznamu funkcie v súvislosti s ukladaním a načítaním hodnôt registrov a argumentov funkcie. Volanie funkcie tiež môže mať negatívny vplyv na predikciu vetiev v programe, ktorú realizuje procesor.

Celkovo sa z hľadiska optimalizácie môže javiť, že je lepšie v programe nevyužívať žiadne ďalšie funkcie okrem hlavnej. Tento prístup má však výrazný negatívny dopad na „čistotu“ kódu, čo sa odzrkadlí v jeho udržiavateľnosti a rozširiteľnosti. V praxi je dôležité nájsť rovnováhu medzi optimálnym a prehľadným kódom.

7.2 Výpočet odrezávacích rigidít s modelmi geomagnetického poľa IGRF a TS05

Tabuľka 7.2 zobrazuje priemerný čas trvania výpočtu simulácie s jednotlivými optimalizáciami, ktoré boli implementované do programu a opísané v rámci sekcie 5.8. V súvislosti s kódom modelu TS05 sa jedná o redukciu využitia smerníkov, odstránenie výpočtov s konštantnými hodnotami a aplikovanie optimalizácií na úrovni kompilácie kódu. Realizovaný bol výpočet odrezávacích rigidít v mieste so strednou zemepisnou šírkou a krokom v rigidite 0,01 GV.

Z výsledkov zhrnutých v tabuľke 7.2 je evidentné, že už pôvodná C verzia simulácie v kombinácii s modelmi geomagnetického poľa IGRF a TS05 je takmer o 83 % rýchlejšia oproti jej Fortran alternatíve. Najväčší prínos z hľadiska rýchlosti výpočtu bol nadobudnutý vo verzii C-3, v ktorej boli odstránené časti kódu modelu TS05, ktoré realizovali aritmetické operácie s konštantnými hodnotami. Jedná sa o viac ako 1,4-násobné zrýchlenie oproti pôvodnej verzii simulácie.

Ďalšie podstatné zrýchlenie bolo nadobudnuté vo verzii C-5 (tabuľka 7.2), v ktorej boli aplikované optimalizácie na úrovni kompilácie programu. V tejto verzii bolo dosiahnuté už takmer dvojnásobné zrýchlenie výpočtu oproti pôvodnej C verzii. Zrýchlenie bolo namerané aj v prípade výpočtu len s modelom interného geomagnetického poľa IGRF, ako je zdokumentované v tabuľke 7.3 vo verzii C-3. V tomto prípade ide o 8,7 % zrýchlenie oproti pôvodnej C verzii simulácie. Podobné zrýchlenia boli namerané aj v prípade výpočtov s historickými modelmi geomagnetického poľa (bez zahrnutia výpočtu externej zložky), ktorých implementácia bola rovnako súčasťou práce.

Za zmienku stojí využitie prepínača `-march=native` kompilátora GCC, ktorý

Tabuľka 7.2: Porovnanie rýchlostí výpočtu optimalizovaných verzií simulácie s modelmi geomagnetického poľa IGRF a TS05

Verzia	Popis zmien	Výkonnosť	
		Priem. čas [s]	Zrýchlenie [%]
Fortran	Referenčná verzia	242,57	–
C	Pôvodná C verzia simulácie	41,41	82,93
C-1	Refaktorizovaná C verzia simulácie s pôvodným kódom modelov geomagnetického poľa	41,33	0,19
C-2	Redukovaný počet smerníkov v argumentoch funkcií modelu TS05	38,34	7,23
C-3	Odstránený kód v spojitosti s konštantnými parametrami modelu TS05	28,63	25,29
C-4	Aplikovanie tretej úrovne optimalizácií kompilátora GCC (-O3)	28,57	0,18
C-5	Aplikovanie ostatných prepínačov pri kompilácii, ktoré boli zmienené v sekcii 4.6	21,79	23,72

preukázateľne urýchlil výpočet už v rámci predchádzajúcej práce [7]. Kompiláciou programu využitím tohto prepínača došlo k zmene vo výsledkoch simulácie, ktoré spôsobovali inštrukcie FMA. Tieto inštrukcie redukujú zaokrúhľovanie čísel s pohyblivou rádovou čiarkou pri aritmetických operáciách typu $A \times B + C$ a zároveň realizujú tento výpočet v rámci jednej inštrukcie. To umožňuje dosiahnuť zrýchlenie výpočtu, avšak dôjde k zmienenej diskrepancii vo výsledkoch. Prostredníctvom prepínača `-ffp-contract=off` bolo možné vypnúť využitie tejto sady inštrukcií a zároveň ponechať všetky ostatné rozšírenia konkrétneho procesora.

Predvolene kompilátor GCC limituje veľkosť funkcií, ktoré budú v mieste volania nahradené ich kódom, pokiaľ boli explicitne označené kľúčovým slovom *inline*. Pokiaľ je však aplikovaná aspoň druhá úroveň optimalizácií (prepínačom -O2), všetky funkcie v programe budú automaticky označené ako *inline*. Prepínač

Tabuľka 7.3: Porovnanie rýchlostí výpočtu optimalizovaných verzií simulácie s modelom geomagnetického poľa IGRF

Verzia	Popis zmien	Výkonnosť	
		Priem. čas [s]	Zrýchlenie [%]
Fortran	Referenčná verzia	14,17	–
C	Pôvodná C verzia simulácie	2,40	83,03
C-1	Refaktorizovaná C verzia simulácie s pôvodným kódom modelov geomagnetického poľa	2,25	6,24
C-2	Aplikovanie tretej úrovne optimalizácií kompilátora GCC (-O3)	2,20	2,47
C-3	Aplikovanie ostatných prepínačov pri kompilácii, ktoré boli zmienené v sekcii 4.6	2,19	0,28

`-finline-limit=n` umožňuje ovplyvniť maximálnu veľkosť funkcie, ktorá bude kompilovaná ako *inline* funkcia. Experimentovaním sa ukázalo, že najoptimálnejšia hodnota n tohto prepínača pre kód simulácie je 300. Hodnota n podľa manuálu² kompilátora GCC znamená počet „pseudo inštrukcií“ funkcie.

Celkovo možno usúdiť, že všetky prepínače kompilátora, ktoré boli zmienené v časti návrhu v sekcii 4.6 spôsobili zrýchlenie a neovplyvnili výsledok. Je potrebné podotknúť, že efekt zrýchlenia výpočtu, ktorý bol získaný kombináciou optimalizačných prepínačov kompilátora bude silne závisieť od cieľového systému, na ktorom bude simulačný program kompilovaný a spúšťaný. To sa týka najmä prepínača `-march=native`, ktorý optimalizuje kompiláciu na konkrétnu architektúru procesora.

7.3 Výpočet odrezávacích rigidít s modelmi geomagnetického poľa IGRF a T96

Súčasťou práce bola implementácia výpočtu externej zložky geomagnetického poľa modelom T96 do simulačného programu. Verzia simulácie, ktorá zahŕňala

²<https://gcc.gnu.org/onlinedocs/gcc-11.4.0/gcc/Optimize-Options.html>

tento model doposiaľ existovala len v podobe Fortran kódu, ako bolo zmienené v sekcii 4.2. Preto výsledky optimalizácií v súvislosti s kódom modelu T96 budú porovnávané hlavne voči pôvodnej verzii v jazyku Fortran.

Z tabuľky 7.4 je možné vidieť, že už prvá funkčná verzia simulácie (C-1) s prepísaným kódom modelu T96 je takmer 5,9-násobne rýchlejšia oproti pôvodnej Fortran implementácii. V rámci optimalizácie kódu modelu T96 boli vykonané úpravy algoritmov vo funkciách *car3x3_t96*, *birk1shld* a *bitk2shl*. Podstatné zrýchlenie bolo dosiahnuté optimalizáciou funkcie *car3x3_t96* (verzia C-2) – až 22,48 % v porovnaní s verziou C-1. Aj napriek skutočnosti, že funkcie *birk1shld* a *bitk2shl* sa pôvodne vyznačovali rovnakým problémom ako funkcia *car3x3_t96*, ich optimalizácia mala menší vplyv na celkové zrýchlenie keďže sú počas simulácie menej často volané (verzia C-3 a C-4).

Veľký vplyv na rýchlosť výpočtu malo aj odstránenie časti kódu, ktorý realizoval aritmetické operácie s konštantnými hodnotami, podobne ako v prípade optimalizácie kódu TS05 v predchádzajúcej sekcii. Z výsledkov v tabuľke 7.4 je možné vidieť, že v prípade optimalizácie C-5 bolo dosiahnuté až 29 % zrýchlenie oproti predchádzajúcej verzii C-4. Po aplikácii ostatných optimalizácií bolo dosiahnuté zrýchlenie až 93,6 % oproti pôvodnej Fortran verzii.

7.4 Výpočet geomagnetického poľa modelom CHAOS-7

Súčasťou požiadaviek novej verzie programu pre simuláciu trajektórií kozmického žiarenia bolo pridanie výpočtu krustálneho geomagnetického poľa. V rámci práce bolo poukázané na to, že pridanie tohto výpočtu bude vyžadovať implementáciu samostatného kódu pre výpočet geomagnetického poľa, ktorý bude pracovať s koeficientmi modelu CHAOS-7 pre získanie zložiek vektora krustálneho geomagnetického poľa. V sekcii 3.3 boli zvažované 2 rôzne prístupy realizácie výpočtu, pričom boli porovnané z hľadiska časovej komplexity. Predpokladalo sa, že jednotlivé riešenia sa budú líšiť z hľadiska rýchlosti výpočtu. Aby sa naše predpoklady potvrdili, pristúpilo sa k implementácii oboch verzií.

Efektivita oboch spôsobov výpočtu bola porovnávaná z hľadiska rýchlosti vykonávania spúšťaním výpočtov zložiek vektora indukcie geomagnetického poľa na celej Zemi s rozstupom 1° v zemepisnej šírke a dĺžke. Výsledky sú zhrnuté v tabuľke 7.5. Z výsledkov je zrejmé, že výpočet prostredníctvom diferenciálnej formy rovnice magnetického potenciálu je takmer 5,5-násobne rýchlejší oproti prvému spôsobu, ktorý spočíva vo výpočte numerického gradientu funkcie magne-

Tabuľka 7.4: Porovnanie rýchlostí výpočtu optimalizovaných verzií simulácie s modelmi geomagnetického poľa IGRF a T96

Verzia	Popis zmien	Výkonnosť	
		Priem. čas [s]	Zrýchlenie [%]
Fortran	Referenčná verzia	118,02	–
C-1	Refaktorizovaná C verzia simulácie s prvou verziou kódu modelu T96	20,10	82,97
C-2	Optimalizovaný kód funkcie <i>shl-car3x3_t96</i>	15,58	22,48
C-3	Optimalizovaný kód funkcie <i>birk1shld</i>	13,06	16,20
C-4	Optimalizovaný kód funkcie <i>birk2shl</i>	12,47	4,51
C-5	Odstránený kód v spojitosti s konštantnými parametrami modelu T96	8,86	28,97
C-6	Aplikovanie tretej úrovne optimalizácií kompilátora GCC (-O3)	8,30	6,26
C-7	Aplikovanie ostatných prepínačov pri kompilácii, ktoré boli zmienené v sekcii 4.6	7,58	8,60

tického potenciálu na viacerých bodoch. Na základe tohto výsledku bola v kóde simulácie ponechaná rýchlejšia alternatíva tohto výpočtu.

V sekcii 3.3 sa uvažovalo o využití existujúceho kódu pre výpočet internej zložky geomagnetického poľa. Tento kód realizuje výpočet geomagnetického poľa predovšetkým využitím koeficientov modelu IGRF. V rámci tejto práce bola implementovaná možnosť výpočtu geomagnetického poľa prostredníctvom historických modelov, ktoré využívajú rovnaký kód. V prípade výpočtu krustálneho geomagnetického poľa sa tento kód nevyužil v dôsledku neúspešných pokusov z minulosti. Ukázalo sa, že výpočet krustálneho poľa touto metódou nie je možný v dôsledku pretečenia dátových typov pri väčšom ráde výpočtu poľa.

Tabuľka 7.5: Porovnanie rýchlostí výpočtu krustálneho geomagnetického poľa modelom CHAOS-7 na celej Zemi s rozstupom 1° v zemepisnej šírke a dĺžke

Princíp výpočtu	Výkonnosť	
	Priem. čas [s]	Zrýchlenie [%]
Výpočet numerického gradientu funkcie magnetického potenciálu z viacerých bodov	142,75	–
Diferenciálna forma rovnice pre výpočet magnetického potenciálu	26,05	81,75

Keďže nový kód, ktorý bol pre výpočet krustálneho poľa implementovaný realizuje z matematického hľadiska podobný výpočet ako existujúci kód pre výpočet internej zložky geomagnetického poľa, je možné tieto rozdielne prístupy výpočtov porovnať. Pre realizáciu porovnania bolo potrebné upraviť novú funkciu pre výpočet geomagnetického poľa tak, aby bolo pomocou nej možné realizovať výpočet poľa modelom IGRF. Následne bol spustený výpočet geomagnetického poľa na celej Zemi s rozstupom $0,25^\circ$ v zemepisnej šírke a dĺžke pôvodnou a následne novou funkciou.

V tabuľke 7.6 sú uvedené výsledky rýchlostí oboch výpočtov. Je možné vidieť, že pôvodná funkcia pre výpočet geomagnetického poľa je o 24 % rýchlejšia oproti jej novej alternatíve. Táto práca sa síce nezaoberala optimalizáciou nového kódu, ktorý bol implementovaný pre výpočet krustálneho poľa, výsledky porovnania však naznačujú, že má zmysel sa na to v budúcnosti zamerať.

Tabuľka 7.6: Porovnanie rýchlosti výpočtu pôvodnej a novo implementovanej funkcie pre výpočet geomagnetického poľa na sieti bodov s rozstupom $0,25^\circ$ na celej Zemi (model IGRF)

Verzia kódu	Výkonnosť	
	Priem. čas [s]	Zrýchlenie [%]
Pôvodný kód pre výpočet internej zložky geomagnetického poľa	2,58	–
Nový kód pre výpočet internej zložky geomagnetického poľa	3,41	-24,13

8 Záver

V rámci tejto diplomovej práce sme sa venovali rozšíreniu C verzie simulácie trajektórií kozmického žiarenia. Rozšírenie spočívalo spočiatku v refaktorizácii pôvodnej C verzie programu, ktorý disponoval modelmi geomagnetického poľa IGRF a TS05. Cieľom bolo zaviesť jednotné rozhranie pre modely geomagnetického poľa, ktoré uľahčí pridanie ďalších modelov geomagnetického poľa do simulácie. V procese implementácie bol kód existujúcich modelov geomagnetického poľa oddelený do samostatných knižníc, čo zlepšilo jeho udržiavateľnosť a rozširiteľnosť. Súčasťou zmien bola zároveň implementácia funkcionality, ktorá spočívala v spracovávaní argumentov príkazového riadku. Konkrétne išlo o prepínače, ktorými je možné zahrnúť vybraný model geomagnetického poľa do simulácie, prípadne prepísať predvolené fyzikálne parametre výpočtu.

Po dokončení refaktorizácie bol kód simulácie rozšírený o historické modely interného geomagnetického poľa *Historical (0-1968 CE)* a *CALS10k.2*, ktoré doposiaľ existovali v podobe Fortran verzie simulácie. Sférické harmonické koeficienty historických modelov boli implementované v rámci vytvorenej knižnice pre výpočet internej zložky geomagnetického poľa v predchádzajúcom kroku, keďže sa jedná o rovnaký typ výpočtu ako v prípade modelu IGRF.

Ďalšie podstatné rozšírenie simulácie spočívalo v prepise kódu modelu externého geomagnetického poľa Tsyganenko 1996 (T96) z jazyka Fortran do jazyka C a jeho následnom integrovaní do aktuálneho riešenia. Pre model T96 bola vytvorená samostatná knižnica, podobne ako v prípade ostatných modelov geomagnetického poľa v rámci simulácie.

V rámci tejto práce bol do simulácie trajektórií kozmického žiarenia implementovaný model pre výpočet krustálneho alebo inak nazývaného litosférického geomagnetického poľa prostredníctvom modelu *CHAOS-7*. Litosférické geomagnetické pole tvorí súčasť interného geomagnetického poľa a rovnakým spôsobom sa aj vypočítava. Charakteristickým rozdielom výpočtu litosférického poľa v porovnaní s výpočtom hlavného poľa je väčší rád výpočtu. Preto bolo potrebné nájsť vhodnú metódu, ktorou je možné tento výpočet realizovať. V implementačnej

časti tejto práce boli vo forme samostatnej knižnice pridané do riešenia dve verzie kódu výpočtu krustálneho geomagnetického poľa, ktoré realizovali výpočet odlišným spôsobom. Následne sa ukázalo, že výpočet poľa prostredníctvom diferenciálnej rovnice magnetického potenciálu je 5,5-násobne efektívnejší z hľadiska času vykonávania. Preto bol tento spôsob výpočtu v kóde ponechaný.

Súčasťou práce bola aj implementácia módu simulácie pre realizáciu výpočtu individuálnej trajektórie častice kozmického žiarenia. Tento typ výpočtu spočíval v úprave existujúceho kódu simulácie trajektórií častíc kozmického žiarenia, ktorý produkuje hodnoty odrezávacích rigidít. Ďalším rozšírením simulácie bolo pridanie možnosti pre spustenie výpočtu geomagnetického poľa zvolenými modelmi na definovanej sieti bodov.

Dôležitým krokom bolo aj overenie správnosti nového riešenia. Prostredníctvom kontrolných výpočtov sa ukázalo, že výpočty prostredníctvom modelov IGRF, TS05 a T96 produkujú rovnaké výsledky ako ich staršie alternatívy. V prípade výpočtu s historickými modelmi bola pozorovaná diskrepancia vo výsledkoch v dôsledku rozdielnej interpolácie medzi epochami koeficientov. Po konzultáciách s doménovým expertom sa dospelo k záveru, že tento rozdiel je akceptovateľný a spôsob interpolácie, ktorý realizuje nová verzia simulácie je správny.

Súčasťou overenia správnosti implementovaných rozšírení bolo aj overenie výpočtov v kombinácii s modelom *CHAOS-7*. Toto overenie spočívalo v snahe spozorovať vplyv krustálnej (litosférickej) geomagnetickej anomálie na výsledkoch odrezávacích rigidít. Výsledky výpočtov však nenaznačovali očakávané správanie. Vo výsledkoch odrezávacích rigidít bol pozorovaný „šum“, ktorý vznikol už pri malej zmene geomagnetického poľa. Vplyv geomagnetickej anomálie, resp. zložky krustálneho geomagnetického poľa vo všeobecnosti je buď skrytý v pozadí šumu vo výsledkoch alebo vôbec neexistuje. Výpočet krustálneho geomagnetického poľa sa však javí byť v simulácii správny na základe výpočtu celkového poľa na Zemi a na základe preukázania zoslabovania jeho pôsobenia s rastúcou výškou od povrchu Zeme.

V neposlednom rade bola časť práce venovaná optimalizácii kódu novej verzie simulácie. V prípade kódu modelu externej zložky geomagnetického poľa TS05 bolo dosiahnuté dvojnásobné zrýchlenie oproti predchádzajúcej C verzii simulácie. Optimalizácia tejto časti kódu spočívala najmä v odstránení kódu, ktorý realizoval aritmetické operácie s konštantnými hodnotami. V súvislosti s modelom externého geomagnetického poľa T96 bolo dosiahnuté viac ako 15,5-násobné (93,6 %) zrýchlenie v porovnaní s pôvodnou Fortran verzou. Optimalizácia v tomto prípade spočívala v prepísaní algoritmu funkcií *shlcar3x3_t96*, *birk1shld*, *birk2shl*

a taktiež v odstránení kódu v súvislosti s aritmetickými operáciami nad konštantnými hodnotami. Viac ako 5-násobné zrýchlenie sa prejavilo už v prvej verzii po prepise kódu modelu z jazyka Fortran. Vo všeobecnosti je možné skonštatovať, že merateľný vplyv na rýchlosť mali aj optimalizácie na úrovni kompilátora GCC v súvislosti s optimalizačnými prepínačmi.

Cieľom tejto práce bolo okrem splnenia definovaných požiadaviek prispieť určitým spôsobom k fyzikálnemu výskumu v oblasti kozmického žiarenia. Práca na simulačnom programe touto záverečnou prácou nekončí, z hľadiska optimalizácie má zmysel zaoberať sa kódom výpočtu krustálneho geomagnetického poľa modelom *CHAOS-7*, ktorého výpočet má najdlhšie trvanie v porovnaní s ostatnými implementovanými modelmi. Z fyzikálneho hľadiska by bolo prínosom objaviť príčinu šumu vo výsledkoch odrezávacích rigidít pri malej zmene geomagnetického poľa a následne implementovať jej riešenie.

Literatúra

1. STØRMER, Carl. On the Trajectories of Electric Particles in the Field of a Magnetic Dipole with Applications to the theory of Cosmic Radiation. First Communication. *Publications of the Oslo Observatory, vol. 1, pp. Ji-JPIX*. 1933, roč. 1.
2. STØRMER, Carl. On the Trajectories of Electric Particles in the Field of a Magnetic Dipole with Applications to the Theory of Cosmic Radiation. Fifth Communication. With 33 Figures in the Text and 20 Plates. *Astrophysica Norvegica*. 1936, roč. 2, s. 1.
3. SMART, DF; SHEA, MA; FLÜCKIGER, EO. Magnetospheric models and trajectory computations. In: *Cosmic Rays and Earth: Proceedings of an ISSI Workshop, 21–26 March 1999, Bern, Switzerland*. Springer, 2000, s. 305–333.
4. STRONG, Andrew W.; MOSKALENKO, Igor V. Propagation of Cosmic-Ray Nucleons in the Galaxy. *The Astrophysical Journal*. 1998, roč. 509, č. 1, s. 212. Dostupné z DOI: [10.1086/306470](https://doi.org/10.1086/306470).
5. GECÁŠEK, Daniel; BOBÍK, Pavol; GENČI, Ján; VILLIM, Ján; VAŠKO, Martin. COR system: A tool to evaluate cosmic ray trajectories in the Earth's magnetosphere. *Advances in Space Research*. 2022, roč. 70, č. 4, s. 1153–1168. ISSN 0273-1177. Dostupné z DOI: <https://doi.org/10.1016/j.asr.2022.06.001>.
6. VAŠKO, Martin. *Refaktorizácia kódov pre výpočet trajektórii častíc kozmického žiarenia v magnetosfére Zeme*. 2020. Diplomová práca.
7. VILLIM, Ján. *Optimalizácia modelov pohybu kozmického žiarenia v magnetosfére Zeme*. 2022. Bakalárska práca.
8. COOKE, D.; HUMBLE, J.; SHEA, Matthew; SMART, D.; LUND, Niels; RASMUSSEN, I.; BYRNAK, B.; GORET, P.; PETROU, N. Reevaluation of cosmic ray cutoff terminology. 1985.
9. KULANDOVÁ, Anna. *Pohyb častíc kozmického žiarenia v magnetosfére Zeme*. 2014. Bakalárska práca.

10. COOKE, DJ; HUMBLE, JE; SHEA, MA; SMART, DF; LUND, N; RASMUSSEN, IL; BYRNAK, B; GORET, P; PETROU, N. On cosmic-ray cut-off terminology. *Il Nuovo Cimento C*. 1991, roč. 14, s. 213–234. Dostupné z DOI: <https://doi.org/10.1007/BF02509357>.
11. GECÁŠEK, Daniel. *Automatizácia výpočtov trajektórií kozmického žiarenia v magnetosfére Zeme*. 2017. Bakalárska práca.
12. GECÁŠEK, Daniel. *Softvérový rámec pre COR model výpočtov trajektórií častíc v magnetosfére Zeme*. 2019. Diplomová práca.
13. KUDELA, K.; BOBIK, P. Long-Term Variations of Geomagnetic Rigidity Cutoffs. *Solar Physics*. 2004, roč. 224, č. 1, s. 423–431. ISSN 1573-093X. Dostupné z DOI: [10.1007/s11207-005-6498-9](https://doi.org/10.1007/s11207-005-6498-9).
14. BOBIK, Pavol; BOSCHINI, Matteo; GRANDI, Davide; GERVASI, Massimo; MICELLOTTA, Elisabetta; RANCOITA, Pier-Giorgio. A Back-Tracing Code to Study the Magnetosphere Transmission Function for Primary Cosmic Rays. In: *The Inner Magnetosphere: Physics and Modeling*. American Geophysical Union (AGU), 2005, s. 301–305. ISBN 9781118666098. Dostupné z DOI: <https://doi.org/10.1029/155GM32>.
15. BOBIK, P.; BOELLA, G.; BOSCHINI, M. J.; GERVASI, M.; GRANDI, D.; KUDELA, K.; PENSOTTI, S.; RANCOITA, P. G. Magnetospheric transmission function approach to disentangle primary from secondary cosmic ray fluxes in the penumbra region. *Journal of Geophysical Research: Space Physics*. 2006, roč. 111, č. A5. Dostupné z DOI: <https://doi.org/10.1029/2005JA011235>.
16. ALKEN, Patrick; THÉBAULT, Erwan; BEGGAN, Ciarán D; AMIT, H; AUBERT, J; BAERENZUNG, J; BONDAR, TN; BROWN, WJ; CALIFF, S; CHAMBODUT, A et al. International Geomagnetic Reference Field: the thirteenth generation. *Earth, Planets and Space*. 2021, roč. 73, č. 1, s. 1–25.
17. TSYGANENKO, No A. Effects of the solar wind conditions in the global magnetospheric configurations as deduced from data-based field models. In: *International conference on substorms*. 1996, zv. 389, s. 181.
18. TSYGANENKO, N. A.; SITNOV, M. I. Modeling the dynamics of the inner magnetosphere during strong geomagnetic storms. *Journal of Geophysical Research: Space Physics*. 2005, roč. 110, č. A3. Dostupné z DOI: <https://doi.org/10.1029/2004JA010798>.

19. CONSTABLE, Catherine; KORTE, Monika; PANOVSKA, Sanja. Persistent high paleosecular variation activity in southern hemisphere for at least 10 000 years. *Earth and Planetary Science Letters*. 2016, roč. 453, s. 78–86. ISSN 0012-821X. Dostupné z DOI: <https://doi.org/10.1016/j.epsl.2016.08.015>.
20. DESORGHER, L. *MAGNETOCOSMIC Software User Manual*. Physics Institute - University of Bern, 2004. Dostupné tiež z: http://cosray.unibe.ch/~laurent/magnetocosmics/doc/magnetocosmics_sum.pdf.
21. AGOSTINELLI, S. et al. Geant4—a simulation toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. 2003, roč. 506, č. 3, s. 250–303. ISSN 0168-9002. Dostupné z DOI: [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(03\)01368-8](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(03)01368-8).
22. GECÁŠEK, Daniel. *Methods and algorithms of automated processing of data and models of cosmic physics*. 2022. Diz. pr.
23. PETERSON, Pearu. F2PY: a tool for connecting Fortran and Python programs. *International Journal of Computational Science and Engineering*. 2009, roč. 4, č. 4, s. 296–305. Dostupné z DOI: [10.1504/IJCSE.2009.029165](https://doi.org/10.1504/IJCSE.2009.029165).
24. HEYNDERICKX, D; QUAGHEBEUR, B; SPEELMAN, E; DALY, E. ESA's Space Environment Information System (SPENVIS)-A WWW interface to models of the space environment and its effects. In: *38th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. 2000, s. 371.
25. FOG, Agner. *Optimizing software in C++: An optimization guide for Windows, Linux, and Mac platforms*. Technical University of Denmark, 2024. Dostupné tiež z: https://www.agner.org/optimize/optimizing_cpp.pdf.
26. VILLIM, Ján; BOBIK, Pavol; GECÁŠEK, Daniel; GENCI, Jan. COR system error estimation. In: *Proceedings of 27th European Cosmic Ray Symposium — PoS(ECRS)*. 2023, zv. 423, s. 043. Dostupné z DOI: [10.22323/1.423.0043](https://doi.org/10.22323/1.423.0043).
27. GLASSMEIER, K-H; TSURUTANI, BT. Carl Friedrich Gauss—general theory of terrestrial magnetism—a revised translation of the German text. *History of Geo-and Space Sciences*. 2014, roč. 5, č. 1, s. 11–62.
28. REIGBER, Ch.; LÜHR, H.; SCHWINTZER, P. CHAMP mission status. *Advances in Space Research*. 2002, roč. 30, č. 2, s. 129–134. ISSN 0273-1177. Dostupné z DOI: [https://doi.org/10.1016/S0273-1177\(02\)00276-4](https://doi.org/10.1016/S0273-1177(02)00276-4).

29. MAUS, S.; ROTHER, M.; HEMANT, K.; STOLLE, C.; LÜHR, H.; KUVSHINOV, A.; OLSEN, N. Earth's lithospheric magnetic field determined to spherical harmonic degree 90 from CHAMP satellite measurements. *Geophysical Journal International*. 2006, roč. 164, č. 2, s. 319–330. ISSN 0956-540X. Dostupné z DOI: [10.1111/j.1365-246X.2005.02833.x](https://doi.org/10.1111/j.1365-246X.2005.02833.x).
30. MAUS, Stefan; LÜHR, Hermann; ROTHER, Martin; HEMANT, Kumar; BALLASIS, George; RITTER, Patricia; STOLLE, Claudia. Fifth-generation lithospheric magnetic field model from CHAMP satellite measurements. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*. 2007, roč. 8, č. 5. Dostupné z DOI: <https://doi.org/10.1029/2006GC001521>.
31. MAUS, S.; YIN, F.; LÜHR, H.; MANOJ, C.; ROTHER, M.; RAUBERG, J.; MICHAELIS, I.; STOLLE, C.; MÜLLER, R. D. Resolution of direction of oceanic magnetic lineations by the sixth-generation lithospheric magnetic field model from CHAMP satellite magnetic measurements. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*. 2008, roč. 9, č. 7. Dostupné z DOI: <https://doi.org/10.1029/2008GC001949>.
32. OLSEN, Nils; RAVAT, Dhananjay; FINLAY, Christopher C; KOTHER, Livia K. LCS-1: a high-resolution global model of the lithospheric magnetic field derived from CHAMP and Swarm satellite observations. *Geophysical Journal International*. 2017, roč. 211, č. 3, s. 1461–1477. ISSN 0956-540X. Dostupné z DOI: [10.1093/gji/ggx381](https://doi.org/10.1093/gji/ggx381).
33. FRIIS-CHRISTENSEN, E.; LÜHR, H.; KNUDSEN, D.; HAAGMANS, R. Swarm – An Earth Observation Mission investigating Geospace. *Advances in Space Research*. 2008, roč. 41, č. 1, s. 210–216. ISSN 0273-1177. Dostupné z DOI: <https://doi.org/10.1016/j.asr.2006.10.008>.
34. FINLAY, Christopher C.; KLOSS, Clemens; OLSEN, Nils; HAMMER, Magnus D.; TØFFNER-CLAUSEN, Lars; GRAYVER, Alexander; KUVSHINOV, Alexey. The CHAOS-7 geomagnetic field model and observed changes in the South Atlantic Anomaly. *Earth, Planets and Space*. 2020, roč. 72, č. 1, s. 156. ISSN 1880-5981. Dostupné z DOI: [10.1186/s40623-020-01252-9](https://doi.org/10.1186/s40623-020-01252-9).
35. SABAKA, Terence; HULOT, Gauthier; OLSEN, Nils. Mathematical Properties Relevant to Geomagnetic Field Modeling. In: 2010, s. 504–538. ISBN 9783642015472. Dostupné z DOI: [10.1007/978-3-642-01546-5_17](https://doi.org/10.1007/978-3-642-01546-5_17).

Zoznam skratiek

CHAMP Challenging Minisatellite Payload.

COR Cut-Off Rigidity.

ECRS European Cosmic Ray Symposium.

FMA Fused Multiply-Add.

GCC GNU Compiler Collection.

GDB GNU Debugger.

GFortran GNU Fortran.

GNU GPL-3.0 GNU General Public License v3.0.

GSM Geocentric Solar Magnetospheric.

HTTP Hypertext Transfer Protocol.

IGRF International Geomagnetic Reference Field.

OOP Object-Oriented Programming.

OpenMP Open Multi-Processing.

OTSO Oulu - Open-Source Geomagnetosphere Propagation Tool.

T01 Tsyganenko 2001.

T89 Tsyganenko 1989.

T96 Tsyganenko 1996.

TS05 Tsyganenko-Sitnov 05.

TUKE Technická univerzita v Košiciach.

WSL Windows Subsystem for Linux.

ÚEF SAV Ústav experimentálnej fyziky Slovenskej akadémie vied.

Slovník

Dolná odrezávacia rigidita Najnižšia hodnota rigidity častice s dovolenou trajektóriou.

Dovolená hodnota rigidity Častica s touto hodnotou rigidity dopadne na zemský povrch, prekoná zemskú magnetosféru.

Efektívna odrezávacia rigidita Hodnota rigidity, medzi dolnou a hornou hodnotou odrezávacej rigidity.

Horná odrezávacia rigidita Najvyššia hodnota rigidity, od ktorej všetky vyššie hodnoty rigidity znamenajú dovolenú trajektóriu častice.

Krustálne geomagnetické pole Krustálne, resp. litosférické geomagnetické pole tvorí súčasť internej zložky geomagnetického poľa a vzniká v zemskej kôre.

Magnetická indukcia Magnetická indukcia alebo tiež hustota magnetického toku je vektorová fyzikálna veličina charakterizujúca silové účinky magnetického poľa na náboj v pohybe (značka: B , základná jednoka: tesla [T]).

Magnetopauza Hranica pôsobenia magnetického poľa Zeme (magnetosféry).

Rigidita častice Môže byť charakterizovaná ako energia častice vzťahujúca sa na jej náboj (značka: R , základná jednoka: volt [V]).

Zakázaná hodnota rigidity Častica s touto hodnotou rigidity nedopadne na zemský povrch, bude odklonená pôsobením geomagnetického poľa Zeme.

Zoznam príloh

Príloha A Používateľská príručka programu pre simuláciu trajektórií častíc kozmického žiarenia

Príloha B Systémová príručka programu pre simuláciu trajektórií častíc kozmického žiarenia

Príloha C CD médium – záverečná práca v elektronickej podobe

A Používateľská príručka programu pre simuláciu trajektórií častíc koz- mického žiarenia

Tento program slúži primárne pre realizáciu výpočtu trajektórií častíc kozmického žiarenia v magnetosfére Zeme. Program umožňuje spustiť 3 typy (módy) výpočtov:

- výpočet hodnôt odrezávacích rigidít častíc kozmického žiarenia, ktoré opisujú spektrum dovolených a zakázaných rigidít,
- výpočet individuálnej trajektórie častice kozmického žiarenia, ktorého výstupom sú karteziánske súradnice častice v GSM systéme súradníc a sférické súradnice v geocentrickom systéme súradníc,
- výpočet vektora magnetickej indukcie geomagnetického poľa Zeme na definovanej sieti bodov prostredníctvom kombinácie geomagnetických modelov, ktoré sú v rámci programu k dispozícii.

Program podporuje výpočet geomagnetického poľa prostredníctvom nasledujúcich modelov:

- model internej (hlavnej) zložky geomagnetického poľa *IGRF* 9. až 13. generácie,
- historické modely hlavného geomagnetického poľa *Historical (0-1968 CE)* a *CALS10k.2*,
- model *Tsyganenko-Sitnov 05* pre výpočet externého geomagnetického poľa v čase búrok,
- model *Tsyganenko (1996)* pre výpočet externého geomagnetického poľa,

- model *CHAOS-7* (momentálne len vo verzii 7.16) pre výpočet krustálnej (litosférickej) zložky interného geomagnetického poľa.

V nasledujúcich častiach príručky bude opísaný postup pre zostavenie a spustenie programu. Taktiež bude detailne opísaný každý zmienený mód výpočtu.

A.1 Zostavenie simulačného programu

Simulačný program bol vyvinutý a otestovaný na operačnom systéme *GNU/Linux*. Preto sa odporúča pracovať s týmto programom práve na tomto operačnom systéme. Program v aktuálnej podobe nie je možné zostaviť a spúšťať na operačnom systéme *Microsoft Windows*.

Požiadavky pre zostavenie programu

Pre úspešné zostavenie programu je potrebné splniť nasledovné prerekvizity:

- mať nainštalovaný nástroj *CMake*¹ (verziu 3.10 alebo novšiu),
- mať nainštalovaný nástroj *Make*² (verziu 4.3 alebo novšiu),
- mať nainštalovaný kompilátor *GCC*³ (verziu 11.4 alebo novšiu).

Vyššie zmienené verzie nástrojov sú odporúčané. Je pravdepodobné, že program bude možné skompilovať aj so staršími verziami. Úspešnosť zostavenia však nie je garantovaná.

V prípade distribúcie *Debian* (resp. *Ubuntu*) je možné nainštalovať zmienené nástroje príkazmi v zdrojovom kóde A.1. V prípade distribúcie *Fedora* je príkaz pre inštaláciu uvedený v zdrojovom kóde A.2. Používatelia distribúcie *Arch Linux* môžu vyžadované nástroje nainštalovať prostredníctvom príkazu uvedenom v zdrojovom kóde A.3.

Zdrojový kód A.1: Príkazy pre inštaláciu nástrojov potrebných pre zostavenie simulačného programu (Debian/Ubuntu)

```
sudo apt update
sudo apt install gcc make cmake
```

¹<https://cmake.org/>

²<https://www.gnu.org/software/make/>

³<https://gcc.gnu.org/>

Zdrojový kód A.2: Príkaz pre inštaláciu nástrojov potrebných pre zostavenie simulačného programu (Fedora)

```
sudo dnf install gcc make cmake
```

Zdrojový kód A.3: Príkaz pre inštaláciu nástrojov potrebných pre zostavenie simulačného programu (Arch Linux)

```
sudo pacman -Sy gcc make cmake
```

Príkazy pre inštaláciu je potrebné spúšťať s právami super používateľa. Je teda potrebné príkazy spúšťať priamo ako používateľ *root*, prípadne je potrebné spustiť príkazy využitím príkazu *sudo*.

Postup pre zostavenie simulačného programu

Najjednoduchší spôsob ako zostaviť program je spustiť pripravený shell skript *build.sh*, ktorý sa nachádza v koreňovom adresári zdrojového kódu. Skript vygeneruje potrebné *Make* súbory prostredníctvom nástroja *CMake*, ktoré sú následne použité pre zostavenie. Skript je možné spustiť nasledovným spôsobom:

1. navigácia do koreňového adresára zdrojového kódu,
2. spustenie príkazu `./build.sh`,
3. spustiteľný súbor programu s názvom *cor* sa bude nachádzať v automaticky vytvorenom adresári `./build`.

Alternatívny spôsob zostavenia spočíva v manuálnom spustení príkazov nástroja *CMake*. Postup je zdokumentovaný v nasledovnom zozname:

1. navigácia do koreňového adresára zdrojového kódu,
2. spustenie príkazu `cmake -S . -B ./build`, kde voľba `-S` špecifikuje koreňový adresár zdrojového kódu a voľba `-B` špecifikuje adresár, v ktorom budú vytvorené súbory potrebné pre zostavenie,
3. spustenie príkazu `cmake --build ./build`, kde voľba `--build` špecifikuje adresár so súbormi zostavenia z predchádzajúceho kroku,
4. spustiteľný súbor programu s názvom *cor* sa bude nachádzať v adresári so súbormi zostavenia.

A.2 Spustenie simulačného programu

Spustenie simulačného programu spočíva v spustení príkazu v zdrojovom kóde A.4. Program vyžaduje jeden povinný argument príkazového riadku – cestu k vstupnému súboru.

Zdrojový kód A.4: Základný príkaz pre spustenie výpočtu

```
./cor [VOLBA...] VSTUPNY_SUBOR
```

Pri spustení je možná aj špecifikácia ďalších nepovinných volieb. V prípade, že používateľ neuvedie žiadne voľby pri spustení, predvolene sa bude realizovať výpočet odrezávacích rigidít s využitím modelu interného geomagnetického poľa IGRF 13. generácie. V nasledujúcom zozname sú opísané voľby spustenia:

- `-m`, `--mode=MODE`: mód výpočtu, možnosti: *cutoff* – výpočet odrezávacích rigidít, *trajectory* – výpočet individuálnej trajektórie, *field* – výpočet magnetického poľa na sieti bodov, predvolená hodnota: *cutoff*,
- `-o`, `--output=FILE`: cesta k výstupnému súboru, do ktorého budú uložené výsledky simulácie (namiesto ich výpisu na štandardný výstup),
- `-s`, `--steps-count=COUNT`: maximálny počet krokov trasovania jednej trajektórie (má opodstatnenie len pri výpočte odrezávacích rigidít a výpočte individuálnej trajektórie), predvolená hodnota: 25000,
- `-u`, `--tu-angle=RAD`: hodnota uhla, ktorý určuje maximálnu veľkosť uhla medzi dvoma bodmi trajektórie častice (má vplyv na „vyhladenosť“ trajektórie), predvolená hodnota: 0,01 rad,
- `-p`, `--par`: spustenie paralelného výpočtu (má opodstatnenie len pri výpočte odrezávacích rigidít a výpočte magnetického poľa na sieti bodov),
- `-i`, `--internal-field=MODEL`: model interného geomagnetického poľa, možnosti: *igrf13*, ..., *igrf9*, *hist*, *cals10k.2*, predvolená hodnota: *igrf13*,
- `-e`, `--external-field=MODEL`: model externého geomagnetického poľa, možnosti: *ts05*, *t96*
- `-c`, `--crustal-field=MODEL`: model krustálneho geomagnetického poľa, možnosti: *chaos7.16*,
- `-V`, `--version`: výpis verzie programu,

- `-?`, `--help`: výpis informácií o možnostiach, resp. voľbách spustenia,
- `--usage`: výpis spôsobu spustenia programu (obsah zdrojového kódu A.4)

A.3 Múd výpočtu odrezávacích rigidít

Tento typ výpočtu produkuje hodnoty odrezávacích rigidít trajektórií kozmického žiarenia, ktoré opisujú spektrum dovolených a zakázaných odrezávacích rigidít. Princíp výpočtu spočíva vo výpočte trajektórie častice kozmického žiarenia pre každú hodnotu rigidity v definovanom intervale s definovanou veľkosťou kroku.

Príklad spustenia výpočtu odrezávacích rigidít s modelmi geomagnetického poľa *IGRF 13*. generácie a *TS05* s uložením výsledkov do výstupného súboru: `./cor -ets05 input_file -o output_file`.

Opis vstupného súboru výpočtu

Ukážkový vstupný súbor pre výpočet odrezávacích je zobrazený v zdrojovom kóde A.5. Vstupný súbor pozostáva z nasledujúcich parametrov:

1. riadok: počiatková rigidita; typ častice (-1) pre protón; koncová rigidita,
2. riadok: polomer v násobkoch polomeru Zeme; geogr. šírka a dĺžka miesta začiatku trajektórie,
3. riadok: geogr. šírka a dĺžka pre smer príchodu častice,
4. riadok: rok; mesiac; deň; deň v roku; hodina; minúta; sekunda,
5. riadok: prvé 3 parametre - parametre delenia trajektórie; veľkosť kroku v rigidite,
6. riadok (nepovinný): *Dst* index (v nT); *pdyn* - dynamický tlak slnečného vetra (v nPa) v danom dátume a čase; intenzita *y* a *z* zložky medziplanetárneho magnetického poľa v danom dátume a čase (pre modely externého geomagnetického poľa),
7. riadok (nepovinný): vstupné parametre *W1* – *W6* reprezentujú pre model externého geomagnetického poľa (Tsyganenko-Sitnov 05), ktoré popisujú prehistóriu geomagnetického poľa,
8. riadok: hodnota -1.00, značí koniec vstupného súboru.

Pre výpočet s modelom externého geomagnetického poľa *T96* je 6. riadok v predchádzajúcom zozname povinný. Pre výpočet s modelom externého geomagnetického poľa *TS05* je povinný aj 7. riadok v predchádzajúcom zozname.

Zdrojový kód A.5: Ukážka vstupného súboru pre výpočet odrezávacích rigidít

```
1 2.5000 -1. 20.0000
2 1.00 48.66 20.53
3 48.66 20.53
4 1980 3 28 88 16 00 00
5 100 1 1 0.01
6 -2 0.37 2.30 -0.80
7 0.04 0.03 0.06 0.01 0.03 0.02
8 -1.00
```

Opis výstupného súboru výpočtu

Ukážkový výstupný súbor pre výpočet odrezávacích rigidít je zobrazený v zdrojovom kóde A.6. Výstupný súbor tohto módu výpočtu pozostáva z troch hlavných častí:

1. hlavička: obsahuje informácie o simulácii (zvolené modely geomagnetického poľa, súradnice miesta, dátum a čas, veľkosť kroku v rigidite, maximálny počet krokov výpočtu jednej trajektórie),
2. výsledné dáta: parametre dovolenej trajektórie častice kozmického žiarenia s konkrétnou rigiditou (v GV), v konkrétnom čase a mieste,
3. hodnoty odrezávacích rigidít: 3 hodnoty reprezentujúce dolnú, hornú a efektívnu odrezávaciu rigiditu.

Výsledné dáta (2. hlavná časť vo výstupnom súbore) pozostávajú z nasledovných stĺpcov:

1. stĺpec – *rig*: rigidita v GV (dovolená trajektória),
2. stĺpec – *v*: rýchlosť častice v jednotkách rýchlosti svetla (c),
3. stĺpec – *rad*: polomer bodu úniku v jednotkách zemských polomerov (R_e),
4. stĺpec – *eth*: zemepisná šírka koncového bodu trajektórie v geocentrickom systéme súradníc,

5. stĺpec – *efi*: zemepisná dĺžka koncového bodu trajektórie v geocentrickom systéme súradníc,
6. stĺpec – *ath*: zemepisná šírka asymptotického smeru trajektórie v geocentrickom systéme súradníc,
7. stĺpec – *afi*: zemepisná dĺžka asymptotického smeru trajektórie v geocentrickom systéme súradníc,
8. stĺpec – *time*: čas pohybu častice po simulovanej trajektórii od počiatočného bodu po koncový v sekundách (s),
9. stĺpec – *length*: dĺžka celej trajektórie častice od počiatočného bodu po koncový v kilometroch (km).

Zdrojový kód A.6: Ukážka výstupného súboru výpočtu odrezávacích rigidít

```
1          ASYMPTOTIC COORDINATES
2    calculated by model(s): IGRF-13, Tsyganenko-Sitnov 05
3    Station with geo.latitude: 48.660 & longitude: 20.530 & radius: 1.00000
4    Direction of trajectory with latitude: 48.660 & longitude: 20.530
5    Date: 1980 3 28 time: 16 hod 0 min 0 sec
6    Starting rigidity: 2.5000 GV Epsilon: 0.0100
7    Limit of total number of steps: 25000
8
9    rig : v~: rad : eth : efi : ath : afi : time : length
10   3.400000 0.9640001655 25.000397  0.693 166.720 -5.429 181.442 2.278660 660615.50
11   3.420000 0.9643947482 11.352530 -15.478 263.456 -6.966 297.867 2.052018 593359.31
12   ...
13   20.000000 0.9989023805 24.355427 15.426 67.476 13.215 71.134 0.490567 151481.27
14   CUTOFF with rigidities P(S),P(C),P(M) are:
15   3.400000 4.230000 3.890000
```

A.4 Múd výpočtu individuálnej trajektórie

Tento mód výpočtu je podobný výpočtu odrezávacích rigidít. Rozdiel spočíva v skutočnosti, že pri výpočte individuálnej trajektórie ide o výpočet jednej trajektórie častice kozmického žiarenia s konkrétnou hodnotou rigidity. Tento výpočet vyžaduje špecifikáciu názvu výstupného súboru (voľba *-o*).

Príklad spustenia výpočtu individuálnej trajektórie s modelmi geomagnetického poľa IGRF 13. generácie a TS05 s uložením výsledkov do výstupných súborov: `./cor -mtrajectory -ets05 input_file -o output_file`.

Opis vstupného súboru výpočtu

Vstupný súbor tohto výpočtu je rovnaký ako pre výpočet odrezávacích rigidít. Opis jednotlivých parametrov bol zdokumentovaný v sekcii A.3. Rozdiel spočíva v nutnosti špecifikácie rovnakej počiatkovej a koncovej hodnoty rigidity ako je možné vidieť v zdrojovom kóde A.7 na riadku 1.

Zdrojový kód A.7: Ukážka vstupného súboru pre výpočet individuálnej trajektórie častice kozmického žiarenia

```
1  4.3000 -1.  4.3000
2  1.00    48.66  20.53
3          48.66  20.53
4 1980 3 28 88 16 00 00
5  100    1    1    0.01
6  -2    0.37  2.30 -0.80
7  0.04  0.03  0.06  0.01  0.03  0.02
8 -1.00
```

Opis výstupných súborov výpočtu

Tento výpočet vytvorí dva výstupné súbory s prefixom *tragsm_* a *trasph_*. V oboch súboroch su zaznamenané súradnice častice v každom kroku výpočtu trajektórie. Rozdiel medzi nimi spočíva v rozdielnom systéme súradníc. Ukážku súboru s prefixom *tragsm_*, ktorý obsahuje súradnice častice v GSM systéme súradníc je možné vidieť v zdrojovom kóde A.8. Obsah tohto súboru pozostáva z nasledujúcich stĺpcov:

1. stĺpec: aktuálny krok výpočtu trajektórie,
2. stĺpec: súradnica X častice v GSM systéme súradníc,
3. stĺpec: súradnica Y častice v GSM systéme súradníc,
4. stĺpec: súradnica Z častice v GSM systéme súradníc,
5. stĺpec: rýchlosť častice v jednotkách rýchlosti svetla (c),
6. stĺpec: čas pohybu častice po simulovanej trajektórii od počiatkového bodu po aktuálny bod v sekundách (s),
7. stĺpec: dĺžka trajektórie častice od počiatkového bodu po aktuálny bod v kilometroch (km).

Ukážku súboru s prefixom *trasph_*, ktorý obsahuje súradnice častice v geocentrickom systéme súradníc je možné vidieť v zdrojovom kóde A.9. Obsah výstupného súboru s prefixom *trasph_* pozostáva z nasledujúcich stĺpcov:

1. stĺpec: aktuálny krok výpočtu trajektórie,
2. stĺpec: sférická súradnica r častice v geocentrickom systéme súradníc,
3. stĺpec: sférická súradnica θ častice v geocentrickom systéme súradníc,
4. stĺpec: sférická súradnica ϕ častice v geocentrickom systéme súradníc,
5. stĺpec: rýchlosť častice v jednotkách rýchlosti svetla (c),
6. stĺpec: čas pohybu častice po simulovanej trajektórii od počiatočného bodu po aktuálny bod v sekundách (s),
7. stĺpec: dĺžka trajektórie častice od počiatočného bodu po aktuálny bod v kilometroch (km).

Zdrojový kód A.8: Ukážka výstupného súboru výpočtu individuálnej trajektórie častice kozmického žiarenia so súradnicami v GSM systéme

```
1 1 1050989.25000 4331214.00000 4558623.00000 290993984.00 0.0000142495 4146.39
2 2 1051647.25000 4334042.50000 4561594.00000 290993984.00 0.0000285262 8300.98
3 ...
```

Zdrojový kód A.9: Ukážka výstupného súboru výpočtu individuálnej trajektórie častice kozmického žiarenia so sférickými súradnicami v geocentrickom systéme

```
1 1 1.00065 48.66000 20.53000 290993984.00 0.0000142495 4146.39
2 2 1.00130 48.65998 20.53037 290993984.00 0.0000285262 8300.98
3 ...
```

A.5 Múd výpočtu magnetickej indukcie geomagnetického poľa na sieti bodov

Tento typ výpočtu sa od ostatných líši tým, že nerealizuje simuláciu trajektórie kozmického žiarenia. Podstatou tohto výpočtu je výpočet zložiek vektora magnetickej indukcie geomagnetického poľa na definovanej sieti bodov využitím zvolených modelov. Sieť bodov je okrem počiatočných a koncových súradníc definovaná aj krokom v zemepisnej šírke a dĺžke, ktorá určuje jej hustotu.

Príklad spustenia výpočtu geomagnetického poľa na sieti bodov s modelmi IGRF-13 a TS05 s uložením výsledkov do výstupného súboru: `./cor -mfield -ets05 input_file -o output_file`.

Opis vstupného súboru výpočtu

Ukážkový vstupný súbor výpočtu geomagnetického poľa je možné vidieť v zdrojovom kóde A.10. Vstupný súbor pozostáva z nasledujúcich parametrov:

1. riadok: polomer v násobkoch polomeru Zeme; počiatočná zemepisná šírka; počiatočná zemepisná dĺžka,
2. riadok: krok v zemepisnej šírke; krok v zemepisnej dĺžke; koncová zemepisná šírka; koncová zemepisná dĺžka,
3. riadok: rok; mesiac; deň; deň v roku; hodina; minúta; sekunda (pre výpočet hlavnej zložky poľa),
4. riadok (nepovinný): *Dst* index (v nT); *p_{dyn}* - dynamický tlak slnečného vetra (v nPa) v danom dátume a čase; intenzita *y* a *z* zložky medziplanetárneho magnetického poľa v danom dátume a čase (pre modely externého geomagnetického poľa),
5. riadok (nepovinný): vstupné parametre *W1* – *W6* pre model externého geomagnetického poľa (Tsyganenko-Sitnov 05), ktoré popisujú prehistóriu geomagnetického poľa,
6. riadok: hodnota -1.00, značí koniec vstupného súboru.

Pre výpočet s modelom externého geomagnetického poľa *T96* je 4. riadok v predchádzajúcom zozname povinný. Pre výpočet s modelom externého geomagnetického poľa *TS05* je povinný aj 5. riadok v predchádzajúcom zozname.

Zdrojový kód A.10: Ukážka vstupného súboru výpočtu magnetického poľa na sieti bodov

```
1  1.00      -90.00      -180.00
2  0.50      0.50      90.00      180.00
3  2020  3 28  88 16 00 00
4  -2  0.37  2.30  -0.80
5  0.04  0.03  0.06  0.01  0.03  0.02
6  -1.00
```

Opis výstupného súboru výpočtu

Ukážka výstupného súboru výpočtu geomagnetického poľa je zobrazená v zdrojovom kóde A.11. Výstupný súbor tohto typu výpočtu pozostáva z dvoch hlavných častí: hlavička a výsledné dáta. Hlavička obsahuje informácie o použitých

modeloch geomagnetického poľa, veľkosti kroku v súradniciach a čase. Výsledné dáta pozostávajú zo stĺpcov:

1. stĺpec: zemepisná šírka,
2. stĺpec: zemepisná dĺžka,
3. stĺpec: hodnota celkovej indukcie geomagnetického poľa v jednotkách nT,
4. stĺpec: zložka X vektora indukcie geomagnetického poľa v geocentrickom systéme súradníc v jednotkách nT,
5. stĺpec: zložka Y vektora indukcie geomagnetického poľa v geocentrickom systéme súradníc v jednotkách nT,
6. stĺpec: zložka Z vektora indukcie geomagnetického poľa v geocentrickom systéme súradníc v jednotkách nT.

Zdrojový kód A.11: Ukážka výstupného súboru výpočtu magnetického poľa na sieti bodov

```
1          GEOMAGNETIC FIELD
2 Geomagnetic Model(s): IGRF-13
3 lat step: 0.500, lon step: 0.500
4 Date: 2020  3 28  time: 16 h  0 min  0 sec
5
6 lat : lon : B [nT] : BXGEO [nT] : BYGEO [nT] : BZGEO [nT]
7 -90.00 -180.00 56420.11 -1784.16 129.33 -56391.74
8 -90.00 -179.50 56420.11 -1784.16 129.33 -56391.74
9 ...
```

A.6 Zoznam chybových správ programu

Zoznam chybových správ programu, ktoré sa môžu vyskytnúť pri spustení:

- *Error: Invalid internal geomagnetic field model: '<model>'*: bol špecifikovaný neexistujúci model interného geomagnetického poľa voľbou *-i*,
- *Error: Invalid external geomagnetic field model: '<model>'*: bol špecifikovaný neexistujúci model externého geomagnetického poľa voľbou *-e*,
- *Error: Invalid crustal geomagnetic field model: '<model>'*: bol špecifikovaný neexistujúci model krustálneho geomagnetického poľa voľbou *-c*,

- *Error: Invalid calculation mode:* bol špecifikovaný neexistujúci mód výpočtu voľbou *-m*,
- *Error: Cannot open input file for reading:* nebolo možné otvoriť vstupný súbor výpočtu pre čítanie,
- *Error: Invalid input file:* vstupný súbor nemá správny formát pre konkrétny výpočet s konkrétnymi modelmi geomagnetického poľa,
- *Error: Cannot open output file for writing:* nepodarilo sa otvoriť výstupný súbor pre zápis,
- *Error: Cannot write output file header:* nepodarilo sa zapísať hlavičku do výstupného súboru,
- *Error: Output file name is required for trajectory calculation mode:* je vyžadovaná špecifikácia mena výstupného súboru voľbou *-o*,
- *Error: Invalid steps count '<count>':* bol zadaný nevalidný počet krokov výpočtu jednej trajektórie častice kozmického žiarenia, prípadne bola zadaná nenumerická hodnota voľbou *-s*,
- *Error: Invalid TU angle '<angle>':* bol zadaný nevalidný uhol TU, prípadne bola zadaná nenumerická hodnota voľbou *-u*,
- *Error: Invalid input file - starting and ending rigidity must be the same for trajectory calculation mode:* štartovacia a koncová hodnota rigidity vo vstupnom súbore nie je rovnaká (podmienka pre výpočet individuálnej trajektórie častice kozmického žiarenia),
- *Error: Rigidity step size must be bigger than 0:* hodnota veľkosti kroku v rigidite vo vstupnom súbore nesmie byť nulová alebo záporná.