

ИНСТИТУТ КОСМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУКАХ

МЕТОДЫ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Часть 4

СБОРНИК ТРУДОВ

24–26 мая 2016 года, Россия, Таруса

Под редакцией
Р.Р. Назирова, Л.Н. Щура

Серия «Механика, управление и информатика»

МОСКВА
ИКИ РАН
2017

**Вычислительные технологии в естественных науках.
Методы суперкомпьютерного моделирования
Часть 4**

Сборник трудов

Россия, Таруса, 24–26 мая 2016 г. Под ред. Р. Р. Назирова, Л. Н. Шура

В сборник вошли статьи, основанные на докладах, представленных на конференции «Методы суперкомпьютерного моделирования», которая проходила 24–26 мая 2016 г. в г. Таруса на базе гостиницы «Интеркосмос» Государственного бюджетного учреждения науки Института космических исследований РАН. Это очередная конференция из серии расширенных конференций и семинаров, в научной программе которых делается акцент на методах суперкомпьютерного моделирования и их применении для исследований в естественных науках. Конференция продолжает серию научных мероприятий по вычислительным технологиям в естественных науках, проводимых с 2009 г. На первом семинаре рассматривались вопросы компьютерного моделирования актуальных задач физики и механики, его труды изданы в 2009 г. в выпуске 1 (Труды семинара по вычислительным технологиям в естественных науках. Вып. 1. Вычислительная физика / Под ред. Р. Р. Назирова. М.: КДУ, 2009. 288 с.); второй семинар был посвящён обсуждению физических и медицинских аспектов исследования сложных нелинейных физических процессов в организме человека (Методы нелинейного анализа в кардиологии и онкологии: Физические подходы и клиническая практика. Вып. 2 / Под ред. Р. Р. Назирова. М.: КДУ, 2010. 206 с.); на третьем семинаре обсуждались проблемы компьютерного моделирования задач биологии и химии (Труды семинара по вычислительным технологиям в естественных науках. Вып. 3. Вычислительная химия и биология / Под ред. Р. Р. Назирова, Л. Н. Шура. М.: КДУ, 2010. 118 с.); на четвертом — проблемы технического зрения (Техническое зрение в системах управления мобильными объектами-2010: Труды научно-технической конференции-семинара. Вып. 4. / Под ред. Р. Р. Назирова. М.: КДУ, 2011. 328 с.). На пятом семинаре обсуждались вопросы моделирования событий глобальных масштабов (Труды семинара по вычислительным технологиям в естественных науках. Системы глобального масштаба / Под ред. Р. Р. Назирова, Л. Н. Шура. М.: ИКИ РАН, 2011. 148 с.). Шестой семинар был посвящён теме исследований в области перспективных компьютерных систем с акцентом на обсуждение концептуальных подходов, разработке новых методов и устройств (Вычислительные технологии в естественных науках. Перспективные компьютерные системы: устройства, методы и концепции: труды семинара / Под ред. Р. Р. Назирова, Л. Н. Шура. М.: ИКИ РАН, 2011. 192 с.). На седьмом семинаре были обсуждены алгоритмы и методы в области вычислительной физики, причём особый акцент делался на обсуждении полученных новых физических результатах. Материалы этого семинара можно найти на страницах семинара (<http://www.iki.rssi.ru/seminar/2011101821/>). Восьмой семинар получил название «Инфокоммуникационные технологии в научных исследованиях», его материалы были изданы в двойном номере журнала «Информационное общество» (выпуски 1-2, 2013). Девятое, десятое и одиннадцатое научные мероприятия, как уже отмечалось, получили название «Методы суперкомпьютерного моделирования» (Вычислительные технологии в естественных науках: Методы суперкомпьютерного моделирования / Под ред. Р. Р. Назирова, Л. Н. Шура. М.: ИКИ РАН, 2014. 168 с.; Часть 2. 2015. 184 с.; Часть 3. 2015. 192 с.). Проведение семинаров с таким названием имеет целью поддержки выполнения научных исследований по гранту РФФИ 14-21-00158 «Разработка алгоритмов и методов для задач математического моделирования на суперкомпьютерных системах, включая гибридные». Важная особенность расширенных семинаров состоит в привлечении молодёжи к активному участию в качестве докладчиков. Как правило, более половины докладов делаются молодыми исследователями.

Ключевые слова: математическое моделирование, гибридные компьютерные системы, моделирование на суперкомпьютерах, методы и алгоритмы параллельных вычислений.

Редактор: *Полякова Т. В.*
Компьютерная вёрстка: *Комарова Н. Ю.*
Дизайн обложки: *Захаров А. Н.*

Мнение редакции не всегда совпадает с точкой зрения авторов статей.
Отдельные статьи даны в авторской редакции.
Качество иллюстраций соответствует предоставленному авторами материалу.

Электронная версия сборника размещена на сайтах ИКИ РАН <http://www.iki.rssi.ru/print.htm>
и Российской научной электронной библиотеки <http://elibrary.ru/>.

**Computer Technologies in Sciences.
Methods of Simulations on Supercomputers
Part 4**

Proceedings

Russia, Tarusa, 24–26 May 2016. Eds. R. R. Nazirov, L. N. Shchur

This issue is the collection of the papers based on the talks presented at the extended workshop “Methods of simulations on supercomputers”, which was held at 24–26 May 2016, in Tarusa hotel Interkosmos of the RAS Space Research Institute. It is the Conference in the series of extended workshops and conferences, devoted to the computer technologies in natural sciences. The first workshop was devoted to computer simulations of the actual problems in physics and mechanics and papers was published in the issue 1 (Proceedings of the seminar on Computing Technology in Science. Iss. 1. Computational Physics / Ed. R. R. Nazirov. M.: KDU, 2009. 288 p.), the second workshop was devoted to the discussion of the physical and medical aspects of the research of the complex nonlinear processes in the human body (Methods of Non-linear Analysis in Cardiology and Oncology: Physicist’s Approaches and Clinical Practice Iss. 2. / Ed. R. R. Nazirov. M.: KDU, 2010. 206 p.), the third workshop was devoted to the computer simulations in biology and chemistry (Materials of the seminar on Computing Technology in Science. Iss. 3. Computational Chemistry and Biology / Eds. R. R. Nazirov, L. N. Shchur. M.: KDU, 2010. 118 p.), the fourth was devoted to the discussion of the computer vision in control systems of the mobile objects (Computer vision in control systems of the mobile objects: Proceedings of the conference-workshop-2010. Iss. 4 / Ed. R. R. Nazirov. M.: KDU, 2011. 328 p.). The fifth workshop was devoted to the simulation of events of global scale (Proceedings of the seminar on Computing Technology in Science. Global scale systems / Eds. R. R. Nazirov, L. N. Shchur. M.: IKI RAN, 2011, 148 p.). Fifth workshop was devoted to the investigations of promising computing systems, with emphasis on the conceptual approaches and on the development of new methods and tools (Advanced computing: systems, methods and concepts. Proceedings of the seminar on Computer Technology in Science / Eds. R. R. Nazirov, L. N. Shchur. M.: IKI RAN, 2011, 192 p.). Algorithms and methods in computational physics was discussed at the sixth workshop with the special accents on the physical results. Materials may be found at the seminar web-pages <http://www.iki.rssi.ru/seminar/>. Seventh workshop was transformed into the conference “Infocommunication technologies in scientific research» with the papers published in the double volume issue of Journal Information Society. Eighth, ninth and tenth scientific events, as the current one, named “Methods of simulations on supercomputers”. The name is connected with the fact that such workshops are supporting the research program within the grant by Russian Scientific Foundation 14-21-00158 “Algorithms and methods for mathematical simulations on supercomputing systems, including hybrid ones”. Important highlight of the workshop is the active participation of the young scientists, and the young speakers did more than half of the talks.

Keywords: simulations, hybrid computing systems, simulations on supercomputers, methods and algorithms of parallel computing.

СОДЕРЖАНИЕ

Методы суперкомпьютерного моделирования (Вместо предисловия)	5
<i>Алешин С. В., Глызин С. Д.</i> Взаимодействие волн в логистическом уравнении с диффузией и запаздыванием.	9
<i>Будков Ю. А.</i> Среднеполевая модель суспензии поляризуемых частиц во внешнем электрическом поле	21
<i>Зиганурова Л. Ф., Шур Л. Н.</i> Исследование свойств консервативного алгоритма параллельного моделирования дискретных событий в сетях Small World.	28
<i>Ивановский Л. И.</i> Устойчивые режимы одного класса динамических систем с импульсными воздействиями	35
<i>Ким Ч. С., Пашин Д. С., Сатанин А. М.</i> Квантовая диссипативная динамика частицы в двухъямном потенциале	43
<i>Леоненков С. Н., Жуматий С. А.</i> Алгоритмы планирования и эффективность использования суперкомпьютера «Ломоносов».	53
<i>Посыткин М. А.</i> Программная инфраструктура для решения задач глобальной оптимизации на суперкомпьютерах.	64
<i>Рыбакин Б. П.</i> Моделирование деформирования и фрагментации системы молекулярных облаков на сетках сверхбольшого разрешения	67
<i>Блинов В. Н.</i> Снижение размерности вычислительных задач с помощью низкоранговых тензорных приближений.	77
<i>Дружинин О. А., Троицкая Ю. И., Ву Тинг Цай</i> Прямое численное моделирование турбулентного пограничного слоя над взволнованной водной поверхностью: эффекты капиллярной ряби.	84
<i>Фадеева М. А., Шур Л. Н.</i> Контроль точности вычислений плотности состояний в алгоритме Ванга-Ландау.	101
<i>Шикота С. К., Шур Л. Н.</i> О системах управления заданиями в процессе выполнения научного исследования с использованием данных большого объема	112

МЕТОДЫ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ (ВМЕСТО ПРЕДИСЛОВИЯ)

Читателю предлагаются избранные статьи, написанные на основе приглашённых докладов на конференции «Методы суперкомпьютерного моделирования», прошедшей 24–26 мая 2016 года на базе гостиницы «Интеркосмос» Института космических исследований Российской академии наук. Как и предыдущие три мероприятия, конференция была посвящена методам и практике разработки и применения методов моделирования на суперкомпьютерах для решения задач в различных областях естественных наук, а также вопросам применения новых информационных и телекоммуникационных технологий при проведении исследований в области естественных наук. Особое внимание было уделено новым разработкам, идеям и методам, а также ярким результатам, добиться которых без применения современных методов проведения моделирования и без использования новых информационных и телекоммуникационных технологий было бы затруднительно или невозможно.

Особенность таких научных мероприятий [1–10] — в активном участии молодых научных сотрудников и аспирантов, число которых составляет примерно половину всего состава. Другая специфика — в их рамках проводились научно-учебные семинары с приглашёнными студентами, которые делают первые шаги в научных исследованиях по тематике семинара.

На семинаре был представлен 21 доклад.

Сотрудник Института космических исследований РАН (Москва) Моисеенко Сергей Григорьевич сделал доклад, посвящённый физическим особенностям магнитного поля вокруг вращающихся звёзд, в котором был применён развитый ранее численный метод, основанный на сохранении энтропии, позволяющий получать результаты в тех случаях, когда методы, основанные на сохранении энергии, неустойчивы [11].

Доклад Рыбакина Виктора Петровича, сотрудника МГУ имени М.В. Ломоносова (Москва), был посвящён моделированию молекулярных облаков на динамически перестраиваемых сетках сверхбольшого разрешения [12].

Два доклада, основанные на теории магнитной гидродинамики, представили молодые ученики А.С. Петросяна из Института космических исследований РАН. Сергей Игоревич Сафонов рассказал об исследовании турбулентности космической плазмы методом быстрых искажений [13], а Дмитрий Александрович Климачков — о параметрической неустойчивости в приближении мелкой воды [14].

Первый день конференции закончился докладом известного специалиста в области суперкомпьютеринга, Владимира Валентиновича Воеводина

(Московский государственный университет), в ходе которого докладчик поделился своим взглядом на параллельные вычисления и проблему алгоритмов [15]. Особенность этого доклада в том, что он длился два часа, во время ужина. Такая форма научного сообщения имеет название «доклад-ужин» и традиционна для проводимых нами семинаров.

Второй день научного мероприятия начался докладами математиков из Ярославского университета, руководитель математической школы которого Сергей Дмитриевич Глызин объяснил аудитории, как строить импульсо-подобные решения с помощью сети нейроподобных осцилляторов [16]. Его молодой коллега Сергей Владимирович Алешин представил удивительные результаты моделирования уравнений с запаздыванием [17].

Следующие два доклада были сделаны сотрудниками легендарного Вычислительного центра РАН им. А.А. Дородницына. Его директор Юрий Гаврилович Евтушенко представил развитую им технику быстрого автоматического дифференцирования, которая с успехом применяется в задачах оптимизации с распределенными параметрами [18]. Сотрудник ВЦ РАН Михаил Анатольевич Посыпкин представил свой взгляд на программную инфраструктуру подобных задач на суперкомпьютерных системах [19].

Эффективность использования флагмана российских вычислительных систем суперкомпьютера «Ломоносов» была темой доклада сотрудника МГУ имени М. В. Ломоносова Сергея Николаевича Леоненкова [20].

Второй день конференции завершился докладами исследователей из различных регионов России — от Подмосквья до Нижнего Новгорода.

Впечатляющий анализ с применением мощной вычислительной техники к фазового портрета сложных динамических систем представил аспирант ЯРГУ Ивановский Леонид Игоревич [21].

Аспирант МФТИ из Долгопрудного Даниил Павлович Григорьевых продемонстрировал результаты моделирования образования и распространения трещин в различных материалах [22].

Маститый исследователь из Нижегородского Института прикладной физики РАН Олег Александрович Дружинин представил результаты моделирования пограничного слоя над водной поверхностью, в котором ясно видна роль ряби капиллярного происхождения [23].

Завершился второй день докладом Пашина Дмитрия Сергеевича о результатах моделирования системы, перспективной для использования в устройствах квантовых вычислений [24].

Третий день конференции начался с доклада Сатанина Аркадия Михайловича из Нижегородского государственного университета имени Н. И. Лобачевского, посвященный захвату резонанса в диссипативных квантовых системах [25].

Интересный доклад, основанный на применении методов теоретической физики к анализу моделей, описывающих растворы макромолекул, представил преподаватель Национального исследовательского института Высшая школа экономики Будков Юрий Алексеевич [26].

Аспирант Ярославского государственного университета Даниил Александрович Фролов представил свою разработку в области информационных технологий, которая значительно облегчает проведение на кластерных системах моделирования задач типа реакция-диффузия [27].

Научный сотрудник Научного центра РАН в Черноголовке Блинов Вениамин Николаевич познакомил слушателей с концепцией применения тензорных разложений в вычислительных задачах, что позволяет эффективно уменьшить размерность задач [28].

Работа конференции завершилась докладом аспирантки Национального исследовательского института Высшая школа экономики Зигануровой Лилии Фаилевны, в котором она представила слушателям результаты своих исследований эволюции профиля времени в модели консервативного алгоритма параллельного моделирования дискретных событий в предположении, что обмен сообщениями между процессами происходит в рамках концепции сетей малого мира [29].

С полными мультимедийными версиями докладов можно ознакомиться на странице семинара [30].

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Труды семинара по вычислительным технологиям в естественных науках. Вып. 1. Вычислительная физика / Под ред. Р. Р. Назирова. М.: КДУ, 2009.
- [2] Методы нелинейного анализа в кардиологии и онкологии: Физические подходы и клиническая практика. Вып. 2 / Под ред. Р. Р. Назирова. М.: КДУ, 2010.
- [3] Труды семинара по вычислительным технологиям в естественных науках. Вып. 3. Вычислительная химия и биология / Под ред. Р. Р. Назирова, Л. Н. Щура. М.: КДУ, 2010.
- [4] Техническое зрение в системах управления мобильными объектами-2010: Труды научно-технической конференции-семинара. Вып. 4. / Под ред. Р. Р. Назирова. М.: КДУ, 2011.
- [5] Вычислительные технологии в естественных науках. Системы глобального масштаба: Труды семинара / Под ред. Р. Р. Назирова, Л. Н. Щура. М.: КДУ, 2011.
- [6] Вычислительные технологии в естественных науках. Перспективные компьютерные системы: устройства, методы и концепции: Труды семинара / Под ред. Р. Р. Назирова, Л. Н. Щура. М.: ИКИ РАН, 2011.
- [7] Инфокоммуникационные технологии в научных исследованиях // Информационное общество. 2013. Вып. 1-2.
- [8] Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования: Труды семинара / Под ред. Р. Р. Назирова, Л. Н. Щура. М.: ИКИ РАН, 2014.
- [9] Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования. Часть 2: Труды семинара / Под ред. Р. Р. Назирова, Л. Н. Щура. М.: ИКИ РАН, 2015.
- [10] Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования. Часть 3: Труды семинара / Под ред. Р. Р. Назирова, Л. Н. Щура. М.: ИКИ РАН, 2015.
- [11] *Моисеенко С. Г., Бисноватый-Коган Г. С.* Нарушение зеркальной симметрии магнитного поля во вращающихся звёздах и возможные астрофизические применения.
- [12] *Рыбакин Б. П.* Моделирование деформирования и фрагментации системы молекулярных облаков на сетках сверхбольшого разрешения.
- [13] *Сафонов С. И., Петросян А. С.* Исследование магнитогидродинамической турбулентности космической плазмы методом быстрых искажений.
- [14] *Климачков Д. А., Петросян А. С.* Параметрические неустойчивости в магнитной гидродинамике астрофизической плазмы в приближении мелкой воды.
- [15] *Воеводин В. В.* Параллельные алгоритмы: так ли хорошо мы их знаем?

- [16] *Глызин С. Д.* Моделирование различных типов связи в ассоциациях нейроподобных осцилляторов
- [17] *Алешин С. В.* Численное исследование взаимодействия волн в уравнении Колмогорова-Петровского-Пискунова с запаздыванием
- [18] *Евтушенко Ю. Г.* Применение техники быстрого автоматического дифференцирования для решения задач оптимизации с распределёнными параметрами
- [19] *Посыпкин М. А.* Программная инфраструктура для решения задач глобальной оптимизации на суперкомпьютерах
- [20] *Леоненков С. Н., Жуматий С. А.* Алгоритмы планирования и эффективность использования суперкомпьютера «Ломоносов»
- [21] *Ивановский Л. И.* Устойчивые режимы одного класса динамических систем с импульсными воздействиями.
- [22] *Григорьевых Д. П., Хохлов Н. И., Петров И. Б.* Моделирование трещиноватых неоднородностей сеточно-характеристическим методом на высокопроизводительных вычислительных системах.
- [23] *Дружинин О. А., Троицкая Ю. И., Цай В. Т.* Прямое численное моделирование турбулентного пограничного слоя над взволнованной водной поверхностью: эффекты капиллярной ряби.
- [24] *Пашин Д. С.* Численное моделирование процесса захвата в резонанс в открытых квантовых системах.
- [25] *Сатанин А. М.* Захват в резонанс в диссипативных квантовых системах».
- [26] *Будков Ю. А.* Термодинамическое моделирование растворов макромолекул с сильными кулоновскими взаимодействиями.
- [27] *Фролов Д. А.* Фреймворк для интерактивного моделирования задач «реакция-диффузия» на вычислительных кластерах.
- [28] *Блинов В. Н.* Снижение размерности и вычислительных задач с помощью тензорных разложений.
- [29] *Зиганурова Л. Ф.* Исследование свойств консервативного алгоритма параллельного моделирования дискретных событий в сетях Small World.
- [30] Мультимедийные версии докладов: <http://iki.rssi.ru/seminar/2016052426/>.

Организаторы семинара

Р. Р. Назиров,
доктор технических наук, профессор,
Институт космических исследований РАН

Л. Н. Шур,
доктор физико-математических наук, профессор,
Научный центр РАН в Черноголовке

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВОЛН В ЛОГИСТИЧЕСКОМ УРАВНЕНИИ С ДИФфуЗИЕЙ И ЗАПАЗДЫВАНИЕМ

С. В. Алешин, С. Д. Глызин

Ярославский государственный университет им. П. Г. Демидова
(ЯрГУ им. П. Г. Демидова)

Научный центр в Черноголовке Российской академии наук (НЦЧ РАН)

Рассматривается задача взаимодействия распространяющихся волн плотности в логистическом уравнении с запаздыванием и диффузией (уравнение Фишера–Колмогорова–Петровского–Пискунова с запаздыванием). Проведён численный анализ процесса взаимодействия распространяющихся волн. Получены результаты, иллюстрирующие усложнение пространственно-временных распределений решения при столкновении и дальнейшем взаимодействии волн.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект № 14-21-00158).

Ключевые слова: уравнение Фишера–Колмогорова–Петровского–Пискунова, диффузия, запаздывание, уравнения с запаздыванием, нормальные формы, численные методы.

ВВЕДЕНИЕ

Задача распространения волны плотности численности (генной волны) от некоторого ненулевого начального условия, описывается следующим логистическим уравнением с диффузией:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u(1-u), \quad (1)$$

где $u(t, x)$ — плотность распределения числа особей обладающих доминантным геном, $t \geq 0$ — временная переменная, а $x \in (-\infty, +\infty)$ — пространственная. Это уравнение впервые было рассмотрено в статьях А. Н. Колмогорова, И. Г. Петровского и Н. С. Пискунова [Колмогоров и др., 1937] и Р. А. Фишера [Fisher, 1937].

Уравнение (1) находит применение в широкой области приложений, связанных с распространением в некоторой области волн различной природы: от концентрации некоторого реагирующего вещества до волн плотности популяции. В работах [Колмогоров и др., 1937; Fisher, 1937] рассмотрен вопрос о таких неотрицательных решениях $u(t, x)$, для которых при каждом $t > 0$ выполнены условия: $u(t, x) \rightarrow 1$ при $x \rightarrow +\infty$ и $u(t, x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow -\infty$. В частности, показано, что при достаточно больших t решение принимает форму $u(t, x) = z(2t \pm x)$.

Среди различных обобщений уравнения (1), связанных с возможностью учёта зависимостей нелинейных слагаемых этого уравнения от пространственных и временных сдвигов [Britton, 1990], выделим подход, продемон-

Алешин Сергей Владимирович — ассистент, старший лаборант-исследователь, кандидат физико-математических наук, fktiby@yandex.ru

Глызин Сергей Дмитриевич — заведующий кафедрой, ведущий научный сотрудник, доктор физико-математических наук, профессор, glyzin@uniyar.ac.ru

стрированный в статье [Гурли и др., 2003], где изучается пространственное распределение плотности популяции и предлагается использовать следующее уравнение в частных производных:

$$\frac{\partial N(t, x)}{\partial t} = \Delta N(t, x) + N(t, x)(1 + \alpha N(t, x) - (1 + \alpha)(g * N)(t, x)). \quad (2)$$

Здесь $N(t, x)$ — плотность популяции в момент времени t в точке x ареала обитания; выражение $1 + \alpha N(t, x) - (1 + \alpha)(g * N)(t, x)$ определяет изменения плотности численности; Δ — оператор Лапласа; функция g характеризует пространственно-временные неоднородности. Для свёртки $(g * N)$ обычно используют следующее представление:

$$(g * N)(t, x) = \int_{-\infty}^t \int_{\Omega} g(t - \tau, x - y) N(\tau, y) dy d\tau, \quad (3)$$

где Ω — область распределения популяции и выполнено $(g * 1)(t, x) = 1$. Если в свёртке (3) взять в качестве $g(t - \tau, x - y)$ дельта-функцию, а точку сосредоточения сдвинуть по оси времени, то получится уравнение с запаздыванием [Алешин и др., 2015а], если же точку сосредоточения сдвинуть по пространственной переменной, то получится уравнение с отклонением по пространству [Алешин и др., 2015б].

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Как и в статье [Алешин и др., 2015а] рассмотрим логистическое уравнение с запаздыванием и диффузией

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u(1 - u(t - h, x)). \quad (4)$$

Для него может быть поставлена краевая задача, например с периодическими граничными условиями

$$u(t, x + T) \equiv u(t, x), \quad (5)$$

а может быть, как и для уравнения (1), рассмотрена задача о распространении волны от одного или нескольких начальных возмущений. В настоящей работе на основе известного асимптотического анализа краевой задачи (4), (5) удаётся дать некоторое объяснение поведению распространяющейся от двух начальных всплесков волны в задаче (4).

НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА ЗАДАЧИ С ПЕРИОДИЧЕСКИМИ КРАЕВЫМИ УСЛОВИЯМИ

В этом разделе с помощью асимптотических методов рассмотрим локальные свойства решений краевой задачи (4), (5). Коротко остановимся на свойствах решений уравнения (4) без учёта пространственной переменной. Логистическое уравнение с запаздыванием

$$\dot{u} = u(1 - u(t - h)) \quad (6)$$

достаточно хорошо изучено (см. [Кашенко, 1981; Колесов, 1985; Kakutani, Markus, 1958; Kuang, 1993]). При $h < e^{-1}$ решение (6) монотонно стремится к единице, а при $e^{-1} < h < \pi/2$ стремится к единице колебательным образом. При $h > \pi/2$ уравнение (6) имеет медленно осциллирующее (т. е. с расстоянием между всплесками больше, чем h) устойчивое периодическое решение $u_0(t)$. При $h - \pi/2 \ll 1$ и при $h \gg 1$ его асимптотика приведена в работе [Кашенко, 1981] (см. также [Kashchenko, 2013]).

Краевая задача (4), (5) при $h > \pi/2$, как и уравнение (6), имеет пространственно однородное периодическое решение $u_0(t)$, которое устойчиво при достаточно малых значениях T . В случае если значение T достаточно велико, то возможна потеря устойчивости решения u_0 и возникновение сложных пространственно неоднородных структур [Глызин, 2009; Kashchenko, 2013; Wu, 1996].

В случае близости запаздывания к $\pi/2$

$$h = \frac{\pi}{2} + \varepsilon h_1, \quad (7)$$

где $0 < \varepsilon \ll 1$, и дополнительного предположения, что параметр T велик

$$T \gg 1, \quad (8)$$

динамика краевой задачи (4), (5) существенно усложняется. Поведение решений в малой окрестности состояния равновесия $u_0 = 1$ в этом случае в основном определяется нелокальным поведением решений нормализованного комплексного уравнения (уравнение Гинзбурга–Ландау)

$$\frac{\partial \xi}{\partial \tau} = \sigma \delta \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} + h_1 \delta \xi + (d_0 + ic_0) |\xi|^2 \xi, \quad (9)$$

$$\xi(\tau, y + 1) \equiv \xi(\tau, y). \quad (10)$$

Здесь $\tau = \varepsilon t$, $y = T^{-1}x$ — новые временная и пространственная переменные; $\sigma = T^{-2}\varepsilon^{-1}$ — величина порядка единицы;

$$\delta = \frac{4 - 2\pi i}{4 + \pi^2}, \quad d_0 + ic_0 = -\frac{2(3\pi - 2 + i(\pi + 6))}{5(4 + \pi^2)}. \quad (11)$$

Решения (5), (6) и решения (9), (10) связаны асимптотической формулой

$$u(t, x) = 1 + \varepsilon^{1/2} \left[\bar{\xi}(\tau, y) \cdot e^{it} + \xi(\tau, y) \cdot e^{-it} \right] + O(\varepsilon). \quad (12)$$

Динамические свойства (9), (10) существенно зависят от параметра σ . Например, при достаточно малых σ все простейшие периодические решения вида $\rho_m \exp(2\pi i m y + i \varphi_m \tau)$ ($m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) неустойчивы [Кашенко, 2011]. В статьях [Глызин, 2009; Glyzin, 2013] для задачи (9) с периодическими краевыми условиями (10) и с краевыми условиями Неймана показано, что при уменьшении параметра σ её колебательные режимы становятся неупорядоченными и имеют все более сложную структуру по пространственной переменной. Следует отметить, что утверждение о соответствии

решений квазинормальной формы (9), (10) исходной краевой задаче может быть обосновано только в случае гиперболичности аттрактора задачи (9), (10), поэтому в статье [Глызин и др., 2010] для уравнения (4) с краевыми условиями Неймана и условиями (10) был выполнен переход к специальному разностному аналогу, с последующим численным анализом дискретной системы. Для получения дискретного аналога распределённого уравнения (4) произвольно фиксируется натуральное k и выписывается интегральное уравнение

$$u\left(t + \frac{h}{k}, x\right) = u(t, x) \cdot \exp\left[\int_t^{t+h/k} \frac{1}{u(\tau, x)} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\tau, x) d\tau + \frac{h}{k} - \int_{t-h}^{t-h+h/k} u(\tau, x) d\tau\right], \quad (13)$$

соответствующее уравнению (4). Затем фиксируется некоторое натуральное N , задаются узлы $x_j = T(j - 1/2)/N, j = 1, \dots, N$ и вторая частная производная по x в выражении (13) заменяется второй разделённой разностью. Аппроксимируя интегралы по формуле прямоугольников, для переменных $u_{n,j} = u((nh)/k, x_j)$ имеем систему разностных уравнений

$$u_{n+1,j} = u_{n,j} \exp\left[d\left(\frac{u_{n,j+1}}{u_{n,j}} + \frac{u_{n,j-1}}{u_{n,j}} - 2\right) + \frac{h}{k}(1 - u_{n-k,j})\right], j = 1, \dots, N, \quad (14)$$

где $n = 1, 2, \dots; d = N^2/(kT^2); u_{n,0} = u_{n,N}; u_{n,N+1} = u_{n,1}$.

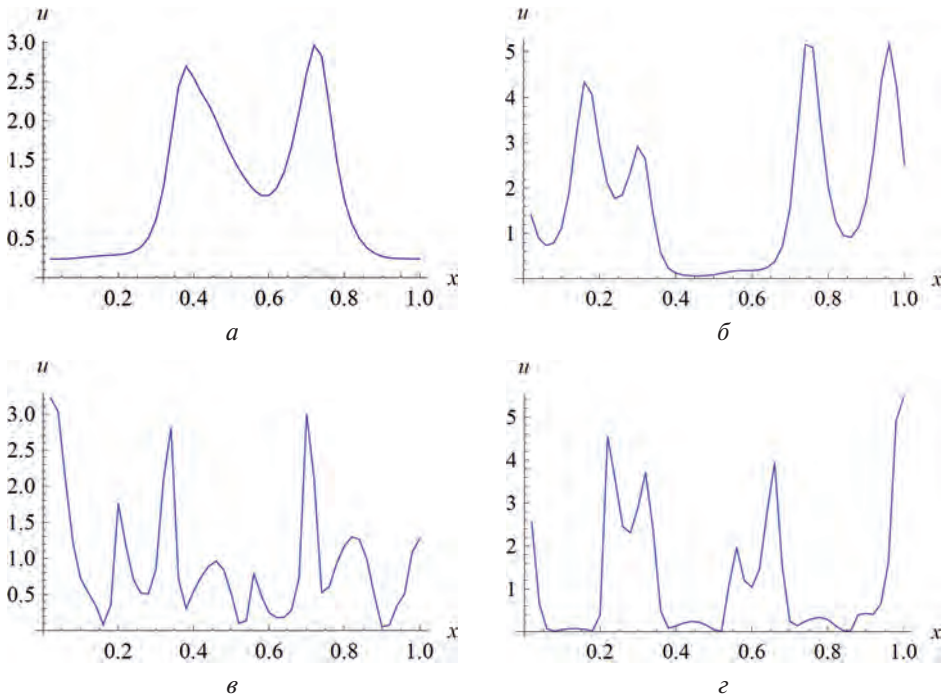


Рис. 1. Пространственное распределение решения $u(t, x)$: а — $T = 60, h = 1,6$; б — $T = 60, h = 1,8$; в — $T = 120, h = 1,6$; г — $T = 120, h = 1,8$

Непосредственное вычисление по формулам (14) приближённых решений краевой задачи (9), (10) позволяет проследить за усложнением решений при уменьшении параметра d (соответствует увеличению значения T) и за увеличением амплитуды колебательного режима при увеличении параметра h . На рис. 1 приведены графики распределения решения краевой задачи (9), (10) по пространственной переменной, построенные с помощью дискретной модели (14) при $N = 50$; первые два графика построены для $T = 60$, $h = 1,6$ в случае a и $h = 1,8$ в случае b , третий и четвёртый графики построены для $T = 120$ и тех же значений h . На всех графиках рис. 1 пространственная переменная x пронормирована на T .

ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

В этом разделе перейдём к численному исследованию распространения волн концентрации от двух локализованных по пространству начальных возмущений, которое будем выполнять на некотором отрезке $[a, b]$. При этом разницу $|a - b|$ выберем достаточно большой для того, чтобы можно было проследить за распространением волн от начального момента до момента встречи фронтов волн с границами a или b . Учитывая, что рассматривается задача о распространении и взаимодействии локальных возмущений, зададим на границах отрезка следующие краевые условия: $u(t, a) = u(t, b) = c$. Было выполнено несколько численных экспериментов, в одних из которых величина c выбиралась равной нулю, а в других единице.

Перейдём к описанию вычислительной процедуры. Вторую производную по пространственной переменной в правой части уравнения (4) заменим конечной разностью второго порядка. Для этого отрезок $[a, b]$ разобьём на N равных частей и построим сетку узлов с шагом $\Delta x = (b - a)/N$ так, что $x_j = a + j\Delta x$, где $j = 0, \dots, N - 1$. Обозначим через $u_j(t)$ значение функции $u(t, x)$ в соответствующих узлах сетки. В итоге получим следующую систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\dot{u}_j = \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{(\Delta x)^2} + [1 - u_j(t - h)]u_j, \quad j = 0, \dots, N - 1. \quad (15)$$

Для учёта краевых условий полагаем $u_{-1}(t) = u_N(t) = c$.

Численный эксперимент выполнялся на вычислительном кластере ЯрГУ (МНИЛ «Дискретная и вычислительная геометрия» им. Б. Н. Делоне). Одновременно решалось от $N = 10^5$ до $N = 2 \cdot 10^5$ уравнений с запаздыванием. Особенностью численного решения такой системы является повышенная требовательность к объёмам доступной памяти для хранения решения на промежутке запаздывания. Для вычислений использовался метод Дормана-Принца пятого порядка с переменной длиной шага интегрирования. Абсолютная и относительная погрешности алгоритма были приняты равными 10^{-12} . Начальный шаг интегрирования взят равным 10^{-3} . Начальные условия выбирались в виде двух прямоугольных импульсов высоты 0,1 и единичной ширины, смещённых на 100 единиц влево и вправо относительно центра

отрезка $[a, b]$ для всех $-h \leq t \leq 0$. В частности, для граничных условий $u_{-1}(t) = u_N(t) = c$ в случае $x \in [0, 2000]$:

$$u_j(t) = \begin{cases} c + 0,1, & \text{если } j \in [89950, 90050] \cup [109950, 110050], \\ c, & \text{иначе,} \end{cases} \quad (16)$$

где $t \in [-h, 0]$. Для последующего анализа и графического отображения полученные данные прореживались.

Перейдём к описанию результатов моделирования. Численный эксперимент проводился для значений $c = 0$ и $c = 1$. Сначала рассмотрим случай $c = 0$. На рис. 2а и 3а представлен общий вид распространения волн концентрации, описываемых системой (15) при запаздывании, равном 1,6 и 1,8 соответственно. На рис. 2б и 3б хорошо видно, что скорость распространения основного фронта волны совпадает с тангенсом угла наклона проекции решения $u(t, x)$ на плоскость (t, x) и равна двум. Отметим, что на краях волны имеются многочисленные осцилляции, причины возникновения которых описаны в статье [Алешин и др., 2015а].

В середине рассматриваемой области значения $u(t, x)$ не приближаются к единице, поскольку при $h > \pi/2$ соответствующая краевая задача имеет устойчивое пространственно неоднородное решение. При этом, как было показано в предыдущем пункте, по мере расширения промежутка (увеличения T) происходит усложнение устойчивого колебательного режима. В данном случае до момента пересечения волновых фронтов (рис. 2в и 3в) пространственные неоднородные колебания наблюдались в узкой области, совпадающей с областью возмущения по пространственной переменной. Пересечение волновых фронтов (рис. 2г и 3г) приводит к объединению пространственно неоднородных участков и усложнению пространственного распределения решения. Важно отметить, что на рис. 2д и 3д есть большой участок со сложной пространственной структурой решения.

Учитывая, что нами обосновано наличие сложного поведения краевой задачи (4) с периодическими краевыми условиями в случае единичного состояния равновесия, особый интерес представляет вопрос о колебаниях, возникающих при фиксированных единичных условиях (параметр $c = 1$) и двух малых начальных импульсах. Повторим численный эксперимент, аналогичный выполненному ранее при $c = 0$. На рис. 4а и 5а представлен общий вид распространения волн концентрации, описываемых системой (15) при запаздывании, равном 1,6 и 1,8 соответственно. На рис. 4б и 5б представлена проекция решения $u(t, x)$ на плоскость (t, x) . В этом случае отчётливо видно, что в результате взаимодействия волн пространственное распределение решения существенно усложняется. На рис. 4в и 5в представлены разрезы вдоль пространственной переменной при фиксированных значениях времени перед взаимодействием волн, на рис. 4г и 5г — после взаимодействия. Усложнение решения объясняется расширением области, в которой $u(t, x)$ не равно единице (на рис. 4д и 5д представлены разрезы вдоль пространственной переменной при фиксированных значениях времени в конце временного промежутка взаимодействия волн).

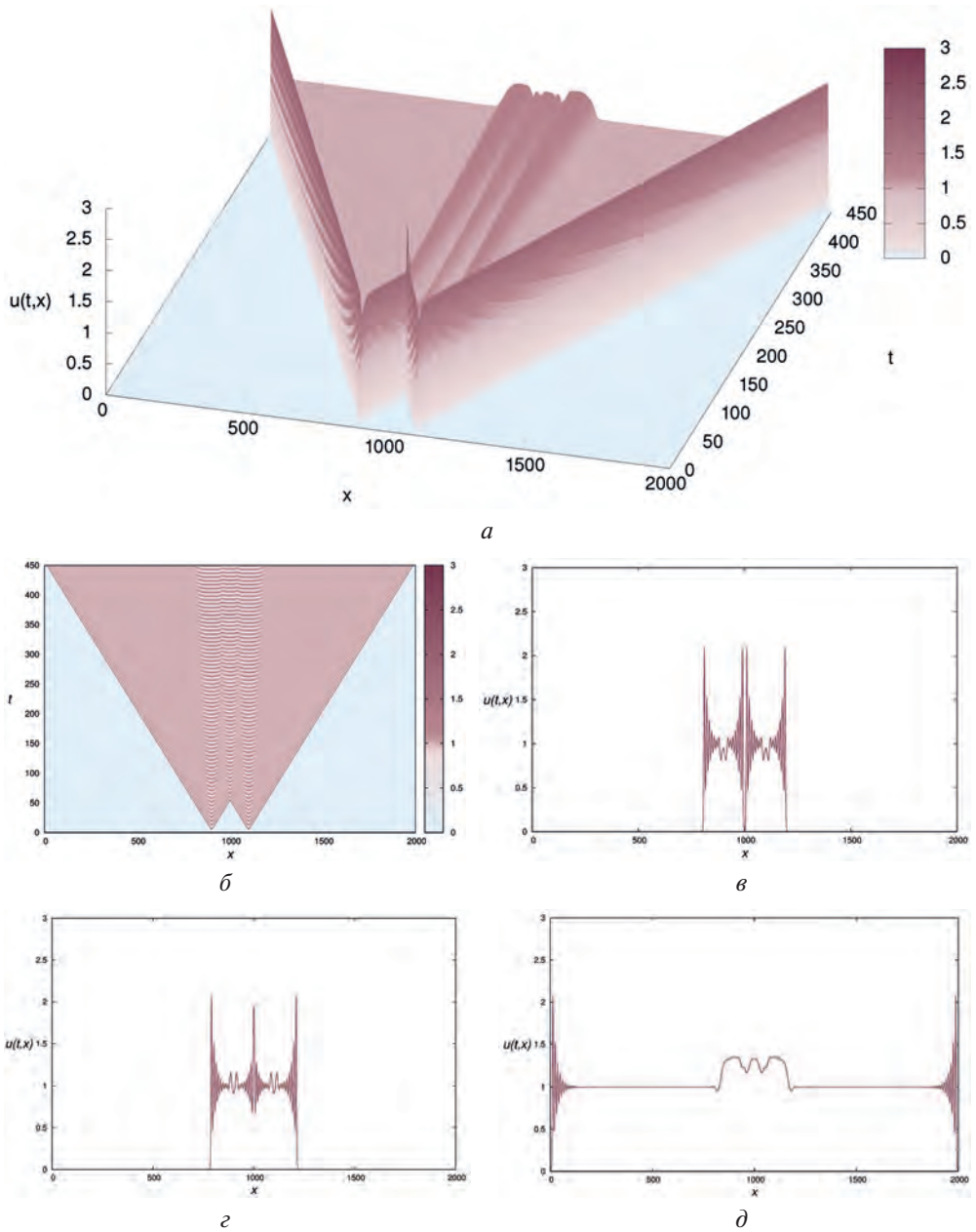


Рис. 2. Пространственное распределение решения $u(t, x)$ при $h = 1,6$ и $c = 0$: *a* — общий вид; *б* — вид сверху; *в* — разрез при $t = 50$; *г* — разрез при $t = 60$; *д* — разрез при $t = 450$

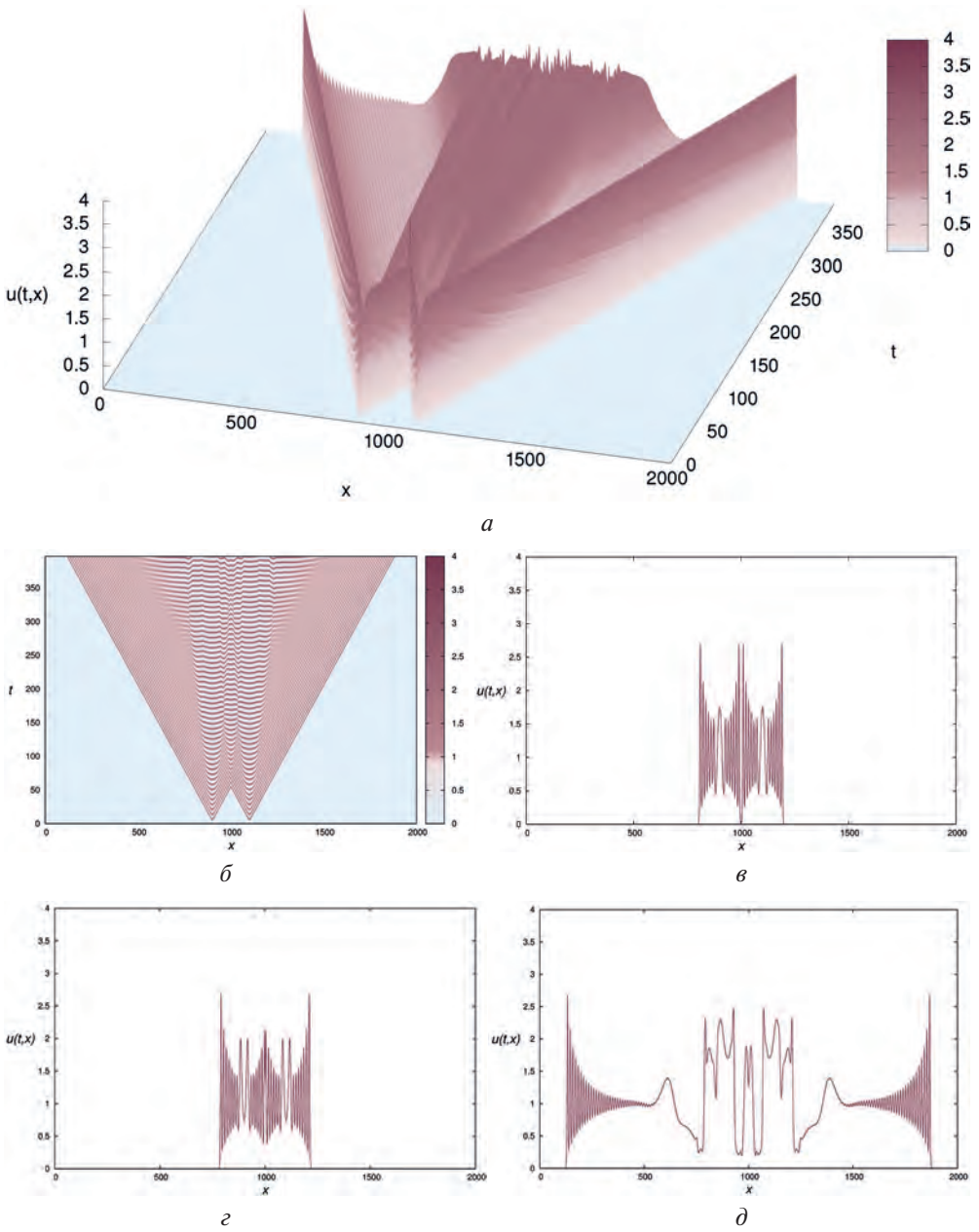


Рис. 3. Пространственное распределение решения $u(t, x)$ при $h = 1,8$ и $c = 0$: *a* — общий вид; *б* — вид сверху; *в* — разрез при $t = 50$; *г* — разрез при $t = 60$; *д* — разрез при $t = 390$

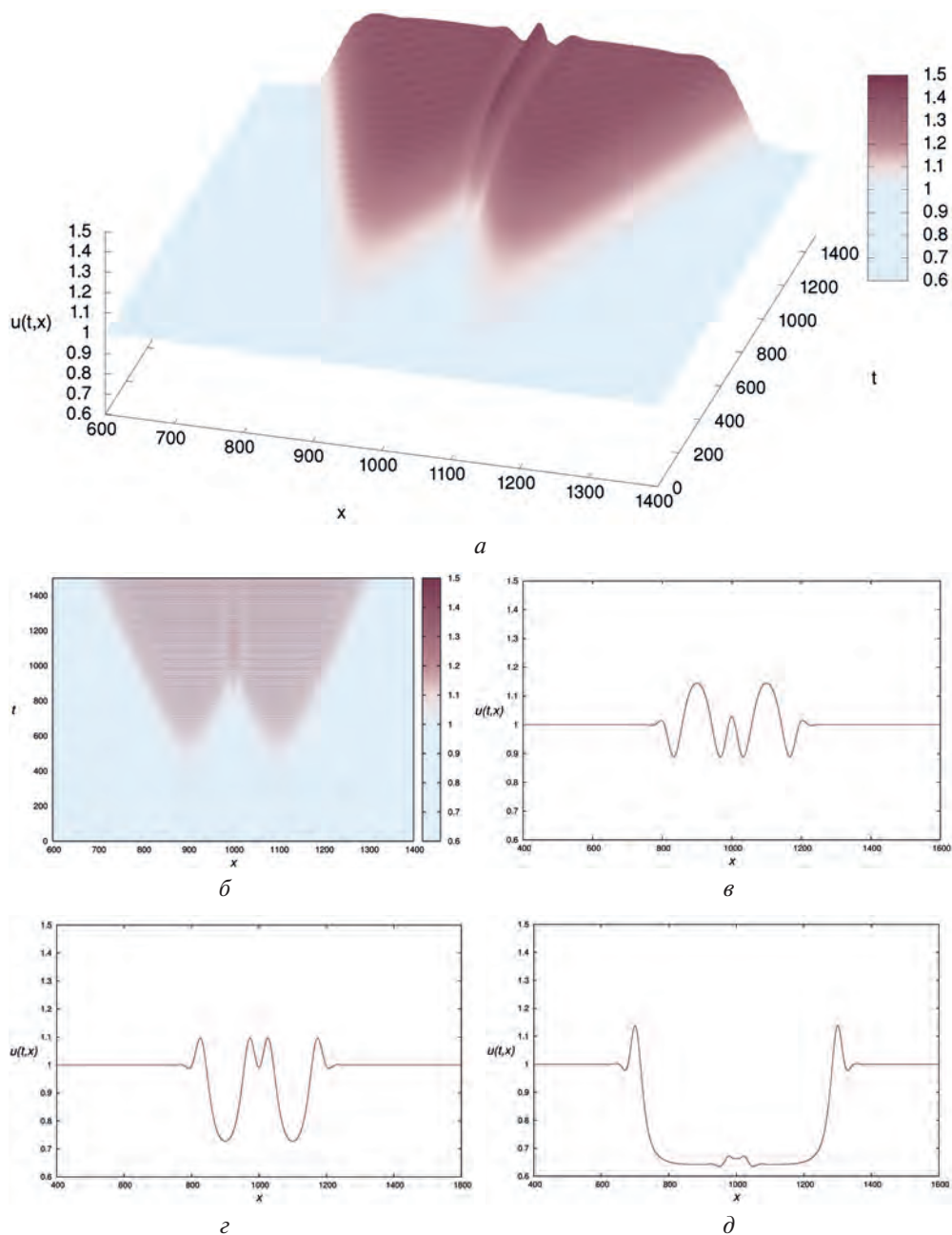


Рис. 4. Пространственное распределение решения $u(t, x)$ при $h = 1,6$ и $c = 1$: *a* — общий вид; *б* — вид сверху; *в* — разрез при $t = 750$; *г* — разрез при $t = 760$; *д* — разрез при $t = 1500$

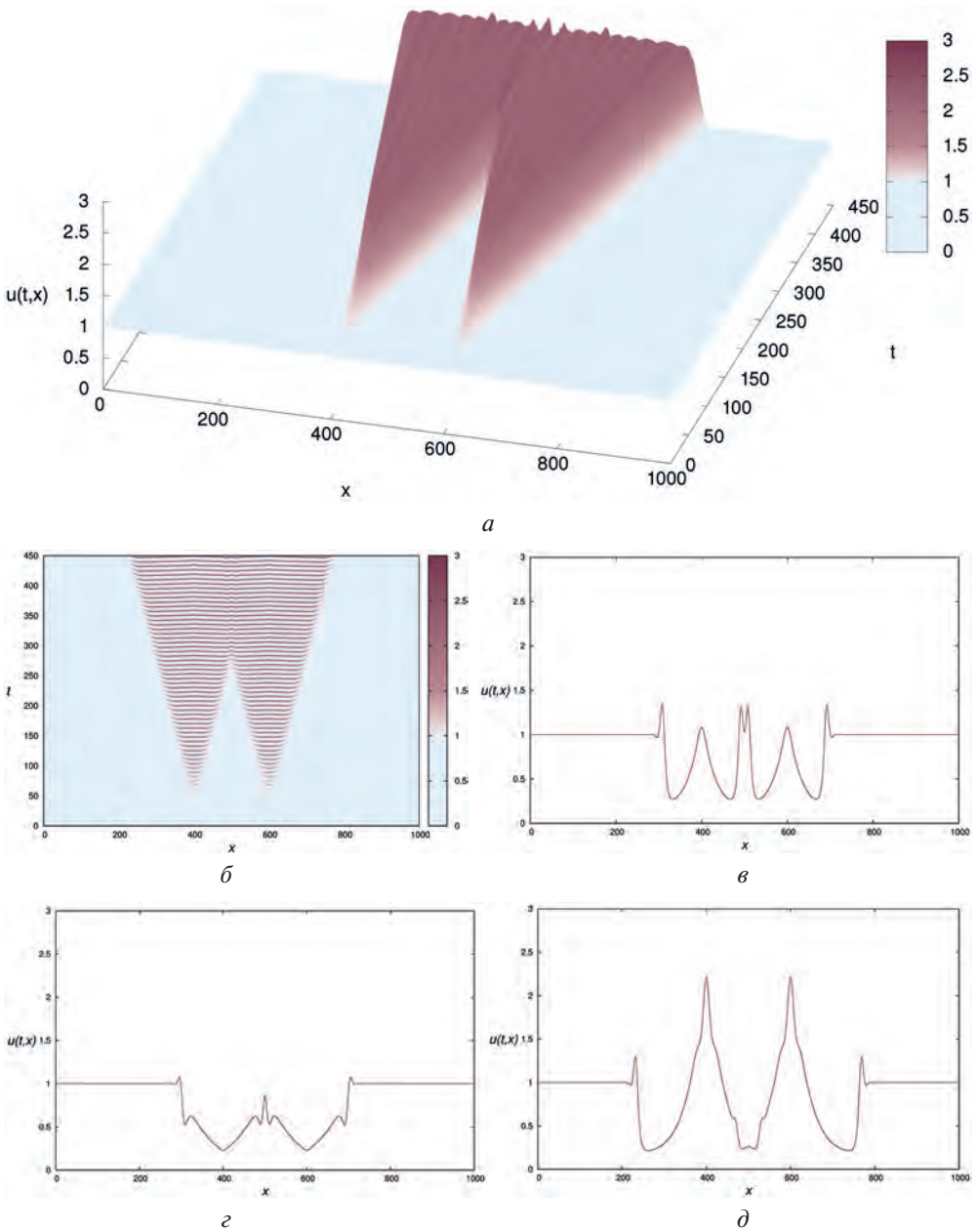


Рис. 5. Пространственное распределение решения $u(t, x)$ при $h = 1,8$ и $c = 1$: *a* — общий вид; *б* — вид сверху; *в* — разрез при $t = 270$; *г* — разрез при $t = 280$; *д* — разрез при $t = 450$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Численный анализ логистического уравнения с диффузией и запаздыванием показал, что сложная пространственно неоднородная структура, возникающая при взаимодействии волн, может быть объяснена свойствами решений соответствующей краевой задачи при увеличении промежутка изменения пространственной переменной. Тем самым, усложнение пространственной структуры волны обусловлено в первую очередь её расширением.

Авторы выражают благодарность Кащенко С. А. за участие в постановке задачи и обсуждении полученных результатов.

ЛИТЕРАТУРА

- [Алешин и др., 2015а] *Алешин С. В., Глызин С. Д., Кащенко С. А.* Уравнение Колмогорова-Петровского-Пискунова с запаздыванием // Моделирование и анализ информационных систем. 2015. Т. 22. № 2. С. 304–321
- [Алешин и др., 2015б] *Алешин С. В., Глызин С. Д., Кащенко С. А.* Особенности динамики уравнения Колмогорова-Петровского-Пискунова с отклонением по пространственной переменной // Моделирование и анализ информационных систем. 2015. Т. 22. № 5. С. 609–628.
- [Глызин, 2009] *Глызин С. Д.* Разностные аппроксимации уравнения «реакция-диффузия» на отрезке // Моделирование и анализ информационных систем. 2009. Т. 16. № 3. С. 96–116.
- [Глызин и др., 2010] *Глызин С. Д., Колесов А. Ю., Розов Н. Х.* Конечномерные модели диффузионного хаоса // Журн. вычислительной математики и мат. физики. 2010. Т. 50. № 5. С. 860–875.
- [Гурли и др., 2003] *Гурли С. А., Соу Дж. В.-Х., Ву Дж. Х.* Нелокальные уравнения реакции-диффузии с запаздыванием: биологические модели и нелинейная динамика // Современная математика. Фундаментальные направления. 2003. Т. 1. С. 84–120.
- [Кащенко, 1981] *Кащенко С. А.* Асимптотика периодического решения обобщённого уравнения Хатчинсона // Исследования по устойчивости и теории колебаний. Ярославль: ЯрГУ, 1981. С. 64–85.
- [Кащенко, 2011] *Кащенко А. А.* Устойчивость бегущих волн в уравнении Гинзбурга-Ландау с малой диффузией // Моделирование и анализ информационных систем. 2011. Т. 18. № 3. С. 58–62.
- [Колесов, 1985] *Колесов Ю. С.* Об устойчивости пространственно однородного цикла в уравнении Хатчинсона с диффузией // Математические модели в биологии и медицине. Вильнюс: ИМК, 1985. № 1. С. 93–103.
- [Колмогоров и др., 1937] *Колмогоров А. Н., Петровский И. Г., Пискунов Н. С.* Исследование уравнения диффузии, соединённой с возрастанием вещества, и его применение к одной биологической проблеме // Бюл. МГУ. Сер. А. Математика и механика. 1937. Т. 1. № 6. С. 1–26.
- [Britton, 1990] *Britton N. F.* Spatial structures and periodic travelling waves in an integro-differential reaction-diffusion population model // SIAM J. Appl. Math. 1990. V. 50. P. 1663–1688.
- [Fisher, 1937] *Fisher R. A.* The Wave of Advantageous Genes // Annals of Eugenics. 1937. V. 7. P. 355–369.
- [Glyzin, 2013] *Glyzin S. D.* Dimensional Characteristics of Diffusion Chaos // Automatic Control and Computer Sciences. 2013. V. 47. No. 7. P. 452–469.

- [Kakutani, Markus, 1958] *Kakutani S., Markus L.* On the non-linear difference-differential equation $y(t) = [a - by(t - \tau)]y(t)$ // Contributions to the Theory of Nonlinear Oscillations. V. 4. / ed. S. Lefschetz. New Jersey: Princeton University Press, 1958. P. 1–18.
- [Kashchenko, 2013] *Kashchenko S. A.* Asymptotics of the Solutions of the Generalized Hutchinson Equation // Automatic Control and Computer Science. 2013. V. 47. No. 7. P. 470–494.
- [Kuang, 1993] *Kuang Y.* Delay Differential Equations. With Applications in Population Dynamics // Mathematics in Sciences and Engineering. 1993. V. 191. 398 p.
- [Wu, 1996] *Wu J.* Theory and Applications of Partial Functional Differential Equations Theory and Applications of Partial Functional Differential Equations. N. Y.: Springer-Verlag, 1996. 432 p.

WAVES INTERACTION IN THE FISHER-KOLMOGOROV EQUATION WITH DELAY

S. V. Aleshin, S. D. Glyzin

P.G. Demidov Yaroslavl State University (P.G. Demidov YSU)

Science Center in Chernogolovka, Russian Academy of Sciences (SCCh RAS)

We considered the problem of interaction of density waves propagation of logistic equation with a deviation of spatial variable and diffusion (Fisher-Kolmogorov equation with a deviation of spatial variable). We performed a numerical analysis of interaction of wave propagation. Results of analysis illustrate the complexity of spatial and temporal distributions of the solutions in a collision, and further interaction of waves.

Keywords: Fisher–Kolmogorov equation, diffusion, spatial deviation, delay differential equation, normal form, numerical analysis.

Aleshin Sergey Vladimirovich — assistant, senior assistant researcher, PhD, fktiby@yandex.ru

Glyzin Sergey Dmitrievich — doctor of physical and mathematical sciences, professor, glyzin@uniyar.ac.ru

СРЕДНЕПОЛЕВАЯ МОДЕЛЬ СУСПЕНЗИИ ПОЛЯРИЗУЕМЫХ ЧАСТИЦ ВО ВНЕШНЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Ю. А. Будков

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»
(НИУ ВШЭ)

Институт химии растворов им. Г. А. Крестова Российской академии наук (ИХР РАН)

Сформулирована статистико-термодинамическая модель монодисперсной коллоидной суспензии поляризуемых твёрдых частиц во внешнем электрическом поле, основанная на локальной теории функционала плотности. Обсуждены различные режимы поведения объёмной доли коллоидных частиц во внешнем поле в зависимости от разности диэлектрических проницаемостей растворителя и коллоида.

Работа поддержана грантом Президента РФ МК-2823.2015.3.

Ключевые слова: электрическое поле, поляризуемость, коллоидные растворы.

ВВЕДЕНИЕ

Суспензии, такие как *электрореологические жидкости*, нашли широкое применение в различных отраслях промышленности в последние несколько десятилетий [Agafonov, Zakharov, 2010]. Электрореологические жидкости — это суспензии, вязкость которых может значительно увеличиваться при приложении к ним электрического поля. Последнее явление получило название *электрореологического эффекта* [Agafonov, Zakharov, 2010]. Величина, с которой связана вязкость суспензии, является объёмной долей коллоидных частиц. Другими словами, зная, как будет меняться последняя при увеличении величины напряжённости электрического поля, можно качественно судить, насколько сильно будет меняться вязкость. Как хорошо известно, если объёмная доля коллоидных сферических частиц достаточно мала, то вязкость суспензии может быть оценена с помощью формулы Эйнштейна [Ландау, Лифшиц, 1986]:

$$\eta = \eta_0(1 + 2,5\phi), \quad (1)$$

где $\eta = \eta_0$ — вязкость чистого растворителя; $\phi = V_c/V$ — объёмная доля коллоидных частиц; V_c — объём, занимаемый коллоидными частицами; V — полный объём системы. Однако формула Эйнштейна (1) не может быть обоснованной для электрореологических жидкостей, находящихся в достаточно сильном электрическом поле. Действительно, в этом случае возможно выстраивание коллоидных частиц в цепочки вдоль силовых линий поля [Davis, 1992], тогда как формула (1) справедлива только для случая равномерно распределённых по объёму коллоидных частиц.

В то время как вычисление вязкости суспензии во внешнем электрическом поле в общем случае является задачей неравновесной статистической

механики и сопряжена в настоящее время с принципиальными трудностями, задача вычисления объёмной доли коллоидных частиц может быть сформулирована полностью на языке термодинамики гетерогенных систем [Bagrat, Hansen, 2003].

Чтобы вычислить объёмную долю коллоидных частиц во внешнем электрическом поле, будем использовать формализм классической теории функционала плотности в представлении электростатического потенциала, сформулированной в работах [Budkov et al., 2015; Maggs, Podgornik, 2015] и успешно применённый автором настоящей работы с коллегами к теории двойного электрического слоя в недавних работах [Budkov et al., 2015, 2016].

1. МОДЕЛЬ

Рассмотрим разбавленную монодисперсную коллоидную суспензию сферических частиц объёма $v = 4\pi r^3/3$ (r — радиус коллоидных частиц), находящаяся во внешнем электрическом поле $E(r)$. Растворитель будем рассматривать как сплошную диэлектрическую среду с диэлектрической проницаемостью ϵ_s . Кроме того, положим, что коллоидные частицы представляют собой сферические частицы твёрдого диэлектрика с диэлектрической проницаемостью ϵ_c . Предположим, что объём суспензии находится в равновесии с бесконечным резервуаром с суспензией, электрическое поле в котором отсутствует. Таким образом, будем описывать эту систему в рамках большого канонического ансамбля. Большой термодинамический потенциал суспензии может быть записан как

$$\Omega = - \int_V \frac{\epsilon(r)(\nabla\psi(r))^2}{8\pi} dV + \int_V \{f(n(r)) - \mu n(r)\} dV, \quad (2)$$

где первое слагаемое определяет свободную энергию диэлектрика в электрическом поле [Ландау, Лифшиц, 1982], а второе — большой термодинамический потенциал суспензии; $\psi(r)$ — электростатический потенциал в точке r ; $f(n)$ — плотность свободной энергии Гельмгольца суспензии; μ — химический потенциал коллоидных частиц в резервуаре; $n(r)$ — концентрация коллоидных частиц в точке r . Интегрирование в формуле (2) ведётся по всему объёму V суспензии. Локальная диэлектрическая проницаемость для достаточно разбавленной суспензии может быть представлена в виде [Ландау, Лифшиц, 1982]:

$$\epsilon(r) = \epsilon_s + \frac{3(\epsilon_c - \epsilon_s)}{\epsilon_c + 2\epsilon_s} n(r)v. \quad (3)$$

Далее, используя стандартное преобразование Лежандра [Ландау, Лифшиц, 1976] $\Pi = \mu n - f$ (Π — осмотическое давление), перепишем термодинамический потенциал (2) в следующей форме:

$$\Omega[\psi] = - \int_V \frac{\epsilon_s (\nabla\psi(r))^2}{8\pi} dV - \int_V \Pi \left[\mu + \frac{\alpha (\nabla\psi(r))^2}{2} \right] dV, \quad (4)$$

которая содержит в качестве переменной варьирования только электростатический потенциал; кроме того, была введена эффективная поляризуемость коллоидных частиц:

$$\alpha = \frac{3\nu}{4\pi} \cdot \frac{3(\varepsilon_c - \varepsilon_s)}{\varepsilon_c + 2\varepsilon_s}. \quad (5)$$

Чтобы провести варьирование термодинамического потенциала (5) по электростатическому потенциалу $\psi(r)$, необходимо знать зависимость $\Pi(\mu)$ осмотического давления от химического потенциала. В качестве базисной модели возьмём модель решёточного газа, для которого эта зависимость хорошо известна [Barrat, Hansen, 2003]:

$$\Pi(\mu) = \frac{k_B T}{\nu} \ln(1 + e^{\mu/(k_B T)}), \quad (6)$$

где k_B — постоянная Больцмана; T — абсолютная температура.

Варьируя большой термодинамический потенциал по электростатическому потенциалу, придём к стандартному уравнению Пуассона:

$$\operatorname{div}(\varepsilon(r)\nabla\psi(r)) = 0, \quad (7)$$

где введена локальная диэлектрическая проницаемость, выраженная полностью через локальное электростатическое поле $-\nabla\psi(r)$:

$$\varepsilon(r) = \varepsilon_s + \frac{4\pi\alpha}{\nu} \cdot \frac{\varphi_0 \exp\left[\frac{\alpha(\nabla\psi(r))^2}{2k_B T}\right]}{1 + \varphi_0 \left(\exp\left[\frac{\alpha(\nabla\psi(r))^2}{2k_B T}\right] - 1 \right)}, \quad (8)$$

где φ_0 — невозмущённая объёмная доля коллоидных частиц в резервуаре. Следует отметить, что при выводе соотношения (8) было использовано выражение для химического потенциала решёточного газа $\mu = k_B T \ln(\varphi_0/1 - \varphi_0)$. Объёмная доля коллоидных частиц может быть вычислена по формуле:

$$\varphi(r) = \frac{\varphi_0 \exp\left[\frac{\alpha(\nabla\psi(r))^2}{2k_B T}\right]}{1 + \varphi_0 \left(\exp\left[\frac{\alpha(\nabla\psi(r))^2}{2k_B T}\right] - 1 \right)}. \quad (9)$$

Теперь рассмотрим задачу о вычислении объёмной доли коллоидных частиц в однородном электрическом поле E . Направляя ось z вдоль электрического поля, запишем уравнение (7) в следующем виде

$$\frac{d}{dz}(\varepsilon(z)\psi'(z)) = 0. \quad (10)$$

Интегрирование уравнения (10) даёт

$$\left(\varepsilon_s + \frac{4\pi\alpha}{\nu} \cdot \frac{\varphi_0 \exp \left[\frac{\alpha(\psi'(z))^2}{2k_B T} \right]}{1 + \varphi_0 \left(\exp \left[\frac{\alpha(\psi'(z))^2}{2k_B T} \right] - 1 \right)} \right) \psi'(z) = \text{const.} \quad (11)$$

Из уравнения (11) следует, что локальное поле $E_{loc} = -\psi'(z)$ должно быть также однородным, т. е. $\psi'(z) = \text{const.}$ Далее, из условия непрерывности электростатической индукции на границе раздела суспензия/воздух, определяем константу интегрирования, что даёт следующее нелинейное уравнение для локального электрического поля

$$\left(\varepsilon_s + \frac{4\pi\alpha}{\nu} \cdot \frac{\varphi_0 \exp \left[\frac{\alpha E_{loc}^2}{2k_B T} \right]}{1 + \varphi_0 \left(\exp \left[\frac{\alpha E_{loc}^2}{2k_B T} \right] - 1 \right)} \right) E_{loc} = E. \quad (12)$$

Решая уравнение (12) относительно E_{loc} , можно получить зависимость локального электрического поля от объёмной доли коллоидных частиц φ_0 в резервуаре, температуры T и напряжённости E приложенного электрического поля:

$$E_{loc} = E_{loc}(\varphi_0, T, E). \quad (13)$$

Объёмная доля коллоидных частиц в электрическом поле, которая, разумеется, также не будет зависеть от координат, может быть вычислена по формуле

$$\varphi(\varphi_0, T, E) = \frac{\varphi_0 \exp \left[\frac{\alpha E_{loc}(\varphi_0, T, E)^2}{2k_B T} \right]}{1 + \varphi_0 \left(\exp \left[\frac{\alpha E_{loc}(\varphi_0, T, E)^2}{2k_B T} \right] - 1 \right)}. \quad (14)$$

2. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

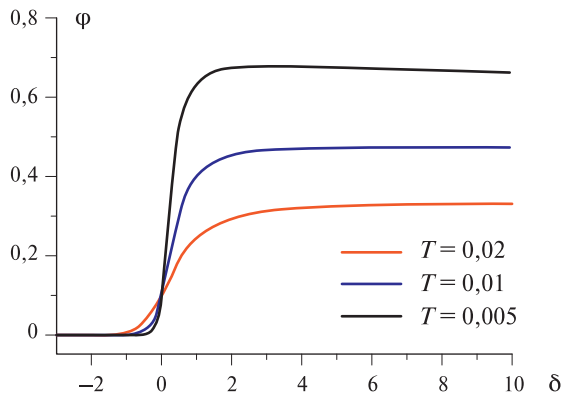
Прежде чем перейти к анализу численных результатов, введём следующие безразмерные параметры: $\tilde{T} = k_B T \varepsilon_s / \nu E^2$ — безразмерная температура; $\tilde{E}_{loc} = E_{loc} \varepsilon_s / E$ — безразмерное электрическое поле; $\tilde{\alpha} = \alpha / \nu \varepsilon_s = 3 / (4\pi) \times \delta / (3 + \delta)$ — безразмерная поляризуемость частиц; $\delta = (\varepsilon_c - \varepsilon_s) / \varepsilon_s$ — относительное отклонение диэлектрической проницаемости коллоида от диэлектрической проницаемости растворителя. В относительных единицах уравнение для локального электрического поля примет следующий вид

$$\left(1 + 4\pi\tilde{\alpha} \frac{\varphi_0 \exp\left[\frac{\tilde{\alpha}\tilde{E}_{loc}^2}{2\tilde{T}}\right]}{1 + \varphi_0 \left(\exp\left[\frac{\tilde{\alpha}\tilde{E}_{loc}^2}{2\tilde{T}}\right] - 1\right)} \right) \tilde{E}_{loc} = 1. \quad (15)$$

Уравнение для объёмной доли коллоидных частиц в безразмерном виде записывается как:

$$\varphi = \frac{\varphi_0 \exp\left[\frac{\tilde{\alpha}\tilde{E}_{loc}^2}{2\tilde{T}}\right]}{1 + \varphi_0 \left(\exp\left[\frac{\tilde{\alpha}\tilde{E}_{loc}^2}{2\tilde{T}}\right] - 1\right)}. \quad (16)$$

На рисунке показаны зависимости объёмной доли коллоидных частиц от величины δ при различных значениях безразмерной температуры \tilde{T} . Следует отметить, что область физических значений параметра δ ограничена снизу числом -3 , т. е. $\delta > -3$. Как видно на рисунке, в области отрицательных значений параметра δ (что соответствует случаю, когда диэлектрическая проницаемость растворителя больше диэлектрической проницаемости коллоида) приложение электрического поля должно приводить к понижению объёмной доли коллоидных частиц. Однако в области положительных значений δ электрическое поле будет всегда приводить к уплотнению суспензии, т. е. к увеличению объёмной доли коллоидных частиц. Как видно на рисунке, уменьшение безразмерной температуры (что соответствует охлаждению системы или увеличению напряжённости электрического поля) приводит к более резкому увеличению объёмной доли коллоидных частиц при увеличении параметра δ . Такое поведение объёмной доли коллоидных частиц во внешнем электрическом поле может соответствовать указанному во *введении* электрореологическому эффекту.



Зависимость объёмной доли коллоидных частиц от параметра $\delta = (\epsilon_c - \epsilon_s)/\epsilon_s$ при различных значениях безразмерной температуры $\tilde{T} = k_B T \epsilon_s / \nu E^2$ и при фиксированном значении $\varphi_0 = 0,1$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе сформулирована среднеполевая модель суспензии поляризуемых сферических коллоидных частиц во внешнем электрическом поле. В рамках предложенной модели получена система трансцендентных уравнений для локального электрического поля в объёме суспензии и объёмной доли коллоидных частиц. Решая полученную систему уравнений при различных значениях температуры, напряжённости электрического поля и разностях диэлектрических проницаемостей растворителя и коллоида, получено два режима поведения объёмной доли коллоидных частиц. А именно, в случае, когда диэлектрическая проницаемость коллоида меньше диэлектрической проницаемости растворителя, приложение электрического поля приводит к понижению объёмной доли коллоидных частиц. Напротив, когда диэлектрическая проницаемость коллоида больше диэлектрической проницаемости растворителя, электрическое поле приводит к увеличению объёмной доли коллоидных частиц. Последний эффект может быть связан с так называемым электрореологическим эффектом.

ЛИТЕРАТУРА

- [Ландау, Лифшиц, 1976] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика: Статистическая физика. Ч. 1. М.: Наука, 1976. 584 с.
- [Ландау, Лифшиц, 1982] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика: Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. 624 с.
- [Ландау, Лифшиц, 1986] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика: Гидродинамика. М.: Наука, 1986. 736 с.
- [Agafonov, Zakharov, 2010] *Agafonov A. V., Zakharov A. G.* Electrorheological fluids // Russian J. General Chemistry. 2010. V. 80. Iss. 3. P. 567–575.
- [Barrat, Hansen, 2003] *Barrat J.-L., Hansen J.-P.* Basic Concepts for Simple and Complex Liquids. Cambridge: Cambridge University Press, 2003. 294 p.
- [Budkov et al., 2015] *Budkov Yu. A., Kolesnikov A. L., Kiselev M. G.* A modified Poisson-Boltzmann theory: Effects of co-solvent polarizability // Europhysics Letters. 2015. V. 111. P. 28002-1–28002-6.
- [Budkov et al., 2016] *Budkov Yu. A., Kolesnikov A. L., Kiselev M. G.* On the theory of electric double layer with explicit account of a polarizable cosolvent // J. Chem. Phys. 2016. V. 144. P. 184703-1–184703-8.
- [Davis, 1992] *Davis L. C.* Polarization forces and conductivity effects in electrorheological fluids // J. Applied Physics. 1992. V. 72. P. 1334–1340.
- [Maggs, Podgornik, 2015] *Maggs A. C., Podgornik R.* General theory of asymmetric steric interactions in electrostatic double layers // Soft Matter. 2015. V. 12. P. 1219–1229.

MEAN-FIELD MODEL OF COLLOIDAL SOLUTION OF THE STRONGLY POLARIZABLE SOLID PARTICLES UNDER THE EXTERNAL ELECTRIC FIELD

Yu. A. Budkov

National Research University Higher School of Economics

G. A. Krestov Institute of Solution Chemistry of the Russian Academy of Sciences (ISC RAS)

The statistical model based on the local density functional theory (DFT) of the monodisperse colloidal solution of the polarizable spherical solid particles under the external electric field is formulated. The regimes of the behavior of colloidal particles' volume fraction in dependence on the difference between the dielectric permittivities of the solvent and colloidal particles are discussed.

Keywords: electric field, polarizability, colloid solutions.

Budkov Yuriy Alekseevich — associate professor, researcher, ybudkov@hse.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ КОНСЕРВАТИВНОГО АЛГОРИТМА ПАРАЛЛЕЛЬНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИСКРЕТНЫХ СОБЫТИЙ В СЕТЯХ SMALL WORLD

Л. Ф. Зиганурова^{1,2}, Л. Н. Щур^{1,2,3}

¹ Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ)

² Научный центр в Черноголовке Российской академии наук (НЦЧ РАН)

³ Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук (ИТФ РАН)

Обсуждается эволюция профиля локальных виртуальных времён при использовании консервативного алгоритма синхронизации в параллельном дискретно-событийном моделировании на топологии Small World. Показано, что добавление небольшого процента случайных дальних связей поверх регулярной решётки позволяет улучшить синхронизацию логических процессов. Проведено моделирование эволюции профиля локальных времён и измерены такие показатели, как средняя ширина и скорость роста профиля. Обнаружено, что при росте размера системы ширина профиля локальных виртуальных времён (дисперсия) в такой модели остаётся постоянной, что свидетельствует о хорошей синхронизации процессов между собой. При этом в системе не возникает блокирующих состояний, так как скорость роста профиля с течением глобального времени моделирования остаётся ненулевой.

Работа выполнена в рамках исследований по гранту РНФ № 14-21-00158.

Ключевые слова: параллельное моделирование дискретных событий (ПМДС), консервативный алгоритм синхронизации, сеть малого мира.

ВВЕДЕНИЕ

Параллельное моделирование дискретных событий (ПМДС) — это метод моделирования систем с дискретными событиями на параллельном компьютере [Fujimoto, 1990]. Примерами таких систем могут служить телекоммуникационные сети, магнитные системы, системы воздушно-транспортного сообщения и др. Метод ПМДС заключается в том, что каждая отдельная часть изучаемой системы моделируется на своём процессорном элементе (ПЭ). Процессорными элементами могут быть процессор, ядро или поток, в зависимости от архитектуры компьютера и особенностей самой системы. Каждый ПЭ исполняет свой *логический процесс* (ЛП) и имеет своё *локальное виртуальное время* (ЛВВ) [Jefferson, 1985; Lamport, 1978]. Набор всех локальных времён составляет *профиль* локальных виртуальных времён. В ПМДС отсутствует механизм глобальной синхронизации, синхронизация происходит только за счёт обмена сообщениями с временными метками. В зависимости от характера взаимодействия между ПЭ различают консервативные и оптимистические алгоритмы синхронизации, а также алгоритм FaS [Shchur, Novotny, 2004].

Зиганурова Лилия Фаилевна — аспирантка, старший лаборант-исследователь, ziganurova@gmail.com

Щур Лев Николаевич — ведущий научный сотрудник, профессор, заместитель председателя, заведующий отделом заведующий кафедрой, доктор физико-математических наук, levshchur@gmail.com

Для того чтобы изучить производительность и свойства масштабируемости алгоритмов синхронизации ПМДС, используется так называемый метод «моделирования модели», а основным объектом исследования в модели является профиль ЛВВ.

1. ОПИСАНИЕ БАЗОВОЙ МОДЕЛИ КОНСЕРВАТИВНОГО АЛГОРИТМА

Рассмотрим простейшую *базовую модель* эволюции времени в консервативном алгоритме синхронизации [Korniss et al., 2000]. Имеется система из N логических процессов. Будем считать, что каждый ЛП $_i$ выполняется на своём ПЭ $_i$ и зависит только от двух соседних. Если схематически изобразить такую систему в виде графа, узлами которого являются ЛП, а рёбрами — отношения зависимости, то можно считать, что топология базовой модели — это кольцо. ЛВВ каждого ЛП обозначим как τ_i . В начальный момент времени $\tau_i = 0$ для всех $i = 0..N$. На каждом дискретном шаге моделирования проверяется следующее условие:

$$\tau_i(t) \leq \{\tau_{i-1}(t), \tau_{i+1}(t)\}. \quad (1)$$

Если условие (1) выполняется, то значение τ_i увеличивается на случайную величину, распределённую по закону Пуассона, в противном случае локальное время ЛП не изменяется.

Показатель, определяющий степень синхронизации процессов — это ширина профиля ЛВВ. Она измеряется по следующей формуле:

$$\langle w^2(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N (\tau_i(t) - \bar{\tau}(t))^2, \quad (2)$$

где $\bar{\tau}(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N \tau_i(t)$. Также считается скорость роста профиля, которая соответствует плотности локальных минимумов:

$$\langle u(t) \rangle = \frac{N_{act}}{N},$$

где N_{act} — это количество ЛП, удовлетворяющих условию (1).

Исследование эволюции профиля ЛВВ базовой консервативной схемы ПМДС, представленное в работе [Korniss et al., 2000], показало, что данная модель относится к классу универсальности Кардара–Паризи–Жанга (KPZ, Kardar–Parisi–Zhang) [Kardar et al., 1986]. Класс KPZ характеризуется следующими скейлинговыми показателями: α — экспонента роста и β — экспонента шероховатости, $\alpha = 1/2$ и $\beta = 1/3$. Функция скейлинга имеет вид:

$$\langle w^2(N, t) \rangle \sim N^{2\alpha} g\left(\frac{1}{N^{\alpha/\beta}}\right), \quad (4)$$

$$g(x) = \begin{cases} x^{2\beta}, & x \ll 1, \\ \text{const}, & x \gg 1. \end{cases}$$

Таким образом, ширина профиля ЛВВ в базовой консервативной схеме асимптотически растёт как $N^{1/2}$, что снижает эффективность параллельного моделирования.

2. МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНСЕРВАТИВНОГО АЛГОРИТМА В СЕТИ ТОПОЛОГИИ SMALL WORLD

Изучим поведение профиля ЛВВ при изменении топологии с регулярной на топологию Small World (SW) (рис. 1). Среднее расстояние между двумя узлами в такой топологии (средняя длина пути в графе) растёт как логарифм от количества узлов [Watts, Strogatz, 1998]. Выбор данной топологии для изучения объясняется тем, что она является более реалистичной, чем регулярная, и используется при моделировании в таких областях, как социология, логистика, нейробиология, вычислительная лингвистика и проч.

Конструировать граф со свойствами SW можно различными способами. В данной работе мы строили топологию следующим образом. Сначала создаётся регулярный граф со степенью вершин $k = 2$ (т.е. каждый узел соединён с двумя соседними). Затем задаётся параметр p , который изменяется в нашей работе от 0,002 до 1. К существующему графу добавляется ровно pN случайных рёбер так, чтобы не возникало кратных рёбер и петель.

Процесс обновления локальных времён остаётся таким же. Поскольку теперь каждый ЛП может быть соединён более чем с двумя другими, условие (1) принимает вид:

$$\tau_i(t) \leq \{\tau_r(t)\} \quad (3)$$

где r — номера всех соседей ЛП _{i} .

В ходе моделирования размер системы изменялся от 10^3 до 10^6 , количество временных шагов от $1,5 \cdot 10^3$ до 10^5 , результаты усреднены по 1500 независимым реализациям.

Наше моделирование показало, что ширина профиля так же, как и в базовой схеме, растёт со временем и выходит на насыщение (рис. 2). Показатель степени роста зависит от количества добавленных связей, причём он резко увеличивается даже при очень незначительном значении параметра p . Мы измерили зависимости степени β от размера системы N и параметра p (рис. 3). Для достаточно большого размера системы ($N > 10^4$) показатель β зависит только от p следующим образом: $\beta = -0,140(5) - 0,162(2) \cdot \ln(p)$ (рис. 4).

В отличие от базовой схемы, где ширина профиля ЛВВ расходится с ростом размера системы, в данном случае значение ширины остаётся постоянной (рис. 5), при этом предельное значение зависит от параметра p следующим образом: $\langle w_\infty^2 \rangle = -0,75(5)p^{-1,45(4)}$. Следует отметить, что такая оценка является достаточно грубой в связи с ограниченным набором статистики.

Ещё одним важным показателем является скорость роста профиля ЛВВ. Зависимость скорости от параметра p является нелинейной. Обозначим за Δu разницу между $u(p > 0)$ и $u(p = 0)$. Мы выяснили, что $\Delta u(N, p) = 0,078(3)p^{0,092(3)}$ или $\Delta u(N, p) = 0,08(2)p^{0,24(1)}$ в зависимости от способа аппроксимации показателя степени и коэффициента (логарифмической или степенной функцией).

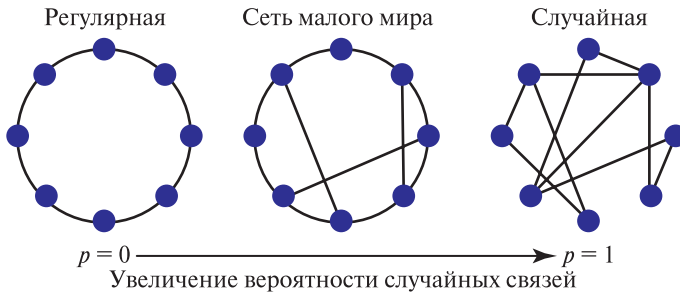


Рис. 1. Сетевые топологии

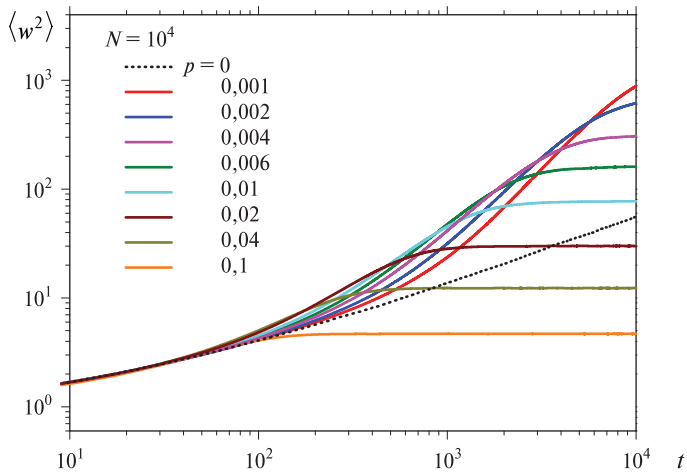


Рис. 2. Зависимость средней ширины профиля от времени при разных параметрах p

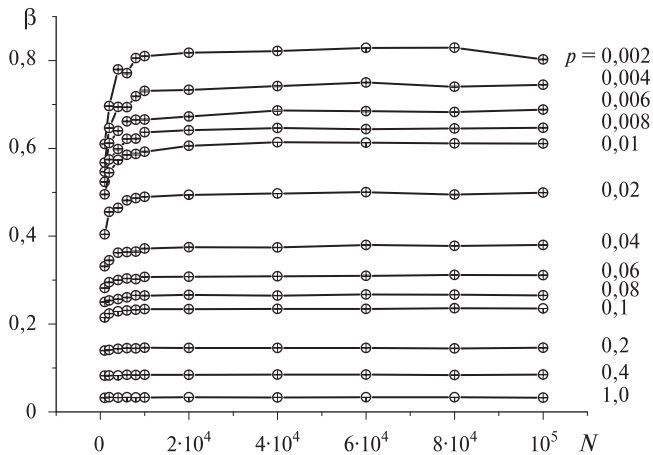


Рис. 3. Зависимость показателя β от размера системы при разных параметрах p

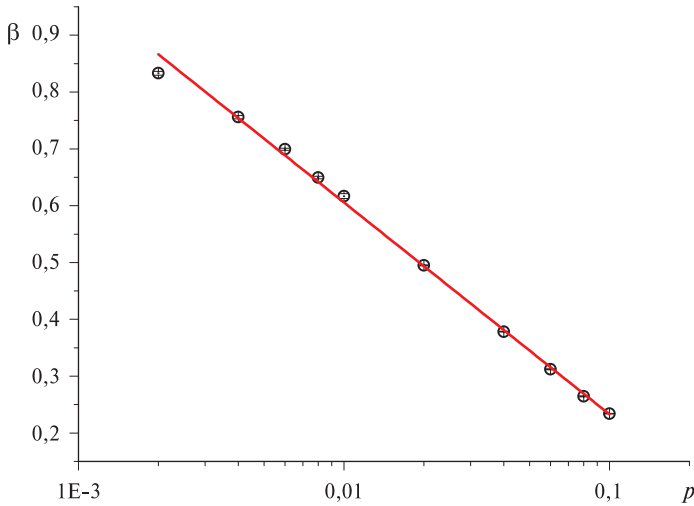


Рис. 4. Зависимость показателя β от параметра p

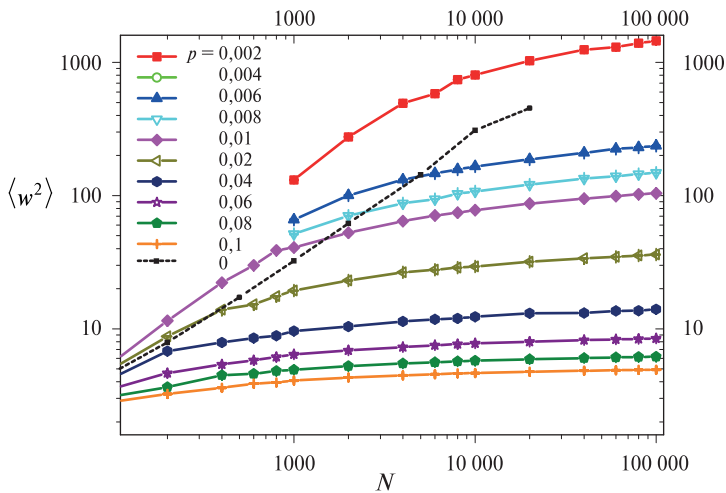


Рис. 5. Зависимость средней ширины от размера системы при различных значениях параметра p

Стоит отметить, что похожая работа была проведена Корниссом с соавторами и изложена в статье “Suppressing roughness of virtual times in parallel discrete-event simulations” [Korniss et al., 2003]. Способ конструирования топологии, используемый в их работе, отличается от стандартных способов создания топологии Small World. Авторы добавляют ровно одну дальнюю связь к каждому узлу регулярной решётки, так что степень каждой вершины становится равной трём, а затем модифицируют способ обновления локальных времён. Аналогичный параметр p в их работе означает не процент добавленных связей, а вероятность, с которой проверяется условие $\tau_i(t) \leq \{\tau_{i-1}(t), \tau_{i+1}(t), \tau_r(t)\}$, где r — номер дальнего соседа ЛП $_i$. Таким образом, с вероятностью p локальное время логического процесса сравнивается с локальными времена-

ми всех его соседей, а с вероятностью $(1 - p)$ — только с двумя ближайшими. Несмотря на разницу в конструкции моделей, качественно наши результаты совпали с аналогичными результатами работы Корнисса. Отметим, что мы провели более детальный анализ эволюции профиля ЛВВ, однако здесь приведены лишь предварительные результаты.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье представлены результаты моделирования эволюции профиля локальных виртуальных времён в консервативном алгоритме параллельного моделирования дискретных событий для топологии Small World. Выбор топологии влияет на свойства масштабируемости при параллельном моделировании дискретных событий, а именно, добавление некоторого количества случайных дальних связей позволяет сделать ширину профиля локальных виртуальных времён нерасходящейся с ростом размера системы. При этом средняя скорость эволюции профиля снижается незначительно. Это означает, что логические процессы в такой модели остаются хорошо синхронизированными вне зависимости от размера системы.

ЛИТЕРАТУРА

- [Fujimoto, 1990] *Fujimoto R. M.* Parallel discrete event simulation // Communications of the ACM. 1990. V. 33. No. 10. P. 30–53.
- [Jefferson, 1985] *Jefferson D. R.* Virtual time // ACM Transactions on Programming Languages and Systems (TOPLAS). 1985. V. 7. No. 3. P. 404–425.
- [Kardar et al., 1986] *Kardar M., Parisi G., Zhang Y. C.* Dynamic scaling of growing interfaces // Physical Review Letters. 1986. V. 56. No. 9. P. 889.
- [Korniss et al., 2000] *Korniss G., Toroczkai Z., Novotny M. A., Rikvold P. A.* From massively parallel algorithms and fluctuating time horizons to nonequilibrium surface growth // Physical review letters. 2000. V. 84. No. 6. P. 1351.
- [Korniss et al., 2003] *Korniss G., Novotny M. A., Guclu H., Toroczkai Z., Rikvold P. A.* Suppressing roughness of virtual times in parallel discrete-event simulations // Science. 2003. V. 299. No. 5607. P. 677–679.
- [Lamport, 1978] *Lamport L.* Time, clocks, and the ordering of events in a distributed system // Communications of the ACM. 1978. V. 21. No. 7. P. 558–565.
- [Shchur, Novotny, 2004] *Shchur L. N., Novotny M. A.* Evolution of time horizons in parallel and grid simulations // Physical Review E. 2004. V. 70. No. 2. P. 026703.
- [Watts, Strogatz, 1998], *Watts D. J., Strogatz S. H.* Collective dynamics of ‘small-world’ networks // Nature. 1998. V. 393. No. 6684. P. 440–442.

STUDY OF THE PROPERTIES OF THE CONSERVATIVE ALGORITHM OF PARALLEL DISCRETE EVENT SIMULATION ON SMALL WORLD NETWORKS

L. F. Ziganurova^{1,2}, L. N. Shchur^{1,2,3}

¹ National Research University Higher School of Economics (NRU HSE)

² Scientific Center in Chernogolovka, Russian Academy of Sciences (SCCh RAS)

³ Landau Institute for Theoretical Physics

The evolution of local time profile in conservative parallel discrete event simulation on small-world topology is discussed. It is shown that adding even small fraction of random long-distance links improves the synchronization properties of the logical processes. We performed the simulation of the local virtual time profile evolution and investigated such properties as the average width and the average velocity of the profile. The width of the time profile remains constant while the size of the systems is increasing. Moreover, despite of the additional causality checks, the evolution maintains non-zero rate.

Keywords: parallel discrete event simulations, conservative synchronization algorithm, small-world network.

Ziganurova Liliia Failevna — PhD student, senior laboratory researcher, ziganurova@gmail.com

Shchur Lev Nikolaevich —leading scientist, professor, deputy chairman, head of department, chair of department, doctor of physical and mathematical sciences

УСТОЙЧИВЫЕ РЕЖИМЫ ОДНОГО КЛАССА ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ИМПУЛЬСНЫМИ ВОЗДЕЙСТВИЯМИ

Л. И. Ивановский

Ярославский государственный университет им. П. Г. Демидова
(ЯрГУ им. П. Г. Демидова)

Научный центр в Черноголовке Российской академии наук (НЦЧ РАН)

Рассматривается математическая модель динамической импульсной системы, представляющая собой цепочку из трёх связанных в кольцо, возмущённых дифференциальных уравнений с запаздыванием. Изучаются вопросы существования и устойчивости релаксационных периодических решений этой системы на основе анализа специального двумерного отображения. Особое внимание уделяется числу сосуществующих устойчивых режимов.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект № 14-21-00158).

Ключевые слова: бифуркации, фазовые портреты, релаксационные колебания, устойчивые режимы.

ВВЕДЕНИЕ

Для цепочки связанных в кольцо, возмущённых осцилляторов с запаздыванием

$$\dot{u}_j = d(u_{j+1} - u_j) + \lambda[-1 + \alpha f(u_j(t-1)) - \beta g(u_j)]u_j, \quad j = \overline{1, m}, \quad (1)$$

$$u_1 = u_{m+1},$$

где $u_j = u_j(t) > 0$; параметры $m \geq 2$, $\lambda \gg 1$, $\beta > 0$, $\alpha > 1 + \beta$; гладкие функции $f(u)$, $g(u) \in C^2(\mathbb{R}_+)$ удовлетворяют условиям:

$$0 < \beta g(u) < \alpha, \quad f(0) = g(0) = 1, \quad \forall u \in \mathbb{R}_+;$$

$$f(u), \quad g(u), \quad \alpha f'(u), \quad u g'(u) = O\left(\frac{1}{u}\right) \quad \text{при } u \rightarrow +\infty,$$

в статьях [Глызин и др., 2011а, б, 2012] было показано, что с помощью замен вида

$$u_1 = \exp\left(\frac{x}{\varepsilon}\right), \quad u_j = \exp\left(\frac{x}{\varepsilon} + \sum_{k=1}^{j-1} y_k\right), \quad j = \overline{2, m}, \quad \varepsilon = \frac{1}{\lambda} \ll 1,$$

где x, y_1, \dots, y_{m-1} — новые переменные, систему (1) можно свести к системе обыкновенных дифференциальных уравнений с импульсными воздействиями. Рассмотрим данную задачу для случая $m = 3$:

$$\begin{cases} \dot{y}_1 = d(e^{y_2} - e^{y_1}), \\ \dot{y}_2 = d(e^{y_1+y_2} - e^{y_2}). \end{cases} \quad (2)$$

$$y_j(+0) = \frac{\alpha - 1}{\alpha - \beta - 1} y_j(-0), \quad y_j(1+0) = y_j(1-0) - \frac{\alpha}{\alpha - 1} y_j(+0),$$

$$y_j(\alpha + 0) = (1 + \beta) y_j(\alpha - 0),$$

$$y_j(\alpha + 1 + 0) = y_j(\alpha + 1 - 0) - \frac{\alpha}{1 + \beta} y_j(\alpha + 0), \quad j = 1, 2.$$

Функции $y_1(t)$ и $y_2(t)$ характеризуют фазовые сдвиги между компонентами системы (1) и асимптотически близки при $\lambda \rightarrow +\infty$ к величинам $y_1 = \ln u_2 - \ln u_1$, $y_2 = \ln u_3 - \ln u_2$ соответственно.

Изучается отображение вдоль решений системы (2) за период T_0 :

$$\Phi(z): \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} y_1(T_0) \\ y_2(T_0) \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где $y_1(-0) = z_1$, $y_2(-0) = z_2$. Величина $T_0 = \alpha + 1 + (\beta + 1)/(\alpha - \beta - 1)$ определяет главную часть периода устойчивого цикла одиночного осциллятора системы (1). Отображение $\Phi(z)$ сопоставляет начальным условиям системы (2) решение с координатами y_j в момент времени $t = T_0$.

В работах [Глызин и др., 2011а, б, 2012] было доказано, что экспоненциально устойчивым неподвижным точкам отображения (3) соответствуют орбитально-экспоненциально устойчивые циклы системы (1). Другими словами, для того, чтобы говорить об устойчивых циклах, достаточно изучить неподвижные точки модельного отображения. Они и являлись объектами исследования.

Асимптотический анализ отображения (3) показывает, что при достаточно малых значениях параметра d оно имеет как минимум три устойчивые неподвижные точки, при этом нулевое состояние равновесия устойчиво для любых значений d . Задача исследования состоит в определении таких значений параметров α и β , при которых отображение (3) имеет большее число устойчивых неподвижных точек. Поскольку сделать это в полной мере с использованием лишь аналитического аппарата затруднительно, поиск устойчивых состояний осуществлялся с помощью специально разработанной программы, использующей технологию параллельных вычислений на центральном процессоре компьютера.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

На координатной плоскости параметров (α, β) можно выделить области A_1, A_2, A_3 и кривые l_0, \dots, l_5 . Графическая визуализация данных множеств приведена на рис. 1.

Наиболее важным элементом построения введённых областей, является прямая $l_0 = \{(\alpha, \beta): \beta = \alpha - 2\}$. Относительно неё симметрично проведены кривые l_2 и l_3 , касающиеся l_0 в точке $(2, 0)$. Эти кривые являются границами области $A_2 = \{(\alpha, \beta): \beta > l_3, \beta < l_2\}$. В точке $(2, 0)$ проведена ещё и кривая l_4 , касательная к прямой l_0 . Также на рис. 1 имеется прямая l_5 , которая по мере увеличения значения параметра α приближается к прямой l_0 . В совокупности прямые

l_1, \dots, l_5 образуют границы двусвязных областей

$$A_1 = \{(\alpha, \beta) : \beta > 0, \beta < l_4; \beta > l_2, \beta < l_5\}$$

и

$$A_2 = \{(\alpha, \beta) : \beta > l_4, \beta < l_3; \beta > l_5, \beta < l_1\}.$$

При относительно малых значениях d не трудно обнаружить состояния равновесия, предсказанные аналитически. Для обнаружения же других неподвижных точек величины α и β фиксировались, а значение d менялось. В результате исследования были получены значения начальных параметров, для которых обнаруживалось одновременное существование семи устойчивых состояний равновесия.

Далее, как и в работах [Ивановский, 2015; Ивановский, Самсонов, 2014, 2015], рассмотрим типичные бифуркации для каждой из введённых областей.

Основные бифуркации в области A_1

При изменении параметра d для любых фиксированных значений пары $(\alpha, \beta) \in A_1$ в фазовом пространстве отображения наблюдается один и тот же сценарий фазовых перестроек. Для определённости возьмём $\alpha = 3,6$ и $\beta = 0,4$. При изменении параметра d для заданных величин α и β получают следующие бифуркации.

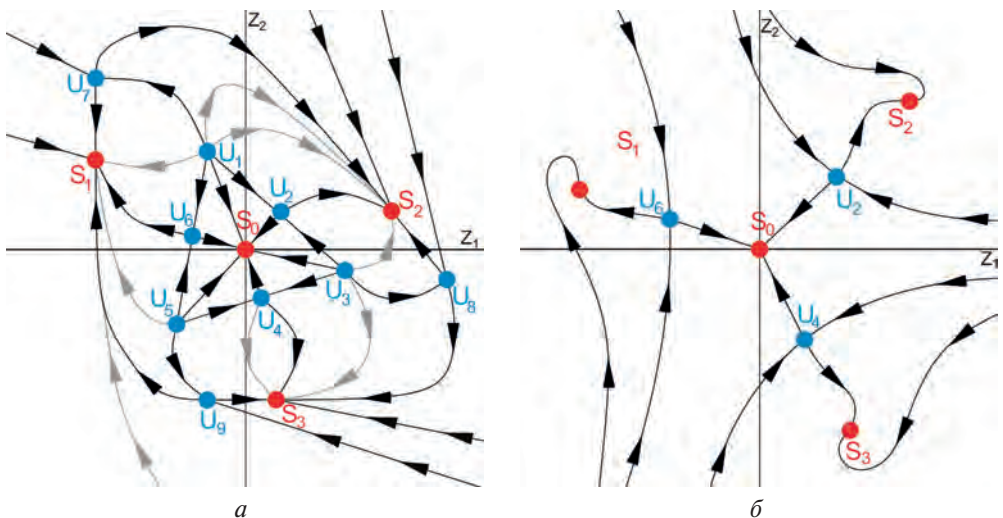


Рис. 2. Фазовые портреты отображения: $a - d < d_1$; $b - d_1 < d < d_2$

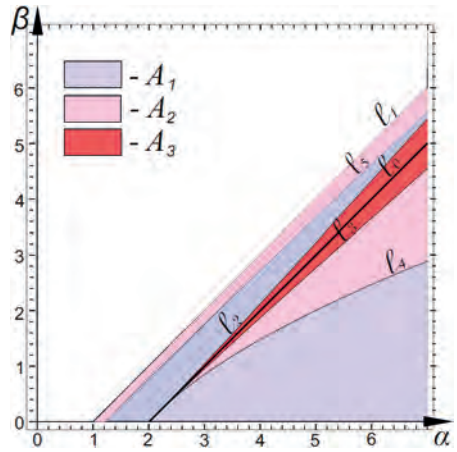


Рис. 1. Разбиение на области параметров с одинаковыми бифуркационными сценариями

1. При $d < d_1$; $d_1 \approx 0,008$ отображение имеет четыре устойчивые неподвижные точки и девять неустойчивых. Схематическое изображение фазового портрета для этого случая можно увидеть на рис. 2а. Буквами S_j обозначены устойчивые неподвижные точки, U_j — неустойчивые. Чёрным цветом показаны сепаратрисы, а серым — некоторые фазовые кривые.

2. При $d = d_1$ три узла U_1 , U_3 и U_5 одновременно сливаются с седлами U_7 , U_8 и U_9 и исчезают.

3. При $d_1 < d < d_2$; $d_2 \approx 0,19$ отображение имеет четыре устойчивые неподвижные точки и три неустойчивые. Фазовый портрет для данного случая изображён на рис. 2б.

4. Последняя бифуркация происходит при $d = d_2$. Устойчивые узлы S_1 , S_2 и S_3 , сливаясь с седлами U_6 , U_2 и U_4 , пропадают. Тем самым, при $d > d_2$ отображение имеет лишь одно единственное нулевое устойчивое состояние.

Полученный сценарий фазовых перестроек остаётся верным для любых $(\alpha, \beta) \in A_1$. Отличия от рассмотренного случая состоят лишь в числовых выражениях бифуркационных значений параметра d .

Основные бифуркации в области A_2

При изменении параметра d для любых фиксированных значений пары $(\alpha, \beta) \in A_2$ в фазовом пространстве отображения наблюдается один и тот же сценарий фазовых перестроек. Для удобства зафиксируем величины $\alpha = 1,9$ и $\beta = 0,1$ и будем менять значения параметра d . В результате для отображения Φ получим следующую последовательность бифуркаций.

1. При $d < d_1$; $d_1 \approx 0,316$ отображение имеет четыре устойчивые неподвижные точки и девять неустойчивых. Схематическое изображение фазового портрета для этого случая можно увидеть на рис. 3а.

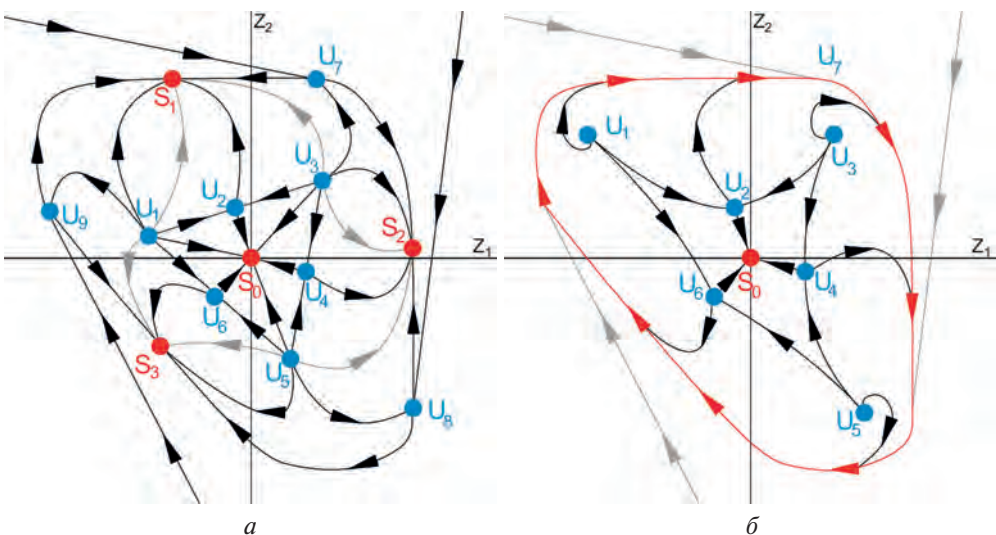


Рис. 3. Фазовые портреты отображения: а — $d < d_1$; б — $d_1 < d < d_2$

2. При $d = d_1$ седла U_7 , U_8 и U_9 одновременно подходят к седлам S_1 , S_2 и S_3 , сливаются с ними и образуют устойчивое многообразие M_S , по которому осуществляется движение по часовой стрелке. При этом неустойчивые состояния равновесия U_1 , U_3 и U_5 становятся фокусами.

3. При $d_1 < d < d_2$; $d_2 \approx 0,317$ отображение имеет три неустойчивые и одну устойчивую неподвижные точки, а также устойчивое многообразие. Сепаратрисы, идущие из точек U_1, \dots, U_6 бесконечно приближаются к устойчивому многообразию M_S . Фазовый портрет в данном случае имеет вид, изображённый на рис. 3б.

4. При $d = d_2$ от неустойчивых узлов U_1 , U_3 и U_5 отделяются неустойчивые многообразия. Тем самым неустойчивые фокусы U_1 , U_3 и U_5 становятся устойчивыми фокусами S'_1 , S'_2 и S'_3 .

5. При $d_2 < d < d_3$; $d_3 \approx 0,3174$ отображение имеет три неустойчивые и четыре устойчивые неподвижные точки, а также одно устойчивое и три неустойчивых многообразия. Сепаратрисы, идущие из точек U_2 , U_4 и U_6 бесконечно приближаются к устойчивому многообразию M_S . Фазовый портрет для данного случая изображён на рис. 4а.

6. При $d = d_3$ три неустойчивых многообразия, расположенные вокруг фокусов S'_1 , S'_2 и S'_3 одновременно сливаются с устойчивым многообразием M_S и пропадают.

7. При $d_3 < d < d_4$; $d_4 \approx 0,3178$ отображение имеет четыре устойчивые неподвижные точки и три неустойчивые. Фазовый портрет в данном случае имеет вид, изображённый на рис. 4б.

8. Последняя бифуркация происходит при $d = d_4$. Неустойчивые седла U_2 , U_4 и U_6 , сливаясь с устойчивыми фокусами S'_2 , S'_3 и S'_1 соответственно, пропадают. Тем самым, при $d > d_4$ отображение имеет лишь одно единственное нулевое устойчивое состояние.

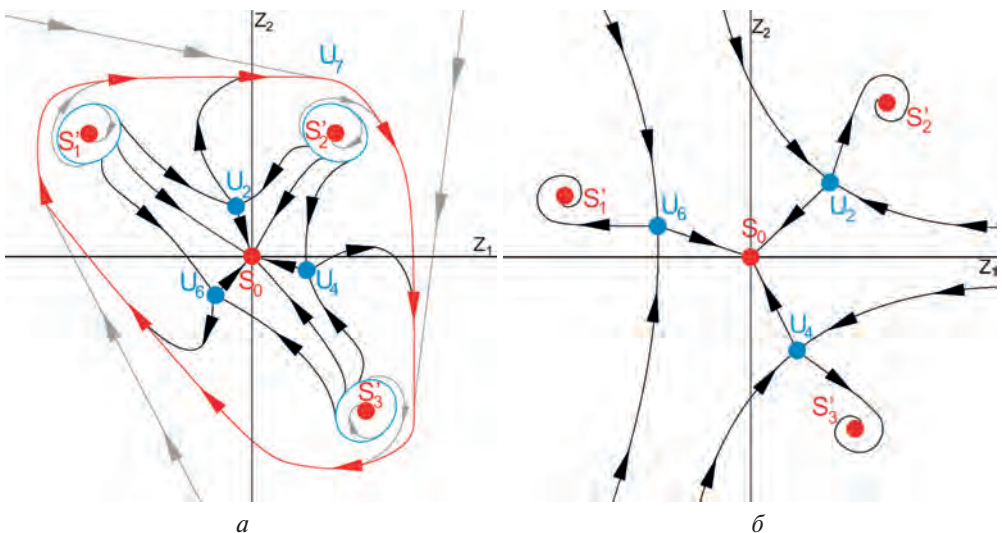


Рис. 4. Фазовые портреты отображения: а — $d_2 < d < d_3$; б — $d_3 < d < d_4$

Полученный сценарий фазовых перестроек верен для любых $(\alpha, \beta) \in A_2$. Отличия от рассмотренного случая состоят лишь в числовых выражениях бифуркационных значений параметра d .

Основные бифуркации в области A_3

При изменении параметра d для любых фиксированных значений пары $(\alpha, \beta) \in A_3$ в фазовом пространстве отображения наблюдается один и тот же сценарий бифуркационных перестроек. Для удобства зафиксируем величины $\alpha = 2,1$ и $\beta = 0,1$ и будем менять значения параметра d . В результате для отображения Φ получим следующую последовательность бифуркаций.

1. При $d < d_1$; $d_1 \approx 0,013$ отображение имеет семь устойчивых и шесть неустойчивых неподвижных точек, а также неустойчивое многообразие M_U , по которому осуществляется движение по часовой стрелке. Схематическое изображение фазового портрета для данного случая можно увидеть на рис. 5а.

2. При $d = d_1$ неустойчивые узлы $U_1, U_2, U_3, U_4, U_5, U_6$ одновременно сливаются с устойчивыми седлами $S_2, S_3, S_4, S_5, S_6, S_1$ и исчезают, образуя тем самым устойчивое многообразие M_S .

3. При $d_1 < d < d_2$; $d_2 \approx 0,017$ отображение имеет одно устойчивое и одну неустойчивое многообразие, движение по которым осуществляется по часовой стрелке. Фазовый портрет в данном случае имеет вид, изображенный на рис. 5б.

4. Последняя бифуркация происходит при $d = d_2$. Устойчивое многообразие M_S приближается к неустойчивому M_U , сливается с ним и пропадает. Тем самым, при $d > d_2$ отображение имеет лишь одно единственное нулевое устойчивое состояние.

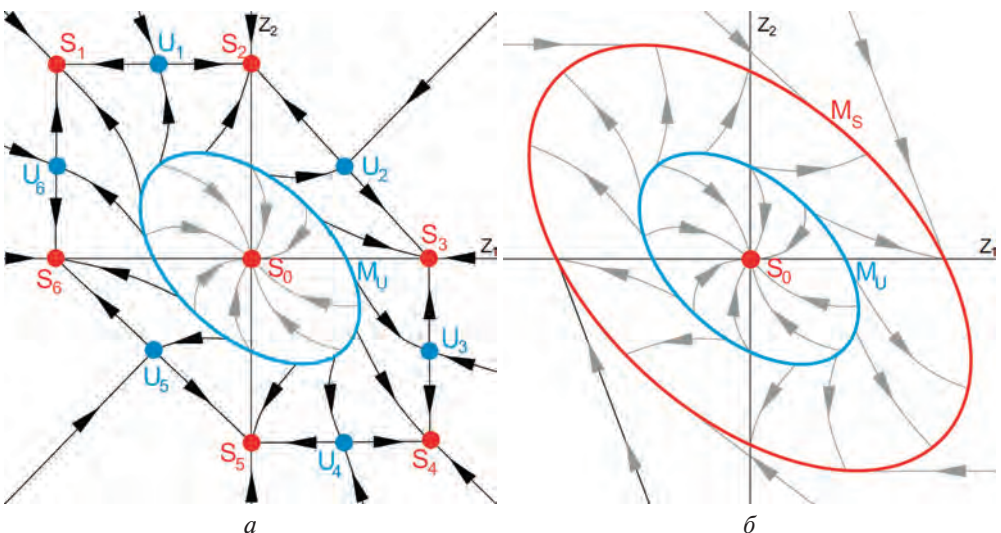


Рис. 5. Фазовые портреты отображения: а — $d < d_1$; б — $d_1 < d < d_2$

Полученный сценарий фазовых перестроек верен для любых $(\alpha, \beta) \in A_3$. Отличия от рассмотренного случая состоят лишь в числовых выражениях бифуркационных значений параметра d .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На координатной плоскости параметров были выделены области, соответствующие различным бифуркационным сценариям. Благодаря исследованию модельного отображения с помощью разработанного приложения, осуществляющего поиск устойчивых режимов, были получены значения начальных параметров, при которых возможно единовременное сосуществование семи устойчивых режимов, а также были подробно рассмотрены основные перестройки, происходящие в фазовом пространстве отображения.

ЛИТЕРАТУРА

- [Глызин и др., 2011a] *Глызин С.Д., Колесов А.Ю., Розов Н.Х.* Релаксационные автоколебания в нейронных системах I // Дифференциальные уравнения. 2011. Т. 47. № 7. С. 919–932.
- [Глызин и др., 2011b] *Глызин С.Д., Колесов А.Ю., Розов Н.Х.* Релаксационные автоколебания в нейронных системах II // Дифференциальные уравнения. 2011. Т. 47. № 12. С. 1675–1692.
- [Глызин и др., 2012] *Глызин С.Д., Колесов А.Ю., Розов Н.Х.* Релаксационные автоколебания в нейронных системах III // Дифференциальные уравнения. 2012. Т. 48. № 2. С. 155–170.
- [Ивановский, Самсонов, 2014] *Ивановский Л.И., Самсонов С.О.* Фазовые перестройки одной двумерной динамической системы с импульсным воздействием // Моделирование и анализ информационных систем. 2014. Т. 21. № 6. С. 179–181.
- [Ивановский, Самсонов, 2015] *Ивановский Л.И., Самсонов С.О.* Динамика одного двумерного отображения и устойчивые режимы сингулярно возмущенной системы нейронного типа // Вычислительная техника в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования. Ч. 2. 2015. С. 121–132.
- [Ивановский, 2015] *Ивановский Л.И.* Динамические свойства одного класса импульсных систем // Вычислительная техника в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования. Ч. 3. 2015. С. 126–131.

STABLE REGIMES OF ONE CLASS OF DYNAMIC SYSTEMS WITH IMPULSIVE INFLUENCES

L. I. Ivanovsky

P.G. Demidov Yaroslavl State University (P.G. Demidov YarSU)

Scientific Center Chernogolovka, Russian Academy of Sciences (SCCh RAS)

Let us consider a mathematical model of dynamic impulse system, which is presented as a ring of three connected and perturbed differential equations with a delay. In the further text researched the questions of existence and stability of relaxational periodic solutions of this

system due to an analysis of two-dimensional mapping. Also the special attention is paid to the number of coexisting stable regimes.

Keywords: bifurcations, phase portraits, relaxational oscillations, stable regimes.

Ivanovsky Leonid Ivanovich — postgraduate student, laboratory researcher, leon19unknown@gmail.com

КВАНТОВАЯ ДИССИПАТИВНАЯ ДИНАМИКА ЧАСТИЦЫ В ДВУХЪЯМНОМ ПОТЕНЦИАЛЕ

Ч. С. Ким¹, Д. С. Пашин², А. М. Сатанин²

¹ Государственный университет Чоннам, Кванджу, Южная Корея

² Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского (ННГУ)

В работе представлены результаты численного моделирования квантовой диссипативной динамики и захвата в резонанс частицы в потенциале с двумя состояниями равновесия. Классическим аналогом такой задачи может служить движение частицы в двухъямном потенциале, где пара состояний равновесия в фазовом пространстве (в отсутствие диссипации) разделены сепаратрисой. Обсуждается вероятность нахождения системы в одном из положений равновесия для квантового и классического случая в зависимости от начальных условий и степени воздействия термостата. Численные расчёты иллюстрируются на примере точно решаемой модели («модель обрезанных петель сепаратрисы»), предложенной авторами.

Работа поддержана РФФИ (проекты № 16-57-51045-НИФ и 16-07-01012).

Ключевые слова: захват в резонанс, динамика вблизи сепаратрисы, задача Арнольда, диссипативная квантовая динамика.

ВВЕДЕНИЕ

Впервые задача о нетривиальной динамике электронов со сложным законом дисперсии вблизи сепаратрисы рассматривалась в работе И. М. Лифшица с сотрудниками (1961). Как известно, в импульсном пространстве траектория электрона в магнитном поле расположена в сечении ферми-поверхности плоскостью, перпендикулярной магнитному полю. В металлах со сложным законом дисперсии может реализоваться ситуация, когда сечение ферми-поверхности содержит седловую точку, разделяющую две петли сепаратрисы. В этом случае при учёте малых возмущений траектории прохождение электроном седла может привести к сложному стохастическому движению, которое целесообразно описывать на вероятностном языке. В работе [Лифшиц и др., 1961] показано, что вероятность попадания электрона в ту или иную область равновесия, т. е. проникновение в области петель, пропорциональна площади фазового пространства, охватываемого петлями сепаратрисы. Выдвинутая идея получила дальнейшее развитие и нашла широкое применение в работах по нелинейной динамике [Арнольд, 1999; Арнольд и др., 2002; Нейштадт, 1975, 1986; Neishtadt, 1997; Зелёный и др., 2013].

Простейшая версия проблемы захвата в резонанс (прохождения через сепаратрису) сформулирована в работе В. И. Арнольда (1963). Рассмотрим одномерное движение частицы в двухъямном потенциале. В этом случае две петли сепаратрисы, которая проходит через вершину потенциального ба-

Чанг Саб Ким — профессор, eskim@jnu.ac.kr

Пашин Дмитрий Сергеевич — аспирант, pashindmi@gmail.com

Сатанин Аркадий Михайлович — доктор физико-математических наук, профессор, sarkady@mail.ru

рьера, разделяющего ямы, охватывают области движения вокруг центров. Траектории, соответствующие движению с энергией выше вершины потенциала, представляют собой замкнутые «восьмёрки». Учтём теперь влияние малого трения (диссипации) на динамику. Пусть нас интересует вероятность, что траектория частицы, начавшей движение из произвольного начального положения на «восьмёрке», попадёт в одну из областей, ограниченных сепаратрисой. Будем для краткости называть поставленную проблему задачей Арнольда.

В данной работе речь пойдёт об обобщении задачи Арнольда на квантовый случай, иными словами, на случай когда частица в двухъямном потенциале описывается с точки зрения квантовой механики. Понятно, что в отсутствие диссипации существуют стационарные состояния частицы в двухъямном потенциале. В квазиклассическом приближении движение частицы в широких ямах (см. ниже) во многом напоминает классическое, за исключением особого движения вблизи сепаратрисы. Изучение особенности этого движения стало одним из новых направлений представленной работы. Вторая особенность квантовой задачи связана с включением диссипации, которая требует введения взаимодействия квантовой частицы с бозонным термостатом [Скалли, Зубайри, 2003]. Как будет показано, матричные элементы, определяющие связь частицы с термостатом, существенно зависят от волновых функций вблизи сепаратрисы, а также от проницаемости барьера, разделяющего ямы. Поэтому захват частицы ямами существенно зависит от вида вероятностей перескока по уровням в яме. Сказанное будет проиллюстрировано и подтверждено прямым численным решением уравнения для матрицы плотности (уравнения Паули), а также точным решением модельной задачи (с обрванными петлями сепаратрисы).

КЛАССИЧЕСКАЯ ЗАДАЧА АРНОЛЬДА

Для дальнейшего представляется целесообразным несколько модифицировать задачу Арнольда. При этом мы сохраним все основные черты модели: наличие двух ям и сепаратрисы (рис 1а и б). Упрощение будет состоять в том, что в разрешённой области имеется явное выражение для потенциала, что позволит получить обозримые формулы для фазовых интегралов (адиабатических инвариантов). Фактически, мы удаляем несущественные части — куски петель сепаратрисы, сохраняя седловую точку, которая и обуславливает сложное поведение траекторий частицы в яме.

Рассмотрим движение частицы в поле $V(x)$, изображённом на рис. 1а и описываемым выражением:

$$V(x) = \begin{cases} -\frac{1}{2}m\omega^2 x^2, & -a \leq x \leq b, \\ \infty, & x < -a, x > b. \end{cases} \quad (1)$$

В таком потенциале сепаратрисы — это прямые линии ($p = \pm m\omega x$, $-a \leq x \leq b$), показанные на рис. 1б, а левая и правая площади, ограниченные сепаратрисами, определены выражениями: $S_L = (m\omega a^2)/4$ и $S_R = (m\omega b^2)/4$.

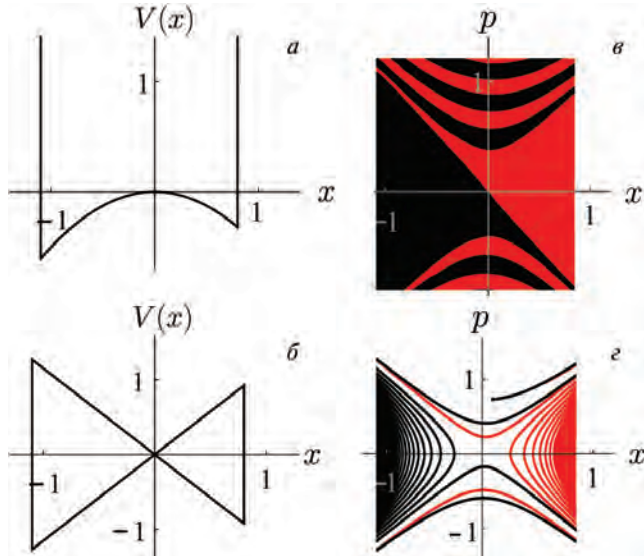


Рис. 1. Пример двухъямного потенциала (а); сепаратриса на фазовой плоскости (б); фазовая плоскость для рассматриваемой системы с диссипацией (в). Чёрным цветом показано множество начальных точек, при котором частица «сваливается» в левое положение равновесия, красным цветом — в правое. Две типичные траектории с одинаковыми начальными условиями, которые «скручиваются» из-за теплового шума к разным состояниям равновесия (г)

В отсутствии трения траектории частицы с энергией вблизи сепаратрисы сильно неустойчивы. На рис. 1в и г показано «разбегание» траекторий, что оправдывает для описания динамики введение меры [Арнольд, 1963; Лифшиц и др., 1961] — вероятности попадания траектории в выбранную ячейку фазового пространства.

Если теперь добавить малое трение, характеризуемое коэффициентом γ , то классические уравнения движения будут иметь вид:

$$\begin{cases} \dot{x} = \frac{p}{m}, \\ \dot{p} = -\frac{\partial V(x)}{\partial x} - m\gamma\dot{x}. \end{cases} \quad (2)$$

Изменение энергии за период, определяемое адиабатическим инвариантом $S = S_L + S_R$, является медленным:

$$\Delta E = -\gamma \int_0^T p\dot{x} dt = -\gamma(S_L + S_R). \quad (3)$$

Выражение (3) аддитивно $\Delta E = \Delta E_L + \Delta E_R$, где

$$\Delta E_L = -\gamma S_L \quad \text{и} \quad \Delta E_R = -\gamma S_R. \quad (4)$$

Поскольку при медленной диссипации частица много времени проводит вблизи контура сепаратрисы, то вероятность захвата пропорциональна площади, охватываемой сепаратрисой [Арнольд, 1963; Лифшиц и др., 1961].

Таким образом, в рассматриваемой задаче вероятности захвата в левую и правую ямы равны, соответственно:

$$P_L = \frac{a^2}{a^2 + b^2} \quad \text{и} \quad P_R = \frac{b^2}{a^2 + b^2}. \quad (5)$$

Строгое обоснование введения понятия меры для подобного класса задач приведено в работах по нелинейной механике [Арнольд, 1999; Арнольд и др., 2002; Нейштадт, 1986; Зелёный и др., 2013; Neishtadt, 1997], где можно найти также ссылки на дополнительные источники.

КВАНТОВАЯ ТРАКТОВКА ЗАДАЧИ АРНОЛЬДА

Квантовым аналогом рассмотренной выше задачи (без трения) будет система, описываемая уравнением Шредингера:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x), \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x), \quad (6)$$

где потенциал определяется выражением (1). Ниже мы представим результаты численного решения (6) и сопоставим результаты с точным решением и квазиклассическим анализом.

В квазиклассическом приближении расстояние между уровнями можно найти приближённо из соотношения:

$$\Delta E_n = S(E_{n+1}) - S(E_n) = \frac{2\pi\hbar}{T(E_n)}, \quad (7)$$

где $T(E)$ — период классического движения с энергией E ; $S(E)$ — площадь, заметаемая траекторией. Рассмотрим поведение периода как функции энергии вблизи сепаратрисы. Если $E > 0$, то

$$T(E) = \frac{2}{\omega} \left(\operatorname{arcsch} \left(b \sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}} \right) + \operatorname{arcsch} \left(a \sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}} \right) \right), \quad (8)$$

которое при $E \ll (m\omega^2 a^2)/2$ ($a \approx b$) приводит к виду

$$T(E) \approx \frac{2}{\omega} \ln \left(2a \sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}} \right). \quad (9)$$

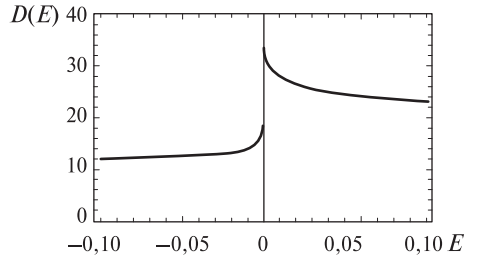
Аналогично, при $E < 0$ получаем для периода колебания в левой и правой ямах:

$$T_L(E) = \frac{2}{\omega} \left(\ln \left(a \sqrt{\frac{m\omega^2}{2|E|}} + \sqrt{\frac{m\omega^2 a^2}{2|E|} - 1} \right) \right). \quad (10)$$

Выражение для $T_L(E)$ получается из соотношения (10) заменой a на b .

При приближении к сепаратрисе эти выражения приводят к логарифмическому росту времени колебания. Таким образом, наивные квазиклассические формулы предсказывают сужение расстояния между уровнями (рис. 2).

Рис. 2. Плотность уровней вблизи классической сепаратрисы для частицы в двухъямном потенциале с точки зрения «наивного» подхода по Бору-Зоммерфельду



Обратимся теперь к точному решению уравнения Шредингера. В случае «перевернутого» осциллятора, как и в случае «прямого», в качестве единицы длины удобно выбрать

$\sqrt{\hbar/(2m\omega)}$, а в качестве единицы энергии $\hbar\omega$. После изменения масштаба уравнение Шредингера в области $-a < x < b$ запишется в виде:

$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{x^2}{4}\psi(x) = \varepsilon\psi(x), \tag{11}$$

причём действие стенок будет эквивалентно граничными условиями $\psi(-a) = 0$ и $\psi(b) = 0$. Отметим, что ниже под a и b понимаются безразмерные величины.

Как известно, общее решение (11) можно выразить через линейную комбинацию двух действительных функций Вебера [Абрамовиц, Стиган, 1979]:

$$\psi(x) = AW(\varepsilon, x) + BW(\varepsilon, -x). \tag{12}$$

Из граничных условий имеем:

$$W(\varepsilon, b)W(\varepsilon, a) - W(\varepsilon, -b)W(\varepsilon, -a) = 0. \tag{13}$$

В общем случае из выражения (13) спектр может быть найден только численно. Обозримое аналитическое решение вблизи сепаратрисы можно получить для симметричной ямы ($a = b$), когда либо $W(\varepsilon, a) = W(\varepsilon, -a)$ (симметричные состояния), либо $W(\varepsilon, a) = -W(\varepsilon, -a)$ (антисимметричные состояния).

В случае широкой ямы ($a \approx b \gg 1$) воспользуемся асимптотическим разложением [Абрамовиц, Стиган, 1979] для функций Вебера:

$$W(\varepsilon, x) \approx \sqrt{\frac{2k(\varepsilon)}{x}} \{s_1(\varepsilon, x) \cos \Phi(\varepsilon, x) - s_2(\varepsilon, x) \sin \Phi(\varepsilon, x)\}, \tag{14}$$

$$W(\varepsilon, -x) \approx \sqrt{\frac{2}{k(\varepsilon)x}} \{s_1(\varepsilon, x) \sin \Phi(\varepsilon, x) - s_2(\varepsilon, x) \cos \Phi(\varepsilon, x)\}, \tag{15}$$

где $\Phi(\varepsilon, x) = \frac{x^2}{4} - \varepsilon \ln x + \frac{\pi}{4} + \frac{1}{2} \arg \Gamma\left(\frac{1}{2} + i\varepsilon\right)$; $\Gamma(x)$ — гамма функция; $k(\varepsilon) = \sqrt{1 - e^{2\pi\varepsilon}} - e^{\pi\varepsilon}$; $s_1(\varepsilon, x) \approx 1 + \frac{v_2}{2x^2}$; $s_2(\varepsilon, x) \approx \frac{u_2}{2x^2}$; коэффициенты u_2 и v_2 определены соотношением:

$$u_2 + iv_2 = \operatorname{Re} \left[\frac{\Gamma\left(\frac{5}{2} + i\varepsilon\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + i\varepsilon\right)} \right].$$

Для симметричного случая получаем

$$\operatorname{tg}(\Phi(\varepsilon, a)) = \frac{k(\varepsilon)s_1(\varepsilon, a) - s_2(\varepsilon, a)}{s_1(\varepsilon, a) + k(\varepsilon)s_2(\varepsilon, a)} \quad (16)$$

(аналогичная формула для антисимметричного случая здесь не приводится). Решения (16) существенно зависят от знака ε . Нетрудно показать, что при $\varepsilon > 0$ и малых $\varepsilon \ll 1$ правая часть (16) медленно зависит от ε . Воспользуемся теперь тем, что при переходе от уровня ε_n к ε_{n+1} изменение фазы в аргументе функции в левой части (16) равно π . Тогда, используя разложение фазы $\Phi(\varepsilon, a)$ при $\varepsilon \ll 1$, найдём минимальное расстояние между уровнями:

$$\Delta E_n = \frac{\pi \hbar \omega}{\ln a - \frac{1}{2} \psi\left(\frac{1}{2}\right)}, \quad (17)$$

где $\psi(1/2)$ — дигамма-функция [Абрамовиц, Стиган, 1979].

Таким образом, квазиклассическое рассмотрение неприменимо для малых энергий. Как видно, имеется минимальное расстояние между уровнями, которое определяется параметрами потенциала.

Приведём теперь результаты численного решения, которые далее также можно будет использовать при рассмотрении квантовой релаксации. Для моделирования использовались параметры $a = 60$, $b = 45$ (в безразмерных единицах), позволяющие выполнить условия квазиклассичности для состояний вблизи классической сепаратрисы. При таких параметрах для гамильтониана (6) были найдены собственные функции и соответствующие им уровни энергий (рис. 3а). Для уровней, находящихся далеко от сепаратрисы, ниже по энергии, собственные функции сильно локализованы в одной из ям. Обозначим номер уровня с максимальной энергией, волновая функция которого, считаем, полностью равна нулю в одной из ям, через n_s . Количество уровней, находящихся в левой или правой яме, равны соответственно $N_L = 823$, $N_R = 460$. Вблизи классической сепаратрисы, как и ожидалось, происходит сгущение уровней (рис. 3б).

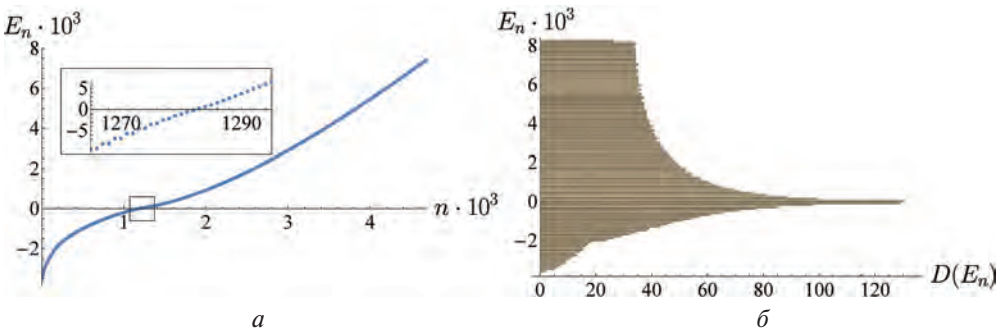


Рис. 3. Зависимость энергии E_n от номера уровня n (а); гистограмма распределения плотностей уровней по энергии (б)

ВЛИЯНИЕ ДИССИПАЦИИ. УРАВНЕНИЕ ПАУЛИ

В классической теории задача о захвате в одну из ям обусловлена влиянием возмущения на гамильтонову систему, в частности, влиянием трения. Квантовая диссипативная динамика частицы описывается матрицей плотности:

$$\rho(x, x', t) = \sum_{n, n'} \psi_n(x) \rho_{n, n'}(t) \psi_{n'}^*(x').$$

Учёт диссипации требует введения взаимодействия квантовой частицы с бозонным термостатом [Скалли, Зубайри, 2003]. Обычно эта связь выбирается линейной по координате частицы:

$$\hat{V}_{int} = \hat{x} \sum_i k_i \hat{X}_i, \quad (18)$$

где \hat{x} — оператор координаты рассматриваемой системы; \hat{X}_i — оператор координаты для бозонов термостата; k_i — коэффициент связи. Будем считать, что частотный спектр бозонного термостата достаточно широкий, а коэффициент связи k_i медленно зависит от номера моды. Уравнение для матрицы плотности подсистемы после усреднения по состояниям бозонного термостата хорошо известно [Блум, 1983; Скалли, Зубайри, 2003]. Для нашего рассмотрения существенно, что недиагональные элементы матрицы плотности меняются как $\rho_{n, n'}(t) \approx \exp(-i\omega_{n, n'}t)$, т. е. являются «быстрыми» переменными и, соответственно, быстро релаксируют. Следовательно

$$\rho(x, x', t) = \sum_{n, n'} \psi_n(x) P_n(t) \psi_{n'}^*(x'), \quad (19)$$

где введено обозначение $P_n(t) = \rho_{n, n}(t)$ — вероятность найти частицу на уровне с номером n . Зависимость вероятности населённости уровней от времени $P_n(t)$ подчиняется кинетическому уравнению (master-equation или уравнение Паули):

$$\frac{\partial P_n}{\partial t} = \sum_m W_{m \rightarrow n} P_m - P_n \sum_m W_{n \rightarrow m}, \quad (20)$$

где $W_{m \rightarrow n}$ — вероятность перехода системы из состояния $|m\rangle$ в состояние $|n\rangle$ в единицу времени, которые определяются матричными элементами оператора координаты на собственных функциях гамильтониана (6). Если связь частицы с термостатом подчиняется соотношению (18), то матричные элементы перехода при нулевой температуре определены выражением:

$$W_{m \rightarrow n} = \frac{1}{\hbar^2} |\langle n | \hat{x} | m \rangle|^2 \int_0^\infty d\omega g(\omega) k^2(\omega) \int_{-\infty}^\infty dt \exp\{-i(\omega_{n, m} + \omega)t\}, \quad (21)$$

где $g(\omega)$ — спектральная плотность бозонных мод. Видно, что при нулевой температуре соотношение (21) даёт отличные от нуля вероятности перехода

$$W_{m \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |\langle n | \hat{x} | m \rangle|^2 g(\omega_{m, n}) k^2(\omega_{m, n}), \quad (22)$$

только при условии, что $\omega_{m,n} > 0$, т. е. учитываются только процессы, идущие «вниз» по энергии.

Понятно, что вблизи сепаратрисы эти матричные элементы существенно определяются видом волновых функций вблизи неё; они также зависят от барьера, разделяющего ямы. Поэтому захват частицы в ямы зависит от вида вероятностей перескока по уровням.

Определим вероятность обнаружить частицу в левой яме как

$$P_L(t) = \int_{-a}^0 \rho(x, x, t) dx = \sum_n P_n(t) \cdot \int_{-a}^0 |\psi_n(x)|^2 dx. \quad (23)$$

Вероятность обнаружить частицу в правой яме $P_R(t)$ получается из выражения (23) заменой пределов интегрирования $(-a, 0)$ на $(0, b)$.

Вычисление матричных элементов получено численным решением уравнения Шредингера, а временная эволюция $P_n(t)$ — решением уравнения Паули. Результаты численного решения (20) приведены на рис. 4.

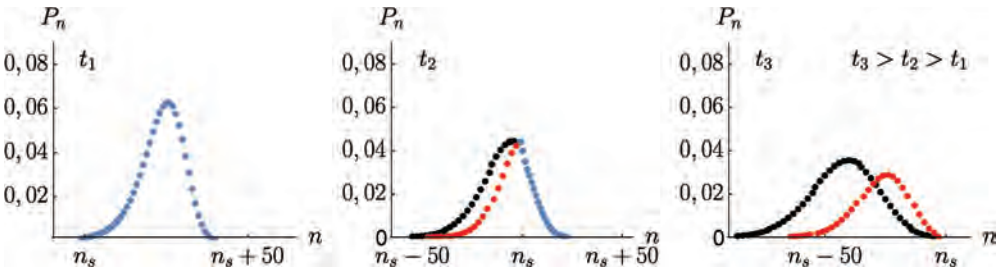


Рис. 4. Заселённость уровней в разные моменты времени. Чёрным цветом показаны уровни, для которых $P_L(t) > 0,99$, красным цветом — уровни, для которых $P_L(t) > 0,99$; n_s — ближайший к сепаратрисе уровень по энергии

Численное моделирование показало, что для любой начальной заселённости, созданной выше энергии, соответствующей сепаратрисе, система релаксирует в ту или иную яму. При большом барьере отношение вероятностей нахождения в одной из ям пропорционально отношению числа уровней в каждой из ям. В частности, при указанных выше параметрах вероятность нахождения в левой яме равна $P_L = N_L / (N_L + N_R) = 0,64$.

ВЫВОДЫ

Ранее было показано, что в классическом случае при движении частицы в двухъямном потенциале вероятность захвата частицы в одно из положений равновесия определяется площадью области, заматаемой сепаратрисой. Представленные в данной работе аналитические и численные расчёты позволяют трактовать квантовую диссипативную динамику частицы, движущейся в потенциале с двумя состояниями равновесия. При этом в процессе захвата в резонанс частица, «сбрасывая» энергию, неминуемо должна пройти

группу уровней вблизи сепаратрисы. В работе показано, что плотность таких уровней велика, хотя расстояние между ними логарифмически медленно зависит от ширины ямы. Как оказалось, в квантовом случае вероятность захвата пропорциональна числу уровней в соответствующей яме. Представленные результаты численного моделирования согласуются с результатами, полученными путем анализа точнорешаемой модели («модель обрезанных петель сепаратрисы»).

ЛИТЕРАТУРА

- [Абрамовиц, Стиган, 1979] *Абрамовиц М., Стиган И.* Справочник по специальным функциям. М.: Наука, 1979. 832 с.
- [Арнольд, 1963] *Арнольд В. И.* Малые знаменатели и проблемы устойчивости движения в классической и небесной механике // *Успехи мат. наук.* 1963. Т. 18. Вып. 6(114). С. 91.
- [Арнольд, 1999] *Арнольд В. И.* Математические методы классической механики. М: Эдиториал УРСС, 1999. 472 с.
- [Арнольд и др., 2002] *Арнольд В. И., Козлов В. В., Нейштадт А. И.* Математические аспекты классической и небесной механики. 2-е изд. М.: Эдиториал УРСС, 2002. 416 с.
- [Блум, 1983] *Блум К.* Теория матрицы плотности и её приложения. М.: Мир, 1983. 248 с.
- [Зелёный и др., 2013] *Зелёный Л. М., Нейштадт А. И., Артемьев А. В., Вайнштейн Д. Л., Малова Х. В.* Квазиadiaбатическое описание динамики заряженных частиц в космической плазме // *Успехи физ. наук.* 2013. Т. 183. № 4. С. 365–415.
- [Лифшиц и др., 1961] *Лифшиц И. М., Слуцкий А. А., Набутовский В. М.* Об особенностях движения заряженных частиц в переменном и неоднородном электромагнитном поле // *Журн. эксперим. и теорет. физики.* 1961. Т. 41. Вып. 3. С. 939.
- [Нейштадт, 1975] *Нейштадт А. И.* Прохождение через сепаратрису в резонансной задаче с медленно изменяющимися параметрами // *Прикладная математика и механика.* 1975. Т. 39. № 4. С. 621.
- [Нейштадт, 1986] *Нейштадт А. И.* Об изменении адиабатического инварианта при переходе через сепаратрису // *Физика плазмы.* 1986. Т. 12. Вып. 8. С. 992.
- [Скалли, Зубайри, 2003] *Скалли М. О., Зубайри М. С.* Квантовая оптика. М.: Физматлит, 2003. 512 с.
- [Neishtadt, 1997] *Neishtadt A. I.* Scattering by resonances // *Celestial Mech. and Dynamical Astronomy.* 1997. V. 65. P. 1–20.

QUANTUM DISSIPATIVE DYNAMICS IN A DOUBLE-WELL POTENTIAL

C. S. Kim¹, D. S. Pashin², A. M. Satanin²

¹ Chonnam National University, South Korea

² Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod (NNGU), Nizhny Novgorod

The results of analytical investigation and numerical simulation of quantum dissipative dynamics a particle in a potential with two equilibrium states is presented. A classical analogue of this problem is the motion and capture into the resonance a particle in a double-well potential, where two states of equilibrium in the phase space are separated by a separatrix.

The probability of finding the system in one of states of equilibrium for the quantum and the classical case, depending on initial conditions and noise, is discussed. Numerical calculations are illustrated by the example of an exactly solvable model (“model cut off loops of a separatrix”), proposed by the authors.

Keywords: resonance capture, the motion near the separatrix, Arnold’s problem, dissipative quantum dynamics.

Kim Chang Sub— professor, cskim@jnu.ac.kr

Pashin Dmitrii Sergeevich — graduate student, pashindmi@gmail.com

Satanin Arkady Mihailovich — doctor of physical and mathematical sciences, sarkady@mail.ru

АЛГОРИТМЫ ПЛАНИРОВАНИЯ И ЭФФЕКТИВНОСТЬ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ СУПЕРКОМПЬЮТЕРА «ЛОМОНОСОВ»

С. Н. Леоненков¹, С. А. Жуматий²

¹ Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова (МГУ)

² Научно-исследовательский вычислительный центр Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова (НИВЦ МГУ)

Суперкомпьютерный центр Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова ежедневно обслуживает сотни индивидуальных пользователей и научных групп. В центре две основные установки — суперкомпьютеры «Ломоносов» и «Ломоносов-2». В статье рассмотрены типичные профили очереди заданий на примере суперкомпьютера «Ломоносов», представлен обзор средних величин ежедневной загрузки и графики утилизации процессорного времени системы. Приведён анализ реального использования менеджера ресурсов SLURM (Simple Linux Utility for Resource Management). Предложен набор метрик отслеживания эффективности планирования процессорного времени суперкомпьютера. Разработаны оптимизации к внешнему планировщику, оценена эффективность применения лимита процессорно-часов.

Ключевые слова: суперкомпьютер «Ломоносов», метрики алгоритмов планирования, SLURM, алгоритмы планирования, Backfill.

ВВЕДЕНИЕ

Пользователи высокопроизводительных кластеров имеют различные права доступа, запрашивают от одного до многих тысяч процессоров для запуска своих задач, время выполнения которых колеблется от нескольких секунд, многих часов или даже дней. Решение задачи удовлетворения всех запросов пользователей в режиме реального времени в рамках ограниченных мощностей является краеугольным камнем для системных администраторов загруженных вычислительных систем. Суперкомпьютер (с/к) «Ломоносов», используемый для исследований, которые проводят учёные и студенты Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова (МГУ), занимает второе место в рейтинге «Топ 50» суперкомпьютеров, установленных на территории СНГ и показавших наибольшую производительность на тесте Linpack (по состоянию на 29 марта 2016 г.), и удерживает 94-е место в авторитетном международном рейтинге самых высокопроизводительных вычислительных систем TOP500 (по состоянию на ноябрь 2015 г.).

В текущей конфигурации «Ломоносова» доступны восемь разделов, количество узлов в каждой колеблется от 1 до 4096. В среднем в день выполняется от 200 до 400 задач, которые ставят на запуск 30–50 разных пользователей, причём каждый год активно используется около 400 аккаунтов, и эти числа

Леоненков Сергей Николаевич — аспирант, leonenkov@parallel.ru

Жуматий Сергей Анатольевич — ведущий научный сотрудник, кандидат физико-математических наук, serg@parallel.ru

не являются пределом. Чтобы справляться с ежедневно растущими нагрузками на суперкомпьютер «Ломоносов», на нём используется система SLURM (Simple Linux Utility for Resource Management).

SLURM — один из самых перспективных менеджеров ресурсов суперкомпьютеров. Его основные преимущества — огромная масштабируемость и портируемость. На суперкомпьютере «Ломоносов», так же, как и на многих ведущих системах списка «Топ 500», используется встроенный плагин-планировщик Backfill, который оперирует одноименным алгоритмом планирования. Исследования показали, что алгоритм позволяет повысить плотность использования ресурсов суперкомпьютеров примерно на 20 % и уменьшить среднее время ожидания постановки задач на исполнение. Растущее количество пользователей в совокупности с большим количеством задач ставит перед суперкомпьютерным комплексом МГУ задачу повысить количество ресурсообеспеченных пользователей в каждый конкретный момент; другой целью в процессе работы стало упрощение системы приоритетов SLURM и повышение удобства администрирования кластеров.

На системах суперкомпьютерного комплекса МГУ используются разные версии SLURM. Например, на с/к «Ломоносов» — версия 2.5.6, а на с/к «Ломоносов-2» — версия 15.08.

1. ПРЕДМЕТНАЯ ОБЛАСТЬ

Система SLURM — это высокомасштабируемый, отказоустойчивый менеджер кластеров и планировщик заданий для больших систем вычислительных узлов. Ливерморская национальная лаборатория им. Э. Лоуренса (Lawrence Livermore National Laboratory, LLNL) в 2001 г. начала разработку SLURM для управления ресурсами собственных суперкомпьютеров [Jette, Grondona, 2003; <http://slurm.schedmd.com/slurm.html>]. В данный момент менеджер кластеров SLURM используется на многих суперкомпьютерах из рейтинга TOP500, включая половину суперкомпьютеров из первой десятки рейтинга (по состоянию на ноябрь 2013). Исходный код написан на языке программирования С. Система доступна по лицензии GNU GPL V2 и имеет хорошую документацию. Две главные цели, которые ставили перед собой разработчики, — это высокая масштабируемость и портируемость SLURM.

В основе SLURM реализована иерархическая архитектура управления суперкомпьютером. Главным агентом менеджера является основной контроллер, который содержит управляющий агент `slurmctld`. В некоторых архитектурах для повышения отказоустойчивости менеджера основному контроллеру может соответствовать резервный. Основной задачей `slurmctld` является выделение ресурсов под задачи, которые были поставлены пользователями.

Для управления каждым отдельным узлом на них развёрнуты демоны `slurmd`. Они служат для запуска и управления заданием на самом узле (получение задания от основного контроллера, запуск уже непосредственно на ядрах) и мониторинга его состояния.

Менеджер SLURM спроектирован для гетерогенных кластеров с допустимым количеством процессоров до 10 миллионов штук. SLURM успешно

апробирован и используется на суперкомпьютере с более чем 98 000 вычислительными узлами. Пользователи суперкомпьютера, который управляется с помощью SLURM, могут ставить на исполнение 1000 задач в секунду. Менеджер может исполнять до 500 задач в секунду (в зависимости от конфигурации и оборудования системы).

Пользователи SLURM имеют большую свободу в установке настроек для каждой отдельной задачи. Можно изменять, в том числе, размер задачи, лимит по времени выполнения.

Одним из основных преимуществ SLURM является модульность, доступны десятки дополнительных плагинов. Написаны стандартные планировщики, один из которых (`sched/backfill`) используется для оптимизации работы суперкомпьютера «Ломоносова». При возникновении ситуации, когда стандартные алгоритмы планирования полностью не устраивают системного администратора, можно легко ввести в эксплуатацию собственный плагин, используя стандартные интерфейсы (`wiki` и `wiki2`), которые предоставляет SLURM.

Системный администратор может достаточно гибко настраивать логическую конфигурацию вычислительной системы, которую будет поддерживать SLURM, и легко варьировать множество параметров кластера изменением конфигурационного файла или применением соответствующих команд.

Специфика использования менеджера на суперкомпьютере «Ломоносов» предполагает расширение функциональности программного комплекса SLURM для качественного администрирования и повышения эффективности системы.

1.1. Алгоритм Backfill

На суперкомпьютере «Ломоносов» применяется стандартный планировщик и алгоритм Backfill. Этот алгоритм планирования используется на большом количестве кластеров и доказал свою высокую эффективность.

В основе алгоритма Backfill лежит принцип First Come First Served (первым прибыл — первым обслужен). Это означает, что задачи запускаются в том же порядке, в котором они были поставлены в очередь (при доступности ресурсов для исполнения каждой конкретной задачи). В процессе работы алгоритма Backfill обрабатывается очередь задач, ожидающих запуска на выполнение. Задачи в очереди упорядочены по их приоритету и времени постановки в очередь. Как только система SLURM сигнализирует, что появилась новая задача или одна из задач закончила выполнение и освободила ресурсы, алгоритм (при наличии необходимого количества свободных узлов для запуска первой в очереди задачи) выбирает эту задачу из очереди и запускает её на исполнение. В противном случае, если для запуска первой в очереди задачи свободных узлов не хватает, планировщик пытается совершить «уплотнение» очереди: взять следующую в очереди задачу и поставить её на выполнение при условии, что для запуска имеется необходимое количество свободных узлов и не нарушатся права остальных задач в очереди на запуск (т. е. их запуск не будет задержан) [Techiouba et al., 2008].

Стандартный цикл работы планировщика на примере одной партиции (раздела) выглядит, как представлено ниже [Lipari, 2012].

Псевдокод стандартного цикла планировщика

1. Создание очереди заданий для партиции.
2. Сортировка заданий по приоритету.
3. Удаление из очереди задачи, которые не представляется возможным запустить.
4. Нахождение узлов для запуска заданий.
5. «Уплотнение», если требуется.
6. Запуск заданий.
7. Обновление очереди и статусов задач и узлов.
8. Возврат к п. 2.

1.2. Опыт эксплуатации суперкомпьютера «Ломоносов» и менеджера ресурсов SLURM

Несмотря на все плюсы SLURM, НИВЦ МГУ столкнулся с некоторыми проблемами при использовании менеджера на суперкомпьютере «Ломоносов», который обладает базой из более 1000 различных активных пользователей (ежегодно). На суперкомпьютере «Ломоносов» одновременно работают в среднем 20 уникальных пользователей. Типичная ситуация на суперкомпьютере «Ломоносов» — это примерно 100 исполняемых задач и 200 задач в очереди в каждый момент времени. Утилизация процессорного времени на примере очереди regular4 (состоит из 4096 узлов, самая большая очередь суперкомпьютера «Ломоносов») превышает 80 %. Интересным является график распределения длительности ожидания постановки на исполнение задач пользователей. Как видно на рис. 1, задачи в среднем ожидают в очереди более 22 часов. Это очень много, потому что даже для получения первых результатов работы программы надо ждать следующего дня. (По оси абсцисс задачи отсортированы по времени постановки в очередь. На графике есть достаточное количество ярко выраженных пиков, соответствующих большим задачам, у которых количество запрашиваемых узлов больше 512.)

Если обратить внимание на среднюю загруженность очереди regular4 (рис. 2), то можно заметить резкие перепады в графике количества задач, которые находятся в очереди в конкретный момент (красная линия). Это связано с этапом «уплотнения» алгоритма Backfill, потому что, когда мы резервируем будущее время под «большую» задачу, то рано или поздно (чем ближе к времени резервирования, тем сильнее) это начинает тормозить продвижение других задач в виду того, что им требуется хоть и мало процессоров, но на большое время, что идёт в разрез с политикой алгоритма. В связи с этим новые задачи начинают накапливаться в очереди быстрее, повышая тем самым её загруженность (синяя линия). Отдельно интересным к рассмотрению будет рис. 3, на котором изображена средняя суммарная загруженность кластера в количестве используемых (красная линия) и запрошенных (синяя линия) узлах в данный конкретный момент. Можно заметить, что он не соотносится

напрямую с рис. 2. Это происходит потому, что список задач очереди содержит в себе совершенно разные по количеству запрошенного времени и количеству узлов задачи.

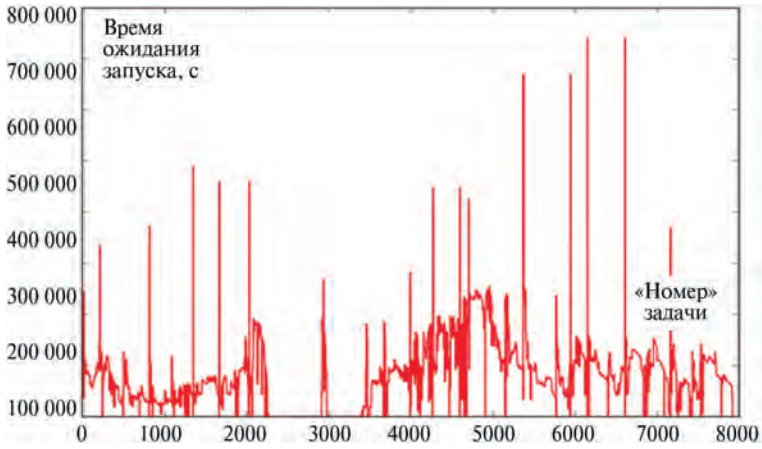


Рис. 1. Время ожидания запуска отдельных задач, реальная статистика. Очередь regular4

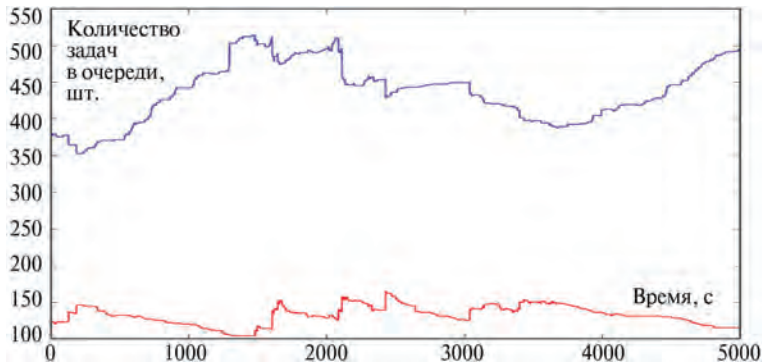


Рис. 2. Средняя загрузка очереди regular4

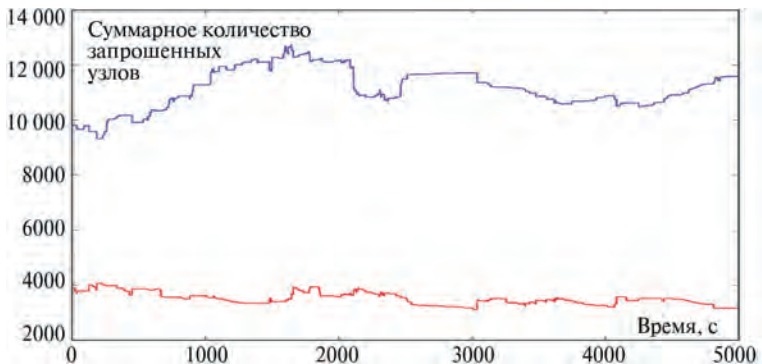


Рис. 3. Среднее суммарное количество запрошенных узлов. Очередь regular4

Из-за такой приличной нагрузки Научно-исследовательский вычислительный центр Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова (НИВЦ МГУ) столкнулся с трудностями ограниченности набора настроек SLURM.

Одной из серьёзных проблем планирования процессорного времени, которая уже была выделена в начале раздела, является факт, что каждый пользователь слишком долго ждёт начала своей работы даже при использовании планировщика, который основан на алгоритме Backfill. Это вызывает очень распространённую ситуацию: всякий пользователь ставит в очередь несколько заданий (в осязаемом количестве случаев с целью отладки работы своей программы) и ждёт. Когда первая задача пользователя запускается, верхняя часть очереди уже заполнена другими его задачами, так что большинство пользователей ожидают одного. Эта проблема не может быть решена установкой ограничения на максимальное количество выполняемых задач пользователя — эффективность очереди будет значительно снижена, когда очередь содержит много коротких и/или небольших задач.

Мы предлагаем новый тип лимитов для SLURM — лимит процессоро-часов для каждого пользователя. (Процессоро-часы рассчитываются как время, на которое были выделены процессоры на конкретные задачи одного пользователя, умноженное на их количество.) Это позволяет управлять количеством процессоро-часов (или ядро-часов, или узло-часов) всех исполняемых задач и задач для каждого пользователя, которые уже стоят в очереди. Таким образом, каждый пользователь может запускать, например, одну задачу для большого количества узлов на короткое время, или больше задач на меньшее количество процессоров.

Другим недостатком SLURM является неспособность установки большинства ограничений для разделов по умолчанию. Например, максимальное количество запущенных заданий может быть установлено только для всего кластера на одного пользователя. Если у нас есть около 1000 пользователей, значение лимитов (так называемый Account в SLURM) для каждого пользователя добавляется в течение одной минуты. Во время этой операции клиентские команды (sbatch, sinfo и т.д.) не могут быть выполнены. Это значит, что встроенная система лимитов SLURM полностью непригодна для наших нужд, и мы должны реализовывать её внешними плагинами.

Для повышения эффективности использования суперкомпьютера «Ломоносов» мы должны добавить в планировщик некоторые другие функции. В целях повышения прозрачности системы приоритетов было решено отказаться от плагина Multifactor, реализующего систему приоритетов в SLURM по умолчанию, и добавить новую систему приоритетов во внешний планировщик. Новая система основана на расслоении пользователей — администратор организует систему приоритетов задач пользователей разделением на уровни (от 0 до 65 536 в нашем случае), формируя группы из высокого и низкого приоритета пользователей. Ежегодный опрос пользователей суперкомпьютера показал, что новая система приоритетов — очень эффективный инструмент, используя который системные администраторы могут, например, поставить недобросовестным пользователям уменьшенный приоритет.

Для оптимизации работы планировщика SLURM было решено внести следующие дополнения:

- 1) учёт и контроль процессоро-часов, запрошенных каждым пользователем;
- 2) создание прозрачной системы приоритетов с возможностью настройки в режиме реального времени;
- 3) реализация возможности использования узлов из разных разделов для пользователей с определённым приоритетом;
- 4) добавление квот по времени: определённое число процессоро-часов в неделю/месяц/год;
- 5) реализация возможности использования разных алгоритмов планирования в разных очередях.

Все эти дополнения не могут быть реализованы без расширения функциональности SLURM. Система поддерживает интерфейсы для внешних планировщиков. Есть несколько коммерческих планировщиков (например, MOAB [<http://www.adaptivecomputing.com/products/hpc-products/moab-hpc-suite-enterprise-edition/>]), которые могут быть использованы совместно со SLURM. MOAB имеет очень широкие возможности, но является коммерческим приложением. Другой планировщик — MAUI [<http://www.adaptivecomputing.com/support/download-center/maui-cluster-scheduler/>], также может использоваться системой SLURM, но он больше не поддерживается, и через некоторое время будет закрыт компанией-владельцем, которая сейчас разрабатывает MOAB. По этой причине использование MAUI не является безопасным, и, кроме того, не предоставляет все необходимые функции.

Что касается opensource планировщиков для SLURM, мы нашли только два проекта, которые пытаются реализовать плагины SLURM. Первый называется `slurm-spank-plugin` [<https://code.google.com/p/slurm-spank-plugins/w/list/>], но он не развивается с 2011 г. Проект состоит из пяти различных плагинов для дополнения функций SLURM. Второй проект называется `IPSCHEM` [<http://code.google.com/p/slurm-ipsched/>], он направлен на поддержку новых функций планировщика SLURM (ориентирован на взаимодействие CPU и GPU) и не имеет нужных нам функций.

Исходя из вышеперечисленного обзора технических решений, был реализован свой собственный планировщик, чтобы наиболее эффективно использовать вычислительные возможности суперкомпьютера «Ломоносов» с его характерной высокой рабочей нагрузкой и постоянно растущей пользовательской базой.

2. ИНТЕРФЕЙС SLURM/WIKI2

Стандартные интерфейсы `wiki/wiki2` были изначально разработаны для поддержки внешних планировщиков: Maui Cluster Scheduler™ и Moab® HPC Suite. Внешне они представляют собой подобие плагинов самого штатного планировщика, даже использует те же примитивы и функции, но отличие состоит в том, что вся логика планировщика полностью отсутствует и оставлена

в компетенции внешнего модуля, который и отвечает за алгоритмы планирования [Jackson et al., 2007].

Алгоритм работы wiki2 завязан на обмене сообщениями с внешним планировщиком. Между ними налажены два канала связи: первый служит для передачи команд и получения ответов, второй — для информирования внешнего планировщика о событиях, произошедших в системе.

Базовый набор команд внешнего планировщика: CANCELJOB, GETJOBS, JOBMODIFY, NOTIFYJOB, STARTJOB, INITIALIZE, REQUEUEJOB, SUSPENDJOB, RESUMEJOB, SIGNALJOB. Каждая из них запрашивает какую-либо информацию от wiki2 или передаёт указание на изменение состояния конкретной задачи. В канале «событий» внешний планировщик может получить лишь два типа сообщения: «1234» или «1235». Первое соответствует изменению параметра задания, второе — изменению в структуре/конфигурации SLURM.

Данная архитектура (рис. 4) позволяет в полной мере воссоздать функционал штатного планировщика и дополнить его новыми свойствами. Основная реализация дополнения (написание нового внешнего планировщика) представляет собой модуль, содержащий две части: коммуникационный менеджер и сам внешний планировщик, который будет нести в себе всю логику алгоритма планирования [Novotny, 2009].



Рис. 4. Архитектура решения

3. ЭФФЕКТИВНОСТЬ ОДНОЙ ИЗ ОПТИМИЗАЦИЙ НА ИСТОРИЧЕСКИХ ДАННЫХ

Предлагаемое нами решение было протестировано на исторических данных очереди regular4. Лимит процессоро-часов был выбран так, чтобы позволить пользователям комфортно использовать потенциал системы, но в то же время ограничить возможность отдельному пользователю почти полностью занять часть кластера. Например, для очереди regular4 лимит процессоро-часов равен 81 920. Этот предел дал нам возможность перераспределить до 2,7 % от месячного процессорного времени на работу других пользователей, что позволило увеличить количество ресурсообеспеченных пользователей.

Кроме того, внешний модуль с новым планировщиком был протестирован в сравнении со стандартным плагином-планировщиком SLURM (на исторических данных об очереди regular4 суперкомпьютера «Ломоносов»), и показал хорошее ускорение для времени старта «первой» задачи каждого пользователя (запуск до ~9 % быстрее по сравнению со стандартным плагином), в то время как общая эффективность очереди почти не изменилась (только 0,2 % по сравнению со стандартным плагином). Сравнение SLURM со стандартным плагином Backfill и с нашим внешним планировщиком показано в таблице. Набор задач для тестов — реальный, это задачи, которые были запущены в период с октября (2014) по декабрь (2014) в очереди regular4 суперкомпьютера «Ломоносов». Почти без падения общей производительности планирования мы добились ощутимых результатов в ускорении времени начала первых задач каждого пользователя.

Тесты на реальных данных

Эксперименты	Набор данных (ускорения)	
	Задержка старта (общая)	Задержка старта (первой задачи)
Backfill	0,998	1
Backfill + Лимит	1	0,907

Предлагаемое решение было разработано для решения проблем, с которыми мы столкнулись во время эксплуатации SLURM. Оно может эксплуатироваться любыми группами пользователей, которые используют SLURM для управления суперкомпьютером. Решение имеет открытый исходный код и может быть быстро адаптировано для каких-либо других требований. Также оно имеет хорошую портируемость благодаря использованию протокола wiki2. С помощью нашего планировщика эффективность суперкомпьютерного комплекса может быть повышена. Наши нововведения делают управление суперкомпьютером более гибким [Leonenkov, Zhumatiy, 2015a, b].

4. МЕТРИКИ ЭФФЕКТИВНОСТИ

В процессе разработки стало ясно, что обойтись двумя метриками для оптимизации работы планировщика SLURM невозможно, поэтому был выделен набор метрик, на которые будет сделан упор при оценке эффективности новых расширений. Самой важной из них является утилизация процессорного времени, это основной ресурс суперкомпьютера. Остальные метрики представляют собой факторы, влияющие на «удобство» пользователей в процессе эксплуатации суперкомпьютера. Например, повышение количества ресурсообеспеченных пользователей в данный конкретный момент (при сохранении высоких показателей основной метрики — утилизации процессорного времени) позволяет уменьшить время ожидания старта первой задачи каждого пользователя, что, как уже было описано в предыдущих разделах, повышает скорость обратной связи системы с пользователем. (Это удобно при отладке программы или, например, исследователь сможет начать работу над первой порцией полученных после вычислений данных.)

Список оптимизационных метрик

1. Утилизация процессорного времени.
2. Скорость старта первой задачи пользователей с момента запуска.
3. Отношение количества запущенных задач к единице времени («скорострельность»).
4. Количество пользователей, обслуженных в единицу времени.
5. Суммарное время до предсказанного старта каждой задачи в очереди.
6. Отношение runtime к estimates; аналог 5).
7. Среднее время постановки задачи на исполнение.
8. Суммарное время простоя узлов очереди («потерянные процессорочасы»); аналог 1).
9. Скорость прохождения задач пользователей на запуск (среднее суммарное время от постановки в очередь до запуска заданий каждого пользователя, или же отдельно по заданиям).
10. Скорость запуска типов задач (маленькие/большие/средние).

Дальнейшие расширения будут представлять собой решение задачи оптимизации для набора метрик (выбранных из списка) при контроле над всеми остальными метриками списка (их значение не должно выходить за рамки выбранных окон). Изучение задачи оптимизации планирования процессорного времени по выбранному множеству метрик невозможно без определения набора конкретных примеров загруженности очереди, типов и размеров задач, типа вычислительных узлов и системы планирования. Возможно изучение этого вопроса и на исторических данных, но ввиду частого изменения профиля очередей и зависимости данных от конкретного времени, когда происходило планирование и постановка задач в очередь, это было бы не самым эффективным решением. Исходя из перечисленного, было принято решение создать набор тестов, включающий в себя типы, которые перечислены ниже.

Список тестовых выборов

1. Загруженная очередь, много больших задач.
2. Загруженная очередь, много маленьких задач.
3. Загруженная очередь, одинаковое количество задач разных размеров.
4. Загруженная очередь, мало пользователей.
5. Загруженная очередь, много пользователей.
6. Маленькая загруженность очереди, но есть пользователь с большим запросом по задачам и процессорочасам.

Именно на этом наборе тестов планируется решение задачи оптимизации, причём тесты построены исходя из статистики запусков на суперкомпьютере «Ломоносов», но не повторяют их полностью. В процессе разработки находится программный комплекс для тестирования оптимизаций алгоритма планирования в рамках задачи оптимизации планирования процессорного времени по выбранному множеству метрик на данном множестве тестовых выборов.

ЛИТЕРАТУРА

[Jette, Grondona, 2003] *Jette M., Grondona M. SLURM: Simple Linux Utility for Resource Management // Proc. ClusterWorld Conference and Expo. San-Jose, California, June 2003. 2003. 18 p.*

- [Sadovnichy et al., 2013] *Sadovnichy V., Tikhonravov A., Voevodin Vl., Opanasenko V.* “Lomonosov”: Supercomputing at Moscow State University // Contemporary High Performance Computing: From Petascale toward Exascale. 2013. P. 283–307.
- [Jones, 2012] *Jones M.* Optimization of resource management using supercomputers SLURM. 2012. URL: <http://www.ibm.com/developerworks/ru/library/l-slurm-utility/>
- [Jackson et al., 2007] *Jackson D., Snell Q., Clement M.* Core Algorithms of the Maui Scheduler. Brigham Young University, Provo, Utah, 2007.
- [Snell et al., 2000] *Snell Q., Clement M., Jackson D., Gregory Ch.* The Performance Impact of Advance Reservation Meta Scheduling (Part of the Lecture Notes in Computer Science book series (LNCS, volume 1911)) // JSSPP 2000: Job Scheduling Strategies for Parallel Proc. 2000. P. 137–153.
- [Lipari, 2012] *Lipari D.* The SLURM Scheduler Design // SLURM User Group Meeting, Oct. 9, 2012. 52 p. URL: http://slurm.schedmd.com/slurm_ug_2012/SUG-2012-Scheduling.pdf.
- [Tehioubia et al., 2008] *Tehioubia A. D., Capannini G., Ranieri Baraglia, Puppini D., Pasquali M.* Backfilling Strategies for Scheduling Streams of Jobs on Computational Farms // Making Grids Work, II. 2008. P. 103–115.
- [Novotny, 2009] *Novotny M.* Job scheduling with the SLURM resource manager. 2009. 58 p. URL: https://is.muni.cz/th/173052/fi_b_b1/thesis.pdf.
- [Leonenkov, Zhumatiy, 2015a] *Leonenkov S. N., Zhumatiy S. A.* Backfill scheduling system optimization for use on Lomonosov supercomputer. Computer Technologies in Science. Methods of Simulations on Supercomputers. 2015. P. 140–150.
- [Leonenkov, Zhumatiy, 2015b] *Leonenkov S. N., Zhumatiy S. A.* Introducing new backfill-based scheduler for SLURM resource manager // Procedia computer science. 2015. V. 66. P. 661–669.

SCHEDULING ALGORITHMS AND EFFICIENCY OF LOMONOSOV SUPERCOMPUTER

S. N. Leonenkov¹, S. A. Zhumatiy²

¹ Lomonosov Moscow State University, Russia

² Research Computing Center, Lomonosov Moscow State University (RCC MSU), Russia

The work proposes new set of efficiency metrics for analysing SLURM (Simple Linux Utility for Resource Management) add-ons. Two main of them are: number of resourced users at given moment of time and utilisation of CPU hours. After researching historical data of queue regular4 of Lomonosov supercomputer and identifying bottlenecks of current scheduling policies we discover methods to break these limitations via implementing new portable SLURM scheduler. We address the problem of maximizing the number of users, whose requests are processed in each given moment of time, and decrease start time of user’s first task. We use standard interface wiki2 for creating our new external scheduler. In present we are researching more extensive queue scheduling optimisation problem based on proposed metrics list.

Keywords: Lomonosov supercomputer; scheduling metrics; SLURM; scheduling algorithms; Backfill.

Leonenkov Sergei Nikolaevich — postgraduate student, leonenkov@parallel.ru

Zhumatiy Sergey Anatolievich — leading scientist, PhD, serg@parallel.ru

ПРОГРАММНАЯ ИНФРАСТРУКТУРА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ НА СУПЕРКОМПЬЮТЕРАХ

М. А. Посыпкин

Вычислительный центр им. А. А. Дородницына Федерального исследовательского центра «Информатика и управление» Российской академии наук (ВЦ РАН)

В статье рассмотрен программный комплекс для решения задач глобальной оптимизации на суперкомпьютерах с распределённой памятью, построенный на принципах модульности, что позволяет существенно сократить усилия, требуемые для реализации новых задач. В предлагаемом программном комплексе балансировщик выделен в отдельный модуль, а для описания управления балансировкой применяется формализм конечных автоматов. Это позволяет не только отделить детали реализации численного метода от логики распределения вычислительной нагрузки, но и открывает широкие перспективы по исследованию алгоритмов балансировки методами имитационного моделирования, рассматриваемые в работе.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 16-07-00458А, 16-07-00873А), проекта министерства образования и науки Республики Казахстан 0115РК00554.

Ключевые слова: суперкомпьютеры, методы оптимизации, распределенная память, балансировка нагрузки, метод ветвей и границ.

В последнее время значительный интерес и внимание учёных вызывает детерминированная глобальная оптимизация, в рамках которой удаётся не только получить решение, но и численно доказать его точность [Евтушенко, 1971]. Такие алгоритмы обычно очень трудоёмки в вычислительном отношении. Одним из способов решения проблемы высокой ресурсоёмкости алгоритмов, гарантирующих оптимальность решения, является применение методов параллельных и распределённых вычислений [Стронгин и др., 2013].

Вычислительная схема ветвей и границ является основой для реализации многих методов оптимизации, в частности, метода неравномерных покрытий [Евтушенко, 1971; Евтушенко, Посыпкин, 2011], методов ветвей и отсечений [Евтушенко, Посыпкин, 2011], многих методов дискретной оптимизации. Отличаясь в деталях, варианты методов ветвей и границ (МВГ) для различных задач имеют общую базовую схему, которая состоит в декомпозиции исходной задачи на подзадачи с последующей обработкой подзадач и их «отсевом». Отсевом называется исключение подзадачи из дальнейшего рассмотрения по некоторым правилам. Наличие общей схемы даёт возможность эффективно разделить проблемно-зависимую и проблемно-независимые части в программном комплексе.

В основу разрабатываемой программной архитектуры положены принципы расширяемости. Разделение проблемно-зависимой и независимой составляющих даёт возможность легко добавлять новые алгоритмы на основе МВГ, оставляя неизменной параллельную часть. Разработан программный комплекс для решения задач детерминированными методами, основанными на методе ветвей и границ. Параллельная реализация ориентирована на мно-

гопроцессорные системы с распределённой памятью и использует интерфейс передачи сообщений MPI (Message Passing Interface) [Snir et al., 1998].

Основной проблемой при реализации метода ветвей и границ на многопроцессорных системах является обеспечение равномерной загрузки процессоров. Для этого применяются методы балансировки нагрузки, которые перераспределяют эту нагрузку в процессе расчётов. В предлагаемом программном комплексе балансировщик выделен в отдельный модуль, а для описания управления балансировкой применяется формализм конечных автоматов. Это позволяет не только отделить детали реализации численного метода от логики распределения вычислительной нагрузки, но и открывает широкие перспективы по исследованию алгоритмов балансировки методами имитационного моделирования.

В рамках проекта по созданию открытой программной архитектуры для оптимизации на высокопроизводительных вычислительных системах был разработан симулятор параллельной системы [Фомин, 2015], который позволяет выполнять алгоритм балансировки нагрузки, имитируя распределённую работу метода ветвей и границ, а также передачу данных между параллельными процессами. Для имитации МВГ используется случайный ветвящийся процесс с вероятностью ветвления, уменьшающейся пропорционально удалению от корня дерева. В основу моделирования положена концепция логических часов. Вместо реального решения подзадачи производится сдвиг логического таймера на заданную величину. Передача данных моделируется аналогично, при этом время на принимающем процессе полагается равным временной метке полученного сообщения. Для облегчения изучения методов балансировки нагрузки разработана графическая среда [Орлов, 2015], показывающая загрузку процессоров в разные моменты времени, визуализирующая обмены между ними. С помощью разработанной среды можно изучать как трассы реального выполнения, так и трассы, собранные при помощи симулятора.

ЛИТЕРАТУРА

- [Евтушенко, 1971] *Евтушенко Ю. Г.* Численный метод поиска глобального экстремума функций (перебор на неравномерной сетке) // Журн. вычислительной математики и мат. физики. 1971. Т. 11. № 6. С. 1390–1403.
- [Евтушенко, Посыпкин, 2011] *Евтушенко Ю. Г., Посыпкин М. А.* Применение метода неравномерных покрытий для глобальной оптимизации частично целочисленных нелинейных задач // Журн. вычислительной математики и мат. физики. 2011. Т. 51. № 8. С. 1376–1389.
- [Стронгин и др., 2013] *Стронгин Р. Г., Гергель В., Гришагин В., Баркалов К.* Параллельные вычисления в задачах глобальной оптимизации. М.: Изд-во Мос. ун-та. 2013. 280 с.
- [Орлов, 2015] *Орлов Ю. В.* Среда комплексного анализа производительности алгоритмов балансировки в параллельном методе ветвей и границ // Intern. J. Open Information Technologies. 2015. V. 3. No. 9. P. 20–23.
- [Фомин, 2015] *Фомин А. Л.* Программная модель параллельной реализации метода ветвей и границ // Intern. J. Open Information Technologies. 2015. V. 3. No. 11. P. 10–15.

[Snir et al., 1998] *Snir M., Otto S., Huss-Lederman S., Walker D., Dongarra J.* MPI — The Complete Reference: Volume 1: The MPI core. 2nd ed. Cambridge: MIT Press, 1998. 426 p.

PROGRAMMING ENVIRONMENT FOR SOLVING GLOBAL OPTIMIZATION PROBLEMS ON SUPERCOMPUTERS

M. A. Posypkin

Dorodnicyn Computing Centre, Federal Research Center “Computer Science and Control” of Russian Academy of Sciences

The article describes software for solving global optimization problems on supercomputers with distributed memory based on the principles of modularity which can significantly reduce the effort required to implement the new tasks. In the proposed software system load balancer is a separate module, and to describe balancing management we apply the formalism of finite state machines. This allows us not only to separate the implementation details of the numerical method from the logic of computational load distribution, but also opens up wide prospects for the study of load-balancing algorithms with simulation methods considered in this work.

Keywords: supercomputers, optimization methods, distributed memory, load balancing, branch and bound method.

Posypkin Mikhail Anatolievich — head of the department, doctor of physical and mathematical sciences, mposypkin@gmail.com

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФОРМИРОВАНИЯ И ФРАГМЕНТАЦИИ СИСТЕМЫ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОБЛАКОВ НА СЕТКАХ СВЕРХБОЛЬШОГО РАЗРЕШЕНИЯ

Б. П. Рыбакин

Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук (НИИСИ РАН)
Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова (МГУ)

Приводятся результаты численного моделирования процесса взаимодействия ударной волны с системой молекулярных облаков (МО). Моделирование проводится в трёхмерной постановке на сетках сверхбольшого разрешения. Повышенное разрешение позволяет найти и проследить возникающие возмущения, абляцию и развитие неустойчивости МО. Исследованы процессы распространения в МО ударных волн, процессов уноса вещества с поверхности, фрагментации, образования неустойчивости Рихтмайера–Мешкова, образование, развитие и разрушение вихрей. Приведены результаты расчётов, моделирующих взаимодействие ударной волны с плотными, холодными молекулярными облаками.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 14-29-06055).

Ключевые слова: сверхзвуковая турбулентность, фрагментация молекулярных облаков, ударные волны, параллельные вычисления, CUDA.

ВВЕДЕНИЕ

Распространение и столкновение ударных волн с молекулярными облаками играют важную роль в цепи событий, приводящих к образованию звёзд. Газ в молекулярных облаках (МО), при прохождении через них ударных волн, сжимается на несколько порядков. Это приводит к фрагментации и перестройке структуры облаков. В результате таких процессов вещество молекулярных облаков формирует сеть плотных нитей (филамент). На достаточно малых масштабах внутри таких облаков (обычно около 1 пс), преобладает сила тяжести, и формирование звёзд происходит в многочисленных плотных газовых «ядрах», в пределах этих нитей, которые проявляются в кластерообразующих областях [André et al., 2010].

Филаментные структуры наблюдались в межзвёздной среде (МЗС) и раньше, но снимки высокого разрешения в телескопах (Herschel Space Observatory) показывают, что такие структуры наблюдаются повсеместно [Schneider, Elmegreen, 1979]. Звёзды формируются вдоль гравитационно неустойчивых частей филаментов, т.е. там, где масса на единицу длины нити превышает критического значения $2c_s^2/G$, где c_s — скорость звука; G — гравитационная постоянная [André et al., 2010]. В этой работе мы рассмотрим влияние, которое ударные волны и турбулентность оказывают на формирование и измерение базовой структуры молекулярных облаков.

В последнее время на смену представлению о долгоживущих МО пришла гипотеза облаков-транзиентов — объектов, которые представляют собой кратковременное (по меркам возраста Галактики) состояние межзвёздного газа [Klein et al., 1994]. Такие облака быстро формируются, быстро (частично) превращаются в звёзды и быстро рассеиваются, так что весь цикл занимает всего 20–30 млн лет. Движущей силой звёздообразования оказывается не медленная потеря магнитной поддержки, а столкновения турбулентных потоков, в результате которых формируются гравитационно неустойчивые плотные ядра, которые коллапсируют в звёзды. Моделирование таких процессов даёт возможность с единой позиции описать круговорот вещества в галактиках.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В предыдущей работе [Рыбакин, 2015] мы рассматривали процесс ударного взаимодействия одного МО, у которого плотность однородно распределена по радиусу. В данной работе была проведена серия расчётов для того, чтобы промоделировать взаимодействие ударной волны с системой молекулярных облаков, плотность которых увеличивается к центру. Изменение плотности позволяет промоделировать разные стадии гравитационного сжатия. В расчётах используются два МО с разными функциями распределения плотности и разными радиусами r и массами M . Считается, что изначально облака находятся в динамическом равновесии с межзвёздной средой. На рис. 1 приведено начальное распределение плотности и радиусы МО. Полная масса записывается в массах Солнца.

Диапазон изменения плотности вещества, который возникает при моделировании процесса образования звёзд в молекулярных облаках, изменяется на несколько порядков, диапазон расстояний также меняется на несколько порядков. Такой большой диапазон для характерных расстояний и плотностей накладывает жёсткие ограничения на размеры сетки, которые необходимы для

достижения хорошего пространственного разрешения [Рыбакин и др., 2015]. Расчёты на сетках невысокой размерности приводят к потере разрешения быстро изменяющихся переменных и важных деталей. Как показано в статье [Blitz, Shu, 1980], ускорение и перемешивание в молекулярных облаках происходит до пяти раз быстрее на сетках небольшого разрешения.

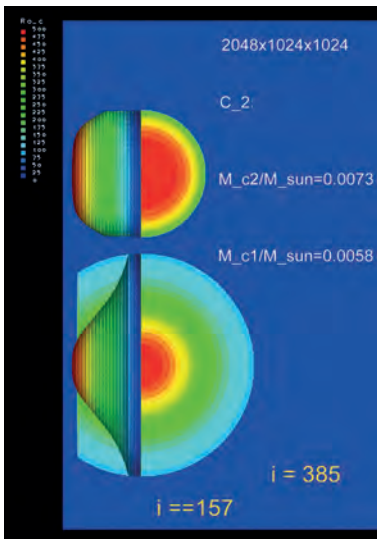


Рис. 1. Распределение массы и физические размеры двух молекулярных облаков на сетке $2048 \times 1024 \times 1024$. Масса верхнего $M_{C_2} = 0,0073$ и нижнего $M_{C_1} = 0,0058$ облаков в массах Солнца; i — радиус i -го облака в ячейках

Плотность межзвёздной среды принимается равной $2,15 \cdot 10^{-25}$ г/см³, температура 10^4 К, скорость — равной нулю; плотность в облаке $1,075 \cdot 10^{-22}$ г/см³, температура 100 К, скорость равной нулю. Параметры газа за ударной волной определяются из уравнений Ренкина–Гюгонио. В наших расчётах число Маха ударной волны — $M = 7$, плотность — $\rho = 8,6 \cdot 10^{-22}$ г/см³, температура — $T = 1,5 \cdot 10^5$ К, скорость — $u = 104$ км/с [Stone, Norman, 1992].

Более подробно система определяющих уравнений, начальные и граничные условия приведены в работе [Рыбакин, 2015]. В наших расчётах были использованы расчётные сетки с разрешением от $256 \times 256 \times 512$ до $2018 \times 1024 \times 1024$. Физический размер расчётной области составляет $3,2 \times 1,6 \times 1,6$ пс. Отметим сразу, что расчёты, проведённые на разных сетках, показали качественно одинаковые результаты, но с разной степенью детализации. Выбираемое разрешение накладывает также ограничение на визуализацию процессов турбулизации и образования филамент. Распределение начальной плотности $\rho(r)$ в первом молекулярном облаке принято в виде [Johansson, Ziegler, 2011]:

$$\rho(r) = \rho_{ism} + \frac{\rho_{cl} - \rho_{icm}}{1 + (r/R_{cl})^e},$$

во втором молекулярном облаке было использовано распределение плотности

$$\rho(r) = \rho_{ism} [\chi + (1 - \chi)\eta],$$

здесь ρ_{ism} — плотность в межзвёздной среде; ρ_{cl} — плотность в облаке;

$$\eta = 1 / \left\{ 2 \left[1 + (\alpha - 1) / (\alpha + 1) \right] \right\};$$

$$\alpha = \exp \left\{ \min \left[20, 0, p_1 \left((r/R_{cl})^2 - 1 \right) \right] \right\};$$

$$\chi = \rho_{cl} / \rho_{icm}$$

— отношение плотности в облаке к плотности в межзвёздной среде [Pittard et al., 2009].

Для решения поставленной задачи была использована программа, основанная на явной трёхмерной схеме типа TVD второго порядка точности [Harten, 1983; Toro, 1997]. Данная схема сохраняет консервативность относительно массы, импульса и энергии газа, а также хорошо описывает ударные волны и контактные разрывы.

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ

Создание параллельных алгоритмов, предназначенных для решения сложных задач астрофизики, позволяет исследовать динамическую эволюцию МЗС, МО и образование новых звёзд. Проведение численных экспериментов в трёхмерной постановке на достаточно подробных сетках требует больших вычислительных ресурсов. Для проведения расчётов был разработан параллельный алгоритмы решения задач нестационарной газодинамики [Rybakin et al., 2016]. Для ускорения расчётов были использованы технологии OpenMP для CPU и CUDA для графических ускорителей.

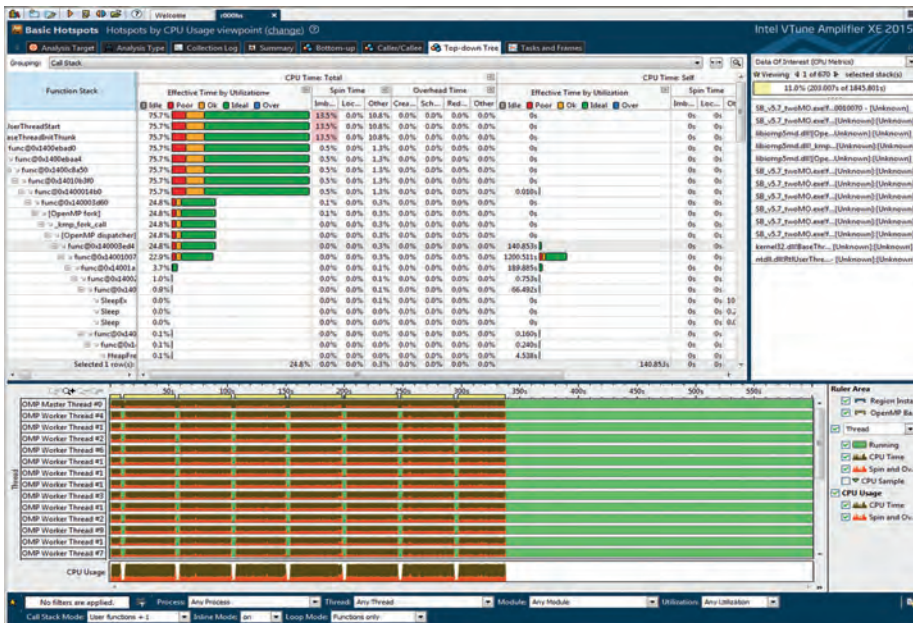


Рис. 2. Результаты распараллеливания программы на процессорах Intel Xeon E2630

Для изучения тонких механизмов процессов фрагментации, абляции, образования филаментных структур требуется проведение расчётов на достаточно подробной сетке. Расчёты на больших сетках требуют применения параллельных алгоритмов. В работе используется алгоритм и программа, которые позволяют проводить расчёты с использованием многопроцессорных ЭВМ. В программе были использованы технологии OpenMP и CUDA. Настройка OpenMP осуществлялась с помощью Intel VTune Amplifier XE. Этот инструментарий позволяет выполнять профилирование приложений непосредственно на узле кластера. Был использован тип анализа Lightweight Hotspots. Настройка осуществлялась для процессоров Xeon E2630 и Xeon E5 2650 Ivy Bridge (рис. 2).

Для увеличения производительности построен алгоритм распараллеливания на графических процессорах. Для этого использовались CUF-ядра. Управление данными в коде с CUF-ядрами осуществлялась явно. Массивы на стороне устройства объявляются с атрибутом device, pinned и явно производится передача данных с хоста на устройство и обратно. Для не очень больших размеров сетки (до $1024 \times 512 \times 512$) распараллеливание на GPU давало лучшие результаты, чем OpenMP, но с увеличением размера сетки производительность GPU снижается.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЁТОВ

Взрывы сверхновых звёзд, распространение остатков этих взрывов, столкновения гигантских МО сопровождается образованием ударных волн большой интенсивности. Такие ударные волны оказывают большое влияние на меж-

звёздную среду и на облака молекулярного газа. Взаимодействие ударных волн с молекулярными облаками вносят заметный вклад в их фрагментацию, и приводит к турбулизации среды. Толщина фронта ударной волны достаточно большая ($\sim 2-5$ пс), что намного больше радиуса облака. Радиус облака в наших расчётах принимался $r = 0,05$ пс, время прохождения ударной волной всего облака 960 лет.

В начальные моменты времени температура межзвёздной среды принималась равной $T_{ism} = 10^4$ К. Температура за фронтом ударной волны $T_{ism} = 1,5 \cdot 10^5$ К, а температура молекулярных облаков — $T_{cl} = 100$ К. Таким образом, МО на несколько порядков холоднее межзвёздной среды и вещества ударной волны. На рис. 3 приведены температурные поля в центральном сечении на разные моменты безразмерного времени, хорошо виден процесс турбулизации и образования филамент. Отметим, что холодное вещество молекулярных облаков (отмечено синим цветом) постепенно прогревается. Таким образом, диссипация энергии, которая заключена в вихревых образованиях, даёт вклад в процесс передачи энергии холодному веществу МО.

На рис. 4 приведено распределение логарифма безразмерной плотности в центральном сечении на те же моменты безразмерного времени.

При взаимодействии ударной волны с облаком проходит несколько характерных стадий взаимодействия. На начальной стадии под действием падающей ударной волны облако сжимается. Разность величин в МЗС, молекулярном облаке и за фронтом ударной волны меняется на несколько порядков. Поэтому на приведённых графиках используется логарифм плотности и температуры. На рис. 5 (левый рисунок) приведены результаты расчёта для логарифма плотности на момент безразмерного времени $t = 7$. На правом рисунке приведён график логарифма плотности в момент времени $t = 17$.

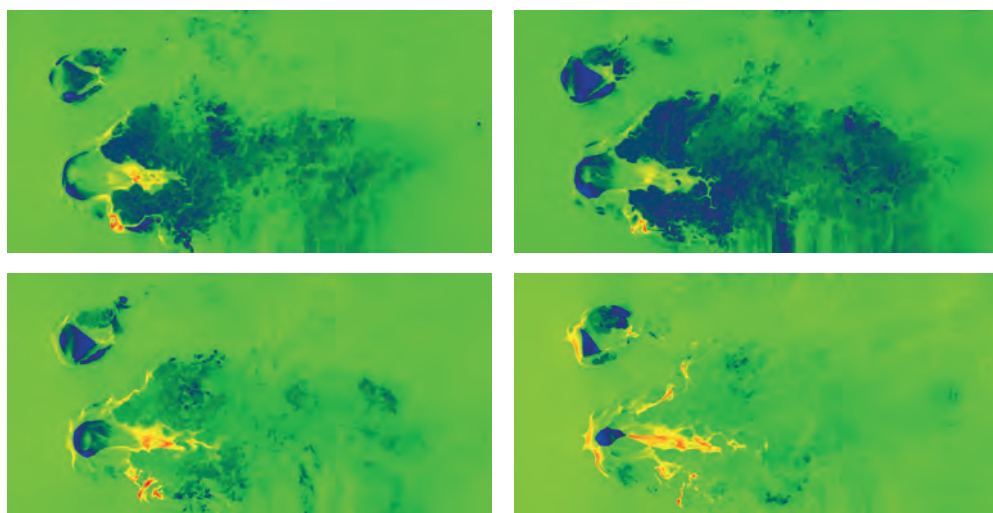


Рис. 3. Температурные поля на моменты безразмерного времени $t = 121, 167, 221$ и 300 (слева направо и сверху вниз)

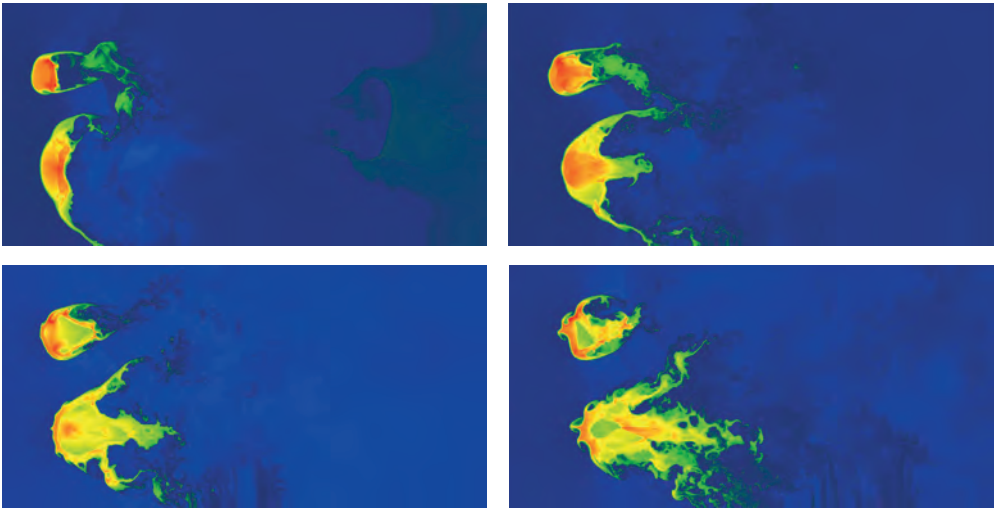


Рис. 4. Распределение плотности на моменты безразмерного времени $t = 121, 167, 221$ и 300 (слева направо и сверху вниз)

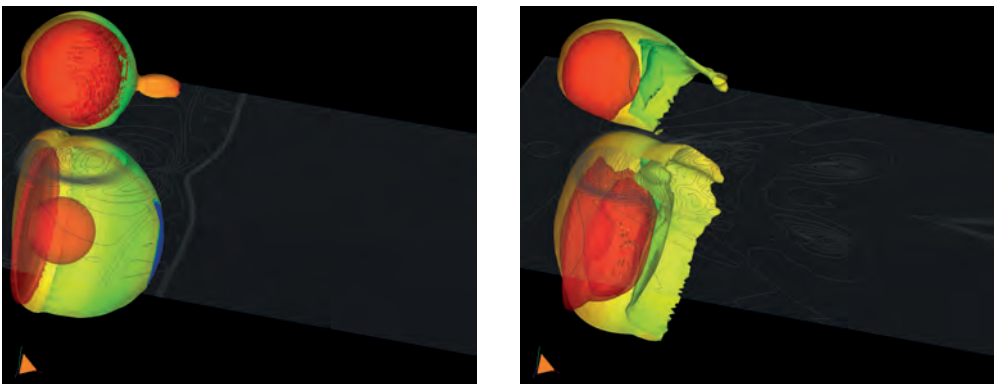


Рис. 5. Изоповерхность логарифма плотности от двух до шести на начальные моменты времени

Неустойчивость Рихтмаейра–Мешкова (Р-М) является частным случаем неустойчивости Рэля–Тейлора и возникает из-за нарастания возмущения на границе раздела двух сред с различными плотностями, подвергнутых воздействию ударной волны. На рис. 6 видно формирование неустойчивости Р-М на правых границах. На правой половине каждой сферы видно сформировавшееся вихревое кольцо, которое с течением времени развивается и образует вихревую структуру. После прохождения ударной волной нескольких диаметров МО процесс фрагментирования облака усиливается и начинается перемешивание вещества молекулярных облаков с ударной волной и межзвёздной средой. Прошедшая ударная волна «сдувает» возмущения с поверхности молекулярных облаков. На рис. 6 можно отметить унос вещества, образование поверхностных возмущений и филомент. На этом рисунке вверху представлено облако массой $M_{C2} = 0,0073$, внизу облако массой $M_{C1} = 0,0058$.

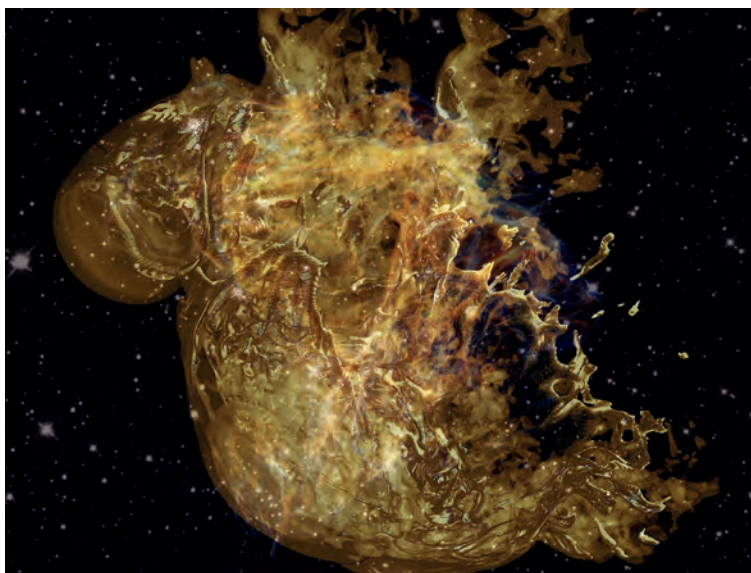


Рис. 6. Образование поверхностных возмущений. Развитие неустойчивости на границе, абляция и унос вещества облака. Приведён логарифм безразмерной плотности

Эволюция во времени плотности и температуры (см. рис. 4, 6), в случае трёхмерного моделирования, существенно отличается от результатов, которые были получены в двумерной постановке [Silvia et al., 2010]. Кроме того, на процесс фрагментации и возникновения турбулентной системы МО существенное влияние оказывает взаимное расположение и геометрия облаков.

После возникновения неустойчивости Рихтмайера–Мешкова, начинает сказываться влияние пограничных слоёв МО, которое приводит к возрастанию перемешивания вещества облаков и межзвёздной среды. При этом нарастают и становятся хаотическими скорости потоков, и возникает неустойчивость Кельвина–Гельмгольца. Начинаются процессы смешивания пространственных следов от облаков, и возникает аналог колебательного процесса образования вихревых дорожек Кармана (см. рис. 3, 4). Наконец, для моментов безразмерного времени $t > 90$ в системе двух облаков начинает доминировать гидродинамическая неустойчивость и возникает неоднородная, фрагментированная среда с филаментными структурами. Эволюция завихренности в трёхмерном моделировании становится более сложной, чем двумерном случае, так как третье измерение даёт возможность вихревым трубкам растягиваться. Это в конечном итоге приводит к более высокому уровню нарушения симметрии турбулентности.

На рис. 7 приведено распределение безразмерной массы для двух молекулярных облаков по фракциям с течением времени: слева приведено распределение массовой доли для фракции окружающей среды от $\rho_a = 5,9865 \cdot 10^{-23}$ до $1,535 \cdot 10^{-17}$ для первого облака; справа — такое же распределение для второго облака. Нужно отметить, что около 70 % всей массы облаков концентрируется во фракциях большой плотности, доля которых сначала уменьшается, а затем, для больших значений времени ($t > 300$), начинает расти.

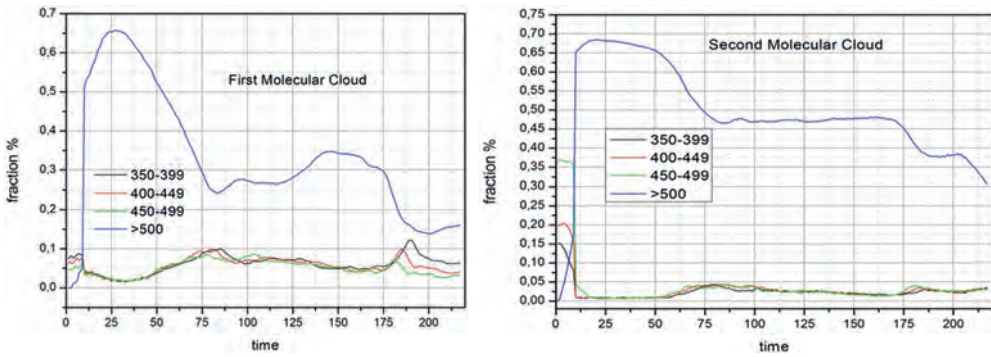


Рис. 7. Стратификация массы системы молекулярных облаков. Приведено распределение по «тяжёлым» фракциям для первого облака (слева) и для второго молекулярного облака (справа)

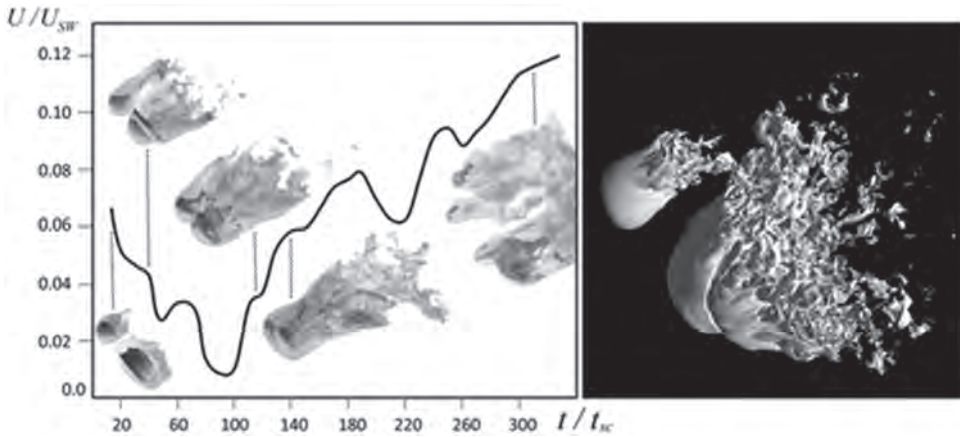


Рис. 8. Зависимость скорости центра массы системы двух молекулярных облаков от времени (слева); трёхмерная структура облаков на момент безразмерного времени $t = 100$ (справа)

Ускорение и замедление центра массы системы молекулярных облаков тесно связано с площадью поверхности облака, с увеличением или уменьшением локального сжатия вещества, а также фрагментирования расщепленных «ядер» и филаментов (рис. 8). Сверхзвуковые возмущения увеличивают перенос массы и импульса между поверхностными слоями облаков и их окружением, и, как следствие, процесс фрагментации и разрушения облаков ускоряется.

ВЫВОДЫ

Проведено численное моделирование процесса взаимодействия ударной волны с молекулярными облаками. Подробно изучен процесс абляции с поверхности облаков и образование вихревых структур. В начальные моменты времени на левой границе облака формируется и начинает развиваться

ся первичное возмущение. На правой границе возникает неустойчивость Рихтмаейра–Мешкова.

Следующая стадия характеризуется расширением облаков и образованием сложной волновой структуры. За фронтом прошедшей ударной волны формируется вихри, которые развиваются с течением времени. Вихри образуют кольцевые структуры на поверхности облака. Соседние вихри с противоположным направлением вращения образуют систему первичных и вторичных вихревых структур. Вещество молекулярных облаков после прохождения ударной волны сильно сжимается, что приводит к фрагментации и перестройке структуры облаков. Для достаточно больших значений времени $t > 90$ в системе двух МО возникает существенно неоднородная, фрагментированная среда с филаментными структурами.

ЛИТЕРАТУРА

- [Рыбакин, 2015] *Рыбакин Б. П.* Математическое моделирование процессов фрагментации и абляции молекулярного облака сильной ударной волной // Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования. 17–19 ноября, 2015, Россия, Таруса: сборник трудов / под ред. Р. Р. Назирова, Л. Н. Шура. М.: ИКИ РАН, 2015. С. 161–172.
- [Рыбакин и др., 2015] *Рыбакин Б. П., Бетелин В. Б., Душин В. Р., Михальченко Е. В., Моисеенко С. Г., Стамов Л. И., Тюренкова В. В.* Математическое моделирование гидродинамического взаимодействия сильной ударной волны с неоднородной средой // Вестн. кибернетики. 2015. № 3. С. 43–52.
- [André et al., 2010] *André Ph. Men'shchikov S. Bontemps S. et al.* From filamentary clouds to prestellar cores to the stellar IMF: Initial highlights from the Hersche Gould Belt Survey // *Astronomy and Astrophysics*. 2010. V. 518. article number L102. 7 p. doi:10.1051/0004-6361/201014666).
- [Blitz, Shu, 1980] *Blitz L., Shu F. H.* The origin and lifetime of giant molecular cloud complexes // *Astrophysical J.* 1980. V. 238. P. 148–157.
- [Harten, 1983] *Harten A.* High resolution schemes for hyperbolic conservation laws // *J. Computational Physics*. 1983. V. 49. P. 357–393.
- [Johansson, Ziegler, 2011] *Johansson E. P. G., Ziegler U.* Radiative interaction of shocks with small interstellar clouds as a pre-stage to star formation // *Astrophysical J.* 2011. V. 766. No. 1. P. 45.
- [Klein et al., 1994] *Klein R., McKee C., Colella P.* On the hydrodynamics interaction of shock waves with interstellar clouds. 1. Nonradiative shocks in small clouds // *Astrophysical J.* 1994. V. 420. P. 213–236.
- [Pittard et al., 2009] *Pittard J. M., Falle S. A. E. G., Hartquist T. W., Dyson J. E.* The turbulent destruction of clouds // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society (MNRAS)* 32009. V. 94. P. 1351–1378.
- [Rybakin et al., 2016] *Rybakin B. P., Betelin V. B., Dushin V. R., Mikhalechenko E. V., Moiseenko S. G., Stamov L. I., Tyurenkova V. V.* Model of turbulent destruction of molecular clouds // Elsevier. *Acta Astronautica*. 2016. V. 119. P. 131–136.
- [Schneider, Elmegreen, 1979] *Schneider S., Elmegreen B. G.* A catalog of dark globular filaments // *Astrophysical J. Supplement Series*. 1979. V. 41. P. 87–95. doi:10.1086/190609.
- [Silvia et al., 2010] *Silvia D. W., Smith B. D., Shull J. M.* Numerical simulations of supernova dust destruction. I. Cloud-crushing and post-processed grain sputtering. 2010 // *Astrophysical J.* 2010. V. 715. P. 1575–1590.

- [Stone, Norman, 1992] *Stone J. M., Norman M. L.* The three-dimensional interaction of a supernova remnant with an interstellar cloud // *Astrophysical J. Letters*. 1992. V. 390. P. 17–19.
- [Toro, 1997] *Toro E. F.* *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics*. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1997. 727 p.

NUMERICAL SIMULATION OF DEFORMATION AND FRAGMENTATION OF THE MOLECULAR CLOUD SYSTEM AT EXTRA HIGH RESOLUTION GRIDS

B. P. Rybakin

Scientific Research Institute of System Analysis, Russian Academy of Science (SRISA RAS)
Lomonosov Moscow State University (MSU)

Results of numerical simulation of shock wave interaction with the system of molecular clouds (MC) are given. Simulation is carried out in three-dimensional statement on the extra high resolution meshes. High resolution allows you to find and track emerging perturbations ablation and development MC instability. The calculation results in a three-dimensional setting, gives much more accurate picture of the behavior of matter. The processes of propagation of shock waves in the MC, processes ash material from the surface, fragmentation, development Richtmyer–Meshkov; development and the destruction of the vortices. The results of calculations simulating the interaction of a shock wave with a dense, cold molecular clouds are presented.

Keywords: Supersonic Turbulence, Shock Waves, Fragmentation of Molecular Clouds, Parallel Calculations, CUDA.

Rybakin Boris Petrovich — leading researcher, doctor of physics and mathematics,
rybakin@vip.niisi.ru

СНИЖЕНИЕ РАЗМЕРНОСТИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЗАДАЧ С ПОМОЩЬЮ НИЗКОРАНГОВЫХ ТЕНЗОРНЫХ ПРИБЛИЖЕНИЙ

В. Н. Блинов

Научный центр Российской академии наук в Черноголовке, (НЦЧ РАН)

Многомерные тензорные разложения позволяют существенно снизить размерность некоторых задач, сформулированных в тензорных терминах. При этом эффективность этого подхода существенно зависит как от свойств выбранного разложения, так и от конкретных реализаций низкоранговых разложений тензоров задачи. Эти и другие важные особенности рассматриваются на примере тензорных поездов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант РНФ № 14-21-00158).

Ключевые слова: тензорные разложения, тензорный поезд.

ВВЕДЕНИЕ

Численное решение ряда задач сводится к матричной или, в более общем случае, тензорной формулировке. К этому классу относятся некоторые типы систем дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных, краевые задачи, задачи из теории управления и др. Вычислительные методы решения подобных проблем построены на дискретизации задачи, в результате которой функционалы и функциональные операторы становятся дискретными тензорными объектами на пространствах конечной размерности. Полученные дискретизованные задачи можно решать в полном виде, что зачастую требует значительных вычислительных ресурсов. Так, современные методы позволяют моделировать системы из порядка 10^9 структурных единиц, занимая для этого дни и недели суперкомпьютерного времени.

Для снижения вычислительных затрат используются различные методы редукации размерности. При этом механизмы редукации зачастую оказываются специфичными к задаче и требуют каких-либо нетривиальных соображений, например, основанных на внутренних симметриях исследуемой системы. Так, имеется множество распространённых методов снижения размерности методов решения систем уравнений с частными производными, поскольку эти задачи крайне востребованы в науке и промышленности (см., например, [Hesthaven et al., 2016] или [Banagaaya et al., 2016]). Основной идеей таких методов является построение редуцированного базиса на основе частных решений задачи для известных случаев. Такой тип снижения размерности можно назвать *аналитическим*, поскольку он строится на основе алгебраической формулировки задачи.

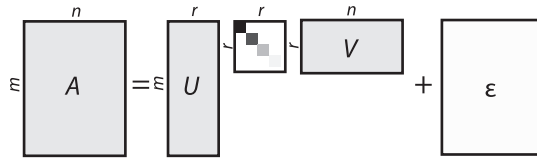


Рис. 1. Сингулярное разложение ранга r

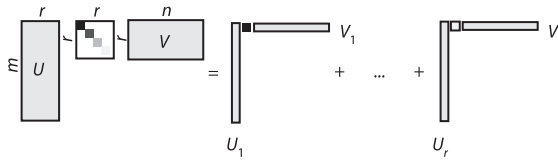


Рис. 2. Сингулярное разложение как сумма матриц ранга 1

Остановимся на другой идее снижения размерности, которая основана на низкоранговых разложениях тензорных объектов задачи. Его можно назвать *численным*, поскольку он работает напрямую с матрицами (тензорами) численной схемы, и ничего не знает о симметриях моделируемых систем. Простейшим примером снижения размерности такого типа является редукция ранга матрицы задачи на основе *сингулярного разложения* (singular value decomposition, SVD). Оно позволяет представить матрицу в виде суммы тензорных произведений r пар векторов (рис. 1, 2):

$$A = USV + \epsilon,$$

где U и V — ортогональные матрицы, S — диагональная.

Число r называется рангом разложения и может варьироваться в зависимости от предполагаемой ошибки конечного решения. Следует отметить, что ранг сингулярного разложения является также рангом аппроксимирующей матрицы. Этот ранг обычно меньше ранга исходной матрицы, а потому такое разложение и называется низкоранговым. Сингулярное разложение широко используется в цифровой обработке сигналов и является основой метода *анализа главных компонент* (principal component analysis, PCA), многомерного аналога статистической регрессии. Геометрическая интерпретация рассматриваемого разложения состоит в поиске подпространства малой размерности (а именно, равной r), некоторые элементы которого с заданной точностью приближают систему векторов, записанную в матрице по строкам (столбцам). Отсюда очевидно, что ошибка приближения тем больше, чем меньше размерность искомого приближения.

МНОГОМЕРНЫЕ РАЗЛОЖЕНИЯ

В случае, когда данные задачи имеют естественную многомерную интерпретацию (например, таблица значений функции многих переменных), редукция размерности может быть произведена либо посредством SVD с предварительным представлением данных в матричном виде, либо с помощью многомер-

ного обобщения SVD, применяемого к данным напрямую. Проблема первого подхода заключается в том, что при превращении многомерного тензора (по сути, таблицы данных) в матрицу, теряется информация о структуре всех размерностей, кроме двух; так, близкие в исходном представлении элементы оказываются сильно разнесёнными в матрице. По этой причине оптимальное (в смысле минимального ранга) разложение будет, вообще говоря, зависеть от способа превращения многомерных данных в матрицу.

С другой стороны, обобщение сингулярного разложения означает приближение заданного тензора тензором меньшего ранга (в некотором многомерном смысле). Но если в случае матриц понятие ранга определено и имеет несколько эквивалентных определений (число ненулевых собственных значений, размерность максимальной системы линейно-независимых строк/столбцов), то в многомерном случае это не так, и обобщение понятия ранга не единственно. В этом случае ранг определяется *в смысле некоторого разложения*.

Простейшим способом обобщить SVD на трёхмерный случай является разложение вида

$$A = \sum_{k=1}^r S_k U_k V_k W_k,$$

которое имеет несколько названий, самые популярные из которых *PARAFAC*, *CPD*, *CANDECOMP*, *k-rank* [Bro, 1997]. Многообразие названий связано с тем, что это разложение открывалось независимо в различных областях науки, и каждый раз называлось по-своему. Мы будем называть это разложение *каноническим* (рис. 3). Обобщение на случай произвольной размерности происходит очевидным образом.

Преимуществом данного разложения является линейная асимптотика числа параметров по отношению к размерности d , рангу r и числу точек n вдоль каждого направления (размерности) данных, $O(n dr)$ против $O(n^d)$ в явном представлении. Основной недостаток представления составляет сложность определения ранга разложения численными методами. Для этой цели применяют итерационные методы, которые являются крайне неустойчивыми в случае, когда ранг искомого приближения сильно занижен. Это связано с тем, что множество всех тензоров некоторого малого ранга не является гладким компактным многообразием и, более того, даже не всегда замкнуто. В таких условиях сложно говорить о сходимости.

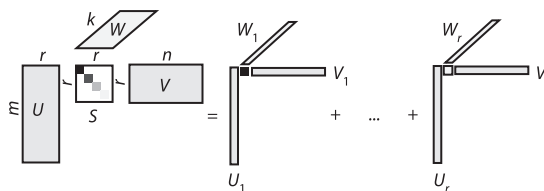


Рис. 3. Каноническое разложение

Другим типом низкоранговых разложений является *разложение Такера*, имеющее вид

$$A(i_1, i_2, \dots, i_d) = \sum_{k_1, k_2, \dots, k_d} S(k_1, k_2, \dots, k_d) U_1(k_1, i_1) U_2(k_2, i_2) \dots U_d(k_d, i_d).$$

Его основное отличие состоит в том, что теперь в разложение вносит вклад внешнее произведение любой комбинации строк матриц от различных размерностей. Соответственно, тензор S теперь представляет собой тензор той же размерности, что и A и, вообще говоря, не является диагональным. Если он всё-таки диагонален, мы получаем каноническое разложение. Асимптотика количества параметров разложения $O(r^d + ndr)$ растёт экспоненциально с размерностью тензора, что делает его малоприменимым для данных высоких размерностей. Его сильной стороной является устойчивость итерационных алгоритмов поиска аппроксимирующего тензора, а потому этот тип разложений нашёл ряд применений в цифровой обработке сигналов [Cichocki et al., 2014].

Третьим типом многомерных разложений является *тензорный поезд* (*tensor train, TT*) (рис. 4) [Oseledets, 2011]

$$A(i_1, \dots, i_d) = \sum_{k_1, k_2, \dots, k_{d-1}} G_1(i_1, k_1) G_2(k_1, i_2, k_2) \dots G_d(k_{d-1}, i_d).$$

Он представляет собой разложение в произведение трёхмерных тензоров: соседние тензоры перемножаются внутренне по общему индексу и внешне — по различным. Это представление не является интуитивно очевидным и требует некоторого понимания, как осуществляется разложение тензора в такую форму, а также как осуществлять операции над тензорами в ТТ-форме. Преимуществом этого разложения является сочетание линейной асимптотики количества параметров по отношению к размерности тензора $O(dnr^2)$ с хорошими численными свойствами алгоритмами.

Указанные выше типы разложений активно используются для анализа данных в различных областях науки: медицинских изображений, анализ массивных данных, анализ сигналов сенсорных систем и других [Cichocki, 2014; Cichocki et al., 2014]. Следует отметить, что множество всевозможных тензорных разложений не исчерпывается перечисленными выше; более того, их существует сколь угодно много, и зачастую сложно сказать заранее, какое из них будет наиболее эффективным в той или иной задаче.

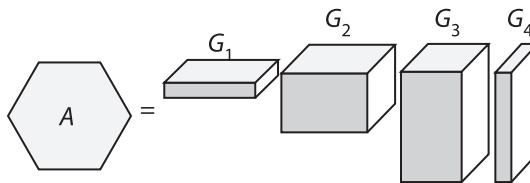


Рис. 4. Тензорный поезд. Шестиугольник в левой части схематично изображает многомерный тензор

ОБЩАЯ СХЕМА ПРИМЕНЕНИЯ ТЕНЗОРНЫХ РАЗЛОЖЕНИЙ

Идея применения тензорных разложений крайне проста: в разложенном виде некоторые операции можно делать значительно эффективнее. С этой точки зрения алгоритм применения тензорных разложений можно сформулировать следующей последовательностью действий:

- 1) сформулировать задачу в терминах многомерных тензоров;
- 2) получить низкоранговые разложения всех тензоров;
- 3) решить задачу в пространстве тензоров малого ранга;
- 4) получить полное представление тензора из разложения.

Остановимся на каждом шаге этой схемы на примере тензорного поезда.

Для первого и второго шагов необходимо сформулировать задачу в многомерном виде. Обычно это подразумевает либо использование данной изначально формулировки, если задача многомерна сама по себе, либо введение «искусственной многомерности» путём расщепления индексов. Например, рассматривая меняющийся от 1 до 100 как мульти-индекс из двух, каждый из которых меняется от 1 до 10, мы осуществляем переход от одномерного тензора (вектора) к двумерному (матрице). К первому случаю относятся, например, системы, описываемые многомерным уравнением диффузии, поскольку известно, что существует низкоранговое представление многомерного оператора Лапласа в виде тензорного поезда [Долгов, 2014; Kazeev et al., 2012]. Во втором случае необходимо искать оптимальный для заданного тензора способ «свернуть» его в многомерный тензор так, чтобы получить ТТ-разложение с минимальным рангом. Тензорный поезд, полученный разложением «свёрнутой» матрицы (вектора), называется QTT (*quantized tensor train*). Обратим внимание, что именно существование представления *малого* ранга является ключевым ингредиентом, без которого рассматриваемая схема не будет давать заметного выигрыша в скорости расчёта.

С алгоритмической точки зрения тензорный поезд можно получить с машинной точностью, несколько раз применяя сингулярное разложение к вспомогательным матрицам [Oseledets, 2011]. В случае, когда тензоры слишком большие, необходимо применять итерационные методы — в основном, это *alternating least squares* (ALS) [Holtz et al., 2011], — или использовать неточные аналоги сингулярного разложения [Oseledets, Tyrtshnikov, 2010].

Третий шаг представляет собой адаптацию алгоритмического решения задачи для ТТ-разложений. Обычно он состоит из применения операций сложения, умножения и свёртки. Здесь и проявляется основная сила тензорного поезда: эти операции над ТТ-разложениями осуществляются *покомпонентно*, т.е., *линейно* по размерности (рис. 5).

В качестве примера можно привести решение больших систем линейных уравнений методом AMEn [Dolgov, Savostyanov 2014] или DMRG [Долгов, 2014]. Ввиду их нетривиальности мы не будем рассматривать эти методы подробно. Следует отметить, что большинство применяемых алгоритмов является итерационными, а при выполнении различных операций растёт ранг разложения. Поскольку рост ранга значительно замедляет расчёт, крайне важно периодически понижать ранг промежуточного результата.

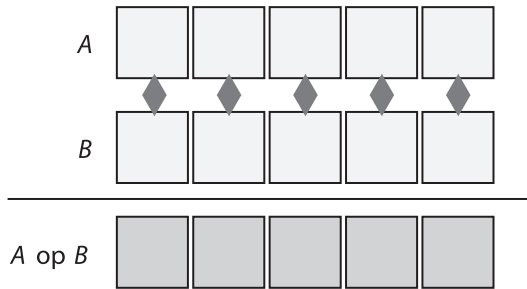


Рис. 5. Операции надо тензорными поездками осуществляются покомпонентно

Наконец, получение полного представления тензора из ТТ-разложения осуществляется тривиальным образом. Здесь отметим тот факт, что это вычисление можно значительно ускорить (например, вычисляя на графическом процессоре) за счёт внутренней параллельной природы алгоритма.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящем обзоре мы рассмотрели схему понижения размерности задач с помощью тензорных разложений на примере тензорных поездов. Поскольку применение этой методики требует существования низкорангового ТТ-разложения тензоров задачи, круг задач, эффективно решаемых этим методом, весьма узок. В то же время, в задачах, в которых все тензоры можно приблизить тензорным поездом малого ранга, эффективность этого метода оказывается чрезвычайно высокой. Так, на основе тензорных поездов можно осуществлять сверхбыстрое преобразование Фурье [Dolgov et al., 2012], быстрое адаптивное вейвлет-преобразование [Oseledets, Tyrtshnikov, 2011], решать системы уравнений [Dolgov, Savostyanov, 2014]. Применение ТТ-разложения позволяет получить значительный выигрыш в производительности (до 1000 раз) на задачах высокой размерности.

Применение методики не ограничивается линейной алгеброй. Тензорные разложения могут также применяться для статистического анализа многомерных данных [Anandkumar et al., 2012; Cichocki, 2014], для обработки сигналов и изображений [Cichocki et al., 2014], задач приближения функций и построения *суррогатных моделей* [Bigoni et al., 2015] — как альтернатива сплайнам, RBF-методам (*radial basis functions*), нейронным сетям. Соответствующие суррогатные модели, в свою очередь, помогают решать другие задачи, например, искать экстремумы и вычислять многомерные интегралы.

Рассмотренный подход является перспективным и с каждым днём находит всё больше интересных приложений.

ЛИТЕРАТУРА

[Долгов, 2014] Долгов С. В. Алгоритмы и применения тензорных разложений для численного решения многомерных нестационарных задач: дис. ... канд. физ.-мат. наук. 2014. 161 с. URL: <http://www.inm.ras.ru/avtoferat/rus-phd2.pdf>.

- [Anandkumar et al., 2012] *Anandkumar A., Ge R., Hsu D., Kakade S. M., Telgarsky M.* Tensor decompositions for learning latent variable models. 2012. URL: arXiv:1210.7559 [cs.LG].
- [Banagaaya et al., 2016] *Banagaaya N., Ali G., Schilders W. H. A.* Index-aware Model Order Reduction Methods. Applications to Differential-Algebraic Equations. Atlantis Press, 2016. 86 p.
- [Bigoni et al., 2015] *Bigoni D., Engsig-Karup A. P., Marzouk Y. M.* Adaptive spectral tensor-train decomposition for the construction of surrogate models // SIAM Conf. Computational Science and Engineering (SIAM CSE 2015). 2015.
- [Bro, 1997] *Bro R.* PARAFAC. Tutorial and applications // Chemometrics and intelligent laboratory systems. 1997. V. 38. Iss. 2. P. 149–171
- [Cichocki, 2014] *Cichocki A.* Era of Big Data Processing: A New Approach via Tensor Networks and Tensor Decompositions. 2014. URL: arXiv:1403.2048 [cs.ET].
- [Cichocki et al., 2014] *Cichocki A., Mandic D., Phan A.-H., Caiafa C., Zhou G., Zhao Q., de Lathauwer L.* Tensor Decompositions for Signal Processing Applications From Two-way to Multiway Component Analysis. 2014. URL: arXiv:1403.4462 [cs.NA].
- [Dolgov, Savostyanov, 2014] *Dolgov S. V., Savostyanov D. V.* Alternating minimal energy methods for linear systems in higher dimensions // SIAM J. Scientific Computing. 2014. V. 36. Iss. 5. P. A2248–A2271.
- [Dolgov et al., 2012] *Dolgov S., Khoromskij B., Savostyanov D.* Superfast Fourier transform using QTT approximation // J. Fourier Analysis and Applications. 2012. V. 18. Iss. 5. P. 915–953.
- [Hesthaven et al., 2016] *Hesthaven J. S., Rozza G., Stamm B.* Certified Reduced Basis Methods for Parametrized Partial Differential Equations. Springer, 2016. 121 p.
- [Holtz et al., 2011] *Holtz S., Rohwedder T., Schneider R.* The Alternating Linear Scheme for Tensor Optimization in the Tensor Train Format // SIAM J. Scientific Computing. 2011. V. 34. Iss. 2. P. A683–A713.
- [Kazeev et al., 2012] *Kazeev V. A., Khoromskij B. N.* Low-Rank Explicit QTT Representation of the Laplace Operator and Its Inverse // Matrix Analysis and Applications. 2012. V. 33. Iss. 3. P. 742–758.
- [Oseledets, 2011] *Oseledets I. V.* Tensor-train decomposition // SIAM J. Scientific Computing. 2011. V. 33. Iss. 5. P. 2295–2317.
- [Oseledets, Tyrtshnikov, 2010] *Oseledets I., Tyrtshnikov E.* TT-cross approximation for multidimensional arrays // Linear Algebra and its Applications. 2010. V. 432. Iss. 1. P. 70–88.
- [Oseledets, Tyrtshnikov, 2011] *Oseledets I. V., Tyrtshnikov E. E.* Algebraic wavelet transform via quantics tensor train decomposition // SIAM J. Scientific Computing. 2011. V. 33. Iss. 3. P. 1315–1328.

NUMERICAL REDUCTION OF PROBLEM DIMENSIONALITY BY MEANS OF LOW-RANK APPROXIMATIONS

V. N. Blinov

Science Center in Chernogolovka, Russian Academy of Sciences

We consider a general workflow of exploiting tensor decompositions for dimensionality reduction of numerical problems. The effectiveness of this approach strongly depends on certain properties of decomposition. These properties are the subject of our discussion.

Keywords: tensor decompositions, tensor train.

ПРЯМОЕ ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТУРБУЛЕНТНОГО ПОГРАНИЧНОГО СЛОЯ НАД ВЗВОЛНОВАННОЙ ВОДНОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ: ЭФФЕКТЫ КАПИЛЛЯРНОЙ РЯБИ

О. А. Дружинин¹, Ю. И. Троицкая¹, Ву Тинг Цай²

¹ Институт прикладной физики Российской академии наук (ИПФ РАН)

² Национальный университет Тайваня, Тайбэй, Тайвань

Параметризация процесса взаимодействия волн с ветром является ключевой задачей моделирования ветрового волнения. При этом наибольший интерес представляют волны с достаточно большой крутизной, когда существенны нелинейные эффекты, связанные с отрывом погранслоя и формированием вихревых структур вблизи водной поверхности. Одним из факторов, усложняющих исследование воздушного потока над взволнованной водной поверхностью, является наличие «паразитной» капиллярной ряби. В этом случае современные методы измерений (контактные и PIV) пока неспособны дать полную, детальную картину обтекания в окрестности вязкого подслоя и буферной зоны. Альтернативой является проведение прямого численного моделирования (DNS). В работе обсуждаются методы и результаты DNS турбулентного ветра над взволнованной водной поверхностью в присутствии капиллярной ряби.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты № 17-05-00703, 16-05-00839, 16-55-52022, 15-35-20953). Разработка алгоритмов и теоретический анализ результатов численного моделирования выполнены при поддержке Российского научного фонда (проекты № 14-17-00667, 15-17-20009).

Ключевые слова: прямое численное моделирование, турбулентный ветер, двумерные волны на воде, капиллярная ряба.

ВВЕДЕНИЕ

Процессы обмена массой, импульсом и теплом между атмосферой и океаном оказывают непосредственное влияние на динамику планетарного погранслоя и формирование климата. Моделирование этих процессов основано на процедуре параметризации, связывающей турбулентные потоки с градиентами средних полей плотности и скорости воздуха посредством так называемых балк-формул. Коэффициенты обмена, содержащиеся в балк-формулах, зависят от многих факторов и деталей процесса взаимодействия ветра с волнами [Fairall et al., 2003]. Одним из таких факторов является присутствие капиллярной ряби на поверхности энергонесущих волн [Longuet-Higgins, 1963]. Влияние ряби на свойства течений в поверхностных волнах довольно подробно изучалось в лабораторном эксперименте [Ermakov et al., 1986] и с помощью численного моделирования [Hung, Tsai, 2009]. Однако до сих пор влияние капиллярной ряби на свойства атмосферного погранслоя детально не рассматривалось.

Дружинин Олег Александрович — ведущий научный сотрудник, доктор физико-математических наук, druzhinin@hydro.appl.sci-nnov.ru

Троицкая Юлия Игоревна — заведующая отделом, доктор физико-математических наук, yuliya@hydro.appl.sci-nnov.ru

Ву Тинг Цай — заведующий лабораторией, wtsai@ntu.edu.tw

Присутствие капиллярной ряби значительно затрудняет измерение параметров воздушного потока в непосредственной близости от водной поверхности (высотой порядка миллиметра) в лабораторном эксперименте [Троицкая и др., 2010; Donelan et al., 2005; Reul, 1999; Troitskaya et al., 2011]. С другой стороны, характеристики течения именно в этой области определяют, является ли обтекание волн ветром отрывным или безотрывным, что чрезвычайно важно для построения теоретических моделей взаимодействия волн с ветром.

В вихреразрешающем моделировании (Large Eddy Simulation, LES) общепринятым является учёт эффекта ряби посредством модификации параметра «шероховатости» в профиле средней скорости [Sullivan et al., 2008]. Неясно, насколько этот подход оправдан, поскольку в LES-процессы на расстояниях порядка амплитуды ряби от водной поверхности (в пределах нескольких сантиметров от водной поверхности, в вязком подслое и буферной зоне) не разрешаются и являются подсеточными.

По-видимому, достаточное разрешение эффектов капиллярной ряби при обтекании её воздушным потоком способно дать лишь прямое численное моделирование (Direct Numerical Simulation, DNS). Оно не требует каких-либо гипотез замыкания, поскольку в DNS разрешаются все физически важные масштабы потока вплоть до масштаба вязкой диссипации. В ранних работах (например, [Sullivan et al., 2000]) DNS турбулентного ветра над волнами проводилось при относительно небольшом числе Рейнольдса (основанном на длине волны λ , балк-скорости потока и молекулярной вязкости воздуха) $Re = 8800$ и для крутизны волн $ka = 0,1$ (где k — волновое число; a — амплитуда волны). Позже в работе [Yang, Shen, 2010] DNS использовалось для исследования турбулентного потока над волнами для крутизны волны $ka = 0,25$ при $Re \approx 10000$. Несколько большего числа Рейнольдса ($Re = 15\,000$) удалось достичь при крутизне $ka = 0,2$ [Druzhinin et al., 2012]. Однако до сих пор в литературе не публиковались результаты DNS, учитывающие присутствие ряби на поверхности энергонесущих волн.

В данной работе впервые проводится прямое численное моделирование турбулентного ветра над взволнованной водной поверхностью при числе Рейнольдса $15\,000$ и крутизне волны до $ka = 0,2$ с учётом присутствия ряби. Волновые числа компонент ряби считаются достаточно большими (на порядок превосходящими волновое число энергонесущей компоненты). При этом предполагается, что рябь можно рассматривать как «паразитную», т. е. стационарную относительно энергонесущей волны.

1. ФОРМУЛИРОВКА ЗАДАЧИ

Проводится прямое численное моделирование турбулентного воздушного течения Куэтта над взволнованной водной поверхностью, где на основную, энергонесущую волну накладывается мелкомасштабная рябь. Схема численного эксперимента аналогична схеме, рассматриваемой в работе [Druzhinin et al., 2012], где проводилось DNS турбулентного воздушного потока над моногармонической волной (рис. 1). Рассматривается декартова система координат с осью x , ориентированной в направлении среднего воздушного потока,

осью z , направленной вертикально вверх (против ускорения свободного падения g) и осью y в поперечном направлении, параллельном фронту волны. Рассматривается двумерная поверхностная волна с амплитудой a , длиной λ и фазовой скоростью c , периодическая в направлении x . В данной работе рассматривается крутизна волны до $ka = 2\pi a/\lambda = 0,2$.

Моделирование DNS проводится в системе отсчёта, движущейся с фазовой скоростью волны, т. е. горизонтальная координата x в этой системе отсчёта связана с координатой в лабораторной системе отсчёта x' соотношением $x = x' - ct$. Таким образом, в движущейся системе отсчёта нижняя граница области счёта, совпадающая с волной, стационарна. На этой границе ставится условие прилипания, т. е. x - и z -компоненты скорости воздушного потока здесь совпадают с орбитальными скоростями частиц жидкости в волне (с учётом вклада ряби) и не зависят от времени. Рассматривается область счёта с размерами $L_x = 6\lambda$, $L_y = 4\lambda$ и $L_z = \lambda$ в x -, y - и z -направлениях. Течение предполагается периодическим в направлениях x и y . Ставится условие прилипания и на верхней (плоской) границе, которая движется с балковой скоростью U_0 в направлении x . Благодаря этому условию создаётся внешний источник потока импульса за счёт действия вязкого напряжения сдвига, который компенсирует вязкую диссипацию кинетической энергии турбулентности и обеспечивает стационарность течения.

Численное моделирование основано на интегрировании полных трёхмерных уравнений Навье-Стокса для несжимаемой жидкости в безразмерных переменных в виде [Монин, Яглом, 1992]:

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + \frac{\partial(U_i U_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j \partial x_j}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial U_j}{\partial x_j} = 0, \quad (2)$$

где U_i ($i = x, y, z$) — компоненты скорости; P — давление. Переменные в выражениях (1), (2) нормированы на длину волны λ и балковую скорость U_0 , давление нормировано на ρU_0^2 (где ρ — плотность воздуха). Балковое число Рейнольдса равно

$$\text{Re} = \frac{U_0 \lambda}{\nu}. \quad (3)$$

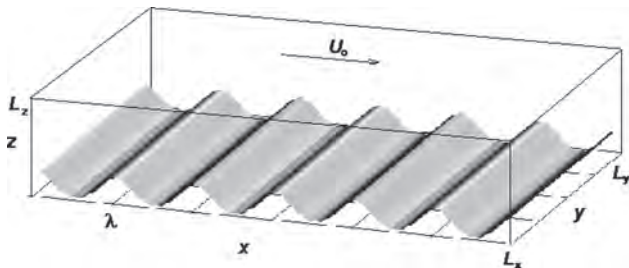


Рис. 1. Схема численного эксперимента

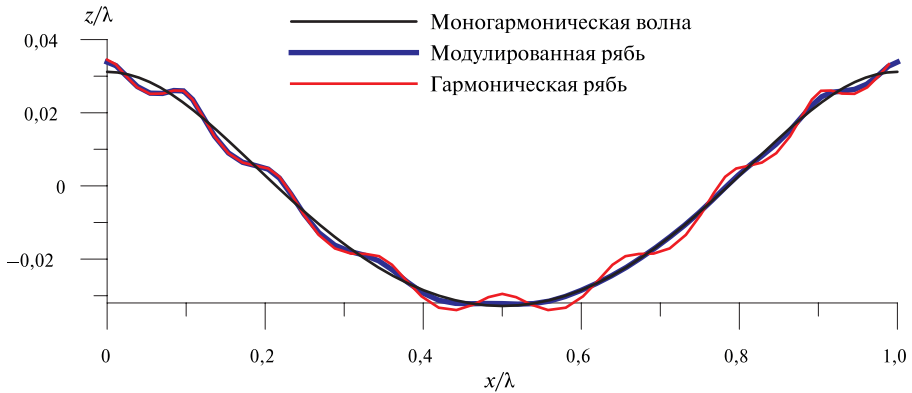


Рис. 2. Вид волновой поверхности для моногармонической волны (чёрная линия), волны с модулированной и гармонической рябью (синяя и красная линии), соответственно

Для того чтобы избежать эффектов, связанных с сильной геометрической нелинейностью при интегрировании уравнений (1)–(3) из-за волнообразной нижней границы (см. рис. 1), используется конформное преобразование координат, переводящее плоскость (x, z) в декартовых координатах в плоскость (ξ, η) в криволинейных координатах, а именно:

$$x = \xi - a_0 \exp(-k\eta) \cdot \sin k\xi - a_1 \left[\exp(-k_1\eta) \cdot \sin k_1\xi + a_2 \left[\exp(-k_2\eta) \cdot \sin(k_2\xi + \varphi) + \exp(-k_3\eta) \cdot \sin(k_3\xi - \varphi) \right] \right], \quad (4)$$

$$z = \eta + a_0 \exp(-k\eta) \cdot \cos k\xi + a_1 \left[\exp(-k_1\eta) \cdot \cos k_1\xi + a_2 \left[\exp(-k_2\eta) \cdot \cos(k_2\xi + \varphi) + \exp(-k_3\eta) \cdot \cos(k_3\xi - \varphi) \right] \right], \quad (5)$$

где $k = 2\pi$ и a_0 — волновое число и амплитуда энергонесущей волны; $k_1 = 8k$ и a_1 — волновое число и амплитуда ряби; $a_2, k_2 = 9k, k_3 = 7k$ и $\varphi = -0,9$ — характеристики модуляции ряби. В DNS, помимо моногармонической волны (при $a_1 = 0$), рассматриваются два случая: случай гармонической ряби ($a_1 = 0,1a_0, a_2 = 0$) и случай модулированной ряби ($a_1 = 0,05a_0, a_2 = 0,5$) (рис. 2).

При преобразовании уравнений (4), (5) волновая граница переходит в плоскую границу $\eta = 0$. В дополнение используется также отображение по вертикальной координате η , обеспечивающее достаточное разрешение больших градиентов полей скорости и температуры благодаря сгущению узлов сетки вблизи нижней и верхней границ [Druzhinin et al., 2012].

Уравнения (1)–(3) решались в прямоугольной области с размерами $0 < \xi < 6, 0 < y < 4$ и $0 < \eta < 1$ при помощи метода конечных разностей второго порядка на разнесённой сетке, состоящей из $360 \times 240 \times 180$ узлов. Интегрирование по времени осуществлялось с использованием метода Адамса-Башфорфа второго порядка точности в две стадии на каждом временном

шаге n . На нижней и верхней границах накладывались условия прилипания (Дирихле) для скорости воздушного потока. На боковых границах, при $x = 0, 6$ и $y = 0, 4$, на все поля накладывались периодические граничные условия. Уравнение Пуассона для давления решалось методом итераций.

Течение инициировалось как слабо-возмущённое ламинарное течение Куэтта, $U_i = z\delta_{ix} + u_{if}$ ($i = x, y, z$), где u_{if} — бездивергентное, изотропное, однородное случайное поле с широким спектром и амплитудой порядка 0,05. Интегрирование во времени сначала проводилось до окончания переходных процессов, связанных с выбором начального условия для воздуха. По достижении статистически стационарного режима течения проводилось осреднение по времени и координате y . Для усреднения по времени брались поля скорости в дискретные моменты t_k ($k = 1, \dots, 1000$) с интервалом $t_{k+1} - t_k = 0,2$. Помимо осреднения по y и t рассчитывались также фазовые (оконные) средние по длине волны.

Таким образом, для данного поля $f(x, y, z, t)$ определялись фазовое среднее и дисперсия:

$$\langle f \rangle(x, z) = \frac{1}{6N_t N_y} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_t} \sum_{n=0}^5 f(x + n\lambda, y_j, z, t_k), \quad (6)$$

$$\langle f^2 \rangle(x, z) = \frac{1}{6N_t N_y} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_t} \sum_{n=0}^5 f^2(x + n\lambda, y_j, z, t_k), \quad (7)$$

где $N_y = 240$, $N_y = 1000$ и $0 < x < 1$. Далее флуктуация поля f определялась как:

$$f'(x, z) = \left[\langle f^2 \rangle(x, z) - \langle f \rangle^2(x, z) \right]^{1/2}. \quad (8)$$

[В случае расчёта потока, например $\langle U_x U_z \rangle$, в уравнение (7) подставляется произведение $(U_x U_z)$ вместо f^2 , и в выражение (8) — разность $\left[\langle U_x U_z \rangle - \langle U_x \rangle \langle U_z \rangle \right]$.]

Средний вертикальный профиль поля f , $[f](z)$, рассчитывался осреднением фазового среднего по продольной координате:

$$[f](z) = \frac{1}{N_x} \sum_{i=1}^{N_x/6} \langle f \rangle(x_i, z). \quad (9)$$

Вертикальный профиль турбулентного потока импульса $\tau(z)$ определяется в виде

$$\tau(z) = \left[\langle U_x U_z \rangle - \langle U_x \rangle \langle U_z \rangle \right]. \quad (10)$$

Таким образом, динамическая скорость (трения), u_* , определяется из асимптотического значения потока импульса на достаточно большом расстоянии от поверхности, где τ стремится к константе, в виде

$$u_* = \sqrt{-\tau}. \quad (11)$$

Численный алгоритм верифицировался сравнением результатов DNS для турбулентного погранслоя над плоской и волновой поверхностью в отсутствие ряби при различных балковых числах Ричардсона и числах Рейнольдса. Результаты DNS сравнивались с известными численными и экспериментальными данными [Druzhinin et al., 2012].

2. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Численное моделирование проводилось для различной крутизны волны ka и отношения фазовой скорости к динамической скорости (возраста волны). Рассматривались два случая: случай относительно крутых («молодых») волн, фазовая скорость которых мала по сравнению с балковой скоростью ветра, $ka = 0,2$ и $c/U_0 = 0,05$ (или $c/u_* \approx 2$, где u_* — скорость трения), и случай относительно пологих («зрелых») волн, с крутизной $ka = 0,1$ и фазовой скоростью $c/U_0 = 0,2$ ($c/u_* \approx 10$). Вычисления проводились для как для моногармонической волновой поверхности, так и для случаев с гармонической и модулированной рябью.

Мгновенные распределения модуля завихренности в центральной плоскости (x, z) , полученные в DNS для случая «молодых» и «зрелых» волн в момент времени $tU_0/\lambda = 400$, представлены на рис. 3а, б. На рисунках изображены поля завихренности для волновой поверхности без ряби (верхняя панель), с модулированной рябью (средняя панель) и с гармонической рябью (нижняя панель).

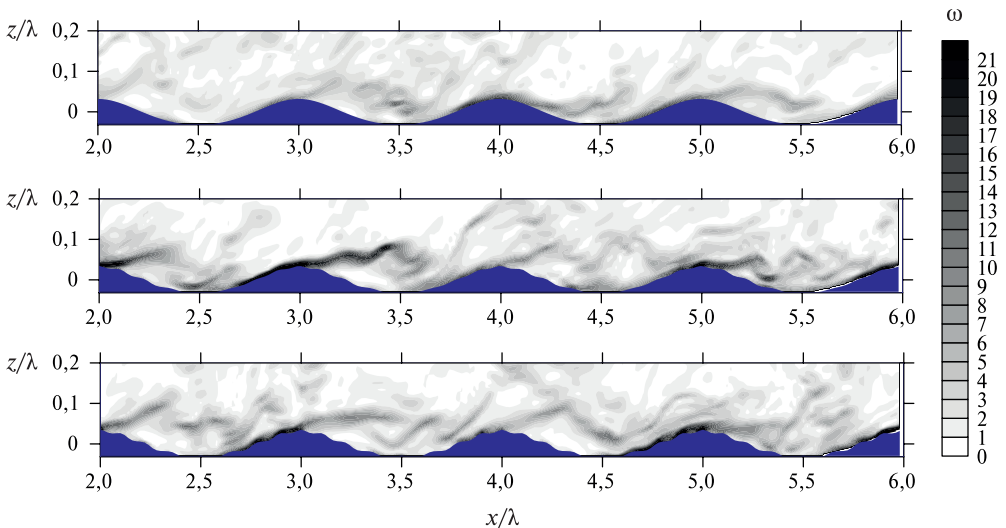


Рис. 3а. Распределение модуля завихренности в центральной плоскости (x, z) в воздушном потоке над взволнованной водной поверхностью без ряби (верхняя панель), с модулированной рябью (средняя панель) и гармонической рябью (нижняя панель) в DNS для «молодых» волн ($ka = 0,2$; $c/U_0 = 0,05$) в момент времени $U_0 t/\lambda = 300$

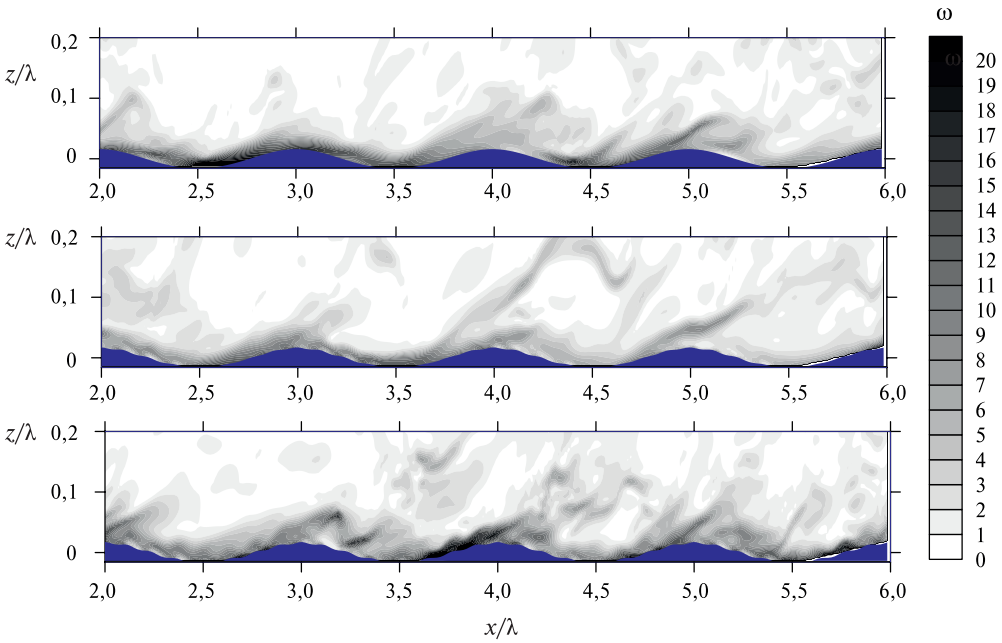


Рис. 3б. То же, что и на рис. 3а, но для «зрелых» волн ($ka = 0,1$; $c/U_0 = 0,2$)

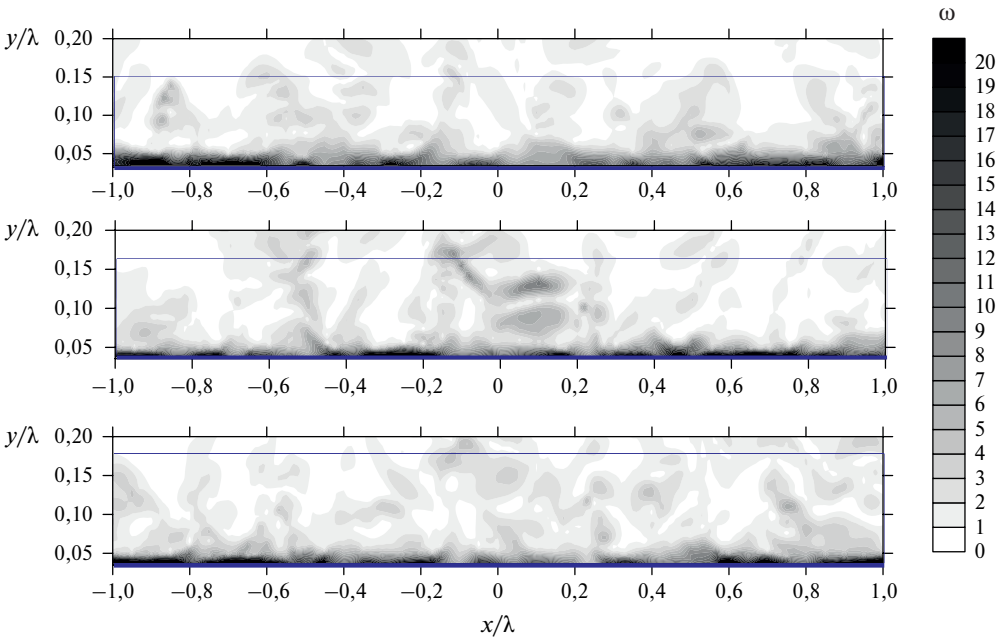


Рис. 4а. То же, что и на рис. 3а, но в плоскости (y, z)

На рис. 4а и б показаны поля завихренности в центральной (y, z) плоскости и в горизонтальной (x, y) при $z/\lambda = 0,042$ для случая «молодых» волн (поле ω в случае «зрелых» волн имеет качественно похожую структуру).

Рисунки показывают наличие типичных для турбулентного погранслоя вихревых структур (так называемых « Λ -вихрей», см. например, [Moin, Kim, 1985]), отрывающихся от водной поверхности вблизи гребней волн и «уходящих» вглубь воздушного потока.

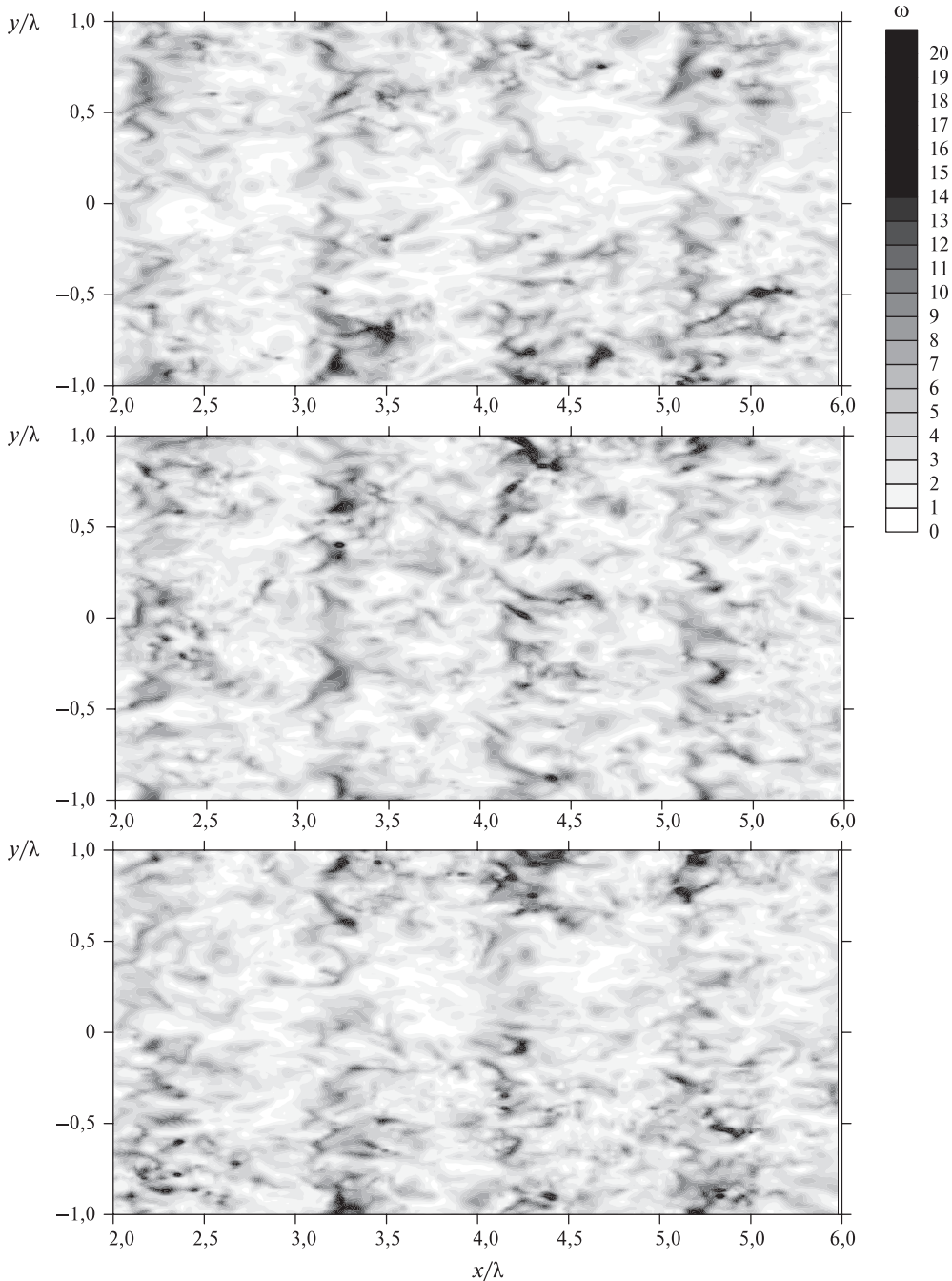


Рис. 4б. То же, что и на рис. 2а, но в плоскости (x, y) при $z/\lambda = 0,042$

Рисунки 4а и б показывают, что присутствие ряби приводит к формированию областей завихренного движения воздуха во впадинах волн ряби, а также к генерации более интенсивных, по сравнению со случаем без ряби, подковообразных вихрей, отрывающихся от водной поверхности.

Рисунки 5а и б демонстрируют мгновенные поля вектора скорости воздуха в центральной горизонтальной плоскости (x, z), полученные в DNS для «молодых» и «зрелых» волн в те же моменты времени, что и на рис 3, 4, в системе отчёта, движущейся с фазовой скоростью поверхностной волны.

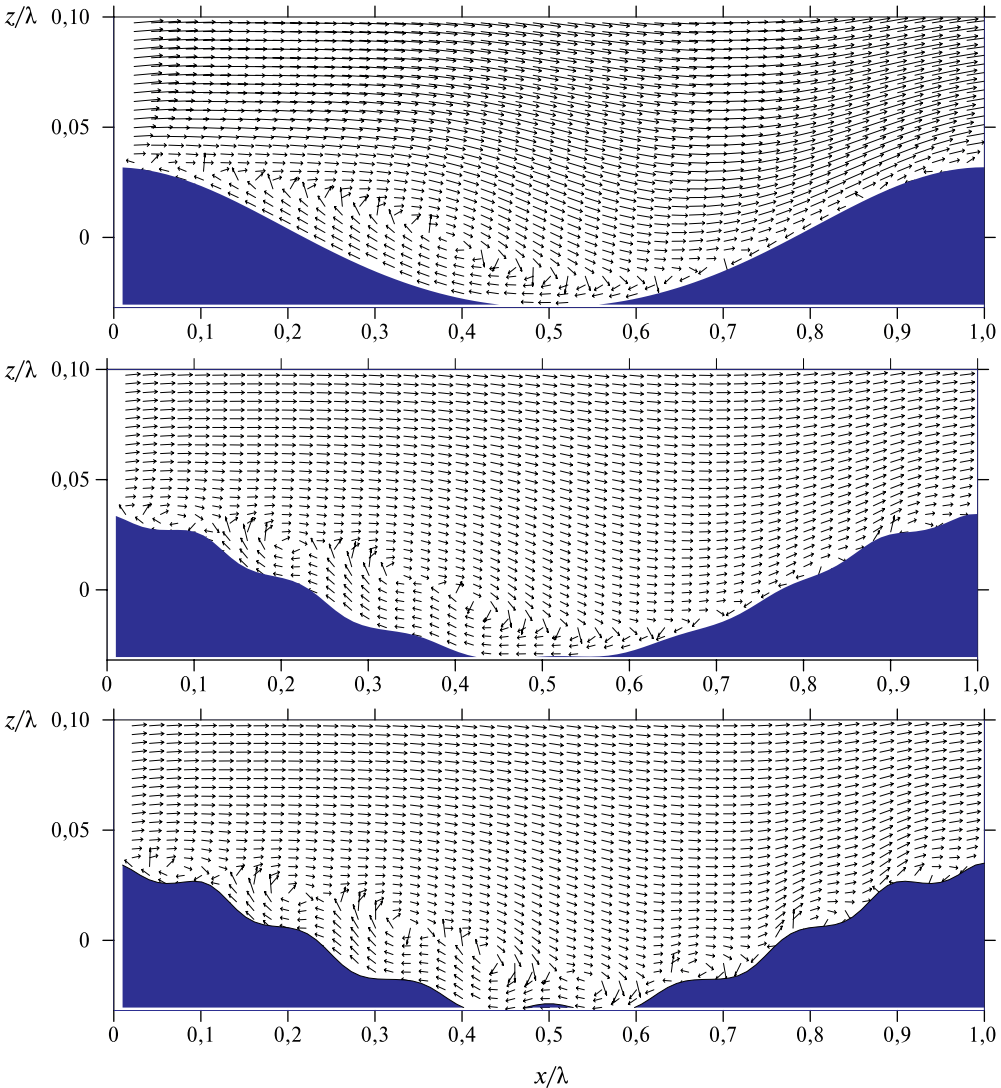


Рис. 5а. Мгновенные векторные поля скорости воздуха в центральной плоскости (x, z), полученные в DNS для «молодых» волн ($ka = 0,2, c/U_0 = 0,05$) в те же моменты времени, что и на рис. 3, 4, в системе отчёта, движущейся с фазовой скоростью поверхностной волны

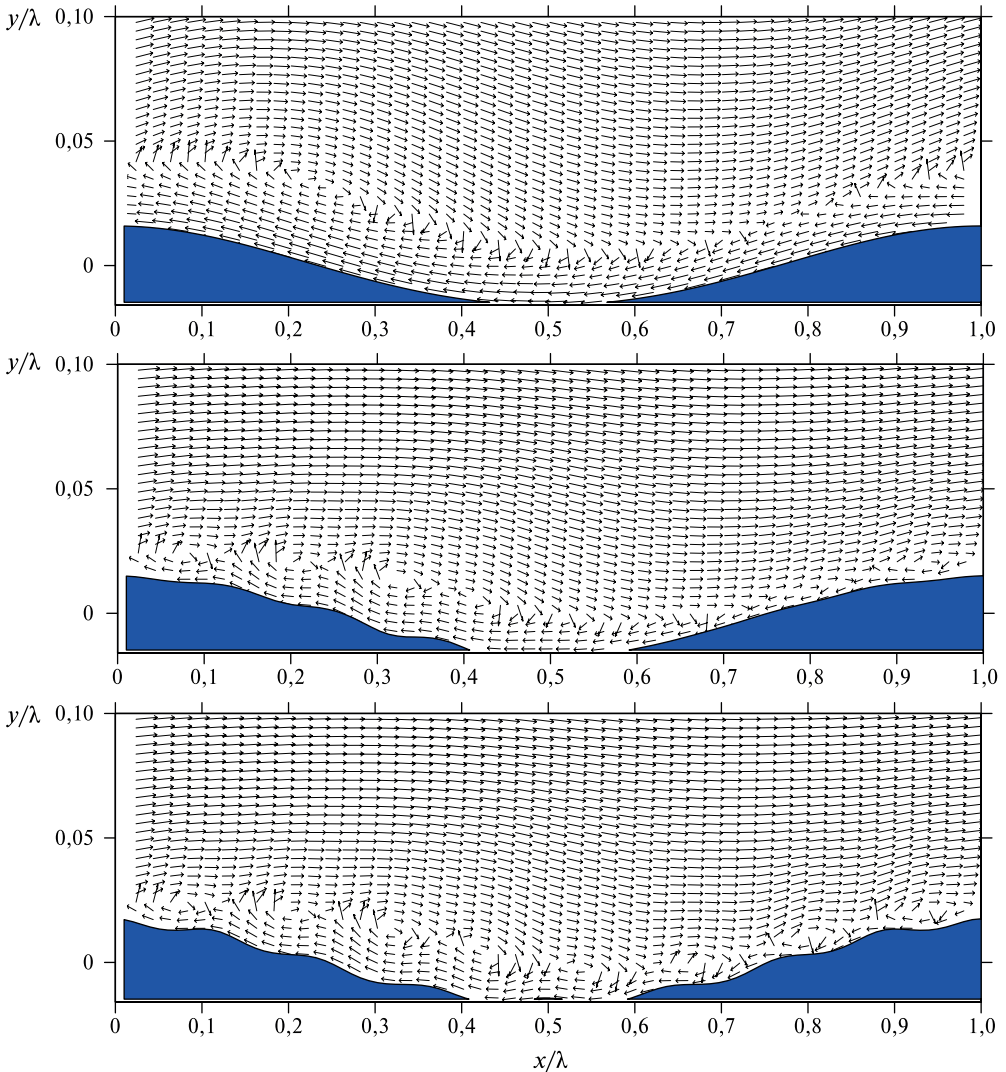


Рис. 5б. Мгновенные поля вектора скорости воздуха в центральной плоскости (x, z), полученные в DNS для «зрелых» волн ($ka = 0,2, c/U_0 = 0,05$) в те же моменты времени, что и на рис. 3, 4, в системе отчёта, движущейся с фазовой скоростью поверхностной волны

Рисунки 5а и б показывают, что под действием ряби слой совпадения (или критический слой, $z_c(x)$), где скорость воздушного потока равна фазовой скорости поверхностной волны ($U_x(z_c) = c$), испытывает осцилляции. Рисунок 5б показывает также, что в случае «зрелых волн» под влиянием ряби критический слой приближается к водной поверхности по сравнению со случаем без ряби.

Рисунки 6а и 6б демонстрируют мгновенные поля модуля завихренности в плоскости (x, z), полученные осреднением соответствующих трёхмерных полей по фронту волны (т.е. по координате y), для «молодых» и «зрелых» волн.

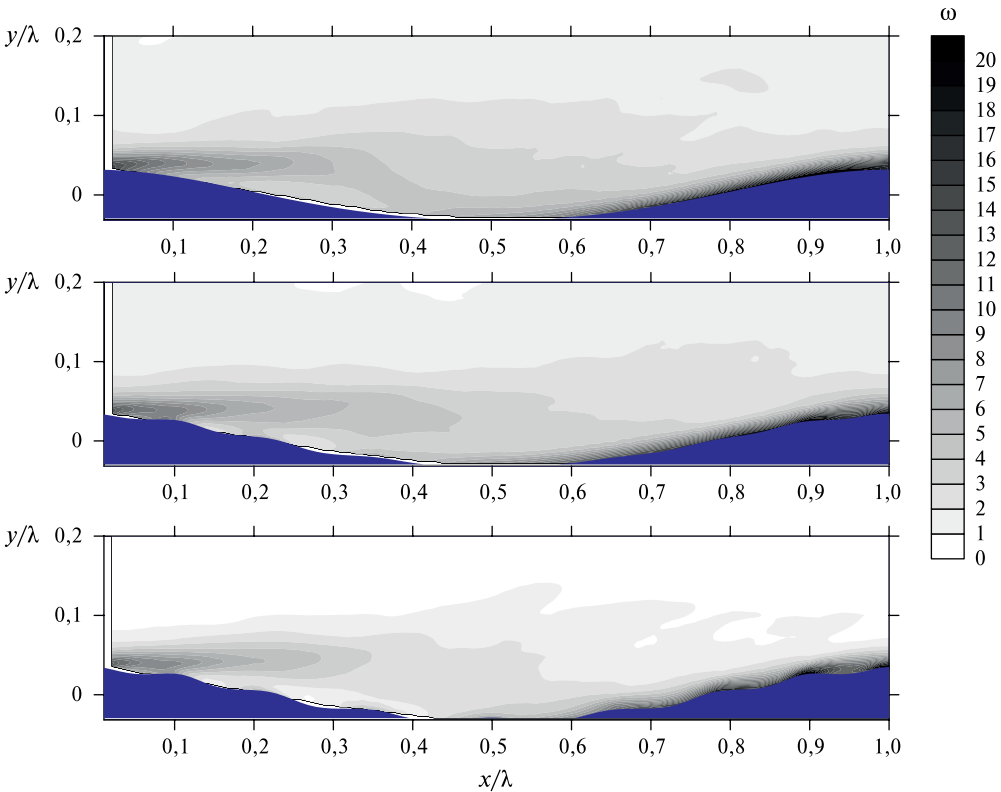


Рис. 6а. Распределение модуля завихренности $\omega(x, z)$, осреднённое по фронту волны, над поверхностью без ряби (верхняя панель), с модулированной рябью (средняя панель) и гармонической рябью (нижняя панель) в DNS для «молодых» волн ($ka = 0,2$, $c/U_0 = 0,05$)

Рисунки 6а и б показывают, что осреднённые по фронту волны поля течения в случае как гармонической, так и модулированной ряби имеют качественно похожую структуру по сравнению со случаем без ряби. Таким образом, несмотря на присутствие отрывных зон потока в мгновенных полях скорости воздуха на рис. 3, осреднённое по фронту волны поле скорости является безотрывным, как в отсутствии ряби, так и при её наличии. Заметим, что безотрывная структура среднего поля скорости воздушного потока над взволнованной водной поверхностью уже обсуждалась ранее [Druzhinin et al., 2012].

Помимо мгновенных средних (по фронту волны) вычислялись также вертикальные профили средних скорости воздуха $[U]$, кинетической энергии турбулентности $[E]$, скорости её диссипации $[\varepsilon]$, и турбулентный, волновой и вязкий потоки импульса τ_r , τ_w , и τ_v , согласно процедуре осреднения, описанной в уравнениях (6–10).

Кинетическая энергия вычислялась в виде

$$[E] = \frac{1}{2} \sum_{i=x,y,z} [U_i'^2], \quad (12)$$

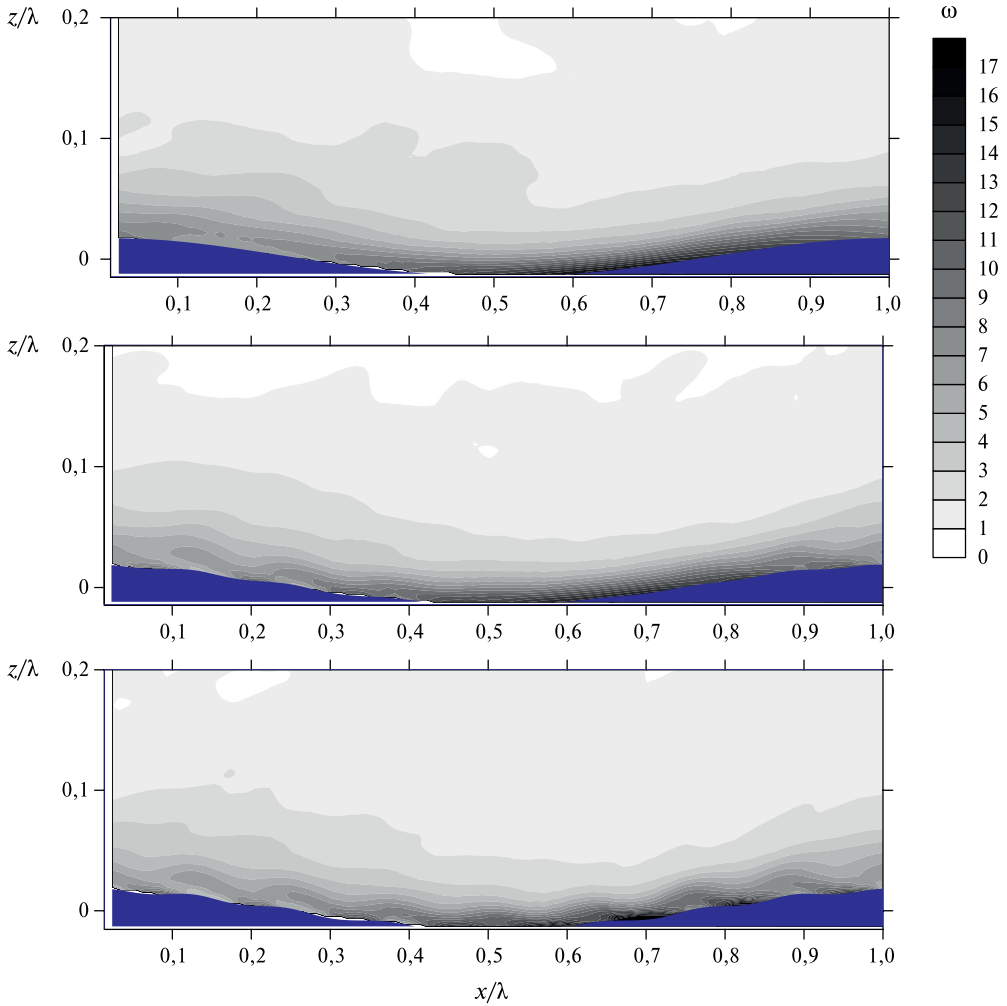


Рис. 66. То же, что и на рис. 6а, но для «зрелых» волн ($ka = 0,1, c/U_0 = 0,2$)

где флуктуации компонент скорости воздуха вычислялись согласно (8). Для определения средней скорости диссипации кинетической энергии турбулентности мгновенное поле f подставлялось в (6–8) в виде:

$$f = \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_j} \right)^2, \quad (13)$$

где турбулентные составляющие компонент скорости вычислялись как

$$\tilde{U}_i = U_i - \langle U_i \rangle. \quad (14)$$

Для определения соотношения потоков импульса (турбулентного, волнового и вязкого) удобно записать уравнение баланса потока импульса в виде выражения:

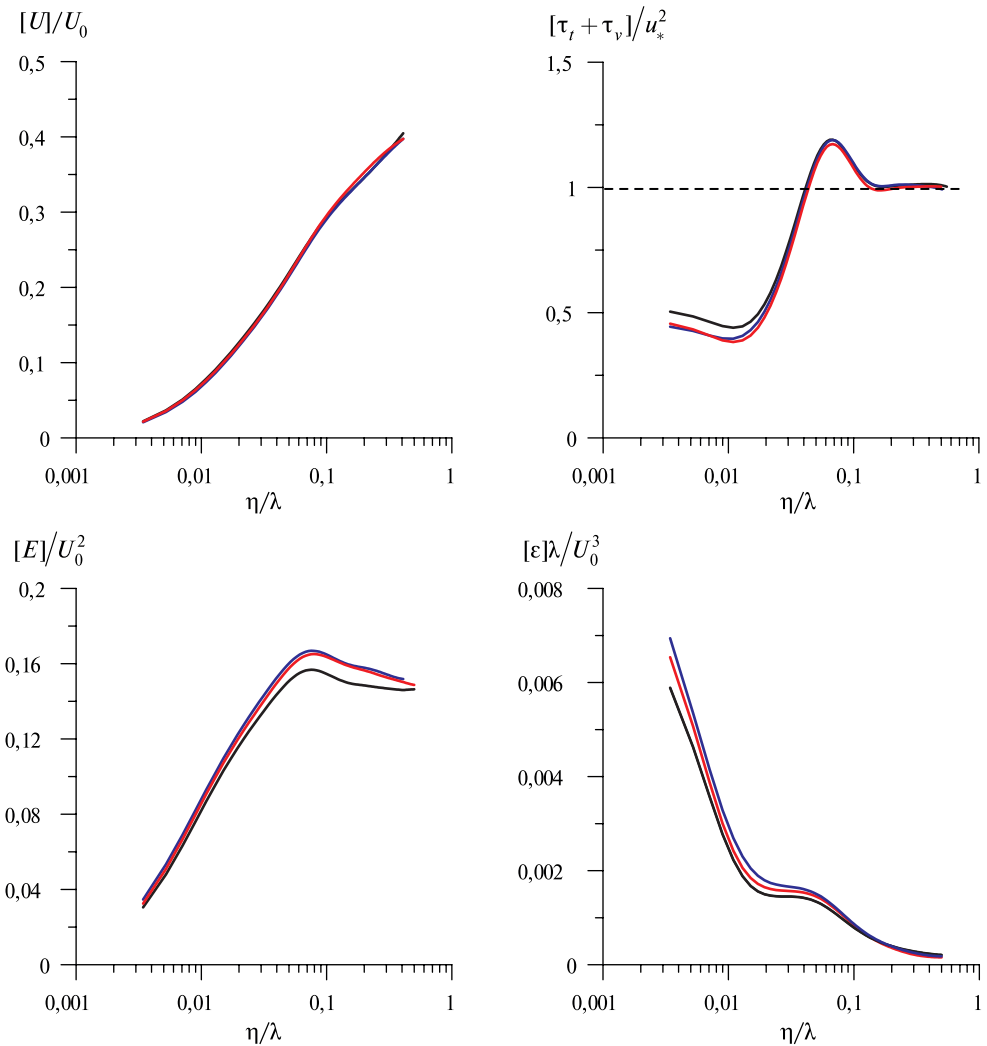


Рис. 7а. Вертикальные профили средней скорости $[U]$, суммы турбулентного и вязкого потоков импульса $(\tau_t + \tau_v)$, кинетической энергии турбулентности $[E]$, и скорости её диссипации $[\varepsilon]$ для случая «молодых» волн ($ka = 0,2$, $c/U_0 = 0,05$). Случаи модулированной и гармонической ряби показаны синим и красным цветом, случай без ряби — чёрным

$$\left[\frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial \langle U_x \rangle}{\partial \eta} + \frac{\partial z}{\partial \xi} \langle U_x^2 + P \rangle - \frac{\partial z}{\partial \eta} \langle U_x U_z \rangle \right] = \frac{u_*^2}{U_0^2}, \quad (15)$$

получающегося осреднением по ансамблю уравнения движения (1), переписанного в криволинейных координатах, и проинтегрированного по ξ . Уравнение (15) может быть переписано в более наглядном виде:

$$\tau_t + \tau_v + \tau_w = u_*^2, \quad (16)$$

где введены обозначения

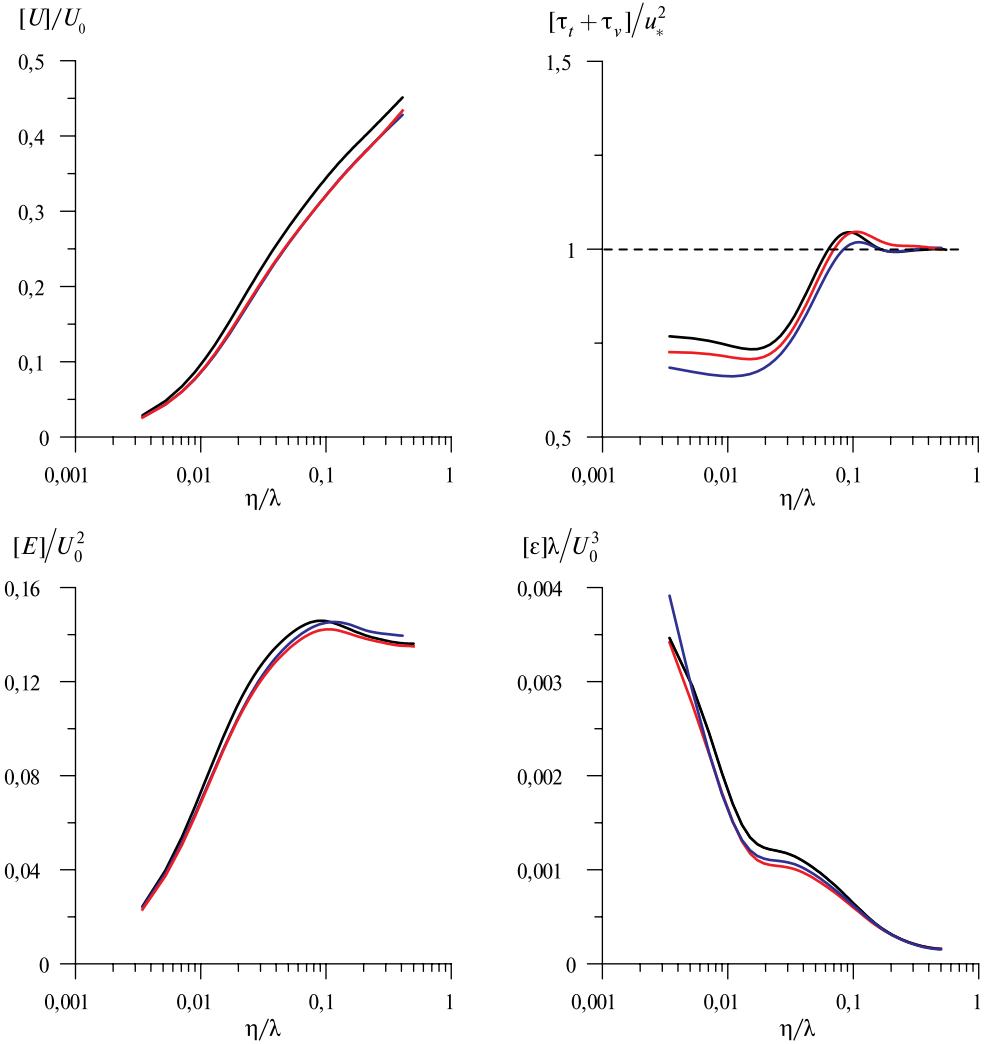


Рис. 7б. То же, что и на рис. 7а, но для случая «зрелых» волн ($ka = 0,1$, $c/U_0 = 0,2$)

$$\tau_v = \frac{U_0^2}{\text{Re}} \cdot \frac{d[\langle U_x \rangle]}{d\eta} \quad (17)$$

— для вязкого потока импульса (напряжения трения);

$$\tau_t = U_0^2 [\langle U_x \rangle \langle U_z \rangle - \langle U_x U_z \rangle] \quad (18)$$

— для турбулентного потока импульса;

$$\tau_w = U_0^2 \left[\frac{\partial z}{\partial \xi} \langle U_x^2 + P \rangle - \left(\frac{\partial z}{\partial \eta} - 1 \right) \langle U_x U_z \rangle - \langle U_x \rangle \langle U_z \rangle \right] \quad (19)$$

— для потока импульса, индуцированного поверхностной волной. При удалении от водной поверхности волновой поток импульса становится пренебре-

жимо малым, и сумма вязкого и турбулентного потоков стремится к u_*^2 . В непосредственной близости от водной поверхности τ_w определяет её сопротивление формы.

На рис. 7 представлены профили средней скорости, суммы вязкого и турбулентного потоков импульса, кинетической энергии турбулентности и скорости её диссипации.

Рисунок 7а показывает, что под действием ряби в случае «молодых» волн примерно на 10% возрастает вклад волнового потока импульса вблизи водной поверхности, при $\eta/\lambda < 0,02$ (т. е. в вязком подслое), кинетической энергии турбулентности (в буферной зоне и в начале логарифмического слоя, при $0,1 < \eta/\lambda < 0,2$) и скорости её диссипации (в вязком подслое), по сравнению со случаем поверхностной волны без ряби. В этом случае профиль средней скорости мало меняется под действием ряби. С другой стороны, в случае «зрелых» волн эффект ряби аналогичен эффекту большей шероховатости водной поверхности в профиле средней скорости (см. рис. 7б), так как скорость уменьшается, а наклон в логарифмической области (при $\eta/\lambda > 0,1$) остаётся таким же, как и в отсутствии ряби. Как и в случае «молодых» волн, под действием ряби возрастает вклад волнового потока импульса. С другой стороны, кинетическая энергия турбулентности и её диссипация по сравнению со случаем без ряби изменяются незначительно.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Впервые выполнено прямое численное моделирование турбулентного воздушного потока над взволнованной водной поверхностью с учётом присутствия «паразитной» ряби. Рассмотрено два случая: относительно крутых («молодых») волн, фазовая скорость которых мала по сравнению с балковой скоростью ветра, $ka = 0,2$ и $c/U_0 = 0,05$ (или $c/u_* \approx 2$, где u_* — скорость трения), и случай относительно пологих («зрелых») волн, с крутизной $ka = 0,1$ и фазовой скоростью $c/U_0 = 0,2$ ($c/u_* \approx 10$). Результаты показывают, что под влиянием ряби происходит интенсификация процессов «отрыва» вихревых структур мгновенного поля скорости ветра в окрестности гребней поверхностных волн. Поле скорости ветра, осреднённое по фронту волны, однако, является безотрывным, как в присутствии ряби, так и при её отсутствии. В случае «молодых» волн, под действием ряби, вблизи водной поверхности, возрастает кинетическая энергия турбулентности и скорость диссипации, по сравнению со случаем течения без ряби. Вертикальный профиль средней скорости ветра при этом почти не изменяется. С другой стороны, в случае «зрелых» волн присутствие ряби обуславливает увеличение эффективной «шероховатости» водной поверхности и связанное с ним уменьшение средней скорости ветра. Турбулентная кинетическая энергия при этом мало меняется по сравнению со случаем без ряби. Как для «молодых», так и для «зрелых» волн рябь приводит к увеличению потока импульса, индуцированного поверхностными волнами, которое более заметно в случае «зрелых» волн.

ЛИТЕРАТУРА

- [Монин, Яглом 1992], *Монин А. С., Яглом А. М.* Статистическая гидромеханика. Т. 1. СПб: Гидрометеиздат, 1992, 694 с.
- [Троицкая и др., 2010] *Троицкая Ю. И., Сергеев Д. А., Ермакова Г. Н., Баландина Г. Н.* Тонкая структура турбулентного пограничного слоя атмосферы над водной поверхностью // Известия РАН. Физика атмосферы и океана. 2010. Т. 46. № 1. С. 119–130.
- [Donelan et al., 2005] *Donelan M. A., Babanin A. V., Young I. R., Banner M. L., McCormick C.* Wave follower field measurements of the wind input spectral function Pt. 1: Measurements and calibrations // J. Atmospheric and Oceanic Technology. 2005. V. 22. P. 799–813.
- [Druzhinin et al., 2012] *Druzhinin O. A., Troitskaya Yu. I., Zilitinkevish S. S.* Direct numerical simulation of a turbulent wind over a wavy water surface // J. Geophysical Research. 2012. V. 117. C00J05. doi: 10.1029/2011JC007789.
- [Fairall et al., 2003] *Fairall C. W., Bradley E. F., Hare J. E.* Bulk parameterization of air-sea fluxes: updates and verification for the COARE algorithm // J. Climate. 2003. V. 16. P. 571–591.
- [Ermakov et al., 1986] *Ermakov S. A., Ruvinsky K. D., Salashin S. G., Freidman G. I.* Experimental investigations of the generation of capillary–gravity ripples by strongly nonlinear waves on the surface of a deep fluid // Izvestiya. Atmospheric and Oceanic Physics. 1986. V. 22. P. 835–842.
- [Hung, Tsai, 2009] *Hung L. P., Tsai W. T.* The Formation of Parasitic Capillary Ripples on Gravity–Capillary Waves and the Underlying Vortical Structures // J. Physical Oceanography. 2009. V. 39. P. 263–289.
- [Longuet-Higgins, 1963] *Longuet-Higgins M.* The generation of capillary waves by steep gravity waves // J. Fluid Mechanics. 1963. V. 16. P. 138–159.
- [Moin, Kim, 1985] *Moin P., Kim J.* The structure of the vorticity field in the turbulent channel flow. Pt. 1. Analysis of instantaneous fields and statistical correlations // J. Fluid Mechanics. 1985. V. 155, P. 441–464.
- [Reul et al., 1999] *Reul N., Branger H., Giovanangeli J.-P.* Airflow separation over unsteady breaking waves // Physics of Fluids. 1999. V. 11. P. 1959–1961.
- [Sullivan et al., 2000] *Sullivan P. P., McWilliams J. C., Moeng C.-H.* Simulation of turbulent flow over idealized water waves // J. Fluid Mechanics. 2000. V. 404. P. 47–85.
- [Sullivan et al., 2008] *Sullivan P. P., Edson J., Hristov T., McWilliams J. C.* Large-eddy simulations and observations of atmospheric marine boundary layers above nonequilibrium surface waves // J. Atmospheric Sciences. 2008. V. 65. P. 1225–1245.
- [Troitskaya et al., 2011] *Troitskaya Yu., Sergeev D., Ermakova O., Balandina G.* Statistical Parameters of the Air Turbulent Boundary Layer over Steep Water Waves Measured by the PIV Technique // J. Physical Oceanography. 2011. V. 41. P. 1421–1454.
- [Yang, Shen, 2010] *Yang D., Shen L.* Direct-simulation-based study of turbulent flow over various waving boundaries // J. Fluid Mechanics. 2010. V. 650. P. 131–180.

DIRECT NUMERICAL SIMULATION STUDY OF A TURBULENT STABLY STRATIFIED AIR FLOW ABOVE THE WAVY WATER SURFACE: THE EFFECTS OF CAPILLARY RIPPLES

O. A. Druzhinin¹, Yu. I. Troitskaya¹, Wu Ting Tsai²

¹ Institute of Applied Physics Russian Academy of Sciences (IAP RAS)

² National Taiwan University, Taipei, Taiwan

Parameterization of the interaction between surface waves and wind is a key problem of air-sea interaction. Of interest are the waves with sufficiently large slope when nonlinear effects related to boundary layer separation and vortex structures formation occur in the vicinity of the water surface. One of the factors complicating the study of the airflow above the water surface is related to the presence of “parasitic” capillary ripples. In this case, available measurements methods (such as contact methods and PIV) are not capable of providing full detailed information on the airflow structure in the viscous sublayer and buffer regions. An alternative approach is to perform Direct Numerical Simulation (DNS). In this study, we discuss methods and results of DNS of a turbulent wind above the waved water surface in the presence of capillary ripples.

Keywords: direct numerical simulation, turbulent wind, two-dimensional water waves, capillary ripples.

Druzhinin Oleg Aleksandrovich — senior researcher, doctor of physical and mathematical sciences, druzhinin@hydro.appl.sci-nnov.ru

Troitskaya Yuliya Igorevna — head of laboratory, doctor of physical and mathematical sciences, yuliya@hydro.appl.sci-nnov.ru

Wu Ting Tsai — head of laboratory, wttsai@ntu.edu.tw

КОНТРОЛЬ ТОЧНОСТИ ВЫЧИСЛЕНИЙ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ В АЛГОРИТМЕ ВАНГА-ЛАНДАУ

М. А. Фадеева³, Л. Н. Щур^{1,2}

¹ Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук (ИТФ им. Л. Д. Ландау РАН)

² Научный центр Российской академии наук в Черноголовке (НЦЧ РАН)

³ Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ)

Предложена модификация алгоритма Ванга-Ландау для вычисления плотности состояний статистических моделей. Модификация основана на вычислении матрицы переходов между уровнями энергии. Показано, что матрица переходов в алгоритме Ванга-Ландау при сходимости плотности состояний к истинному является стохастической. Наш подход даёт, во-первых, объяснение требованию равномерности гистограммы в оригинальном алгоритме Ванга-Ландау, во-вторых — возможность контролировать процесс схождения вычислений плотности состояний, также возможность контролировать точность вычислений. Критерии сходимости и точности основаны на поведении показателя — отклонения старшего собственного значения матрицы переходов от единицы.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (РНФ), проект № 14-21-00158.

Ключевые слова: плотность состояний, матрица переходов, алгоритм Монте-Карло, алгоритм Ванга-Ландау, стохастическая аппроксимация, случайная матрица, точность вычислений.

ВВЕДЕНИЕ

Компьютерное моделирование является мощным инструментом изучения физических процессов. Для моделирования задач в области статистической физики широко применяются подходы, основанные на методе Монте-Карло [Binder, Heermann, 2010]. В настоящей работе проводится анализ метода Ванга-Ландау [Wang, Landau, 2001], основанного на представлении статистической суммы в виде разложения по плотности состояний энергии. Знание плотности состояний даёт нам знание статистической суммы и свободной энергии. Знание последней, в свою очередь, позволяет вычислить наблюдаемые термодинамические величины. Таким образом, метод достаточно универсален, он широко применяется в моделировании. Недостатком его является отсутствие контроля сходимости решения [Belardinelli, Pereyra, 2016].

Статистическая сумма может быть представлена в виде разложения по плотности состояний энергии $g(E)$ (количество состояний с энергией E):

$$Z = \sum_E g(E) \cdot \exp\left(-\frac{E}{k_b T}\right),$$

Фадеева Марина Александровна — лаборант-исследователь НЦЧ РАН, магистрант НИУ ВШЭ, m-a-fadeeva@yandex.ru

Щур Лев Николаевич — заместитель председателя НЦЧ РАН, заведующий отделом, профессор, доктор физико-математических наук, Shchur@chg.ru

где T — температура; k_b — постоянная Больцмана. Основная идея метода Ванга-Ландау состоит в моделировании случайного блуждания по спектру энергии.

Для изучения свойств алгоритма разработан программный код на языке программирования C\C++ с использованием библиотеки LAPACK.

АЛГОРИТМ ВАНГА-ЛАНДАУ

В этом разделе приводится формальное описание алгоритма, которое удобно для нашего анализа, из статьи [Щур, 2014].

Процесс инициализации алгоритма Ванга-Ландау состоит из следующих шагов:

- I1) задаётся начальное состояние значений спинов s_i ;
- I2) вычисляется значение энергии начального состояния E_0 ;
- I3) присваиваются начальные значения плотности состояний $g(E) = 1$ для всех значений энергии E ;
- I4) устанавливаются начальные значения вспомогательной гистограммы $H(E) = 0$ для всех значений E ;
- I5) фиксируется начальное значение параметра $f = 2,718281828$.

Основной цикл алгоритма таков:

- C1) выбирается случайно спин s_i (для этого выберем случайно узел i на решётке);
- C2) вычисляется энергия E_{k+1} нового состояния решётки с перевёрнутым (виртуально) спином $s_i \rightarrow -s_i$;
- C3) если $g(E_{k+1}) < g(E_k)$, то принимается новое состояние;
- C4) если нет, то принимается новое состояние с вероятностью $g(E_k)/g(E_{k+1})$;
- C5) если не произошло событий C4 и C5, то состояние остаётся неизменённым.

Основной цикл алгоритма повторяется MN раз, где N — это число спинов в системе; M — параметр алгоритма, некоторое большое число, имеющее значение, например, 10^4 . После этого проверяется свойство «ровности» гистограммы. Эмпирически предлагается повторять процесс до тех пор, пока элементы вспомогательного алгоритма будут отличаться не более чем на 5 %. Если гистограмм недостаточно «ровная», то шаги основного цикла C1–C5 повторяются ещё MN раз.

Если мы достигли желаемого уровня «ровности» диаграммы, то делаются такие операции нормировки (сравните с операциями инициализации I3–I5):

- S1) отнормировать значения плотности состояний $g(E)$ для всех значений энергии E так, чтобы была выполнена нормировка на единицу значения плотности состояний энергии основного состояния моделируемой системы $g(E_{gs}) = 1$;

- S2) установить значения вспомогательной гистограммы $H(E) = 0$ для всех значений E ;
 S3) изменить текущее значение параметра $f = f^{1/2}$.

Процессы основного цикла и нормировки повторяем до тех пор, пока значение параметра f не приблизится близко к единице, например $\log f = 10^{-9}$.

Принятие нового состояния на шагах основного цикла C3 и C4 состоит из таких операций:

- A1) переворот спина $s_i := -s_i$;
 A2) изменение значения DoS с текущим значением E_{k+1} энергии системы, $g(E_{k+1}) := fg(E_{k+1})$;
 A3) изменение значения вспомогательной гистограммы $H(E_{k+1}) := H(E_{k+1}) + 1$.

Непринятие нового состояния на шаге основного цикла C5 состоит из таких операций:

- N1) изменение значения DoS с текущим значением E_k энергии системы, $g(E_k) := fg(E_k)$;
 N2) изменение значения вспомогательной гистограммы $H(E_k) := H(E_k) + 1$.

МОДЕЛЬ ИЗИНГА

Поведение алгоритмов будем обсуждать в применении к модели Изинга [Ising, 1925]. Это простейшая модель ферромагнетика, в которой в узлах регулярной гиперкубической решётки помещаются переменные s_i , принимающие значения 1 и -1 , а на рёбрах — константы J_{ij} . Строится функция

$$E = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j - h \sum_i s_i, \quad (1)$$

где сумма вычисляется по всем парам ближайших соседей и x . Переменные s_i называются спинами, h играет роль внешнего магнитного поля и E — энергия системы. В случае нулевой температуры эта система классических спинов упорядочена, но значение энергии двукратно вырождено — спины могут принимать значение $+1$ (смотреть все вверх) или -1 (смотреть все вниз). В случае одномерной решётки, как показал Изинг [Ising, 1925], фазовый переход отсутствует. Модель Изинга на квадратной решётке и в нулевом магнитном поле решил Онзагер [Onsager, 1944], который обнаружил фазовый переход второго рода (особенность во второй производной логарифма от статистической суммы). Его точное решение используется для проверки методов и алгоритмов, поскольку позволяет точно вычислить значения термодинамических величин на прямоугольной решётке любого конечного размера и при любой величине температуры. Мы будем проверять точность метода именно сравнением результатов моделирования с точным решением для плотности состояний [Beale, 1996].

РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГОРИТМА

С помощью программной реализации описанного алгоритма [Landau et al., 2004] была подсчитана плотность состояний двумерной модели Изинга для $L = 4$. На рис. 1 представлено сравнение точного результата для плотности состояний энергии [Beale, 1996] и вычисленного по алгоритму Ванга-Ландау при заданном значении $MCS = 10^4$. На рис. 2 можно видеть, что относительная точность алгоритма Ванга-Ландау выше в центре распределения и достигает значений на порядок ниже процента. К границе погрешность растёт и достигает значений в несколько процентов. В основном состоянии (все спины упорядочены, т. е. «смотрят в одну сторону») погрешность отсутствует в виду особенности программной реализации алгоритма (по этому значению происходит нормировка спектра плотности состояний).

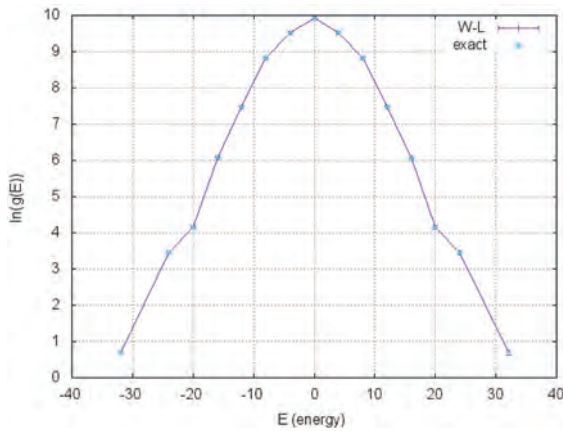


Рис. 1. Логарифм плотности состояний энергии двумерной модели Изинга размером $L = 4$, количество MCS между проверкой на «ровность» — 10^4

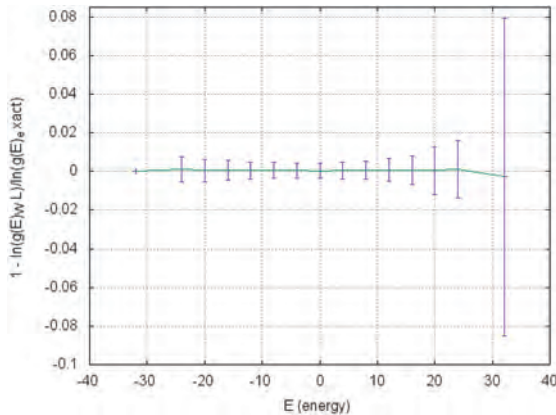


Рис. 2. Относительная погрешность вычисления плотности состояний для двух способов вычисления — по точным аналитическим данным [Beale, 1996] и по алгоритму Ванга-Ландау [Wang, Landau, 2001]. Размер решётки $L = 4$, количество MCS между проверкой на «ровность» — 10^4

МАТРИЦА ПЕРЕХОДОВ

В методе Ванга-Ландау для контроля управления выполнением алгоритма используется эмпирический критерий «ровности» гистограммы $H(E)$. Гистограмма накапливается при случайном блуждании по спектру энергии и хранит количество посещений каждого энергетического уровня. Иными словами, при переходе на состояние с энергией E_i значение соответствующей ячейки в гистограмме увеличивается на единицу $H(E_i) := H(E_i) + 1$. Блуждание по спектру происходит до тех пор, пока гистограмма не достигнет «ровности». Согласно введённому авторами правилу [Wang, Landau, 2001], «ровностью» называется заполнение гистограммы, когда значения по ячейкам отличаются от среднего по всей гистограмме не больше чем на 5 %. Известно, что при меньшем значении степени ровности выполнение программы может заикликоваться.

Предлагается для контроля точности в методе Ванга-Ландау использовать свойства матрицы переходов, которая устроена следующим образом [Щур, 2014].

Составим матрицу M размером $m \times m$, где m — количество энергетических уровней (например, для одномерного случая с чётным числом спинов L на цепочке — $m = L/2 + 1$). В случае перехода с одного энергетического уровня на другой $E_i \rightarrow E_j$ в ячейку $M[i][j]$ будем добавлять единицу. В случае если новый уровень не принимается, добавляем единицу в ячейку $M[i][i]$. В качестве примера, на рис. 3 отображена матрица, полученная согласно обусловленному правилу при одной из реализаций алгоритма.

Тогда сумма по столбцам есть количество посещений каждого энергетического уровня, т.е. аналогия гистограммы, используемой в оригинальном методе [Wang, Landau, 2001].

Строка «отклонение от среднего» вычислена по формуле

$$\frac{|X_{\text{среднее}} - X_i|}{X_{\text{среднее}}}$$

10106	674	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	10780
674	8176	1320	492	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	10662
0	1273	8517	673	214	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	10677
0	538	633	8147	1049	289	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	10656
0	0	207	1062	7881	1263	287	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	10700
0	0	0	282	1268	6642	2016	483	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	10691
0	0	0	0	289	1993	5341	2407	645	0	0	0	0	0	0	0	0	0	10673
0	0	0	0	0	504	2405	4875	2405	482	0	0	0	0	0	0	0	0	10671
0	0	0	0	0	0	624	2423	5425	1888	315	0	0	0	0	0	0	0	10673
0	0	0	0	0	0	0	483	1868	6834	1222	254	0	0	0	0	0	0	10661
0	0	0	0	0	0	0	0	332	1232	7810	1061	217	0	0	0	0	0	10652
0	0	0	0	0	0	0	0	0	225	1072	8180	611	543	0	0	0	0	10631
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	235	653	8491	1240	0	0	0	0	10619
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	483	1300	8128	704	0	0	0	10615
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	704	9935	0	0	0	10639
10780	10661	10677	10656	10701	10691	10673	10671	10673	10661	10652	10631	10619	10615	10639	количество посещений каждого уровня			
0,010625	0,00053	0,00097	0,001	0,00322	0,00228	0,00059	0,00041	0,00059	0,00053	0,00137	0,00334	0,00447	0,00484	0,00259	отклонение от среднего			

Рис. 3. Состояние матрицы переходов для алгоритма Ванга-Ландау для решётки размером $L = 4$ при $f = 1,116544$, с $MCS = 1000$ между проверкой на «ровность» гистограммы

Очевидно, что каждый уровень посещён одинаковое количество раз с точностью до 10^{-3} , т. е. можно считать, что гистограмма заполнена равномерно.

Сумма по строкам — это количество состояний с данным уровнем энергии до трансформации спинов, а сумма по столбцам — количество посещений данного уровня энергии.

На рис. 3 видно, что переход $E_i \rightarrow E_j$ возможен только лишь при выполнении одного из условий: $i = j$, $|j - i| = 1$ или $|j - i| = 2$, что определяется свойствами модели (1).

МОДИФИЦИРОВАННЫЙ АЛГОРИТМ ВАНГА-ЛАНДАУ

Предлагаемая модификация алгоритма Ванга-Ландау основана на статье [Щур, 2014], в которой предложена замена гистограммы на матрицу переходов и на статье [Bellardinelli, Pereyra, 2007], в которой предложено изменять фактор f обратно пропорционально текущему значению шага Монте-Карло (времени вычислений). В модифицированном алгоритме выполняем следующий порядок действий:

- A. Пусть $F_k = \ln(f_k)$, f — фактор f .
- B. Пусть $t = (MC\ trials)/N$, где N — количество уровней энергии (для чётных L : $N = L^2 - 1$, для нечётных: $N = (L - 1)^2$), t будем называть *MC time*, а *MC trials* представляет собой процесс поворота одного спина на заданной решётке (см. п. C1–C5).
- C. Зададим начальные значения параметров: $\ln(g(E)) = \ln(g_{exact}(E))$, $F_k = 1$, $t = 0$, $F_{final} = 10^{-8}$.
- D. Выполним обычный алгоритм Ванга-Ландау, где вместо гистограммы используем матрицу переходов. Выводим состояния матрицы после каждого изменения F и увеличиваем *MC time* $t = t + (MC\ trials)/N$.
- E. Если $F_k < 1/t$, то, начиная с этого момента и до конца алгоритма, F_k изменяем по правилу: $F_{k+i} = 1/t$ после каждого *MC trials*.
- F. Алгоритм завершается, когда выполнится условие: $F_k < F_{final}$.

Далее вычислим старшие собственные значения полученных матриц перехода, для этого:

1. Создадим массив $sum[]$ размером $L^2 - 1$, где $sum[i]$ — сумма всех элементов i -й строки.
2. Найдём среднее значение массива $sum[]$ по формуле:

$$M = \frac{sum[1] + sum[2] + \dots + sum[L^2 - 1]}{L^2 - 1}.$$

3. Проведём нормировку матрицы переходов: каждый элемент матрицы поделим на среднее значение суммы строк $(m[i][j])/M$.
4. Найдём старшее собственное значение ортонормированной матрицы переходов с помощью функции $dgeev()$ (в основе функции лежит qr-алгоритм нахождения собственных значений матрицы) из библиотеки LAPACK.
5. Проведём $n = 100$ независимых запусков алгоритма.

6. Найдём среднеквадратичное отклонение собственного значения. Для этого вычислим дисперсию по формуле:

$$D = \frac{\sum_i^n X_i^2 - \left(\sum_i^n X_i \right)^2 / n}{n-1},$$

где X_i — старшее i -е собственное значение, $n = 100$, тогда среднеквадратичное отклонение $\sigma = \sqrt{D}$.

Построим график в дважды логарифмическом масштабе (рис. 4), где по горизонтали t — *MC time*, по вертикали $|eigenvalue_t - 1|$ — отклонение старшего собственного значения от единицы. Для сравнения построим аналогичный график (рис. 5) отклонения старшего собственного значения от единицы, но для обычного алгоритма Ванга-Ландау [Wang, Landau, 2001].

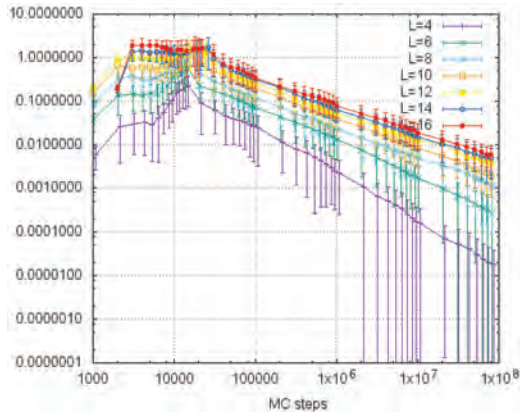


Рис. 4. Отклонение от единицы старшего собственного значения матрицы переходов алгоритма Ванга-Ландау с $f = 1/t$ как функция времени t ($MCS = 10^3$)

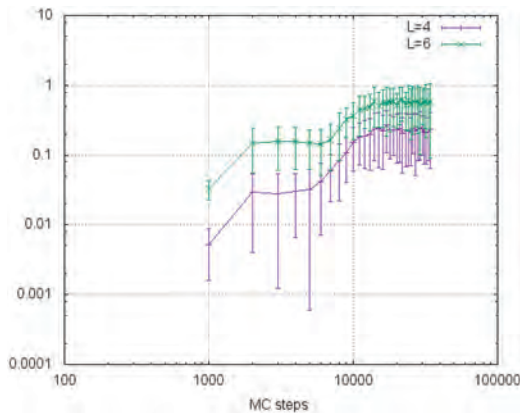


Рис. 5. Отклонение от единицы старшего собственного значения матрицы переходов алгоритма Ванга-Ландау с $f = 1/t$ как функция времени t ($MCS = 103$)

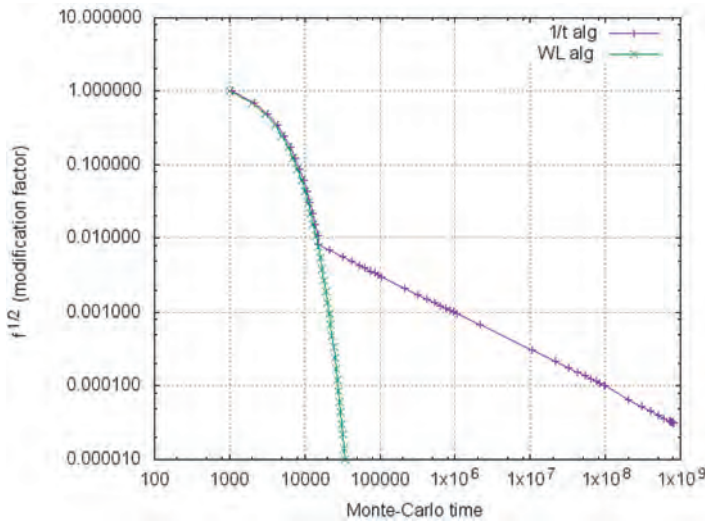


Рис. 6. Изменение фактора f с ростом времени ($MCS = 10^3$)

Алгоритм Ванга-Ландау (в единицах измерения $MC\ time$) быстрее, чем его модификация с функцией $1/t$ (рис. 6). Сравнивая результаты на рис. 3 и 4, видно, что с ростом числа $MC\ time$ отклонение уменьшается как $1/t$, т. е. погрешность обратно пропорциональна $MC\ time(t)$. В классическом алгоритме Ванга-Ландау, отклонение стремится к конечному пределу.

В алгоритме SAMC [Liang et al., 2007] также используется фактор F , который должен удовлетворять условию $\sum_{t=1}^{\infty} F_t = \infty$ и $\sum_{t=1}^{\infty} F_t^{\zeta} < \infty$, где $1 < \zeta < 2$.

Предлагается изменять параметр $F = \ln(f)$ как: $F_t = \frac{t_0}{\max(t_0, t)}$, где t_0 — некоторое число, подобранное под конкретную задачу. Таким образом, фактор $F = 1$ если $t_0 \geq t$ и изменяется пропорционально $F = 1/t$ при $t_0 \leq t$. Данный подход полностью освобождает нас от проверки на «ровность» посещения каждого уровня. Значение же фактора F изменяется после каждого Монте-Карло шага.

В данной работе были проведены расчёты для значений $t_0 = 10; 10^2; 10^3; 10^4$. Для каждого значения t_0 было выполнено 100 независимых запусков алгоритма и вычислялось отклонение старшего собственного значения матрицы переходов от единицы с ростом t . Судя по графику (рис. 7), после преодоления некоторого критического значения t отклонение собственного значения уменьшается пропорционально $\sim 1/t$. Построив график среднего и максимального отклонения DoS от точного значения (см. рис. 7), видно, что после некоторых колебаний, отклонение уменьшается пропорционально $\sim \sqrt{1/t}$.

На рис. 8 показано отклонение от единицы старшего собственного значения матрицы переходов для алгоритма Ванга-Ландау с $F = 1/t$ и описанного в этом разделе алгоритма с разными значениями t_0 от $t_0 = 10$ до 10^4 . При больших значениях t_0 отклонение со временем изменяется не монотонно, есть локальные минимумы. При этом минимальное отклонение собственного

значения от единицы достигается при выборе $t_0 = 10^4$. Но при выборе любого из рассмотренных значений t_0 , сходимость к точному значению происходит быстрее, чем алгоритмом Ванга-Ландау с функцией $F = 1/t$.

На рис. 9 изображено среднее отклонение DoS от точного значения. После достижения пика отклонения, ошибка начинает монотонно убывать пропорционально $\sim 1/t^{1/2}$. При этом минимальное отклонение достигается при моделировании алгоритмом 1/t-WL.

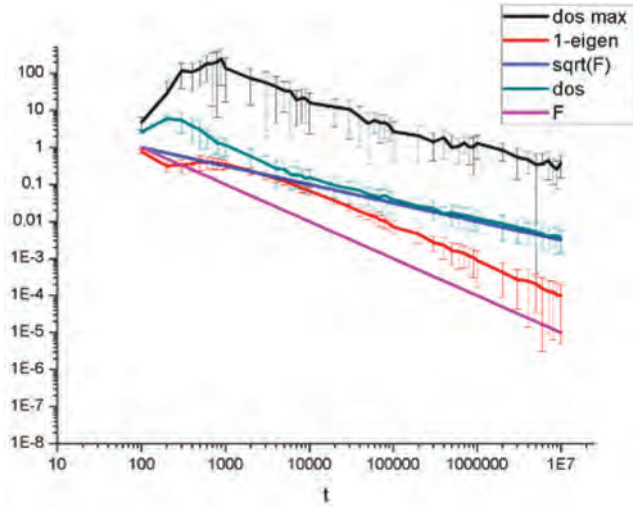


Рис. 7. Отклонение от единицы старшего собственного значения матрицы переходов; dos — среднее относительное отклонение DoS; dos max — максимальное отклонение DoS; $L = 8$; $t_0 = 100$

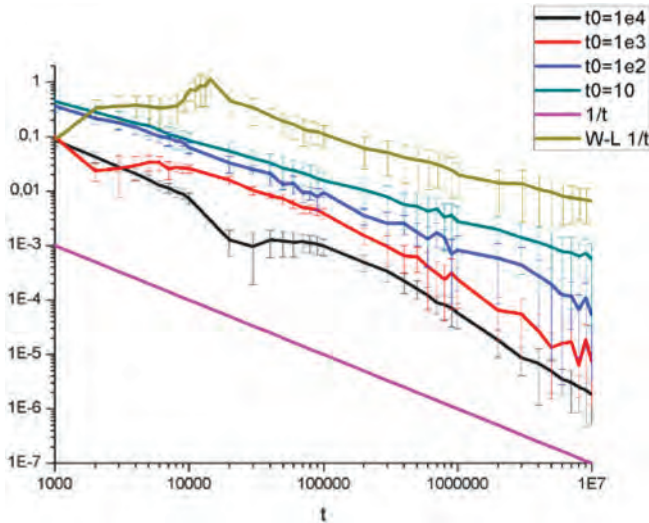


Рис. 8. Отклонение от единицы старшего собственного значения матрицы переходов алгоритма SAMC при выборе различных значений t_0 и Ванга-Ландау с $F = 1/t$ ($MCS = 10^3$); $L = 8$

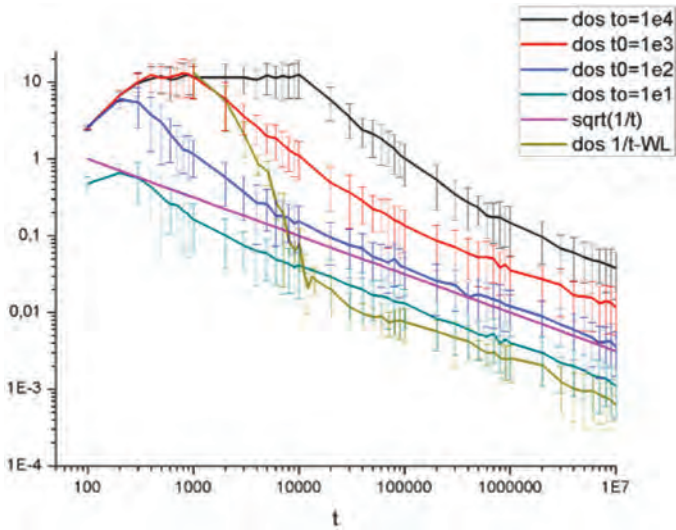


Рис. 9. Отклонение от единицы старшего собственного значения матрицы переходов алгоритма SAMC при выборе различных значений t_0 и Ванга-Ландау с $F = 1/t$ ($MCS = 10^3$; $L = 8$)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе подтверждён результат работы [Щур, 2014], что критерий «ровности» гистограммы оригинального метода Ванга-Ландау является отражением обстоятельства, что случайное блуждание по спектру энергий является стохастическим процессом и описывается матрицей переходов. Эта матрица стремится к стохастической по мере приближения к стационарной (истинной) плотности состояний. Предложен критерий точности вычислений, основанный на отличии от единицы старшего собственного значения матрицы переходов. Результаты моделирования подтверждают наше предложение.

ЛИТЕРАТУРА

- [Щур, 2014] *Щур Л. Н.* Алгоритм Ванга-Ландау: случайное блуждание по спектру энергии // Вычислительные технологии в естественных науках. Методы суперкомпьютерного моделирования: сб. тр. / под ред. Р. Р. Назирова, Л. Н. Щура. М.: ИКИ РАН, 2014. С. 160–166.
- [Beale, 1996] *Beale P. D.* Exact Distribution of Energies in the Two-Dimensional Ising Model // Physical Review Letters. 1996. V. 76. No. 1. P. 78.
- [Belardinelli, Pereyra, 2016] *Belardinelli R. E., Pereyra V. D.* Nonconvergence of the Wang-Landau algorithms with multiple random walkers // Physical Review E. 2016. V. 93. Iss. 5. id. 053306.
- [Bellardinelli, Pereyra, 2007] *Bellardinelli R. E., Pereyra V. D.* Wang-Landau algorithm: A theoretical analysis of the saturation of the error // J. Chemical Physics. 2007. V. 127. No. 18. P. 184105.

- [Binder, Heermann, 2010] *Binder K., Heermann D. W.* Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. Berlin; N. Y.: Springer-Verlag, 2010. 200 p.
- [Ising, 1925] *Ising E.* Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus // Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei. 1925. V. 31. Iss. 1. S. 253–258.
- [Landau et al., 2004] *Landau D. P., Shan-Ho Tsai, Exler M.* A new approach to Monte-Carlo simulations in statistical physics: Wang-Landau sampling // American J. Physics. 2004. V. 72. No. 10. P. 1294–1302.
- [Liang et al., 2007] *Liang F., Liu C., Carroll R. J.* Stochastic approximation in Monte Carlo computation // J. American Statistical Association. 2007. V. 102. No. 477. P. 305–320.
- [Onsager, 1944] *Onsager L.* Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition // Physical Review. 1944. V. 65. No. 3-4. P. 117.
- [Wang, Landau, 2001] *Wang F., Landau D. P.* Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States // Physical Review Letters. 2001. V. 86. Iss. 10. P. 2050–2053.

CONTROL OF ACCURACY IN THE WANG-LANDAU ALGORITHM OF COMPUTATION OF DENSITY OF STATES

M. A. Fadeeva³, L. N. Shchur^{1,2}

¹ Landau Institute for Theoretical Physics

² Science Center in Chernogolovka of Russian Academy of Sciences

³ National Research University Higher School of Economics

We propose modification of Wang-Landau algorithm for the computation of density of states in the statistical mechanics models. Modification is based on the computation of matrix of transitions between energy levels. We demonstrate that transition matrix in Wang-Landau algorithm is the stochastic one while density of states in close to the right limit. First, our approach gives explanation for the condition of flatness of auxiliary histogram. Second, it provides possibility of the control of accuracy of simulations of density of states. We introduce criteria for the control of simulations, which is based on the deviation from unity of the largest eigenvalue of the transition matrix.

Keywords: Monte Carlo method, density of states, Wang-Landau method, transition matrix, accuracy of computations, stochastic approximation.

Fadeeva Marina Aleksandrovna — laboratory assistant-researcher, undergraduate, fadeeva@aa.ru

Schur Lev Nikolaevich — deputy chairman, head of department, professor, doctor of physical and mathematical sciences, Shchur@chg.ru

О СИСТЕМАХ УПРАВЛЕНИЯ ЗАДАНИЯМИ В ПРОЦЕССЕ ВЫПОЛНЕНИЯ НАУЧНОГО ИССЛЕДОВАНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДАННЫХ БОЛЬШОГО ОБЪЁМА

С. К. Шикота¹, Л. Н. Щур^{1,2,3}

¹ Научный центр в Черноголовке Российской академии наук (НЦЧ РАН)

² Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН (ИТФ им. Л. Д. Ландау РАН)

³ Московский институт электроники и математики им. А. Н. Тихонова Национального исследовательского университета Высшей школы экономики (МИЭМ НИУ ВШЭ)

Проанализированы пути эволюционного развития инфо-коммуникационной инфраструктуры научного центра с учётом вызовов современного научного развития. Предложена конкретная модель модернизации инфраструктуры Научного центра РАН в Черноголовке. Проектируемый программно-аппаратный комплекс предоставит исследователям возможность проведения научных работ с использованием технологий обработки данных большого объёма.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 14-07-00552).

Ключевые слова: система управления заданиями, большие данные, научная инфраструктура.

ВВЕДЕНИЕ

При работе над научным проектом распределённым коллективом учёных нередко требуется производить обработку данных большого объёма. Для этого используются вычислительные ресурсы и наборы данных, которые не сконцентрированы в одном месте, а находятся в тех лабораториях, в которых ресурсы также являются распределёнными. Очевидно, что для обработки и анализа таких данных, а также для управления аппаратными и программными ресурсами требуется некоторая система, которая способна выполнять операции с распределёнными ресурсами данных и вычислений. Такая система должна быть централизованной, интегрирующей распределённые аппаратные ресурсы. Для решения подобной задачи подходит идеология системы научных информационных потоков SWS (scientific workflow systems).

Понятие scientific workflow недостаточно полно освещено в русскоязычной научной литературе. Например, в статье [Чернышов, Попова, 2014] приведена такая точка зрения: «Не было введено единого термина для перевода данного словосочетания. Scientific workflow, дословно поток научных задач — это последовательность задач, выполняющих, как правило, обработку научных данных. Такие потоки задач принято представлять в виде ориентированных графов, вершины в которых соответствуют выполняемым операциям, а рёбра указывают зависимости между операциями, обозначая те ситуации, когда одна задача должна быть полностью выполнена перед тем, как начнёт-

Шикота Светлана Каликстовна — ведущий инженер, программист, sveta@chg.ru

Щур Лев Николаевич — заместитель председателя НЦЧ РАН, shchur@chg.ru

ся выполнение другой». Эта цитата отражает распространённую точку зрения в русскоязычной литературе, в которой, как правило, под *scientific workflow systems* понимаются системы управления последовательностью заданий в вычислительных системах. Часто даже более утилитарно — организация очереди задач в кластерных и суперкомпьютерных системах.

В настоящей статье мы придаём SWS более широкие функции — это управление заданиями на обработку данных. Причём, важным элементом понятия является то, что задание формируется с учётом доступных пользователю ресурсов по обработке данных (рабочие станции, кластерные системы, облачные системы и т.п.), доступных на момент отсылки выполнения заданий.

В дальнейшем, с целью избегания неоднозначности, а также для прозрачного соответствия с англоязычной литературой, будем применять термин SWS системы.

Под доступными пользователю ресурсами мы понимаем ресурсы, обладающие одновременно следующими характеристиками:

- 1) доступные пользователю юридически (соглашения, договоры, гранты и т.п.);
- 2) подходящие для выполнения текущего задания по техническим вычислительным характеристикам;
- 3) доступные технически (работоспособные, незагруженные и т.п.);
- 4) способные выполнить задание в течение заданного интервала времени.

Этот список требований к характеристикам может быть расширен.

ИСТОРИЯ ПРОБЛЕМЫ

Системы SWS представляют собой специализированную форму систем управления заданиями, разработанную для составления и выполнения последовательности шагов по проведению вычислений, обработке данных и анализу данных в рамках приложения, специфического для раздела науки.

Например, существуют такие специализированные SWS системы, как *Discovery Net*, *Apache Taverna*, *Kepler*. Приведём кратко информацию об этих системах.

Исторически первая SWS система *Discovery Net* (<http://www.discovery-on-the.net/>) была создана в рамках проекта EPSRC (Engineering and Physical Sciences Research Council) — главного государственного агентства Великобритании по финансированию исследований и повышению образования в области инженерных наук и физики, который ежегодно инвестирует в рамках программы e-Science более 800 миллионов фунтов стерлингов на исследования по широкому спектру — от математики до науки о материалах, и от информационных технологий до структурной инженерии» (<https://www.epsrc.ac.uk/about/>). Для цели её создания Лондонскому имперскому колледжу было выделено 2,8 миллиона фунтов стерлингов. *Discovery Net* — это мультидисциплинарный проект, обслуживающий интересы научных сотрудников из

различных областей науки, включая биологию, комбинаторную химию, возобновляемые источники энергии и геологию; это сервис ориентированные вычислительные модели для извлечения нового знания, которые предоставляют пользователю возможность использования программного обеспечения по анализу данных, а также источники данных, доступные по сети от третьей стороны. Discovery Net определяет стандарты, архитектуру и средства, которые дают возможность:

- исследователю — планировать, управлять, распределять и выполнять комплекс процедур (доступных, как удалённые сервисы) для извлечения знаний и анализа данных;
- провайдеру — публиковать и предоставлять пользователям компоненты программного обеспечения, как сервисы, которые будут использованы в процедурах извлечения новых знаний;
- собственникам — предоставлять интерфейсы (для доступа к научным базам данных, хранилищам данных, датчикам и экспериментальным результатам), как сервисы, так что они могут быть интегрированы в процесс извлечения знания.

В постановке задачи [Curgin, 2002] отмечается: «Необходимость создания такой системы определяется необходимостью совместного использования ресурсов знаний, информации и вычислений в рамках отдельной большой распределённой лаборатории или в рамках комплексной виртуальной лаборатории, созданной для выполнения определённого проекта. Предлагаемая архитектура строится поверх слоя управления федеративным ресурсом и построена, как набор различных ресурсов. Архитектура поддерживает процесс разработки и внедрения, выполняет задачи комплексного и распределённого извлечения данных с большой эффективностью и предоставляет все это сообществу e-исследователей для целей совместной работы в визуальной аналитической оболочке». Идеи и решения проекта Discovery Net позднее были использованы во многих аналогичных проектах.

Сервис Apache Taverna (<https://taverna.incubator.apache.org/>) (или Taverna Workflow System) — это не зависящий от домена набор инструментов для разработки определяемых данными потоков заданий (data-driven workflows) и для их выполнения. Основное применение — это биоинформатика, однако набор доступных сервисов не ограничен только этим. Система используется более чем в 350 организациях, как академических, так и коммерческих. Она является продолжением проекта myGrid.

Система Kepler (<https://kepler-project.org/>) разработана с целью помочь учёным, аналитикам и программистам в создании, выполнении и обмене моделями и результатами анализа в широком спектре научных исследований и инженерных разработок. Система может работать как с локальными, так и с распределёнными ресурсами. Она является эффективной оболочкой для интеграции программных компонент. Графический интерфейс пользователя позволяет пользователю легко выбирать и объединять компоненты для анализа, а также источники данных, в единое программное обеспечение Software

Workflow (SW). В проекте под SW понимается система Kepler — «выполняемое представление шагов, требуемых для генерации результата». В архитектуре системы реализована возможность общего доступа к данным, повторное использование данных, рабочих потоков и компонент, разработанных научным сообществом. Лидеры проекта — это три калифорнийских университета — в Дэвисе, Санта-Барбаре и Сан-Диего. Технически программное обеспечение основано на языке Java, что позволяет использовать его на платформах Windows, OSX и Linux.

НАШ ОПЫТ

В рамках выполнения государственного контракта Министерства образования РФ нами был разработан веб-ориентированная производственно-исследовательская платформа в области вычислительной физики КомпФиз (Платформа). Формулировка проблемы и постановка задачи изложены в статьях [Шур, 2012; Шур и др., 2011]. Платформа не только предоставляет возможность доступа к прикладным моделям, базам данных, хранилищам информации, средствам визуализации (анимации), совместной разработки приложений распределёнными коллективами, проведения научных исследований в области вычислительной физики на основе этих приложений, но и позволяет обсуждать текущие результаты исследований, вести работу со студентами, используя средства Web 2.0 (группы пользователей, форумы, wiki и др.). В качестве основы Платформы использовалось программное обеспечение Hubzero (<https://hubzero.org/>), поскольку в него уже интегрированы различные средства, позволяющие реализовать основной функционал Web 2.0. [Шикота и др., 2012]. На аппаратном уровне Платформа содержит следующие компоненты:

- 1) серверная часть, обеспечивающая функции платформы Web 2.0 и осуществляющая взаимодействие с запросами пользователей посредством интернета;
- 2) вычислительная — кластер Wall, состоящий из 10 вычислительных узлов и одного управляющего;
- 3) система хранения данных;
- 4) внутренняя коммуникационная сеть, выполненная на базе технологии Ethernet, обеспечивающая работу вычислительного кластера и служащая для управления заданиями, для доступа к данным, для выполнения функций мониторинга оборудования и программного обеспечения.

АРХИТЕКТУРА НОВОЙ СИСТЕМЫ

В настоящей работе предлагается модернизированная архитектура программно-аппаратного комплекса для выполнения научной работы с целью извлечения новых знаний из данных большого объёма.

Предложенный в статье [Curcin, 2002] подход, на котором в большой степени основаны и другие системы, состоит в том, что на различных стадиях маршрута извлечения нового знания исследователю требуется доступ к данным из различных источников, их интеграция и анализ с целью нахождения закономерностей и соответствия моделям, чтобы на следующих стадиях проанализировать эти данные с помощью выбранных моделей.

На первом этапе построения архитектуры новой системы мы также придерживаемся подхода, применённого при разработке Discovery Net. При этом реализация системы основана на имеющемся у нас заделе по разработке систем обработки информации, а также на опыте их применения. Изложим кратко те детали подхода Discovery Net [Curcin, 2002], которые мы используем в архитектуре нашего программно-аппаратного комплекса.

Методами обработки на начальных стадиях может быть кластеризация данных. На следующих стадиях проверяется соответствие полученной кластеризации уже известным фактам о данных. В качестве исходных данных для анализа могут быть использованы слабо структурированные данные, доступные в интернете. Их поиск может быть осуществлён в базах данных или с использованием поисковых механизмов. Далее требуется интеграция полученных данных, при этом важно не потерять ссылки на источник информации, более того, необходимо также запомнить, с помощью каких именно механизмов такие данные были найдены. Это важно для возможности повторения поиска, а также для уточнения механизмов поиска. Кроме того, важно знать юридические аспекты защиты используемых данных (патенты, публикации, обзоры и т.п.).

Также данные могут быть получены с удалённых вычислительных источников. Для этой цели может быть использовано открытое программное обеспечение по интенсивной обработке данных. Задача усложнена тем, что такие исследования по извлечению нового знания могут проводиться коллективами исследователей, использующими тот же набор данных и те же ресурсы по их обработке. Поэтому требуется не только обмен информацией о результатах исследований между коллегами, но также и обмен информацией о механизмах их получения, способах обработки и т.п.

Обсуждаемый подход опробован в таких областях науки, как, например, геология и минералогия, биоинформатика, науки об окружающей среде, астрономия, физика частиц.

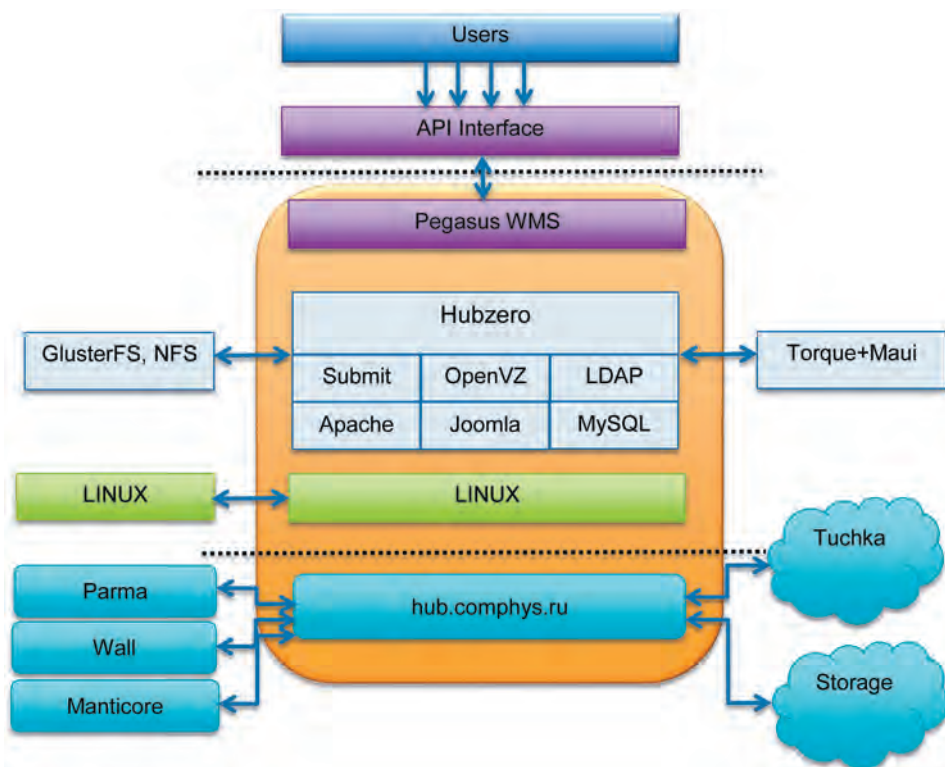
Системы SWS существенно отличаются от подходов, применяемых в эру до архитектуры грид [Foster et al., 2001], т.е. в эру до архитектуры промежуточного программного обеспечения (middleware) [Kosyakov, Shchur, 1999]. Эти подходы были основаны на обработке данных от локализованных ресурсов (база данных или хранилище данных) на локальном сервере с использованием заранее определённого набора программных средств. В системах SWS принципиальным является распределённость как ресурсов данных, так и обрабатывающих эти данные ресурсов.

Ключевое место в развиваемом нами подходе занимает централизованное программное обеспечение. Его задача состоит в интеграции распределённых данных, алгоритмов и инструментов работы с этими данными, а также ап-

паратных средств, на которых и производятся основные операции по работе с данными.

Важным требованием к архитектуре SWS систем является требование интероперабельности, т.е. независимости программного обеспечения SWS системы от используемых аппаратных ресурсов.

Для реализации такого подхода мы применили эволюционный принцип развития программно-аппаратного комплекса. На рисунке приведена архитектура строящегося нами программно-аппаратного комплекса. Нижний слой обеспечивает интеграцию аппаратных ресурсов на базе модернизированного программно-аппаратного комплекса hub.comphys (<http://hub.comphys.ru/>). Это даёт возможность использовать для обработки данных кластеры ПАРМА, Wall [Григорьева и др., 2011], Manticore, а также облачную систему Тучка [Russkov, 2014] с облачной системой хранения данных Storage. Программно-аппаратный комплекс Comphys предоставляет пользователю интерфейсы для разработки и внедрения элементов программного обеспечения для работы с данными большого объёма, а также для разработки элементов для извлечения нового знания с предметно-ориентированными особенностями. Поверх системы Comphys работает система Pegasus, которая облегчает пользователю создание заданий на обработку данных. Это достигается использованием графического интерфейса, позволяющего комбинировать задание их упомянутых выше элементов обработки данных нижнего уровня.



Архитектура программно-аппаратного комплекса

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье мы обсудили детали создания программно-аппаратного комплекса (ПАК). Он создаётся для решения задачи извлечения нового знания из данных большого объёма. ПАК способен обеспечить хранение и обработку данных большого объёма. Его архитектура позволяет производить динамичное развитие программного обеспечения как на уровне общих алгоритмов и методов, так и на предметном уровне. Архитектура не накладывает ограничений на степень интеграции программного обеспечения. Также нет ограничений на степень интеграции аппаратных ресурсов. Это могут быть рабочие станции, кластеры, облачные системы и т.п. Доступность для пользователя обеспечивается на уровне WMS Pegasus за счёт графического интерфейса подготовки заданий.

ЛИТЕРАТУРА

- [Григорьева и др., 2011] *Григорьева М. В., Крашаков С. А., Меньшутин А. Ю., Разумов В. Ф., Шикота С. К., Щур Л. Н.* Высокопроизводительный программно-аппаратный комплекс для приёма и отображения визуальной информации // Тр. суперкомпьютерного форума «Суперкомпьютерные технологии в образовании, науке и промышленности». Нижний Новгород, ННГУ им. Н. И. Лобачевского, 1–3 нояб. 2011. 2011. С. 96–99.
- [Чернышов, Попова, 2014] *Чернышов Ю. А., Попова Н. Н.* Система управления многошаговыми заданиями для суперкомпьютеров и кластеров // Тр. 16-й Международной суперкомпьютерной конф. «Научный сервис в сети Интернет: многообразии суперкомпьютерных миров». Абрау-Дюрсо, 22–27 сент. 2014. 2014. С. 335–338.
- [Шикота и др., 2012] *Шикота С. К., Меньшутин А. Ю., Щур Л. Н.* Программно-аппаратная платформа для научных исследований в области вычислительной физики // Программная инженерия. 2012. Т. 9. С. 16–22.
- [Щур, 2012] *Щур Л. Н.*, Роль инфокоммуникационных технологий в развитии процесса глобализации научных исследований // Информационное общество. 2012. Т. 5. С. 16–23.
- [Щур и др., 2011] *Щур Л. Н., Меньшутин А. Ю., Шикота С. К.* Инфокоммуникационное обеспечение исследовательского центра: задачи и инфраструктура // Информационное общество. 2011. Т. 6. С. 58–65.
- [Curcin, 2002] *Curcin V., Ghanem M., Guo Y., Kohler M., Rowe A., Syed J., Wendel P.* Discovery Net: towards a grid of knowledge discovery // KDD'02: Proc. 8th ACM SIGKDD Intern. Conf. Knowledge Discovery and Data Mining. August, 2002. P. 658–663.
- [Foster et al., 2001] *Foster I., Kesselman C., Tuecke S.* The Anatomy of the Grid: Enabling Scalable Virtual Organizations // Intern. J. High Performance Computing Applications. 2001. V. 15. Iss. 3. P. 200–222.
- [Kosyakov, Shchur, 1999] *Kosyakov S. S., Shchur L. N.* Topos — Manager for Computing in Distributed Computer Environment // Proc. 1st Workshop on Cluster-Based Computing. Rhodes, Greece, 20 June 1999. 5 p.
- [Russkov, 2014] *Russkov A. A.* Shared storage performance of cloud computing: OpenNebula case // Proc. 2014 IEEE 3rd Intern. Conf. Cloud Networking, CloudNet. 2014. P. 275–277.

ON THE SCIENTIFIC WORKFLOW SYSTEMS AND BIG DATA ANALYSIS

*S. K. Shikota*¹, *L. N. Shchur*^{1,2,3}

1 Science Center in Chernogolovka of Russian Academy of Sciences

2 Landau Institute for Theoretical Physics

3 National Research University Higher School of Economics Tikhonov Moscow Institute of Electronics and Mathematics (MIEM HSE)

Evolutional development of info-communication infrastructure of science park is analyzed taking into account the contemporary research calls. Accordingly, we propose model for transition of the infrastructure of Science Park in Chernogolovka. Hardware-software system will provide researchers with the possibility of big data manipulation and analysis.

Keywords: scientific workflow system, big data, scientific infrastructure.

Shikota Svetlana Kalikstovna — lead engineer, programmer, sveta@chg.ru

Shchur Lev Nikolaevich — deputy chairman, shchur@chg.ru

055(02)2

ИКИ РАН
117997, Москва, Профсоюзная, 84/32
Подписано к печати 3.11.2017

Заказ 4166

Формат 70×100/16

Тираж 70

10,5 усл.-печ. л.