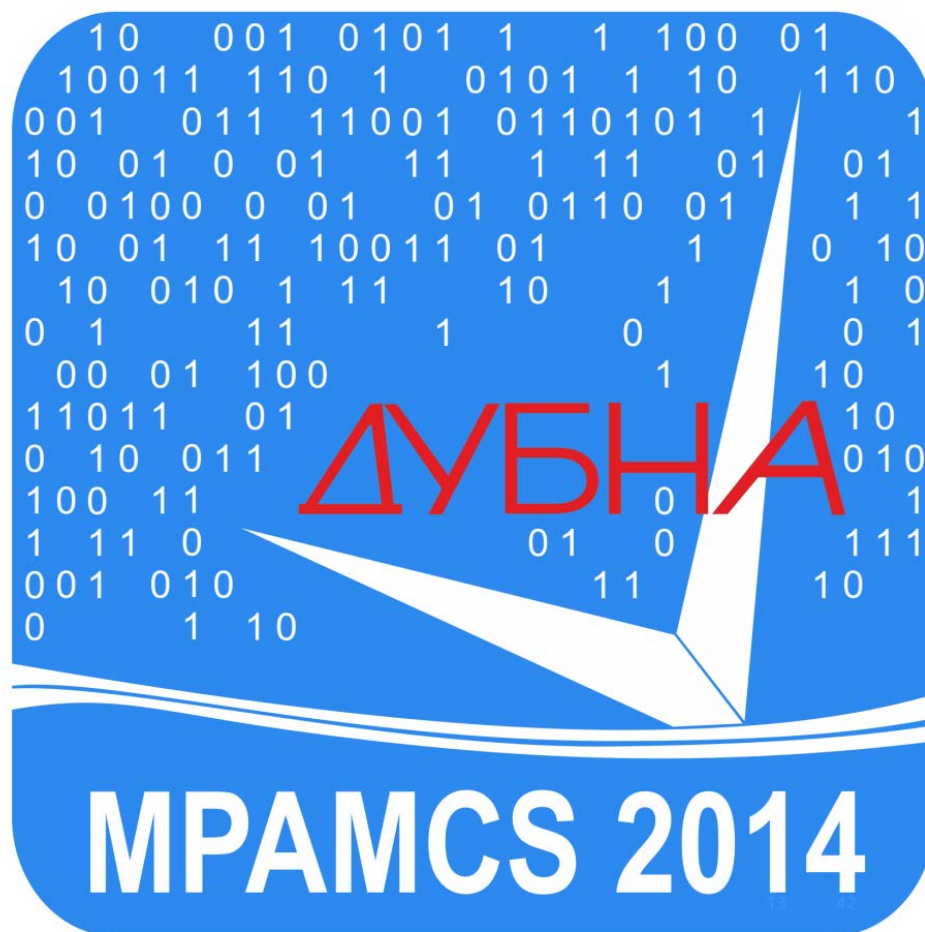




**Современные проблемы
прикладной математики и информатики
Международная молодёжная конференция**

Дубна, 25 – 29 августа 2014 г.

Тезисы докладов

СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ

МЕЖДУНАРОДНАЯ МОЛОДЁЖНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

Дубна, 25 – 29 августа 2014 г.

Тезисы докладов

MODERN PROBLEMS OF APPLIED MATHEMATICS & COMPUTER SCIENCE

INTERNATIONAL CONFERENCE FOR YOUNG SCIENTISTS

Dubna, August 25 – 29, 2014

Book of Abstracts

УДК [519.6+51-7:53](063)
ББК [22.19+22.3 Я431]
С56

Организаторы МРАМС'2014:

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН,
Лаборатория информационных технологий
Объединённого института ядерных исследований,
Институт вычислительной математики РАН,
Научно-исследовательский вычислительный центр МГУ им. М.В. Ломоносова

Organizers of MPAMCS'2014:

Keldysh Institute of Applied Mathematics, RAS,
Laboratory of Information Technologies of the Joint Institute for Nuclear Research,
Institute of Numerical Mathematics, RAS,
Research Computer Center, MSU

С56 **Современные** проблемы прикладной математики и информатики (МРАМС'2014): Тезисы докладов международной конференции (Дубна, 25 – 29 августа 2014 г.). – Дубна: ОИЯИ, 2014. – 173 с.
ISBN 978-5-9530-0394-0

В сборник включены тезисы лекций и докладов, представленных на международную молодежную конференцию «Современные проблемы прикладной математики и информатики» (МРАМС'2014). Данная конференция продолжает традиции молодежной конференции-школы МРАМС'2012, проведенной в ОИЯИ в 2012 г. Конференция ориентирована на молодых ученых и специалистов, работающих в области применения современных методов прикладной математики для решения актуальных задач науки и техники с использованием высокопроизводительных вычислительных систем. Среди приглашенных докладчиков известные ученые России и стран СНГ, профессора ведущих вузов и научных организаций, члены академий наук. Конференция предоставит молодым участникам широкие возможности для обсуждения результатов исследований с ведущими учеными, для установления личных контактов и неформального общения.

Конференция МРАМС'2014 проводится при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ № 14-31-10082 мол_г).

Modern Problems of Applied Mathematics & Computer Science (MPAMCS'2014): Book of Abstracts of the International Conference for Young Scientists (Dubna, August 25 – 29, 2014). – Dubna: JINR, 2014. – 173 p.
ISBN 978-5-9530-0394-0

The book contains abstracts of lectures and reports submitted to the International Conference for Young Scientists «Modern Problems of Applied Mathematics & Computer Science» (MPAMCS'2014). This Conference carries on a tradition of the previous International Conference for Young Scientists MPAMCS'2012, which was held in JINR in 2012. The Conference is intended for young scientists and specialists involved in development of advanced methods of applied mathematics in topical problems of science and technology. The invited lecturers at the conference comprise well-known scientists from Russia and the CIS, professors of leading universities and scientific institutions, members of academies of sciences. The Conference will provide the young participants with a wide range of opportunities for establishing personal contacts, for informal communications as well as discussions of scientific results with leading researchers.

The Conference MPAMCS'2014 is supported by the Russian Foundation for Basic Research.

УДК [519.6+51-7:53](063)
ББК [22.19+22.3 Я431]

ISBN 978-5-9530-0394-0

© Объединённый институт ядерных
исследований,
2014

Организационный комитет

Четверушкин Б.Н.	академик РАН, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН	сопредседатель
Кореньков В.В.	проф., ЛИТ ОИЯИ	сопредседатель
Афенди́ков А.Л.	проф., ИПМ им. М.В. Келдыша РАН	зам. председателя
Воеводин В.В.	чл.-корр. РАН, НИВЦ МГУ	
Иванов В.В.	проф., ЛИТ ОИЯИ	
Матус П.П.	проф., Институт математики НАН Беларуси	
Нарожный Н.Б.	Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»	
Попов Ю.П.	чл.-корр. РАН, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН	
Тыртышников Е.Е.	чл.-корр. РАН, ИВМ РАН	
Поляков С.В.	ИПМ им. М.В. Келдыша РАН	учёный секретарь
Стрельцова О.И.	ЛИТ ОИЯИ	учёный секретарь

Organizing committee

Chetverushkin B.N.	Academician of RAS, KIAM, RAS	Co-chair
Korenkov V.V.	Professor, LIT, JINR	Co-chair
Afendikov A.L.	Professor, KIAM, RAS	Vice-chairman
Voevodin V.V.	Corresponding Member of RAS, RCC MSU	
Ivanov V.V.	Professor, LIT, JINR	
Matus P.P.	Professor, Institute of Mathematics of NAS, Belarus	
Naroznyi N.B.	National Research Nuclear University «MEPhI»	
Popov Yu.P.	Corresponding Member of RAS, KIAM, RAS	
Tyrtysnikov E.E.	Corresponding Member of RAS, INM, RAS	
Polyakov S.V.	KIAM, RAS	Scientific secretary
Streltsova O.I.	LIT, JINR	Scientific secretary

Локальный оргкомитет

Стриж Т.А.	ЛИТ ОИЯИ	сопредседатель
Афендиков А.Л.	проф., ИПМ им. М.В. Келдыша РАН	сопредседатель
Зрелов П.В.	ЛИТ ОИЯИ	зам. председателя
Поляков С.В.	ИПМ им. М.В. Келдыша РАН	учёный секретарь
Стрельцова О.И.	ЛИТ ОИЯИ	учёный секретарь
ОИЯИ	Адам Г., Айриян А.С., Александров Е.И., Аристархова М.В., Беляков Д.В., Булыга Н.И., Голубь Д.С., Графов А.Н., Дереновская О.Ю., Заикина Т.Н., Зуев М.И., Киракосян М.Х., Коротчик О.М., Лукьянов С.О., Матвеев М.А., Подгайный Д.В., Руднева Е.М., Румянцева Д.Б., Румянцева О.Ю., Торосян Ш.Г.	

Local committee

Strizh T.A.	LIT, JINR	Co-chair
Afendikov A.L.	Professor, KIAM, RAS	Co-chair
Zrelov P.V.	LIT, JINR	Vice-chairman
Polyakov S.V.	KIAM, RAS	Scientific secretary
Streltsova O.I.	LIT, JINR	Scientific secretary
JINR	Adam Gh., Ayriyan A.S., Alexandrov E.I., Aristarkhova M.V., Belyakov D.V., Bulyga N.I., Golub D.S., Grafov A.N., Derenovskaya O.Ju., Zaikina T.N., Zuev M.I., Kirakosyan M.Kh., Korotchik O.M., Lukyanov S.O., Matveev M.A., Podgainy D.V., Rudneva E.M., Rumyantseva D.B., Rumyantseva O.Yu., Torosyan Sh.G.	

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВЫЙ КОМПЬЮТИНГ	13
В.П. Гердт	
МЕТОД НЕРАВНОМЕРНЫХ ПОКРЫТИЙ ДЛЯ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ С ОДНИМ И НЕСКОЛЬКИМИ КРИТЕРИЯМИ.....	14
Ю.Г. Евтушенко, М.А. Посыпкин	
НОВАЯ ЗАДАЧА: РАСЧЕТ ГЕНЕТИЧЕСКОГО КОДА	14
Н.Н. Козлов	
РАЗВИТИЕ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ В ЛИТ ОИЯИ.....	17
В.В. Кореньков	
РАЗРАБОТКА ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ПРОГРАММ ДЛЯ КЛАСТЕРОВ С УСКОРИТЕЛЯМИ	20
В.А. Крюков	
АТОМИСТИЧЕСКИЙ И КОНТИНУАЛЬНЫЙ ПОДХОДЫ К МАТЕМАТИЧЕСКОМУ МОДЕЛИРОВАНИЮ ПРОЦЕССОВ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ, ИНДУЦИРОВАННЫХ СВЕРХКОРОТКИМ ЛАЗЕРНЫМ ВОЗДЕЙСТВИЕМ	20
В.И. Мажукин	
МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ПРОЦЕССОВ В ТЕХНИЧЕСКИХ МИКРОСИСТЕМАХ.....	24
С.В. Поляков, Т.А. Кудряшова, Ю.Н. Карамзин	
ГРИД-СИСТЕМЫ ИЗ ПЕРСОНАЛЬНЫХ КОМПЬЮТЕРОВ КАК РЕЗЕРВ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МОЩНОСТИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ НАУЧНЫХ ЗАДАЧ.....	29
М.А. Посыпкин	
О ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ МОДЕЛЯХ ДВИЖЕНИЯ КРУПНЫХ КОСМИЧЕСКИХ ТЕЛ В АТМОСФЕРЕ ЗЕМЛИ.....	30
А.С. Холодов	
МОДЕЛИРОВАНИЕ 3D ЗАДАЧ МАГНИТНОЙ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ НА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ СВЕРХВЫСОКОЙ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ	32
Б.Н. Четверушкин	
DATA-MINING AT THE NEW ERA OF BIG DATA	32
G.A. Ososkov	

РЕШЕНИЕ МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ОПТИМИЗАЦИОННОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ	40
А.С. Айриян	
РАЗРАБОТКА ПАКЕТА H-UTILS ДЛЯ РАБОТЫ НА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМ КЛАСТЕРЕ С ГИБРИДНОЙ АРХИТЕКТУРОЙ	40
Е.И. Александров	
ФОРМИРОВАНИЕ ТЕМАТИЧЕСКИХ КЛАСТЕРОВ ДЛЯ АГЕНТНОГО ПОИСКА НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ В ИНТЕРНЕТ (НА ПРИМЕРЕ ТЕМАТИЧЕСКОГО НАПРАВЛЕНИЯ «ФИЗИКА ПЛАЗМЫ»).....	41
А.А. Артамонов, К.А. Соколина, Д.В. Леонов, А.И. Черкасский	
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ ВЯЗКОЙ ЖИДКОСТИ ПРИ МАЛЫХ ЧИСЛАХ МАХА НА ОСНОВЕ КВАЗИГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ.....	42
В.А. Балашов, Е.Б. Савенков	
РЕАЛИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ GEM-СТАНЦИЙ ДЛЯ ЭКСПЕРИМЕНТА VM@N	45
Д.А. Баранов	
ЭКСТРАПОЛЯЦИЯ КАРТЫ МАГНИТНОГО ПОЛЯ ДИПОЛЬНОГО МАГНИТА SP41 ЭКСПЕРИМЕНТА VM@N	46
П.Н. Батюк, С.П. Мерц	
АНАЛИТИКО-ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА ФИЗИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРИБОРАХ.....	47
С.И. Безродных, В.И. Власов	
СВЕРХБЫСТРЫЙ МЕТОД С ГАРАНТИРОВАННОЙ ТОЧНОСТЬЮ ДЛЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ В ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ОБЛАСТИ	48
А.А. Белов, Н.Н. Калиткин	
МОДИФИЦИРОВАННЫЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ РЕЛЕВАНТНОГО ОБРАТНОГО ВЫВОДА	52
С.Ю. Болотова	
СЛОЖНОСТЬ НАХОЖДЕНИЯ КОРНЕЙ БУЛЕВЫХ МАТРИЧНЫХ ПОЛИНОМОВ.....	54
Ф.Б. Буртыка	

ЧИСЛЕННО-АНАЛИТИЧЕСКИЙ МЕТОД ГЕНЕРАЦИИ ОРТОГОНАЛЬНЫХ СЕТОК В ПРЯМОУГОЛЬНЫХ МНОГОУГОЛЬНИКАХ	58
О.А. Григорьев	
СРАВНЕНИЕ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЛАВНО НЕРЕГУЛЯРНЫХ ОПТИЧЕСКИХ ВОЛНОВОДОВ.....	60
Г.Д. Дашицыренов	
БЫСТРЫЕ АЛГОРИТМЫ РЕГИСТРАЦИИ $J/\Psi \rightarrow e^+e^-$ В ЭКСПЕРИМЕНТЕ СВМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ	61
О.Ю. Дереновская	
МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ СОБСТВЕННЫХ МОД ЗАКРЫТОГО ВОЛНОВОДА НЕПОЛНЫМ МЕТОДОМ ГАЛЕРКИНА.....	61
Д.В. Диваков	
КОМПЬЮТЕРНАЯ ПРОВЕРКА ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ НЕЗАВИСИМОСТИ ПОЛИНОМИАЛЬНЫХ ИНВАРИАНТОВ СИСТЕМЫ ДВУХ КУБИТОВ	65
И. Ломидзе, С.А. Евлахов	
ОСОБЕННОСТИ ДИНАМИЧЕСКОЙ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ГИДРОМЕХАНИЧЕСКОГО ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА	66
Т.Р. Ежакова	
ИЗУЧЕНИЕ СВЯЗАННОСТИ ПАРАМЕТРОВ СРЕДЫ С ПОГЛОЩЕНИЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ SVD-АНАЛИЗА ОПЕРАТОРА ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ СЕЙСМИКИ.....	67
Е.С. Ефимова	
РЕАЛИЗАЦИЯ И ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИОННЫХ АЛГОРИТМОВ ДЛЯ МИНИМИЗАЦИИ ФУНКЦИЙ В ROOT	71
М.В. Жабицкий	
АНАЛИЗ СЛОЖНЫХ ВЕЗИКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА АСИНХРОННОЙ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ЭВОЛЮЦИИ	71
Е.И. Жабицкая	
МЕТОД ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ НА ОСНОВЕ РАЗЛОЖЕНИЯ ТЕНЗОРНЫЙ ПОЕЗД.....	74
Д.А. Желтков, Е.Е. Тыртышников, В.В. Азиатцева	

СПЕКТРАЛЬНАЯ ДУАЛЬНОСТЬ В ИНТЕГРИРУЕМЫХ СИСТЕМАХ И СУПЕРСИММЕТРИЧНЫХ КАЛИБРОВОЧНЫХ ТЕОРИЯХ	77
Е. Зенкевич	
КВАЗИГАЗОДИНАМИЧЕСКИЙ АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ МЕЛКОЙ ВОДЫ В ПОЛЯРНОЙ СИСТЕМЕ КООРДИНАТ.....	77
Т.Г. Елизарова, М.А. Истомина	
ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ РАСЧЕТА РАСПРОСТРАНЕНИЯ УПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ В ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ОБЛАСТИ С КЛИНОВИДНЫМ ВЫРЕЗОМ.....	79
А.А. Гавриков, М.В. Генкин, Д.Ю. Князьков, А.С. Шамаев	
ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ КВАНТОВОЙ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ НА ПЛОСКОСТИ	83
Е.А. Коваль	
ИССЛЕДОВАНИЕ РЕКОНСТРУКЦИИ D^0-МЕЗОНОВ В ЭКСПЕРИМЕНТЕ СВМ.....	83
Г.Е. Козлов	
СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ДЕТЕКТОРОВ ОБЪЕКТОВ НА ИЗОБРАЖЕНИИ	86
А.Г. Комиссарова, П.С. Сажин, А.В. Стадник	
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ АППАРАТНОЙ ВИРТУАЛИЗАЦИИ И ВИРТУАЛИЗАЦИИ НА УРОВНЕ ОС НА ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ И СКОРОСТЬ ВЫЧИСЛЕНИЙ.....	89
И.Г. Ганкевич, А.С. Крошенинников	
ФРАКТАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА СКАТТЕРОГРАММЫ МГНОВЕННОГО СЕРДЕЧНОГО РИТМА.....	89
Д.Ю. Лебедев, А.П. Иванов, В.Н. Рыжиков, В.П. Цветков	
ВЫЧИСЛЕНИЕ КОНТИНУАЛЬНЫХ ИНТЕГРАЛОВ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ДИФфуЗИИ С ПОМОЩЬЮ МАЛОРАНГОВЫХ АППРОКСИМАЦИЙ.....	92
М.С. Лицарев	
КОМПЛЕКСЫ ПРОГРАММ ДЛЯ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЁТОВ НА ВИДЕОКАРТАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ БИБЛИОТЕКИ OPENCL	93
Д. Мазилкин	
ОСНОВНЫЕ АЛГОРИТМЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ БАЗИСОВ ГРЁБНЕРА.....	93
К.Б. Маринов	

ГЕТЕРОГЕННЫЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ КЛАСТЕР HYBRILIT: СТРУКТУРА И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ	96
Г. Адам, Д.В. Беляков, Л. Вальова, М. Валя, П.В. Зрелов, В.В. Кореньков, М.А. Матвеев, Д.В. Подгайный, О.И. Стрельцова	
О НОВОМ МЕТОДЕ ПОЛУЧЕНИЯ ТРЕКОВ-КАНДИДАТОВ ДЛЯ ЭКСПЕРИМЕНТА VM@N.....	97
П.Н. Батюк, С.П. Мерц, Г.А. Ососков, О.В. Рогачевский	
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВЕЙВЛЕТ-ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ АУДИОИДЕНТИФИКАТОРА МУЗЫКАЛЬНЫХ ПРОИЗВЕДЕНИЙ	100
А.В. Павлюкова	
ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА МУЛЬТИПОЛЕЙ К МОДЕЛИРОВАНИЮ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ В ЛАЗЕРЕ.....	102
А.Б. Пальцев	
МОДЕЛЬ ДОРОЖНОГО ДВИЖЕНИЯ НА ОСНОВЕ РАСШИРЕННОЙ СЕТИ ПЕТРИ	103
М.А. Петров, Н.М. Ершов	
ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ КВАЗИЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НА ГЕТЕРОГЕННЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ.....	107
М.И. Зуев, М.А. Матвеев, В.А. Петрова	
ОБ ОДНОМ СВОЙСТВЕ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЯ, МОДЕЛИРУЮЩЕГО НЕКОТОРЫЕ ХИМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ	107
С.В. Пикулин	
МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ТЕЧЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАСЧЕТНЫХ СЕТОК, АДАПТИРОВАННЫХ К ПОЛОЖЕНИЮ РАЗРЫВОВ	109
А.В. Плёткин	
МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГАЗОВОГО ПОТОКА С МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ СТЕНКОЙ	112
В.О. Подрыга, В.В. Жаховский, С.В. Поляков	
САМОАДАПТИВНЫЙ АЛГОРИТМ БАКТЕРИАЛЬНОГО ПОИСКА В ЗАДАЧАХ МНОГОМЕРНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ	117
С.В. Полуян, Н.М. Ершов	
ВЫБОР ОПТИМАЛЬНОЙ ЧАСТОТЫ ВРАЩЕНИЯ ВАЛА ЦЕНТРОБЕЖНОГО МАЛОРАСХОДНОГО НАСОСА	121
А.А. Протопопов	

ПРЕДСКАЗАНИЕ ИЗОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ТОЧКИ ПРОТЕОЛИТИЧЕСКИХ ПЕПТИДОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ.....	123
И.В. Ромеро Рейес, В.С. Скворцов, Н. Алексейчук	
ИССЛЕДОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ НЕЛИНЕЙНЫХ ОПТИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ДВУМЕРНОЙ ОБРАТНОЙ СВЯЗЬЮ	124
А.М. Селицкий	
НИЗКОУРОВНЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФЕРМЕНТАТИВНЫХ РЕАКЦИЙ С ПОМОЩЬЮ СТОХАСТИЧЕСКИХ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ	126
А.Ю. Синячкин, Н.М. Ершов	
ВЫЧИСЛЕНИЕ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ И СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ КУЛОНОВСКОГО СФЕРОИДАЛЬНОГО ВОЛНОВОГО УРАВНЕНИЯ.....	129
С.Л. Скороходов	
ПОСТРОЕНИЕ СЕМАНТИЧЕСКИХ СТРУКТУР ДАННЫХ ДЛЯ СЦЕНАРИЕВ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ПРОГРАММНЫХ СИСТЕМ.....	131
С.С. Соколов, А.А. Богуславский	
РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДА КЛЕТОЧНОГО АВТОМАТА ДЛЯ ITS – ВНУТРЕННЕГО ТРЕКОВОГО ДЕТЕКТОРА УСТАНОВКИ МРД.....	134
М.В. Стрельченко, А.И. Зинченко, Г.А. Ососков	
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКТИВНОСТИ ИМПУЛЬСНОГО РЕАКТОРА ИБР-2М	138
Ю.Н. Пепельшев, А.К. Попов, Д. Сумхуу	
ПРИМЕНЕНИЕ ТЕХНОЛОГИИ CUDA ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ЗАДАЧ 3D СЕЙСМИКИ В ОДНОРОДНОЙ СРЕДЕ.....	142
А.Е. Тархов ¹ , Н.И. Хохлов, С.Ю. Никитин	
ЭФФЕКТИВНЫЙ АЛГОРИТМ ДЕКОМПОЗИЦИИ БУЛЕВЫХ ПОЛИНОМОВ.....	146
А.В. Трепачева	
ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ В МАТЕРИАЛАХ В РАМКАХ ГИПЕРБОЛИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ.....	150
И.В. Амирханов, З.К. Тухлиев, З.А. Шарипов	

ВЫВОД СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ДЛЯ КОЭФФИЦИЕНТНЫХ ФУНКЦИЙ КАНТОРОВИЧА ПО БАЗИСУ АДИАБАТИЧЕСКИХ МОД.....	151
А.Л. Севастьянов, А.А. Тютюнник, Л.А. Севастьянов	
ГИПЕРСПЕКТРАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ ПЕРЕНОСА СОЛНЕЧНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В АНИЗОТРОПНОЙ СРЕДЕ С УЧЕТОМ ПОЛЯРИЗАЦИИ	154
В.А. Фалалеева, Т.А. Сушкевич	
РАЗРАБОТКА КРИТЕРИЕВ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЖАНРА МУЗЫКАЛЬНОГО ПРОИЗВЕДЕНИЯ	157
К.А. Червякова	
ТЕМАТИЧЕСКИЕ ТЕЗАУРУСЫ В АГЕНТНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ ПОИСКА НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ В ИНТЕРНЕТ (НА ПРИМЕРЕ ТЕЗАУРУСА ПО «ФИЗИКЕ ПЛАЗМЫ»).....	160
А.А. Артамонов, И.Ю. Галин, К.А. Соколова, В.С. Николаев, А.И. Черкасский	
MODERN MATHEMATICAL METHODS OF SPEAKER IDENTIFICATION	161
A.V. Ermilov	
MODELING OF BOUND STATES OF QUANTUM SYSTEMS IN A TWO-DIMENSIONAL GEOMETRY OF ATOMIC TRAPS	163
O.A. Koval	
PROOF OF THE CONJECTURE AGT AND GENERALIZED JACK POLYNOMIALS	163
S. Mironov	
A GEOPHYSICAL METHOD FOR DENSITY RECONSTRUCTION USING WAVELET DECOMPOSITION AND WATERSHED SEGMENTATION.....	163
S.V. Mitsyn, G.A. Ososkov	
CABLING PROCEDURE FOR THE HOMFLY POLYNOMIALS.....	164
A. Morozov	
MATHEMATICAL MODELING OF PULSATING DETONATION WAVE USING NON-OSCILLATING NUMERICAL SCHEMES OF DIFFERENT APPROXIMATION ORDERS	164
A.I. Lopato, P.S. Utkin	
LASER INDUCED SPIN-1/2 DYNAMICS BEYOND THE DIPOLE APPROXIMATION IN THE SEMI-RELATIVISTIC REGIME.....	168
A. Khvedelidze, I. Rogojin	

NUMERICAL INVESTIGATION OF THE SHOCK WAVE – DENSE PARTICLES LAYER INTERACTION	169
P.S. Utkin	

THE WAY OF INFORMATIONAL SUPPORT OF SCIENTIFIC PROJECTS IN COMPUTER CENTER	173
I.G. Gankevich, Yu.A. Tipikin, N.V. Yuzhanin, V.I. Zolotarev	

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ДВУХ СИМУЛЯТОРОВ КВАНТОВЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ	173
Д.А. Калёнов	

ВВЕДЕНИЕ В КВАНТОВЫЙ КОМПЬЮТИНГ

В.П. Гердт

gerdt@jinr.ru

Объединённый институт ядерных исследований,
Лаборатория информационных технологий

Лекция является обзорной и может рассматриваться как введение в бурно развивающуюся за последние два десятилетия научно-техническую область квантовых вычислений и квантовых информационных технологий. Мы начнем с истории развития вычислительной техники, которая прошла путь от механических арифмометров до современных компьютеров, процессоры которых основаны на технологии субмикронных сверхскоростных и сверхбольших интегральных схем и покажем, что дальнейшее развитие последней технологии с неизбежностью (закон Мура) приведет к квантовомеханической элементной базе будущих компьютеров. Затем мы рассмотрим основные постулаты «контр-интуитивной» квантовой механики, лежащие в основе математического аппарата квантовых вычислений. После этого, в рамках схемной модели вычислений, мы обсудим основополагающие идеи квантового компьютера как вычислительного устройства, использующего законы квантовой механики в процессе квантового вычисления, т.е. преобразования исходного начального состояния квантового регистра, состоящего из квантовых битов (кубитов) к его конечному состоянию, считывание (измерение) которого дает результат вычислений. Далее мы рассмотрим основные требования, предъявляемые к квантовым компьютерам, как вычислительным устройствам, и охарактеризуем современное состояние дел в области создания реалистических квантовых компьютеров.

Из нескольких десятков квантовых алгоритмов, разработанных на сегодняшний день, и опирающихся на специфику квантовых вычислений, наиболее ярким является алгоритм Шора целочисленной факторизации (разложения целых чисел на множители) – операции, имеющей фундаментальную важность для современной криптографии. Мы вкратце остановимся на вычислительных свойствах Шора, который, в отличие от всех известных классических алгоритмов, является полиномиальным по длине входного числа и сопоставим времена счета, требуемые для классического и квантового компьютеров для факторизации целых чисел, используемых для защиты информации в современном мире на основе криптосистемы RSA. Эта система является наиболее широко используемой в современной криптографии, и безопасность ее использования обеспечивается вычислительной трудностью целочисленной факторизации.

В заключительной части лекции мы обсудим основные квантовые информационные процессы, основанные на квантовых корреляциях (перепутывании) состояний составных квантовых систем. Примерами таких квантовых информационных процессов являются свехплотное кодирование и телепортация, исследованиями которых занимаются коллективы ученых и инженеров во многих мировых научных и образовательных центрах.

МЕТОД НЕРАВНОМЕРНЫХ ПОКРЫТИЙ ДЛЯ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ С ОДНИМ И НЕСКОЛЬКИМИ КРИТЕРИЯМИ

Ю.Г. Евтушенко¹, М.А. Посыпкин²

mposypkin@gmail.com

¹ Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН

² Институт проблем передачи информации им. А.А. Харкевича РАН

В докладе рассматривается метод неравномерных покрытий, предназначенный для нахождения экстремума функции на компактном множестве. Основным достоинством метода является гарантия точности получаемых приближенных решения оптимизационной задачи. Рассматриваются основные понятия метода неравномерных покрытий: покрывающее множество, миноранты, «рекорды». Излагаются основные факты и алгоритмическая основа метода.

Предлагается обобщение метода неравномерных покрытий на случай многокритериальной оптимизации. Приводятся примеры применения метода для построения аппроксимации множества Парето в различных задачах.

На основе идей многокритериальной оптимизации в работе определено понятие эффективной оболочки множества и предложен метод ее аппроксимации с заданной точностью для случая, когда множество является образом компакта при непрерывном отображении. Показано, что эффективная оболочка компактного множества содержится в его выпуклой оболочке. Предложенный метод применен для построения рабочей области могосекционного робота-манипулятора.

НОВАЯ ЗАДАЧА: РАСЧЕТ ГЕНЕТИЧЕСКОГО КОДА

Н.Н. Козлов

gencodkiam@mail.ru

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

Введение

Как известно, генетический код является одной из наиболее загадочных структур живой природы. Он был окончательно установлен экспериментально в 1966 году. Сразу после этого началась расшифровка генов с использованием генетического кода. Главный объект исследований автора также гены, но перекрывающиеся, открытые в 1976 году и обнаруживаемые в настоящее время в значительных количествах также в больших геномах. Перекрывающиеся гены это случаи, когда один и тот же участок ДНК кодирует более одной (вплоть до 6-и) белковой последовательности. В ходе исследований были решены ряд задач для области ДНК с перекрытиями генов. Подробное изложение этих задач в их взаимосвязи представлено в авторской монографии [1]. В ходе решения указанных задач возникла мысль попытаться расчетным путем установить структуру генетического кода, или найти такой тип математических преобразований, на основе которых можно было бы вычислить генетический код. Об одном подходе к решению этой задачи говорится в данной работе [2].

1 Исходные данные

Мы оперируем понятием элементарного перекрытия применительно к перекрытиям трех генов. Под термином элементарное перекрытие понимаем, перекрытие для кодонов одиночных аминокислот по максимальному числу позиций. На рис. 1А для аминокислоты Ama, кодируемой триплетом $p_1p_2p_3$ указаны альтернативные аминокислоты Ama₁ и Ama₂, кодировки которых $p_0p_1p_2$ и $p_2p_3p_4$ соответственно, образованы сдвигами на -1 и $+1$ нуклеотид в той же цепи ДНК ($\rightarrow$). Предполагается при этом, что все значения $p_0 - p_4$ принадлежат каноническому набору из четырех нуклеотидов. На основе рис. 1А можно построить три вида сочетаний аминокислот, представленных на рис. 1Б и обозначенных соответственно u_1 , u_2 , u_3 : одно u_1 для перекрытия по одной позиции, два u_2 для перекрытия по двум позициям, и одно u_3 для перекрытия 3-х аминокислот.

Следует отметить, что в генетических экспериментах более 10 лет назад нами были обнаружены все допустимые генетическим кодом элементы u_1 , u_2 , u_3 , которые будем рассматривать соответственно как элементы множеств U_1 , U_2 , U_3 . Число элементов U_2 равно 160, а элементов $U_3 - 307$; полный их перечень представлен в [2]. Что касается множества U_1 , то в ходе решения были использованы лишь небольшая часть элементов этого множества и его обобщенные характеристики, которые приводятся в [2].

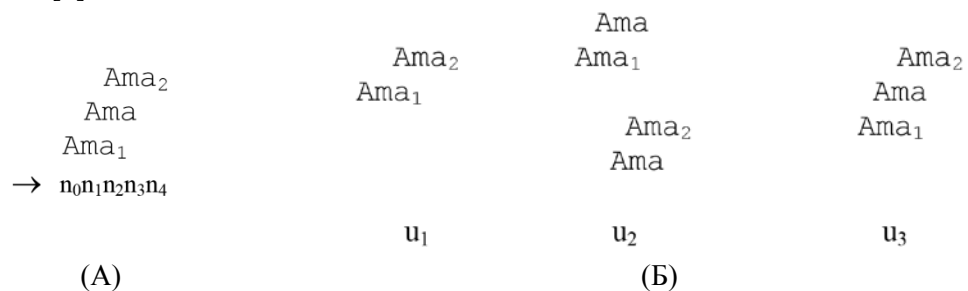


Рисунок 1. А. Для аминокислоты Ama, кодируемой триплетом $p_1p_2p_3$, имеют место 2 альтернативных аминокислоты Ama₁ и Ama₂. Кодировки их образованы сдвигами $-1, +1$ в той же цепи ДНК ($\rightarrow$). Кодон $p_0p_1p_2$ для Ama₁ перекрывается с кодоном $p_1p_2p_3$ для Ama – перекрытие содержит два нуклеотида p_1p_2 ; кодон $p_2p_3p_4$ для Ama₂ перекрывается с кодоном $p_1p_2p_3$ для Ama – перекрытие содержит два нуклеотида p_2p_3 . В итоге тройное перекрытие содержит всего одну общую позицию p_2 . Каждая из приведенных трех аминокислот принадлежит тем наборам A^0 из (1), кодировки которых допускают такие перекрытия. **Б.** Элементы множеств сочетаний аминокислот, образованные на основе элементарного перекрытия из рис. 1А. Слева – один элемент множества U_1 , в центре – два элемента множества U_2 и справа – один элемент множества U_3 .

2 Постановка задачи

Пусть имеем набор из 4 букв: N: a, b, c, d, а также триплеты – любые тройки из этих букв, всего их 64. При этом каждая из 20 канонических аминокислот может кодироваться произвольным сочетанием таких триплетов. Задача состоит в поиске всех генетических кодов, отвечающих всем элементам, обозначенным выше трех множеств U_1 , U_2 , U_3 , соответствующих генетическим экспериментам.

Для дальнейшего используем стандартные трехбуквенные сокращения для каждой из 20 аминокислот, указанные в первом столбце рис. 2.

3 О решении задачи

Для расчета предлагается одно сжатое представление для 307 элементов главного множества – U_3 . На рис. 2 (публикуется впервые) для каждой A_{ma} этого множества (оно указывается в соответствующей клетке) дается аминокислота A_{ma_1} по оси абсцисс, а по оси ординат – A_{ma_2} (см. рис. 1А). Оказалось, что полученное представление не является однородным, а содержит множественные неоднозначности: это случаи, когда одним и тем же значениям A_{ma_1} и A_{ma_2} соответствуют более одного значения A_{ma} – от 2-х до 4-х. Эти случаи заштрихованы на рис. 2, они обозначены через A1 – A13. Следует отметить, что указанные неоднозначности соответствуют значениям Ser, Leu, Arg, как по оси абсцисс, так и по оси ординат. Однако наиболее значительная область на рис. 2 соответствует области, где по обеим осям нет ни одной из аминокислот из набора Ser, Leu, Arg. Последнюю область редуцируем, исключив из нее клетки, содержащие Ser, Leu, Arg. Для ненулевых элементов каждое значение A_{ma} является единственным для соответствующей пары A_{ma_1} и A_{ma_2} . Это свойство позволило обратиться к первому этапу расчета, когда производится расчет кодировок для всех элементов значения A_{ma} на основе кодировок для соответствующей пары A_{ma_1} и A_{ma_2} . Этот подход позволил найти кодировки для 17 аминокислот – или всех, кроме Ser, Leu, Arg, для которых решения были получены в последующих расчетах с учетом указанных выше неоднозначностей. В итоге расчета было найдено 24 кода, каждый из которых являлся подобным (с точностью перестановки нуклеотидов) стандартному коду.

	Met	Trp	Phe	Tyr	His	Asn	Asp	Cys	Gln	Lys	Glu	Ile	Val	Pro	Thr	Ala	Gly	Ser	Leu	Arg
Met																				
Trp							Gly				Gly		Cys			Gly	Trp			
Phe		Leu	Phe	Leu	Ser			Leu	Ser					Ser				Phe	A9	Ser
Tyr		Met	Ile	Ile	Thr			Met	Thr					Thr				Ile	A6	Thr
His		Met	Ile	Ile	Thr			Met	Thr					Thr				Ile	A6	Thr
Asn		Met	Ile	Ile	Thr			Met	Thr					Thr				Ile	A6	Thr
Asp		Met	Ile	Ile	Thr			Met	Thr					Thr				Ile	A6	Thr
Cys		Val	Val	Val	Ala			Val	Ala					Ala				Val	A8	Ala
Gln	Asn					Lys	Arg			Lys	Arg	Asn	Ser		Asn	Ser	Arg	Lys		Lys
Lys	Asn					Lys	Arg			Lys	Arg	Asn	Ser		Asn	Ser	Arg	Lys		Lys
Glu	Asn					Lys	Arg			Lys	Arg	Asn	Ser		Asn	Ser	Arg	Lys		Lys
Ile	Tyr	Leu	Phe	Leu	Ser			Leu	Ser			Tyr		Ser	Tyr			Phe	A9	Ser
Val	Tyr	Leu	Phe	Leu	Ser			Leu	Ser			Tyr	Cys	Ser	Tyr	Cys	Trp	Phe	A9	Ser
Pro	His	Leu	Leu	Leu	Pro	Gln	Arg	Leu	Pro	Gln	Arg	His	Arg	Pro	His	Arg	Arg	A1	A11	A5
Thr	His	Leu	Leu	Leu	Pro	Gln	Arg	Leu	Pro	Gln	Arg	His	Arg	Pro	His	Arg	Arg	A1	A11	A5
Ala	His	Leu	Leu	Leu	Pro	Gln	Arg	Leu	Pro	Gln	Arg	His	Arg	Pro	His	Arg	Arg	A1	A11	A5
Gly	Asp	Val	Val	Val	Ala	Glu	Gly	Val	Ala	Glu	Gly	Asp	Gly	Ala	Asp	Gly	Gly	A3	A8	A4
Ser	His	A10	A10	A10	A7	Gln	Arg	A10	A7	Gln	Arg	His	Arg	A7	His	Arg	Arg	A2	A12	A13
Leu	Tyr	Leu	Phe	Leu	Ser			Leu	Ser			Tyr	Cys	Ser	Tyr	Cys	Trp	Phe	A9	Ser
Arg	Asp	Val	Val	Val	Ala	Glu	Gly	Val	Ala	Glu	Asp	Gly	Ala	Asp	Gly	Gly	A3	A8	A4	

Рисунок 2.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 13-01-00133, 14-01-00112).

Список литературы

1. Н.Н. Козлов. Математический анализ генетического кода. – М.: БИНОМ, 2010, 223 с.
2. Н.Н. Козлов. О расчете генетического кода. Математическое моделирование. 2011. Т. 23. №6. с. 3-17.

РАЗВИТИЕ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ В ЛИТ ОИЯИ

В.В. Кореньков

korenkov@jinr.ru

Объединённый институт ядерных исследований,
Лаборатория информационных технологий

В настоящее время в мире информационных технологий интенсивно развиваются распределенные и параллельные вычисления, которые представлены широким спектром архитектурных решений. Активно развивается направление Big Data (большие данные), которое концентрирует усилия в организации хранения, обработки, анализа огромных массивов данных.

В области распределённых и параллельных вычислений можно выделить четыре основных направления. Это грид, суперкомпьютинг, который меняет свои очертания, свою техническую и элементную базу, однако современные суперкомпьютеры являются передовым фронтом IT-технологий. В последние пять-шесть лет активно развивается *cloud computing*, *облачные вычисления*, которые сейчас преобразуют мир информационных технологий, делая его более эффективным и более простым для пользователей. Эти три направления (grid, supercomputing и cloud computing) используют выделенные ресурсы: суперкомпьютерные центры, дата-центры, grid-сайты, где сосредоточены все ресурсы. Кроме этого, среди систем распределённых вычислений развиваются *добровольные вычисления*, когда каждый пользователь может на своих ресурсах, на своём ноутбуке или даже на своём iPad участвовать в решении задач.

Современное развитие научных исследований, медицины, государственного управления, высокотехнологической промышленности и инновационного бизнеса требует совместной работы многих организаций по обработке большого объёма данных в короткие сроки.

Grid-технологии играют важнейшую роль в развитии компьютеринга для обработки данных экспериментов на Большом адронном коллайдере (LHC). В рамках проекта WLCG (Worldwide LHC Computing Grid) создана уникальная глобально распределённая компьютерная инфраструктура, объединяющая около 200 компьютерных центров 60 стран мира, для хранения, обработки, анализа и моделирования данных экспериментов.

На семинаре 4 июля 2012 года, посвященном наблюдению бозона Хиггса, на экспериментальных установках CMS и ATLAS, директор ЦЕРН Р. Хойер дал высокую оценку грид-технологиям и их значимости для мировой науки. Он выделил три составляющие, обеспечившие получение этого результата - ускорительный комплекс ЦЕРН, экспериментальные установки и грид-инфраструктура БАК. Грид-инфраструктура на БАК позволила обрабатывать и хранить колоссальный объем данных, поступающих от экспериментов на коллайдере, и, следовательно, совершать научные открытия.

Российские центры и ОИЯИ активно участвуют в этом проекте, обеспечивая эффективно функционирующую инфраструктуру и активно участвуя в развитии grid-технологий. В 2014 году в российской грид-инфраструктуре было выполнено более 10 млн. задач, которые использовали более 350 млн. нормализованных часов процессорного времени для анализа данных экспериментов Большого адронного коллайдера.

В ОИЯИ более 10 лет успешно функционирует компьютерный комплекс для

обработки и анализа данных в составе глобальной грид-инфраструктуры WLCG/EGEE/EGI, который обеспечивает поддержку виртуальных организаций крупнейших международных проектов, в том числе экспериментов на LHC.

Ядром этой инфраструктуры является Центральный информационно - вычислительный комплекс (ЦИВК) ОИЯИ, который базируется на распределенной модели хранения и обработки данных. ЦИВК ОИЯИ организован как единый информационно-вычислительный ресурс, предназначенный для обеспечения всех пользователей ОИЯИ (в том числе пользователей параллельных вычислений) и пользователей виртуальных организаций грид-инфраструктуры. Вычислительные ресурсы и ресурсы для хранения данных используются как локальными пользователями ОИЯИ, так и пользователями международных проектов распределенных вычислений, в первую очередь экспериментов на Большом адронном коллайдере (ATLAS, CMS, ALICE).

Основной системой хранения больших объемов информации служит аппаратно-программный комплекс dCache. Несколько объединений пользователей нашего центра используют систему доступа к удаленной информации XROOTD. Созданные средства мониторинга помогают решать задачу эффективного использования системы хранения и балансировки нагрузки на дисковые пулы.

Большую роль в эффективности функционирования вычислительного комплекса играет правильно организованная сетевая инфраструктура, соединяющая управляющие серверы, вычислительную систему и систему хранения информации.

Большое внимание уделяется эффективности функционирования грид-сайта ОИЯИ, включая показатели надежности и доступности, которые достигли 99%.

Сотрудники ЛИТ принимают активное участие в работах по развитию распределенных вычислений.

Основное направление нашей деятельности – глобальный грид-мониторинг. Это важнейшая и сложнейшая проблема, потому что огромные потоки данных и задач, которые возникают в проекте WLCG, требуют новых решений для эффективного и надёжного функционирования глобальной инфраструктуры. Можно выделить следующие работы и проекты:

- 1) участие в развитии универсальной системы мониторинга Dashboard WLCG;
- 2) мониторинг функционирования глобальной инфраструктуры WLCG в реальном масштабе времени с применением интерфейса Google Earth;
- 3) развитие модели компьютеринга для Большого адронного коллайдера с введением нового слоя вычислительных ресурсов для анализа данных, который называется Tier-3. Были разработаны системы локального и глобального мониторинга для этого слоя, что позволило существенно увеличить количество ресурсов для анализа данных;
- 4) в настоящее время совместно с ЦЕРН реализуется проект *Global data transfer monitoring*, в рамках которого для всех протоколов и систем разрабатывается коллекторы сбора информации обо всех передачах данных, которые осуществляются в рамках мировой грид-инфраструктуры (сотни тысяч передач данных в день объемом более одного петабайта). Собранная информация записывается в базу данных для анализа, причем сравниваются разные способы хранения информации (технологии SQL и NoSQL);
- 5) кроме глобального мониторинга, важную роль имеет система многоуровневого мониторинга вычислительного комплекса;
- 6) была разработана архитектура и создана подсистема корректного удаления наборов данных и их реплик (Deleting Service) для обеспечения целостности распределенного хранения информации эксперимента ATLAS.

Для подготовки специалистов в области распределенных вычислений была

создана первая в России распределённая учебно-тестовая инфраструктура, которая активно используется в учебном процессе в Университете «Дубна», в УНЦ ОИЯИ. На базе этой инфраструктуры регулярно проводятся практические курсы для студентов, аспирантов и молодых сотрудников многих стран.

В последние несколько лет активно развиваются облачные вычисления и технологии Больших данных (BigData). Организация хранения, анализа, оперативного доступа к хранилищам больших данных является чрезвычайно сложной задачей. Для эксперимента ATLAS была разработана система PanDA, которая эффективно управляет потоком заданий в различных грид-системах. В настоящее время эта система развивается в направлении использования альтернативных ресурсов: облачные вычисления (Google, Amazon), суперкомпьютеры.

Самый важный и престижный проект по развитию грид-технологий в России – создание центра хранения данных для Большого адронного коллайдера уровня Tier-1 на базе НИЦ «Курчатовский институт» и ОИЯИ. Для центров Tier1 должна быть обеспечена стопроцентная надёжность и доступность, что требует надёжной работы всех компонент центра Tier1 и высококвалифицированной команды для эффективной работы комплекса.

В ближайшее время планируется существенно увеличить вычислительную мощность, системы хранения, ленточные библиотеки, скорость передачи данных, чтобы достичь требуемых параметров. Этот опыт необходим для проектирования распределённой инфраструктуры для мегапроекта НИКА.

В настоящее время мы создаем Многофункциональный центр хранения, обработки и анализа данных в ОИЯИ, который состоит из следующих компонентов:

- 1) грид-инфраструктура уровня Tier1 для эксперимента CMS;
- 2) грид-инфраструктура уровня Tier2 для поддержки экспериментов на LHC (ATLAS, Alice, CMS, LHCb), FAIR (CBM, PANDA) и других;
- 3) распределённая инфраструктура для хранения, обработки и анализа экспериментов ускорительного комплекса НИКА;
- 4) инфраструктура облачных сервисов;
- 5) суперкомпьютер гетерогенной архитектуры;
- 6) центр базовых грид-сервисов для поддержки грид-инфраструктуры институтов стран-участниц ОИЯИ;
- 7) учебно-исследовательская инфраструктура для распределённых и параллельных вычислений.

В настоящий момент в ЛИТ вводится в эксплуатацию гетерогенная компонента Многофункционального центра хранения, обработки и анализа данных – гетерогенный кластер “HybriLIT”. Для эффективного использования кластера создается информационно-вычислительная среда, включающая специализированные сервисы и предоставляющая пользователям широкие возможности по изучению новых подходов и технологий параллельного программирования, удобные инструменты для разработки, отладки и профилирования параллельных приложений, а также для проведения ресурсоемких расчетов, связанных с математической поддержкой исследований, проводимых в ОИЯИ.

В заключении отметим, что ЛИТ ОИЯИ имеет широкую программу сотрудничества в области распределённых вычислений, облачных технологий и параллельных вычислений, не только с российскими центрами и ЦЕРН, но и организациями Германии, Чехии, Словакии, Румынии, Китая, Украины, Армении, Грузии, Азербайджана, Монголии и т.д.

РАЗРАБОТКА ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ПРОГРАММ ДЛЯ КЛАСТЕРОВ С УСКОРИТЕЛЯМИ

В.А. Крюков

krukov@keldysh.ru

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

Бурное развитие архитектуры ЭВМ (доминирование многоядерных и гетерогенных систем), не поддержано появлением адекватных высокоуровневых моделей и языков параллельного программирования. Причина этого – на появление новых архитектур прежде всего отвечали развитием низкоуровневых языков параллельного программирования (MPI, Pthreads, CUDA), заставляя программиста учитывать новые архитектурные особенности ЭВМ, что очень значительно усложнило написание, отладку, сопровождение программ и их адаптацию при переносе на новые ЭВМ.

Необходимо пересмотреть подход к языкам параллельного программирования. Наряду с универсальными высокоуровневыми языками, содержащими явные спецификации параллельного выполнения программы на ЭВМ определенной архитектуры, должны предлагаться и языки с неявным параллелизмом. Например, привычные проблемно-ориентированные языки (Фортран, Си, Си++) по-прежнему должны использоваться для описания алгоритмов в тех областях, в которых они успешно применяются на последовательных ЭВМ. Для отображения на параллельные ЭВМ программ, написанных на этих языках, должны использоваться методы автоматического распараллеливания.

Необходимость адаптации к новым параллельным ЭВМ крупных программных комплексов, используемых в настоящее время на последовательных ЭВМ, остро ставит проблему создания систем автоматизации распараллеливания, облегчающих программисту анализ программного комплекса и оценку эффекта от его распараллеливания, и помогающих ему выполнить преобразования программ, необходимые для их эффективной работы на параллельных ЭВМ.

АТОМИСТИЧЕСКИЙ И КОНТИНУАЛЬНЫЙ ПОДХОДЫ К МАТЕМАТИЧЕСКОМУ МОДЕЛИРОВАНИЮ ПРОЦЕССОВ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ, ИНДУЦИРОВАННЫХ СВЕРХКОРОТКИМ ЛАЗЕРНЫМ ВОЗДЕЙСТВИЕМ

В.И. Мажукин

vim@modhef.ru

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

1 Введение

Сверхбыстрое введение энергии в конденсированные среды, осуществляемое сверхкороткими (характерное время 10^{-11} - 10^{-15} с) сверхмощными (характерная интенсивность 10^{12} - 10^{15} Вт/см²) лазерными импульсами приводит к возникновению ряда явлений не наблюдаемых при других режимах воздействия. Широкий спектр практических приложений, связанных с процессами разрушения материалов и удаления вещества под воздействием импульсных нагрузок определяет большое прикладное значение исследований. Фундаментальные знания материаловедения и исследование

динамической фрагментации ударно-нагруженных материалов является также важной проблемой фундаментальной науки. Общеизвестным универсальным инструментом теоретических, является математическое моделирование.

В основу математического моделирования положены методы научных исследований, включающие разработку математических моделей, численных методов, вычислительных алгоритмов, создание программных проблемно-ориентированных комплексов, предназначенных для использования высокопроизводительной вычислительной техники.

2 Постановка задачи

Для математического описания динамической фрагментации конденсированных сред подвергающихся внешнему воздействию, оценки геометрических и кинематических свойств полученных фрагментов кинетики и динамики фазовых переходов I-го рода используются континуальный [1, 2] и атомистический [3-5] подходы.

Атомистические модели позволяют проводить исследования в конденсированных, газовых и плазменных средах на уровне элементарных процессов. Результаты исследований используются, в частности, для построения кинетических теорий гомогенного плавления. Основным недостатком атомистического подхода, наряду с проблемой выбора потенциала межчастичного взаимодействия, является огромная размерность моделей, количество уравнений в которых определяется количеством рассматриваемых частиц. Столь большое число уравнений с одной стороны служит основным ограничением пространственно-временного масштаба применения моделей молекулярной динамики (современный уровень исследований оперирует с числом уравнений порядка $10^6 \div 10^9$), с другой – свидетельствует об избыточном объеме информации, получаемой в результате решения.

Континуальные модели, базирующиеся на уравнениях механики сплошной среды (как правило, дифференциальные уравнения в частных производных), напротив, используют минимум информации и оперируют со средними значениями физических характеристик, вычисленными по бесконечно малому объему. Основным недостатком континуального подхода, применительно к проблеме гомогенного плавления, является отсутствие адекватного математического аппарата, позволяющего описывать кинетику процессов в метастабильной сильно перегретой твердой фазе.

На основе анализа теоретических моделей, описывающих гетерогенные и гомогенные механизмы фазовых переходов I-го рода разработана неравновесная гидродинамическая модель гетерогенного плавления и испарения:

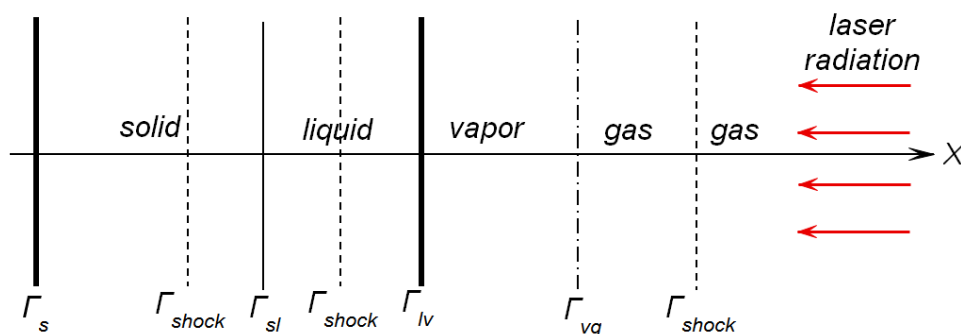


Рисунок 1. Схема лазерного воздействия.

3 Континуальная модель

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} &= 0 \\ \rho_e &= z \frac{m_e}{m_a} \rho \\ \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2)}{\partial x} + \frac{\partial P}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial(\rho_e \varepsilon_e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_e \varepsilon_e u)}{\partial x} &= - \left(P \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial W_e}{\partial x} + g(T_e)(T_e - T_{ph}) + \frac{\partial G}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial(\rho \varepsilon_{ph})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \varepsilon_{ph} u)}{\partial x} &= - \left(P \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial W_{ph}}{\partial x} - g(T_e)(T_e - T_{ph}) \right) \\ \frac{\partial G}{\partial x} + \alpha(T_e)G &= 0 \end{aligned} \right\}_k$$

$$k = s, l \quad \varepsilon_e = C_{ve}(T_e)T_e, \quad \varepsilon_{ph} = C_{vph}(T_{ph})T_{ph}, \quad P = P_e(\rho_e, T_e) + P_{ph}(\rho_{ph}, T_{ph})$$

$$W_e = -\lambda(T_e, T_{ph}) \frac{\partial T_e}{\partial x}, \quad W_{ph} = -\lambda(T_{ph}) \frac{\partial T_{ph}}{\partial x}$$

$$G(t) = (1 - R(T_e)) \cdot G_0 \exp\left(-\left(\frac{t}{\tau_L}\right)^2\right)$$

$$x = \Gamma_{sl}(t): \quad \rho_s(u_s - v_{sl}) = \rho_l(u_l - v_{sl})$$

$$P_s + \rho_s(u_s - v_{sl})^2 = P_l + \rho_l(u_l - v_{sl})^2$$

$$(W_e)_s = (W_e)_l, \quad T_{e,s} = T_{e,l}, \quad (W_{ph})_s - (W_{ph})_l = L_m^{ne} \rho_s(u_s - v_{sl})$$

$$L_m^{ne} = L_m + (C_{pl} - C_{ps})(T_{sl} - T_m) + \frac{\rho_s + \rho_l}{\rho_s - \rho_l} \frac{(u_s - u_l)^2}{2}$$

$$\begin{aligned} T_{ph,s} = T_{ph,l} = T_{sl} &\neq T_m(P_s) = (T_{m,0} + K \cdot P_s) \\ v_{sl}(T_{sl}) &= u_s - \text{Const} \cdot \sqrt{\frac{RT_{sl}}{\mu}} \left[\exp\left(\frac{L_m^{ne} \mu}{RT_m} \cdot \frac{\Delta T}{T_{sl}}\right) - 1 \right] \\ \Delta T &= T_{sl} - T_m, \quad \text{Const} \approx 3 \text{ for aluminium} \end{aligned}$$

4 Модель молекулярной динамики

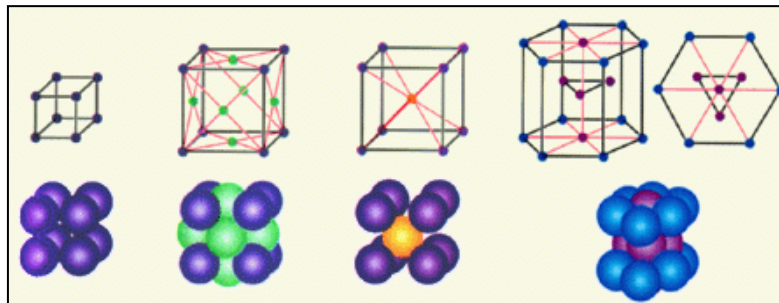


Рисунок 2. Различные решетки кристаллов

$$\begin{cases} m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{F}_i + \vec{F}_i^{ext} \\ \vec{F}_i = -\frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_N) \\ \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i \end{cases}$$

$i = 1 \dots N$

Начальные условия

$$(\vec{r}_i, \vec{v}_i) \Big|_{t=0}, \quad i = 1 \dots N$$

5 Математическое моделирование ультракороткого лазерного воздействия на металл [6]

Режим воздействия $F = 0.25 \text{ J/cm}^2$, $\tau_{1/2} = 5 \text{ ps}$

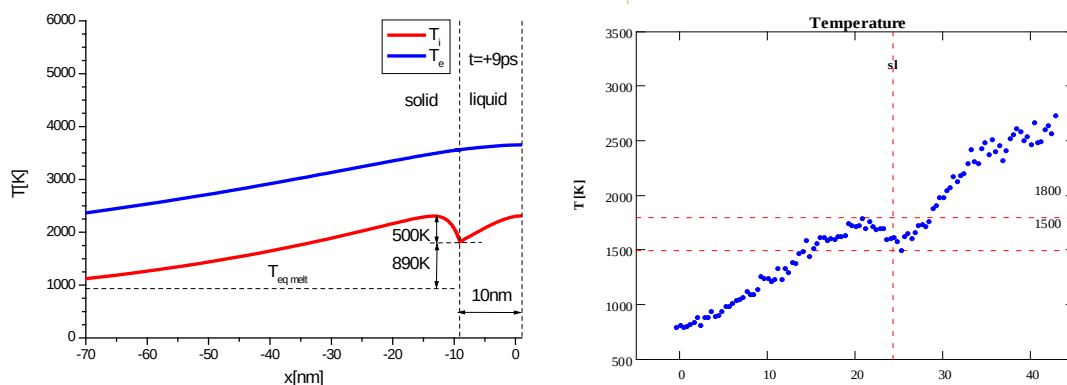


Рисунок 3. Пространственные профили температуры

Заключение

Математическое моделирование с использованием континуальных и молекулярно-динамических моделей с последующим анализом результатов и сравнением с экспериментальными данными позволили определить основные закономерности лазерного воздействия и оптимальные режимы для высокоскоростной абляции.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проекты № 12-07-00436, №13-07-00597.

Список литературы

1. V.I. Mazhukin. Kinetics and Dynamics of Phase Transformations in Metals Under Action of Ultra-Short High-Power Laser Pulses. // Laser Pulses - Theory, Technology, and Applications (Ed. by I. Peshko). InTech, Croatia. 2012. Chapter 8. Pp. 219 -276.
2. M.E. Povarnitsyn, T.E. Itina. Hydrodynamic modeling of femtosecond laser ablation of metals in vacuum and in liquid. //Applied Physics A. Published online (2014).
3. L.V. Zhigilei, Z. Lin, D.S. Ivanov. Atomistic modeling of short pulse laser ablation of metals: connections between melting, spallation, and phase explosion. // J. Phys. Chem. C. 2009. V.113. P. 11892-11906.
4. F. Delogu. Molecular dynamics simulations of homogeneous and heterogeneous melting scenarios in metals. // Physical Review B. 2006. V.73. 184108(10).

5. Y. Gan and J.K. Chen. Integrated Continuum-Atomistic Modeling of Nonthermal Ablation of Gold Nanofilms by Femtosecond Lasers. // Applied Physics Letters. 2009. V.94. Pp. 201116 (8).
6. V.I. Mazhukin, M.M. Demin, A.V. Shapranov. High-speed laser ablation of metal with pico- and subpicosecond pulses. // Applied Surface Science. 2014. V.302. Pp. 6-10.

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ПРОЦЕССОВ В ТЕХНИЧЕСКИХ МИКРОСИСТЕМАХ

С.В. Поляков, Т.А. Кудряшова, Ю.Н. Карамзин

polyakov@imamod.ru

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

Введение

Настоящая работа посвящена развитию численных подходов к моделированию нелинейных процессов в технических системах малого размера или микроэлементах больших систем. Физика функционирования подобных систем описывается целой иерархией математических моделей, спускающейся вплоть до атомарного уровня. В результате такого объединения появляется возможность очень точного предсказания свойств моделируемых объектов и процессов. Однако при этом существенно повышается уровень вычислительной сложности конкретных задач, что становится преодолимым лишь при использовании очень мощных компьютеров и суперкомпьютеров.

В качестве примера рассматривается проблема сверхзвукового холодного газового напыления (СХГН) наночастиц на подложку [1, 2]. Данная задача актуальна для многих направлений нанотехнологии, в том числе, для производства новых материалов для электроники и медицины. В работе предлагается комбинированный подход, сочетающий в себе моделирование газодинамических процессов на макроуровне с помощью уравнений газовой динамики, а также молекулярное моделирование на микро- и наноуровнях. В основе подхода лежит расщепление по физическим процессам и масштабам, сеточные методы и методы молекулярной динамики. В проведенном исследовании предложены смешанная математическая модель, развиты численные методы и разработана параллельная реализация основных элементов модели. Проведенные численные эксперименты показали преимущества и узкие места подхода, в целом оправдавшего свое прямое назначение.

1 Физико-математическая модель и общий алгоритм решения

В рамках решения общей задачи напыления возникает множество различных подзадач, связанных с отдельными технологическими процессами. Основной из них – разгон холодным сверхзвуковым потоком наночастиц и доставка их к разогретой до нужной температуры подложке. При реализации наноимпринтинга [2] для этого используется матрица микросопел, позволяющая получить на подложке «рисунок» нужной структуры. При математическом анализе данной технической системы возникает вопрос о параметрах многокомпонентного двухфазного течения газовой смеси с наночастицами в отдельно взятом микросопле и выводящем микрострую канале, а также вопрос взаимодействия струи с подложкой (см. рис. 1).

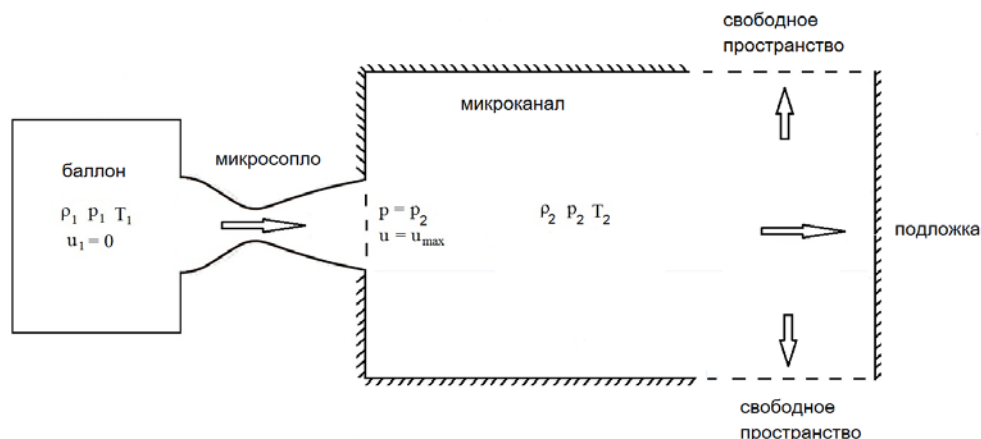


Рисунок 1. Геометрия модельной задачи. Из баллона (слева) через микросопло подается в направляющий микроканал газовая смесь, содержащая наночастицы, которые сверхзвуковым потоком доставляются до подложки (справа).

В общем случае для моделирования процесса в целом используется макро-скопический подход, в котором двухфазное течение газовой смеси с наночастицами описывается в рамках механики сплошной среды с помощью уравнений газовой динамики для компонент газа и уравнения конвекции-диффузии для концентрации наночастиц. В такой постановке задача исследовалась многими авторами (см., например, [3-5]). Однако для систем микронных и субмикронных размеров возникает проблема нарушения гипотезы сплошности, когда длина свободного пробега молекул газа становится сравнимой с элементами геометрии системы. В рассматриваемом случае длина свободного пробега принимает значения из диапазона 60 - 600 нм и близка к размерам сопел и некоторых видов наночастиц или их кластеров. Таким образом, математическая модель исследуемого течения не может быть полностью сформулирована в рамках макроскопического подхода.

Обычно в данной ситуации для описания течения смеси используют либо уравнения Навье-Стокса со специальными граничными условиями на стенках, либо переходят к решению уравнения Больцмана в том или ином приближении [6]. Оба способа имеют свои преимущества и недостатки. Решение на основе уравнений Навье-Стокса позволяет существенно сократить вычислительные затраты, однако число Кнудсена в рамках такого подхода не может быть больше 0.1. Решение на основе уравнения Больцмана [7-9] получается на порядок более затратным, однако диапазон чисел Кнудсена сверху не ограничен, а снизу ограничен величинами порядка 0.01, поскольку для меньших значений числа Кнудсена вычислительная процедура на базе уравнения Больцмана становится абсолютно неприемлемой с точки зрения временных затрат.

Имеются, однако, и альтернативные подходы, в том числе, метод молекулярной динамики (ММД) [7-10]. Использование ММД в полном объеме в принципе уже возможно (см., например, [11-13]), однако для реальных размеров области и конечных промежутков времени оно представляется пока преждевременным, даже при наличии очень мощных суперкомпьютеров. Поэтому, на наш взгляд наиболее продуктивным подходом к задачам подобного класса может оказаться комбинация макроскопического подхода (например, на основе уравнений Эйлера, Навье-Стокса или квазигазодинамики), описывающего среднее поле течения, и коррекция характеристик течения с помощью статистических подходов (например, на основе метода крупных частиц, уравнения Больцмана или ММД).

В данной работе использовался комбинированный подход, который базируется на уравнениях квазигазодинамики (КГД) [14], а коррекция параметров течения производилась с помощью ММД. Предложенный общий алгоритм моделирования представлен в [15, 16] и применялся к моделированию течения бинарной смеси водорода и азота в однофазном варианте (без наночастиц). Он представляет собой расщепление по физическим процессам. КГД система рассматривается в релаксационном приближении и является обобщением квазигазодинамических уравнений на случай смеси газов. Она решается методом конечных объёмов на подходящей сетке. Система уравнений молекулярной динамики используется в качестве подсеточного алгоритма (применяющегося внутри каждого контрольного объёма). Она решается с помощью алгоритма Верле [17], записанного в скоростной форме. В рамках МД-вычислений взаимодействие частиц описывается с помощью потенциалов, определяющих основные свойства чистых компонент газовой смеси. Для расчета сил взаимодействия молекул газа между собой и молекулами металлических поверхностей системы используются парные потенциалы Леннарда-Джонса [18, 19].

2 Детали алгоритма и параллельная реализация

В рассматриваемом случае двухфазной среды численный алгоритм аналогичен предложенному в [15, 16], за исключением того, что к системе КГД уравнений добавляется уравнение конвекции-диффузии для концентрации наночастиц. При этом предполагается, что размер наночастиц не превышает 10 нм, что позволяет не выделять кнудсеновский слой вокруг самих наночастиц (хотя в будущем это предполагается). Кроме того, для упрощения задачи не учитывается собственная температура наночастиц (считается, что она совпадает с температурой газовой смеси). Также для упрощения предварительного анализа течения в расчётах не учитывалось наличие подложки на пути струи.

В итоге численная процедура состояла в следующем. На каждом шаге по времени производится сначала предикторный расчёт макропараметров компонент газа по сеточным аналогам КГД уравнений без учёта обменных членов (последние описывают перераспределение импульса и энергии между компонентами газовой смеси [14, 15]). В результате расчёта определяются новые макропараметры компонент газа и смеси в целом в каждом контрольном объёме пространственной сетки.

Далее производится подсеточный расчёт с целью вычисления обменных членов. Он осуществляется независимо в каждом контрольном объёме (ячейке) сетки с помощью уравнений молекулярной динамики и производится с существенно более мелким шагом по времени, связанным с эволюцией молекулярной подсистемы. Критерием останова МД-расчёта является либо достижение характерного времени эволюции молекулярной системы (которое связано с линейным размером ячейки и средней скоростью молекул: $\Delta t \sim l/v$), либо изменение (на 1-2%) одного или нескольких макропараметров молекулярной системы (средний импульс, средняя кинетическая или средняя потенциальная энергии). Фактически, если сильных изменений макропараметров не происходит, то расчёт производится до достижения некоторого заданного интервала Δt пропорционального времени максвеллизации молекулярной системы.

Возврат к макроскопическому уровню вычислений осуществляется путём вычисления обменных членов в каждой точке сетки и коррекцией газодинамических параметров по КГД уравнениям с учётом обменных членов. Далее производится решение уравнения конвекции-диффузии для концентрации наночастиц. Затем осуществляется переход к новому слою по времени.

Параллельная компьютерная реализация данного алгоритма предполагает использование кластера (или суперкомпьютера) с центральной или гибридной

архитектурой, имеющего на каждом узле несколько многоядерных центральных и возможно несколько графических процессоров (ЦПУ и ГПУ). Распараллеливание алгоритма производится на принципах геометрического параллелизма и деления областей. В частности, основной газодинамический расчёт производится по дискретным КГД уравнениям на сетке, распределённой между узлами кластера с помощью техники “domain decomposition” (см., например, [20]). Внутри узла КГД-вычисления распределяются между потоками ЦПУ. Вычисление обменных членов возлагается на графические процессоры при их наличии (в противном случае эти вычисления также производятся потоками ЦПУ). Распараллеливание КГД-вычислений между потоками ЦПУ также производится геометрическим способом. Распараллеливание МД-вычислений производится путём разбиения всего множества молекул, относящихся к одному узлу сетки, на группы примерно одинаковой мощности. В итоге каждый блок (варп) ГПУ обрабатывает одну или несколько молекулярных групп, относящихся к одному или нескольким узлам сетки. Программная реализация алгоритма основана на гибридной технологии MPI+OpenMP+CUDA, представленной нами в [21].

3 Результаты предварительного моделирования

Предварительная апробация разработанного численного подхода без учёта наночастиц проводилась в рамках работ [15, 16]. В них было показано следующее.

1) Разработанный численный алгоритм пригоден для анализа физических процессов в установках СХГН, а его параллельная реализация является достаточно эффективной при проведении расчётов на кластерах и суперкомпьютерах с гибридной архитектурой.

2) Расчёты течения в рамках упрощённой модельной задачи вдали от стенок микроканала на основе макроскопической КГД-модели при микронных размерах расчётной области качественно согласуются с результатами натурных экспериментов.

3) Для достижения количественного совпадения численных результатов, получаемых с помощью КГД-модели, с результатами натурных экспериментов следует использовать уравнение состояния, согласованное по параметрам с потенциалами взаимодействия молекул, применяемых при МД-вычислениях, а также с экспериментальными данными о свойствах используемых газов. В частности, в качестве уравнения состояния газов можно использовать вириальные уравнения состояния для давления и внутренней энергии.

В дополнение к этим результатам следует добавить следующее.

1) На уровне макроописания моделируемого процесса существует необходимость использования двухтемпературного КГД-описания, предложенного в [22]. Этому есть две причины. Во-первых, часто используемая в установках СХГН азот-водородная газовая смесь в разных подобластях канала имеет температуру из диапазона 80-600 К. При этом вблизи нижней границы указанного диапазона молекулы газовой смеси имеют преимущественно три степени свободы, а при комнатных и более высоких температурах – пять. Во-вторых, при взаимодействии газа со стенками микроканала и подложкой образуются отошедшие ударные волны (именно они и должны реализовываться в установках СХГН), которые создают в приповерхностном слое дозвуковое течение с расщепленной поступательной и вращательной температурами газа.

2) Взаимодействие газа со стенками следует учитывать на молекулярном уровне (особенно это будет актуально для подложки), поскольку макроскопические граничные условия не улавливают всей специфики процесса вблизи стенки. В частности, следует учесть проникновение водорода в стенку и подложку системы, а

также взаимные превращения поступательной и вращательной энергии газов и колебательной энергии атомов решеток стенок и подложки.

Заключение

В заключении отметим, что в рамках данной работы представлены вычислительные основы и комбинированный подход к моделированию процессов сверхзвукового холодного газового напыления наночастиц на подложки. Конкретные преимущества и недостатки предлагаемой численной методики выявят последующие детальные исследования. Однако уже сейчас можно отметить большой интерес исследователей во всем мире к подобного рода мультимасштабным вычислениям, ориентированным на использование современных суперкомпьютеров.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда фундаментальных исследований (проекты №№ 13-01-12073-офи-м, 12-01-00345, 14-01-00663-а).

Список литературы

1. *А.П. Алхимов, С.В. Клинов, В.Ф. Косарев, В.М. Фомин.* Холодное газодинамическое напыление. Теория и практика. – М.: Физматлит. 2010.
2. *D. Resnick.* Nanoimprint lithography. // Nanolithography. The art of fabricating nanoelectronic and nanophotonic devices and systems (Edited by Martin Feldman). Woodhead Publishing Limited. 2014.
3. *Yau Wu and C.H. Lee.* Kinetic Theory of Shock Tube Problems for Binary Mixtures. // The Physics of Fluent. 1971. V.14. №2. Pp. 313-322.
4. *V. Garzo, A. Santos and J.J. Brey.* A kinetic model for a multicomponent gas. // J. Phys. Fluids A. 1989. 1(2). Pp. 380-383.
5. *A. Ramos, G. Tejeda, J.M. Fernandez, S. Montero.* Nonequilibrium Processes in Supersonic Jets of N₂, H₂, and N₂ + H₂ Mixtures: (I) Zone of Silence. // J. Phys. Chem. A. 2009. 113. Pp. 8506-8512.
6. *Дж. Гирифельдер, Ч. Кертисс, Р. Берд.* Молекулярная теория газов и жидкостей. – М.: Издательство иностранной литературы, 1961.
7. *М.Н. Коган.* Динамика разреженного газа. – М.: Наука, 1967.
8. *Г. Бёрд.* Молекулярная газовая динамика. – М.: Мир, 1981.
9. *G.A. Bird.* Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flow. – Oxford Science simulations. 1994.
10. *J.M. Haile.* Molecular Dynamics Simulation. Elementary Methods. – John Wiley & Sons, Inc. New-York. 1992.
11. *В. Мирный, М. Фрэнер.* Об одной программе моделирования молекулярной динамики газа с элементами распараллеливания алгоритма. // Вычислительные технологии. 2001. Т.6. №3. С. 32-50.
12. *В.Л. Ковалев, В.Ю. Сазонова, А.Н. Якунчиков.* Моделирование взаимодействия струи разреженного газа с преградой методами молекулярной динамики // Вестн. Моск. ун-та. Матем. Механ. 2008. №2. С. 56-58.
13. *В.Л. Ковалев, А.Н. Якунчиков.* Исследование течения и теплообмена в микро- и наноканалах методами молекулярной динамики. // Вестн. Моск. ун-та. Матем. Механ. 2008. №5. С. 67-70.
14. *Т.Г. Елизарова.* Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. Лекции по математическим моделям и численным методам в динамике газа и жидкости. – М.: Научный Мир, 2007. – 350 с.
15. *Т.А. Кудряшова, В.О. Подрыга, С.В. Поляков.* Моделирование течений газовых смесей в микроканалах. // Вестник РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика». 2014. №3 (в печати).
16. *Yu. Karamzin, T. Kudryashova, V. Podryga and S. Polyakov.* Numerical Simulation of the Gas Mixture Flows on Hybrid Computer Systems. CD-proceedings of the Ninth International Conference on Engineering Computational Technology (ECT2014), Naples, Italy, 2-5 September 2014. Pp. 1-14 - CIVIL-COMP LTD (CIVIL-COMP PRESS & SAXE-COBURG PUBLICATIONS). 2014 (в печати).

17. *L. Verlet.* Computer “experiments” on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. // *Phys. Rev.* 1967. V.159. Pp. 98-103.
18. *J.E. Lennard-Jones.* Cohesion. // *Proceedings of the Physical Society.* 1931. V.43. №5. Pp. 461-482.
19. *Л.Р. Фокин, А.Н. Калашиников.* Транспортные свойства смеси разреженных газов N₂-H₂ в базе данных ЭПИДИФ. // *Теплофизика высоких температур.* 2009. Т.47. №5. С. 675-687.
20. *J. Dongarra, I. Foster, J. Fox, W. Gropp, K. Kennedy, L. Torczon, A. White.* Sourcebook of Parallel Computing. – Morgan Kaufman. 2003. – 852 p.
21. *С.В. Поляков, Ю.Н. Карамзин, О.А. Косолапов, Т.А. Кудряшова, С.А. Суков.* Гибридная суперкомпьютерная платформа и разработка приложений для решения задач механики сплошной среды сеточными методами. // *Известия ЮФУ. Технические науки.* 2012. № 6 (131). С. 105-115.
22. *Т.Г. Елизарова, И.А. Широков.* Макроскопическая модель газа с поступательно-вращательной неравновесностью. // *ЖВМиМФ.* 1999. Т.39. №1. С. 141-153.

ГРИД-СИСТЕМЫ ИЗ ПЕРСОНАЛЬНЫХ КОМПЬЮТЕРОВ КАК РЕЗЕРВ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МОЩНОСТИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ НАУЧНЫХ ЗАДАЧ

М.А. Посыпкин

mposypkin@gmail.com

Институт проблем передачи информации им. А.А. Харкевича РАН

В последнее время широкое распространение получили грид-системы из персональных компьютеров (ГСПК). ГСПК основаны на наблюдении, что большую часть времени персональные компьютеры либо простаивают, либо загружены лишь на некоторую небольшую долю своей мощности. Пользователи могут добровольно предоставлять ресурсы своих компьютеров для использования в научных расчетах (добровольные вычисления).

В докладе рассматриваются технологии, дающие возможность объединения свободных вычислительных мощностей домашних компьютеров и персональных компьютеров учреждений в единую распределенную систему для решения сложных вычислительных задач. Планируется уделить основное внимание системе BOINC, которая является наиболее распространенным инструментом создания распределенных приложений в среде добровольных вычислений. Будет рассмотрен процесс создания и развертывания BOINC-приложения, проведения расчетов и обработки результатов. Также будут рассмотрены основные технологии интеграции BOINC с распределенными вычислительными платформами другого типа (кластерами, облаками, сервисными грид-системами), проблематика использования мобильных устройств в добровольных вычислениях.

Основные положения доклада будут проиллюстрированы опытом решения вычислительных задач на платформе BOINC, накопленным участниками российского отделения международной федерации грид-систем персональных компьютеров.

О ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ МОДЕЛЯХ ДВИЖЕНИЯ КРУПНЫХ КОСМИЧЕСКИХ ТЕЛ В АТМОСФЕРЕ ЗЕМЛИ

А.С. Холодов

xolod@cres.mipt.ru

Институт автоматизации проектирования РАН,
Московский физико-технический институт
Балтийский федеральный университет

Состояние нижней и верхней атмосферы Земли существенно влияет на жизнедеятельность каждого человека, поэтому ему исследованию придается постоянное и все возрастающее внимание. Знания о состоянии нижней и верхней атмосферы, умение прогнозировать ее изменения в условиях постоянных и самых разнообразных воздействий естественного и антропогенного происхождения необходимы, в частности, для обеспечения работы всевозможных систем теле- и радиосвязи, навигационных систем, проектного функционирования космических аппаратов, безопасности находящихся в космосе (да и на поверхности Земли) людей. Одной из реальных угроз космического происхождения, что убедительно продемонстрировал недавний челябинский феномен, является кометно-астероидная опасность, математическому моделированию различных аспектов которой посвящено большое число оригинальных и обзорных работ (В.П. Коробейников, В.П. Стулов, Г.А. Тирский, В.Е. Фортов, Ю.Д. Шевелев и др.), в том числе работы, опубликованные в [1] и [2].

Движение метеороидов в атмосфере Земли со скоростями в десятки км/с является пока единственным примером наблюдаемых глубоких гиперзвуковых течений, сопровождается, как показано, например, в [1] самыми разными физическими процессами при численном моделировании которых (с целью уточнения измеряемых и восстановления отсутствующих параметров движения) требует решения целого комплекса взаимосвязанных задач, в том числе:

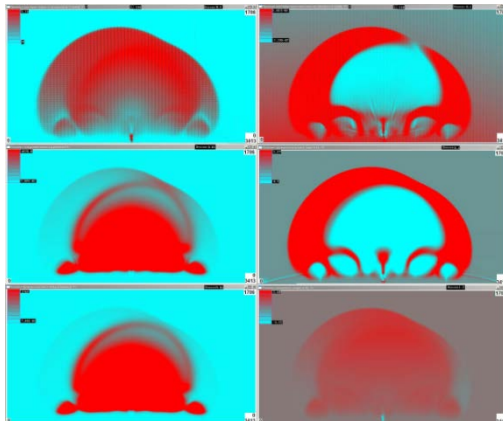
- аэробаллистическое моделирование с учетом процесса возможной фрагментации и разрушения [4];
- моделирование аэрогазодинамики гиперзвукового обтекания «болидообразных» тел с максимально возможным учетом физико-химических процессов, включая процессы прогрева тела, приповерхностные процессы, сильный вдув, перенос излучения и др. [3, 5, 6];
- моделирование аэрогазодинамики формирования и начальной эволюции следа за плохообтекаемыми телами;
- моделирование процесса нагрева и разрушения тел в газовом потоке в рамках механики деформируемых твердых тел (фрагментация на крупные части и в мелкодисперсную среду) [7];
- моделирование газодинамики затекания паров аблирующей лобовой поверхности в трещины разрушающегося тела;
- моделирование аэрогазодинамики близкорасположенных тел с учетом их интерференции (задача о разделении тела на несколько фрагментов разного размера – массы) [8];
- моделирование многофазной термогазодинамики гиперзвукового обтекания мелкодисперсного облака частиц болида;
- моделирование процесса воздействия ударной волны на элементы городской застройки (в рамках газодинамики, МДТТ и сейсмодинамики) [9];
- моделирование эволюции области начального возмущения в тропосфере,

генерация акустико-гравитационных волн, возмущений электромагнитных полей и др. [10].

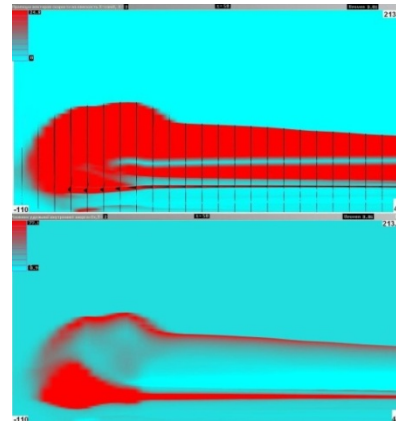
Попытка решения некоторых из комплекса перечисленных выше задач, представленных в серии статей [3-10] из [2] и возможное их развитие обсуждается в данном сообщении. Для численного решения задачи об эволюции возмущений, вызванных движением метеороидов в атмосфере Земли, использовалась полная магнитогазодинамическая модель в дивергентной форме и консервативный вариант сеточно-характеристического метода, что позволило рассматривать сильные возмущения и рассчитывать динамику процессов на длительные времена.



Заимствованный из [1] снимок светящейся части возмущенной атмосферы в момент разрушения метеороида (фото А. Ахметвалеева).



Распределение параметров в плоскости магнитного меридиана ($t/t_* = 598$): векторы скорости (верхняя левая панель); векторы напряженности магнитного поля (верхняя правая панель); газодинамического давления (средняя левая панель); удельной внутренней энергии (средняя правая панель); относительной плотности (нижняя левая панель); вертикальной компоненты скорости (нижняя правая панель), [10].



Распределение скорости (верхняя панель, цвет – величина, черные штрихи – направление) и внутренней энергии (нижняя панель) в срединной широтной плоскости ($t/t_* = 50$), [10].

Список литературы

1. В.В. Емельяненко, О.П. Попова, Н.Н. Чугай и др. *Астрономический вестник*. 2013. Т.47. №4.
2. Спецвыпуск журнала «Компьютерные исследования и моделирование». 2013. Т.5. №6.
3. В.А. Андрущенко, Ю.Д. Шевелев. Обстрел Земли из космоса – хроника столетия. // *Компьютерные исследования и моделирование*. 2013. Т.5. №6. С. 907-916.
4. М.М. Голомазов. Моделирование движения астероида в атмосфере Земли. // *Компьютерные исследования и моделирование*. 2013. Т.5. №6. С. 917-926.

5. В.А. Андрущенко, Н.Г. Сызранова, Ю.Д. Шевелев. Моделирование падения Челябинского метеорита. // Компьютерные исследования и моделирование. 2013. Т.5. №6. С. 927-940.
6. А.А. Иванов, В.С. Финченко. Численное исследование теплового разрушения метеорита «Челябинск» при входе в атмосферу Земли. // Компьютерные исследования и моделирование. 2013. Т.5. №6. С. 941-956.
7. И.Б. Петров, В.А. Миряха, А.В. Санников, А.В. Шевцов. Численное моделирование начальной стадии разрушения метеороида в плотных слоях атмосферы в упругопластическом приближении. // Компьютерные исследования и моделирование. 2013. Т.5. №6. С. 957-967.
8. Ф. А. Максимов. Сверхзвуковое обтекание системы тел. // Компьютерные исследования и моделирование. 2013. Т.5. №6. С. 969-980.
9. И.С. Никитин, А.В. Филимонов, В.Л. Якушев. Распространение волн Релея при косом ударе метеорита о поверхность Земли и их воздействия на здания и сооружения. // Компьютерные исследования и моделирование. 2013. Т.5. №6. С. 981-992.
10. А.С. Холодов. Об эволюции возмущений, вызванных движением метеороидов в атмосфере Земли. // Компьютерные исследования и моделирование. 2013. Т.5. №6. С. 993-1030.

МОДЕЛИРОВАНИЕ 3D ЗАДАЧ МАГНИТНОЙ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ НА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ СВЕРХВЫСОКОЙ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ

Б.Н. Четверушкин

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

Моделирование с использованием высокопроизводительных вычислительных систем позволяет получать принципиально новые результаты как в научных исследованиях, так и в промышленности.

Однако использование таких систем сопряжено с большими трудностями. По сути дела для их эффективного использования требуется принципиально новые математические модели, алгоритмы и математическое обеспечение. В данной работе такие методы и алгоритмы предлагаются для решения задач магнитной гидродинамики.

Уравнения магнитной газовой динамики (МГД) состоят из уравнений газовой динамики (ГД) и уравнений магнитной индукции (МИ).

Как известно, уравнения ГД могут быть получены из кинетического уравнения Больцмана. Уравнения МИ являются следствием уравнений Максвелла. Кинетическая природа уравнений ГД позволяет использовать явные кинетические схемы, которые хорошо адаптируются к архитектуре высокопроизводительных многопроцессорных систем. Однако для уравнений параболического типа, к которым относится уравнение МИ с дополнительными членами магнитной вязкости, явные схемы обладают очень жесткими условиями устойчивости, что по сути дела замедляет решение всей системы МГД. Предлагаемый в работе подход позволяет в определенной мере снять данное ограничение.

На основе единого кинетического описания изменения газодинамических параметров и МИ удастся построить кинетически согласованный газодинамический вариант МГД системы. Дополнительные диссипативные члены в этом варианте выступают в качестве физически обоснованных регуляризаторов, дающих возможность для эффективного использования высокопроизводительных вычислительных систем.

DATA-MINING AT THE NEW ERA OF BIG DATA

G.A. Ososkov

ososkov@jinr.ru

Joint Institute for Nuclear Research, Laboratory of Information Technologies

1 Data-mining in general and in experimental physics

Computerization of all sites of scientific and technical life led to increasing the role of data processing needed to estimate wanted parameters that are difficult or sometimes

impossible to measure directly. The drastic increase of data streams especially in social and business domains, where systems under study are too complex to be mathematically formalized, resulted in the barest necessity to develop models and the corresponding analyses directly from large, complex, information-rich data sets overfilled computers, networks, and our existence. Besides, only a small amount of these data could ever be used because, as a rule, data volumes were too large to manage, or data structures themselves were too complicated to be analyzed effectively. Therefore the ability to extract useful knowledge hidden in these data and to act on that knowledge was becoming increasingly important.

Such the process of analyzing large amounts of data about experimental results held on a computer in order to get essential information about them that is not immediately available was called data mining (DM) [1]. It is accomplished by extracting dependencies and patterns from large data sets by combining methods from statistics and artificial intelligence with database management.

Data mining methods commonly involves four classes of tasks:

- Association rule learning – searches for relationships between variables;
- Clustering – is the task of discovering groups and structures in the data that are in some way or another "similar", without using known structures in the data;
- Classification – is the task of generalizing known structure to apply to new data;
- Regression – attempts to find a function which models the data with the least error.

Although data mining methods are oriented mostly on mining business and social science data, in recent years, data mining has been used widely in the areas of science and engineering, such as bioinformatics, genetics, medicine, education and electrical power engineering. So a great volume of DM software is now exists as open-source and commercial.

However one would not find experimental physics in DM application domains. There are, at least, two reasons for that.

At the first, physicists, dealing permanently with tremendous streams of experimental data, use to develop their own comprehensive set of specific DM methods, which physicists named data analysis (DA), and corresponding software packages summarized now at CERN in the famous data analysis framework ROOT [2].

The very important stage of DA process in experimental high energy and nuclear physics (HEPN) is *pre-processing*. It includes:

- *Data acquisition*: before DA algorithms can be used, a target data set must be assembled and converted from the rough format of detector counters into natural unit format;
- *Data selection*: then data must be cleaned to remove noisy, inconsistent and other observations, which do not satisfy acceptance conditions. It results in a significant reduction of target data (several orders of magnitude);
- *Data transformation*: to transform data into forms appropriate for mining, they must be corrected from detector distortions and misalignment by special calibration and alignment transformation procedures.

The next HEPN data mining stages and methods can be summarized as:

- *Pattern recognition*: tracking, vertex finding, revealing Cherenkov rings, fake objects removing that employ the methods, as Hough transform, Kalman filter, artificial neural networks, cellular automata, wavelet analysis and so on;
- *Physical parameters estimation* with applying robust M-estimations;
- *Hypothesis testing* by likelihood ratio test, neural network and boosted decision trees (BDT) approach.

It should be pointed out the importance of *Monte-Carlo simulations* in HENP that are used on all stages. It is based on the very advanced physical theory of the studied particle interactions for HENP experiments. Special programming packages were developed to simulate physical processes taking into account all details of experimental setups. It allows to

- accomplish in advance the experimental design of hardware setup and data mining
- algorithms and optimize them from money, materials and time point of view;
- develop needed software framework and test it;
- optimize structure and needed equipment of planned detectors minimizing costs, timing with a proposed efficiency and accuracy; calculate in advance all needed distributions or thresholds for goodness-of-fit tests.

Some examples of DA method applications from practice of the Joint Institute for Nuclear Research (JINR) given below in this lecture.

At the second, DA methods are the only part of the total great process of data manipulating in contemporary experiments in HENP. It can be demonstrated on the Large Hadron Collider (LHC) example [3]. The LHC during its first run 2010-2012 produced 600 millions of collisions every second in each of many detectors, generating approximately one petabyte of data per second. None of today's computing systems are capable of recording such rates, so sophisticated selection systems are used for a first fast electronic pre-selection, only passing one out of 10,000 events. Tens of thousands of processor cores then select 1% of the remaining events for analysis. Even after such drastic data reduction, the four big experiments, ALICE, ATLAS, CMS and LHCb, together need to store over 25 petabytes per year. The LHC data are aggregated in the CERN Data Centre, where initial data reconstruction is performed, and a copy is archived to long-term tape storage. Another copy-replica is sent to several large data centers around the world. Subsequently hundreds of thousands of computers from around the world come into action: harnessed in a distributed computing service, they form the Worldwide LHC Computing Grid (WLCG), which provides the resources to store, distribute, and process the LHC data (see WLCG Tier's structure in fig.1). WLCG combines the power of more than 170 collaborating centres in 36 countries around the world, which are linked to CERN. Every day WLCG processes more than 1.5 million "jobs", corresponding to a single computer running for more than 600 years.

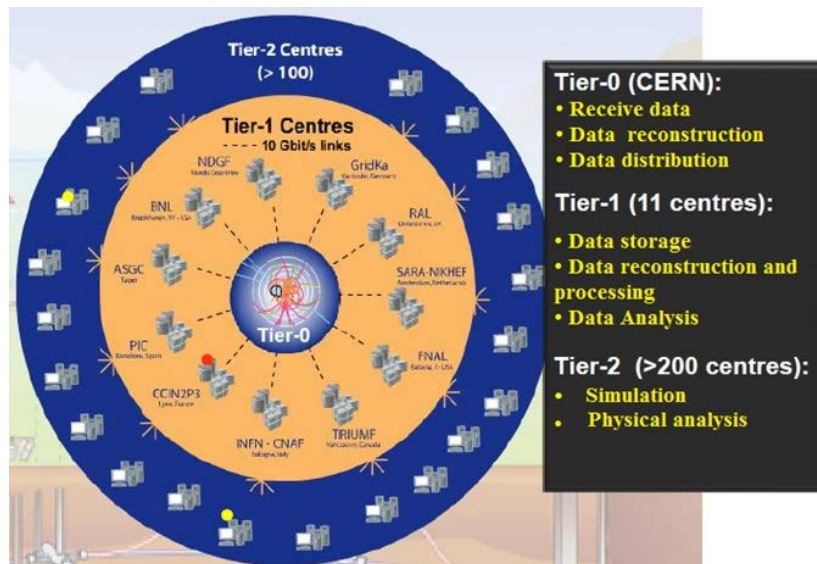


Figure 1. WLCG Tier's structure

Currently the LCG Tier1 center for the CMS experiment is actively developed at LIT JINR in association with the Moscow Kurchatov Center to be ready to the next LHC run in 2015 [4].

Thus tremendous stream of simulated and experimental HENP data to be stored, transmitted and analyzed has exceeded already the Exabyte level signifying our accession into the Big Data era.

2 Big Data

The **Big Data** phenomenon is one of the most popular now, when they are generated by everything around us at all times arriving from multiple sources: every digital process and social media exchange produces it. Systems, sensors and mobile devices transmit it. According to IBM, we have produced 2.5 Exabyte (2.5×10^{18} bytes) of data every day in 2012 and this amount is growing exponentially doubling every year, according to famous Law of Gordon Moore, co-founder of Intel Corporation.

Gartner for describing big data proposed yet in 2001 three key attributes: Volume (amount of data), Velocity (speed of data in and out), and Variety (range of data types and sources) [5]. However even this "3Vs" model was now in 2014 after drastic technology changes inevitably extended by adding four new "Vs" including Validity, Veracity, Value, and Visibility [6, 7].

Simply speaking, one can define Big Data as data that's too large or complex to be effectively handled by standard database technologies, although at the same time those Big Data from all listed above multiple sources are to be analyzed by many web browsers, for marketing trends in business as well as in the fields of manufacturing, medicine, fiscal and justice services, science and easy individual who needs it. One should realize the influence of such analysis is affected everybody including persons, who know nothing about internet or computers, since any of our contacts with police, fiscal, justice or medical services, any using credit or bonus cards is captured in corresponding data bases. These personal data can be then obtained by an authorized body, but more often by browsers of various social or market networks or just by an unfair hacker. Many examples of such Big Data use one can find in A.Serbant's popular slideshare [8]. The comprehensive survey of revolutionary transformations what Big Data brought in the economy, science, and society at large is given in Viktor Mayer-Schönberger's bestseller [9].

However, as the most impressive example of Big Data more often the abovementioned large-scale experiment on the LHC at CERN for High Energy Physics is pointed out [3]. The diagram in fig.2 shows comparative ranges of 2012 data streams in social networks, business, medicine, climate and LHC [10]. As it is seen, the data products of the latter are really BIG.

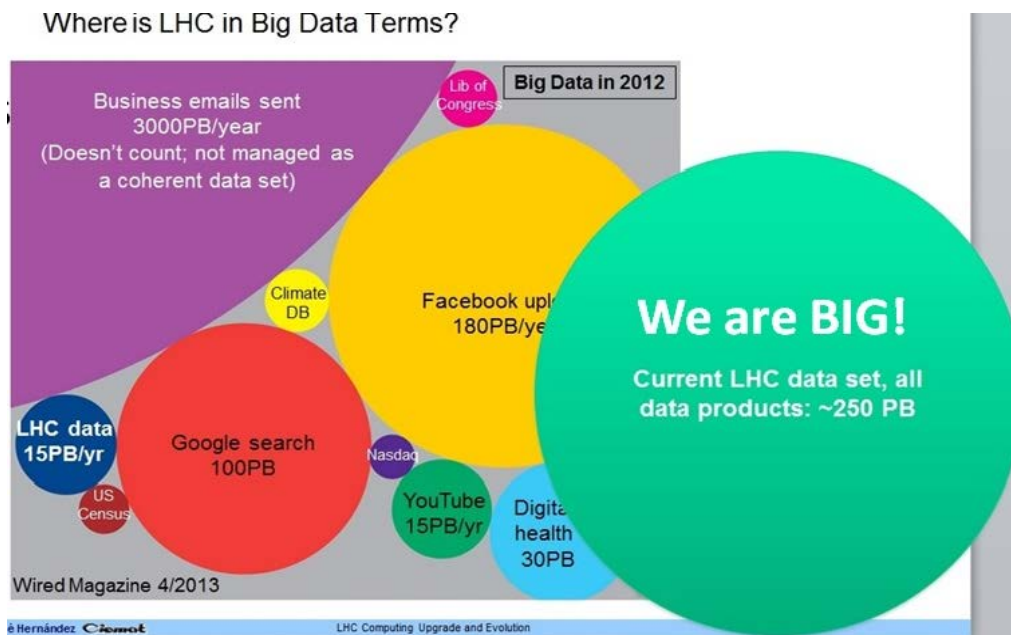


Figure 2. Comparative diagram of 2012 data streams in social networks, business, medicine, climate and LHC

As the famous Microsoft specialist in data sciences Jim Grey predicted in 2005 [11], entering to Big Data era with peta- and exa-scale datasets should inevitably require a new data-intensive science – a new “fourth paradigm” in addition to previous three classical scientific paradigms, – experimental, theoretical and computational.

CERN director general Rolf Heuer said about the key fundamentals of the impressive Higgs boson observation: “Result today only possible due to extraordinary performance of accelerators-experiments- Grid computing”. This success also corroborates that CERN entering the Big Data era could efficiently overcome problems of the fourth paradigm. It is also one more example (together with WWW invention by CERN) when the experimental HENP achievements influenced on researched on the other fields.

3 Big Data in HENP

Nevertheless the LHC demands are still growing: after completing the really successful LHC run 1 in 2012 by the discovery of Higgs boson the considerable LHC renovation is going on now to start run 2 in 2015 when the event reconstruction time will be doubled while the event rate to storage is expected to be 2.5 times faster. It is needed for potentially new physics, but faces with great challenges in LHC computing [12]:

1. large increase of CPU and WLCG resources;
2. intelligent dynamic data storage;
3. combined grid and cloud access;
4. distributed parallel computing;

Let us consider these challenges in details because they are general enough to be inherent to many other fields also entering to the Big Data era.

1. Big Data demands more computer power. Not only CPUs, but corresponding increase of disk space and mass storage robotized libraries with special tape cartridges of 25 terabytes capacity. According to [11] estimated annual resource growth for fixed cost is for CPU, 15% for disks and 15% for tapes. It includes not only CERN computing center, but also all Tier1 and Tier2 centers of the countries joined by WLCG. The important nuance is: although the multiprocessor transistor count growth is holding up in the accordance with Moore’s Law, but clock speed growth suffered a heat death, as it is shown in Fig. 2. It demands sustaining throughput growth by replacing ever faster processors with a higher number of cores, co-processors, concurrency features or using new environment with the finer grained parallelism, as GPUs.

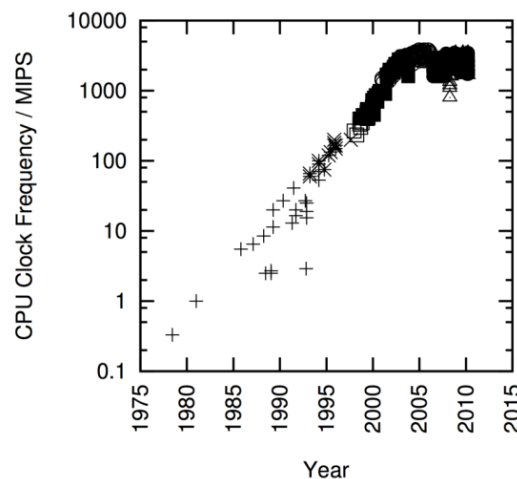


Figure 2. CPU clock frequency vs years

2. Intelligent dynamic data reduction and placement. Terabytes of data per second produced by HENP detectors require either a sophisticate multilevel triggering

procedure or parallel data processing (or both). It is needed to compress raw data in million times by abovementioned intelligent procedures of data preprocessing. Since worldwide distributed computing via WLCG is based on intensive data exchange between hundreds of tiers centers, a sophisticated system of massive robotized tape stages is provided for data archiving in these centers.



Figure 3. Robotized tape storage

One of the key problems in such a distributed data management is the balanced replication and deletion process. As example of organizing automatic replication of hot data and deletion of cold data is the ATLAS Distributed Data Management project, which is responsible for the replication, access and bookkeeping of ATLAS data across more than 120 distributed grid sites. The special data popularity service is designed to decide when the number of replicas of a sample needs to be adjusted either up or down and deleted eventually as obsolete.

The current version of Deletion Service DQ2 was developed (and maintained) by JINR LIT specialists and is used by ATLAS Distributed Computing [4]. In usual operation it deletes 2-2,5M of files per day, which correspond to 400 - 500 TB per day. During the deletion campaigns when deletion was carried out on most sites, deletion rate achieved is more than 6M of files per day, reaching up to 300k files per hour.

3. Combined grid and cloud access.

The rigid grid structures are designed for integrating hardware and software resources already existed and fixed at the system, while cloud structures are more flexible by using virtual clusters from virtual machines. As it has been proved recently in the thesis of Nikolay Kutovsky, “grid of clouds” structures allow to speed up solution time of the wide class of HENP problems and lift up the efficiency of resources usage [13]. Another example of the new technology implementing the synthesis of grid-cloud structures is the system PanDA (Production and Distributed Analysis) developed for ATLAS experiment on LHC. The bid data oriented evolution of PanDA named BigPanDA is now considered as a proper system for the Russian megaproject NICA in the Joint Institute for Nuclear research, Dubna [4, 13].

The important issue related to developing and improving process of grid-cloud systems is the optimization of this process from the cost, development time and system reliability points of view. It can be done by simulating system structure and process of its functioning. The new grid and cloud services simulation system SyMSim (Synthesis of Monitoring and Simulation) is developed in LIT JINR Dubna to facilitate designing NICA Tier 0 and CMS Tier 1 projects [14]. It is focused on improving the efficiency of the grid-cloud systems development by using work quality indicators of some real system to design and predict its evolution. For these purpose the simulation program is

combined with real monitoring system of the grid-cloud service through a special database. An example of the program usage to simulate a sufficiently general cloud structure, which can be used not only for experimental physics, is given.

4. Distributed parallel computing. During the last decade the vital need to speed up calculations rigorously demands to invent a parallelism in HEP data mining. Fortunately the common structure of HENP experimental data naturally organized as the sequence of events gives the possibility for the natural multithread parallelism by handling events simultaneously on different processors.

Nevertheless, the requirements of such experiments, as the CBM, to handle terabytes of data per second leads to the necessity of parallelism on the level of each event. It can be accomplished by applying the SIMD (Single Instruction Multiple Data) approach which allows to pack several data items into one register and to operate on all of them in parallel thus achieving more operations per cycle. Requiring fewer instructions to process a given amount of data, SIMD operations yield higher computational efficiency than scalar operations. The Intel Streaming SIMD Extension (SSE) technology is supported by all modern CPUs. However, the conversion from C++ code using scalar computer instructions to SSE vector instructions means a lot of work to rewrite loops, modify algorithms, debug and test SIMDized programs. As it was demonstrated in [16] on an example with the tracking CBM program, the time consuming gain for both multithreading and SIMD approaches can reach several orders of magnitude for an ordinary Intel Core 2 Duo processor at 2.26 GHz with the data throughput on the level $2 \cdot 10^6$ tracks/s. Such a gain expects to be much more promising in the future with the next generation of many core processors.

Parallelism is to be introduced inevitably on the basis of new technologies of computing and software.

4 Mathematical methods applied in data analysis

The main tasks of data analysis, as event reconstruction, detector alignment, physical parameters estimation and hypothesis testing, are based on the application of many sophisticated mathematical methods. Some examples from the practice of the Joint Institute for Nuclear research are considered with applying such methods, as Hough transform, Kalman filter, artificial neural networks, cellular automata and wavelet analysis for solution of several concrete experimental problems with keeping in mind new tendencies caused by the Big Data influence.

References

1. *J. Han and M. Kamber*. Data Mining: Concepts and Techniques. – Morgan Kaufmann, San Francisco, 2000.
2. Data analysis framework ROOT: URL: <http://root.cern.ch/drupal/>
3. CERN computing. URL: <http://home.web.cern.ch/about/computing>
4. *V.Korenkov*. Laboratory of Information Technologies: Status and Future. // The 6th International Conference GRID'2014 (Dubna, Russia, June30 - July5, 2014), plenary talk. URL: <http://indico-new.jinr.ru/indico/contributionDisplay.py?sessionId=4&contribId=117&confId=19>
5. *Doug Laney*. Meta Group. URL: <http://blogs.gartner.com/doug-laney/files/2012/01/ad949-3D-Data-Management-Controlling-Data-Volume-Velocity-and-Variety.pdf>
6. *Rob Livingstone*. Advisory. URL: <http://rob-livingstone.com/2013/06/big-data-or-black-hole/>
7. *Timo Elliott*. Definitions of Big Data You Should Know About. URL: <http://timoelliott.com/blog/2013/07/7-definitions-of-big-data-you-should-know-about.html>
8. *A. Serbant*. What is Big data. URL: <http://www.slideshare.net/yandex/big-data-30799013>
9. *Viktor Mayer-Schönberger, Kenneth Cukier*. Big Data: A Revolution That Transforms How we Work, Live, and Think. – Houghton Mifflin Harcourt. 2012.

10. *José M. Hernández* (CIEMAT, Madrid) On behalf of the Spanish LHC Computing community, Perspectives on LHC Computing. // Jornadas CPAN 2013, Santiago de Compostela.
11. *Jim Gray et al.* Scientific Data Management in the Coming Decade. // SIGMOD Record. V.34. №4. Dec. 2005.
12. Update of the Computing Models of the WLCG and the LHC Experiments.
URL: <http://indico.cern.ch/event/212502/material/1/1?contribId=0>
13. *Н.А. Кутровский*. Развитие методов построения грид-сред и систем облачных вычислений для задач физики высоких энергий. Диссертация, ЛИТ ОИЯИ, Дубна, 2014
14. *А. Климентов, А. Ваняшин, В. Кореньков*. За большими данными следит ПАНДА. // Суперкомпьютеры. 2013. №15. С. 56.
15. *V. Korenkov, A. Nechaevskiy, G. Ososkov, D. Pryahina, V. Trofimov, A. Uzhinskiy*. Synthesis of the simulation and monitoring processes for the data storage and big data processing development in physical experiments. // Distributed Computing and Grid-technologies in Science and Education: Book of Abstracts of the 6th International Conference (Dubna, Russia, June 30 - July 5, 2014), Dubna, JINR. 2014. p. 78.
16. *S.A. Lebedev, C. Höhne, G.A. Ososkov*. Fast parallel ring recognition algorithm in the RICH detector of the CBM experiment at FAIR. // PEPAN, Letters. 2010. V.7. №4(164). Pp. 473-482.

РЕШЕНИЕ МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ОПТИМИЗАЦИОННОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

А.С. Айриян

ayriyan@jinr.ru

Объединённый институт ядерных исследований,
Лаборатория информационных технологий

Разработан алгоритм для решения многопараметрической задачи для уравнения теплопроводности. Свободными параметрами модели являются геометрические размеры (форма расчетной области) и мощность источника. Задача имеет приложение в ускорительной технике. На основе полученных в рамках моделей результатов, исследуемые детали были изготовлены и внедрены в установку.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 14-01-31227 и гранта ОИЯИ № 14-602-01.

РАЗРАБОТКА ПАКЕТА H-UTILS ДЛЯ РАБОТЫ НА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМ КЛАСТЕРЕ С ГИБРИДНОЙ АРХИТЕКТУРОЙ

Е.И. Александров

aleksand@jinr.ru

Объединённый институт ядерных исследований,
Лаборатория информационных технологий

В докладе описывается пакет H-Utils для работы на вычислительном кластере с гибридной архитектурой. Пакет призван помочь разработчикам при написании программ и программных комплексов для решения задач в различных областях науки на высокопроизводительных вычислительных кластерах. На данный момент пакет H-Utils состоит из двух модулей:

- Модуль хранения входных параметров. Задачей этого модуля является обеспечение возможности динамического изменения входных данных параметров физических задач без изменений в программном коде.
- Модуль мониторинга и управления. Модуль обеспечивает предоставление программного интерфейса (API) для передачи команд в уже запущенную на кластере программу.

Пакет будет расширяться за счет модулей, обеспечивающих работу с WEB, и модуля, стандартизации логов.

Работа выполнена при частичной поддержке молодежного гранта ОИЯИ № 14-602-02.

ФОРМИРОВАНИЕ ТЕМАТИЧЕСКИХ КЛАСТЕРОВ ДЛЯ АГЕНТНОГО ПОИСКА НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ В ИНТЕРНЕТ (НА ПРИМЕРЕ ТЕМАТИЧЕСКОГО НАПРАВЛЕНИЯ «ФИЗИКА ПЛАЗМЫ»)

А.А. Артамонов, К.А. Соколова, Д.В. Леонов, А.И. Черкасский
aaartamonov@mephi.ru, kasokolina@mephi.ru, dvleonov@mephi.ru, aicherkasskij@mephi.ru
Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

В докладе рассматриваются вопросы формирования тематических кластеров в Мультиагентных информационно-аналитических системах по естественнонаучным и технологическим направлениям.

Под агентной технологией понимается регулярный целевой автоматический поиск тематической информации в заданном кластере сайтов сети интернет. Агентом будем называть сетевую поисковую программу, управляемую различными данными: имя владельца агента и его адрес, поисковые предписания, адреса сайтов [1].

С развитием сети Интернет существенно увеличилось количество доступных пользователю источников научно-технической информации, появились сайты университетов, научных центров, отдельных лабораторий, кафедр, неформальных рабочих групп и, наконец, сайты специалистов. Эти источники информации оказались привлекательными для специалистов, так как новостная информация на этих сайтах появляется на несколько месяцев раньше, чем в журналах, и возможен прямой диалог с авторами. Однако, увеличение тематических информационных ресурсов в Интернет сопровождается рассеиванием информации по различным сайтам. Как следствие, увеличивается время и трудоемкость поиска информации.

Агентные технологии освобождают специалистов от этих трудозатрат. Мировые кластеры источников тематической информации отображаются в соответствующих базах данных, где в качестве атрибутов, в частности, указываются адреса сайтов для настройки поисковых роботов на конкретную область поиска.

Такая агентная технология разработана кафедрой «Анализ конкурентных систем» №65 НИЯУ МИФИ. База данных зарегистрирована в Федеральной службе по интеллектуальной собственности, свидетельство о регистрации № 2014620346.

Упомянутая база данных представляет собой структурированный архив сведений о мировых научно-исследовательских и технологических организациях и их подразделениях, занимающихся исследованиями в области физики плазмы. В этой базе данных приведены основные контактные данные и список источников для мониторинга сайтов организаций с целью получения актуальной новостной информации об исследованиях.

Список литературы

1. Решение 11 комитета по стандартизации IEEE Computer Society FIPA.
URL: <http://www.computer.org/portal/web/sab/foundation-intelligent-physical-agents>

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ ВЯЗКОЙ ЖИДКОСТИ ПРИ МАЛЫХ ЧИСЛАХ МАХА НА ОСНОВЕ КВАЗИГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ

В.А. Балашов, Е.Б. Савенков

vladislav.balashov@gmail.com, e.savenkov@gmail.com

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

Введение

Квазигазодинамическая (КГД) и квазигидродинамическая (КГиД) системы уравнений являются модификациями системы уравнений Навье-Стокса, в которые включены малые физически обоснованные слагаемые диссипативного характера [1, 2, 4]. С точки зрения построения разностных аппроксимаций они играют роль регуляризаторов и позволяют использовать простые центральные разностные аппроксимации. Малость этих слагаемых гарантирует, что модифицированные модели можно использовать для анализа течений, описываемых классическими моделями гидродинамики.

КГД система была впервые получена в работах [1, 2]. КГиД система была построена в работе [4]. Хотя численному исследованию КГД подхода посвящено достаточно много работ (см. [2]), КГиД система исследована существенно меньше [3, 4]. Целью настоящей работы является в некоторой степени восполнение этого пробела.

1 Квазигидродинамическая система уравнений

КГиД система имеет следующий вид [2]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_m &= 0 \\ \frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{j}_m \otimes \vec{u}) + \operatorname{grad} p &= \rho \vec{F} + \operatorname{div} \Pi \\ \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon \right) \right] + \operatorname{div} \left[\vec{j}_m \left(\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) \right] + \operatorname{div} \vec{q} &= (\vec{j}_m \cdot \vec{F}) + \operatorname{div}(\Pi \cdot \vec{u}), \end{aligned}$$

где p – давление, ρ – плотность, $\vec{u} = (u_x, u_y, u_z)$ – вектор скорости, $\vec{F}$ – вектор массовой плотности внешних сил, ε – внутренняя энергия единицы массы, $\vec{j}_m = \rho(\vec{u} - \vec{w})$ – вектор плотности потока масс, $\Pi = \mu \left[(\operatorname{grad} \otimes \vec{u}) + (\operatorname{grad} \otimes \vec{u})^T - \frac{2}{3} I \operatorname{div} \vec{u} \right] + \rho \vec{u} \otimes \vec{w}$ – тензор вязких напряжений, $\vec{q} = -\kappa \operatorname{grad} T$ – тепловой поток, T – температура, κ – коэффициент теплопроводности, μ – коэффициент динамической вязкости.

От классической системы уравнений Навье-Стокса приведенная выше система отличается наличием в векторе плотности потока массы и тензоре вязких напряжений слагаемых с «дополнительной» скоростью

$$\vec{w} = \tau \left((\vec{u} \cdot \operatorname{grad}) \vec{u} + \frac{1}{\rho} \operatorname{grad} p - \vec{F} \right).$$

В случае течений разреженных газов эта скорость может быть физически интерпретирована как скорость перемешивания газа на пространственных масштабах порядка длины свободного пробега молекул газа [2, 4]. В этом случае величина τ интерпретируется как среднее время столкновений между молекулами. При описании

течений плотных газов и жидкостей входящие в уравнения члены пропорциональные τ следует рассматривать как физически-обоснованные регуляризаторы. В этом случае τ – малый регуляризирующий параметр, имеющий размерность времени и, вообще говоря, зависящий от шага пространственной сетки.

Приведенные выше уравнения дополняются уравнением состояния совершенного газа: $p = \rho RT$, $\varepsilon = p/\rho(\gamma-1)$, где R – газовая постоянная, γ – показатель адиабаты.

2 Результаты расчетов

Для аппроксимации системы уравнений использовались явные аппроксимации по времени и центральные разностные производные по пространству (см. [2]). Во всех случаях использовалась равномерная декартова ортогональная сетка. Используемая схема позволяла проводить расчеты при числах Куранта от 0.1 до 0.4. При этом использовалось следующее выражение для величины регуляризирующего параметра (здесь переменные обезразмерены)

$$\tau = \frac{Ma^2}{\rho Re} + \alpha \frac{h}{c},$$

где $\alpha = 0.5$, h – шаг сетки, c – скорость звука.

В представленных ниже расчетах использовалась приведенная выше постановка с учетом эффектов сжимаемости и неизотермичности. Для корректного сравнения полученных результатов с «эталонными» параметры течения задавались такими, чтобы в расчете реализовывался случай практически несжимаемого течения (числа Маха $Ma = 0.01 - 0.1$). В указанном смысле полученные результаты можно считать результатами расчета несжимаемого течения полученного с использованием метода «искусственной сжимаемости». Относительные отклонения плотности и температуры от начального значения контролировались и не превышали величину порядка единиц процентов.

Рассмотрим двумерную задачу об обтекании цилиндра квадратного сечения в ограниченном канале. На рис. 1 изображена расчетная область: D – сторона квадрата, H – высота расчетной области, V – максимальная скорость входного потока, L_y – безразмерная высота канала. Граничные условия на левой границе:

$$\frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{8\gamma Ma^2}{L_y^2 Re}, \quad \rho = 1, \quad u_x = \frac{4}{L_y^2}(L_y y - y^2), \quad u_y = 0$$

Граничные условия на правой границе: $p = 1$, $\frac{\partial u_x}{\partial x} = 0$, $\frac{\partial u_y}{\partial x} = 0$, $\frac{\partial p}{\partial x} = 0$.

На нижней, верхней границе и на обтекаемом теле стоят условия прилипания.

Коэффициент перекрытия $B = D/H = 1/8$, длина расчетной области $L = 30D$. Расчет проводился для числа Маха $Ma = 0.1$. На рис. 2 приведена полученная зависимость длины вихря за цилиндром от числа Рейнольдса. Сплошной линией изображена зависимость, полученная в работе [5].

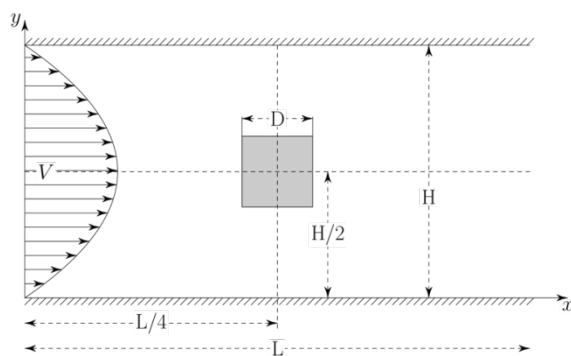


Рисунок 1.

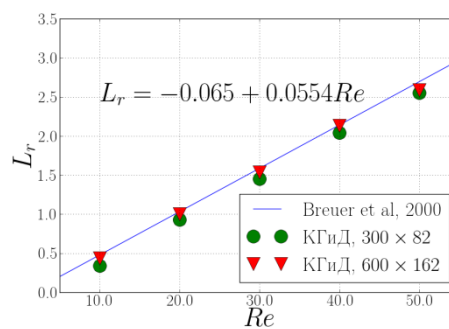


Рисунок 2.

На рис. 3 приведены значения коэффициента сопротивления c_d как функции числа Рейнольдса, полученные в расчетах и значения из работы [5].

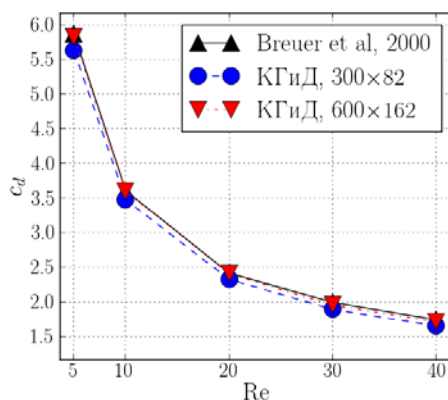


Рисунок 3.

В качестве трехмерного теста рассмотрим задачу о течении жидкости в кубической камере с подвижной верхней крышкой и длиной ребра $L=1$. На всех границах стоят условия прилипания. На рис. 4-6 приведены линии, касательные к векторным полям $(0, u_y, u_z)$, $(u_x, u_y, 0)$, $(u_x, 0, u_z)$, в плоскостях, параллельных координатным плоскостям и проходящих через центр куба $(L/2, L/2, L/2)$. Расчет проводился для числа Рейнольдса $Re = 100$ и числа Маха $Ma = 0.01$. Верхняя граница движется со скоростью $(0, V, 0)$, $V = 1$. Полученное решение хорошо совпадает с известными результатами, см., например, [6].

Заключение

В настоящей работе представлены результаты ряда численных расчетов модельных двумерных и трехмерных задач гидродинамики при малых числах Маха с использованием алгоритма, построенного на основе квазигидродинамической системы уравнений. Получено хорошее совпадение результатов расчетов с известными результатами для несжимаемых изотермических течений.

Авторы выражают свою благодарность Т.Г. Елизаровой за советы и полезные обсуждения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 14-11-00549.

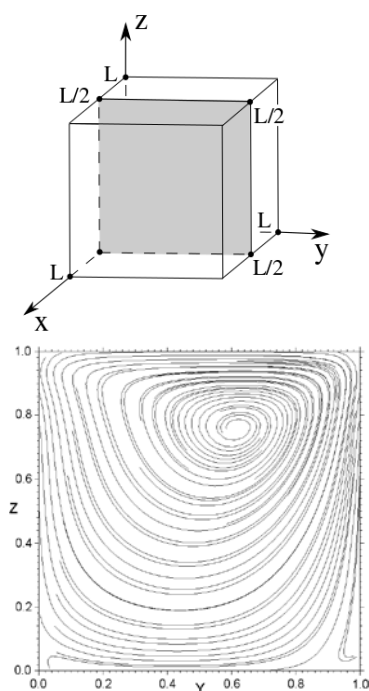


Рисунок 4. Сечение $x = 0.5$

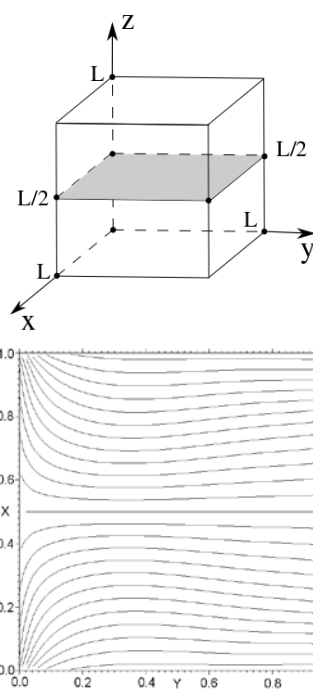


Рисунок 5. Сечение $z = 0.5$

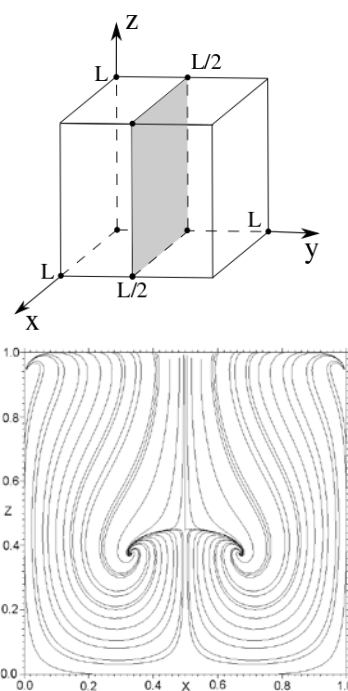


Рисунок 6. Сечение $y = 0.5$

Список литературы

1. Б.Н. Четверушкин. Кинетические схемы и квазигазодинамическая система уравнений. – М.: МАКС Пресс. 2004. 332 с.
2. Т.Г. Елизарова. Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. – М.: Научный Мир. 2007. 352 с.
3. T.G. Elizarova, O.V. Bulatov. Numerical Simulation of Gas Flows on the Basis of Quasi-Hydrodynamic Equations. // Moscow University Physics Bulletin. 2009. V.64. №6. Pp. 589-593.
4. Ю.В. Шеретов. Динамика сплошных сред при пространственно-временном осреднении. М. – Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2009. 400 с.
5. M. Breuer, J. Bernsdorf, T. Zeiser, F. Durst. Accurate computations of the laminar flow past a square cylinder based on two different methods: lattice-Boltzmann and finite-volume. // International Journal of Heat and Fluid Flow. 2000. 21. Pp. 186-196.
6. В.П. Шапеев, Е.В. Ворожцов, В.И. Исаев, С.В. Идимешев. Метод коллокаций и наименьших невязок для трехмерных уравнений Навье-Стокса. // Вычислительные методы и программирование. 2013. 14. С. 306-322.

РЕАЛИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ ГЕМ-СТАНЦИЙ ДЛЯ ЭКСПЕРИМЕНТА ВМ@N

Д.А. Баранов

dmitriybaranof@gmail.com

Объединённый институт ядерных исследований,
Лаборатория информационных технологий

Одним из основных элементов детекторной системы, используемой в эксперименте ВМ@N, является ГЕМ-трекер – детектор, регистрирующий координаты

заряженных частиц, что позволяет впоследствии получить трехмерную картину взаимодействия. Данная детекторная установка состоит из двенадцати газовых камер, последовательно расположенных вдоль оси Z, каждая из которых представляет собой отдельную GEM-станцию. Проходя через станцию, заряженная частица взаимодействует с атомами находящегося внутри газа («явление ионизации»). В результате лавинообразного процесса, образующегося при прохождении электронов ионизации через слои GEM-станций, количество электронов многократно увеличивается (коэффициент усиления до 105). Далее следует регистрация лавин микростриповым считывающим слоем.

В представленной работе выполнено моделирование физических процессов, возникающих при прохождении заряженной частицы через каждую GEM-станцию, с целью получения характеристик (коэффициент электронного усиления, средний размер кластера электронной лавины), необходимых для точной реконструкции треков в эксперименте BM@N. Приведены результаты моделирования для трехкаскадных GEM-станций с газом ArCO₂ (в соотношении 70/30%), предполагаемых для применения в этом эксперименте.

Список литературы

1. А.Ф. Бузулуцков. Физические основы работы каскадных газовых электронных умножителей.
2. R. Boucliev, M. Capeans, W. Dominik et al. The Gas Electron Multiplier (GEM).
3. Z. Marcus. Development of a Triple GEM Detector for the LHCb Experiment.

ЭКСТРАПОЛЯЦИЯ КАРТЫ МАГНИТНОГО ПОЛЯ ДИПОЛЬНОГО МАГНИТА SP41 ЭКСПЕРИМЕНТА BM@N

П.Н. Батюк, С.П. Мерц

batyuk@jinr.ru, sergey.merts@gmail.com

Объединённый институт ядерных исследований,

Лаборатория физики высоких энергий им. В.И. Векслера и А.М. Балдина

В работе представлен подход, позволяющий получить экстраполированные значения компонент $B_x(x, y, z)$, $B_y(x, y, z)$ и $B_z(x, y, z)$ карты магнитного поля за пределами магнита. В основе подхода лежит анализ одномерных и двумерных профилей карты магнитного поля, позволяющий локализовать область спада поля для его последующей аппроксимации монотонной убывающей функцией. Отмечена невозможность применения интерполяционных полиномов для решения данной задачи. Важность корректного решения задачи обеспечит ускорение процедуры глобального трекинга в эксперименте, поскольку для последнего является критичным нахождение области, где магнитное поле с высокой степенью точности равно нулю. Представленные качественные и количественные оценки экстраполяции позволяют сделать вывод о высокой эффективности предложенного подхода для решения поставленной задачи.

АНАЛИТИКО-ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА ФИЗИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРИБОРАХ

С.И. Безродных, В.И. Власов

sergeyib@pochta.ru, vlasov@ccas.ru

Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН

Полупроводниковые приборы характеризуются взаимодействием возникающих в них электрического поля и полей плотности дырок и электронов. Моделирование взаимодействия этих полей, как правило, осуществляется на основе диффузионно-дрейфового подхода с привлечением рекомбинационной функции, которая часто выбирается в форме Шокли – Рида – Холла (см., например, [1, 2] и приведенную там литературу). Такое моделирование приводит к краевым задачам для сингулярно возмущенных нелинейных эллиптических систем, которые в одномерном случае превращаются в аналогичные системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Для их решения в [1, 2] предложен эффективный аналитико-численный метод. Ниже рассмотрено обобщение этого метода на случай сингулярно возмущенной системы из M нелинейных дифференциальных уравнений на отрезке $[-1,1]$ относительно функции $\Psi(x)$ и вектор-функции $P(x) = \{P_1(x), \dots, P_{M-1}(x)\}$

$$[\varepsilon^2(x)\Psi'(x)]' + \mathcal{L}[\Psi(x), P(x)] = \text{sign } x \quad (1)$$

$$[a_m(\Psi)P_m'(x) + \Psi'(x)b_m(\Psi)P_m(x)]' = \mathcal{R}_m(x, P), \quad (2)$$

где $m = \overline{1, M-1}$, с граничными условиями

$$\Psi(\pm 1) = V^\pm, \quad P_m(\pm 1) = P_m^\pm, \quad m = \overline{1, M-1} \quad (3)$$

В уравнении (1) функция $\varepsilon(x)$ является ступенчатой, определяемой по формуле

$$\varepsilon(x) = \varepsilon_-, \quad x \in [-1, 0), \quad \varepsilon = \varepsilon_+, \quad x \in (0, 1],$$

где $\varepsilon^\pm$ – малые положительные параметры; $\mathcal{L}(\Psi, P)$ – гладкая функция от Ψ и P_m , для которой выполняются условия

$$\mathcal{L}(\Psi(\pm 1), P(\pm 1)) = \pm 1.$$

В уравнениях (2) коэффициенты a_m , b_m являются гладкими функциями Ψ , причем a_m не обращаются в нуль, а правые части $\mathcal{R}_m(x, P)$ достаточно гладко зависят от аргументов x и P_m .

Предлагаемый метод решения задачи (1)-(3), являющийся обобщением метода, предложенного в [1-4], заключается в следующем. Обозначим через $R_m(x)$ правые части уравнений (2), понимаемые как функции x ,

$$R_m(x) = \mathcal{R}_m(x, P), \quad (4)$$

и заметим, что из уравнений (2) с учетом граничных условий (3) можно выразить P_m как функции Ψ и R_m , т.е. $P_m = \mathcal{P}_m[\Psi, R_m]$, где интегральные операторы $\mathcal{P}_m$ записываются в явном виде. Подставляя эти выражения в (1) и (4) и вводя обозначения

$$R = \{R_1, \dots, R_{M-1}\}, \quad \mathbf{P}[\Psi, R] = \{\mathcal{P}_1[\Psi, R_1], \dots, \mathcal{P}_{M-1}[\Psi, R_{M-1}]\},$$

$$\mathbf{R}[\Psi, R] = \{\mathcal{R}_1(x, \mathbf{P}[\Psi, R]), \dots, \mathcal{R}_{M-1}(x, \mathbf{P}[\Psi, R])\},$$

где $P = \mathbf{P}[\Psi, R]$, приходим к следующей системе уравнений относительно новых

неизвестных Ψ и R :

$$[\varepsilon^2(x)\Psi'(x)]' + \mathcal{L}[\Psi(x), \mathbf{P}[\Psi, R]] = \text{sign } x \quad (5)$$

$$R = \mathbf{R}[\Psi, R]; \quad (6)$$

здесь (5) является интегро-дифференциальным, а (6) – системой интегральных уравнений. Система (5), (6) решается при помощи сочетания метода Ньютона и метода продолжения по параметру, причем обращение производной Фреше для уравнения (5) осуществляется на основе приближения Грина – Лиувилля (метод ВКБ), а начальное приближение для метода Ньютона находится в явном виде. Метод обладает сверхэкспоненциальной скоростью сходимости, что подтвердила его численная реализация.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 13-01-00923), Программы № 3 ОМН РАН и Программы РАН «Современные проблемы теоретической математики».

Список литературы

1. *В.И. Власов, С.И. Безродных.* Метод решения сингулярно возмущенной системы нелинейных дифференциальных уравнений. // Доклады РАН. 2004. Т.394. №6. С. 731-734.
2. *С.И. Безродных, В.И. Власов.* Краевая задача для моделирования физических полей в полупроводниковом диоде. // Ж. вычисл. мат. и матем. физ. 2004. Т.44. №12. С. 2232-2263.
3. *С.И. Безродных, В.И. Власов.* Эффективное решение сингулярно возмущенной системы нелинейных дифференциальных уравнений. // Современная математика и ее приложения. 2005. Т.36. С. 8-17.
4. *С.И. Безродных, В.И. Власов.* Эффективный метод решения сингулярно возмущенной системы нелинейных дифференциальных уравнений. // Современная математика. Фундаментальные направления. 2006. Т.15. С.45-58.

СВЕРХБЫСТРЫЙ МЕТОД С ГАРАНТИРОВАННОЙ ТОЧНОСТЬЮ ДЛЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ В ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ОБЛАСТИ

А.А. Белов¹, Н.Н. Калиткин²

belov_25.04.1991@mail.ru, kalitkin@imamod.ru

¹ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

² Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

Введение

Решение многомерных эллиптических уравнений разностными методами приводит к системам линейных алгебраических уравнений огромной размерности. На произвольных сетках получаются линейные системы достаточно общего вида. Для них работоспособны только методы сопряженных направлений, в которых число итераций зависит от границ спектра по закону $S \approx 10\sqrt{\lambda_{\max}/\lambda_{\min}} \approx 10N$, где N – среднее число узлов по каждой координате. Это приводит к неприемлемо большим S . Оценить полученную точность можно лишь косвенно по невязке.

Нужны качественно более быстрые, но при этом достаточно общие методы. Кроме того, необходимо построить алгоритм апостериорной оценки сходимости итераций. Этому посвящена данная работа. Ограничимся задачей Дирихле для эллиптического оператора без смешанных производных

$$Lu = -f(\vec{r}), \quad Lu = \sum_{\alpha} L_{\alpha} u, \quad L_{\alpha} u = \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left(k_{\alpha}(\vec{r}) \frac{\partial u}{\partial x_{\alpha}} \right). \quad (1)$$

в прямоугольной области. Коэффициенты k_{α} будем считать переменными, а сетки – прямоугольными и неравномерными. Это достаточно общая и содержательная постановка. Она приводит к разностной задаче

$$\sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha} u = -f, \quad (2)$$

где

$$(\Lambda_x u)_n = \frac{2}{h_{x,n+0.5} - h_{x,n-0.5}} \left[\frac{k_{x,n+0.5}}{h_{x,n+0.5}} (u_{n+1} - u_n) - \frac{k_{x,n-0.5}}{h_{x,n-0.5}} (u_n - u_{n-1}) \right], \quad (3)$$

$$h_{x,n+0.5} = x_{n+1} - x_n.$$

В (3) оставлен только индекс по координате x . Выражения для Λ_y и Λ_z пишутся аналогично.

1 Эволюционная факторизация

Будем решать задачу (1) счетом на установление. Это значит, что нужно найти стационарный предел решения соответствующего параболического уравнения $u_t = Lu + f$. Для экономичного решения последнего нужно применять тот или иной способ факторизации. Наиболее удобной оказалась эволюционная факторизация:

$$\prod_{\alpha} \left(E - \frac{\tau}{2} \Lambda_{\alpha} \right) \frac{\hat{u} - u}{\tau} = \sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha} u + f. \quad (4)$$

Эта схема имеет аппроксимацию $O(\tau^2 + \sum h^2)$, является безусловно устойчивой и условно асимптотически устойчивой. Она единообразно записывается для произвольного числа измерений, а в двумерном случае совпадает со схемой Писмена-Рэкфорда. В отличие от последней в эволюционно факторизованной схеме естественно формулируются разностные граничные условия.

2 Логарифмические наборы шагов

Для явных схем известен оптимальный набор шагов по времени, называемый чебышевским. Однако явные схемы настолько невыгоднее неявных, что даже с оптимальным набором шагов они неприемлемо трудоемки.

Для неявных схем нет строгих результатов о том, как следует строить оптимальный набор шагов по времени. В работе предложено эвристическое обобщение известного строгого результата о постоянном оптимальном шаге $\tau_0 \approx \sqrt{\tau_{\max} \tau_{\min}}$. Оно заключается в том, чтобы строить набор в логарифмической шкале

$$\ln \tau_s = \frac{1}{2} \ln(\tau_{\max} \tau_{\min}) + \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\tau_{\max}}{\tau_{\min}} \right) f(s), \quad 0 \leq s \leq S, \quad (5)$$

где $f(s)$ – производящая функция. Результат, близкий к оптимальному, дает $f(s)$ вида

$$f_{\text{ЛТ}}(s) = \frac{\pi}{\pi + 2} f_p(s) + \frac{\pi}{\pi + 2} f_q(s), \quad (6)$$

где

$$f_p(s) = \frac{2s}{S} - 1, \quad (7)$$

$$f_q(s) = -\cos\left(\frac{\pi s}{S}\right). \quad (8)$$

Назовем этот набор *линейно-тригонометрическим (ЛТ)*. Наборы с производящими функциями $f_p(s)$ и $f_q(s)$ будем называть равномерным и чебышевским соответственно.

3 Априорные оценки сходимости

Для равномерного и линейно-тригонометрического набора построены априорные оценки сходимости. Для последнего такая оценка имеет вид

$$S = \frac{4}{\pi^2 + 2\pi} \ln \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} \ln \frac{1}{\varepsilon} \approx 13 \ln N, \quad (9)$$

где S – число итераций, требуемое для достижения точности ε . Эта оценка позволяет эффективно решать задачи с огромными $N \sim 1000$. Оценка строилась как мажорантная, но вычисления показывают, что она близка к неулучшаемой.

4 Аналог метода Рундсона

Поскольку сходимость экспоненциальная, можно применить метод, аналогичный методу Рундсона для разностных сеток. Он сводится к специальной перестановке шагов логарифмического набора. Такая перестановка возможна в силу безусловной устойчивости схемы (4). Это дает апостериорные асимптотически точные оценки сходимости итерационного процесса. Пусть $\{\tau_q\}$ – последовательность сгущающихся вдвое сеток, $\{U_q\}$ – соответствующая последовательность решений. Из экспоненциального характера сходимости следуют интерполяционная и экстраполяционная оценки норм погрешности:

$$\|U_q - u\| \approx \|U_{q+1} - U_q\|, \quad (10)$$

$$\|U_{q+1} - u\| \approx \|U_{q+1} - U_q\|^3 / \|U_q - U_{q-1}\|^2. \quad (11)$$

Этими эвристическими закономерностями можно пользоваться, пока расчеты не выйдут на фон ошибок округления.

5 Методические расчеты проведены для одномерного, двумерного и трехмерного случаев. Они показывают, что предлагаемый метод позволяет достигать предельно возможной точности – фоновой $10^{-11} \div 10^{-13}$ – за небольшое число итераций $S \approx 40 \div 80$. Это на 100-1000 раз быстрее, чем для метода сопряженных градиентов.

Типичная картина сходимости логарифмического набора представлена на рис. 1. Он иллюстрирует 1) преимущества ЛТ-набора по сравнению с равномерным и чебышевским и 2) эффективность априорной и апостериорной оценок.

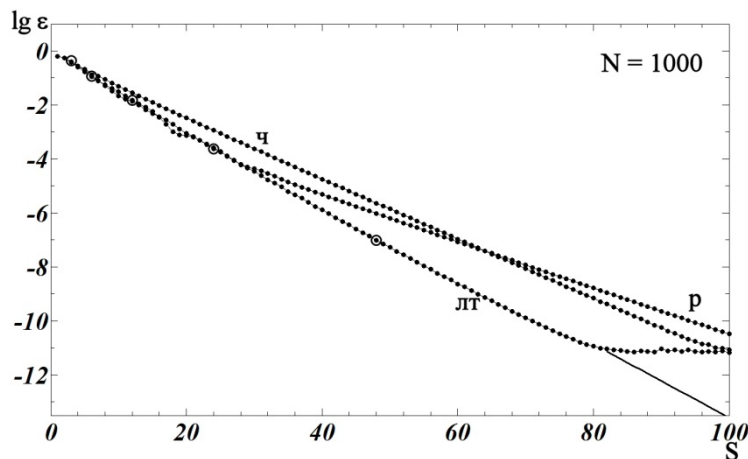


Рисунок 1. Погрешность в одномерном случае; $N = 1000$, $k = 1$, $h = (N + 1)^{-1}$; обозначения наборов: ЛТ – линейно-тригонометрический (6), Р – равномерный (7), Ч – чебышевский (8); прямая – априорная оценка (9), • – численные расчеты, о – апостериорная оценка (10).

В двумерном и трехмерном случаях имеют место аналогичные результаты.

6 Прикладные расчеты

На основе предлагаемого метода написан пакет программ для решения двумерных и трехмерных эллиптических уравнений, включающий апостериорную оценку сходимости итераций и оценку точности разностного решения по классическому методу Рундсона. Работа этого пакета иллюстрируется на примере сингулярно возмущенного уравнения Гельмгольца $\mu^2 \Delta u - K^2 u = -f$ с малым параметром μ . Этот расчет показывает важность правильного выбора сеток по пространству. В частности, при грамотно подобранной сетке можно решать сложные задачи с пограничным слоем, визуальнo контролируя порядок сходимости по методу Рундсона.

Список литературы

1. Н.Н. Калиткин. Улучшенная факторизация параболических схем. // Доклады Академии Наук. 2005. **402**. № 4. С. 467-471.
2. А.А. Болтнев, Н.Н. Калиткин, О.А. Качер. Логарифмически сходящийся счет на установление. // Доклады Академии Наук. 2005. **404**. № 2. С. 177-180.
3. Н.Н. Калиткин, А.А. Белов. Аналог метода Рундсона для логарифмически сходящегося счета на установление. // Доклады Академии Наук. 2013. **452**. № 3. С. 261-265.
4. А.А. Белов, Н.Н. Калиткин. Эволюционная факторизация и сверхбыстрый счет на установление. Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. Препринт № 69 за 2013г. URL: http://www.keldysh.ru/papers/2013/prep2013_69.pdf
5. А.А. Белов, Н.Н. Калиткин. Эволюционная факторизация и сверхбыстрый счет на установление. // Математическое моделирование. В печати.
6. Н.Н. Калиткин, П.В. Корякин. Численные методы (в двух книгах). Книга 2. Методы математической физики. – М.: Академия, 2013.

МОДИФИЦИРОВАННЫЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ РЕЛЕВАНТНОГО ОБРАТНОГО ВЫВОДА

С.Ю. Болотова

bolotova.svetlana@gmail.com

Воронежский государственный университет

Введение

Аппарат продукционно-логических уравнений, описанный в [1], предоставляет новые возможности для оптимизации обратного вывода в интеллектуальных системах продукционного типа. Стратегия релевантного вывода (LP-вывода, [1]) направлена на снижение числа обращений к внешним источникам информации. Метод состоит из двух стадий: 1) решение уравнения – вычисление множества начальных прообразов и 2) нахождение среди них истинного прообраза. Выполнение указанных стадий может быть организовано в виде конвейера – независимо и параллельно. Работа на каждой из стадий также может быть распределена между параллельными вычислителями.

Упрощенные описания нерекурсивного алгоритма обычного обратного вывода и релевантного вывода приведены в [1]. Там же описан алгоритм кластерно-релевантного LP-вывода, который предполагает последовательное построение кластеров начальных прообразов (подмножеств ограниченной мощности) с их динамическим релевантным исследованием. В статье [2] показаны возможности распараллеливания этих алгоритмов. Настоящая работа посвящена параллельным алгоритмам релевантного вывода, основанным на усовершенствованной схеме «конвейера» параллельных вычислений, использование которой позволяет повысить степень параллелизма.

Параллельная реализация LP-вывода

При больших объемах баз знаний и их достаточно «глубокой» структуре целесообразно использовать имеющиеся в наличии возможности повышения эффективности логического вывода. В связи с этим метод релевантного LP-вывода модифицирован с использованием параллельных вычислений. Параллельный релевантный LP-вывод предполагает одновременное построение набора начальных прообразов с их дальнейшим исследованием в разных потоках. Здесь и далее под «потоками» подразумеваются threads – потоки выполнения [3].

Как было описано в [1], для решения уравнения исходное каноническое отношение R представляется в виде слоев. Работа с различными слоями может быть организована независимо и параллельно. Ниже приводятся основные положения такой организации.

Первичный поток приложения создает новые потоки (их число ограничено параметром), передавая им пакеты данных. Созданный вторичный поток вычисляет решение продукционно-логического уравнения в отдельном слое. Как только накапливается достаточное число прообразов (кластер или все прообразы), модуль LP-вывода начинает (релевантно) исследовать их на предмет истинности, обращаясь при необходимости за фактами к внешнему источнику. Если при обработке очередного кластера прообразов истинный прообраз выявить не удастся, то процесс вычисления прообразов продолжается. При этом запоминается информация об установленных на предыдущем шаге ложных фактах. На ее основе перед очередным процессом вычисления прообразов сужается множество актуальных правил. Это обстоятельство также существенно ускоряет работу. По окончании работы вторичные потоки ликвидируются.

В случае, когда рабочих потоков оказывается слишком много, в соответствии с законом Амдала, эффективность параллельных вычислений снижается [3]. Интенсивное создание и завершение потоков с малым временем работы, а также множественные переключения их контекстов, увеличивают объем расходуемых ресурсов. Поэтому при реализации параллельного LP-вывода используется заранее создаваемый пул потоков [3], максимальный размер которого ограничен параметром. Его значение должно быть большим, чем число процессоров, чтобы добиться приемлемой степени одновременности.

Главный поток выбирает поток из пула и передает ему необходимые данные для обработки. Когда количество активных потоков достигает максимума, запрос помещается в очередь. В качестве механизма синхронизации потоков могут быть использованы критические секции, которые иницируются в процессе активизации.

С целью повышения производительности процессы вычисления прообразов и их дальнейшего исследования выполняются асинхронно. Пока решение не найдено, полученный на очередном шаге кластер прообразов помещается в динамическую структуру данных Q , организованную в виде очереди. Главный поток извлекает кластер прообразов из очереди Q и, при наличии свободного вторичного потока выполнения, инициирует параллельное исследование элементов кластера на релевантность.

Найденные на очередном этапе наиболее релевантные элементы помещаются в очередь с приоритетом P , реализованную на основе двоичной кучи [3]. Максимальный размер такой очереди задается специальным параметром *maxRelevanceQueueSize*. Подобная организация данных позволяет отсортировать исследованные элементы в соответствии с их релевантностью. При добавлении новых элементов можно менять порядок их следования и за константное время получать доступ к элементу с максимальным показателем. Процесс определения релевантных объектов в построенных кластерах продолжается до тех пор, пока решение не будет найдено.

Общая структура алгоритма параллельного релевантного вывода может быть представлена в виде следующей схемы (рис. 1).

При имеющемся (обычно большом) количестве прообразов процесс выявления релевантных объектов весьма ресурсозатратен, поэтому он также распараллеливается. Для очередного кластера прообразов в отдельном потоке (количество потоков аналогично ограничено параметром) запускается процесс их релевантного исследования на предмет истинности. Количество активных в данный момент потоков хранится в переменной *usedThreadsNumber*. Здесь возможны различные способы подсчета релевантности, в частности, описанные в [4]. Для синхронизации потоков используется механизм критических секций.

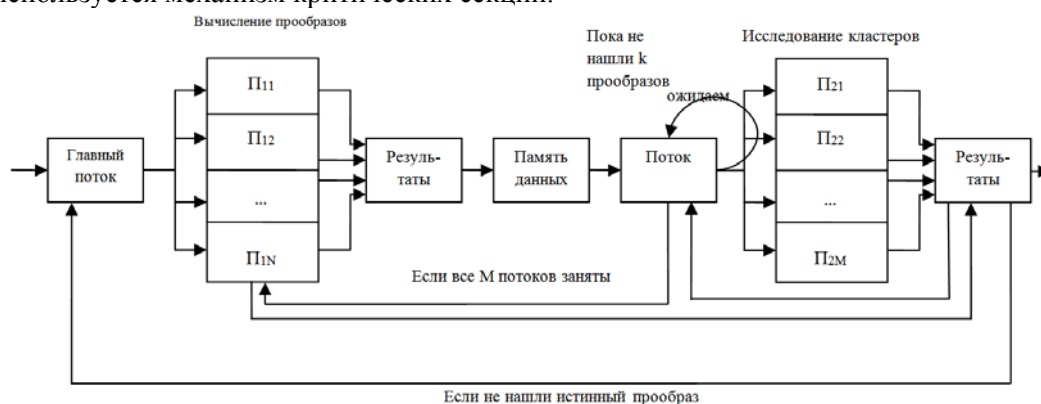


Рисунок 1. Структура алгоритма параллельного релевантного вывода.

Использование метода релевантного вывода приводит к уменьшению количества

обращений за информацией к внешнему источнику, хотя при этом в основной памяти может производиться значительно больше вычислений по сравнению с обычным обратным выводом. Формальное обоснование данного утверждения представляет собой задачу, существенно зависящую от исходных данных. Однако эффективность LP-вывода подтверждена результатами экспериментов и их статистической обработкой: число внешних запросов в среднем снижается на 15-20%. Эксперименты показывают также эффективность *параллельного* LP-вывода для обработки баз знаний больших размеров.

Заключение

В докладе представлена усовершенствованная схема «конвейера» параллельных вычислений при LP-выводе. На ее основе базируются параллельные алгоритмы релевантного и кластерно-релевантного LP-вывода, а также параллельные алгоритмы вычисления истинных прообразов в LP-структурах, повышающие быстродействие предлагаемого метода.

Список литературы

1. С.Ю. Болотова, С.Д. Махортов. Алгоритмы релевантного обратного вывода, основанные на решении продукционно-логических уравнений. // Искусственный интеллект и принятие решений. 2011. № 2. С. 40-50.
2. С.Ю. Болотова. Реализация многопоточности в релевантном LP-выводе. // Программная инженерия. 2014. № 1. С. 12-18.
3. Дж. Рихтер. Windows для профессионалов: создание эффективных Win32-приложений с учетом специфики 64-разрядной версии Windows: пер. с англ. – 4-е изд. – СПб.: Питер; М.: «Русская Редакция». 2001. 732с.
4. С.Д. Махортов. Логические уравнения на решетках. // Вестник ВГУ. Серия «Физика, математика». – Воронеж. – 2004. № 2. С. 170-178.

СЛОЖНОСТЬ НАХОЖДЕНИЯ КОРНЕЙ БУЛЕВЫХ МАТРИЧНЫХ ПОЛИНОМОВ

Ф.Б. Буртыка

bbfilipp@ya.ru

Южный федеральный университет

Введение

За последнее время в связи с приложениями в математической физике активно изучались матричные полиномы над полем комплексных [1] и вещественных чисел [2], однако довольно мало известно о матричных полиномах над конечными кольцами и полями, такими как кольца вычетов и поля Галуа. В таком контексте задача связана с дискретными интегрируемыми системами [3]. В связи с распространённостью вычислительных процессов с двумя состояниями и необходимостью их моделирования, особую актуальность приобретают булевы матричные полиномы. Задача нахождения корней булевых матричных полиномов возникает в связи с дискретными динамическими системами [4, 5] и теорией кодирования [6], а также в связи с тем, что такого рода полиномами можно описывать любые нелинейные преобразования булевых векторов. В общем виде произвольный матричный полином от одной переменной общего вида – это некоторое алгебраическое выражение:

$$F(\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_m, X_1, \dots, X_d),$$

где $\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_m$ – некоторые фиксированные матрицы, $X_1, \dots, X_d$ – неизвестные. В силу

некоммутативности умножения матриц, матричный полином в общем виде может выглядеть довольно громоздко. Однако, в данной работе будут рассматриваться полиномы вида:

$$P(X) = P_n \cdot X^n + P_{n-1} \cdot X^{n-1} + \dots + P_1 \cdot X + P_0,$$

где P_i – матрицы, а также уравнения вида $P(X) = 0$, связанные естественным образом с этими полиномами.

1 Количество корней матричного полинома

В данном разделе устанавливается количество корней булева матричного полинома. Количество корней матричного полинома над полем комплексных чисел изучалось в [7]. Для начала отметим, что в отличие от скалярного полинома, матричный полином может иметь корней больше чем его степень. Уже простейшие полиномы дают примеры таких случаев. В самом деле, рассмотрим, например матричный полином X^2 , его корни, это решения уравнения

$$X^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Его решениями являются матрицы $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$, для которых $a + d = 0$ и $ad + bc = 0$.

Таких матриц четыре: нулевая матрица, матрица из единиц и матрицы, у которых на месте a и d нули, а из элементов b и c один нуль, а другой – единица.

Также, стоит отметить, что матричный полином может и вовсе не иметь корней. Так например полином

$$X^2 - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

не имеет корней, поскольку соответствующее ему матричное уравнение

$$X^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

не имеет решений: на роль X подходит только матрица, имеющая лишь нулевые собственные значения (если квадрат матрицы имеет только нулевые собственные значения, то и она сама имеет только нулевые собственные значения), т.е. идемпотентная матрица, но квадрат любой идемпотентной 2×2 матрицы равен нулевой матрице.

В общем случае, булев матричный полином может иметь не более $C_{d \cdot N}^N$ различных корней (матриц), где d – степень матричного полинома, а N – размерность матриц.

2 Нахождение корней матричного полинома

Для нахождения корней булева матричного полинома можно составить систему булевых алгебраических уравнений. Решение этой системы эквивалентно нахождению корней матричного полинома.

Лемма. Нахождение корней булева матричного полинома эквивалентно решению системы N^2 алгебраических булевых уравнений от N^2 переменных.

Доказательство

Рассмотрим матрицу $X = \{x_{i,j}\}_{i,j=1}^N$, возведение её в степень дает матрицы

$$\begin{aligned}
\mathbf{X}^2 &= \left\{ \sum_{k_1=1}^N (x_{i,k_1} \cdot x_{k_1,j}) \right\}_{i,j=1}^N, \\
\mathbf{X}^3 &= \left\{ \sum_{k_1=1}^N x_{i,k_1} \cdot \sum_{k_2=1}^N (x_{k_1,k_2} \cdot x_{k_2,j}) \right\}_{i,j=1}^N \\
&\dots \\
\mathbf{X}^n &= \left\{ \sum_{k_1=1}^N x_{i,k_1} \cdot \sum_{k_2=1}^N x_{k_1,k_2} \cdot \dots \cdot \sum_{k_{n-1}=1}^N (x_{k_{n-2},k_{n-1}} \cdot x_{k_{n-1},j}) \right\}_{i,j=1}^N
\end{aligned}$$

где $x_{i,j} \in \mathbb{Z}_2$ — элементы матрицы. Обозначим как $\mathbf{F}_t = \{(f_t)_{i,j}\}_{i,j=1}^N$ матрицы-коэффициенты матричного полинома. Для каждого элемента матрицы $x_{i,j}$ получаем отдельное уравнение. Тогда для всей матрицы получаем систему уравнений вида:

$$\begin{cases} \sum_{n=0}^{\deg(\mathbf{F}(\mathbf{X}))} \sum_{k=0}^N (f_n)_{0,k} \cdot (\mathbf{X}^n)_{k,0} = 0 \\ \dots \\ \sum_{n=0}^{\deg(\mathbf{F}(\mathbf{X}))} \sum_{k=0}^N (f_n)_{N,k} \cdot (\mathbf{X}^n)_{k,N} = 0 \end{cases}$$

или, в более развернутом виде:

$$\begin{cases} \sum_{n=0}^{\deg(\mathbf{F}(\mathbf{X}))} \sum_{k=0}^N (f_n)_{0,k} \cdot \sum_{k_1=1}^N x_{k,k_1} \cdot \sum_{k_2=1}^N x_{k_1,k_2} \cdot \dots \cdot \sum_{k_{n-1}=1}^N (x_{k_{n-2},k_{n-1}} \cdot x_{k_{n-1},0}) = 0 \\ \dots \\ \sum_{n=0}^{\deg(\mathbf{F}(\mathbf{X}))} \sum_{k=0}^N (f_n)_{0,k} \cdot \sum_{k_1=1}^N x_{k,k_1} \cdot \sum_{k_2=1}^N x_{k_1,k_2} \cdot \dots \cdot \sum_{k_{n-1}=1}^N (x_{k_{n-2},k_{n-1}} \cdot x_{k_{n-1},N}) = 0 \\ \dots \\ \sum_{n=0}^{\deg(\mathbf{F}(\mathbf{X}))} \sum_{k=0}^N (f_n)_{N,k} \cdot \sum_{k_1=1}^N x_{k,k_1} \cdot \sum_{k_2=1}^N x_{k_1,k_2} \cdot \dots \cdot \sum_{k_{n-1}=1}^N (x_{k_{n-2},k_{n-1}} \cdot x_{k_{n-1},N}) = 0 \end{cases}$$

— система из N^2 уравнений от N^2 неизвестных. ■

Перемножив все булевы алгебраические уравнения системы, можно получить одно булево уравнение от N^2 неизвестных. Тогда вопрос, имеет ли данное уравнение решения, сводится к экземпляру задачи ВЫПОЛНИМОСТЬ.

Пример. Рассмотрим задачу нахождения корней квадратного матричного полинома с 2×2 матрицами:

$$\begin{aligned}
&\begin{pmatrix} (f_2)_{0,0} & (f_2)_{0,1} \\ (f_2)_{1,0} & (f_2)_{1,1} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{X}^2 + \begin{pmatrix} (f_1)_{0,0} & (f_1)_{0,1} \\ (f_1)_{1,0} & (f_1)_{1,1} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{X} + \begin{pmatrix} (f_0)_{0,0} & (f_0)_{0,1} \\ (f_0)_{1,0} & (f_0)_{1,1} \end{pmatrix} = \\
&= \begin{pmatrix} (f_2)_{0,0} & (f_2)_{0,1} \\ (f_2)_{1,0} & (f_2)_{1,1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_{0,0} \cdot x_{0,0} + x_{0,1} \cdot x_{1,0} & x_{0,0} \cdot x_{0,1} + x_{0,1} \cdot x_{1,1} \\ x_{1,0} \cdot x_{0,0} + x_{1,1} \cdot x_{1,0} & x_{1,0} \cdot x_{0,1} + x_{1,1} \cdot x_{1,1} \end{pmatrix} + \\
&+ \begin{pmatrix} (f_1)_{0,0} & (f_1)_{0,1} \\ (f_1)_{1,0} & (f_1)_{1,1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_{0,0} & x_{0,1} \\ x_{1,0} & x_{1,1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} (f_0)_{0,0} & (f_0)_{0,1} \\ (f_0)_{1,0} & (f_0)_{1,1} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Соответствующая система булевых алгебраических уравнений, будет, очевидно, такова:

$$\begin{cases} (f_2)_{0,0}(x_{0,0} \cdot x_{0,0} + x_{0,1} \cdot x_{1,0}) + (f_2)_{0,1}(x_{1,0} \cdot x_{0,0} + x_{1,1} \cdot x_{1,0}) + (f_1)_{0,0} \cdot x_{0,0} + (f_1)_{0,1} \cdot x_{1,0} + (f_0)_{0,0} = 0 \\ (f_2)_{1,0}(x_{0,0} \cdot x_{0,0} + x_{0,1} \cdot x_{1,0}) + (f_2)_{1,1}(x_{1,0} \cdot x_{0,0} + x_{1,1} \cdot x_{1,0}) + (f_1)_{1,0} \cdot x_{0,0} + (f_1)_{1,1} \cdot x_{1,0} + (f_0)_{1,0} = 0 \\ (f_2)_{0,0}(x_{0,0} \cdot x_{0,1} + x_{0,1} \cdot x_{1,1}) + (f_2)_{0,1}(x_{1,0} \cdot x_{0,1} + x_{1,1} \cdot x_{1,1}) + (f_1)_{0,0} \cdot x_{0,1} + (f_1)_{0,1} \cdot x_{1,1} + (f_0)_{0,1} = 0 \\ (f_2)_{1,0}(x_{0,0} \cdot x_{0,1} + x_{0,1} \cdot x_{1,1}) + (f_2)_{1,1}(x_{1,0} \cdot x_{0,1} + x_{1,1} \cdot x_{1,1}) + (f_1)_{1,0} \cdot x_{0,1} + (f_1)_{1,1} \cdot x_{1,1} + (f_0)_{1,1} = 0 \end{cases}$$

Для её решения можно воспользоваться методами нахождения базиса Грёбнера идеала, порождаемого данными полиномами. Однако, например, в [8] утверждается, что в случае, когда в системе булевых алгебраических уравнений количество переменных совпадает с количеством уравнений, такую систему сложно решать.

3 Результаты экспериментов

Для приблизительной оценки вычислительной сложности решения системы уравнений, возникающих при поиске корней булевых матричных полиномов, было проведено несколько экспериментов. Для экспериментов был использован компьютер с процессором Quad Core Celeron 1,7 ГГц и 4 ГБ оперативной памяти. Была использована система компьютерной алгебры SINGULAR [9]. В таблице ниже приведены результаты экспериментов

Таблица 1. Результаты эксперимента

	N=4	N=5	N=6
Deg=3	4 мин	>48 ч	>8 дней
Deg=4	8 ч		
Deg=5	33 ч		

Заключение

Была поставлена задача определения нахождения корней булева матричного полинома. Был предложен универсальный способ – сведение к системе булевых алгебраических уравнений и к задаче «ВЫПОЛНИМОСТЬ». Было исследовано, какое может быть количество корней у булева матричного полинома. Для оценки практической сложности нахождения корней булева матричного полинома были проведены эксперименты, свидетельствующие о том, что в общем случае вычислительная сложность задачи сравнима с задачей факторизации или дискретного логарифмирования в конечных полях.

Список литературы

1. Gohberg, P. Lancaster, L. Rodman. Matrix polynomials. – SIAM, 2009. Т.58.
2. J.E. Dennis, Jr, J.F. Traub, R.P. Weber. The algebraic theory of matrix polynomials. // SIAM Journal on Numerical Analysis. 1976. Т.13. №. 6. Pp. 831-845.
3. J. Moser, A.P. Veselov. Discrete versions of some classical integrable systems and factorization of matrix polynomials. // Communications in Mathematical Physics. 1991. Т.139. №. 2. Pp. 217-243.
4. С.Л. Блюмин. Математические проблемы искусственного интеллекта: булева «линейная» алгебра. // Системы управления и информационные технологии. 2005. №. 3. С. 20.
5. А.В. Ушаков, Е.С. Яцкая. Анализ структуры пространства состояний линейных двоичных динамических систем на основе их рекуррентного модельного представления. // Научно-технический вестник Санкт-Петербургского государственного университета информационных технологий, механики и оптики. 2011. №. 4.
6. I. Cascudo et al. On powers of codes. // arXiv preprint arXiv:1407.0848. – 2014.
7. С.И. Гельфанд. О числе решений квадратного уравнения. Издание осуществлено при поддержке РФФИ (издательский проект № 01-01-14022). – 2004. – С. 124.

8. *N. Courtois et al.* Efficient algorithms for solving overdefined systems of multivariate polynomial equations. // *Advances in Cryptology – EUROCRYPT 2000.* – Springer Berlin Heidelberg, 2000. – Pp. 392-407.
9. *G.M. Greuel, G. Pfister, H. Schönemann.* SINGULAR – A computer algebra system for polynomial computations. // *Symbolic computation and automated reasoning.* – AK Peters, Ltd., 2001. – Pp. 227-233.

ЧИСЛЕННО-АНАЛИТИЧЕСКИЙ МЕТОД ГЕНЕРАЦИИ ОРТОГОНАЛЬНЫХ СЕТОК В ПРЯМОУГОЛЬНЫХ МНОГОУГОЛЬНИКАХ

О.А. Григорьев

guelpho@mail.ru

Институт вычислительной математики РАН

Введение

Численные методы конформных отображений применяются при решении многих задач аэродинамики дозвуковых скоростей, теорий фильтрации, гидродинамики невязкой жидкости. Однако во многих случаях эти методы сталкиваются с так называемой проблемой сгущения точек, или краудинга. В докладе будет изложено обобщение численно-аналитического подхода к вычислению конформных отображений прямоугольных многоугольников, сформулированного в [1] и [2]. Этот подход позволяет избежать вычислительной неустойчивости, связанной с краудингом, в том числе в случаях, когда это не удастся сделать с помощью широко используемых пакетов (в докладе приведено сравнение с пакетом SCPACK).

1 Идея метода и численный алгоритм

Идея метода состоит в интерпретации интеграла Кристоффеля-Шварца, реализующего конформное отображение верхней полуплоскости H на прямоугольный многоугольник D , как абелева интеграла на римановой поверхности, ассоциированной с многоугольником. Неизвестными параметрами задачи при этом становятся элементы матрицы периодов поверхности – оказывается, что они удовлетворяют системе нелинейных уравнений, которая может быть решена численно.

Схема вычисления конформного отображения может быть пояснена диаграммой

$$H \xleftarrow{x(u)} u(H) \subset Jac(M) \xrightarrow{2(C,u)} P$$

Здесь $Jac(M)$ – многообразие Якоби кривой, ассоциированной с многоугольником, C – набор констант, линейно зависящих от длин сторон многоугольника. Уравнения, задающие locus кривой в $Jac(M)$, и выражение для отображения $x(u)$ записываются через эффективно вычисляемые θ -функции Римана. Для «обращения» каждой из стрелок необходимо решить нелинейную систему.

Поскольку такой подход позволяет вычислять как прямое, так и обратное отображения, с его помощью можно вычислять отображения прямоугольных многоугольников D_1 и D_2 друг на друга как композицию отображений D_1 на H и H на D_2 .

Генерация ортогональной сетки в прямоугольном многоугольнике с четырьмя отмеченными вершинами $D(z_1, z_2, z_3, z_4)$ осуществляется в 2 этапа.

1 этап – вычисление конформного модуля $s(D(z_1, z_2, z_3, z_4))$, т.е. такого числа τ ,

что вершины прямоугольника $R_\tau = [-1;1] \times [-\tau;\tau]$ при конформном отображении на D переходят в соответствующие отмеченные вершины D .

2 этап – прямоугольная сетка, построенная в квадрате $[-1;1] \times [-1;1]$, сначала отображается сжатием в R_τ , а затем – вышеупомянутым конформным отображением в D .

2 Результаты численных экспериментов

а. Вычисление конформных модулей

В том случае, если отмеченные вершины расположены как показано на рис.1, описанное отображение R_τ на D можно по риманову принципу симметрии продолжить до конформного отображения $R_{2\tau}$ на D' . Было предложено протестировать методы вычисления конформного модуля, сравнив отношение конформных модулей $c_1 = c(D, u_1, u_2, u_3, u_4)$ с $c_2 = c(D, u_1, u_2, u_5, u_6)$ многоугольников геометрии, представленной на рис.1, изменяя их полуширину (на рис. $|z_4 - z_1|$). Высота ($|z_2 - z_1|$) и глубина разреза ε оставались постоянными и равными 1 и 0,1 соответственно.

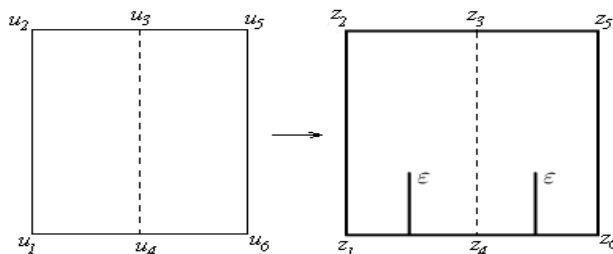


Рисунок 1. Конформное отображение R_τ (часть прямоугольника слева от пунктирной линии) на D (часть правого многоугольника слева от пунктирной линии) может быть продолжено до отображения R_τ на D'

$ z_4 - z_1 $	$c_2/c_1 - 2$ (SCPACK)	$c_2/c_1 - 2$ (числ.-ан. метод)
0,4	$5,06 \times 10^{-10}$	$1,52 \times 10^{-10}$
0,35	$-0,729 \times 10^{-8}$	$2,34 \times 10^{-9}$
0,3	0,139070	7×10^{-9}
0,25	0,147395	$1,22 \times 10^{-8}$
0,2	0,158038	$5,81 \times 10^{-8}$
0,15	0,171375	$2,67 \times 10^{-6}$

Результаты теста говорят в пользу численно-аналитического метода.

б. Вычисление основного течения

В технологию [3] для вычисления пуазейлевского течения в периодическом канале с пластинчатым оребрением методом Галёркина-коллокаций был включен численно-аналитический метод генерации сетки в периоде канала, геометрия которого совпадает с D на рис.1.

Одним из преимуществ численно-аналитического метода является возможность аналитического вычисления производных конформного отображения. Сравнение результатов расчетов пуазейлевского течения в канале с периодом вида D с использованием производных, вычисленных аналитически и методом коллокаций, служат косвенным подтверждением точности метода.

Результаты расчета течения предоставлены Ключневым Н.В.

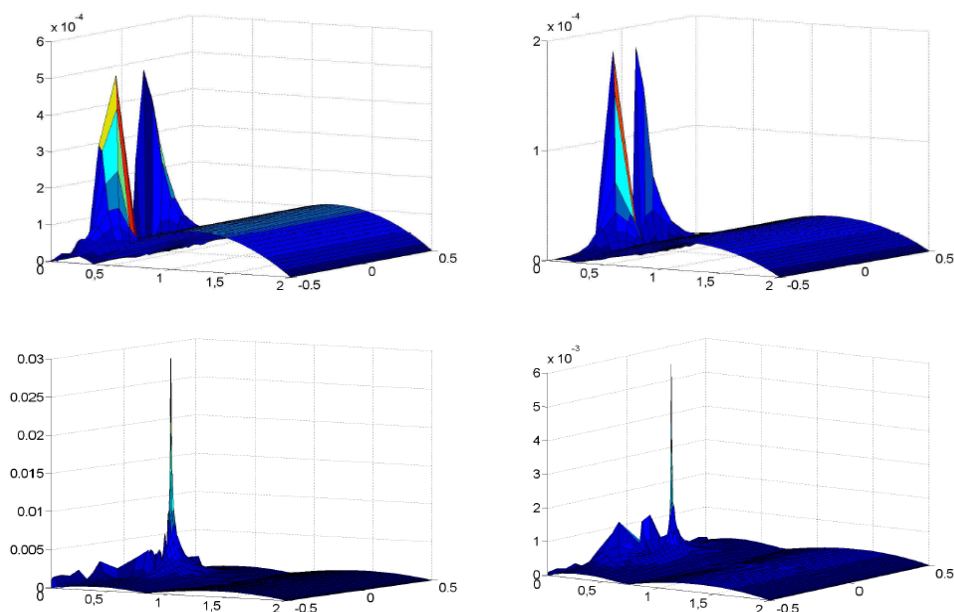


Рисунок 2. Сравнение результатов расчёта основного течения на образцах прямоугольной сетки 35×40 и 105×40 (слева), и 105×40 и 315×40 (справа). Сверху показаны результаты при вычислении производных отображения численно-аналитическим методом, снизу методом коллокаций.

Заключение

Обобщение численно-аналитического метода конформного отображения [1] и [2] прямоугольных многоугольников позволяет провести простой численный эксперимент, свидетельствующий о его преимуществе над широко используемым методом, реализованным в пакете SCPACK.

Также метод был успешно включен в технологию [3] для исследования влияния гребёчатого оребрения на устойчивость течения жидкости в каналах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, номера проектов 13-01-00350 и 13-01-00115.

Список литературы

1. *А.Б. Богатырев.* Конформные отображения прямоугольных семиугольников. // Матем. сб. 2012. 203(12). С. 35-56.
2. *О.А. Григорьев.* Численно-аналитический метод конформного отображения многоугольников с шестью прямыми углами. // ЖВМ и МФ. 2013. 53(10). С. 27-36.
3. *А.В. Бойко, Ю.М. Нечепуренко.* Технология численного анализа влияния оребрения на временную устойчивость плоских течений. // ЖВМ и МФ. 2010. 50(6). С. 1109-1125.

СРАВНЕНИЕ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЛАВНО НЕРЕГУЛЯРНЫХ ОПТИЧЕСКИХ ВОЛНОВОДОВ

Г.Д. Дашицыренов

genin_d@mail.ru

Российский университет дружбы народов

Решается задача синтеза поверхности тонкоплёночной волноводной линзы Люнеберга. Используются метод волноводов сравнения и метод адиабатических мод нулевого порядка.

БЫСТРЫЕ АЛГОРИТМЫ РЕГИСТРАЦИИ $J/\Psi \rightarrow e^+e^-$ В ЭКСПЕРИМЕНТЕ СВМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

О.Ю. Дереновская

odenisova@jinr.ru

Объединённый институт ядерных исследований,
Лаборатория информационных технологий

В работе представлены результаты по оценке временных затрат алгоритмов, используемых для регистрации $J/\Psi \rightarrow e^+e^-$ в эксперименте СВМ, в том числе с применением векторизации программного кода посредством SIMD-инструкций и распараллеливания задач между ядрами процессора.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ СОБСТВЕННЫХ МОД ЗАКРЫТОГО ВОЛНОВОДА НЕПОЛНЫМ МЕТОДОМ ГАЛЕРКИНА

Д.В. Диваков

dmitriy.divakov@gmail.com

Российский университет дружбы народов

Введение

В работе рассмотрена задача численного моделирования волнового скалярного поля в закрытом двумерном локально-неоднородном волноводе (см. рис.1).

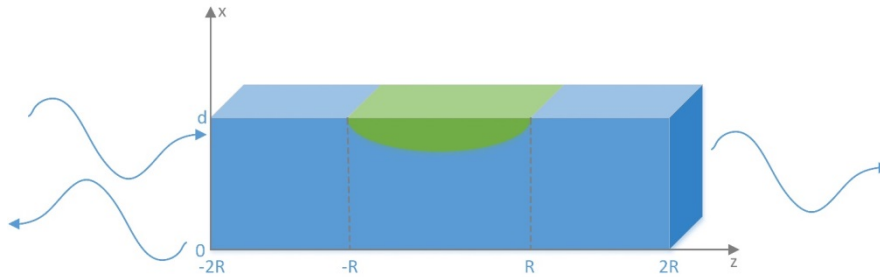


Рисунок 1. Двумерный локально-нерегулярный волновод

Постановка задачи

В регулярных областях волновода ($z \leq -R$ и $z \geq R$) поле удовлетворяет уравнению Гельмгольца с постоянными коэффициентами [1]:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + k^2 \right) u = 0 \quad (1)$$

и соответствующим граничным условиям при $x = 0$ и $x = d$ – условиям первого рода:

$$u|_{x=0} = u|_{x=d} = 0 \quad (2)$$

Задача (1)-(2) допускает разделение переменных, приводящее к задаче:

$$\begin{cases} \varphi'' + \lambda \varphi = 0 \\ \varphi|_{x=0} = \varphi|_{x=d} = 0 \end{cases} \quad (3)$$

решением которой является полная система ортогональных собственных функций $\{\varphi_n\}_{n=1}^{\infty}$ и соответствующих собственных значений $\{\lambda_n\}_{n=1}^{\infty}$ [1].

Используя метод разделения переменных представляем решение уравнения Гельмгольца (1) с условиями (2) в виде ряда по системе собственных функций $\{\varphi_n\}_{n=1}^{\infty}$:

$$u(x, z) = \sum_{n=1}^{\infty} u_n(z) \varphi_n(x) \quad (4)$$

коэффициенты разложения которого $u_n(z)$, $n=1, 2, 3, \dots$ удовлетворяют уравнениям:

$$u_n'' + (k^2 - \lambda_n) u_n = 0 \quad (5)$$

Обозначим теперь через $u_1(x, z)$ поле в однородном участке $z \leq -R$, а через $u_2(x, z)$ – поле в однородном участке $z \geq R$. Учитывая отсутствие волн, приходящих из бесконечности для $z = -R$, кроме падающей моды (с номером n') для $u_1(x, z)$ справедливо представление:

$$u_1(x, z) = \sum_{n=1}^{\infty} (\delta_{n,n'} A_n e^{i\gamma_n z} + R_n e^{-i\gamma_n z}) \varphi_n(x). \quad (6)$$

С учетом наличия только уходящих в бесконечность мод для $z \geq R$, для $u_2(x, z)$ справедливо:

$$u_2(x, z) = \sum_{n=1}^{\infty} T_n e^{i\gamma_n z} \varphi_n(x) \quad (7)$$

Поле в нерегулярном участке $(-R \leq z \leq R)$ удовлетворяет двумерному уравнению Гельмгольца с переменным коэффициентом:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + k^2(x, z) \right) u = 0 \quad (8)$$

На границах $z = -R$ и $z = R$ решение удовлетворяет условиям $u|_{z=-R} = u_1|_{z=-R}$ и $u|_{z=R} = u_2|_{z=R}$. Используя выражения (5), (6), их можно записать в виде парциальных условий [1, 2]:

$$(u_n' + i\gamma_n u_n)|_{z=-R} = (2i\gamma_{n'} A_n \delta_{n,n'} e^{i\gamma_{n'} z})|_{z=-R} \quad (9)$$

$$(u_n' - i\gamma_n u_n)|_{z=R} = 0 \quad (10)$$

Будем искать приближенное решение задачи (8), (2), (9) и (10) согласно неполному методу Галеркина в виде:

$$u^N(x, z) = \sum_{n=1}^N u_n(z) \varphi_n(x) \quad (11)$$

Функции $u_n(z)$ определяются из проекционных соотношений неполного метода Галеркина:

$$\int_0^d \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + k^2(x, z) \right) u^N \varphi_m(x) dx = 0, \quad m = \overline{1, N} \quad (12)$$

Подставляя вид приближенного решения (11) в систему (12), получим систему ОДУ:

$$u_m'' - \lambda_m u_m + \sum_{n=1}^N q_{mn}(z) u_n = 0, \quad m = \overline{1, N} \quad (13)$$

где $q_{mn}(z) = \frac{1}{\|\varphi_m\|} \int_0^d k^2(x, z) \varphi_n(x) \varphi_m(x) dx$. Уравнения (13) запишем в виде системы:

$$\vec{u}'' + [\mathbf{Q}(z) - \mathbf{\Lambda}] \vec{u} = \vec{0} \quad (14)$$

где $\mathbf{\Lambda} = \text{diag}\{\lambda_m\}_{m=1}^N$, $\mathbf{Q}(z) = [q_{mn}]_{m,n=1}^N$. К (14) добавляются условия (9)-(10) в виде:

$$(\vec{u}' + i\mathbf{\Gamma}\vec{u})|_{z=-R} = \vec{b} \quad (15)$$

$$(\vec{u}' - i\mathbf{\Gamma}\vec{u})|_{z=R} = \vec{0} \quad (16)$$

где $\mathbf{\Gamma} = \text{diag}\{\gamma_m\}_{m=1}^N$, $\vec{b} = 2i\gamma_{n'} A_{n'} e^{-i\gamma_{n'} R} \vec{e}_{n'}$ и $\vec{e}_{n'}$ – вектор, у которого компонента с номером n' равна единице, а остальные компоненты нулевые.

Постановка разностной задачи

Рассмотрим краевую задачу для системы дифференциальных уравнений 2-го порядка с переменными действительными коэффициентами (14)-(16). Эту задачу можно решать несколькими методами [1-3]. Аппроксимируем дифференциальные операторы в (14)-(16) их разностными аналогами на равномерной сетке с шагом $h = 2R/M$ и общим количеством узлов $M+1$, обозначив $\vec{u}(z_j) = \vec{u}_j$ [4]:

$$\begin{cases} \vec{u}''|_{z=z_j} \approx \frac{1}{h^2} (\vec{u}_{j+1} - 2\vec{u}_j + \vec{u}_{j-1}) \\ (\vec{u}' + i\mathbf{\Gamma}\vec{u})|_{z=-R} \approx \frac{1}{h} \mathbf{I}\vec{u}_1 + \left(i\mathbf{\Gamma} - \frac{1}{h}\mathbf{I}\right) \vec{u}_0 \\ (\vec{u}' - i\mathbf{\Gamma}\vec{u})|_{z=R} \approx -\left(i\mathbf{\Gamma} - \frac{1}{h}\mathbf{I}\right) \vec{u}_M - \frac{1}{h} \mathbf{I}\vec{u}_{M-1} \end{cases} \quad (17)$$

Используя разностные аппроксимации (17), запишем разностную задачу, аппроксимирующую исходную задачу (14)-(16), в следующем виде:

$$\begin{cases} \vec{u}_{j+1} - \mathbf{B}_j \vec{u}_j + \vec{u}_{j-1} = \vec{0}, \quad j = \overline{1, M-1} \\ \vec{u}_1 - \mathbf{B}_0 \vec{u}_0 = h\vec{b} \\ -\mathbf{B}_M \vec{u}_M + \vec{u}_{M-1} = \vec{0} \end{cases} \quad (18)$$

где $\mathbf{B}_j = 2\mathbf{I} - h^2(\mathbf{Q}_j - \mathbf{\Lambda})$ – действительная эрмитова матрица, $\mathbf{Q}_j = \mathbf{Q}(z_j)$; $\mathbf{B}_0 = \mathbf{B}_M = \mathbf{I} - ih\mathbf{\Gamma}$ – диагональные комплексные матрицы.

Задача (18) – система линейных алгебраических уравнений с блочно-трехдиагональной матрицей – может решаться методом LU либо блочного LU-разложения, методом Гаусса и методом матричной прогонки [3].

Автором было показано, что для блочно-трехдиагональной матрицы системы линейных алгебраических уравнений (18) критерий блочного диагонального преобладания не выполняется [5]. Это обстоятельство сужает круг методов решения системы уравнений (18) следующим образом: в методах, работающих с отдельными блоками матрицы, погрешность решения нарастает в процессе счета. Поэтому про устойчивость полученного решения сказать ничего нельзя, особенно в случаях большой размерности матрицы системы.

В качестве метода решения был выбран метод LU-разложения, применимость

которого была показана на практике.

Расчет производился для нерегулярного участка закрытого волновода толщиной 500 нм из материала с показателем преломления $n_w = 1,510$ и нерегулярностью в форме синуса (см. рис. 1) с показателем преломления $n_l = 1,565$. Протяженность нерегулярности составляет 1200 нм, максимальная высота нерегулярности 100 нм.

Строгое доказательство сходимости разностной схемы не проводилось, поэтому проводился вычислительный эксперимент по сравнению близости численных решений при сгущении сетки. В случае $h \ll d$ (h – шаг сетки, d – период решения) относительная погрешность решений небольшая и полученное численное решение качественно согласовано с точным решением для регулярного волновода (см. рис. 2).

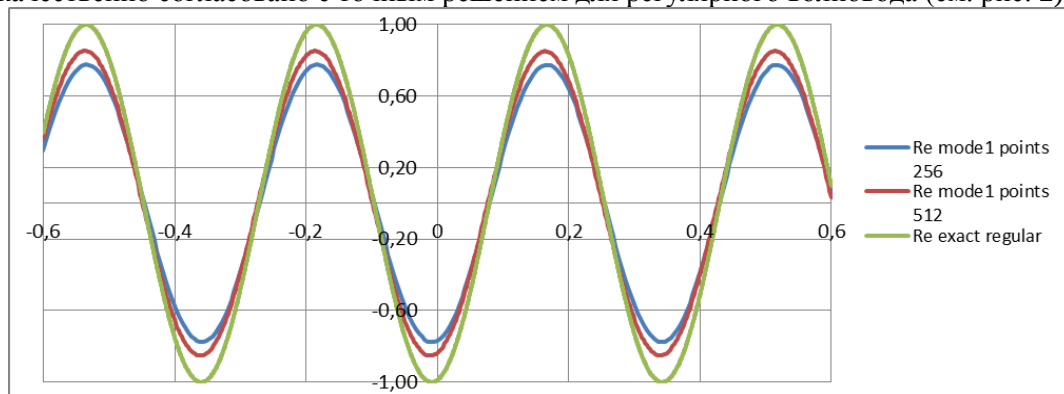


Рисунок 2. Численные решения для сеток из 256 и 512 узлов и точное решение в регулярном волноводе

Системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) для различных сеток решались методом LU-разложения, точность решения для всех сеток сохранялась близкой к компьютерной точности (см. рис. 3), что показывает практическую применимость LU-разложения к решению систем с блочно-трехдиагональными матрицами.

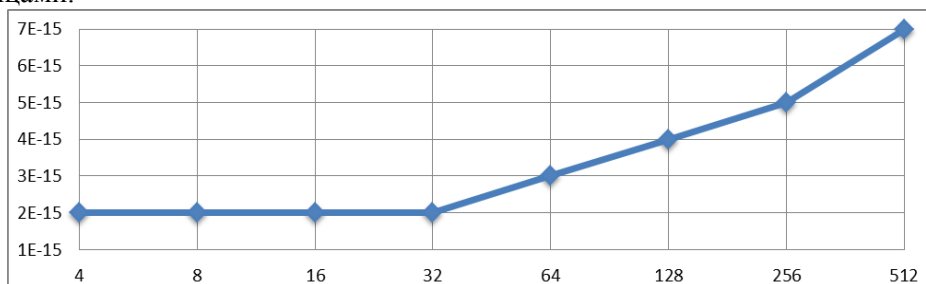


Рисунок 3. Зависимость погрешности решения СЛАУ от числа узлов сетки

Заключение

В работе рассмотрен алгоритм решения волноводной задачи неполным методом Галеркина. Особое внимание уделено аспектам численной реализации метода, а именно разностной аппроксимации задачи и выбору метода решения полученной системы линейных алгебраических уравнений. Экспериментально выявлено минимальное количество узлов сетки, обеспечивающее адекватность решения. В рамках исследования создано программное обеспечение, реализующее описанный метод.

Автор благодарен Малых М.Д. и Севастьянову Л.А. за полезные обсуждения.

Список литературы

1. А.Г. Свеишников, И.Е. Могилевский. Математические задачи теории дифракции. Учебное пособие. – М.: Физический факультет МГУ. 2010. 197 с.
2. А.Н. Боголюбов, А.Л. Делицин, А.В. Лавренова. Численное моделирование дифракции в волноводе методом конечных элементов. // Журнал радиоэлектроники (электронный журнал).
3. А.А. Самарский, А.В. Гулин. Численные методы: Учебное пособие для вузов. – М.: Наука. 1989. 432 с.
4. А.А. Самарский. Введение в теорию разностных схем. – М.: Наука, 1971. 552 с.
5. Д.В. Диваков. Неполный метод Галеркина в задаче моделирования локально-нерегулярных оптических волноводов. // ИТТММ: материалы конференции. – Москва: РУДН. 2014. С. 225-227

КОМПЬЮТЕРНАЯ ПРОВЕРКА ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ НЕЗАВИСИМОСТИ ПОЛИНОМИАЛЬНЫХ ИНВАРИАНТОВ СИСТЕМЫ ДВУХ КУБИТОВ

И. Ломидзе¹, С.А. Евлахов²

lomitsu@gmail.com, evlakhov@jinr.ru

¹ Грузинский Государственный Университет

² Объединённый институт ядерных исследований,
Лаборатория информационных технологий

Введение

Так называемые перепутанные состояния (entangled states) – важнейший ресурс квантовых систем, лежащий в основе как непосредственных приложений квантовой механики (квантовая криптография), так и новых перспективных направлений исследований (квантового компьютеринга).

Содержание работы

Аналогом классического бита, в квантовой механике служит кубит. В отличие от бита, кубит может находиться не только в состояниях 0 или 1, но и в суперпозициях этих состояний. Простейшей квантовой системой, в которой возникает перепутанность, является система двух кубитов. Математически она может быть описана некоторой матрицей ρ , называемой матрицей плотности системы, размерности 4×4 со следующими свойствами:

1. Эрмитовость.
2. Положительная определённость
3. Единичность следа ($\text{tr}(\rho) = 1$)

Эволюция системы описывается унитарным оператором, действующим на систему присоединённо. Среди всех унитарных преобразований выделяются так называемые *локальные унитарные преобразования* (local unitary transformation, LUT), т.е. преобразования из подгруппы $SU(2) \otimes SU(2)$, примечательные тем, что такие преобразования не меняют нелокальные свойства системы [1]. Таким образом, пространство матриц плотности системы двух кубит распадается на орбиты относительно действия локальной унитарной группы, которые могут быть охарактеризованы в терминах полиномиальных инвариантов группы $SU(2) \otimes SU(2)$.

Явное построение базиса кольца инвариантов было проведено в работе [2]. В

настоящей работе предложен альтернативный подход к построению функционально независимых инвариантов для локальных унитарных преобразований системы двух кубитов. Этот подход связан простыми преобразованиями с методами, которые использовались в предыдущих работах.

Заключение

Предлагаемый метод имеет алгоритмическую природу и вследствие этого представляется перспективным с точки зрения обобщений на большие размерности. Указанный метод связан с весьма громоздкими вычислениями, но допускает применение систем компьютерной алгебры.

Список литературы

1. *I.Bengtsson, K.Zyczkowski*. Geometry of Quantum States: An Introduction to Quantum Entanglement. – Cambridge University Press. 2006.
2. *J.King, T.Welsh*. Qubits and Invariant theory. // J.Phys: Conf. Ser. 2006. 30. 1-8.
3. *V.P.Gerdt, A.Khvedelidze, Yu.Palii*. Constraints on $SU(2) \otimes SU(2)$ Invariant Polynomials for a Pair of Entangled Qubits. // Ядерная Физика. 2011. Т.74. №6. С.919-925.

ОСОБЕННОСТИ ДИНАМИЧЕСКОЙ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ГИДРОМЕХАНИЧЕСКОГО ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Т.Р. Ежакова

t.r.ezhakova@gmail.com

Санкт-Петербургский государственный университет

Прямые вычислительные эксперименты для множества прикладных задач механики основываются на самых разнообразных методах численного представления элементарных трехмерных объектов для заполнения пространства подвижной сплошной средой. Нередко разнообразие методов решения прикладных задач определяется их особенностями и доступностью отлаженных алгоритмов и вычислительных ресурсов.

Традиционные математические модели гидромеханики основаны на системах дифференциальных и интегральных уравнений математической физики, которые изначально ориентированы на аналитические исследования некоторых свойств жидкости и выявление простейших процессов в сплошной среде. В прикладных науках, востребованных в реальной промышленности, перспективным и актуальным направлением разработок в области механики сплошных сред стали прямые вычислительные эксперименты, в проектировании и построении которых, изначально оптимизируется достижение практического результата в ограничениях доступной архитектуры ЭВМ. Эффективная реализация исследовательских вычислительных экспериментов в гидромеханике нередко усложняется необходимостью использования нерегуляризованных сеточных узлов и ячеек с крупными частицами жидкости, формализуемых однозначными функциональными связями числовых объектов с алгоритмическими операциями объектно-ориентированных языков программирования.

В настоящей работе систематизируются некоторые методы построения числовых объектов и операций для Лагранже-Эйлера подхода в гидромеханике, в которых исходной постановкой физической задачи допускается разделение этапов

решения по процессам с независимыми физическими полями и массивами свободных частиц. Такое разделение физических полей по сути означает возможность использования явных численных схем с распараллеливанием вычислительных операций до уровня отдельно взятых частиц-ячеек, и в том числе с одновременным исполнением расчетных этапов с синхронизацией или дублированием расчетных массивов.

Реализация новых вычислительных экспериментов основана на активном использовании алгоритмических правил специальной тензорной арифметики, объединяемых в функциональные комплексы трехмерной тензорной математики для прямого численного моделирования в гидромеханике. Визуализация динамики физических полей и частиц жидкости выполняется с использованием аналитической геометрии из пакета «однородных координат» графической системы OpenGL, в которой задействованы тензорные операции для трехмерного представления обзорных сцен с произвольным количеством элементарных графических объектов – крупных частиц. Ориентация на OpenGL отводит сложные процессы визуализации на автономную графическую станцию.

Алгоритмы на основе тензорной математики являются наиболее эффективным инструментарием для проектирования главных вычислительных схем. Ее числовые объекты легко трансформируются в однородные координаты для визуализации крупных частиц жидкости и всех вычислительных процессов с помощью стандартных графических средств, типа OpenGL, в том числе с применением возможностей контроля состояния и автоматической адаптации численных схем на основе методов линейной алгебры и аналитической геометрии, образующих объекты и операции «однородных координат», органично охватываемых алгоритмическими построениями тензорной математики, основанной на физических моделях и математических операциях тензорного исчисления и анализа.

Список литературы

1. *О.М. Белоцерковский, Ю.М. Давыдов.* Метод крупных частиц в газовой динамике. – М.: Наука. 1982. 391 с.
2. *В.Н. Храмушин.* Трехмерная тензорная математика вычислительных экспериментов в гидромеханике. – Владивосток: ДВО РАН, 2005. 212 с.
3. *F.R.A. Hopgood.* Introduction to the Graphical Kernel System (GKS). – London.: Academic Press, 1983. 200 p.
4. *S. Laflin.* The Graphical Kernel System. [Электронный ресурс] // Computer Graphics II. School of Computer Science, University of Birmingham.
URL: <http://www.cs.bham.ac.uk/~slb/courses/Graphics/CourseSEM307.html>

ИЗУЧЕНИЕ СВЯЗАННОСТИ ПАРАМЕТРОВ СРЕДЫ С ПОГЛОЩЕНИЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ SVD-АНАЛИЗА ОПЕРАТОРА ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ СЕЙСМИКИ

Е.С. Ефимова

EfimovaES@ipgg.sbras.ru

Институт нефтегазовой геологии и геофизики СО РАН

Введение

Численными моделями сред с поглощением описываются геологические структуры, при этом поглощающие свойства меняются в зависимости от состава флюида, насыщенности, проницаемости и пористости среды [1]. Одновременное

определение параметров среды улучшит характеризацию резервуаров и обнаружение углеводородов. При решении численной задачи может оказаться, что часть параметров среды является связанной. Параметры считаются *связанными*, если истинная неоднородность только по одному из параметров восстанавливается при решении задачи как возмущение по другим параметрам. Наличие связанности параметров будет означать недостоверность решения.

Решению данной задачи посвящен ряд работ. В частности в работе [2] задача решается для случая сред с небольшим отклонением скоростей от константы. Неоднозначность, проявляющаяся при одновременном определении скоростей и поглощений в вязкоупругих средах без дополнительных условий была обнаружена в работе [3].

В работе рассматривается численное решение обратной задачи геофизики по определению характеристик вязкоупругих сред с использованием сейсмических данных, зарегистрированных на поверхности Земли.

1 Численное моделирование вертикально-неоднородной вязкоупругой среды

Уравнением состояния в идеально упругих средах определяется связь между напряжениями и деформациями в один и тот же момент времени, а в вязкоупругих средах напряжения зависят от прошлых состояний деформаций и выражается с использованием обобщенного закона Гука [4]. Среда с поглощением может быть представлена:

$$\begin{cases} \rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = \text{div} \sigma + \vec{f} \\ \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = \frac{1}{2} (\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^*) \\ \sigma_{ij}(x, t) = \int_{-\infty}^t G_{ijkl}(x, t-\tau) \frac{\partial \varepsilon_{kl}(x, \tau)}{\partial \tau} d\tau. \end{cases}$$

Физический параметр, характеризующий поглощающие свойства среды – добротность. *Добротность* Q – число длин волн, на которое распространяется сигнал до того, как его амплитуда уменьшится в e^π раз.

В модели, описывающей реальные геологические среды, добротность должна быть константой в зависимости от частоты на заданном частотном диапазоне [6]. Для выполнения этого условия при переходе к дифференциальной форме будем использовать обобщенную стандартную модель твердого тела (Generalized Standard Linear Solid – GSLS) [5].

Далее с помощью τ -метода [8], можно перейти к использованию параметров поглощения τ^P , τ^S (соответствующие P-, S-волнам). Указанный переход позволяет упростить вычисления, уменьшить затраты памяти и получить более точные результаты при меньших компьютерных затратах. Значение добротности можно определить единственным образом по заданным параметрам поглощения.

В общем случае рассматривается обратная задача об определении следующих параметров среды: $\delta\lambda$, $\delta\mu$, $\delta\tau^P$, $\delta\tau^S$ (плотность, параметры Ламе, параметры поглощения) по данным, записанным в приемниках $u(x, z, x_s, \omega)|_{z=0} = u^{obs}$. Далее рассматривается только задача определения: $\delta\lambda$, $\delta\tau^P$.

Исходная нелинейная система представляется в линеаризованном виде (параметры среды представляются в виде суммы постоянных составляющих $\vec{m}_0$ и малых возмущений $\delta\vec{m}$: $\vec{m} = \vec{m}_0 + \delta\vec{m}$, а полное волновое поле $\vec{u} = \vec{u}_0 + \delta\vec{u}$, где $\vec{u}_0$ –

волна, распространяющаяся в однородной среде, а $\delta \vec{u}$ – компонента, порожденная малыми возмущениями):

$$\begin{cases} \omega^2 \rho_0 \delta u_x + (\lambda_0 + 2\mu_0) \partial_x^2 \delta u_x + (\lambda_0 + \mu_0) \partial_{xz}^2 \delta u_z + \mu_0 \partial_z^2 \delta u_x = f_1(x, z, \omega, u^0, \delta \lambda, \delta \tau^P) \\ \omega^2 \rho_0 \delta u_z + (\lambda_0 + 2\mu_0) \partial_z^2 \delta u_z + (\lambda_0 + \mu_0) \partial_{xz}^2 \delta u_x + \mu_0 \partial_x^2 \delta u_z = f_2(x, z, \omega, u^0, \delta \lambda, \delta \tau^P) \\ \omega^2 \rho_0 u_x^0 + (\lambda_0 + 2\mu_0) \partial_x^2 u_x^0 + (\lambda_0 + \mu_0) \partial_{xz}^2 u_z^0 + \mu_0 \partial_z^2 u_x^0 = F_1(\omega) \partial_x \delta(\bar{x} - \bar{x}_0) \\ \omega^2 \rho_0 u_z^0 + (\lambda_0 + 2\mu_0) \partial_z^2 u_z^0 + (\lambda_0 + \mu_0) \partial_{xz}^2 u_x^0 + \mu_0 \partial_x^2 u_z^0 = F_2(\omega) \partial_z \delta(\bar{x} - \bar{x}_0) \end{cases}$$

Для перехода к рассмотрению модели среды, зависящей только от вертикальной переменной проводится преобразование Фурье по горизонтальной переменной. При этом линеаризованная обратная задача для вязкоупругой среды, сводится к решению линейного интегрального уравнения.

2 Численные эксперименты

Связанность параметров означает, что при решении обратной задачи истинная неоднородность в среде по некоторому параметру может быть ошибочно определена как неоднородность другого параметра [9]. Такое решение получится не верным, поэтому до разработки и реализации алгоритма обращения необходимо определить несвязанный набор параметров. При изучении связанности и возможности определения параметров использовался метод, основанный на сингулярном разложении компактного оператора задачи [10].

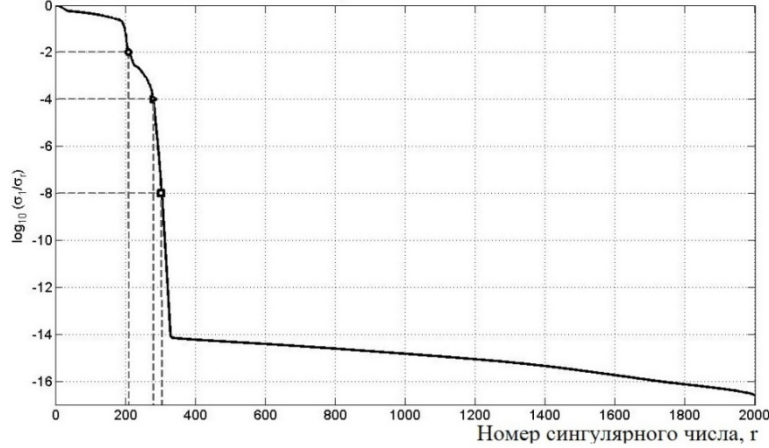


Рисунок 1. Сингулярные числа в логарифмической шкале (круг соответствует числу обусловленности 10^2 и 210 сингулярному числу, треугольник – 10^4 и 280, квадрат – 10^8 и 304).

Стремление к нулю сингулярных чисел σ_i при малых числах обусловленности (σ_1 / σ_n) (рис. 1) отражает компактность оператора, поэтому предлагается использовать ме усечение сингулярного разложения [9]. Будем рассматривать *r-решения* – проекции искомого решения на линейную комбинацию старших правых сингулярных векторов. Число r привлекаемых сингулярных векторов контролирует обусловленность задачи и позволяет построить решение с приемлемой точностью, зная относительную ошибку во входных данных (далее рассматриваются случаи числа обусловленности 10^2 , 10^4 , 10^8 рис. 1).

Далее предлагается разделить действительную и мнимую части рассматриваемого оператора и искомым параметров. Далее мы перейдем к параметрам:

$$x_1 = \text{Re}(\delta \lambda + (\lambda_0 + 2\mu_0) S \delta \tau^P) = \delta \lambda + (\lambda_0 + 2\mu_0) \sum_{l=1}^L \frac{(\omega \tau_{\sigma_l}^P)^2}{1 + (\omega \tau_{\sigma_l}^P)^2} \delta \tau^P,$$

$$x_2 = \text{Im}(\delta \lambda + (\lambda_0 + 2\mu_0) S \delta \tau^P) / [(\lambda_0 + 2\mu_0) \text{Im}(S)] = \delta \tau^P.$$

В качестве целевой области была рассмотрена однородная среда с двумя подобластями, в каждой из которых был возмущен только один параметр, такой выбор обеспечивает наглядное определения связанности параметров. На рис. 2 изображены проекции на 210, 280, 304 старших сингулярных векторов. На рис. 2 видно, что возмущения x_1 отражаются на x_2 и наоборот, но с увеличением числа обусловленности, связанность между параметрами уменьшается.

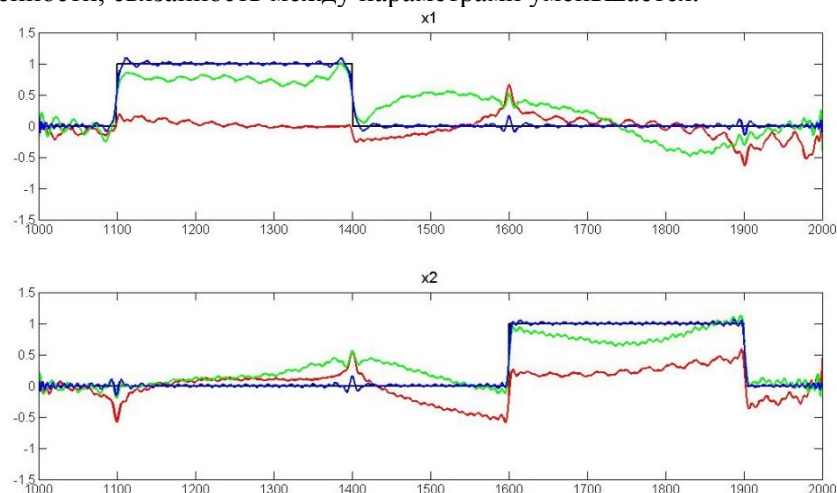


Рисунок 2. г-решения: в верхнем слое – возмущение параметра x_1 , в нижнем – x_2 . Красный цвет соответствует числу обусловленности 10^2 , зеленый – 10^4 , синий – 10^8 , черный – искомое решение.

3 Заключение

В результате исследования линейризованного оператора динамической теории упругости для модели среды с поглощением, зависящей только от вертикальной переменной, использован метод, основанный на сингулярном анализе [Cheverda, Kostin, 1995 10]. В качестве параметров среды рассмотрена комбинация параметра Ламе λ и параметра поглощения τ^P . Были построены проекции искомого решения на правые старшие сингулярные векторы для числа обусловленности 10^2 , 10^4 , 10^8 . Обнаружено, что связанность параметров уменьшается с увеличением числа обусловленности.

Список литературы

1. J.O. Parra, C.L. Hackert, P.-C. Xu. Characterization of fractured low Q zones at the Buena Vista Hills reservoir, California. // Geophysics. 2002. V.67. Pp. 1061-1070.
2. J.M. Carcione. Seismic modeling in viscoelastic media. // Geophysics. 1993. V.58. Pp. 110-120.
3. W.A. Mulder and B. Hak. An ambiguity in attenuation scattering imaging. // Geophys.J. 2009. V.178. Pp. 1614-1624.
4. R.M. Christensen. Theory of viscoelasticity – An introduction. – Academic Press, Inc. 1982. Pp. 357.
5. H.-P. Liu, D.L. Anderson, H. Kanamori. Velocity dispersion due to anelasticity; implications for seismology and mantle composition. // Geophysics. 1976. V.47. Pp. 41-58.
6. W.I. Futterman. Dispersive body waves. // J. Geophysics. 1962. V.67. Pp. 5279- 5291.
7. A. Tarantola. A strategy for nonlinear elastic inversion of seismic reflection data. // Geophysics. 1986. V.51(10). Pp. 1893-1903.
8. J.O. Blanch, J.O.A. Robertsson and W.W. Symes. Modeling of a constant Q: Methodology and algorithm for an efficient and optimally inexpensive viscoelastic technique. // Geophysics. 1995. V. 60(1). Pp. 176-184.

9. *F. Assous and F. Collino.* A numerical method for the explanation of sensitivity: the case of the identification of the 2D stratified elastic medium. // *Inverse Problems*. 1990. V.6(4). Pp. 487–514.
10. *V.A. Cheverda, V.I. Kostin.* R-pseudoinverses for compact operators in hilbert spaces:existence and stability. // *Journal of Inverse and Ill-Posed Problems*. 1995. V.3(2). Pp. 131–148.

РЕАЛИЗАЦИЯ И ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИОННЫХ АЛГОРИТМОВ ДЛЯ МИНИМИЗАЦИИ ФУНКЦИЙ В ROOT

М.В. Жабицкий

mikhail.zhabitsky@jinr.ru

Объединённый институт ядерных исследований,
Лаборатория ядерных проблем им. В.П. Джелепова

Решение оптимизационных проблем для определения параметров физических моделей является одной из основных задач пакета ROOT (<http://root.cern.ch>), широко используемого в физике частиц. Исторически в ROOT в качестве базового алгоритма для минимизации функций вещественных переменных применялся квазиньютоновский метод MIGRAD, основанный на формуле Давидона-Флетчера-Пауэлла. MIGRAD зарекомендовал себя как эффективный способ минимизации широкого спектра непрерывных функций. Вместе с тем существуют задачи, решение которых выходит за рамки возможностей MIGRAD. Среди таких проблем следует упомянуть задачи на нахождение глобального минимума многомодальных функций, минимизация разрывных функций или функций с наличием шума, а также решение задач большой размерности (число параметров > 100). Многие из подобных проблем могут быть оптимизированы при помощи эволюционных алгоритмов. Помимо собственно реализации эволюционных алгоритмов, их внедрение в пакет ROOT потребовало введение дополнительных методов, специфичных для эволюционных алгоритмов. Реализация и использование эволюционных алгоритмов для минимизации функций в пакете ROOT объясняются на примере метода Асинхронной дифференциальной эволюции.

АНАЛИЗ СЛОЖНЫХ ВЕЗИКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА АСИНХРОННОЙ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ЭВОЛЮЦИИ

Е.И. Жабицкая

Evgeniya.Zhabitskaya@jinr.ru

Объединённый институт ядерных исследований,
Лаборатория информационных технологий
Международный университет природы, общества и человека «Дубна»

Введение

Информация о структуре однослойных везикул важна для таких отраслей как структурная биология и фармакология. В работах [1, 2] метод разделенных форм-факторов (РФФ) адаптирован для анализа экспериментальных данных по малоугловому рассеянию синхротронного излучения на полидисперсной популяции

однослойных везикул димиростоилфосфатидилхолина (ДМФХ), помещенных в водный раствор сахарозы. Показано, что учет флуктуаций внутренних параметров бислоя в рамках указанного подхода позволяет описать различия в глубине минимумов на экспериментальной кривой в области больших значений вектора рассеяния.

Параметры моделей, задающие структуру везикулярной системы, в работах [1, 2] определены с использованием метода Асинхронной Дифференциальной Эволюции (АДЭ) [3-6]. В данной работе показано, что применение АДЭ для фитирования сложных везикулярных систем эффективнее, чем применение таких методов минимизации как SIMPLEX или MIGRAD.

Математическая модель и численный алгоритм

Приведем основные формулы, определяющие РФФ-метод. Макроскопическое сечение полидисперсной популяции везикул имеет вид $\frac{d\Sigma}{d\Omega}(q) = n_x \cdot \hat{F}_s \cdot \hat{F}_b$, где n_x – нормировочный фактор, пропорциональный количеству везикул в единице объема.

$$\hat{F}_s(q, \langle R \rangle, m) = \frac{\int_{R_{\min}}^{R_{\max}} F_s(q, R) \cdot G(\langle R \rangle, R, m) \cdot dR}{\int_{R_{\min}}^{R_{\max}} G(\langle R \rangle, R, m) \cdot dR} \quad \hat{F}_b(q, \Theta_b, k_F) = \frac{\int_{-K}^{+K} F_b(q, \theta_b(\Theta_b, k_F, \xi)) \cdot f(\xi) \cdot d\xi}{\int_{-K}^{+K} f(\xi) \cdot d\xi}.$$

$$\text{Здесь } F_s(q, R) = \left(4\pi \cdot \frac{R^2}{qR} \cdot \sin(qR) \right)^2 \quad \text{и} \quad F_b(q, \theta_b) = \left(\int_{-d/2}^{d/2} \rho(x, \theta_b) \cdot \cos(qx) \cdot dx \right)^2 -$$

соответственно формфактор бесконечно тонкой сферической оболочки радиуса R и формфактор бислоя; $G(\langle R \rangle, R) = \frac{R^m}{m!} \cdot \left(\frac{m+1}{\langle R \rangle} \right)^{m+1} \exp\left(-\frac{(m+1) \cdot R}{\langle R \rangle}\right)$ – распределение

Шульца, $\langle R \rangle$ – средний радиус везикулы, m – коэффициент полидисперсности, Θ_b – совокупность параметров, определяющих средние значения параметров плотности длины рассеяния $\rho(x, \theta_b)$, k_F – коэффициент флуктуаций. В расчетах пределы интегрирования $R_{\min}$ и $R_{\max}$ соответственно равны 10 нм и 100 нм, $K = 3$. С учетом некогерентного фона I_B и разрешения спектрометра (второй момент функции разрешения спектрометра $\Delta = 6 \cdot 10^{-3} \text{ нм}^{-1}$) макроскопическое сечение принимает вид

$$I(q) = \frac{d\Sigma}{d\Omega}(q) + \frac{1}{2} \Delta^2 \frac{d^2}{dq^2} \left[\frac{d\Sigma}{d\Omega}(q) \right] + I_B.$$

Фитирование экспериментальных данных (спектров малоуглового рентгеновского рассеяния на суспензии однослойных везикул ДМФХ в водном растворе сахарозы с концентрацией 40%, снятых на установке A2 синхротронного источника Doris III, DESY, Германия) проводилось путем минимизации целевой

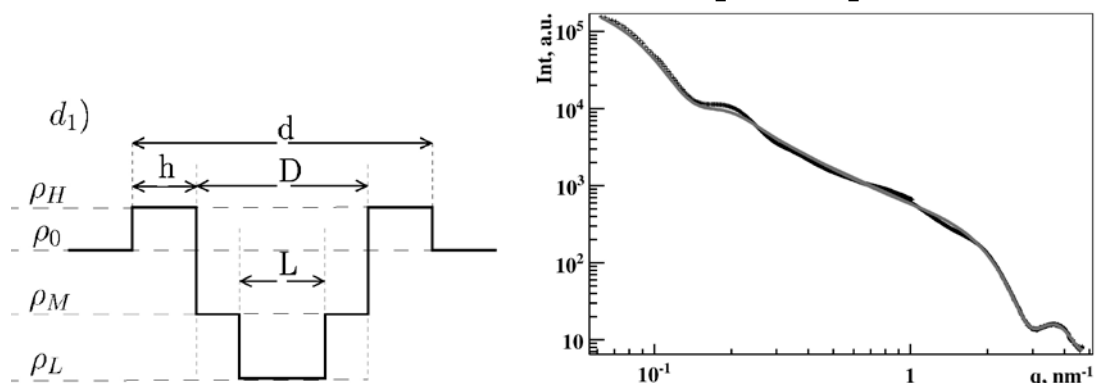
функции $f(\Theta) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{I(q_i) - I_{\text{exp}}(q_i)}{\delta(q_i)} \right)^2$, где ошибки полагались равными

$\delta(q_i) = 0,1 \times I_{\text{exp}}(q_i)$. Количество экспериментальных точек $N = 894$.

Разные методы оптимизации при подгонке параметров везикулярной системы

На примере анализа d_1 модели для плотности длины рассеяния $\rho(x, \theta_b)$ (см.

рис. 1) с учетом флуктуаций толщины мембраны [1, 2] оптимизация проводилась многократно при помощи различных оптимизационных методов: метода Симплексов (метод Нелдера-Мида), квази-ньютоновского метода наискорейшего спуска (метод Дэвидона-Флетчера-Пауэлла) (ROOT-реализация программы Minuit, методы SIMPLEX и MIGRAD) и метода АДЭ. Расчеты проводились исходя из того, что допустимые значения параметров лежат в области $\Theta_i \in [\Theta_i^{\min}, \Theta_i^{\max}]$.



Рисиннок. 1. Слева: d_1 – аппроксимация плотности длины рассеяния фотона поперек липидного бислоя. Справа: спектр МУРР и результаты фитирования в рамках РФФ- d_1 -модели

Глобальный минимум задачи найден в точке Θ^* , координаты которой представлены в таблице 1. Значение целевой функции в глобальном минимуме: $f(\Theta^*) = 608,46$. Ошибки оценены исходя из условия $\Delta f = 1$. Кроме основного, в данной задаче существуют локальные минимумы.

Таблица 1. Координаты минимума.

Θ_i	$\langle R \rangle$, нм	m	$\langle d \rangle$, нм	$\langle 2h \rangle$, нм	$\langle L \rangle$, нм	k_{fluct}	ρ_H , $\times 10^{10}$ см^{-1}	n_x , $\times 10^{18}$ см^{-3}	I_B , у.е.
Θ_i^*	19,1 $\pm 0,2$	13,22 $\pm 0,7$	3,45 $\pm 0,04$	0,70 $\pm 0,07$	0,40 $\pm 0,01$	0,10 $\pm 0,01$	6,9 $\pm 0,6$	3,78 $\pm 0,09$	5,4 $\pm 0,2$

Заклучение

Сравнительные расчеты показывают, что при решении данной задачи метод АДЭ предпочтительнее классических методов поиска по следующим причинам:

Во-первых, метод АДЭ-Р является робастным методом поиска. С вероятностью, близкой к единице, он завершает расчеты в окрестности одного из минимумов задачи, в то время как метод SIMPLEX зачастую заканчивает расчеты, не приблизившись к минимуму.

Во-вторых, метод АДЭ является методом глобальной оптимизации. Он с большой вероятностью обеспечивает нахождение самого глубокого из минимумов функции в области допустимых значений параметров. Эта вероятность может быть приближена к единице путем увеличения размера исходной популяции. Вероятность обнаружения глобального минимума методом наискорейшего спуска значительно меньше и зависит от размеров области поиска.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ грант 13-01-00060а.

Список литературы

1. *Е.И. Жабицкая, Е.В. Земляная, М.А. Киселев.* Исследование структуры однослойных везикул DMPC с использованием параллельного алгоритма асинхронной дифференциальной эволюции. // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия «Математика. Информатика. Физика». 2014. № 2. С. 253-259.
2. *М.А. Киселев, Е.В. Земляная, Е.И. Жабицкая, В.Л. Аксенов.* Исследование однослойных везикул ДМФХ в водных растворах сахарозы методами малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей // Препринт объединенного института ядерных исследований РЗ-2014-34. Дубна. 2014. // Принято в журнал «Кристаллография».
3. *E.I. Zhabitskaya, M.V. Zhabitsky.* Asynchronous Differential Evolution. // Lecture Notes in Computer Science. 2012. V.7125. Pp. 328-333.
4. *Е.И. Жабицкая, М.В. Жабицкий.* Решение оптимизационных задач на распределенных вычислительных системах с помощью алгоритма Асинхронной Дифференциальной Эволюции. // Математическое моделирование. 2012. Т.24. № 12. С.33-37.
5. *E.I. Zhabitskaya, M.V. Zhabitsky.* Asynchronous Differential Evolution with restart // (Editors: I. Dimov, I. Farag, and L. Vulkov): NAA 2012, LNCS 8236, Springer, Heidelberg, 2013. Pp. 555-561.
6. *E.I. Zhabitskaya, M.V. Zhabitsky.* Asynchronous Differential Evolution with Adaptive Correlation Matrix. // Proc. 15th Ann. Conf. on Genetic and Evolutionary Computation, ISBN: 978-1-4503-1963-8, USA: N.Y. 2013. Pp. 455-462.

МЕТОД ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ НА ОСНОВЕ РАЗЛОЖЕНИЯ ТЕНЗОРНЫЙ ПОЕЗД

Д.А. Желтков¹, Е.Е. Тыртышников², В.В. Азиатцева¹

dmitry.zheltkov@gmail.com, eugene.tyrtysnikov@gmail.com, valeryaaziattseva@yandex.ru

¹ Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

² Институт вычислительной математики РАН

Введение

Задача глобальной оптимизации возникает во многих прикладных областях, например, в задачах квантовой химии, при разработке лекарств, при определении оптимальных значений параметров модели и др.

Во многих случаях глобальная оптимизация необходима для функционалов, зависящих от многих переменных. Это приводит к идее использования различных методов малопараметрического представления многомерных массивов (тензоров).

В данной работе рассматривается метод глобальной оптимизации на основе разложения тензорный поезд (tensor train, ТТ). Этот метод активно использует структуру оптимизируемого функционала, что позволяет ему находить глобальный минимум, производя в 10-100 раз меньше вычислений его значений, чем требуется генетическим алгоритмам.

Разложение тензорный поезд

Разложение тензорный поезд [1, 2] представляет d -мерный тензор $A \in \mathbb{C}^{n_1 \times n_2 \times \dots \times n_d}$ в виде:

$$A(i_1, i_2, \dots, i_d) = \sum_{\alpha_1=1, \dots, \alpha_{d-1}=1}^{r_1, \dots, r_{d-1}} G_1(i_1, \alpha_1) G_2(\alpha_1, i_2, \alpha_2) \dots G_{d-1}(\alpha_{d-2}, i_{d-1}, \alpha_{d-1}) G_d(\alpha_{d-1}, i_d)$$

Тензоры G_i называются вагонами тензорного поезда, а числа r_i – ТТ-рангами тензора. Часто для удобства записи добавляют $r_0 \equiv r_d \equiv 1$.

Если обозначить максимальный из ТТ-рангов $r_0, \dots, r_d$ за r , а максимальный из модовых размеров $n_1, \dots, n_d$ тензора за n , легко увидеть, что для хранения тензора в формате тензорный поезд требуется всего $O(dnr^2)$ ячеек памяти. При условии небольшого максимального тензорного ранга r это означает, что для хранения тензора нам требуется лишь логарифмическое к общему числу его элементов количество параметров.

Большим преимуществом данного формата является то, что в формате тензорный поезд существует быстрая арифметика над тензорами – большинство операций выполняется за $O(dnr^3)$ арифметических действий. Также крайне важно наличие быстрого метода получения приближения тензора в ТТ-формате – ТТ-крестовый метод [3] позволяет получить интерполяцию тензора, вычислив лишь $O(dnr^2)$ его элементов и выполнив $O(dnr^3)$ арифметических операций. Отметим, что хоть исходный ТТ-крестовый метод, изложенный в [3], требует априорного знания ТТ-рангов тензора, легко предложить его модификацию, которая будет определять ранги в процессе работы метода, при этом его асимптотическая сложность останется неизменной.

Глобальная оптимизация на основе ТТ

Метод глобальной оптимизации на основе ТТ был предложен в применении к задаче докинга [4]. Он основывается на том, что ТТ-крестовый метод в процессе своей работы осуществляет поиск максимальных по модулю элементов. Таким образом, заменив исходную задачу оптимизации на эквивалентную задачу поиска максимального по модулю значения с помощью некоторой монотонной функции отображения (например, arcctg для замены задачи минимизации), можно осуществлять поиск оптимума с помощью ТТ-крестового метода.

Отметим, что достаточно точное приближение может требовать высоких ТТ-рангов, и, таким образом, его поиск занимает много времени. Однако, на практике максимумы хорошо приближаются значительно раньше, чем тензор в целом. Поэтому используется ограничение максимального ранга.

Также для ускорения сходимости используется локальная оптимизация полученных узлов интерполяции. Полученные значения проецируются на сетку значений тензора и далее используются вместе с узлами интерполяции для поиска лучших узлов интерполяции (исходный ТТ-крестовый метод использует для этого лишь текущие узлы интерполяции). Отметим, что при таком подходе полученные точки будут являться узлами интерполяции в матрицах развёрток тензора, однако, для того, чтобы использовать их в качестве узлов интерполяции тензора необходимо вычислить ещё некоторое небольшое число (не более $O(dnr^2)$) элементов тензора. Это обусловлено тем, что добавлением локально оптимизированных точек нарушает вложенность индексов, возникающую в работе ТТ-крестового метода. На практике сам тензор в ТТ-формате на данный момент не используется, поэтому дополнительные точки для получения интерполяции тензора не вычисляются. Тем не менее, полученные точки можно использовать в качестве узлов такой интерполяции, а производимые итерации, аналогичные итерациям ТТ-крестового метода, улучшают качество приближения тензора, если его всё же вычислять.

Ещё одной идеей по ускорению сходимости является использование сдвига на текущее значение глобального оптимума, особенно для сильно сжимающих значения исходного функционала отображения (такого, как, например, arcctg). Таким образом, вместо исходной задачи оптимизации функционала $f(x)$ решается задача

максимизации по модулю функционала $g(\mathbf{x}) = \phi(f(\mathbf{x}) - f_*)$, где f_* – текущее приближение к глобальному оптимуму, а ϕ – отображение в задачу максимизации модуля.

В целом, схема работы метода выглядит следующим образом:

- I. Замена исходной задачи оптимизации на эквивалентную задачу поиска максимального по модулю значения: $g(\mathbf{x}) = \phi(f(\mathbf{x}) - f_*)$.
- II. Задание сетки в области, формирование (но не вычисление!) тензора $A(\mathbf{i}) \equiv g(\mathbf{x}_i) \in \mathbb{R}^{n_1 \dots n_d}$.
- III. В цикле:
 - а. На основе имеющихся точек с добавлением случайных формируются подматрицы $\widetilde{A}_k$ матриц развёрток $A_k(i_1 \dots i_k, i_{k+1} \dots i_d) \equiv A(i_1, \dots, i_d)$: для каждой имеющейся точки $j = (j_1, \dots, j_d)$ в набор строчных индексов I_k добавляются все индексы вида $(j_1, \dots, j_{k-1}, l)$, $l = \overline{1 \dots n_k}$, а в набор столбцовых индексов J_k – все индексы вида $(l, j_{k+2}, \dots, j_d)$, $l = \overline{1 \dots n_{k+1}}$. $\widetilde{A}_k \equiv A_k(I_k, J_k)$
 - б. Выполняется аппроксимация матриц $\widetilde{A}_k$ с помощью матричного крестового метода [5] с рангом не выше заданного.
 - в. Осуществляется локальная оптимизация полученных узлов интерполяции.
 - г. Для каждой матрицы развёртки формируются наборы точек состоящие из узлов интерполяции и спроектированных на сетку локально оптимизированных точек.
 - д. Соседние матрицы развёрток обмениваются этими наборами точек.

Отметим, что, так как нет необходимости соблюдать вложенность индексов, матрицы развёрток можно рассматривать независимо. Кроме того, существует параллельная реализация матричного крестового метода.

Таким образом, сложность метода – $O(dnr^3)$ арифметических операций, $O(dnr^2)$ вычислений значений оптимизируемого функционала и $O(dr)$ локальных оптимизаций. Число параллельных шагов в методе – $O(r^2)$ операций, $O(r)$ вычислений значений функционала и $O(1)$ локальных оптимизаций.

Ещё одним способом ускорения метода является искусственное увеличение размерности [6]. Для этого по каждому направлению вводится сетка размера $n = 2^p$ и далее, вместо того, чтобы рассматривать d -мерный тензор размером n по каждому направлению, рассматривается dp -мерный тензор с размером 2 по каждому направлению. Отметим, что, вообще говоря, это может привести к росту ранга, необходимого для нахождения глобального оптимума, однако, на практике этот рост несущественен, а асимптотическая сложность значительно уменьшается, т.к. зависимость от n в ней заменяется на зависимость от $\log_2 n$.

Заключение

Предложенный метод глобальной оптимизации был применён к задаче докинга и задаче определения параметров модели ВИЧ на клеточном уровне. В обоих случаях он оказался эффективнее генетических алгоритмов по количеству вычислений значений функционала в 10-100 раз. Параллельная версия демонстрирует хорошую масштабируемость.

В рамках дальнейшей работы планируется реализовать вычисление дополнительных точек для получения интерполяционного приближения тензора в

ТТ-формате, и использовать метод поиска глобального максимума по модулю в тензоре в ТТ-формате для определения дополнительных областей, содержащих большие значения, ускоряя таким образом сходимость метода и гарантируя нахождение глобального оптимума в случае, когда тензор хорошо приближается в ТТ-формате с малым рангом.

Список литературы

1. V. Oseledets and E.E. Tyrtshnikov. Breaking the curse of dimensionality, or how to use SVD in many dimensions. // SIAM J. Sci. Comput. 2009. V.31. №5. Pp. 3744-3759.
2. I.V. Oseledets. Tensor-train decomposition. // SIAM J. Sci. Comput. 2011. V.33. №5. Pp. 2295-2317.
3. I.V. Oseledets and E.E. Tyrtshnikov. TT-cross approximation for multidimensional arrays. // Linear Algebra Appl. 2010. V.432. №1. Pp. 70-88.
4. Д.А. Желтков, И.В. Офёркин, Е.В. Каткова, А.В. Сулимов, Е.Е. Тиртышников и В.Б. Сулимов. TTDock: метод докинга на основе тензорных поездов. // Вычислительные методы и программирование. 2013. Т.14. С. 279-291.
5. E.E. Tyrtshnikov. Incomplete cross approximation in the mosaic-skeleton method. // Computing. 2000. V.64. №4. Pp. 367-380.
6. Д.А. Желтков и Е.Е. Тиртышников. Увеличение размерности в методе докинга на основе тензорных поездов. // Вычислительные методы и программирование. 2013. Т.14. С. 292-294.

СПЕКТРАЛЬНАЯ ДУАЛЬНОСТЬ В ИНТЕГРИРУЕМЫХ СИСТЕМАХ И СУПЕРСИММЕТРИЧНЫХ КАЛИБРОВОЧНЫХ ТЕОРИЯХ

Е. Зенкевич

yegor.zenkevich@gmail.com

Института ядерных исследований РАН

Существует соответствие между четырехмерными $N = 2$ суперсимметричными калибровочными теориями и интегрируемыми моделями. Зная вид гамильтонианов и симплектическую структуру интегрируемой модели, можно найти точное эффективное действие калибровочной теории. С другой стороны, калибровочные теории оказываются связаны посредством АГТ соответствия с корреляторами двумерных конформных теорий. В цикле недавних работ мы показали, что на уровне интегрируемых систем это соответствие проявляется в как эквивалентность некоторых классов интегрируемых систем. Мы также расширили на наше рассмотрение на пятимерные калибровочные теории. В этом случае спектральная дуальность связывает калибровочные теории с различными калибровочными группами и составом материи.

КВАЗИГАЗОДИНАМИЧЕСКИЙ АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ МЕЛКОЙ ВОДЫ В ПОЛЯРНОЙ СИСТЕМЕ КООРДИНАТ

Т.Г. Елизарова, М.А. Истомина

telizar@mail.ru, m_ist@mail.ru

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

Квазигазодинамические (КГД) уравнения и основанные на них численные алгоритмы показали свою эффективность при расчетах разнообразных задач газовой

динамики ([1-3]). При этом большинство задач решалось в декартовой и цилиндрической системах координат (r, z) [2, 3].

Данная работа посвящена расширению КГД подхода для численного моделирования задач, рассмотрение которых естественно и удобно проводить в полярной системе координат. К таким задачам относятся задачи моделирования атмосферных явлений в планетарных масштабах, астрофизических объектов, связанных с вращением материи вокруг притягивающих центров, численное моделирование течений в аккреционных дисках [4, 5] в приближении мелкой воды (МВ).

Система уравнений МВ в декартовых координатах с учетом влияния внешних сил и неровностей дна имеет вид

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \operatorname{div}(h\mathbf{u}) = 0,$$

$$\frac{\partial h\mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \operatorname{div}(h\mathbf{u}) + (h\mathbf{u}\nabla)\mathbf{u} + \nabla\left(\frac{gh^2}{2}\right) = \operatorname{div}\Pi_{NS} + h\mathbf{f} - gh\nabla b,$$

где h – высота жидкости, $\mathbf{u}$ – вектор скорости, $\mathbf{f}$ – вектор внешней силы, Π_{NS} – тензор вязких напряжений Навье-Стокса, b – профиль дна.

Регуляризованные КГД уравнения МВ в полярной системе координат (r, φ) построены с применением метода осреднения исходных уравнений по малому интервалу времени [6, 7]. Эти уравнения являются основой конечно-разностного алгоритма решения уравнений МВ в полярной системе координат. Для решения системы КГД уравнений МВ в полярной системе координат используется явная схема по времени с центральными разностями.

В одномерном случае $h = h(r)$, $u_\varphi = u_\varphi(r)$, $\frac{\partial}{\partial \varphi} = 0$ регуляризованная система уравнений МВ в полярной системе координат принимает следующий вид

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(rj_{mr})}{\partial r} = 0,$$

$$\frac{\partial hu_r}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(rj_{mr}u_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(j_{mr}u_\varphi)}{\partial \varphi} + \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{gh^2}{2}\right) - \frac{hu_\varphi^2}{r} =$$

$$= \left(h - \tau \frac{1}{r} \frac{\partial(hru_r)}{\partial r}\right) \left(f_r - g \frac{\partial b}{\partial r}\right) + \frac{1}{r} \frac{\partial(ru_r h w_r^*)}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial r}\left(gh\tau \frac{1}{r} \frac{\partial(hru_r)}{\partial r}\right) - \tau \frac{u_\varphi^2}{r} \frac{1}{r} \frac{\partial(hru_r)}{\partial r} +$$

$$+ 2h \frac{u_\varphi}{r} w_\varphi^* + \frac{\partial \Pi_{rr}}{\partial r} + \frac{\Pi_{rr} - \Pi_{\varphi\varphi}}{r},$$

$$\frac{\partial hu_\varphi}{\partial t} + \frac{\partial(r^2 j_{mr} u_\varphi)}{\partial r} = \left(h - \tau \frac{1}{r} \frac{\partial(hru_r)}{\partial r}\right) f_\varphi + \frac{\partial(r^2 hu_r w_\varphi^*)}{\partial r},$$

где

$$j_{mr} = h(u_r - w_r), \quad w_r = \frac{\tau}{h} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial(rhu_r^2)}{\partial r} + gh \frac{\partial h}{\partial r} - \frac{hu_\varphi^2}{r} - h \left(f_r - g \frac{\partial b}{\partial r} \right) \right],$$

$$w_r^* = \tau \left[u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + g \frac{\partial h}{\partial r} - \frac{u_\varphi^2}{r} - f_r + g \frac{\partial b}{\partial r} \right], \quad w_\varphi^* = \tau \left[\frac{1}{r} u_r \frac{\partial(ru_r)}{\partial r} - f_\varphi \right],$$

$$\Pi_{rr} = 2\mu \frac{\partial u_r}{\partial r}, \quad \Pi_{\varphi\varphi} = 2\mu \frac{u_r}{r}.$$

Здесь μ – естественная физическая вязкость, τ – параметр регуляризации.

В работе построены три характерных равновесных решения системы уравнений МВ, которые в тоже время являются точными решениями сглаженных уравнений МВ. Показана монотонная сходимость разностной схемы, ее устойчивость и влияние искусственной диссипации.

Параметры разностной схемы, обеспечивающие устойчивость и точность вычислительного алгоритма для одномерной задачи в дальнейшем будут использоваться при проведении математического моделирования двумерных течений.

Список литературы

1. *Б.Н. Четверушкин.* Кинетические схемы и квазигазодинамическая система уравнений. – Москва: МАКС Пресс. 2004.
2. *Т.Г. Елизарова.* Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. – Москва: Научный мир. 2007.
3. *Ю.В. Шеретов.* Динамика сплошных сред при пространственно-временном осреднении. – Москва; Ижевск: НИЦ РХД. 2009.
4. *А.М. Фридман.* Предсказание и открытие новых структур в спиральных галактиках. // УФН. 2007. Т.117(2). С. 121-148.
5. *Е.П. Велихов, А.Ю. Луговский, С.И. Мухин, Ю.П. Попов, В.М. Чететкин.* Роль крупномасштабной турбулентности в прераспределении углового момента в аккреционных звездных дисках. // *Астрономический журнал.* 2007. Т.84. № 2. С. 1-8.
6. *Т.Г. Елизарова.* Осреднение по времени как приближенный способ построения квазигазодинамических и квазигидродинамических уравнений. // *ЖВМиМФ.* 2011. Т.51. №11. С. 2096-2105.
7. *T.G. Elizarova, O.V. Bulatov.* Regularized shallow water equations and a new method of simulation of the open channel flows. // *Comp. Fluids.* 2011. № 46. Pp. 206-211.

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ РАСЧЕТА РАСПРОСТРАНЕНИЯ УПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ В ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ОБЛАСТИ С КЛИНОВИДНЫМ ВЫРЕЗОМ

А.А. Гавриков¹, М.В. Генкин², Д.Ю. Князьков¹, А.С. Шамаев³
gavrikov@ipmnet.ru, info@uralchem.com, knyaz@ipmnet.ru, sham@rambler.ru

¹ Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН

² ОАО «ОХК «УРАЛХИМ»

³ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Введение

Задачи изучения распространения возмущения в упругих телах с негладкой границей являются актуальными и важными для современной механики. Отличительной характеристикой этих задач является образование концентраторов напряжений около особенностей границ [1, 2]. Для исследования поведения решений вблизи таких особенностей требуется использование соответствующих численных методов и высокоэффективных алгоритмов расчета. Поскольку шаг расчетной сетки должен быть достаточно маленьким, возникает необходимость использовать для расчета высокопроизводительные параллельные вычислительные системы.

1 Постановка задачи

Рассмотрим бесконечный упругий цилиндр радиуса R с клиновидным вырезом

раствора 2α . Необходимо рассчитать распространение упругих напряжений, возникающих вследствие приложения нагрузки к участку границы раствора 2β (см. рис. 1). При этом из теоретических соображений вблизи центра будет формироваться концентратор напряжений. Поэтому из расчета убирается ε -окрестность центральной оси цилиндра. Система уравнений линейной теории упругости в напряжениях в цилиндрической системе координат при независимости от координаты z имеет вид

$$\begin{aligned}\frac{\partial \sigma_{rr}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{r\theta}}{\partial \theta} + \frac{\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta}}{r} + \rho F_r &= \rho \frac{\partial^2 u_r}{\partial t^2} \\ \frac{\partial \sigma_{r\theta}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{\theta\theta}}{\partial \theta} + \frac{2\sigma_{r\theta}}{r} + \rho F_\theta &= \rho \frac{\partial^2 u_\theta}{\partial t^2}\end{aligned}$$

2 Математическая модель и численный алгоритм

В качестве расчетной схемы используется метод виртуальных работ, согласованных со связями [3]. Так для точек, находящихся внутри расчетной области будем иметь расчетные формулы следующего вида:

$$\begin{aligned}u_{r,k+1}^{i,j} &= 2u_r^{i,j} - u_{r,k-1}^{i,j} + \tau^2 (J_{1,dd}^{i,j} - J_{1,dd}^{i-1,j} + J_{2,dd}^{i,j} - J_{2,dd}^{i,j-1} - J_{3,dd}^{i,j} + J_4^{i,j}) / (r_i \rho S_{i,j}) \\ u_{\theta,k+1}^{i,j} &= 2u_\theta^{i,j} - u_{\theta,k-1}^{i,j} + \tau^2 (G_{1,dd}^{i,j} - G_{1,dd}^{i-1,j} + G_{2,dd}^{i,j} - G_{2,dd}^{i,j-1} + G_{3,dd}^{i,j} + G_4^{i,j}) / (r_i \rho S_{i,j})\end{aligned}$$

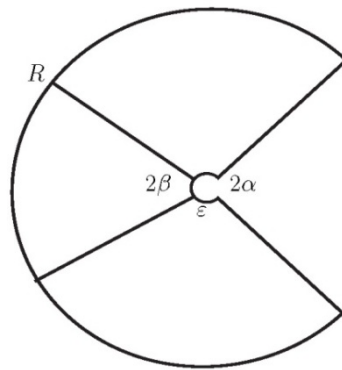


Рисунок 1. Форма сечения упругого цилиндра с клиновидным вырезом

3 Параллельная реализация и исследование параллельных свойств программы

Пусть для вычисления по численной схеме необходимо для каждого узла (i, j) знать значения на предыдущих шагах по времени из окрестности размером L . Вычисления проводятся локально на каждом вычислительном ядре в течении s шагов по времени, после чего осуществляется межпроцессорный обмен. Таким образом, после каждых s шагов по времени соседние процессоры должны обмениваться информацией с результатами расчётов в соседних, приграничных областях.

По описанной выше схеме на языке программирования C++ была написана программа, рассчитанная на использование на суперкомпьютерных вычислительных комплексах. Параллельные свойства [4] написанной программы исследовались на суперкомпьютере МВС100-К МСЦ РАН. Было установлено следующее.

Для размера задачи $n=10^9$, что соответствует расчетной сетке 1000×1000 , время работы уменьшается от 68 мин. (4127 сек.) при использовании одного вычислительного ядра до 46 секунд при использовании 128 вычислительных ядер (16 ВУ) суперкомпьютера МВС100-К МСЦ РАН (см. рис. 2, слева). При размере задачи $n=10^9$, что соответствует расчетной сетке 1000×1000 , и изменении количества вычислительных ядер суперкомпьютера МВС100-К от одного до 128 (16 ВУ), ускорение ведет себя практически линейно (см. рис. 2, справа).

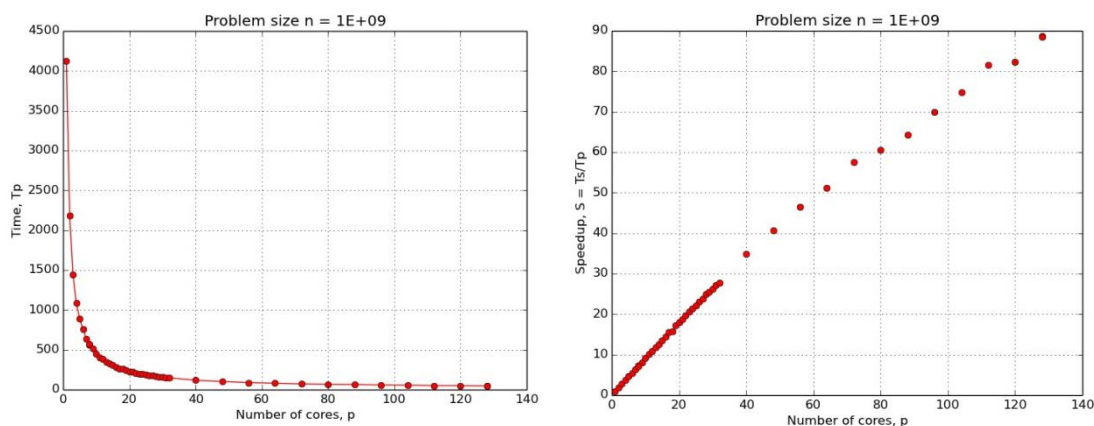


Рисунок 2. Зависимость времени расчета T_p (слева) и ускорения (справа) от числа используемых расчетных ядер p при постоянном размере задачи n .

При размере задачи $n = 10^9$, что соответствует расчетной сетке 1000×1000 , и изменении количества вычислительных ядер суперкомпьютера МВС100-К МСЦ РАН от одного до 128 (16 ВУ), эффективность медленно падает, оставаясь в пределах 70-80% (см. рис. 3, слева). При увеличении размера задачи от $n = 10^6$, что соответствует расчетной сетке 100×100 , до $n = 8 \cdot 10^9$, что соответствует расчетной сетке 2000×2000 , на 8, 16 и 128 вычислительных ядрах суперкомпьютера МВС100-К МСЦ РАН, эффективность растёт, находится в пределах 70-90% на сетках достаточного большого размера (см. рис. 3, справа). При этом максимум эффективности при вычислении на 1 и 2 ВУ достигается на сетках размера 400×400 и 800×800 и равен 95% и 92% соответственно.

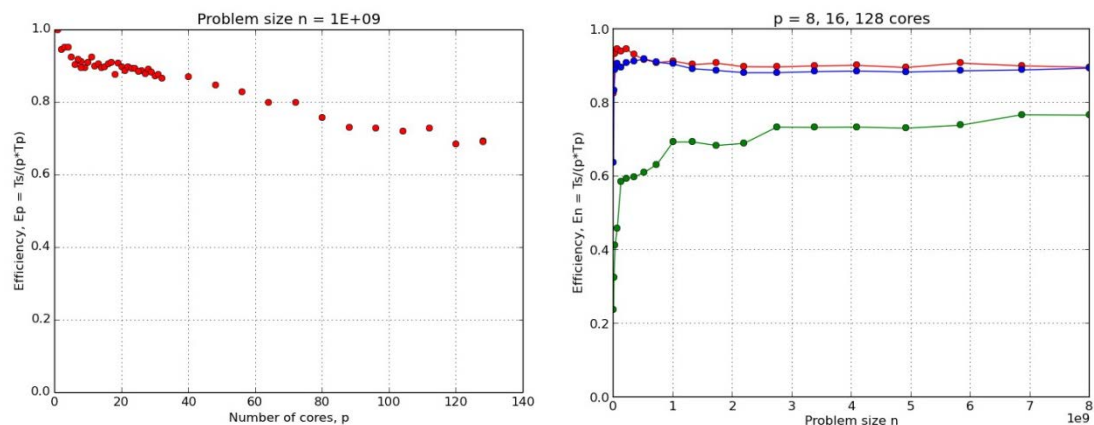


Рисунок 3. Зависимость эффективности от количества используемых вычислительных ядер (слева) и зависимость эффективности от размера задачи при использовании 1 (красным), 2 (синим) и 16 (зеленым) ВУ (8, 16 и 128 ядер соответственно) суперкомпьютера МВС100-К (справа).

4 Пример расчета

На рис. 4 показан пример расчета для следующих значений параметров: размер расчетной сетки $N = 1000$, $M = 1000$; половина угла выреза – $\pi/4$; половина дуги, на которой задана начальная нагрузка $\pi/6$; радиус $R=1$; радиус выреза вокруг центра $\varepsilon = 0.01$; плотность $\rho = 1$; коэффициенты Ламе $\mu = 1$, $\lambda = 1$; время окончания расчета $T = 1.1$; равномерный шаг расчетной сетки по радиусу $\rho_0 = 0.00099$; равномерный шаг расчетной сетки по углу $\psi_0 = 0.00471$; шаг по времени $\tau = 0.99 \cdot 10^{-6}$.

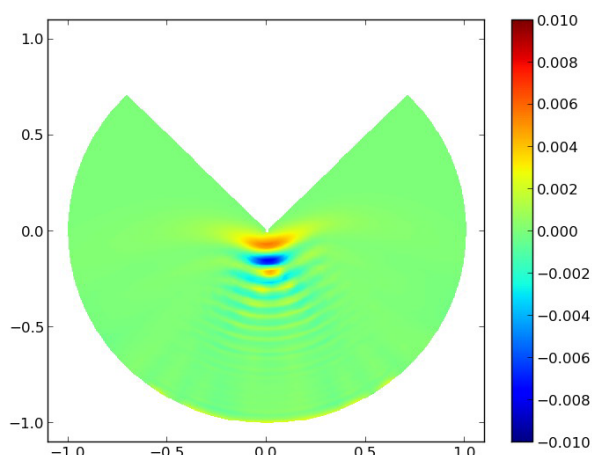


Рисунок 4. След тензора напряжений I_1 в момент времени $t = 0.72$

Заключение

В работе был предложен параллельный алгоритм для расчета по численной схеме метода виртуальных работ. Этот алгоритм был реализован на языке программирования C++ в виде программы CylElast2, для организации графического вывода использовался язык python и, в частности, его библиотека matplotlib. Эта программа использовалась на суперкомпьютере MBC100-K МСЦ РАН. Были исследованы параллельные свойства указанного алгоритма. Было показано, что эффективность программы достигает 70-90% начиная с некоторого достаточно большого объема счета. При этом использование параллельной программы позволило, например, для размера сетки 1000×1000 проводить расчет за 46 секунд на 128 вычислительных ядрах суперкомпьютера; тогда как подобный расчет с использованием однопроцессорного варианта программы требует больше часа времени.

Список литературы

1. А.Ю. Кокотов, Б.А. Пламеневский. Об асимптотике решений задачи Неймана для гиперболических систем в областях с коническими точками. // Алгебра и анализ. 2004/ Т.16, Вып. 3. С. 56-98.
2. Б.А. Пламеневский. О задаче Дирихле для волнового уравнения в цилиндре с рёбрами. // Алгебра и анализ. 1998. Т.10, Вып. 2. С. 197-228.
3. В.Г. Баженов, В.Л. Котов. Математическое моделирование нестационарных процессов удара и проникания осесимметричных тел и идентификация свойств грунтовых сред. – М.: Физматлит. 2011. 208 с.
4. A. Grama, A. Gupta, G. Karypis, V. Kumar. Introduction to Parallel Computing, Second Edition. – Addison Wesley, 2003. 856 p.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ КВАНТОВОЙ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ НА ПЛОСКОСТИ

Е.А. Коваль

e-cov@yandex.ru

Объединённый институт ядерных исследований,
Лаборатория теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова

Разработан алгоритм для численного решения квантовой задачи рассеяния на плоскости. Получено хорошее согласие численных расчетов с известной асимптотикой амплитуды рассеяния в низкоэнергетическом приближении для кругового бесконечно сильного отталкивающего потенциала. Анализ результатов численных расчетов показал, что дифференциальное сечение слабо зависит от угла рассеяния в низкоэнергетическом пределе для финитных потенциалов, и анизотропия потенциала порождает угловые особенности в дифференциальных сечениях: при определенных углах сечения имеют ярко выраженные экстремумы.

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕКОНСТРУКЦИИ D^0 -МЕЗОНОВ В ЭКСПЕРИМЕНТЕ CBM

Г.Е. Козлов

g.kozlov@gsi.de

Объединённый институт ядерных исследований,
Лаборатория информационных технологий

Введение

Одной из ключевых задач эксперимента CBM (Compressed Baryonic Matter) [1], который будет проводиться на строящемся в Дармштадте (Германия) ускорительном комплексе FAIR (Facility for Antiproton and Ion Research), является исследование процессов рождения и распада чарм-частиц в условиях столкновений тяжелых ионов при высоких и средних энергиях. Мы рассматриваем проблему определения точек распада легких векторных мезонов.

Важнейшую роль в решении этой задачи играет детектор MVD (Micro Vertex Detector), состоящий из четырех детектирующих плоскостей, предназначенных для учета пролетающих частиц. Каждая такая плоскость включает в себя большое количество квадратных ячеек со стороной 18,4 мкм. Частицы, пролетая через плоскости детектора, активируют не одну, а несколько ячеек, образуя кластеры округлой формы. В процессе реконструкции откликов детектора по таким кластерам должны быть определены координаты пролета частиц. Для этого используется специальная процедура – кластеризация [2].

Кластеризация откликов MVD детектора затрудняется высокой множественностью и сложностью данных. Помимо частиц, треки которых должны быть восстановлены, при каждом соударении появляется большое количество δ -электронов, затрудняющих проведение кластеризации и трекинга. Число δ -электронов зависит от частоты взаимодействия частиц. В данной работе мы рассматриваем влияние алгоритмов кластеризации и частоты взаимодействия на качество реконструкции D^0 .

1 Алгоритмы кластеризации

Для кластеризации откликов детекторов мы использовали два различных алгоритма. Первый из них был разработан нами специально для обработки откликов детекторов в случае, если детектирующие ячейки имеют заряд. Данный подход способен как определять отдельные, так и разделять большинство перекрывающихся кластеров. Основной принцип работы алгоритма следующий: каждая ячейка с локальным максимумом зарядов образует отдельный кластер, и каждый кластер может включать в себя только одну ячейку с локальным максимумом зарядов. Ячейки, которые не являются локальными максимумами, присоединяются к своим соседям с наибольшим зарядом.

Второй алгоритм не использует информацию о зарядах ячеек, что делает его более гибким в применении. Он основан на упрощенном методе ближайшего соседа [3]. Данный метод предполагает последовательное присоединение объектов к кластерам в зависимости от расстояний между ними. Объект будет присоединен к некоторому кластеру, если расстояние между данным объектом и любым из объектов, уже включенных в кластер достаточно мало. Для достижения максимальной скорости кластеризации, в качестве меры близости объектов мы использовали условие соседства ячеек на плоскости детектора. Таким образом, при помощи простой рекурсивной функции каждая группа соседних ячеек объединяется в отдельный кластер.

Алгоритм кластеризации с зарядами показал наилучшую точность и эффективность кластеризации (более 96%) для всех рассмотренных нами значений частоты взаимодействия (от 0 до 500 кГц). Но при большом количестве частиц его скорость серьезно падает. Использование алгоритма кластеризации без зарядов но с оптимальным порогом активации ячеек также позволило достичь эффективности более 95% при частоте взаимодействия до 120 кГц, что является очень хорошим показателем. По точности данный алгоритм уступает предыдущему, но его ошибки по-прежнему остаются в допустимых пределах. Главным же преимуществом кластеризации без учета зарядов ячеек является чрезвычайно высокая скорость работы.

2 Реконструкция D^0

Рождение легких векторных мезонов – крайне редкое событие, поэтому в данном исследовании мы использовали специальные данные, заведомо включающие в себя случаи D^0 распада до $K\pi^+$. В таком случае становится возможным исследование результатов трекинга на относительно небольшом наборе данных (10^3 - 10^4 событий). Мы рассмотрели качество определения D^0 как в случае отсутствия фоновых частиц, рождающихся в результате соударений, так и при наличии фона от центрального соударения золото по золоту при энергии 25 АГэВ при различных значениях частоты взаимодействия.

Сравнение инвариантной массы D^0 в отсутствии фона при значениях частоты взаимодействия 0 и 50 кГц отображено на рис. 1. Как видно из данной гистограммы, значения инвариантной массы практически не меняются при увеличении количества δ -электронов. Схожая ситуация наблюдается при значениях частоты взаимодействия до 100 кГц, более высокие значения данного параметра не рассматривались. В случае наличия фоновых частиц инвариантная масса так же практически не меняется при увеличении частоты взаимодействия вплоть до 50 кГц вне зависимости от используемого алгоритма кластеризации. Это свидетельствует об успешной реконструкции D^0 -мезонов во всех рассматриваемых случаях.

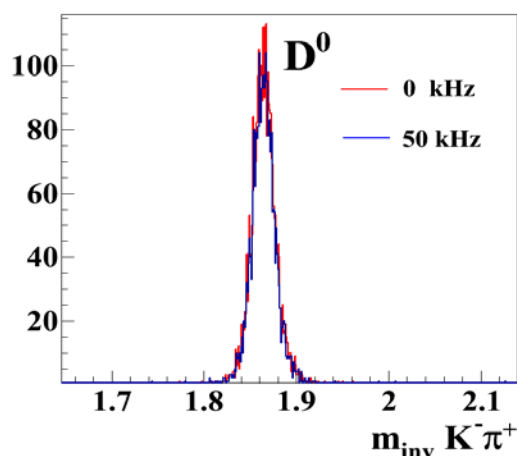


Рисунок 1. Инвариантная масса D^0 в отсутствии фона. Частота взаимодействия 0 и 50 кГц.

Результаты исследования приведены в таблице 1. Как видно из полученных данных, частота взаимодействия практически не влияет на качество реконструкции D^0 -мезонов, ярко выраженной зависимости от количества δ -электронов не наблюдается. Добавление к трекам D^0 фоновых частиц приводит к падению эффективности реконструкции данных треков не более чем на 10%. Учитывая, что в рассматриваемом соударении рождается 500-1000 частиц, такой результат можно трактовать как успешный. Использование зарядов ячеек позволяет увеличить качество реконструкции D^0 -мезонов за счет более высокой эффективности и точности алгоритма кластеризации. Но такой прирост показателей незначителен и укладывается в статистическую погрешность. С учетом малой скорости кластеризации при подобном подходе, использование зарядов для решения задачи реконструкции D^0 не целесообразно.

Таблица 1. Параметры распределений разрешения вершин по оси Z.

		0 кГц	10 кГц	30 кГц	50 кГц	100 кГц
$D^0 + \delta$	<i>успешные события</i>	206	204	202	202	205
	<i>сигма ($\mu\text{м}$)</i>	42,07 $\pm 1,09$	44,61 $\pm 1,24$	43,71 $\pm 1,23$	41,85 $\pm 1,19$	42,19 $\pm 3,44$
$D^0 + \delta + \text{фон}$	<i>успешные события</i>	189	181	187	187	–
	<i>сигма ($\mu\text{м}$)</i>	38,20 $\pm 3,20$	42,79 $\pm 3,62$	39,47 $\pm 4,00$	47,01 $\pm 3,77$	–
$D^0 + \delta + \text{фон},$ <i>с зарядами</i>	<i>успешные события</i>	190	189	191	188	–
	<i>сигма ($\mu\text{м}$)</i>	36,04 $\pm 3,72$	37,15 $\pm 2,27$	37,83 $\pm 3,02$	36,36 $\pm 2,49$	–

Закключение

Проведенное исследование показало, что при рассматриваемой геометрии детектора MVD наличие фоновых частиц и δ -электронов (при частоте взаимодействия до 50-100 кГц) оказывает минимальное влияние на процесс реконструкции D^0 -мезонов. Использование зарядов при кластеризации позволяет повысить эффективность и точность определения хитов. Но преимущества такого подхода минимальны, как и влияние на восстановление траекторий частиц. Таким образом, использование зарядов в MVD детекторе не является необходимым условием для успешной реконструкции

D⁰, но ведет к падению скорости кластеризации, а так же к значительному повышению стоимости данного детектора за счет использования более сложных элементов.

Список литературы

1. Compressed Baryonic Matter in Laboratory Experiments, The CBM Physics Book, 2011. URL: <http://www-alt.gsi.de/documents/DOC-2009-Sep-120-1.pdf>
2. И.Д. Мандель. Кластерный анализ. – М.: Финансы и статистика. 1988. 176 с.
3. R. Sibson. SLINK: An optimally efficient algorithm for the single-link cluster method. // The Computer Journal. 1973. Vol.16. Pp. 30-34.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ДЕТЕКТОРОВ ОБЪЕКТОВ НА ИЗОБРАЖЕНИИ

А.Г. Комиссарова, П.С. Сажин, А.В. Стадник

comissarova.detka@yandex.ru, sazhin@gmail.com, alexeystadnik@gmail.com

Международный университет природы, общества и человека «Дубна»

Данная работа посвящена разработке способа обнаружения пламени в цифровом видеопотоке, который позволил бы быстро, максимально точно и с низкими затратами вычислительных ресурсов определять наличие огня на изображении. Построение алгоритма разбито на этапы, которые позволяют отбросить с каждым этапом области изображения которые не удовлетворяют представленным критериям. Этапы алгоритма учитывают следующие характеристики открытого огня: характерный цвет, непрерывное мерцание, характерная текстура огня.

Введение

Решению данной задачи посвящено большое количество работ [1-5], где исследуются различные характеристики открытого огня, которые можно извлечь из видео-потока с использованием частотно-временного анализа, различных вариантов анализа текстуры огня, построение мульти-гауссового распределения для описания цветовых характеристик пикселей принадлежащих огненным регионам [4, 5], и множество других подходов.

Алгоритм детектирования естественным образом разбивается на этапы, которые, учитывая определенные характеристики огня, поэтапно отбраковывают «подозрительные области» изображения не удовлетворяющие характеристикам огня.

Цветовой фильтр

Под термином «подозрительная область» понимается некоторая область на сцене, которая имеет похожие на огонь характеристики, в дальнейшем эти зоны подвергаются более тщательному анализу. Разделение пространства сцены позволяет не тратить ресурсы вычислительной системы на обработку зон, не представляющих никакого интереса.

Для работы была набрана база данных изображений огня из открытых источников. Суммарно в этой базе изображений выделено около 16 миллионов пикселей, принадлежащих огню. Предварительный этап – разработки цветового фильтра, поскольку именно фильтрация по цвету является минимально ресурсоемкой операцией. Цветовой фильтр, в данном случае – это набор правил для определения, того что данный пиксель окрашен в цвет соответствующий одной из различных вариаций окраски открытого огня. Пиксели изображения, прошедшие все этапы

цветового фильтра заносятся в карту огненно-окрашенных пикселей, которая определяет области, которые будут подвергаться обработке следующими этапами алгоритма.

После анализа распределения цветовых компонент пикселей принадлежащих огню, подтвердилось, что пиксели огня занимают довольно узкие области пространства RGB. Следовательно, принадлежность пикселя к одной из этих областей можно использовать, как первый критерий того, что в кадре присутствует огонь. Это позволит отбросить множество изначально неинтересных для данной задачи областей изображения и существенно сократить ресурсы уже на данном этапе алгоритма.

Убедившись в коррелированности цветов огненных пикселей, та же самая статистика была построена в пространстве HSV. Результат можно увидеть на рис. 1. Он более показателен, чем результат в пространстве RGB, поскольку значение Hue представляет собой восприятие цвета человеком, а у огня характерный узкий диапазон цветов.

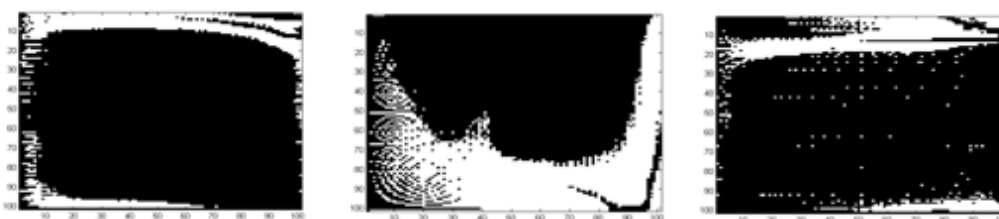


Рисунок 1. Распределение цвета для огненных пикселей: плоскости HV, SV, HS

Из распределения Hue видно, что здесь в решающем правиле можно ограничиться принятием решения, исходя из принадлежности Hue узкому диапазону от 0 до 0.2. Для решающего правила с участием других компонент, следует воспользоваться их распределением.

В результате, достаточно ограничиться принадлежностью пикселя одному из двух прямоугольных регионов части пространства SV.

Это позволяет сформулировать итоговое решающее правило в виде:

$H1 = H < 0.2$; $SV1 = \text{and}(0.95 \leq V, S \leq 0.75)$; $V2 = \text{and}(0.2 < V, V < 0.95)$;
 $SV2 = \text{and}(V2, 0.75 < S)$; $SV12 = \text{or}(SV1, SV2)$; $F = \text{and}(H1, SV12)$;

Пространственный анализ

Открытый огонь на изображении обладает характерной текстурой, которая характеризуется большим количеством перепадов яркости в основном в красном канале. Поскольку цветовой фильтр будет пропускать объекты любой природы с характерным для огня цветом, анализ текстуры представляется логичным вторым этапом анализа выделенных областей.

Из общих соображений можно предложить алгоритм с использованием одного или нескольких этапов дискретного вейвлет-преобразования. Сумма абсолютных величин трех плоскостей с коэффициентами соответствующими горизонтальными, вертикальными и диагональными деталями вейвлет-коэффициентов должна принимать максимальное значение на текстурах соответствующих огню. Уровень разложения определяется масштабом и из практических соображений можно ограничиться тремя уровнями разложения и выбрать максимальное значение. Решение о присутствии пламени в анализируемом регионе принимается на основе сравнения выбранной меры с некоторым пороговым значением. Если значение параметра превышает порог, значит, внутри региона находится пламя.

Второй вариант пространственного анализа можно построить, опираясь на собранную статистику и методы машинного обучения.

В качестве входных данных рассмотрим участок изображения размером 16×16 пикселей с верхней левой точкой в качестве исходной. В качестве дескриптора были выбраны 12 точек этого участка текстуры в красном канале изображения по 6 точек в направлениях по обеим осям. В направлении каждой из осей были выбраны точки соответствующие номерам [1, 2, 4, 7, 11, 16]. Расстояния между выбранными точками увеличиваются в арифметической прогрессии, что позволяет в некоторой степени «просканировать» масштаб изображения. Два, как проиллюстрировано на рис. 2.

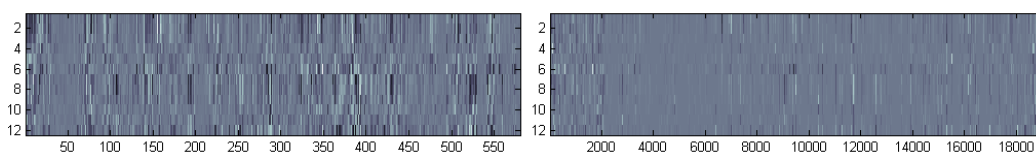


Рисунок 2. Изображения, полученные набором статистики из выборок положительных и отрицательных сэмплов, взятых случайным образом, иллюстрируют отличия выбранных дескрипторов на различных типах текстур

В качестве инструмента построения решающего правила была выбрана искусственная нейронная сеть – прямоточный персептрон с конфигурацией {12-1-1}. Архитектура была выбрана максимально простой, фактически в данном случае линейное отображение.

При обучении была достигнута точность классификации 90%.



Рисунок 3. Пример детекции открытого огня.

Выводы

Следующими этапами, дополняющими детекцию, должны идти этапы, которые анализируют видео-последовательность, т.е. принимают решение исходя из временной динамики пикселей подозрительной области.

Одним из основных отличий огня на сцене обычно является мерцание – постоянное изменение границ языков пламени и яркости пламени. Таким образом, большая часть области огня будет детектироваться как движение, которое можно оценить по меж-кадровой разности или по наличию статистического отклонения от фона.

На рассмотренной статической базе данных эффективность детектирования составила 84%, количество ложных срабатываний составило 2%.

Дальнейшим развитием алгоритма, следует рассмотреть детектор дыма, который в случае его успешной работы поможет снизить вероятность ложного срабатывания.

Список литературы

1. Yu-Chiang Li, Wei-Cheng Wu. Sequential Pattern Technology for Visual Fire Detection. // Journal of Electronic Science and Technology. 2012. V.10. № 3. Pp. 276-280.
2. C. Yu, J. Fang, J. Wang, Y. Zhang. Video Fire Smoke Detection Using Motion and Color Features. // Fire Technology. 2009. V.46(3). Pp. 651-663.

3. T. Celik, H. Demirel, H. Ozkaramanli, M. Uyguroglu. Fire Detection in Video Sequences using Statistical Color Model. // IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing, 2006. Pp. II213-216.
4. T. Celik, H. Demirel. Fire Detection in Video Sequences using a Generic Color Model. // Fire Safety Journal. 2009. V.44(2). Pp. 147-158.
5. А.Г. Комиссарова, А.В. Стадник, П.С. Сажин. Алгоритм обнаружения огня в видео-потоке. // РУДН. 2014. С.137-139.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ АППАРАТНОЙ ВИРТУАЛИЗАЦИИ И ВИРТУАЛИЗАЦИИ НА УРОВНЕ ОС НА ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТЬ И СКОРОСТЬ ВЫЧИСЛЕНИЙ

И.Г. Ганкевич, А.С. Крошенинников

feeblehamster@gmail.com

Санкт-Петербургский государственный университет

В последнее время всё большую популярность в качестве виртуализации завоевывает контейнерная виртуализация. Однако наработки в направлении паравиртуализации не позволяют однозначно ответить на вопрос, что выгоднее использовать на текущий момент.

В данной статье мы рассмотрим два вида виртуализации (KVM и LXC), оценим преимущества и недостатки обоих подходов, а также постараемся понять, что выгоднее использовать при ресурсоемких вычислениях.

ФРАКТАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА СКАТТЕРОГРАММЫ МГНОВЕННОГО СЕРДЕЧНОГО РИТМА

Д.Ю. Лебедев¹, А.П. Иванов², В.Н. Рыжиков¹, В.П. Цветков¹

dmyul@mail.ru, ivanovcardio2010@yandex.ru, vlnr@mail.ru, tsvet@tversu.ru

¹ Тверской государственный университет

² Тверской областной кардиологический центр

Одним из методов функциональной диагностики сердца является наблюдение за динамикой RR-интервалов. RR-интервал это расстояние между соседними R зубцами электрокардиограммы. Надежным методом, позволяющим изучить большой массив RR-интервалов с точностью ± 1 мс, является холтеровское мониторирование.

На наш взгляд, наиболее адекватным методом исследования RR-интервалов является анализ мгновенного сердечного ритма (МСР) [1], определяемый динамикой данных интервалов. Понятие МСР представляет собой обобщение понятия сердечного ритма используемого в медицинской практике. Если усреднить МСР по промежутку времени в одну минуту мы получим значение сердечного ритма.

Пусть i – номер текущего RR-интервала $i = 1, \dots, n$. Число n является числом сердечных сокращений за время наблюдения T . Значение МСР на i -ом интервале согласно [1] равно $y_i = 60 / T_{RR_i}$. Пусть пику R-зубца соответствует момент времени t_i . Тогда $T_{RR_i} = t_{i+1} - t_i$. Промежутки времени t_i приводятся в секундах, а мгновенный ритм y_i в минутах⁻¹. На всем промежутке времени $t_i \leq t \leq t_{i+1}$ кривая сердечного ритма $y(t)$ дается формулой:

$$y(t) = y_i + (y_{i+1} - y_i) \frac{t - t_i}{t_{i+1} - t_i} \quad (1)$$

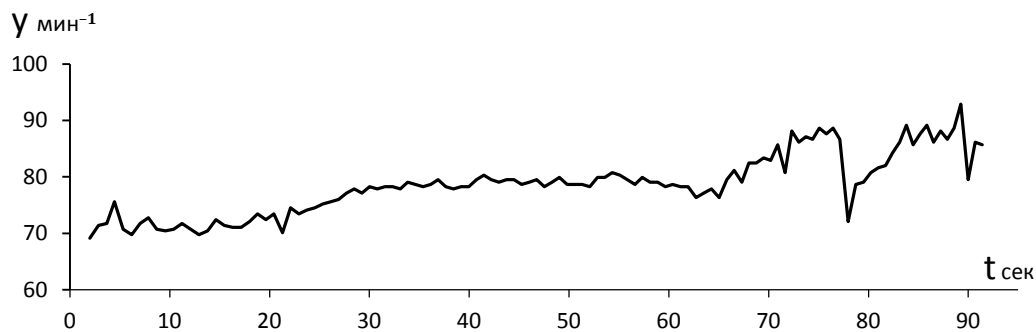


Рисунок 1. Пример кривой MCP $y(t)$

Одним из способов анализа variability сердечного ритма (ВСР) является оценка показателей скаттерограммы, построенной из последовательности RR-интервалов [2].

Сущность этого метода заключается в графическом отображении последовательных пар кардиоинтервалов (предыдущего и последующего) в двухмерной координатной плоскости. График и область точек, полученных таким образом называется скаттерограммой. С помощью данного метода можно анализировать большой объем данных.

В отличие от [2] мы предлагаем анализировать ВСР с помощью скаттерограммы MCP y_i , $i = 1, \dots, n$. Полученные результаты представлены на рис. 2 и рис. 3. На осях рис. 2 и рис. 3 y_i и y_{i+1} имеют размерность мин⁻¹. Количество элементов в исследуемых массивах равно 65 000.

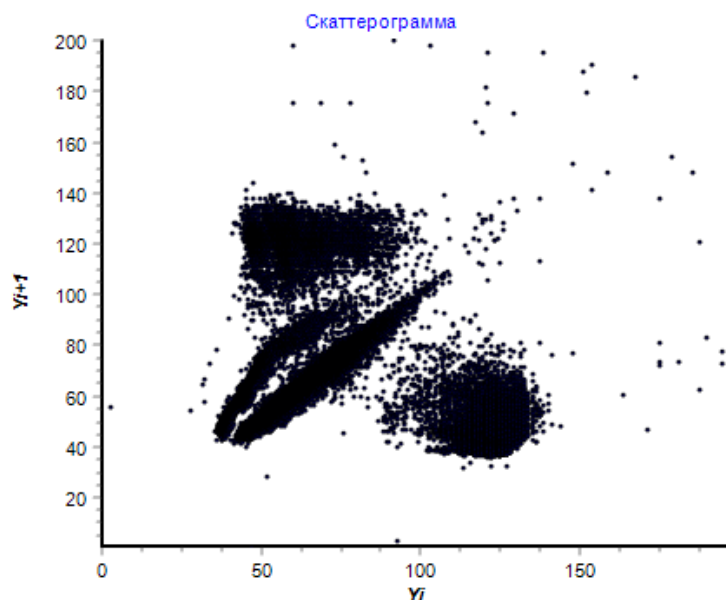


Рисунок 2.

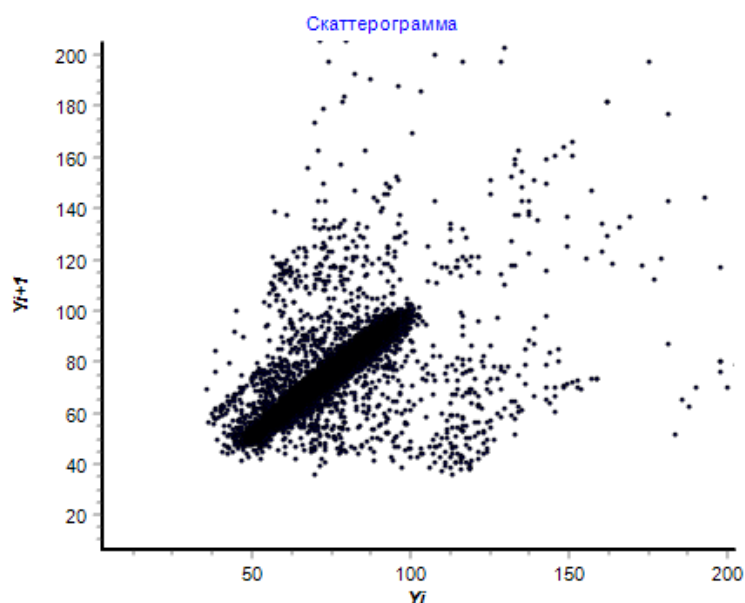


Рисунок 3.

Важнейшим свойством, которым обладают все фракталы – свойство самоподобия (инвариантность относительно изменения масштаба) или же фрактальности. Фрактал можно разбить на сколь угодно малые части так, что каждая часть окажется уменьшенной частью целого. Основным свойством фрактального множества является значение его фрактальной размерности D , которое, как правило, является дробным и характеризует степень сложности структуры данного множества.

Одним из способов вычисления фрактальной размерности является метод box-counting. Для этого выбирается некоторое ограниченное множество в метрическом пространстве, например, скаттерограмма, построенная на рис. 2. Нарисуем на ней равномерную сетку с шагом ε , и закрасим те ячейки сетки, которые содержат хотя бы один элемент исходного множества. Повторяя эту процедуру по некоторым значениям ε и фиксируя на каждом шаге число N закрашенных ячеек, мы получим в дважды логарифмических осях множество точек, представленное на рис. 4.

Зависимость $\ln N$ от $\ln \varepsilon$ для скаттерограммы рис. 3 представлена на рис. 5.



Рисунок 4.



Рисунок 5.

В случае точного фрактала зависимость $\ln N$ от $\ln N$ от $\ln \varepsilon$ имеет вид прямой, угловой коэффициент k которого связан с фрактальной размерностью соотношением $D = -k$ [3].

Достоверность аппроксимации множества точек рис. 4 прямой линией характеризует степень самоподобия МСР, которая в данном случае составляет более 99%. Угловой коэффициент k этого отрезка позволяет найти значение фрактальной размерности. Полученное для скаттерограммы рис. 2 значение $D_1 = 1,415$ с учетом нормировки на треугольник Серпинского не превышает гауссовского значения 1,5, но является достаточно близким к нему. Данный факт указывает на то, что исследуемый нами процесс является в основном детерминированным, но с существенным влиянием случайных факторов. Достоверность аппроксимации множества точек рис. 5 прямой линией составляет более 99%.

Значение фрактальной размерности D_2 для скаттерограммы рис. 3 с учетом нормировки равно 1,156. Полученный результат D_2 оказался существенно меньше, чем значение D_1 . Данный факт указывает на существенное уменьшение хаотичности ритма во втором случае.

Проведенное нами исследование указывает на перспективность использования фрактальных свойств скаттерограмм МСР для функциональной диагностики сердца.

Список литературы

1. *А.Н. Кудинов, Д.Ю. Лебедев, В.П. Цветков, И.В. Цветков.* Математическая модель мультифрактальной динамики и анализ сердечных ритмов. // Математическое моделирование. 2014. Т.26 (в печати).
2. *Р.М. Баевский.* Прогнозирование состояний на грани нормы и патологии. – М.: Медицина. 1979. 205 с.
3. *Ричард М. Крэнвер.* Фракталы и хаос в динамических системах. Основы теории. – Москва: Постмаркет. 2000. 352 с.

ВЫЧИСЛЕНИЕ КONTИНУАЛЬНЫХ ИНТЕГРАЛОВ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ДИФФУЗИИ С ПОМОЩЬЮ МАЛОРАНГОВЫХ АППРОКСИМАЦИЙ

М.С. Лицарев

m.litsarev@skolkovotech.ru

Сколковский институт науки и технологий

Решение уравнения диффузии может быть записано в виде континуального интеграла (формула Фейнмана-Каца). В работе представлен метод вычисления континуальных интегралов такого типа на основе техники малоранговых аппроксимаций (ТТ-разложение) многомерных массивов. Результаты численных экспериментов показывают эффективность и перспективность по скорости и точности предлагаемого метода в сравнении с методом Монте-Карло и квадратурными формулами Смоляка.

КОМПЛЕКСЫ ПРОГРАММ ДЛЯ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЁТОВ НА ВИДЕОКАРТАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ БИБЛИОТЕКИ OPENCL

Д. Мазилкин

mazilkin.dmitry@gmail.com

Московский физико-технический институт

В настоящее время использование видеокарт для решения физических задач получило широкое распространение. В данной работе обсуждается вопрос выбора между языком программирования CUDA и библиотекой OpenCL, перечислены их плюсы и минусы. Основной причиной выбора OpenCL может стать переносимость программного кода. На этапе построения вычислительного алгоритма следует отметить, что данные можно хранить либо в оперативной памяти суперкомпьютера и на каждой итерации загружать часть данных в память видео-ускорителя; либо хранить данные целиком в памяти видео-ускорителя, если размер задачи это позволяет. Второй вариант позволяет получить увеличение производительности в десятки раз для вычисления на видеокарте относительно расчётов на центральном процессоре. Существуют специфические задачи, в которых увеличение производительности может превысить сотню, такие примеры часто используются в книгах по GPGPU чтобы увлечь читателя. Но в численных расчетах задач газовой динамики, как правило, объём начальных данных много больше объёма видео-ускорителя. Поэтому чаще используется первый вариант, когда в память видеокарты данные загружаются частями, способными в ней уместиться. Полученные результаты вычислений показывают ускорение производительности в 5 раз для расчётов на видеокарте относительно вычислений на центральном процессоре. Причем большая часть времени, затрачиваемого на вычисления, тратится на передачу данных в память видео-ускорителя и копирования результатов обратно.

Возникает естественное желание взять лучшее из двух подходов. Сейчас мы работаем над комплексом программ, в котором каждая видеокарта будет получать подобласть расчётной области, целиком уместящуюся в памяти видеокарты. Таким образом, пропадает необходимость на каждой итерации загружать и выгружать всю область из памяти видеокарты. Граничные ячейки подобластей будут передаваться посредством OpenMP (когда это возможно) и MPI. Конечно, не любая задача уместится в памяти видео-ускорителей. Поэтому, мы стремимся создать адаптивный алгоритм. Если размеры расчётной области и количество доступных видеокарт позволяют, то должен использоваться ускоренный алгоритм. В противном случае – более медленный алгоритм, дающий ускорение в 5 раз относительно производительности центрального процессора.

ОСНОВНЫЕ АЛГОРИТМЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ БАЗИСОВ ГРЁБНЕРА

К.Б. Маринов

marinov.kohctahtih@gmail.com

Международный университет природы, общества и человека «Дубна»

В докладе будет дан сравнительный анализ современных алгоритмов вычисления канонической формы для системы многочленов от многих переменных,

которая называется базисом Грёбнера. Слово «базис» присутствует в названии канонической формы, поскольку исходный набор многочленов порождает идеал в соответствующем полиномиальном кольце, а базис Грёбнера является специальной формой базиса этого идеала и поэтому полностью эквивалентен (в смысле значений общих корней многочленов и их кратностей) исходному набору многочленов. Понятие базиса Грёбнера было введено в 1965 году австрийским математиком Б. Бухбергером [1] (впервые в его диссертации на звание доктора философии, PhD). Б. Бухбергер назвал открытую им каноническую форму в честь своего научного руководителя, австрийского математика В. Грёбнера, известного своими результатами в области алгебраической геометрии. В. Грёбнер и поставил перед Б. Бухбергером в качестве темы его диссертационной работы найти такой базис для полиномиального идеала, который бы давал алгоритмический ответ на вопрос о принадлежности заданного многочлена данному идеалу. С этой задачей Б. Бухбергер полностью справился. Более того, он разработал первый алгоритм построения базиса Грёбнера по заданной системе многочленов, названный его именем. Позднее понятие базиса Грёбнера удалось обобщить на системы линейных дифференциальных и разностных многочленов (уравнений) и даже на целые классы таких нелинейных многочленов. В настоящее время метод базисов Грёбнера является незаменимым алгоритмическим инструментом в коммутативной алгебре и алгебраической геометрии, а также мощным компьютерным средством решения научно-технических задач в самых различных областях знаний: робототехнике (решение обратной кинематической задачи), физике высоких энергий (вычисление диаграмм Фейнмана), строительной механике (проектирование строительных конструкций), статистике, теории групп, алгебраической биологии и т.д. Одним из наиболее привлекательных свойств метода базисов Грёбнера является тот факт, что данный метод, будучи полностью алгоритмичным и встроенным во все современные системы компьютерной алгебры общематематического назначения (Maple, Mathematica, Reduce, Magma, SAGE и др.), обобщает метод Гаусса на нелинейные системы. В случае линейных алгебраических систем метод базисов Грёбнера просто воспроизводит метод Гаусса, а в нелинейном случае позволяет привести системы уравнений к треугольному виду.

В данном докладе мы дадим точное определение базиса Грёбнера для алгебраических полиномиальных систем многочленов (уравнений) и сопоставим современные алгоритмы построения базисов Грёбнера:

Алгоритм Бухбергера. Этот алгоритм использует введенное Б.Бухбергером понятие S -полиномов и их редукции, а также два критерия (критерии Бухбергера) частичного обнаружения таких случаев, когда S -полиномы редуцируются к нулю, без выполнения самих редукции, которые являются вычислительно наиболее затратной частью алгоритма. Без критериев алгоритм Бухбергера является непрактичным, ибо требует слишком больших вычислительных ресурсов даже на сравнительно небольших задачах.

Алгоритм Фожера F_4 . Идея этого алгоритма, разработанного французским математиком Ж.-Ш. Фожером [2] состоит в использовании методов линейной алгебры для одновременного выполнения целого ряда редукций S -полиномов (матричная редукция). При эффективной программной реализации это может значительно ускорить построение базисов Грёбнера по сравнению с алгоритмом Бухбергера, в котором последовательно используются редукции отдельных S -полиномов. Алгоритм F_4 встроен в Maple и в ряд других систем компьютерной алгебры (например, в систему Magma).

Алгоритм Фожера F_5 . Основным достоинством этой версии алгоритма построения базисов Грёбнера, также разработанного Ж.-Ш.Фожером [3] является

использование критерия F_5 , установленного автором алгоритма и позволяющего в большинстве случаев обнаруживать все нулевые, и поэтому бесполезные, редукции, а не только те, которые обнаруживают критерии Бухбергера. В сочетании с линейной алгеброй в духе алгоритма F_4 , это потенциально дает самый быстрый алгоритмический путь вычисления базисов Грёбнера. Частичная реализация возможностей этого алгоритма выполнена во внешней для **Maple** библиотеке **FGb** на языке Си, которая создана автором алгоритма и доступна пользователям **Maple**. Имеется также несколько реализаций алгоритма F_5 , которые не используют линейную алгебру.

Инволютивный алгоритм (алгоритм Гердта-Блинкова). Данный алгоритм, разработанный В.П. Гердтом и Ю.А. Блинковым в [4] отличается от вышеупомянутых алгоритмов тем, что переменные в нем для каждого многочлена разбиты на две различные группы – мультипликативные переменные и немultiпликативные. Идея такого разбиения принадлежит французскому математику М. Жане, который использовал ее для приведения в инволюцию систем уравнений в частных производных [5]. При этом редукция производится только по мультипликативным переменным, а остальные – немultiпликативные переменные используются для конструирования S -полиномов определенного типа, редукция которых достаточна для построения базисов Грёбнера специального вида, названных инволютивными. Общая аксиоматическая теория допустимых разбиений переменных, разработанная в [4] позволила создать достаточно эффективную форму инволютивного алгоритма, при которой многие бесполезные S -полиномы вообще не рассматриваются, а кроме того в этот алгоритм допускает использование критерия F_5 [6]. Эти свойства инволютивного алгоритма делают его конкурентно способным с алгоритмами F_4 , F_5 .

Список литературы

1. B. Buchberger. Theoretical Basis for the Reduction of Polynomials to Canonical Forms. // ACM SIGSAM Bull. August 1976. Pp. 19-29.
2. J.-C. Faugère. A new efficient algorithm for computing Gröbner bases (F4). // Journal of Pure and Applied Algebra. June 1999. V.139. Pp. 61-88.
3. J.-C. Faugère. A new efficient algorithm for computing Gröbner Bases without reduction to zero (F5). // Proc. ISSAC'02. ACM Press. 2002. Pp. 75-83.
4. V.P. Gerdt, Yu.A. Blinkov. Involutive bases of polynomial ideals. // Mathematics and Computers in Simulation. 1998. V.45. Pp. 519-542.
5. M. Janet. Les systèmes d'équations aux derives partielles. // Journal de Mathématique. 1920. V. 3. Pp. 65-151.
6. V.P. Gerdt, A. Hashemi, B. M.-Alizadeh. Involutive bases algorithm incorporating F5 criterion. // Journal of Symbolic Computation. 2013. V.59. Pp. 1-20.

ГЕТЕРОГЕННЫЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ КЛАСТЕР HYBRILIT: СТРУКТУРА И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Г. Адам^{1,2}, Д.В. Беляков¹, Л. Вальова^{1,3}, М. Валя^{1,4}, П.В. Зрелов¹,
В.В. Кореньков¹, М.А. Матвеев¹, Д.В. Подгайный¹, О.И. Стрельцова¹
adamg@jinr.ru, dmitry@jinr.ru, jancurova@jinr.ru, mvala@saske.sk, zrelov@jinr.ru,
korenkov@jinr.ru, matveevma@jinr.ru, podgainy@jinr.ru, strel@jinr.ru

¹ Объединённый институт ядерных исследований,
Лаборатория информационных технологий, Россия

² IFIN-НН, Бухарест, Румыния

³ Технический университет Кошице, Словакия

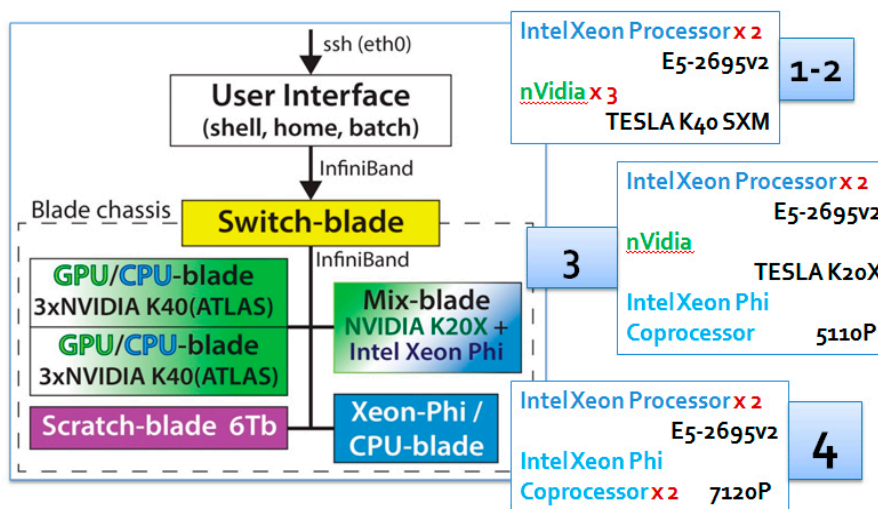
⁴ Институт экспериментальной физики САН в Кошице, Словакия

В работе представлена структура вводимого в эксплуатацию гетерогенного вычислительного кластера HybriLIT [1], являющегося компонентой Многофункционального центра хранения, обработки и анализа данных ЛИТ ОИЯИ. Дано описание установленного программного обеспечения. Кластер HybriLIT содержит четыре вычислительных узла, в том числе два узла с графическими ускорителями NVIDIA Tesla K40 [2], узел с сопроцессорами Intel Xeon Phi 7120P [3], а также узел, содержащий NVIDIA Tesla K20x и сопроцессор Intel Xeon Phi 5110P. Все вычислительные узлы содержат по два процессора Intel Xeon E5-2695v2. Также в состав кластера HybriLIT входят управляющий узел и узел хранения данных.

Гетерогенная структура кластера HybriLIT позволяет проводить расчеты с использованием различных технологий параллельного программирования таких, как MPI [4], CUDA, OpenMP [5], OpenCL и др.

На кластере HybriLIT установлена модульная система управления средой для расчетов, предоставляющая пользователю удобный функционал для использования различных компиляторов и технологий параллельного программирования.

Структура вычислительного комплекса HybriLIT приведена на рисунке. Цифрами 1-2 обозначены узлы для расчетов с использованием графических ускорителей NVIDIA, 3 – узел для тестирования приложений с использованием графического ускорителя NVIDIA или сопроцессора Intel Xeon Phi, 4 – узел для расчетов с использованием сопроцессоров Intel Xeon Phi.



Список литературы

1. Гетерогенный кластер HybriLIT ЛИТ ОИЯИ. URL: <http://hybrilit.jinr.ru>
2. Компания NVIDIA. URL: <http://nvidia.ru>
3. Компания Intel. URL: <http://intel.ru>
4. Open Source High Performance Computing. URL: <http://open-mpi.org>
5. API specification for parallel programming. URL: <http://openmp.org>

О НОВОМ МЕТОДЕ ПОЛУЧЕНИЯ ТРЕКОВ-КАНДИДАТОВ ДЛЯ ЭКСПЕРИМЕНТА ВМ@N

П.Н. Батюк¹, С.П. Мерц¹, Г.А. Ососков², О.В. Рогачевский¹

batyuk@jinr.ru, sergey.merts@gmail.com, gososkov@gmail.com, rogachevsky@jinr.ru

Объединённый институт ядерных исследований

¹ Лаборатория физики высоких энергий им. В.И. Векслера и А.М. Балдина

² Лаборатория информационных технологий

Введение

В экспериментах по физике высоких энергий задача реконструкции событий, то есть восстановления параметров вершин событий и треков частиц, является важной и актуальной. К настоящему моменту для решения этой задачи разработан мощный математический аппарат, основанный на фильтре Калмана [1, 2]. Одним из узких мест данного подхода является необходимость перебора огромного числа хитов (реконструированных откликов детектора на прохождение через него частиц) для получения начальных приближений параметров треков заряженных частиц (нахождение треков-кандидатов).

В данной работе представлен новый подход к данной проблеме, значительно снижающий комбинаторику (число переборов хитов).

Координатное преобразование хитов

На рис. 1 представлено распределение хитов в пространствах $\{Y, Z\}$ и $\{X, Z\}$, полученное путем моделирования прохождения заряженных частиц через ГЕМ-станции детектора ВМ@N [3]. Моделирование реализовано в программном комплексе VmnRoot [4]. Из представленных распределений практически невозможно сгруппировать хиты, относящиеся к одному треку. Представление хитов в поперечной плоскости (см. рис. 2) не сильно улучшает картину. Поэтому в стандартном подходе приходится реализовывать перебор различных вариантов.

Предложенный в работе метод поиска треков-кандидатов основывается на отображении координат частиц из пространства $\{X, Y\}$ в пространство $\{X/R, Y/R\}$ (см. рис. 3), где R – радиус-вектор в трехмерных координатах, а X и Y – поперечные координаты частицы.

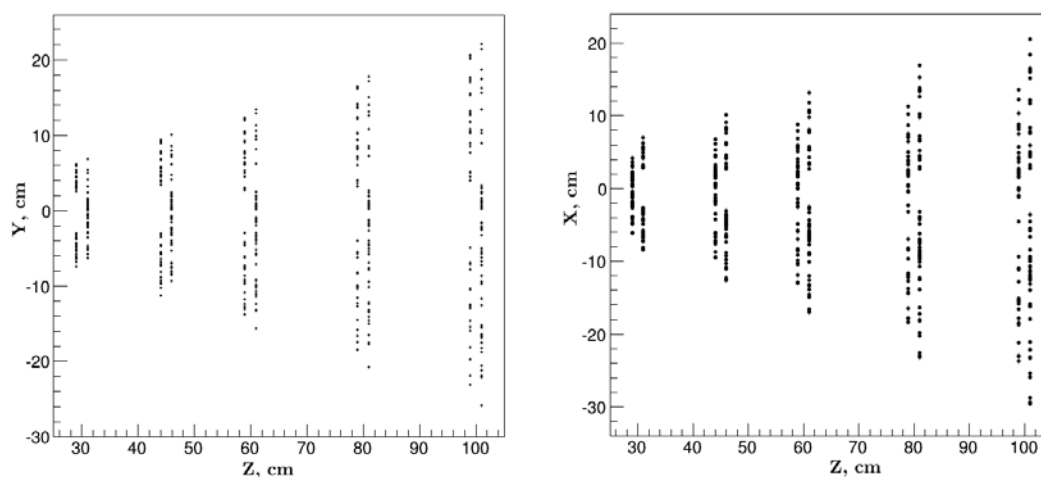


Рисунок 1. Распределение хитов в пространствах $\{Y, Z\}$ и $\{X, Z\}$

Данное преобразование позволяет представить криволинейные траектории частиц в виде коротких горизонтальных отрезков, которые проще и быстрее распознать, то есть найти хиты, принадлежащие каждому из треков.

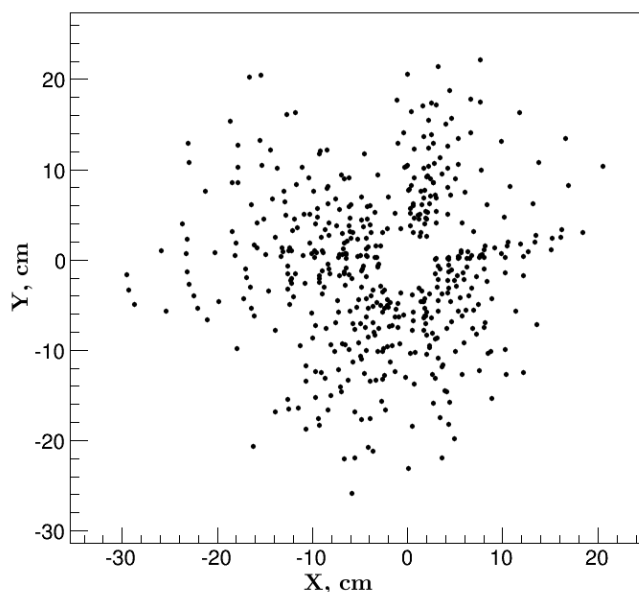


Рисунок 2. Распределение хитов в пространстве $\{X, Y\}$

Найденные хиты аппроксимируются окружностями с помощью метода быстрой робастной подгонки [5, 6]. Введение весовых коэффициентов по степени принадлежности хитов той или иной координатной плоскости позволяет итерационно исключать хиты, лежащие далеко от полученной окружности, что делает метод более эффективным и гибким.

Далее, из полученных окружностей извлекаются начальные приближения параметров треков, которые передаются процедуре калмановской фильтрации.

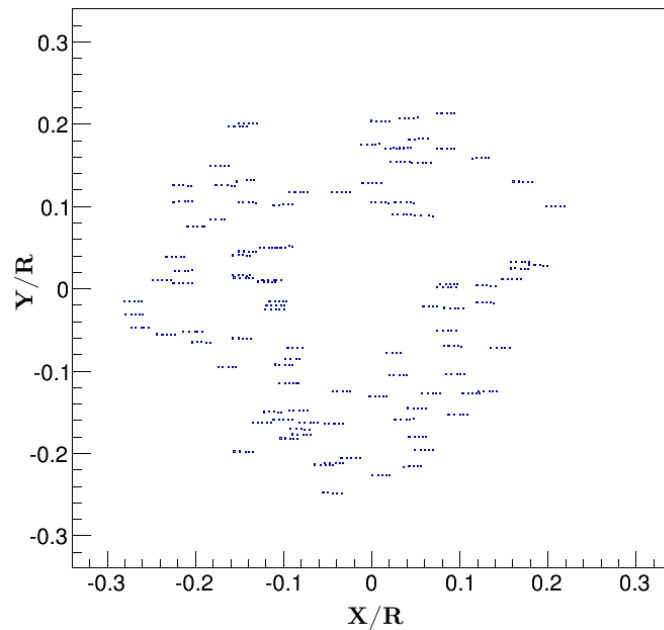


Рисунок 3. Распределение координат частиц в пространстве $\{X/R, Y/R\}$

Результаты

На примере данных, смоделированных для трекового детектора эксперимента BM@N, проведена оптимизация алгоритмов поиска треков-кандидатов. Эффективность работы алгоритма реконструкции представлена на рис. 4. Предложенный метод, совместно с использованием фильтра Калмана, показывает достаточно высокую эффективность для широкого диапазона импульсов. Одним из способов улучшения точности и скорости реконструкции является использование аппроксимации карты магнитного поля [7].

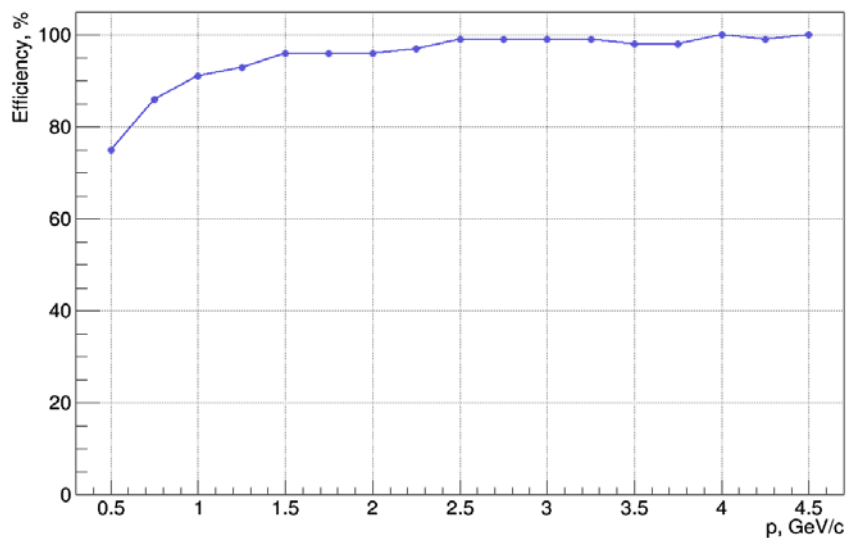


Рисунок 4. Эффективность распознавания треков.

Заключение

В представленной работе предложен новый метод поиска треков-кандидатов для эксперимента BM@N. Данный метод позволяет избежать большого числа переборов хитов и ускорить процедуру реконструкции событий.

Список литературы

1. R. Fruehwirth. Application of Kalman filtering to track and vertex fitting. // Nucl. Instrum. Meth. A 262 (1987) 444.
2. A. Lebedev, G. Ososkov. Track reconstruction in the CBM TRD. // JINR Communication E10-2008-3, Dubna (2008).
3. BM@N collaboration. BM@N proposal for JINR-PAC Meeting in January 2012. 28 p.
4. BmnRoot framework. URL: <http://mpd.jinr.ru>
5. N.I. Chernov, G.A. Ososkov. Effective algorithms for circle fitting. // Journal of Computer Physics Communications. 1984. V.33(4). Pp.329-333.
6. Г. А. Ососков, А. Полянский, И. В. Пузынин. Современные методы обработки экспериментальных данных в физике высоких энергий. // ЭЧАЯ. 2002. Т.33. №3. С. 676-741.
7. П.Н. Батюк, С.П. Мерц. Экстраполяция карты магнитного поля дипольного магнита SP41 эксперимента BM@N. // МРАМС-2014, краткое сообщение.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВЕЙВЛЕТ-ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ АУДИОИДЕНТИФИКАТОРА МУЗЫКАЛЬНЫХ ПРОИЗВЕДЕНИЙ

А.В. Павлюкова

anna.pavlyukova@inbox.ru

Международный университет природы, общества и человека «Дубна»

Введение

Данная работа посвящена распознаванию аудиофайлов. В ней представлен подход, использующий вейвлеты, для распознавания аудиофайлов. Программа, реализованная в ходе исследования, и основанная на использовании вейвлетов, обладает хорошими возможностями для идентификации аудио-фрагментов, даже тех, что были искажены в различных вариантах, в том числе в результате шума или плохого качества записи.

Основная часть

В основу работы положен алгоритм распознавания аудио файлов, разработанный в Shazam Entertainment, Ltd [1]. Основной принцип работы этого алгоритма заключается в том, что сравниваются «отпечатки» аудио файлов, основанные на спектрограммах. В целях решения проблемы надежной идентификации в присутствии весьма значительного шума и искажений были проведены эксперименты с различными характеристиками кандидата, которые могут сохраниться при GSM кодировании в присутствии шума. В качестве таких характеристик выбраны пики спектрограммы. Частотно-временная точка является пиком кандидата, если она имеет более высокое содержание энергии, чем все ее соседи в области вокруг данной точки. Пики кандидата выбираются в зависимости от критерия плотности, чтобы гарантировать, что частотно-временная полоса для звукового файла имеет достаточно равномерное покрытие. Пики в каждой частотно-временной области также выбираются в зависимости от амплитуды, на основании того, что самые высокие по амплитуде пики, скорее всего сохраняются даже в условиях искажения.

Таким образом, сложная спектрограмма может быть уменьшена до редкого набора координат. Список разреженных координат называется «картами созвездий». Узор из точек должен быть одинаковым для совпадающих сегментов звука.

Количество совпадающих точек будет значительным в присутствии ложных

пиков, возникающих из-за шума, поскольку позиции пиков относительно независимы, более того, количество совпадений может быть значительным, даже если многие из правильных точек были удалены.

Для каждого из пиковых значений Shazam отслеживает частоту и промежуток времени от начала трека. Shazam строит свой каталог отпечатков в виде хэш-таблицы, в который роль ключа исполняет значение частоты.

Если у песни выявлено несколько совпадений, тогда проверяют соответствие частот по времени.

В представленной работе предложено заменить Фурье преобразование, с помощью которого строится спектрограмма, на вейвлет-преобразование, а после повторить алгоритм поиска пиков и сравнения аудиофайлов. Но простое использование вейвлет-преобразования не дает упорядоченного изображения, для решения этой проблемы предлагается использовать вейвлет-пакеты.

Использование вейвлет-пакетов позволяет добиться равномерности ячеек разбиения частотно-временной плоскости, в отличие от стандартного вейвлет-разложения. Таким образом, получаем, упорядочив слои вейвлет-разложения по частоте, картину, сравнимую с оригинальной спектрограммой, получаемой в Shazam – см. рис. 1 и рис. 2

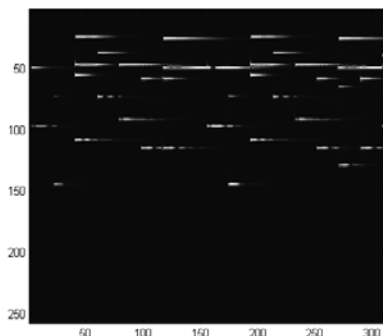


Рисунок 1. Оригинальная спектрограмма

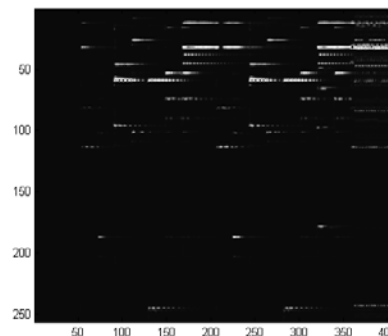


Рисунок 2. Спектрограмма вейвлет-преобразования.

Воспользовавшись алгоритмом поиска пиков, аналогичным тому, что используется в Shazam, мы получили представление пиков схожее с представлением пиков в оригинальном алгоритме, но с преобладанием в низких частотах. Также, из-за очевидной нецелесообразности использования размытия по Гауссу для вейвлет-преобразования, был получен отпечаток с большим количеством неразрезанных пиков.

Вопрос равномерного распределения пиков является предметом дальнейшего исследования.

Преимущество использования вейвлет-преобразования – увеличение обобщающей способности алгоритма для записей с явно выраженными преобладающими низкими частотами, потому что такие записи – это текущее слабое место стандартного алгоритма.

Алгоритм с использованием вейвлет-преобразования показал высокую помехоустойчивость, сравнимую с оригинальным алгоритмом Shazam и даже превосходящую его на некоторых тестах.

Заключение

В ходе работы была реализован алгоритм поиска пиков на основе вейвлет-преобразования.

Улучшены возможности программы Shazam по распознаванию аудиовайлов с преобладанием низких частот. Увеличено количество найденных пиков, за счет пиков,

находящихся в области низких частот. Время выполнения реализованного алгоритма сравнимо с временем оригинального алгоритма. В данный момент проводится дальнейшая оценка алгоритма и его оптимизация.

Список литературы

1. Avery Wang. An Industrial-Strength Audio Search Algorithm. // Proc. 2003 ISMIR International Symposium on Music Information Retrieval, Baltimore, MD, Oct. 2003.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА МУЛЬТИПОЛЕЙ К МОДЕЛИРОВАНИЮ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ В ЛАЗЕРЕ

А.Б. Пальцев

serbez@yandex.ru

Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН

Моделирование электрического поля в газовых лазерах специальной конструкции, разрабатываемой в ФИАН, сводится к решению задачи Дирихле для уравнения Лапласа в области поперечного сечения лазера. Отличительной особенностью этой конструкции является то, что на каждом из электродов (катоде и аноде) электрический потенциал не постоянен, а на дне электрода задается в виде некоторой непрерывной функции. За счет выбора этой функции предполагается повысить эффективность накачки лазера.

Для эффективного решения указанной краевой задачи применен метод мультиполей [1], обеспечивший быстрое и высокоточное вычисление электрического потенциала и ее градиента, в том числе вблизи криволинейного дна электрода сложной формы.

Изучаемая краевая задача для гармонической функции $\Phi(z)$ на комплексной плоскости $z = x + iy$, ставится в (двумерной) односвязной области, представляющей собой верхнюю половину поперечного сечения электрода, т.е. $g = H \setminus (D \cup \partial D)$, где $H := \{ \operatorname{Im} z > 0 \}$ – верхняя полуплоскость, а область D представляет собой деформированную вертикальную полосу (профиль одного из электродов), граница которой состоит из трех звеньев: $\partial D = \Gamma^- \cup \Gamma \cup \Gamma^+$; здесь Γ^+ и Γ^- суть правая и левая стороны данного электрода, т.е. $\Gamma^\pm := \{ x = \pm a, y \in [b, +\infty) \}$, а Γ – дно электрода; она представляет собой гладкую дугу, для точек которой выполняются соотношения $\operatorname{Im} z > 0, |\operatorname{Re} z| < a$. Таким образом, граница области g является объединением $\partial g = R \cup \Gamma^- \cup \Gamma \cup \Gamma^+$, где $R = \partial H$. Для гармонической функции $\Phi(z)$, представляющей собой распределение электрического потенциала в области g (половине поперечного сечения лазера), ставятся следующие краевые условия: $\Phi(z) = 0, z \in R$; $\Phi(z) = \varphi_1, z \in \Gamma^-$; $\Phi(z) = \varphi_2, z \in \Gamma^+$; $\Phi(z) = \varphi(z), z \in \Gamma$. Здесь φ_1 и φ_2 – постоянные величины, а функция $\varphi(z)$ непрерывна на Γ , причем $\varphi(-a + ib) = \varphi_1$ и $\varphi(a + ib) = \varphi_2$. Решение Φ поставленной задачи ищется в классе $C^2(g) \cap Cg \setminus (A^+ \cup A^-) \cap L_\infty(g)$, где через A^+ и A^- обозначены (бесконечные) точки пересечения R и, соответственно, Γ^+ и Γ^- .

Численные эксперименты показали высокую эффективность и экспоненциальную скорость сходимости метода мультиполей [1] при различных

формах дуги Г.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (№ 13-01-00923).

Список литературы

1. В.И. Власов. Краевые задачи в областях с криволинейной границей. – М.: ВЦ АН СССР. 1987.

МОДЕЛЬ ДОРОЖНОГО ДВИЖЕНИЯ НА ОСНОВЕ РАСШИРЕННОЙ СЕТИ ПЕТРИ

М.А. Петров¹, Н.М. Ершов²

frein@mail.ru, ershovnm@gmail.com

¹ Международный университет природы, общества и человека «Дубна»

² Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Введение

Рассматривается задача построения микроскопической [1] модели дорожного движения на основе расширенных сетей Петри [2, 3]. Отличительным свойством разрабатываемой модели является поддержка ею не только качественного, но и количественного описания поведения различных конфигураций. В частности, речь идет о скоростных и временных характеристиках дорожного движения. Предполагается также, что модель будет поддерживать реальную геометрию той местности, в которой осуществляется движение транспорта.

1 Прототип

Предполагается, что схема дорожного движения представляет собой набор дорог. Каждая дорога представляет собой некоторую кривую (известно ее расположение на местности), которая делится на несколько участков с фиксированной максимально разрешенной скоростью движения транспорта (рис. 1).

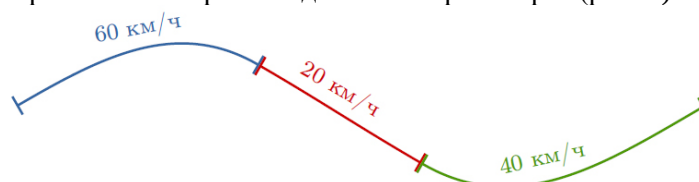


Рисунок 1. Пример дороги, содержащей несколько участков с различными скоростными режимами

Точки соединения нескольких дорог будем называть узлами (перекрестками, рис. 2).

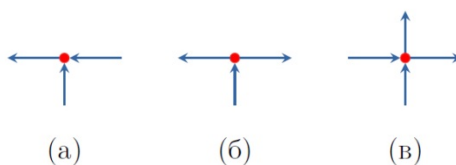


Рисунок 2. Примеры некоторых возможных дорожных узлов:

а) Т-образный перекресток; б) развилка; в) более сложный узел

2 Сеть Петри

Преобразование схемы движения в сеть Петри выполняется следующим образом. Каждый линейный участок дороги (с фиксированной скоростью движения)

делится на короткие сегменты длины l_0 . Этот параметр выбирается таким образом, чтобы на сегменте длины l_0 могла располагаться ровно одна машина. Каждому построенному таким образом сегменту устанавливается в соответствие одно место сети Петри.

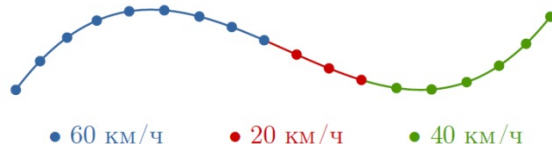


Рисунок 3. Преобразование линейного участка пути в последовательность мест сети Петри

Каждое k -ое место сети Петри характеризуется следующими параметрами: координатами концов соответствующего сегмента; длиной l_k этого сегмента; максимально разрешенной скоростью $v_{\max,k}$; временем t_k прохождения машиной данного сегмента с заданной скоростью.

Машины в рассматриваемой модели представляются метками сети Петри. Метки располагаются в местах сети Петри и в процессе эволюции сети перемещаются из одного места в другое с помощью переходов. Движение машины с заданной скоростью моделируется следующим образом. Предполагается, что один шаг эволюции сети Петри соответствует фиксированному интервалу времени τ . Когда машина перемещается в k -ое место, она становится неактивной на число тактов n_k , примерно равное величине t_k/τ . После истечения этого времени машина становится активной и может быть перенесена каким-нибудь переходом в следующее место.

Переходы служат для перемещения машин-меток между местами сети Петри. Каждый переход может быть в активном или пассивном состоянии. Если переход является активным, то он может сработать и его срабатывание сводится к перемещению одной из машин. Активность того или иного перехода определяется его типом. В настоящее время реализованы следующие типы переходов: источник, сток, стандартный переход, развилка.

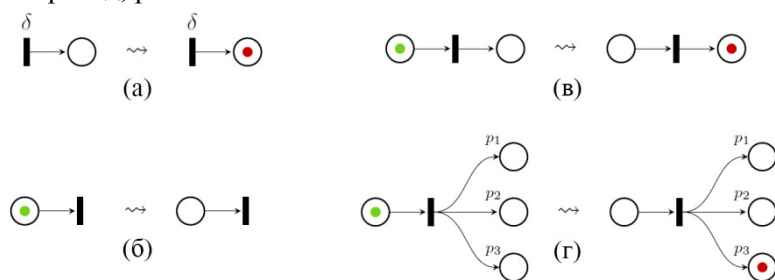


Рисунок 4. Переходы: а) источник; б) сток; в) стандартный; г) развилка

Переход-источник не имеет входного места и имеет одно выходное место (рис. 4а). Такой переход служит точкой появления в системе новых машин и характеризуется средним временем δ появления на нем новой машины. Переход этого типа является активным всегда. Работа перехода заключается в генерации с вероятностью $p = \tau/\delta$ в своем выходном месте новой машины на каждом шаге эволюции системы. Срабатывание перехода выполняется при условии, что выходное место является свободным.

У перехода-стока напротив, нет выходного места, но есть одно входное место (рис. 4б). Переход является активным, если на его входном месте есть активная метка. Работа перехода сводится к изъятию этой метки из системы. Таким образом, сток соответствует точке выхода машин за пределы рассматриваемой схемы движения.

Стандартный переход связывает два места – входное и выходное (рис. 4в). Этот тип переходов служит для перемещения меток между соседними местами сети Петри, что соответствует перемещению машин вдоль дорог. Стандартный переход является активным, если на его входном месте имеется активная метка. Работа перехода заключается в переносе метки на выходное место, если оно является свободным.

Переход-развилка соединяет одно входное место с несколькими выходными (рис. 4г). Как и в предыдущем случае, переход является активным, если на его входе имеется активная метка. Работа перехода-развилки заключается в переносе метки на одно из его выходных мест. Выбор выходного места для переноса метки осуществляется вероятностным образом. Для этого каждому i -ому выходному месту приписывается вероятность p_i выбора этого места. Сам выбор в этом случае выполняется с помощью метода рулетки.

3 Численное исследование линейной модели

На основе описанной модели была разработана программа на языке Python, с помощью которой было проведено численное исследование простой линейной модели дорожного движения. Рассматривалась дорога, состоящая из двух участков, на первом участке (длиной 400 м) разрешенная скорость 60 км/ч, на втором (100 м) – u км/ч. Частота появления машин равна ω (машин в секунду). В случае, когда частота появления машин достаточно мала (не происходит образования пробки) средняя скорость движения машины по данной дороге вычисляется по формуле

$$\tilde{v} = \frac{150u}{2u + 30}.$$

На рис. 5 показана зависимость средней скорости машин в системе за время $t = 1000$ от скорости u медленного участка дороги. Маркерами отмечены численные результаты для двух случаев частоты ω : 1) $\omega = 0.5$ – маркеры синего цвета; 2) $\omega = 1.0$ – маркеры красного цвета. Кроме того, сплошной линией показана теоретическая зависимость $\tilde{v}(u)$.

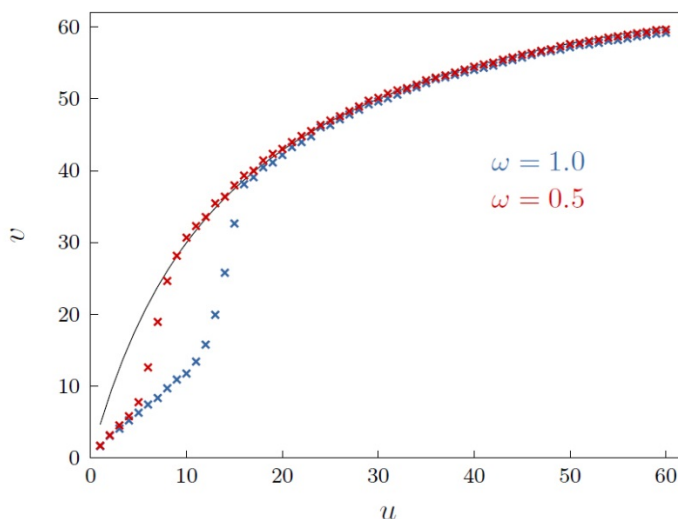


Рисунок 5. Зависимость средней скорости движения машин от скорости u медленного участка пути

Из графика видно, что при относительно больших значениях скорости u средняя скорость машин хорошо согласуется с теоретической оценкой $\tilde{v}(u)$. Когда же скорость u становится низкой, происходит образование пробки, что приводит к увеличению

времени движения машин на первом участке дороги и, как следствие, к уменьшению средней скорости на всей дороге.

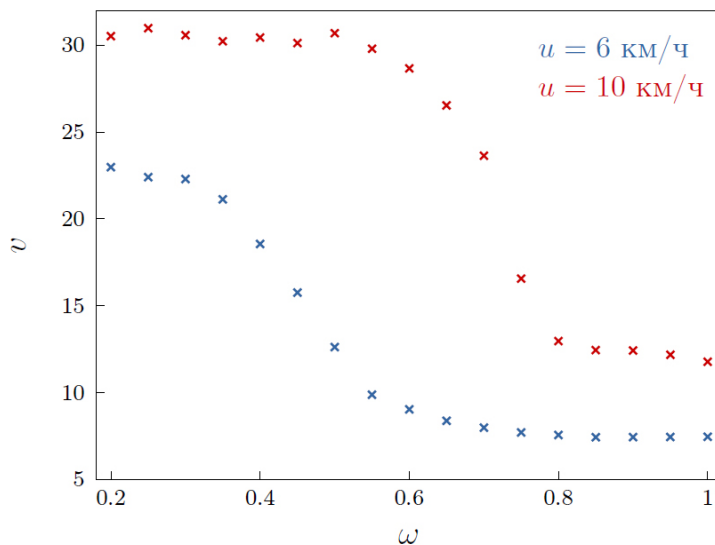


Рисунок 6. Зависимость средней скорости движения машин от частоты ω появления новых машин

На рис. 6 показана зависимость средней скорости машин на той же дороге от частоты ω появления новых машин для двух значений скорости u . Видно, как при увеличении частоты происходит переход от одного режима движения (без пробки) к другому (с пробкой). В первом режиме машины движутся со средней скоростью $\tilde{v}(u)$, а во втором – со скоростью, определяемой скоростью u медленного участка дороги.

Заключение

В результате выполненной работы получены следующие результаты: построена модель дорожного движения на основе расширенной сети Петри с учетом привязки модели к схеме дорожного движения; рассмотрено несколько типов соединения мест сети Петри с помощью переходов; приведены результаты численного исследования построенной модели на примере образования пробки на линейном участке дороги. В дальнейшем предполагается расширить представленную модель другими типами переходов (соединения, светофоры и т.п.).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №14-07-00628 А).

Список литературы

1. S.P. Hoogendoorn, P.H.L. Bovy. State-of-the-art of vehicular traffic flow modelling. // J. Syst. Cont. Eng. 2001. V.215(4). Pp. 283-303.
2. Дж. Питерсон. Теория сетей Петри и моделирование систем. – М.: Мир. 1984.
3. В. Котов. Сети Петри. – М.: Наука. 1984.

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ КВАЗИЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НА ГЕТЕРОГЕННЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ

М.И. Зуев¹, М.А. Матвеев¹, В.А. Петрова²

zuevma@jinr.ru, matveevma@jinr.ru, lerysik283@gmail.com

¹ Объединённый институт ядерных исследований,
Лаборатория информационных технологий

² Международный университет природы, общества и человека «Дубна»

Разработаны параллельные алгоритмы и их программные реализации для численного решения начально-краевой задачи для квазилинейного двумерного уравнения теплопроводности. Для численного решения смешанной задачи строилась экономичная разностная схема – локально-одномерная схема [1].

Разработанные программные модули предназначены для проведения расчетов на гетерогенных вычислительных системах. Параллельные алгоритмы были реализованы с применением технологий CUDA – для проведения расчетов на системах с графическими процессорами NVIDIA [2], OpenMP – для расчетов на многоядерных вычислительных системах [3], OpenMP с расширениями – для расчетов на системах с сопроцессорами Intel Xeon Phi [4, 5].

На ряде модельных задач проведен сравнительный анализ эффективности разработанных параллельных модулей с целью выбора оптимальной архитектуры для решения конкретных прикладных задач, например, при исследовании теплофизических процессов протекающих в анизотропных материалах.

Расчеты проводились на гибридном вычислительном кластере K100 (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН) [6] и гетерогенном вычислительном кластере HybriLIT (ЛИТ ОИЯИ) [7].

Работа выполнена при частичной поддержке грантов РФФИ № 14-01-31227 мол_а, ОИЯИ № 14-602-03.

Список литературы

1. А.А. Самарский. Введение в теорию разностных схем. – М.: Наука. 1971. 552 с.
2. Компания NVIDIA. URL: <http://nvidia.ru>
3. API specification for parallel programming. URL: <http://openmp.org>
4. Компания Intel. URL: <http://intel.ru>
5. J. Jeffers, J. Reinders. Intel Xeon Phi Coprocessor High Performance Programming. – Morgan Kaufmann. 2013. 409 p.
6. Гибридный вычислительный кластер K100, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. URL: <http://www.kiam.ru/>
7. Гетерогенный кластер HybriLIT ЛИТ ОИЯИ. URL: <http://hybrilit.jinr.ru>

ОБ ОДНОМ СВОЙСТВЕ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЯ, МОДЕЛИРУЮЩЕГО НЕКОТОРЫЕ ХИМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ

С.В. Пикулин

spikulin@gmail.com

Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН

Рассматривается квазилинейное уравнение второго порядка типа «диффузия – реакция», возникающее [1-2] при моделировании некоторых химических

процессов.

Пусть $\omega \subset \mathbb{R}^3$ – ограниченная область с липшицевой границей $\partial\omega = \gamma \cup \Gamma$, где γ и Γ – липшицевы поверхности, $\gamma, \Gamma \neq \emptyset$. Рассмотрим следующую смешанную краевую задачу:

$$\begin{cases} \Delta\theta(x) - a_0\theta(x)^q = 0 & \text{в } \omega, \\ \theta(x) = \theta_1 & \text{на } \Gamma, \\ \frac{\partial\theta(x)}{\partial\vec{n}} = 0 & \text{на } \gamma, \end{cases}$$

где Δ – оператор Лапласа в $\mathbb{R}^3 \ni x = (x_1, x_2, x_3)$, коэффициент $a_0 > 0$ не зависит от x , показатель q положителен, $\theta_1 = \text{const} > 0$; $\frac{\partial\theta(x)}{\partial\vec{n}}$ – производная $\theta(x)$ по направлению внешней нормали к γ . Под решением уравнения понимается неотрицательная функция $\theta(x)$ из класса Соболева $W_2^1(\omega)$, удовлетворяющая интегральному тождеству.

Характерным свойством решения $\theta(x)$ в случае $q \in (0,1)$, является то, что оно может обращаться в нуль на некотором открытом подмножестве области, то есть обладать так называемой «мертвой зоной» [3]. При этом носитель решения ($\text{supp } \theta$) лежит в окрестности множества Γ , размер которой можно оценить [3] величиной

$$R = c_0\theta_1^{(1-q)/2},$$

где $c_0 > 0$ зависит только от q, a_0 .

Предположим, что $q \in (0,1)$, и, кроме того, поверхность Γ целиком содержится в шаре радиуса $\rho > 0$ с некоторым центром O . Тогда можно указать [4] такое число $r > 0$:

$$r = \max \left\{ \left(1 + \frac{2}{1-q} \right) \rho ; c_1 (\rho \theta_1)^\tau \right\}, \quad \tau = 1 - \frac{2}{3-q},$$

с некоторой константой $c_1 > 0$, зависящей только от q, a_0 , что решение обращается в нуль за пределами концентрического шара $B(O, r)$ радиуса r :

$$(\text{supp } \theta) \subset B(O, r).$$

Последнее включение может накладывать более сильное условие на расположение носителя ($\text{supp } \theta$), чем условие его принадлежности R -окрестности Γ .

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 13-01-00923) и программы № 3 фундаментальных исследований ОМН РАН.

Список литературы

1. R. Aris. The mathematical theory of diffusion and reaction in permeable catalysts. – Oxford: Carledon Press, 1975.
2. C. Bandle, R.P. Sperb, I. Stakgold. Diffusion and reaction with monotone kinetics. // Nonlinear Anal. 1984. V.8. №4. Pp. 321-333.
3. J.I. Diaz. Nonlinear partial differential equations and free boundaries. Vol. 1: Elliptic equations. Research Notes in Mathematics. Vol 106. Boston: Pitman, 1985.
4. S.V. Pikulin. Behavior of solutions of semilinear elliptic equations in domains with complicated boundary. // Russian J. Math. Physics. 2012. V.19. №3. Pp. 401-404.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ТЕЧЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАСЧЕТНЫХ СЕТОК, АДАПТИРОВАННЫХ К ПОЛОЖЕНИЮ РАЗРЫВОВ

А.В. Плёткин

golden_dragon_84@mail.ru

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

Для расчета газодинамических течений широко используются методы сквозного счета. Их универсальность находится вне конкуренции, поскольку эти методы не требуют учета информации о положении разрывов. Однако такой подход приводит к размазыванию разрывов, что может негативно сказываться на качестве расчета. Кроме того, часто именно положение ударных волн в течении представляет специальный интерес. Отсюда возникает обратная задача – локализовать и классифицировать разрывы в поле, полученном в расчете. До последнего времени эта задача решалась в «ручном» режиме после завершения расчета. Задача локализации разрывов в поле, заданном на дискретном множестве точек, в общем случае не разрешима, но, учитывая специфику рассматриваемых задач, в частности то, что разрывы функций газодинамических величин представляются в виде набора кусочно-гладких кривых (поверхностей), можно надеяться получить результат с достаточной для приложений точностью. В данной работе предполагается, что функции газодинамических величин могут быть представлены в виде разложения по базису вейвлетов. В настоящее время, возникает необходимость проводить алгоритмическую локализацию непосредственно во время расчета для построения адаптивных сеток и повышения качества расчета. Эффективность применения адаптивных сеток ярко продемонстрирована в [1]. Используемые в этих целях алгоритмы должны быть универсальны (применимы к любым расчетным данным) и не должны требовать для каждого класса течений индивидуальной настройки.

В работе рассматривается алгоритм (подробно изложенный в [2]) соответствующий указанным требованиям. В качестве исходных данных используются результаты расчета полей плотности и давления, заданных в узлах расчетной сетки. Сетка состоит из ячеек, которые задаются координатами узлов, являющимися их вершинами, и гранями. В результате обработки расчета каждому узлу сетки сопоставляется число, которое характеризует течение в окрестности узла (нет разрывов, ударная волна, контактный разрыв, волна разрежения и т.д.). Особенностью метода является то, что он не требует тонкой настройки (одни и те же пороги чувствительности и наборы фильтров могут применяться для множества различных задач), что позволяет использовать его в автоматическом режиме. В то же время возможность тонкой настройки также заложена в алгоритм, что позволяет получить более качественные результаты в постобработке [3]. Также был разработан набор фильтров, позволяющий избавиться от большей части артефактов [2].

Для оценки эффективности использования разработанного алгоритма рассматривается задача о сверхзвуковом обтекании клина. Неадаптивный расчет на сетке, содержащей 80×64 ячеек, занимает 5 минут, однако разрывы в расчете сильно размазываются (рис. 1).

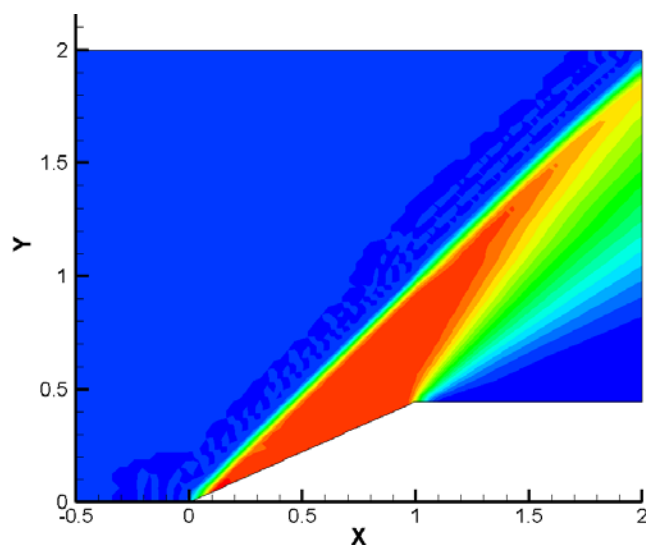


Рисунок 1. Распределение плотности в расчете на сетке, содержащей 80×64 ячеек.

Качество расчета можно повысить за счет измельчения сетки, однако расчет на вдвое более мелкой сетке (рис. 2) занимает уже 45 минут. На практике подобное замедление часто недопустимо.

Однако в задачах установления качество расчета можно повысить, если сначала провести расчет на грубой сетке, затем локализовать положение разрывов в расчете, измельчить сетку в окрестности разрывов и досчитать установление (рис. 3). При этом расчетное время для рассматриваемой задачи увеличивается лишь на несколько минут.

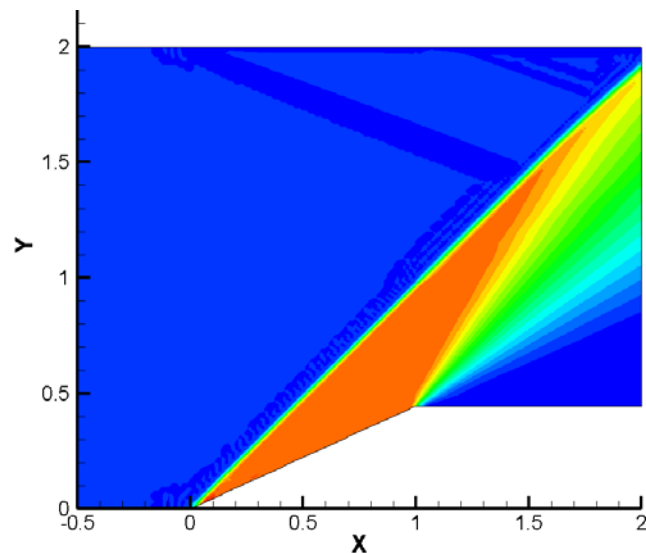


Рисунок 2. Распределение плотности в расчете на сетке, содержащей 160×128 ячеек.

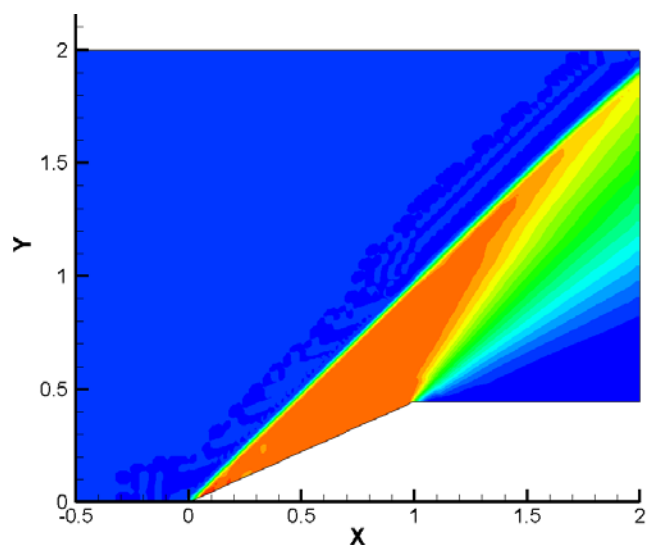


Рисунок 3. Распределение плотности в расчете адаптированном к положению сильных разрывов (сетка в окрестности разрывов в 2 раза мельче).

Используя адаптивный подход можно еще больше мельчить сетку и повышать качество расчета (рис. 4). Аналогичный неадаптивный расчет занял бы уже порядка 6 часов.

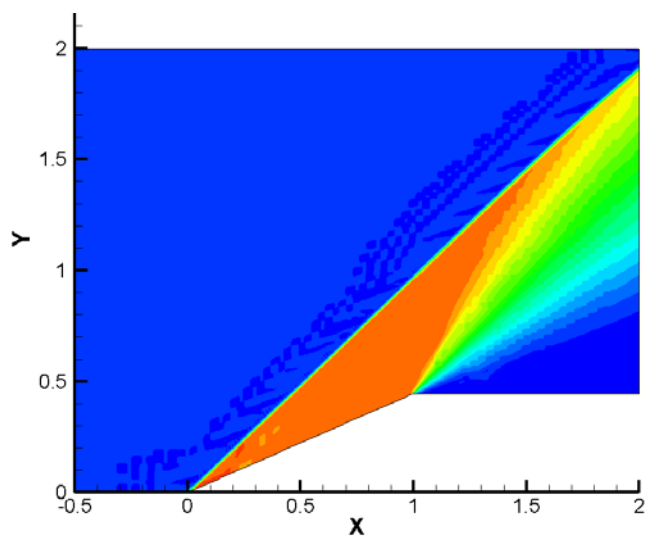


Рисунок 4. Распределение плотности в расчете адаптированном к положению сильных и слабых разрывов (сетка в окрестности разрывов в 4 раза мельче).

Таким образом, разработанный алгоритм локализации особенностей может эффективно использоваться для ускорения и повышения качества расчета за счет использования расчетных сеток, адаптированных к положению разрывов.

Список литературы

1. В.И. Мажукин, А.А. Самарский, О. Кастельянос, А.В. Шапранов. Метод динамической адаптации для нестационарных задач с большими градиентами. // Математическое Моделирование. 1993. Т.5. № 4. С. 32-56.
2. А.Л. Афендииков, А.Е. Луцкий, А.В. Плёткин. Вейвлетный анализ локализованных структур в идеальной и вязкой моделях. // Математическое Моделирование. 2011. Т.23. №1. С. 41-50.

3. *А.Л. Афендииков, А.Е. Луцкий, А.В. Плёткин.* Многомасштабный анализ особенностей газодинамических полей. Препринт Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, №98, 2008г.

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГАЗОВОГО ПОТОКА С МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ СТЕНКОЙ

В.О. Подрыга¹, В.В. Жаховский², С.В. Поляков¹

pvictoria@list.ru, polyakov@imamod.ru

¹ Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

² ФГУП Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики
им. Н.Л. Духова

Введение

Настоящая работа посвящена молекулярному моделированию взаимодействия газового потока с металлической стенкой в целях определения параметров граничных условий, используемых в макроскопических моделях газовой динамики. Актуальность проблемы состоит в том, что при моделировании низкоразмерных технических систем, включающих микроканалы, по которым течет жидкость или газ, обычно неизвестны условия и параметры взаимодействия флюидов со стенками каналов. Стандартные граничные условия прилипания или скольжения к сожалению могут сильно искажать истинную картину течения. Поэтому наиболее адекватным является расчёт свойств взаимодействия из первых принципов, например, с помощью методов молекулярной динамики (МД) [1-4].

В данной работе предлагается численная процедура расчёта базы данных, содержащей параметры граничных условий, применительно к газовым смесям водорода и азота, а также хром-никель-железистых сплавов, используемых в качестве материалов стенки. Внимание именно к этим веществам связано с тем, что они наиболее часто используются в технических микросистемах. В рассматриваемом случае речь идет о системах холодного сверхзвукового напыления наночастиц на подложки. Подающая частицы техническая система включает в себя резервуары, сопла и микроканалы, изготовленные из вышеупомянутых сплавов, а газовый поток обычно является смесью водорода и азота. В работе предложена модель, алгоритм и компьютерная параллельная реализация расчёта параметров граничных условий в зависимости от микро- и макропараметров газового потока и материала стенки. Верификация разработанного численного подхода выполнена для чистого никеля и смеси водорода и азота. Проведенные численные эксперименты подтвердили высокую эффективность разработанной методики. Последующее развитие работы связано с разработкой программного комплекса для моделирования процессов холодного сверхзвукового напыления наночастиц на поверхности материалов, используемых в электронике и медицине.

1 Математическая модель

Рассмотрим процесс взаимодействия молекул газа с металлической поверхностью в некотором выделенном микрообъёме. В качестве газа рассмотрим азот (N_2), в качестве металла – никель (Ni). Геометрия модельной задачи представлена на рис. 1.

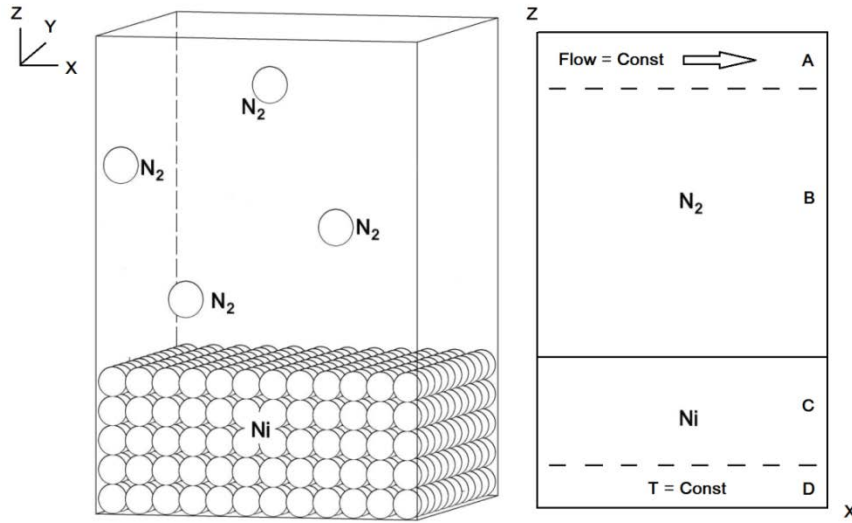


Рисунок 1. Геометрия, используемая при постановке модельной задачи. Слева показана трёхмерная геометрия, содержащая сверху газ (азот), снизу – металл (никель). Справа показана плоская проекция области с указанием направления течения газа и четырех вертикальных слоев: А – верхний слой газа с фиксированными параметрами, В – нижний слой газа, С – верхний слой металла, D – нижний слой металла с фиксированной температурой.

Физико-математическая модель процесса на молекулярном уровне детализации представляется совокупностью взаимодействий частиц газа и металла, находящихся в выделенном объёме. Поведение системы частиц описывается классическими уравнениями Ньютоновской динамики [1-4]:

$$m_{l,i} \frac{d\vec{v}_{l,i}}{dt} = \vec{F}_{l,i}, \quad \vec{v}_{l,i} = \frac{d\vec{r}_{l,i}}{dt}, \quad l = a, b, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad (1)$$

где i – номер частицы, $l = a, b$ – тип частиц (a – молекулы азота, b – атомы никеля), N_l – полное число частиц типа l , $m_{l,i}$ – масса частицы, $\vec{r}_{l,i}$ – радиус-вектор частицы, $\vec{v}_{l,i}$ – вектор скорости частицы, $\vec{F}_{l,i}$ – суммарная сила, действующая на данную частицу.

В случае замкнутой системы действующие на частицы силы определяются только взаимодействиями частиц между собой и выражаются через градиент потенциальной энергии; в присутствии внешнего воздействия (которое присутствует в данном случае) на систему в целом, к ним добавляются внешние силы:

$$\vec{F}_{l,i} = -\frac{\partial U(\vec{r}_{l,1}, \dots, \vec{r}_{l,N})}{\partial \vec{r}_{l,i}} + \vec{F}_{l,i}^{ext}, \quad l = a, b, \quad i = 1, \dots, N_l. \quad (2)$$

Здесь U – потенциальная энергия системы, $\vec{F}_{l,i}^{ext}$ – сила взаимодействия с внешней средой.

Потенциальная энергия системы представляется в виде суммы парциальных энергий парного взаимодействия частиц и зависит только от расстояний между частицами:

$$U = U_{aa} + U_{bb} + U_{ab}, \quad U_{aa} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_a} \sum_{j=1}^{N_a} \varphi_{aa}(|\vec{r}_{a,j} - \vec{r}_{a,i}|), \quad (3)$$

$$U_{bb} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_b} \sum_{j=1}^{N_b} \varphi_{bb}(|\vec{r}_{b,j} - \vec{r}_{b,i}|), \quad U_{ab} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_a} \sum_{j=1}^{N_b} \varphi_{ab}(|\vec{r}_{b,j} - \vec{r}_{a,i}|).$$

Вычисление потенциальной энергии производится по формулам выбранных потенциалов межмолекулярного взаимодействия φ_{ll} , ψ_b . В качестве потенциала φ_{aa} для молекул азота выбран потенциал Леннарда-Джонса [5] в форме “n-m” из [6]; в качестве потенциала для атомов никеля выбран потенциал погруженного атома из [7, 8]; в качестве потенциала φ_{ab} выбран потенциал Леннарда-Джонса в форме “6-12” [5].

Определенную трудность вызывает незамкнутость рассматриваемой системы частиц. Она заключается в том, что количество молекул газа в выделенном объеме, вообще говоря, меняется со временем. К тому же, металлическая часть системы имеет контакт с подложкой, в которой поддерживается постоянная температура. Для преодоления этих трудностей было предложено следующее.

В верхней вертикальной подобласти с газом (подобласти А) задаются постоянные газодинамические параметры газового потока (скорость, давление и температура), что полностью определяет плотность и число молекул газа. Данное число молекул поддерживается в последующие моменты времени.

В нижней вертикальной подобласти с газом (подобласть В) в начальный момент задаются аналогичные условия, но со временем они будут изменяться в соответствии с внутренними процессами и переносом молекул на границах подобласти.

В нижней подобласти с металлом (подобласти D) задается и поддерживается постоянная температура. Количество атомов никеля поддерживается постоянным за счёт использования периодических граничных условий.

В верхней подобласти с металлом (подобласть С) параметры системы вычисляются естественным образом. При этом на большинстве границ также используются периодические граничные условия.

Оба условия задания фиксированного потока газа и температуры металла могут быть учтены в модели с помощью механизма термостатирования. В качестве термостата был выбран термостат Ланжевена [9].

2 Численный алгоритм

В начальный момент времени задаются координаты и скорости всех частиц (и газа, и металла). Пространственное распределение молекул азота берется равномерным. Пространственное распределение атомов никеля берется в соответствии со структурой его гранецентрированной решетки. Максвелловские распределения модулей скоростей соответствуют заданной начальной температуре. После этого решаются уравнения движения (1), для чего на каждом шаге вычисляются силы, новые координаты и скорости частиц с учетом граничных условий и внешнего воздействия на систему. Решение системы уравнений (1) проводится с помощью известной разностной схемы Верле в скоростной форме [10]:

$$\vec{r}_{l,i}^{n+1} = \vec{r}_{l,i}^n + \vec{v}_{l,i}^n \Delta t + \frac{\vec{F}_{l,i}^n (\Delta t)^2}{2 m_{l,i}}, \quad \vec{v}_{l,i}^{n+1} = \vec{v}_{l,i}^n + \frac{\vec{F}_{l,i}^{n+1} + \vec{F}_{l,i}^n}{2 m_{l,i}} \Delta t, \quad n = 0, 1, \dots \quad (4)$$

здесь Δt – шаг интегрирования (по времени), n – номер шага, $\vec{F}_{l,i}^n$ – значение силы на данном шаге. Расчёты ведутся до тех пор, пока в системе не наступит термодинамическое равновесие.

На основе получаемых в расчётах траекторий частиц стандартными методами вычисляются средние по ансамблю частиц макропараметры газа и металла. Детали вычислений этих макропараметров можно уточнить в [11, 12]. В частности, вычисляются параметры течения газа вблизи металлической поверхности (подобласть С), по которым вычисляются коэффициенты аккомодации и теплопередачи между газом и металлом. При этом проникновение молекул азота в структуру никелевой

решётки не учитывается ввиду сравнимых размеров молекул азота и атомов никеля и рассмотрения процессов в диапазоне температур от 80 до 600 К, в котором подобные процессы маловероятны.

3 Параллельная реализация и некоторые результаты моделирования

Для реализации разработанного численного подхода использовалась концепция параллельного программирования, разработанная в [13]. Ее основу составляют принципы геометрического и функционального параллелизма. В нашем случае расчетная область разбивается на локальные домены одинаковой мощности. Мощность домена измеряется в количестве элементарных боксов, в каждом из которых молекулы обязательно взаимодействуют друг с другом. При этом домены, содержащие газ, по геометрическим размерам существенно превосходят домены, содержащие металл. Разбиение на домены производится в рамках топологии трехмерной решетки, поскольку расчетная область является трехмерным параллелепипедом. Каждый расчетный домен попадает на свой вычислитель, в качестве которого используется узел кластера или суперкомпьютера. Распределение доменов по вычислителям реализовано с помощью библиотеки MPI.

Внутри узла (расчетного домена) оказывается некоторое количество элементарных боксов, сгруппированных в трехмерную подрешетку. Такая структура используется для дальнейшего распределения вычислений по трэдам центральных процессоров (ЦПУ), поскольку вычисления внутри боксов имеют более высокую интенсивность, чем между боксами. В итоге, межмолекулярные взаимодействия в боксах реализуются в параллельном режиме за счет использования технологии OpenMP.

Основной алгоритм расчета содержит три этапа. Первый этап – чтение исходных данных MPI-приложением и инициализация структур данных на каждом вычислителе. Второй этап – основные вычисления в цикле по времени. Третий этап – выполнение результирующих вычислений и деинициализация.

В рамках первого этапа производится определение числа молекул в расчетной области, генерация их размещения и распределения по скоростям, расчет стартовых сил.

В рамках основного цикла по времени выполняется следующая последовательность действий. Сначала вычисляются новые значения координат. Далее производится их коррекция с помощью периодических граничных условий. После этого производится обмен частицами между конкретными боксами, который осуществляется как внутри расчетных доменов, так и между расчетными доменами с помощью функций MPI. Далее производится расчет сил, на основании которых производится коррекция скоростей частиц и вычисляются все необходимые макрохарактеристики. При достижении контрольных моментов времени необходимые данные сохраняются в файлах.

Указанный алгоритм был реализован в виде параллельной программы на языке ANSI C в технологии MPI+OpenMP. Тестирование программы проводилось на суперкомпьютерах K100 ИПМ им.М.В.Келдыша РАН и MBC-10П МСЦ РАН. Проведенные с помощью программы расчёты имели целью проанализировать как эффективность разработанного программного обеспечения, так и исследовать свойства предложенного физико-математического подхода.

Анализ эффективности разработанной программы в целом показал её работоспособность и большие перспективы развития. В частности, из расчётов следует, что при типичных размерах области порядка нескольких кубических микрон, количество частиц в моделируемой системе может достигать от десятков до сотен миллионов. Это позволяет достаточно эффективно распределить загрузку

используемых вычислительных мощностей. Однако, максимальной скорости вычислений можно будет достичь лишь в перспективе, при переносе большей части вычислений на современные графические вычислители, такие как NVIDIA Tesla K20 или K40, имеющие достаточную оперативную память и позволяющие уменьшить число MPI-процессов.

Анализ предложенного подхода с точки зрения его применения к моделированию сложных технических процессов на микро- и наноуровне показал следующее. Моделирование реальных технических систем даже очень малых размеров пока невозможно в рамках методов молекулярной динамики. Однако комбинирование этих методик с классическими макромоделями вполне возможно и оправданно. В рамках рассмотренной задачи возможно либо накопление базы данных по параметрам граничных условий, использующейся затем для газодинамических расчётов на макроуровне, либо сочетание в одном расчёте молекулярно-динамических и классических газодинамических расчётов. При этом, безусловно, используемые в расчётах параметры в уравнениях молекулярной динамики, а также параметры в газодинамических уравнениях и уравнениях состояния должны быть максимально согласованы как между собой, так и с известными экспериментальными данными. В данной работе это было частично реализовано путем использования данных о потенциалах взаимодействия, полученных из базы данных ЭПИДИФ [6].

Заключение

Разработана математическая модель, численный алгоритм и параллельная программа для моделирования процессов взаимодействия газа с металлической поверхностью. На примере системы азот – никель проведены предварительные расчёты модельной задачи с целью определения параметров течения газа в кнудсеновском слое. Расчёты подтвердили эффективность подхода и возможность создания базы данных граничных условий для последующего газодинамического макромоделирования сложных технических микро- и наносистем, в том числе систем напыления наночастиц на поверхности с целью создания новых материалов для электроники и медицины.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда фундаментальных исследований (проекты №№ 13-01-12073-офи-м, 12-01-00345).

Список литературы

1. *И.Г. Каплан.* Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. – М.: Наука. 1982. 312 с.
2. *Р. Хокни, Дж. Иствуд.* Численное моделирование методом частиц. – М.: Мир, 1987. 640 с.
3. *G. Sutmann.* Classical molecular dynamics. // Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms (Eds. J. Grotendorst, et al.), Julich: NIC. 2002. V.10. Pp. 211-254.
4. *M.P. Allen.* Introduction to Molecular Dynamics Simulation. // Computational Soft Matter: From Synthetic Polymers to Proteins. John von Neumann Institute for Computing, Julich, NIC Series. 2004. V.23. Pp. 1-28.
5. *J.E. Lennard-Jones.* Cohesion. // Proceedings of the Physical Society. 1931. V.43. №5. Pp. 461-482.
6. *Л.Р. Фокин, А.Н. Калашиников.* Транспортные свойства смеси разреженных газов N₂-H₂ в базе данных ЭПИДИФ. // Теплофизика высоких температур. 2009. Т.47. №5. С. 675-687.
7. *M.S. Daw, M.I. Baskes.* Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. // Physical Review B. 1984. V.29. № 12. Pp. 6443-6453.

8. X.W. Zhou, R.A. Johnson, H.N.G. Wadley. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers. // Phys. Rev. B. 69. 2004. Pp.144113. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.144113.
9. Д.В. Хеерман. Методы компьютерного эксперимента в компьютерной физике. – М.: Наука. 1990. 176 с.
10. L. Verlet. Computer “experiments” on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. // Phys. Rev. 1967. V.159. Pp. 98-103.
11. J.M. Haile. Molecular Dynamics Simulation. Elementary Methods. – John Wiley & Sons, Inc. New-York. 1992.
12. В.О. Подрыга, С.В. Поляков. Молекулярно-динамическое моделирование процесса установления термодинамического равновесия нагретого никеля. // Препринты ИПМ им.М.В.Келдыша. 2014. № 41. 20 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2014-41>
13. С.В. Поляков и др. Гибридная суперкомпьютерная платформа и разработка приложений для решения задач механики сплошной среды сеточными методами. // Известия ЮФУ. Технические науки. 2012. № 6 (131). С. 105-115.

САМОАДАПТИВНЫЙ АЛГОРИТМ БАКТЕРИАЛЬНОГО ПОИСКА В ЗАДАЧАХ МНОГОМЕРНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

С.В. Полуян¹, Н.М. Ершов²

svpoluyan@gmail.com, ershovnm@gmail.com

¹ Международный университет природы, общества и человека «Дубна»

² Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Введение

В основе работы практически всех алгоритмов роевой оптимизации лежит, как правило, достаточно простая идея. Однако эта простая идея при реализации обрастает разнообразными вспомогательными правилами (эвристиками), каждое из которых управляется одним или несколькими параметрами. Это приводит к тому, что конечный алгоритм оказывается зависимым от большого числа параметров, которые влияют на эффективность этого алгоритма (например, на скорость сходимости). К сожалению, настроить такие параметры универсальным образом чаще всего не удастся. Это значит, что для каждого отдельного набора входных данных оказывается невозможным подобрать такую комбинацию параметров, которая обеспечит лучшую сходимость алгоритма.

Настоящая работа посвящена описанию подхода к построению самоадаптивных алгоритмов роевой оптимизации, в которых происходит автоматическая настройка части параметров алгоритма в процессе его эволюции. Рассматривается работа предложенной схемы самоадаптации на примере алгоритма бактериального поиска [1].

1 Алгоритм бактериального поиска

В настоящей работе исследуется алгоритм бактериального поиска [1], предложенный Кевином Пассино (Kevin Passino) в 2002 году. Данный алгоритм предназначен для решения непрерывных задач оптимизации и основан на моделировании процесса поиска пищи, взаимодействия и естественного отбора в популяции бактерий.

Отметим основные особенности рассматриваемого алгоритма. Это прямой метод оптимизации, то есть он требует только возможности вычислять значения целевой функций. Алгоритм относится к классу стохастических алгоритмов оптимизации, поскольку работает с использованием случайных чисел. Также он относится к классу эволюционных алгоритмов, так как использует и моделирует процессы естественного

отбора. Это роевой алгоритм, поскольку при эволюции популяция решений представляет собой мультиагентную децентрализованную систему, где коллективное поведение возникает посредством локального взаимодействия агентов. Алгоритм бактериального поиска похож по структуре на большинство эволюционных алгоритмов оптимизации и включает в себя 3 основных этапа: хемотаксис, репродукция, рассеивание. Подробно с основными принципами работы алгоритма можно ознакомиться, например, в [2].

Одним из преимуществ и одновременно недостатком алгоритма бактериального поиска по сравнению с традиционными методами роевой оптимизации является высокое количество настраиваемых параметров (12 свободных параметров), которые можно разбить на две группы – глобальные и локальные. Глобальные влияют на всю популяцию бактерий (решений), в то время как локальные привязаны к каждой бактерии.

В данной работе рассматривались различные модификации бактериального поиска. Например, для увеличения скорости сходимости шаг бактерии (особи популяции) в области поиска изменяется аналогично методу R-propagation [3]. Следующая модификация алгоритма бактериального поиска произведена с использованием основной идеи эволюционной стратегии с адаптацией матрицы ковариаций [4] (CMA-ES) на этапе репродукции: новые бактерии, полученные путем деления лучших, записываются не в позиции своих родителей, а рассеиваются многомерным нормальным распределением по области поиска, используя взвешенные значения позиций родителей.

2 Схема самоадаптации

Основная идея построения самоадаптивного алгоритма бактериального поиска заключается в том, что на фоне основного алгоритма запускается вспомогательный генетический алгоритм [5]. Целью работы генетического алгоритма является настройка параметров базового алгоритма, обеспечивающая максимально возможную *скорость* его сходимости. Заметим, что такой алгоритм не является гибридным, так как только базовая его часть отвечает собственно за оптимизацию заданной функции.

Для случая алгоритма бактериального поиска схема самоадаптации для параметра δ , определяющий размер шага в области поиска, выглядит следующим образом. В начальный момент времени значения этого параметра устанавливаются случайным образом для каждой бактерии. Затем, каждые τ итераций основного алгоритма производится одна итерация генетического алгоритма, включающая в себя три шага – отбор, скрещивание и мутацию.

Для выполнения отбора используется турнирная схема, две случайно выбранные особи сравниваются по параметру ΔF , который представляет собой изменение целевой функции F данной особи за промежуток времени Δt . С вероятностью p_m выбирается лучшее значение в паре, с вероятностью $(1 - p_m)$ – худшее. Старые значения параметра δ обеих особей заменяются выбранным значением (победителем).

Для рекомбинации параметров применяется арифметическое скрещивание – выбирается пара особей, новые значения δ_i и δ_j находятся по следующим формулам:

$\delta_i = p_c \cdot \delta_i + (1 - p_c) \cdot \delta_j$, $\delta_j = p_c \cdot \delta_j + (1 - p_c) \cdot \delta_i$, где p_c случайное значение из диапазона $[0, 1]$.

Мутация заключается в умножении текущего параметра δ_i на случайный множитель из диапазона $[0.5, 2]$. Мутация применяется к каждому решению, так как нас интересует высокая степень адаптивности алгоритма.

3 Результаты численного исследования для однокритериальных задач

Для тестирования алгоритмов бактериального поиска использовались тестовые функции, представленные на специальных сессиях по оптимизации (Special Session and Competition) конференций CEC (Congress of Evolutionary Computing) в рамках IEEE WCCI (World Congress on Computational Intelligence). Были отобраны функции различного вида для проверки эффективности применения алгоритмов бактериального поиска при решении задач непрерывной оптимизации. Список выбранных функций, полностью представленных на сессии 2008-го года, представлен в [6].

На рис.1 изображена сходимость алгоритмов бактериального поиска для функции Griewank [6], которая является мультимодальной и несепарабельной. Все кривые на рис. 1 – усредненные по 25 запусков (согласно [6]). Параметры для генетического алгоритма: вероятность отбора – 0.75, вероятность скрещивания – 0.5, вероятность мутации – 0.5.

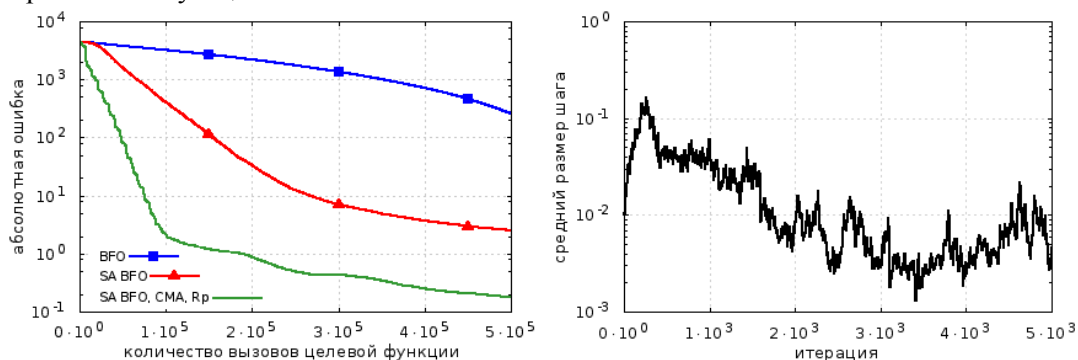


Рисунок 1. Сходимость алгоритмов бактериального поиска для функции Griewank [8] размерности 100 и средний размер шага в популяции для самоадаптивного алгоритма бактериального поиска.

4 Результаты численного исследования для многокритериальных задач

Алгоритм бактериального поиска применим к решению задач многокритериальной оптимизации без каких-либо модификаций. Изменяется только способ вычисления целевой функции. Для решения задач многокритериальной оптимизации использован простейший метод решения многокритериальных задач – метод сведения их с помощью аддитивной скалярной свертки к однокритериальным задачам. Весовые коэффициенты выбирались случайным образом из диапазона $[0, 1]$ равномерным распределением и изменялись каждые t итераций алгоритма. Таким образом, у всей популяции решений при вычислении целевой функции использовались одинаковые весовые коэффициенты.

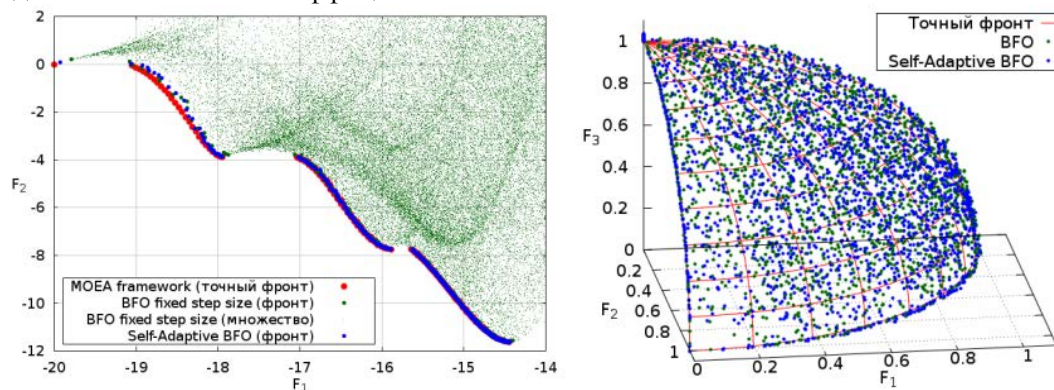


Рисунок 2. Найденные аппроксимирующие значения фронта Парето для задачи Курсаве и задачи DTLZ2 [8]

Проведено численное исследование алгоритмов бактериального поиска на классических непрерывных многокритериальных задачах, таких как двухкритериальная задача Курсаве (Kursawe) [7] и масштабируемых (по критериям и размерности) задачах серии DTLZ [8] с известным истинным фронтом Парето.

Ошибка оценивалась как разница аппроксимирующего и истинного фронта. Для этого используется евклидово расстояние: расстояние между проекцией точки на известный истинный фронт и самой найденной точкой аппроксимирующего фронта. Часть результатов тестирования алгоритмов бактериального поиска представлена на рис. 2.

Заключение

На основании проведенных исследований можно заключить, что предложенный самоадаптивный алгоритм обладает более высокой скоростью сходимости по сравнению с классическим алгоритмом. Важно отметить, что результаты, полученные при оптимизации 100 мерной функции DoubleDip [6] с требуемым числом вызовов целевой функции, превосходят традиционные роевые алгоритмы, представленные на сессии CEC 2008. Например, модификации алгоритма метода роя частиц EPUS-PSO [9] и DMS-PSO [10] уступают предложенному самоадаптивному алгоритму бактериального поиска.

Целью дальнейшей работы может быть разработка различных критериев для изменения параметров у роевых алгоритмов оптимизации. Важно отметить, что применение других методов теории искусственного интеллекта к решению задачи параметрической оптимизации мало изучено и также может быть целью дальнейших исследований.

Список литературы

1. K.M. Passino. Biomimicry of bacterial foraging for distributed optimization and control // IEEE Control Systems Magazine. 2002. Pp. 52-67.
2. С.В. Полуян, Н.М. Ершов. Бактериальный поиск в задачах многомерной оптимизации, Современные проблемы прикладной математики и информатики (MPAMCS'2012): Тезисы докладов международной молодежной конференции-школы (Дубна, 22-27 августа 2012 г.), Дубна: ОИЯИ, тезисы. С. 166-169.
3. M. Riedmiller, H. Braun. A direct adaptive method for faster backpropagation learning // International Conference on Neural Networks, 1993. Pp. 586-591.
4. N. Hansen, A. Ostermeier. Adapting arbitrary normal mutation distributions in evolution strategies: The covariance matrix adaptation // Proceedings of the 1996 IEEE International Conference on Evolutionary Computation. 1996. Pp. 312-317.
5. D. Whitley. A Genetic Algorithm Tutorial // Statistics and Computing. 1994. V.4. Issue 2. Pp. 65-85.
6. K. Tang, X. Yao, P.N. Suganthan, C. MacNish, Y.P. Chen, C.M. Chen, Z. Yang. Benchmark Functions for the CEC'2008 Special Session and Competition on Large Scale Global Optimization, Technical Report, Nature Inspired Computation and Applications Laboratory, USTC, China. URL: <http://nical.ustc.edu.cn/cec08ss.php>, 2007.
7. F. Kursawe. A Variant of Evolution Strategies for Vector Optimization. // H.-P. Schwefel and R. Manner, Parallel Problem Solving from Nature. – Springer, Berlin. 1991. Pp. 193-197.
8. K. Deb, L. Thiele, M. Laumanns, E. Zitzler. Scalable Multi-Objective Optimization Test Problems. // Congress on Evolutionary Computation (CEC'2002), V.1, IEEE Service Center, May 2002, Pp. 825-830.
9. S.-T. Hsieh, T.-Y. Sun, C.-C. Liu, S.-J. Tsai. Solving Large Scale Global Optimization Using Improved Particle Swarm Optimizer. // Proceedings IEEE Congress on Evolutionary Computation. 2008. Pp. 1777-1784.
10. S.Z. Zhao, J.J. Liang, P.N. Suganthan, M.F. Tasgetiren. Dynamic Multi-Swarm Particle Swarm Optimizer with Local Search for Large Scale Global Optimization. // Proceedings IEEE Congress on Evolutionary Computation. 2008. Pp. 3845-3852.

ВЫБОР ОПТИМАЛЬНОЙ ЧАСТОТЫ ВРАЩЕНИЯ ВАЛА ЦЕНТРОБЕЖНОГО МАЛОРАСХОДНОГО НАСОСА

А.А. Протопопов

proforg6@yandex.ru

Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана

Введение

Выбор частоты вращения вала центробежного насоса – важнейшая задача при его проектировании, так как от частоты вращения вала зависит подавляющее большинство конструктивных параметров центробежного насоса, а также его характеристики.

Существующие методики [1-3, 5] расчета центробежных насосов определяют частоту вращения вала из соображений компромисса кавитационных характеристик насоса и его КПД. Однако, применительно к малорасходным насосам, такой подход не подходит, так как даже при очень больших частотах вращения кавитационные характеристики малорасходных насосов ухудшаются незначительно и на первый план выходят другие критерии. Таким образом, возникает необходимость в формулировке новых критериев выбора частоты.

1 Выбор критериев, получение их зависимости от частоты вращения

В ходе работы по математическому моделированию центробежного насоса удалось установить, что наиболее существенными критериями для определения оптимальной частоты являются ресурс и радиальный габарит.

Для нахождения зависимости ресурса от частоты необходимо определить эквивалентную радиальную силу, действующую на наиболее нагруженный подшипник.

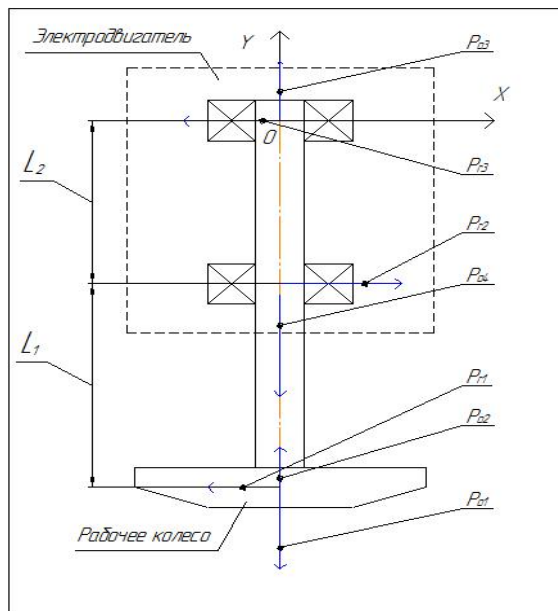


Рисунок 1. Принципиальная расчетная схема радиальных и осевых сил, действующих на ротор.

Из рис. 1 видно, что на валу электродвигателя установлено рабочее колесо и два подшипника. Рабочее колесо создает радиальную силу P_{r1} , вследствие этого на первом подшипнике возникает радиальная реакция P_{r2} , а на втором подшипнике – радиальная

реакция P_{r3} . На переднем диске рабочего колеса возникает осевая сила P_{o2} , а на тыльном диске рабочего колеса – осевая сила P_{o1} . Также на ротор действует его вес P_{o4} . Схема установки подшипников такова, что суммарная осевая сила от рабочего колеса и веса ротора компенсируется осевой реакцией во втором подшипнике P_{o3} .

Из уравнений условия равновесия $M_o = 0$, $\sum_i P_i = 0$ получаем следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} P_{r1} \cdot (L_2 + L_1) = P_{r2} \cdot L_2 & (1) \\ P_{r1} + P_{r3} = P_{r2} & (2) \\ P_{o4} + P_{o1} - P_{o2} = P_{o3} & (3) \end{cases}$$

Откуда получаем

$$P_{r2} = P_{r1} \cdot \frac{(L_2 + L_1)}{L_2} \quad (1a)$$

$$P_{r3} = P_{r1} \cdot \frac{L_1}{L_2} \quad (2a)$$

$$P_{o3} = P_{o4} + P_{o1} - P_{o2} \quad (3a)$$

С учетом известных соотношений для радиальных и осевых сил, получаем ресурс:

$$T = 0,7 \cdot \left(\frac{C}{P_{r\text{экв}}(n)} \right)^3 \cdot \frac{10^6}{60 \cdot n}, \quad (4)$$

где T – ресурс наиболее нагруженного подшипника, C – базовая радиальная грузоподъемность подшипника, $P_{r\text{экв}}(n)$ – эквивалентная радиальная сила, действующая на наиболее нагруженный подшипник, n – частота вращения вала насоса. В ходе работы по расчету насоса была установлена зависимость эквивалентной радиальной силы от частоты, что позволяет получить окончательный вид функции $T(n)$.

Аналогично, для радиального габарита найдена зависимость от частоты. Она имеет вид:

$$R_2 = \frac{\sqrt{\frac{H \cdot g}{0,64}} \cdot 30}{\pi \cdot n}, \quad (5)$$

где H – напор насоса, g – ускорения свободного падения.

2 Компромиссная кривая радиальный габарит – ресурс

Если представить радиальный габарит в виде $x = \frac{1}{R_2}$, то из формул (4) и (5) получим компромиссную кривую:

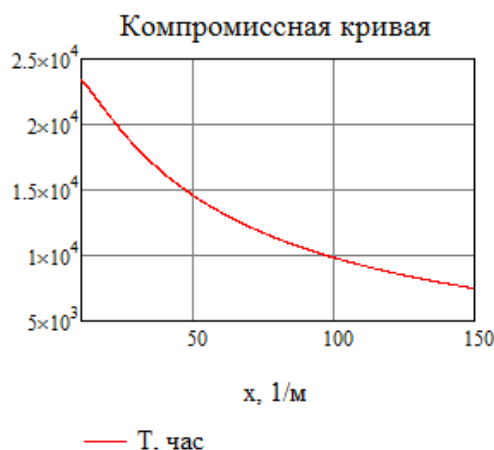


Рисунок 2. Компромиссная кривая ресурс – радиальный габарит.

Выбор точки $x_{\text{опт}}$ на этой кривой позволяет найти соответствующую ей величину частоты вращения ротора из формулы (5):

$$n_{\text{опт}} = \frac{\sqrt{\frac{H \cdot g}{y \cdot \eta_{\Gamma}}} \cdot 30 \cdot x_{\text{опт}}}{\pi} \quad (6)$$

Заключение

Изложенный метод позволяет определять оптимальную частоту вращения вала центробежного насоса в случае малой величины его подачи, что актуально в промышленном применении так как, существующие методики не подходят для определения оптимальной частоты вращения вала насоса.

Список литературы

1. *А.К. Михайлов, В.В. Малюченко.* Лопастные насосы. Теория, расчет и конструирование. – М.: Машиностроение. 1977.
2. *А.А. Ломакин.* Центробежные и осевые насосы. – М.: Машиностроение. 1966.
3. *Т.М. Баишта и др.* Гидравлика, гидравлические машины и гидравлические приводы. – М.: Машиностроение. 1970.
4. *П.Ф. Дунаев, О.П. Леликов.* Конструирование узлов и деталей машин. – М.: Академия. 2007.
5. *В.М. Черкасский.* Насосы, вентиляторы, компрессоры. – М.: Энергоатомиздат. 1984. 416 с.

ПРЕДСКАЗАНИЕ ИЗОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ТОЧКИ ПРОТЕОЛИТИЧЕСКИХ ПЕПТИДОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

И.В. Ромеро Рейес, В.С. Скворцов, Н. Алексейчук

ilacai@mail.ru

Научно-исследовательский институт биомедицинской химии
им. В.Н. Ореховича

Традиционно для расчетов изоэлектрической точки (pI) используется уравнение Гендерсона. При таком подходе средняя ошибка между расчетными и

экспериментальными значениями невелика, однако существуют значительные точечные отклонения, связанные с неоднозначностью определения шкал констант диссоциации (рКа) заряженных групп аминокислотных остатков. Для решения этой проблемы был предложен новый метод оценки рI с использованием искусственных нейронных сетей, обобщающая способность которых обеспечивается наличием выборки экспериментальных данных достаточного размера.

ИССЛЕДОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ НЕЛИНЕЙНЫХ ОПТИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ДВУМЕРНОЙ ОБРАТНОЙ СВЯЗЬЮ

А.М. Селицкий

selitsky@mail.ru

Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН
Российский университет дружбы народов

Введение

В работе [1] используется модель оптического резонатора с тонким нелинейным слоем, в которой фаза световой волны $u(x, y, t)$ удовлетворяет условиям

$$u_t = d(u_{xx} + u_{yy}) - u + K(1 + g(u)), \quad (x, y) \in \Omega, \quad t > 0,$$

$$\frac{\partial u}{\partial \nu} \Big|_{\partial \Omega} = 0.$$

Здесь Ω – ограниченная область в $\mathbb{R}^n$ с границей $\partial \Omega$, d – коэффициент диффузии нелинейной среды, коэффициент K пропорционален интенсивности входного поля, g – преобразование поля в контуре двумерной обратной связи.

Экспериментальные данные показывают, что если преобразование g – поворот, то при определенных значениях коэффициентов образуются ротационные волны. В работах [2, 3] рассматривалось параболическое уравнение, соответствующее данной математической модели, в одномерном случае и в случае круговой области. Случай произвольной области с гладкой границей рассмотрен в работе [4].

В статье [5] рассматривалось параболическое уравнение с преобразованиями-сдвигами по пространственным переменным, содержащимися также в старших производных, в области с кусочно гладкой границей. В настоящем докладе будет сформулирована теорема о разрешимости данной задачи в области с липшицевой границей, на преобразования аргумента в младших членах нет ограничений кроме ограниченности и измеримости, от преобразования аргументов в старших производных требуется небольшая гладкость. Также доказано, что для абсолютной непрерывности сильного решения по времени необходимо и достаточно, чтобы начальная функция принадлежала пространству Соболева первого порядка.

Постановка задачи и основной результат

Пусть Q – ограниченная область в $\mathbb{R}^2$ с липшицевой границей ∂Q . Пусть A_{ij} , B_i, C – ограниченные операторы в $L_2(\mathbb{R}^2)$.

Рассмотрим уравнение

$$u_t(x, t) - \sum_{i,j=1}^2 \left(A_{ij} u_{x_j}(x, t) \right)_{x_i} + \sum_{i=1}^2 B_i u_{x_i}(x, t) + C u(x, t) = f(x, t), \quad (x, t) \in Q_T, \quad (1)$$

с краевым условием

$$\sum_{i,j=1}^2 A_{ij} u_{x_j} \cos(\nu, x_i) = 0, \quad (x, t) \in \Gamma_T, \quad (2)$$

и начальным условием

$$u|_{t=0} = \varphi(x), \quad x \in Q, \quad (3)$$

где $Q_T = Q \times (0, T)$, $0 < T < \infty$, $\Gamma_T = \partial Q \times (0, T)$, ν – единичный вектор внешней нормали к Γ_T , $f \in L_2(Q_T)$, $\varphi \in L_2(Q)$.

Введем оператор $A: D(A) \rightarrow L_2(Q)$, $D(A) \subset L_2(Q)$, действующий по формуле

$$(Av, w)_{L_2(Q)} = \sum_{i,j=1}^2 (A_{ij} v_{x_j}, w_{x_i})_{L_2(Q)} + \sum_{i=1}^2 (B_i v_{x_i}, w)_{L_2(Q)} + (Cv, w)_{L_2(Q)} \quad (4)$$

при $v \in D(A)$, $w \in W_2^1(Q)$, где $W_2^1(Q)$ – пространство Соболева.

Определение 1. Оператор A называется сильно эллиптическим, если существуют числа $c_1 > 0$ и $c_2 \geq 0$ такие, что

$$\Re(Av, v)_{L_2(Q)} \geq c_1 v_{W_2^1(Q)}^2 - c_2 v_{L_2(Q)}^2, \quad v \in D(A) \quad (5)$$

В дальнейшем мы будем предполагать, что оператор A сильно эллиптический. Также мы будем предполагать, что в неравенстве (5) $c_2 = 0$. В противном случае положим $u = ze^{c_2 t}$, что приведет к рассмотрению оператора $A + c_2 I$ вместо A .

Пространство $D(A)$ является гильбертовым с нормой графика. Введем гильбертово пространство

$$W(A) = L_2([0, T]; D(A)) \cap W_2^{1,0}(Q_T) = \{w \in L_2([0, T]; D(A)) : w_t \in L_2(Q_T)\}. \quad (6)$$

Определение 2. Функция $u \in W(A)$ называется сильным решением задачи (1)-(3), если при почти всех t она удовлетворяет уравнению $u_t = Au + f$ и начальному условию (3).

Заметим, что в силу вложения $W(A) \subset C([0, T]; [D(A), L_2(Q)]_{1/2})$ начальное условие (3) имеет смысл.

Теорема 1. Задача (1)-(3) имеет единственное сильное решение для любых $f \in L_2(Q_T)$ и $\varphi \in [D(A), L_2(Q)]_{1/2}$, которое определяется по формуле

$$u(x, t) = T_t \varphi(x) + \int_0^t T_{t-s} f(x, s) ds \quad (7)$$

где T_t ($t \geq 0$) – аналитическая полугруппа с генератором $(-A)$.

Обозначим через $W_2^s(Q)$ пространство Соболева-Слободецкого ($0 \leq s < 1/2$) и через $W_2^{-s}(Q)$ сопряженное к нему.

Теорема 2. Если операторы A_{ij} являются мультипликаторами в пространствах $W_2^s(Q)$ при $|s| < \varepsilon$ ($0 < \varepsilon < 1/2$), то

$$[D(A), L_2(Q)]_{1/2} = W_2^1(Q). \quad (8)$$

Доказательство теорем 1 и 2 аналогично доказательству теорем 1 и 2 в [6].

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 13-01-00923 и гранта Президента государственной поддержки ведущих научных школ НШ-4479.2014.1.

Список литературы

1. С.А. Ахманов, М.А. Воронцов, В.Ю. Иванов. Генерация структур в оптических системах с двумерной обратной связью: на пути к созданию нелинейно-оптических аналогов нейронных сетей. // Новые физические принципы оптической обработки информации. 1990. С. 263-325.
2. А.В. Разгулин. Об автоколебаниях в нелинейной параболической задаче с преобразованным аргументом. // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1993. Т.33. № 1. С. 69-80.
3. А.В. Разгулин. Ротационные волны в оптической системе с двумерной обратной связью. // Мат. моделирование. 1993. Т.5. № 4. С. 105-119.
4. А.Л. Скубачевский. О некоторых свойствах эллиптических и параболических функционально-дифференциальных уравнений. // Успехи мат. наук. 1996. Т. 51. № 1 (307). С. 169-170.
5. А.М. Селицкий. Моделирование некоторых оптических систем на основе параболического дифференциально-разностного уравнения. // Мат. моделирование. 2012. Т. 24. № 12. С. 38-42.
6. А.М. Селицкий. Пространство начальных данных 2-й краевой задачи для параболического дифференциально-разностного уравнения в липшицевых областях. // Мат. заметки. 2013. Т. 94. № 3. С. 447-480.

НИЗКОУРОВНЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФЕРМЕНТАТИВНЫХ РЕАКЦИЙ С ПОМОЩЬЮ СТОХАСТИЧЕСКИХ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ

А.Ю. Синячкин¹, Н.М. Ершов²

du_frein@mail.ru, ershovnm@gmail.com

¹Международный университет природы, общества и человека «Дубна»

²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Введение

В работе рассматриваются вопросы низкоуровневого моделирования простейших ферментативных реакций. В качестве инструмента моделирования выступают двумерные стохастические блочные клеточные автоматы. Приводятся результаты численного исследования предложенной модели.

1 Построение дискретной модели простейшей ферментативной реакции

Рассматривается простейшая ферментативная реакция [1] вида



где S – субстрат, E – фермент, SE – субстрат-ферментный комплекс, P – продукт. Коэффициенты k_i определяют скорости соответствующих реакций.

Строится микроскопическая имитационная модель этой реакции на основе стохастических клеточных автоматов [2]. В каждой клетке автомата располагаются не больше одной молекулы, которые обозначаются следующими символами (состояниями автомата):



Свободные клетки автомата находятся в состоянии, обозначаемом символом λ . Множество, состоящее из этих пяти символов, называется алфавитом A автомата.

Предполагается, что вся система находится в состоянии постоянного перемешивания, которое обеспечивается т.н. перемешивающей подсистемой перестановок вида

$$ab \leftrightarrow_{\theta} ba, \forall a, b \in A.$$

Параметр θ здесь определяет вероятность применения данной подстановки и неявно задает скорость перемешивания (температуру системы). Сама ферментативная

реакция описывается следующей системой подстановок:

$$\begin{cases} se \rightarrow_{p_1} c\lambda, \\ c\lambda \rightarrow_{p_2} se, \\ c\lambda \rightarrow_{p_3} pe. \end{cases}$$

При этом предполагается, что $p_1 + \theta \leq 1$ и $p_2 + p_3 + \theta \leq 1$.

2 Описание реакции в терминах концентраций символов

Предположим, что вероятности $p_i \ll \theta$. Это значит, что поведение системы может быть описано в терминах концентраций символов из A . Будем обозначать концентрации символов теми же самыми символами. Тогда изменения во времени концентраций символов могут быть описаны системой дифференциальных уравнений вида

$$\begin{cases} \dot{s} = -k_1 se + k_2 c\lambda, \\ \dot{e} = -k_1 se + (k_2 + k_3) c\lambda, \\ \dot{c} = k_1 se - (k_2 + k_3) c\lambda, \\ \dot{p} = k_3 c\lambda, \\ \dot{\lambda} = k_1 se - (k_2 + k_3) c\lambda. \end{cases}$$

Начальные условия определяются следующим образом (в начальном состоянии отсутствуют комплекс c и продукт p):

$$s(0) = s_0, e(0) = e_0, c(0) = p(0) = 0, \lambda(0) = 1 - s_0 - e_0.$$

Коэффициенты k_i в этой системе определяются вероятностями p_i и параметром ω стохастического клеточного автомата:

$$k_i = \omega^2 (1 - \omega) p_i.$$

Полученную систему можно упростить с учетом следующих очевидных свойств исходной модели:

$$s + e + c + p + \lambda = 1, e + c = e_0, s + c + p = s_0.$$

Эти соотношения позволяют исключить из дифференциальной системы три уравнения, оставив, например, только два уравнения для субстрата s и фермента e :

$$\begin{cases} \dot{s} = -k_1 se + k_2 (e_0 - e) \lambda, \\ \dot{e} = -k_1 se + (k_2 + k_3) (e_0 - e) \lambda, \end{cases}$$

где $\lambda = 1 + e - 2e_0 - s_0$.

3 Численное моделирование и сравнение с аналитическими оценками

Было проведено моделирование рассмотренной простейшей ферментативной реакции с использованием стохастических клеточных автоматов. На рис. 1 маркерами показано найденное в результате такого моделирования изменение концентраций символов e , c и s от времени t . Для расчетов использовались следующие значения параметров: $\omega = 0.5$, $\theta = 0.7$, $k_1 = 0.7$, $k_2 = 0.01$, $k_3 = 0.02$. На том же рисунке сплошными линиями показаны результаты численного решения построенной для данной реакции системы дифференциальных уравнений. Видно, что эти два способа моделирования дают весьма схожие результаты. Кроме того, полученные результаты находятся в согласии с данными, приведенными в монографии [1].

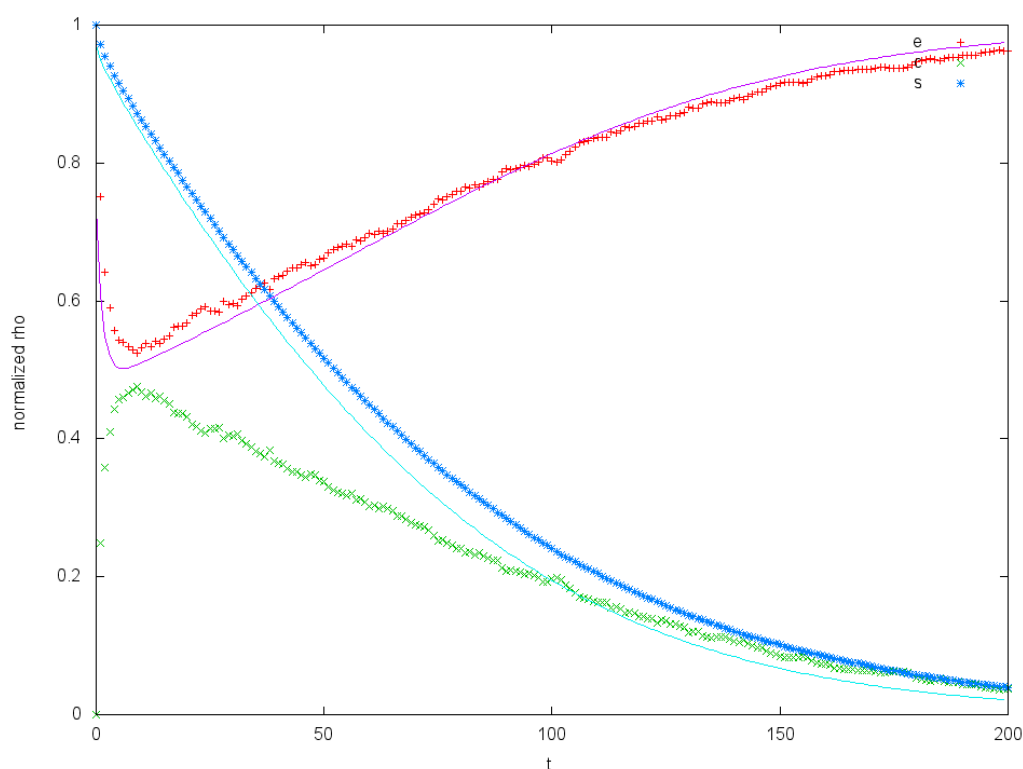


Рисунок 1. Результаты численного моделирования простейшей ферментативной реакции.

Преимуществом моделирования с помощью клеточных автоматов является то, что в этом случае строится прямая модель реакции, практически без всяких предположений о начальных концентрациях, температуре системы и т.д. В то же время модели, основанные на построении систем дифференциальных уравнений, сильно полагаются на ограничения такого рода. Например, на рис. 2 показана эволюция той же самой системы в предположении, что в начальный момент времени имеется *единственная* молекула фермента.

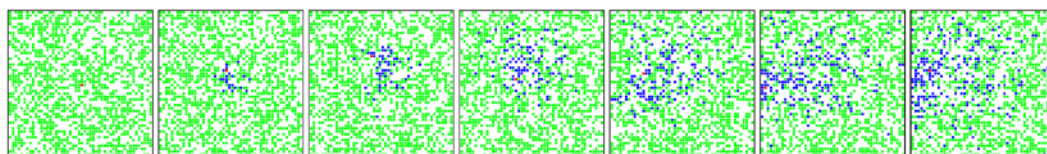


Рисунок 2. Эволюция системы при наличии в ней единственной молекулы фермента (красная клетка)

Отметим, что в данном случае построение непрерывной модели, основанной на системе дифференциальных уравнений, оказывается существенно более сложной задачей.

Заключение

В результате выполненной работы получены следующие результаты: построена модель простейшей ферментативной реакции на основе стохастических клеточных автоматов. Показано, каким образом поведение построенной системы может быть описано в терминах концентраций символов-реагентов. Приведены результаты численного исследования исходной дискретной модели и построенной на ее основе непрерывной модели. Показано, что полученные результаты находятся в согласии с

теоретическими оценками, приведенными в монографии [1]. В дальнейшем предполагается рассмотреть другие более сложные типы ферментативных реакций.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №14-07-00628 А).

Список литературы

1. Дж. Мюррей. Математическая биология. Том 1. Введение. – Изд. ИКИ-РХД, 2009.
2. Н. Ершов, А. Кравчук. Дискретное моделирование с помощью стохастических клеточных автоматов // Вестник РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика.» 2014. №2. С. 359-362.

ВЫЧИСЛЕНИЕ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ И СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ КУЛОНОВСКОГО СФЕРОИДАЛЬНОГО ВОЛНОВОГО УРАВНЕНИЯ

С.Л. Скороходов

sskorokhodov@gmail.com

Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН

На отрезке $\eta \in [-1, 1]$ рассматривается спектральная задача для кулоновского сфероидального волнового уравнения с комплексными параметрами b, c и целым m :

$$\frac{d}{d\eta} \left[(1-\eta^2) \frac{d}{d\eta} U(\eta) \right] + \left(b\eta - c^2 \eta^2 - \frac{m^2}{1-\eta^2} \right) U(\eta) = -\lambda U(\eta), \quad (1)$$

$$|U(-1)| < \infty, \quad |U(1)| < \infty. \quad (2)$$

Через $U(\eta) = U_k(\eta)$ и $\lambda = \lambda_k$, $k = 1, 2, \dots$ обозначим собственные функции и собственные значения оператора задачи (1), (2) и отметим, что уравнение (1) является сингулярным, поскольку коэффициент $(1-\eta^2)$ перед старшей производной обращается в ноль на границах отрезка $[-1, 1]$. Поэтому краевыми условиями для функции $U(\eta)$ являются ограниченность (2) решения в особых точках $\eta = \pm 1$. Отметим также, что при комплексных параметрах b или c оператор (1) задачи несамосопряженный, а при $b = 0$ уравнение (1) определяет угловые сфероидальные функции $S_m(c, \eta)$. Функции $U(\eta)$ и $S_m(c, \eta)$ широко используются в математической физике, например, $U(\eta)$ возникают при решении трехмерного уравнения Шредингера в вытянутых или сплюснутых сфероидальных координатах, см. [1].

Решение $U(\eta)$ представимо, см. [2], в виде двух разложений $\bar{U}(\eta)$ и $\bar{U}(\eta)$ с центрами в точках $\eta = -1$ и $\eta = 1$ с радиусами сходимости, определяемыми далее:

$$\bar{U}(\eta) = (1-\eta^2)^{m/2} \sum_{p=0}^{\infty} \bar{u}_p(\eta) (1+\eta)^p, \quad \bar{U}(\eta) = (1-\eta^2)^{m/2} \sum_{p=0}^{\infty} \bar{u}_p(\eta) (1-\eta)^p. \quad (3)$$

Коэффициенты $\bar{u}_p(\eta)$ и $\bar{u}_p(\eta)$ зависят от λ и удовлетворяют однородным рекуррентным соотношениям 3-го порядка. Исследование асимптотического при $p \rightarrow \infty$ поведения этих коэффициентов на основе анализа характеристических уравнений и использования теории Пуанкаре-Перрона для разностных уравнений позволяет определить области сходимости разложений (3): для $\bar{U}(\eta)$ – это круг

$|1+\eta| < 2$, а для $\bar{U}^+(\eta)$ – круг $|1-\eta| < 2$.

Искомое решение $U(\eta)$ задачи (1), (2) в замкнутом круге $|1+\eta| \leq 1$ будем представлять в виде разложения $\bar{U}(\eta)$ с весом $\bar{C}$, а в круге $(1-\eta) \leq 1$ – в виде $\bar{U}^+(\eta)$ с весом $\bar{C}^+$:

$$U(\eta) = \bar{C}\bar{U}(\eta), \quad |1+\eta| \leq 1, \quad U(\eta) = \bar{C}^+\bar{U}^+(\eta), \quad |1-\eta| \leq 1, \quad (4)$$

где веса $\bar{C}$ и $\bar{C}^+$ найдем из условия гладкой сшивки разложений (4) в точке $\eta = 0$:

$$\bar{C}\bar{U}(0) = \bar{C}^+\bar{U}^+(0), \quad \bar{C}\bar{U}'(0) = \bar{C}^+\bar{U}'^+(0) \quad (5)$$

Разрешимость системы (5) относительно коэффициентов $\bar{C}$ и $\bar{C}^+$ приводит к равенству нулю вронскиана $W(\bar{U}, \bar{U}^+)$:

$$W(\bar{U}, \bar{U}^+) = \bar{U}(0)\bar{U}'^+(0) - \bar{U}'(0)\bar{U}^+(0) = 0. \quad (6)$$

Решение уравнения (6) позволяет вычислить счетное множество искомых собственных значений λ_p , а затем и соответствующие им собственные функции $U_p(\lambda_p; \eta)$ задачи.

На основе разработанного алгоритма, метода продолжения по параметрам c и b , а также итерационного метода Ньютона было численно исследовано поведение собственных значений λ_p как функций комплексного аргумента c при фиксированном параметре b , т.е. $\lambda_p = F_{p,b}(c)$, и как функций комплексного аргумента b при фиксированном параметре c , т.е. $\lambda_p = H_{p,c}(b)$. С помощью обширных численных экспериментов обнаружено, что функции $F_{p,b}(c)$ имеют точки ветвления 2-го порядка c_s , в которых значения $F_{p,b}(c)$ для различных номеров p_1 и p_2 совпадают: $F_{p_1,b}(c_s) = F_{p_2,b}(c_s)$. Аналогично этому, функции $H_{p,c}(b)$ также имеют свои комплексные особые точки ветвления 2-го порядка b_s , в которых значения $H_{p,c}(b_s)$ для других различных номеров p_3 и p_4 совпадают: $H_{p_3,c}(b_s) = H_{p_4,c}(b_s)$.

С помощью обобщенного итерационного метода Ньютона и квадратичных аппроксимаций Эрмита-Паде было вычислено с высокой точностью большое количество таких точек ветвления c_s и b_s собственных значений λ_n и численно исследованы траектории этих точек при изменении, соответственно, параметров b и c .

Развитый в работе метод обладает существенно более высокой эффективностью, чем известные методы. Он был реализован в задачах [3, 4] о вычислении некоторых специальных функций и спектра оператора Орра-Зоммерфельда.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 13-01-00923) и Программы № 3 ОМН РАН.

Список литературы

1. И.В. Комаров, Л.И. Пономарев, С.Ю. Славянов. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. – М.: Наука. 1976.
2. В.В. Голубев. Лекции по аналитической теории дифференциальных уравнений. – М.-Л.: ГТТИ. 1950.

3. *С.Л. Скороходов.* Методы аналитического продолжения обобщенных гипергеометрических функций ${}_pF_{p-1}(a_1, \dots, a_p; b_1, \dots, b_{p-1}; z)$. // Журнал вычислит. матем. и матем. физ. 2004. Т.44. № 7. С. 1164-1186.
4. *С.Л. Скороходов.* Точки ветвления собственных значений оператора Орра-Зоммерфельда. // Доклады Академии Наук. 2007. Т.416. № 5. С. 600-605.

ПОСТРОЕНИЕ СЕМАНТИЧЕСКИХ СТРУКТУР ДАННЫХ ДЛЯ СЦЕНАРИЕВ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ПРОГРАММНЫХ СИСТЕМ

С.С. Соколов, А.А. Богуславский
cleversokol@gmail.com, anbg74@mail.ru

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

Введение

Обработка видеоданных в режиме реального времени для распознавания объектов и образов является трудной задачей, сложность которой во многом связана со слабой формализацией и высокой изменчивостью входных данных. Алгоритмы, предназначенные для обнаружения образов объектов интереса на отдельных изображениях, не всегда удается успешно применить для обработки видеоданных. Требование обработки в режиме реального времени накладывает дополнительные ограничения на объём возможных вычислений, качество видеосигнала, алгоритмы обработки, мощность вычислительных устройств. Для повышения качества обработки видеоданных и для упрощения разработки высокоуровневых алгоритмов обработки в системах компьютерного зрения реального времени предлагается использовать описания сцен – специальные текстовые документы, описывающие множество объектов, которые могут или должны присутствовать на изображении, а также возможные взаимодействия этих объектов.

Составление документов, содержащих описание сцен, – не стандартизированная и слабо формализованная задача. Можно отметить аналогию между процессом создания текстового описания сцен для обработки видеоданных и процессом создания спецификации требований при разработке программного обеспечения. Проблема формализации требований пользователя особенно явно выявилась в последнее десятилетие в области разработки прикладного программного обеспечения. Были предложены несколько методологий обработки требований [1, 2]. Предполагается, что эти методологии целесообразно применить для формализации требований к системам компьютерного зрения реального времени. Однако, анализ имеющейся литературы [3] позволяет заключить, что это проблематично без дополнительных исследований с целью специализации известных подходов к системам компьютерного зрения реального времени.

В распространённых методологиях объектно-ориентированного проектирования и разработки [4-6] наиболее важным и, в то же время, наименее формализованным является начальный этап создания программного продукта: сбор и формулировка требований и создание первых спецификаций по собранным требованиям. Исходным материалом для требований обычно являются файлы технических заданий и описания сценариев использования, приведённые в свободной текстовой форме. Написание сценариев использования и их последующая обработка, как правило, не формализованы в существующих методологиях объектно-ориентированного проектирования. Для обработки технических заданий, пользовательских требований и

требований предметной области при промышленной разработке ПО привлекают экспертов-аналитиков, обладающих навыками в области проектирования ПО и являющихся специалистами в предметной области. Они формализуют требования и приводят их спецификацию к более строгому виду, уточняя детали и указывая необходимые технические подробности. С ростом количества требований или увеличением объёма описания сцены требуется увеличивать количество экспертов, что оказывается не всегда возможным.

Решением данной проблемы могут быть программы для автоматической обработки текстовых документов со спецификациями, записанными на естественном языке.

1 Технологии обработки данных на естественном языке

При автоматической обработке текста на естественном языке возникает ряд проблем. Можно выделить следующие: отсутствие связей между частями речи, проблема отношений, несбалансированность состава предложения, диалектизмы и жаргонизмы, лексическая и синтаксическая многозначность, речевые обороты и фразеологизмы, а также изменчивость в зависимости от формы слова.

К настоящему времени разработан ряд программных продуктов, предназначенных для обработки текста на естественном языке [7]: Natural Language Toolkit, GATE, OpenNLP, LingPipe, и др. Эти программы построены на разных принципах и используют разные технологии, однако их структура, как правило, однотипна. Программы для автоматической обработки текстовых данных на естественном языке содержат инструменты для выделения предложений, синтаксического анализа, определения языка, выделения лексем и изменяющихся частей слова, удаления пробельных символов. Процесс обработки текстов (особенно если рассматривать ПО с непосредственным взаимодействием компонентов) можно представить в виде конвейера (pipeline), составленного из компонентов, называемых аннотаторами, каждый из которых производит над поступившими им на вход данными определённую операцию.

Одним из ключевых событий в истории создания систем обработки текстовой информации на естественном языке стал запущенный в 1991 г. агентством DARPA (США) проект по созданию специализированного программного обеспечения и соответствующей основанной на аннотациях модели данных TIPSTER [8].

Идеи TIPSTER получили развитие в проекте GATE – General Architecture for Text Engineering (Университет Шеффилда, 1995) [7, 9, 10]. GATE предоставляет набор компонентов для обработки текстов на естественном языке и подходит как для создания приложений, состоящих из этих компонентов, так и для последующего анализа и визуализации результатов с помощью графического интерфейса.

2 Архитектура UIMA

Дальнейшее развитие идеи проекта TIPSTER получили в архитектуре UIMA (Unstructured Information Management Architecture), созданной исследовательской лабораторией Deep QA [11, 12]. В отличие от GATE, UIMA предназначена для обработки не только текстовой информации, но также аудио- и видеоданных [13]. В системе GATE используются встроенные в Java структуры данных, а в UIMA есть специальный промежуточный слой представления данных. UIMA написана на Java и имеет API для Java и C++. UIMA хорошо масштабируется при помощи таких средств, как Apache Hadoop [14].

Архитектуру UIMA можно рассматривать как набор шаблонов проектирования или как описание стандартизованных интерфейсов компонентов канала обработки. UIMA позволяет анализировать большие объёмы неструктурированной информации с

целью извлечения знаний, необходимых конечному пользователю.

UIMA представляет собой конвейер (pipeline), к которому подключены компоненты, каждый из которых производит некоторую операцию над входным текстом. В UIMA используется способ представления данных, основанный на аннотациях, поэтому компоненты конвейера получили название аннотаторы (annotators). Выбор и порядок аннотаторов жёстко не определён и может изменяться в зависимости от решаемой прикладной задачи, так как используется унифицированный формат данных. Программные интерфейсы (API) стандартизованы, что позволяет не только комбинировать существующие компоненты но и реализовать новые.

Первоначально система разрабатывалась для обработки естественных текстов на английском языке. После того как UIMA стала свободным программным обеспечением, стало возможным внедрение поддержки других языков. Это осуществляется посредством модификация или создания новых аннотаторов, в частности тех, которые отвечают за морфологический и синтаксический анализ. Для хранения результатов обработки входного текста UIMA использует структуру CAS (Common Analysis Structure). В CAS применяется “stand-off” модель аннотации, при которой служебная информация (аннотация) «указывает» на элементы исходного текста, а не «обрамляют» его, как теги.

CAS файл представляет собой специальную структуру, которая разбивает текст на отдельные сущности, причём текст остаётся в неизменном виде, а сущности являются «ссылками» на определённые его элементы.

3 Онтологии и OWL

Язык OWL (Web Ontology Language) – язык описания онтологий [16]. Является развитием языков OIL и соответствует синтаксису XML-подобных языков. С 2004 года принят в качестве стандарта консорциумом W3C [15]. Объектам и их свойствам в языке OWL ставится в соответствие свой URI, что позволяет связать стандартный для UIMA CAS с языком описания онтологий. С помощью набора открытых инструментов для создания онтологий и семантических сетей, таких как язык OWL и среда Protégé [17] возможно создание семантической сети из извлечённых на первом этапе понятий и связей между.

Заключение

Для решения задачи автоматической обработки сценариев использования на естественном языке с последующим формированием структур данных пригодных для использования в прикладном программном обеспечении была выбрана архитектура UIMA. Благодаря открытому исходному коду и свободной лицензии, возможна модификация и доработка существующего конвейера обработки. Получаемый в результате обработки формат данных может быть преобразован в удобный для последующей работы формат OWL. OWL позволяет не только быстро строить и использовать семантическую сеть и онтологию, но и наглядно представлять полученные результаты в виде графов.

Идея предложенного подхода состоит в том, чтобы автоматизировать или сделать полностью автоматической обработку неформализованных текстов на естественном языке (к примеру, сценарии использования программных систем, описания сцен видеопоследовательностей). Это позволит упростить разработку высокоуровневых алгоритмов обработки зрительных данных за счет предварительной формализации входных данных и выделения классов обрабатываемых изображений. Полученный на выходе конвейера UIMA CAS-файл, соответствующий спецификации XMI может быть сконвертирован в OWL-файл онтологии, что позволяет производить с ним действия и применять инструменты для работы с онтологиями, такие как Protégé.

В частности, применение Protégé позволяет визуализировать извлечённые данные в виде графов и семантической сети, предоставляет графический интерфейс для эксперта с возможностью внесения правок, изменений и дополнений в онтологию, полученную автоматическими средствами. Полученную итоговую онтологию предлагается использовать в прикладных программных системах, в особенности, в системах компьютерного зрения реального времени.

Список литературы

1. IEEE-830 Recommended Practice for Software Requirements Specifications
2. ISO/IEC/IEEE 29148 Systems and software engineering – Life cycle processes – Requirements engineering
3. *Eric Brown, Eddie Epstein, J. William Murdock, Tong-Haing Fin.* IBM Research Report: Tools and Methods for Building Watson.
4. ISO/IEC 15288 Standard for Systems Engineering – System Life Cycle Processes
5. *W.W. Royce.* Managing the Development of Large Software Systems. Proceedings of IEEE.
6. *В.В. Кулямин.* Технологии программирования. Компонентный подход.
7. *Е.И. Большакова, Э.С. Клышинский, Д.В. Ландэ, А.А. Носков, О.В. Пескова, Е.В. Ягунова.* Автоматическая обработка текстов на естественном языке и компьютерная лингвистика.
8. TIPSTER Text Program. URL: http://www.itl.nist.gov/iaui/894.02/related_projects/tipster/
9. Seth Grimes, Open Source Text Analytics.
10. General Architecture for Text Engineering. URL: <https://gate.ac.uk/>
11. Apache UIMA Project. URL: <https://uima.apache.org/>
12. OASIS Standard for UIMA. URL: <http://docs.oasis-open.org/uima/v1.0/uima-v1.0.html>
13. *E.A. Epstein, M.I. Schor, B.S. Iyer, A. Lally, E.W. Brown, J. Cwiklik.* Making Watson fast.
14. *Marc Hofer.* UIMA scale-out with MapReduce using Apache Hadoop.
15. W3C Standards. URL: http://www.w3.org/standards/techs/owl#w3c_all
16. *Michael K. Smith, Chris Welty, Deborah L. McGuinness.* OWL Web Ontology Language Guide.
17. Protégé: Stanford Center for Biomedical Informatics Research.
URL: <http://protege.stanford.edu/>

РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДА КЛЕТОЧНОГО АВТОМАТА ДЛЯ ITS – ВНУТРЕННЕГО ТРЕКОВОГО ДЕТЕКТОРА УСТАНОВКИ MPD

М.В. Стрельченко¹, А.И. Зинченко¹, Г.А. Ососков²
str_max@mail.ru, Alexander.Zinchenko@jinr.ru, ososkov@jinr.ru

Объединённый институт ядерных исследований

¹ Лаборатория физики высоких энергий им. В.И. Векслера и А.М. Балдина

² Лаборатория информационных технологий

Введение

В данной работе рассматривается алгоритм реконструкции треков частиц в ITS – внутреннем трековом детекторе установки MPD на ускорительном комплексе NICA. Представлена реализация алгоритма клеточного автомата для ITS с учетом специфики этого детектора. Для тестирования алгоритма клеточного автомата и изучения его характеристик использовался генератор Au-Au взаимодействий UrQMD со средней множественностью около 1000 треков. В качестве результата работы алгоритма клеточного автомата получают данные о треках-кандидатах и их приближенных параметрах, необходимые для инициализации работы фильтра Кальмана.

1 ITS – центральный трековый детектор MPD

Основные центральные трековые детекторы эксперимента MPD – время-проекционная камера (TPC) и внутренний кремниевый детектор (ITS). Геометрии TPC (Time-Projection Chamber) и ITS (Inner Tracking System) сильно отличаются по сложности. В отличие от TPC, трековый детектор ITS имеет всего четыре слоя с множеством перекрытий между ними [1]. На рис. 1 представлена схема детектора ITS. В настоящее время одним из часто используемых подходов к проблеме реконструкции треков заряженных частиц является метод Кальман - фильтра. Этот метод предоставляет средства для нахождения трека и его параметров одновременно [2]. Для центрального трекового детектора TPC с его относительно простой геометрией и большим числом измерений на трек (~50) Кальман-фильтр является оптимальным. Недостаточная эффективность метода Кальман-фильтра для поиска треков в ITS связана со сложной геометрией детектора. Близость по углу огромного количества «хитов» в ITS требует особого подхода, в качестве которого был выбран метод клеточного автомата (КА).

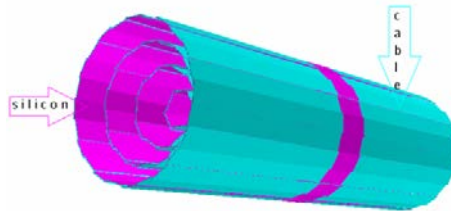


Рисунок 1. Схема детектора ITS

2 Алгоритм клеточного автомата

В задачу программы реконструкции входит нахождение и определение параметров треков, попавших в область координатных детекторов. Реконструкции подлежат все треки, которые относятся к восстанавливаемому событию. Отсев «ложных» и не представляющих интереса с точки зрения физики треков реализуется на более поздних стадиях анализа.

На рис. 2 представлен алгоритм программы реконструкции треков частиц в вершинном детекторе ITS.



Рисунок 2. Схема программы реконструкции треков частиц в вершинном детекторе ITS

Алгоритм КА состоит из двух последовательных этапов:

- формирование треков-сегментов;
- построение треков-кандидатов.
- Кроме того, для последующего фитирования треков требуется определить:
 - начальное значение вектора параметров;
 - исходную матрицу ковариаций этих параметров.

Принцип работы автомата основан на «близости» соседних сегментов. Соседство устанавливалось по двум углам, благодаря малости которых между двумя сегментами их можно объединять. Для каждого слоя детектора вводились «каты» (ограничения по углам) в поперечной плоскости детектора для угла $dangt$ (transverse) и в продольной плоскости для угла $dangl$ (longitudinal). Схематическое представление углов $dangl$ и $dangt$ показано на рис. 3 и 4.

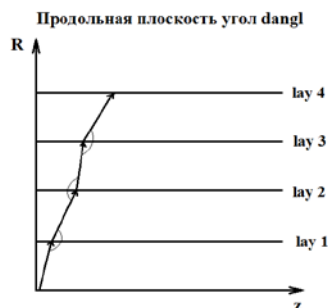


Рисунок 3. Схематическое представление угла $dangle$ в продольной плоскости



Рисунок 4. Схематическое представление угла $dangle$ в поперечной плоскости

Основное различие этих углов в том, что в продольной плоскости трек частицы описывается прямой линией, а в поперечной – дугой окружности из-за отклонения в магнитном поле.

2.1 Реализация алгоритма КА

На первой стадии алгоритма вычислялись угловые распределения $dangle$ и $dangle$ для наборов треков с фиксированным поперечным импульсом p_t . Затем строились зависимости их RMS (root mean square) от p_t . Разброс значений углов для фиксированного p_t связан с влиянием ошибок определения координат хитов и с многократным рассеянием частиц в веществе детектора.

На второй стадии проводится объединение сегментов трека с формированием треков-кандидатов с учетом «катов», полученных на первой стадии, по следующей схеме:

- по двум сегментам, построенным по хитам с первых 3 слоев детектора, оценивается p_t по поперечному углу между сегментами;
- для данного p_t проверяется, лежит ли продольный угол в допустимых пределах;
- процедура повторяется для следующего слоя с использованием информации об углах с предыдущих слоев (с помощью усреднения).

С целью уменьшения числа начальных трековых сегментов для первого слоя устанавливалось ограничение по псевдобыстроте. Кроме того, было предложено использовать процедуру КА в три прохода – на первом осуществлять поиск треков с $p_t > 0.4 \text{ ГэВ/с}$, на втором – с $p_t > 0.2 \text{ ГэВ/с}$, на третьем $p_t > 0.05 \text{ ГэВ/с}$ для оставшихся хитов.

На третьей стадии определяются начальные параметры треков, и строится начальная матрица ошибок для полученных треков-кандидатов. Полученные при помощи клеточного автомата данные сохраняются с целью дальнейшего использования в Кальман-фильтре.

2.2 Результаты работы алгоритмов экстраполяции и оценки параметров треков

На основании полученных результатов работы алгоритма производилась оценка нормированных невязок (pulls), которые показывают правильность оценки ошибок параметров трека. Предполагая правильную оценку ковариационной матрицы, распределения нормированных невязок должны подчиняться нормальному закону распределения со средним значением равным 0 и дисперсией «близкой» к 1. На рис. 5 представлены распределения пуллов, где (ϕ , $\cos\theta$, ϕ , θ) – истинные ошибки, (w_1, w_2, w_3, w_4) – подсчитанные.

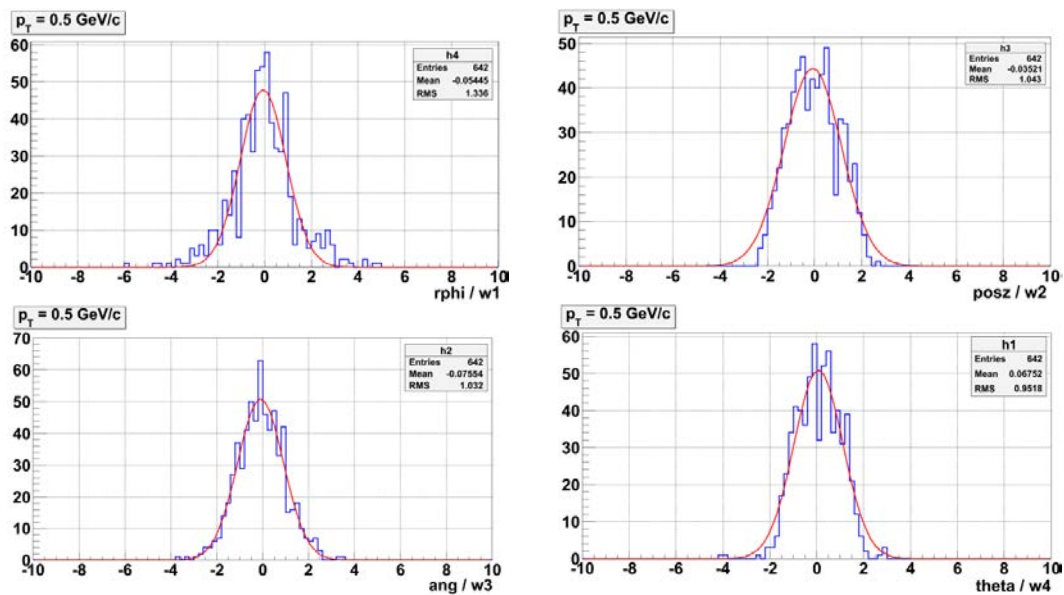


Рисунок 5. Распределения пулов, где (rphi, posz, ang, theta) – истинные ошибки, (w1,w2,w3,w4) – подсчитанные.

Для тестирования алгоритма клеточного автомата и изучения его характеристик использовался генератор Au-Au взаимодействий UrQMD со средней множественностью около 1000 треков. На рис. 6 представлены относительные импульсные разрешения для первичных и вторичных треков.

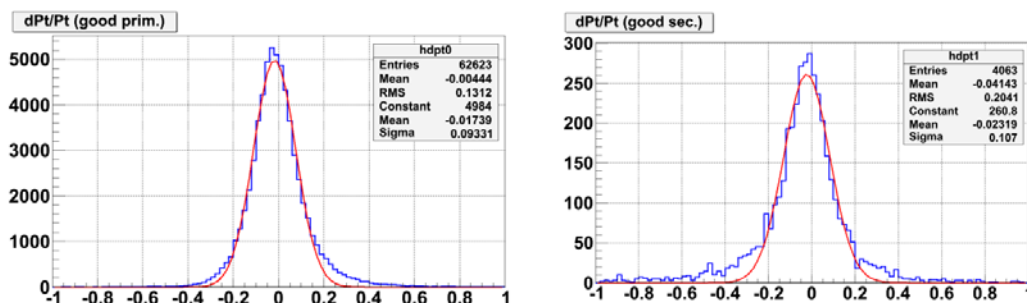


Рисунок 6. Относительные импульсные разрешения для первичных и вторичных треков

Результаты

Реализован алгоритм клеточного автомата для внутреннего трекового детектора ITS в рамках программной оболочки MpdRoot:

- улучшена схема отбора хитов на каждом слое детектора ITS;
- определены пороги в критериях отбора треков-кандидатов на каждом слое детектора;
- реализована процедура поиска треков в три прохода;
- реализованы несколько макросов, позволяющих корректировать параметры треков, а также визуализировать результаты после реконструкции;
- применен метод Кальман-фильтра для треков-кандидатов, полученных при помощи клеточного автомата;
- выполнена работа по ускорению выполнения программы за счет модификации алгоритма клеточного автомата.

Алгоритм клеточного автомата на данном этапе выполняет возложенную на него задачу, однако необходимо дополнительное исследование и доработка с целью повышения его эффективности.

Список литературы

1. K.U. Abraamyan et al. Nucl. Instrum. and Meth. A 628. 2011, p.99.
2. R. Fruehwirth, Nucl. Instr. and Meth. A 262, 1987. Pp. 444-450.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКТИВНОСТИ ИМПУЛЬСНОГО РЕАКТОРА ИБР-2М

Ю.Н. Пепельшев¹, А.К. Попов^{1,2}, Д. Сумхуу^{1,3}
dsumkhuu@jinr.ru

¹ Объединённый институт ядерных исследований,
Лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка

² Филиал МГТУ МИРЭА в г. Дубне

³ Институт физики и технологий МАН

Введение

В импульсном реакторе периодического действия ИБР-2М вращающийся вблизи активной зоны подвижный отражатель создает импульсы реактивности. В результате реактор с периодом $T_H = 0,2$ секунд на короткое время (~ 450 мкс) становится надкритическим на мгновенных нейтронах и с этим же периодом генерирует импульсы мощности длительностью 200 мкс на половине высоты.

В настоящей работе рассмотрена математическая модель реактиметра – устройства для вычисления реактивности реактора, что стало логическим продолжением работ, посвященных созданию модели для анализа динамики импульсных реакторов ИБР-2 и ИБР-2М [1-5].

1 Исходные уравнения кинетики

Реактивность реактора ИБР-2М вычисляется по уравнениям кинетики, соответствующим одноточечной модели реактора:

$$\frac{\tau}{\beta} \frac{dP}{dt} = \frac{\varepsilon}{\beta} P + S, \quad S = \sum_{i=1}^{N_i} S_i, \quad \frac{1}{\lambda_i} \frac{dS_i}{dt} + S_i = \mu_i P. \quad (1)$$

Здесь $P = k_n n$ – мощность реактора (k_n – коэффициент пропорциональности между мощностью и плотностью нейтронов n), λ_i – постоянная распада источников запаздывающих нейтронов группы i ; t – время, $\varepsilon = \rho - \beta$ – реактивность на мгновенных нейтронах (ρ – реактивность); S_i , $S = \sum_i S_i$ – соответственно нормированная интенсивность источников запаздывающих нейтронов группы i и суммарная; $\mu = \beta_i / \beta$ – относительная доля запаздывающих нейтронов группы i , β_i , β – соответственно доля запаздывающих нейтронов группы i и суммарная.

В работе использованы шесть групп запаздывающих нейтронов ($N_i = 6$). Значения параметров запаздывающих нейтронов при делении ^{239}Pu быстрыми нейтронами приняты следующими [6]:

$\beta = 0,00216$; $\mu_i = 0,038$; 0,28; 0,216; 0,328; 0,103; 0,035;

$\lambda_i = 0,0129$; 0,0311; 0,134; 0,331; 1,26; 3,21.

2 Уравнения кинетики импульсного реактора

Амплитуду n -го импульса мощности (как и его энергию) удобно представить в виде произведения [4]:

$$E_{in} = M_n S_n, \quad P_{mn} = M_{pn} S_n, \quad (2)$$

где E_{in} , P_{mn} – энергия и амплитуда импульса мощности, S_n – интенсивность запаздывающих нейтронов перед началом n -го импульса мощности, M_n и M_{pn} – импульсный коэффициент передачи соответственно для энергии и для амплитуды импульса мощности.

Импульсные коэффициенты передачи M и M_p , вычисленные по уравнениям (1) и (2), представляют собой нелинейные функции максимального значения реактивности в импульсе ε_m . В модели реактиметра использованы полученные из этих функций зависимости ε_m от M и M от M_p (рис. 1).

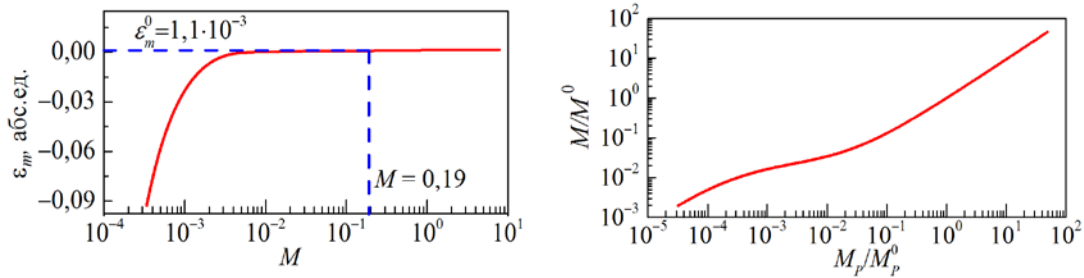


Рисунок 1. Слева зависимость максимальной реактивности ε_m от импульсного коэффициента передачи для энергии импульса мощности M . Справа зависимость импульсного коэффициента передачи для энергии M от импульсного коэффициента передачи для амплитуды импульса мощности M_p (в относительных единицах).

В рабочем режиме ширина импульсов мощности на половине высоты на три порядка меньше периода импульсов. Поэтому импульсы мощности рассматриваются как идеальные (бесконечно узкие) с энергией E_n . В интервалах между импульсами мощности реактор глубоко подкритичен, его реактивность (реактивность фона) на мгновенных нейтронах описана как $\varepsilon_\phi = \varepsilon_m - \Delta k_{по}$, где ε_m – максимальное значение реактивности (надкритичность) в импульсе, $\Delta k_{по} = 0,026$ – эффективность подвижного отражателя. Для интервалов между импульсами мощности $dP/dt \approx 0$. Поэтому мощность фона можно определить из уравнения (1) как $P_\phi = \beta S / (-\varepsilon_\phi) = \beta S / (\Delta k_{по} - \varepsilon_m)$, а энергию фона как $E_\phi = P_\phi T_n = \beta T_n S / (\Delta k_{по} - \varepsilon_m)$. Поскольку между импульсами выделяется лишь 8,6 % от всей энергии реактора, то для удобства принято, что энергия фона E_ϕ выделяется не непрерывно, а тоже в виде бесконечно узких импульсов, причем совмещенных с импульсами мощности. С учетом этих упрощений мощность реактора рассматривается как последовательность идеальных импульсов. При таком представлении мощности из уравнений (1)-(2) вытекают алгебраические уравнения (3), связывающие значения безразмерных переменных в дискретные моменты времени [4] – в моменты, соответствующие текущему импульсу мощности (с индексом n) и предшествующему (с индексом $n-1$). Базовые значения параметров помечены верхним индексом 0.

$$\begin{aligned}
\frac{E_n}{E^0} &= \frac{E_{\text{ин}}}{E^0} + \frac{E_{\text{фн}}}{E^0}, \quad \frac{E_{\text{ин}}}{E^0} = \frac{E_{\text{ин}}}{E_{\text{и}}^0} \frac{E_{\text{и}}^0}{E^0}, \quad \frac{E_{\text{фн}}}{E^0} = k_{\text{фн}} \frac{S_n}{S^0}, \\
k_{\text{фн}} &= \frac{E_{\text{фн}}}{S_n} \frac{S^0}{E^0} = \frac{\beta T_{\text{и}}}{\Delta k_{\text{по}} - \varepsilon_{\text{mn}}} \sum_i \mu_i \lambda_i \frac{1}{e^{\lambda_i T_{\text{и}}} - 1}, \\
\frac{S_n}{S^0} &= \sum_i \frac{S_{\text{ин}}}{S^0}, \quad \frac{S_{\text{ин}}}{S^0} = \left(\frac{S_{\text{ин-1}}}{S^0} + \mu_i \lambda_i \frac{E^0}{S^0} \frac{E_{\text{и-1}}}{E^0} \right) e^{-\lambda_i T_{\text{и}}}, \\
\frac{E_{\text{ин}}}{E_{\text{и}}^0} &= \frac{S_n}{S^0} \frac{M_n}{M^0}, \quad \frac{P_{\text{mn}}}{P_m^0} = \frac{S_n}{S^0} \frac{M_{Pn}}{M_P^0}.
\end{aligned} \tag{3}$$

Постоянные величины S^0/E^0 и $E_{\text{и}}^0/E^0$ в уравнениях (3) вычисляются по формулам:

$$\begin{aligned}
\frac{S^0}{E^0} &= \sum_i \mu_i \lambda_i \frac{e^{-\lambda_i T_{\text{и}}}}{1 - e^{-\lambda_i T_{\text{и}}}} = \sum_i \mu_i \lambda_i \frac{1}{e^{\lambda_i T_{\text{и}}} - 1}, \\
k_{\text{ф}}^0 &= \frac{E_{\text{ф}}^0}{E^0} = \frac{\beta T_{\text{и}}}{\Delta k_{\text{по}} - \varepsilon_m^0} \frac{S^0}{E^0} = \frac{\beta T_{\text{и}}}{\Delta k_{\text{по}} - \varepsilon_m^0} \sum_i \mu_i \lambda_i \frac{1}{e^{\lambda_i T_{\text{и}}} - 1}, \\
\frac{E_{\text{и}}^0}{E^0} &= 1 - k_{\text{ф}}^0.
\end{aligned} \tag{4}$$

В уравнениях (3) и (4) $E_{\text{ин}}$, $E_{\text{фн}}$, $E_n = E_{\text{ин}} + E_{\text{фн}}$ – энергия, выделяемая соответственно в n -м импульсе мощности, в интервале между n -м и $(n-1)$ -м импульсами (энергия фона) и полная за период импульсов $T_{\text{и}}$; $E_{\text{ин}}/E^0$ – отношение энергии импульса мощности к ее базовому значению $E_{\text{и}}^0$; M , M^0 и M_P , M_P^0 – импульсный коэффициент передачи и его базовое значение соответственно для энергии и для амплитуды импульса мощности; ε_m – максимальная реактивность в импульсе; $k_{\text{фн}}$ – параметр соответствующий n -му импульсу мощности (для штатного режима, когда $S_n \approx S^0$, примерно равный доле энергии фона от базового значения полной энергии); $k_{\text{ф}}^0$ – базовое значение параметра $k_{\text{фн}}$ (доля энергии фона от полной энергии в базовом режиме).

3 Модель реактиметра и результаты моделирования переходных процессов

В импульсном реактиметре использованы также отклонения переменных от их базовых значений (реактивность – в абсолютных единицах, остальные – в относительных единицах):

$$\Delta \varepsilon_{\text{mn}} = \varepsilon_{\text{mn}} - \varepsilon_m^0, \quad \Delta e_n = (E_n - E^0)/E^0 = (E_n/E^0) - 1, \quad \Delta s_{\text{ин}} = (S_{\text{ин}} - S_i^0)/S^0, \tag{5}$$

$$\Delta s_{\text{ин}} = \left[\Delta s_{\text{ин-1}} + \mu_i \lambda_i (E^0/S^0) \Delta e_{\text{и-1}} \right] e^{-\lambda_i T_{\text{и}}}, \quad \Delta s_n = \sum_i \Delta s_{\text{ин}} = (S_n/S^0) - 1. \tag{6}$$

В ИБР-2М регистрируется амплитуда каждого (n -го) импульса мощности P_{mn} . Входной величиной импульсного реактиметра является относительная амплитуда импульса мощности P_{mn}/P_m^0 , где P_m^0 – базовое (заданное) значение амплитуды импульса мощности. Выходной величиной является вычисленное по уравнениям (3) и (4) максимальное значение реактивности ε_{mn} , соответствующее n -му импульсу. Для проверки модели реактиметра использовано изменение относительной амплитуды импульса мощности и соответствующее ему изменение реактивности при сбросе мощности. Изменение реактивности, обусловленное сбросом аварийной защиты (АЗ),

было вычислено по перемещению органов СУЗ [4]. Амплитуда импульса мощности при этом уменьшилась почти на 5 порядков. Изменение мощности и реактивности (вычисленной и измеренной) при сбросе аварийной защиты (АЗ), представлено на рис. 2. На рис. 2.б показаны экспериментально зарегистрированная относительная амплитуда импульсов мощности и соответствующая ей реактивность, смоделированная на реактиметре. В результате моделирования получен переходный процесс изменения реактивности, который практически совпал с реактивностью, вычисленное по перемещению органов СУЗ (рис. 2.а), что свидетельствует о приемлемости модели реактиметра.

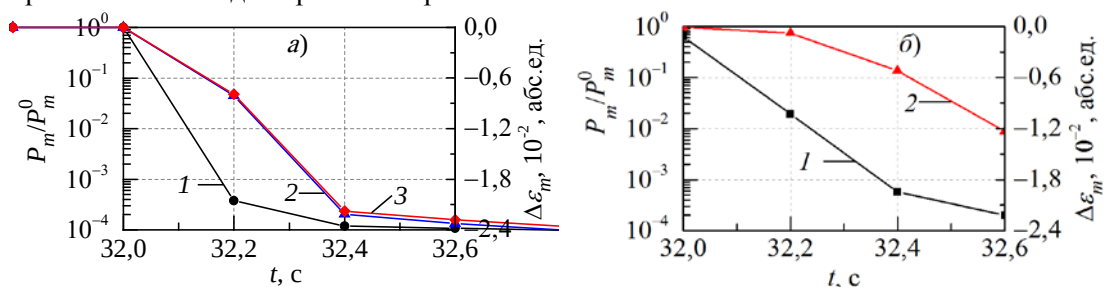


Рисунок 2. Изменение мощности и реактивности при сбросе аварийной защиты ИБР-2М.
а) Относительная амплитуда импульсов мощности (1) и соответствующая ей реактивность (2 – вычисленная на модели реактиметра, 3 – вычисленная по перемещению органов СУЗ).
б) Экспериментально зарегистрированная относительная амплитуда импульсов мощности при сбросе АЗ (1) и соответствующая ей реактивность (2)

Заключение

Создана математическая модель реактиметра импульсного реактора периодического действия. Модель основана на уравнениях кинетики импульсного реактора периодического действия типа ИБР-2, которые представлены в виде разностных уравнений, связывающих параметры реактора, соответствующие текущему и предшествующему импульсам мощности. В модели реактиметра учтены нелинейные зависимости энергии импульса мощности и его амплитуды от реактивности. Практическое совпадение переходных процессов смоделированных на реактиметре при сбросе мощности и полученных ранее на модели реактора подтвердило правильность работы модели реактиметра.

Список литературы

1. А.К. Попов, Ю.Н. Пепельшев, Е.А. Бондарченко. The model of the IBR-2 pulsed reactor dynamics and investigation of pulse energy stabilization. // Nuclear Technology. 2002. V.139. №1. Pp. 21-29.
2. Е.А. Бондарченко, Ю.Н. Пепельшев, А.К. Попов. Экспериментальное и модельное исследование особенностей динамики импульсного реактора периодического действия ИБР-2. // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2004 Т.35. Вып. 4. С.928-983.
3. Ю.Н. Пепельшев, А.К. Попов, Д. Сангаа, Д. Сумхуу. Модель динамики импульсного реактора ИБР-2М для анализа быстрых переходных процессов. Препринт ОИЯИ Р13-2013-34, Дубна, 2013.
4. Ю.Н. Пепельшев, А.К. Попов, Д. Сумхуу. Модель динамики импульсного реактора ИБР-2М для исследования переходных процессов в широком диапазоне изменения мощности. Препринт ОИЯИ Р13-2014-14, Дубна, 2014.
5. А.К. Попов. Основы управления ядерным реактором: Учебное пособие: – М.: Московский государственный университет. 2012. 208 с.
6. Дж.Р. Киппин. Физические основы кинетики ядерных реакторов. Пер. с англ. М. – Атомиздат. 1967.

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕХНОЛОГИИ CUDA ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ЗАДАЧ 3D СЕЙСМИКИ В ОДНОРОДНОЙ СРЕДЕ

А.Е. Тархов¹, Н.И. Хохлов², С.Ю. Никитин¹

tarkhov.andrey@gmail.com, k_h@inbox.ru, sergeynikitin007@yandex.ru

¹ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,

² Московский физико-технический институт

Введение

В данной работе разрабатывается параллельный алгоритм расчета распространения акустических волн в трехмерной однородной геологической среде на графических процессорах с использованием технологии CUDA. Задачи 3D сейсмологии имеют крупные характерные масштабы по пространственным и временным координатам, так характерные размеры могут составлять сотни километров, а характерные времена – от нескольких минут до часов. При этом, например, для предсказаний землетрясений и цунами в режиме реального времени необходима высокая скорость расчета больших объемов данных, которую могут обеспечить графические процессоры.

Для корректного моделирования таких задач необходимы методы, обладающие высокой пространственной и временной точностью, в данной работе используется сеточно-характеристический метод [1] и конечно-объемные методы [9] применительно к численному решению системы уравнений механики твердого тела. Данные методы позволяют применить монотонную разностную схему повышенной точности [2, 5].

Ресурсоемкость задач 3D моделирования приводит к необходимости параллелизации алгоритмов ее расчета. При разработке параллельного алгоритма была учтена особенность задачи 3D сейсмологии – ее внутренний параллелизм по данным.

1 Математическая модель

Математически модель задачи 3D сейсмологии в однородной среде описывается замкнутой системой уравнений нестационарной теории упругости [3], которая в тензорном представлении имеет вид:

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} = \nabla_j \sigma_{ij}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial t} = q_{ijkl} \frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial t}, \quad (2)$$

где ρ – плотность среды, v_i – компоненты вектора скорости, σ_{ij} , ε_{ij} – компоненты тензоров напряжения и деформаций, ∇_k – ковариантная производная по k -ой координате. Тензор q_{ijkl} задается в соответствии с реологией среды. В приближении малых деформаций (изотропное линейно-упругое тело) его можно записать в виде [3]:

$$q_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}), \quad (3)$$

где δ_{ij} – символ Кронекера, λ и μ – постоянные Ламе.

В трехмерном случае:

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} - \frac{1}{\rho} \nabla_j \sigma_{ij} = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial t} = \lambda \delta_{ij} \frac{\partial \varepsilon_{kk}}{\partial t} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial t}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial t} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right), \quad (6)$$

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial t} = \lambda \delta_{ij} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} + \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right). \quad (7)$$

Записывая систему уравнений в матричном виде относительно вектора $\mathbf{u} = (v_x, v_y, v_z, \sigma_{xx}, \sigma_{xy}, \sigma_{xz}, \sigma_{yy}, \sigma_{yz}, \sigma_{zz})^T$, получим:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{A}_x \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} + \mathbf{A}_y \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} + \mathbf{A}_z \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z} = 0, \quad (8)$$

где $\mathbf{A}_x, \mathbf{A}_y, \mathbf{A}_z$ – матрицы размера 9×9 , явные выражения не приводятся в силу их громоздкости. Эти матрицы можно диагонализировать:

$$\mathbf{A}_\alpha = \mathbf{\Omega}_\alpha \mathbf{\Lambda}_\alpha \mathbf{\Omega}_\alpha^{-1}, \quad (9)$$

где $\alpha = x, y, z$ нумерует пространственный индекс, матрицы $\mathbf{\Lambda}_\alpha = \text{diag}(0, 0, 0, -c_s, -c_s, c_s, c_s, -c_p, c_p)$ имеют одинаковый вид для всех пространственных координат и введены обозначения скоростей: $c_s = \sqrt{\mu/\rho}$ – скорость распространения поперечных волн в среде, $c_p = \sqrt{(\lambda + 2\mu)/\rho}$ – скорость распространения продольных волн в среде. Столбцы матриц $\mathbf{\Omega}_\alpha$ являются собственными векторами матрицы $\mathbf{A}_\alpha$.

После расщепления по трем пространственным координатам получим три одномерных системы:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{A}_\alpha \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_\alpha} = 0, \quad \text{где } \alpha = x, y, z. \quad (10)$$

Умножение каждого из этих уравнений на соответствующую матрицу $\mathbf{\Omega}_\alpha$ слева позволяет привести систему к диагональному виду относительно новых переменных:

$$\mathbf{w}_\alpha = \mathbf{\Omega}_\alpha^{-1} \mathbf{u}, \quad (11)$$

$$\frac{\partial \mathbf{w}_\alpha}{\partial t} + \mathbf{\Lambda}_\alpha \frac{\partial \mathbf{w}_\alpha}{\partial x_\alpha} = 0 \quad (12)$$

где $\alpha = x, y, z$ нумерует пространственный индекс.

Переход к старым переменным осуществляется преобразованием:

$$\mathbf{u} = \mathbf{\Omega}_\alpha \mathbf{w}_\alpha.$$

Отметим, что диагональный вид матриц $\mathbf{\Lambda}_\alpha$ приводит к тому, что система (12) распадается на 9 независимых скалярных уравнений.

В результате, на каждом временном шаге алгоритма схема решения задачи после расщепления по переменным (10) (описанную ниже схему нужно повторить для каждой пространственной координаты $\alpha = x, y, z$) состоит из трех шагов:

1. Переход к новым координатам $\mathbf{w}_\alpha$ (11);
2. Решение системы независимых скалярных уравнений (12) относительно компонент вектора $\mathbf{w}_\alpha$;
3. Переход к старым координатам $\mathbf{u}$ (13).

2 Численная схема

Для решения каждого из независимых скалярных уравнений диагонализированной

системы (12) применяется монотонная противопоточно-центрированная схема для законов сохранения (схема MUSCL – “Monotonic Upstream-Centered Scheme for Conservation Laws”, разработанная Ван Липом [4]) с ограничителями потока (концепция TVD – “total variation diminishing”, разработанная Хартемом [5]). Монотонность схемы позволяет избавиться от нефизичных осцилляций решения. Избавление от осцилляций такого вида особенно важно для задач сейсмологии, исследующих волновые процессы в областях разрывов и разломов среды. Теорема Годунова [6] утверждает, что линейная монотонная схема может иметь порядок точности не выше первого, но применение нелинейного ограничителя потока, например, ограничителя SuperBee [7], имеющего вид:

$$\phi_{sb}(r) = \max[0, \min(2r, 1), \min(r, 2)] \quad (15)$$

позволяет достичь второго порядка точности по пространственным координатам с сохранением свойства монотонности разностной схемы [5].

После перехода к новым координатам (11) для вычисления значений компонент вектора $\mathbf{w}_a$ на следующем временном шаге используется описанная ниже разностная схема. Схема реализуется трижды для всех значений пространственного индекса $\alpha = x, y, z$, что следует из метода расщепления по пространственным координатам (10), из соображений краткости опишем схему только для прохода вдоль пространственной координаты x , опустив при этом пространственный индекс. Введем равномерную трехмерную прямоугольную сетку и, обозначив одну из компонент вектора $\mathbf{w} = \mathbf{w}_{x,l}$, где $l \in 1 \dots 9$, запишем схему решения системы уравнений (12) (Хартен, [5]):

$$w_{i,j,k}^{n+1} = F_{TVD}(w_{i-2,j,k}^n, w_{i-1,j,k}^n, w_{i,j,k}^n, w_{i+1,j,k}^n), \quad (16)$$

где i, j, k , – нумеруют пространственные узлы сетки $i \in 2 \dots N_x - 2$, $j \in 0 \dots N_y - 1$, $k \in 0 \dots N_z - 1$ граничные значения $w_{i,j,k}^{n+1}$ при $i = 0, 1$ и $i = N_x - 2, N_x - 1$ выбираются равными $w_{2,j,k}^{n+1}$ и $w_{N_x-3,j,k}^{n+1}$ соответственно. Это соответствует предположению, что во время расчета процесс локализован вдали от границы области и не успевает ее достичь, n – номер шага по времени, $n \in 1 \dots N_t$. Заметим, что в формуле (16) вычисления по индексам (n, i) независимы для различных пар (j, k) , что эффективно снижает размерность задачи до двухмерной и позволяет распараллелить вычисления по различным наборам (j, k) . Для краткости записи дальше опустим индексы n, j, k , т.к. в выражениях ниже они остаются постоянными. Тогда функция F_{TVD} (Хартен, [5]) имеет вид:

$$F_{TVD}(w_{i-2}, w_{i-1}, w_i, w_{i+1}) = w_i - \alpha \left(g_{i+\frac{1}{2}} - g_{i-\frac{1}{2}} \right), \quad (17)$$

где

$$g_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \phi_{sb} \left(\frac{w_i - w_{i-1}}{w_{i+1} - w_i} \right) (1 - \alpha) (w_{i+1} - w_i) + w_i, \quad (18)$$

$$g_{i-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \phi_{sb} \left(\frac{w_{i-1} - w_{i-2}}{w_i - w_{i-1}} \right) (1 - \alpha) (w_i - w_{i-1}) + w_{i-1}, \quad (19)$$

при этом $\alpha = \frac{\Lambda_l \tau}{h}$ – число Куранта для равномерной сетки с шагом по времени τ , по пространственной координате – h_x , Λ_l – собственное значение матрицы $\mathbf{A}_x$, а $\phi_{sb}(r)$ – ограничитель потока SuperBee (14) [7]. После вычисления по этой схеме $\mathbf{w}_{x,l}$

для всех $l \in 1 \dots 9$ выполняется обратное преобразование к переменным $\mathbf{u}$ (13), а затем аналогичные вычисления проводятся для проходов вдоль двух оставшихся координатных осей, т.е. для $\alpha = y, z$.

3 Параллельная реализация

Расщепление по пространственным переменным (10) и независимость вычислений для различных пар (j, k) (16) приводят к возможности распараллелить вычисления по этим парам. На примере схемы (16) параллельная вычислительная нить с координатами (j_m, k_m) получает данные с индексами j, k из интервала $j \in j_m \dots j_{m+1} - 1, k \in k_m \dots k_{m+1} - 1$.

В расчетах использовались вещественные числа двойной точности. Запуск параллельной версии программы производился на видеокарте NVIDIA Tesla M2070, а последовательной – на ноутбуке MacBook Pro с процессором Intel Core i7 2GHz.

Разница между результатами выполнения последовательной и параллельной программы на модельной задаче (сетка 64^3 , начальное условие – сферическое возмущение давления единичной амплитуды в центре области, радиусом 10 пространственных шагов, для 200 шагов по времени) не превышает величины машинного нуля для вещественных чисел двойной точности.

Были проведены модельные расчеты для сферической и плоской продольных волн, а также для плоской поперечной волны. Проверено соответствие скорости распространения волн в численном эксперименте теоретическим значениям, а также качественное соответствие результатов расчета теоретически ожидаемому поведению решений.

Скорость вычислений для данной задачи ограничивается операциями доступа к памяти, в связи с этим важен способ хранения данных. В разработанном алгоритме значения компонент вектора $\mathbf{u}$ для каждого из узлов расположены в памяти последовательно. При такой организации памяти удалось достичь ускорения по сравнению с последовательной программой в 20 раз (при использовании вещественных чисел одинарной точности), и до 7 раз (для чисел двойной точности) на сетках $64^3, 128^3, 256^3$.

Заключение

Представленный в данной работе параллельный алгоритм решения задачи 3D сейсмологии в однородной геологической среде с использованием технологии CUDA с точностью машинного нуля согласуются с последовательным алгоритмом. На модельных задачах алгоритм показывает качественное согласие с ожидаемым видом решения и количественное со скоростями распространения продольных и поперечных возмущений.

Работа выполнена в рамках Летней студенческой программы 2014 в ЛИТ ОИЯИ [10].

Список литературы

1. *К.М. Магомедов, А.С. Холодов.* Сеточно-характеристические численные методы. – М.: Наука. 1988. 288 с.
2. *А.С. Холодов, Я.А. Холодов.* О критериях монотонности разностных схем для уравнений гиперболического типа. // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2006. Т.46. № 9. С. 1560-1588.
3. Сейсморазведка. Справочник геофизика / Под ред. И.И. Гурвича, В.П. Номоконова. – М.: «Недра», 1981. 464 с.
4. *B. Van Leer.* Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov's method // Journal of computational Physics. 1979. Т.32. № 1. Pp. 101-136.

5. A. Harten. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. // Journal of computational physics. 1983. Т.49. № 3. Pp. 357-393.
6. S.K. Godunov. A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics. // Matematicheskii Sbornik. 1959. Т.89. № 3. Pp. 271-306.
7. P.L. Roe. Characteristic-Based Schemes for the Euler Equations. // Annual Review of Fluid Mechanics. 1986. № 18. Pp. 337-365.
8. И.Б. Петров, Н.И. Хохлов. Моделирование задач 3D сейсмологии на высокопроизводительных вычислительных системах. // Математическое моделирование. 2014. Т.26. № 1. С. 83-95.
9. R.J. LeVeque. Finite volume methods for hyperbolic problems. – Cambridge university press, 2002. Т.31.
10. Летняя студенческая программа 2014 года в Объединенном Институте Ядерных Исследований. URL: <http://students.jinr.ru/index.php/ru/summer-2014>.

ЭФФЕКТИВНЫЙ АЛГОРИТМ ДЕКОМПОЗИЦИИ БУЛЕВЫХ ПОЛИНОМОВ

А.В. Трепачева

alina1989malina@ya.ru

Южный федеральный университет

Введение

Декомпозиция булевых функций является очень актуальной как в теоретическом, так и в практическом аспектах. Наличие эффективных алгоритмов декомпозиции важно для решения задач оптимизации размера электронных логических схем [1] и оптимального хранения булевых полиномов в памяти компьютера [2]. Также декомпозиция булевых функций находит применение в верификации ПО [3] и может быть применена для повышения эффективности методов решения систем булевых алгебраических уравнений [4]. Последнее имеет большое значение для криптоанализа некоторых шифров [5].

На настоящий момент существуют некоторые алгоритмы декомпозиции булевых функций [1, 6-7]. В зависимости от выбранного представления булевой функции (КНФ, ДНФ, полином Жегалкина и т.д.) они отличаются друг от друга по принципу работы. Сложность существующих алгоритмов в основном является экспоненциальной. По большей части они ориентированы на некоторые частные случаи.

Также необходимо отметить, что в основном рассматривается проблема декомпозиции булевых функций, представленных именно в виде КНФ или ДНФ. Декомпозиции же в случае представления полиномами Жегалкина (булевыми полиномами) уделяется мало внимания.

В данной работе предлагается эффективный алгоритм декомпозиции булевых функций от n переменных, представленных в виде булевых полиномов. Он основан на алгоритме декомпозиции полиномов в кольце $\mathbb{F}_2[x_1, \dots, x_n]$, предложенном в [8]. Обсуждается применение данного алгоритма для криптоанализа гомоморфного шифра из работы [9].

1 Математическая постановка задачи

Рассмотрим кольцо булевых полиномов $\mathbb{B}[x_1, \dots, x_n] = \mathbb{F}_2[x_1, \dots, x_n] / (x_1^2 - x_1, \dots, x_n^2 - x_n)$, где $\forall f \in \mathbb{B}[x_1, \dots, x_n]$ имеет вид

$$f(x_1, \dots, x_n) = \sum_{\{i_1, \dots, i_k\} \subset \{1, \dots, n\}} b_{i_1, \dots, i_k} \cdot x_{i_1} \cdot \dots \cdot x_{i_k}, \quad b_{i_1, \dots, i_k} \in \mathbb{F}_2. \quad \text{Здесь } + \text{ и } \cdot \text{ вычисляются по}$$

модулю 2, т.е. это XOR и AND соответственно.

Задача декомпозиции булевых полиномов: Пусть есть множество полиномов $h = \{h_1, \dots, h_u\}$, $h_i \in \mathbb{B}[x_1, \dots, x_n]$, $\deg(h_i) > 2$. Необходимо найти их представление в виде $\forall i: h_i = f_i(g_1(x_1, \dots, x_n), \dots, g_n(x_1, \dots, x_n))$, где $\forall i: f_i, g_i \in \mathbb{B}[x_1, \dots, x_n]$, $\deg(f_i) \geq 2$, $\deg(g_i) \geq 2$.

Отметим, что данная постановка не является достаточно общей. Для некоторых практических приложений (например, для оптимизации размера логических схем) нужно искать такую декомпозицию, чтоб f_i были полиномами от числа переменных $< n$. А также может быть необходимо, чтобы все g_i были полиномами от разных наборов переменных. Однако в нашем случае основной целью было проведение криптоанализа криптосистемы из [9]. Для этого рассмотрение задачи декомпозиции в указанной постановке является достаточным.

2 Алгоритм декомпозиции многочленов в $\mathbb{F}_2[x_1, \dots, x_n]$

В работе [8] был предложен эффективный алгоритм декомпозиции полиномов произвольной степени в $\mathbb{F}_q[x_1, \dots, x_n]$. Кратко напомним основные принципы его работы.

Пусть есть набор полиномов $h = \{h_1, \dots, h_u\}$, $h_i \in \mathbb{F}_q[x_1, \dots, x_n]$, $\deg(h_i) > 2$ и $d_h = \deg(h_1) = \dots = \deg(h_u)$. Необходимо найти $f = \{f_1, \dots, f_u\} \in \mathbb{F}_2[x_1, \dots, x_n]^u$ и $g = \{g_1, \dots, g_n\} \in \mathbb{F}_2[x_1, \dots, x_n]^n$ такие, что выполняется $h = (h_1, \dots, h_u) = (f_1(g_1, \dots, g_n), \dots, f_u(g_1, \dots, g_n))$, где $\forall i: \deg(f_i) \geq 2$, $\deg(g_i) \geq 2$, $d_g = \deg(g_1) = \dots = \deg(g_n)$ и $d_f = \deg(f_1) = \dots = \deg(f_u)$. Предложенный в [8] алгоритм получает на вход h и d_g , d_f . Основные его этапы следующие:

1) Вычисляются кандидаты на роль $g = \{g_1, \dots, g_n\}$. Для этого в [8] предлагается определить векторное пространство $L(g) = \text{Span}_{\mathbb{F}_2}(g_1, \dots, g_n)$. Это делается с помощью вычисления редуцированных базисов Гребнера последовательности идеалов, порожденной специальным образом от идеала $I_h = \left\langle \frac{\partial h_i}{\partial x_j} \right\rangle_{i=1..u, j=1..n}$. Ключевым моментом здесь является то, что при условии, что $h = f \circ g$ из I_h можно извлечь идеал I_g^p , являющийся p -й степенью идеала $I_g = (g_1, \dots, g_n)$.

2) На основе $\{g_1, \dots, g_n\}$ и $\{h_1, \dots, h_u\}$ с помощью методов линейной алгебры вычисляются коэффициенты f_i .

Представленный в [8] алгоритм вычисляет нетривиальную декомпозицию. Это означает, что исключается $f = \{x_1, \dots, x_u\}$, $g = \{h_1, \dots, h_u, 0, \dots, 0\}$, $h = f$, $g = \{x_1, \dots, x_n\}$. При этом необходимо отметить, что вычисляемая декомпозиция всегда неоднозначна с точностью до линейной подстановки. В самом деле, если найдена некоторая декомпозиция $\forall i: h_i = f_i(g_1, \dots, g_n)$, то для любого линейного обратимого преобразования $A = \{A_1, \dots, A_n\}$, где $A_i(x_1, \dots, x_n) = \sum_{j=1}^n a_{i,j} \cdot x_j$, $a_{i,j} \in \mathbb{F}_2$ верно, что

$$h_i = (f_i \circ A^{-1}) \circ (A \circ g).$$

Авторы [8] доказали, что их алгоритм работает за время полиномиальное от количества переменных n .

3 Декомпозиция булевых полиномов

Кольцо булевых полиномов $\mathbb{B}[x_1, \dots, x_n] = \mathbb{F}_2[x_1, \dots, x_n] / (x_1^2 - x_1, \dots, x_n^2 - x_n)$ является факторкольцом $\mathbb{F}_2[x_1, \dots, x_n]$, построенным по идеалу $I = (x_1^2 - x_1, \dots, x_n^2 - x_n)$. На основании этого задачу декомпозиции в $\mathbb{B}[x_1, \dots, x_n]$ можно попытаться свести к декомпозиции в $\mathbb{F}_2[x_1, \dots, x_n]$. Изучим вопрос о том, как соотносятся декомпозиция в кольце и факторкольце.

Известно, что существует канонический гомоморфизм $\varphi: \mathbb{F}_2[x_1, \dots, x_n] \mapsto \mathbb{B}[x_1, \dots, x_n]$, который вычисляется следующим образом

$$f(x_1, \dots, x_n) = \sum_{\{i_1, \dots, i_k\} \subset \{1, \dots, n\}} a_{i_1, \dots, i_k} \cdot x_{i_1}^{d_1} \cdot \dots \cdot x_{i_k}^{d_k} \mapsto \varphi(f) = \tilde{f}(x_1, \dots, x_n) = \sum_{\{i_1, \dots, i_k\} \subset \{1, \dots, n\}} a_{i_1, \dots, i_k} \cdot x_{i_1} \cdot \dots \cdot x_{i_k}.$$

Отображение φ , очевидно, сохраняет сумму, произведение, 0 и 1.

Пусть есть полином $h \in \mathbb{F}_2[x_1, \dots, x_n]$ и известна его декомпозиция $h = f(g_1(x_1, \dots, x_n), \dots, g_n(x_1, \dots, x_n))$, где $f(x_1, \dots, x_n) = \sum_{\{i_1, \dots, i_k\} \subset \{1, \dots, n\}} a_{i_1, \dots, i_k} \cdot x_{i_1}^{d_1} \cdot \dots \cdot x_{i_k}^{d_k}$. Ясно,

что справедливо $h(x_1, \dots, x_n) = \sum_{\{i_1, \dots, i_k\} \subset \{1, \dots, n\}} a_{i_1, \dots, i_k} \cdot (g_{i_1})^{d_1} \cdot \dots \cdot (g_{i_k})^{d_k}$. Тогда на основании

свойств φ получаем следующую цепочку равенств:

$$\begin{aligned} \varphi(h(x_1, \dots, x_n)) &= \tilde{h} = \varphi\left(\sum_{\{i_1, \dots, i_k\} \subset \{1, \dots, n\}} a_{i_1, \dots, i_k} \cdot (g_{i_1})^{d_1} \cdot \dots \cdot (g_{i_k})^{d_k}\right) = \\ &= \sum_{\{i_1, \dots, i_k\} \subset \{1, \dots, n\}} a_{i_1, \dots, i_k} \cdot \varphi((g_{i_1})^{d_1}) \cdot \dots \cdot \varphi((g_{i_k})^{d_k}) = \sum_{\{i_1, \dots, i_k\} \subset \{1, \dots, n\}} a_{i_1, \dots, i_k} \cdot \varphi(g_{i_1}) \cdot \dots \cdot \varphi(g_{i_k}) = \\ &= \sum_{\{i_1, \dots, i_k\} \subset \{1, \dots, n\}} a_{i_1, \dots, i_k} \cdot \tilde{g}_{i_1} \cdot \dots \cdot \tilde{g}_{i_k} = \tilde{f}(\tilde{g}_1, \dots, \tilde{g}_n). \end{aligned}$$

Отсюда следует, что если удалось найти нетривиальную декомпозицию $h(x_1, \dots, x_n)$ в $\mathbb{F}_2[x_1, \dots, x_n]$, то тем самым найдена декомпозиция $\varphi(h) = \varphi(f)(\varphi(g_1), \dots, \varphi(g_n))$, которая может также оказаться нетривиальной. Хотя необходимо отметить, что возможны случаи получения тривиальной декомпозиции.

На основании всего вышесказанного можно предложить следующую простую стратегию декомпозиции в $\mathbb{B}[x_1, \dots, x_n]$. Пусть даны $h_1(x_1, \dots, x_n), \dots, h_u(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{B}[x_1, \dots, x_n]$, которые необходимо декомпонировать. Оперируя над $h_1, \dots, h_u$ как над многочленами из $\mathbb{F}_2[x_1, \dots, x_n]$, можно применить к ним алгоритм декомпозиции, разработанный для $\mathbb{F}_2[x_1, \dots, x_n]$ в [8]. В результате будет получено $h_i = f_i(g_1(x_1, \dots, x_n), \dots, g_n(x_1, \dots, x_n))$, где $f_i, g_i \in \mathbb{F}_2[x_1, \dots, x_n]$. Ясно, что применение канонического гомоморфизма даст декомпозицию $h_i(x_1, \dots, x_n) = \varphi(f_i)(\varphi(g_1), \dots, \varphi(g_n))$ в $\mathbb{B}[x_1, \dots, x_n]$. Получение теоретической оценки вероятности того, что полученная таким способом декомпозиция в $\mathbb{B}[x_1, \dots, x_n]$ окажется нетривиальной, требует проведения дальнейших исследований. Однако проведенные компьютерные эксперименты показали, что в большом проценте (>90%) случаев удается получить нетривиальную декомпозицию.

Замечание: Для проведения компьютерного эксперимента случайным образом (по равномерному распределению) генерировались многочлены $h_i \in \mathbb{B}[x_1, \dots, x_n]$, $\deg(h_i) \leq n$, $n \leq 32$. Для разных значений u к $h = (h_1, \dots, h_u)$ применялся алгоритм из [8]. Вычисление базисов Гребнера осуществлялось с помощью системы компьютерной алгебры Singular.

3 Применение декомпозиции к криптоанализу

В работе [9] была предложена симметричная гомоморфная криптосистема, в которой шифрование битов открытого текста осуществляется по формуле

$$c(x_1, \dots, x_n) = r(k_1(x_1, \dots, x_n), \dots, k_n(x_1, \dots, x_n)) \in \mathbb{B}[x_1, \dots, x_n],$$

где $r(x_1, \dots, x_n) = \sum r_{i_1, \dots, i_k} \cdot x_{i_1} \cdot \dots \cdot x_{i_k} + m$, $r_{i_1, \dots, i_k} \in \mathbb{F}_2$, $m \in F_2$ – открытый текст, $K = \{k_i(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{B}[x_1, \dots, x_n], i = 1..n\}$ – секретный ключ. Рассмотренный алгоритм декомпозиции булевых полиномов был применен для криптоанализа по известным открытым текстам данной криптосистемы, для случая, когда все $k_i(x_1, \dots, x_n)$ имеют одинаковую степень, и при шифровании используются полиномы $r(x_1, \dots, x_n)$ одной и той же степени. Алгоритм криптоанализа с применением декомпозиции гарантированно находит секретный ключ при числе известных открытых текстов больше или равном n .

Заключение

Был предложен алгоритм декомпозиции системы булевых полиномов одинаковой степени. Алгоритм работает за полиномиальное время и использует в качестве составляющей построение базиса Грёбнера специального идеала. В ходе экспериментов алгоритм был опробован для криптоанализа полностью гомоморфной криптосистемы и показал высокую эффективность. Даже для числа переменных 32 алгоритм работает довольно быстро – около нескольких минут.

Список литературы

1. A. Bernasconi et al. On decomposing Boolean functions via extended cofactoring. // Proceedings of the Conference on Design, Automation and Test in Europe. – European Design and Automation Association, 2009. С. 1464-1469.
2. H.R. Andersen. An introduction to binary decision diagrams. // Lecture notes, available online, IT University of Copenhagen. 1997.
3. S. Malik et al. Logic verification using binary decision diagrams in a logic synthesis environment. // Computer-Aided Design, 1988. ICCAD-88. Digest of Technical Papers., IEEE International Conference on. – IEEE, 1988. Pp. 6-9.
4. G. Bard. Algebraic cryptanalysis. – Springer. 2009.
5. W. Meier, E. Pasalic, C. Carlet. Algebraic attacks and decomposition of Boolean functions. // Advances in Cryptology-EUROCRYPT 2004. – Springer Berlin Heidelberg. 2004. Pp. 474-491.
6. V. Bertacco, M. Damiani. The disjunctive decomposition of logic functions. // Proceedings of the 1997 IEEE/ACM international conference on Computer-aided design. – IEEE Computer Society, 1997. Pp. 78-82.
7. R.R. Lee, J.R. Jiang, W.L. Hung. Bi-decomposing large Boolean functions via interpolation and satisfiability solving. // Design Automation Conference, 2008. DAC 2008. 45th ACM/IEEE. – IEEE, 2008. Pp. 636-641.
8. J.C. Faugère, L. Perret. An efficient algorithm for decomposing multivariate polynomials and its applications to cryptography. // Journal of Symbolic Computation. 2009. Т. 44. №. 12. Pp. 1676-1689.
9. O. Zhironov, O.V. Zhironova, and S.F. Krendelev. Bezopasnye oblachnye vychisleniya s pomoshhyu homomorfnoj cryptographii. BIT (bezopasnost' informacionnyx technology) journal, 1:6-12, 2013.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ В МАТЕРИАЛАХ В РАМКАХ ГИПЕРБОЛИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

И.В. Амирханов, З.К. Тухлиев, З.А. Шарипов
zafar@jinr.ru

Объединённый институт ядерных исследований,
Лаборатория информационных технологий

Введение

В последние годы с возрастающим интересом проводятся экспериментальные исследования для изучения воздействий тяжелых заряженных частиц на материалы. К таким исследованиям относится, в частности, изучение особенностей радиационного распыления и изменения механических свойств материалов при облучении их тяжелыми ионами высоких энергий.

При взаимодействии с материалом мишени быстрая заряженная частица теряет свою энергию главным образом на возбуждение и ионизацию электронов. Заметим, что характерное время достижения электронами равновесного распределения (или время релаксации электронного газа) составляет $(1-5) \times 10^{-15}$ с и некоторых работах на временах $t < 10^{-12}$ с предлагается иная температурная модель, учитывающая волновой характер переноса тепла [1].

В диффузионных уравнениях типа Фурье для теплового потока, Фик для переноса массы и др. заложена бесконечная скорость распространения возмущений, что приводит к известным парадоксам – бесконечный тепловой поток [2]. Для высокоинтенсивных тепловых процессов необходимо учитывать конечность скорости распространения тепла [3, 4].

В настоящей работе проводится исследование решений гиперболического уравнения теплопроводности с учетом конечной скорости распространения тепла для вычисления температуры материала с разными источниками и разными начальными и граничными условиями. Сделан сравнительный анализ результатов с результатами аналогичных задач, полученных в рамках параболического уравнения теплопроводности.

Заключение

Гиперболическая модель теплопроводности широко применяется на практике. Исследованию решений гиперболических уравнений посвящено большое число работ, из анализа которых следует, что устраняя одни парадоксы, данные уравнения порождают другие. В данной работе с помощью численного моделирования сделаны попытки анализа причины возникновения этих парадоксов.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ № 12-01-00396-а, 13-01-00595-а, 14-01-00628-а.

Список литературы

1. *А.И. Глушцов, Ф.Ф. Комаров, А.П. Новиков, А.И. Урбанович, А.Т. Хоанг* // Докл. АН БССР. 1987. Т.31. №7. С. 609.
2. *В.А. Кудинов, И.В. Кудинов*. Исследование теплопроводности с учетом конечной скорости распространения теплоты. // Теплофизика высоких температур. №4. 2012.
3. *А.А. Самарский, П.Н. Вабищевич*. Вычислительная теплопередача. – М: УРСС, 2003, С.40-41.
4. *А.В. Лыков*. Тепломассообмен. – М: Энергия. 1972. С.526-540.

ВЫВОД СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ДЛЯ КОЭФФИЦИЕНТНЫХ ФУНКЦИЙ КАНТОРОВИЧА ПО БАЗИСУ АДИАБАТИЧЕСКИХ МОД

А.Л. Севастьянов, А.А. Тютюнник, Л.А. Севастьянов
alsevastyanov@gmail.com, nastya.tyutyunnik@gmail.com, leonid.sevast@gmail.com
Российский университет дружбы народов

Введение

Для нужд оптоэлектроники, интегральной оптики и др. необходимо моделировать, проектировать, а затем изготавливать интегрально-оптические волноводы с наперед заданным законом амплитудно-фазового преобразования распространяющегося электромагнитного излучения в волноводном режиме. Что касается регулярных планарных интегрально-оптических (открытых, диэлектрических) волноводов, то их теория разработана полностью и позволяет описывать все собственные волноводные моды, включая излучательные. Для описания плавно-нерегулярных интегрально-оптических волноводов разработаны метод «Маркузе», метод спаренных волноводных мод и метод волноводов сравнения. Они относятся к так называемым «физически обоснованным» методам. В основу их построения положено уравнение Гельмгольца для одной из поляризаций, поэтому они не описывают явления деполяризации.

В работах [1-4] предложена модель адиабатических волноводных мод, описывающая явление деполяризации электромагнитного излучения при его волноводном распространении вдоль нерегулярного участка интегрально-оптического волновода. В предшествующих публикациях, посвященных изучению модели адиабатических волноводных мод, подробно описана эволюция (трансформация) отдельных адиабатических волноводных мод. В данной работе предложен вывод системы уравнений в частных производных для коэффициентных функций Канторовича разложения искомого решения уравнений Максвелла (произвольного волноводного сигнала, распространяющегося в плавно-нерегулярном интегрально-оптическом волноводе) по базису адиабатических волноводных мод.

Математическая модель и численный алгоритм

В уравнениях Максвелла, записанной в Гауссовой системе единиц с использованием безразмерных единиц длины [5] в декартовой системе координат

$$\begin{aligned}\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} &= i\varepsilon E_x, & \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} &= -i\mu H_x, \\ \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} &= i\varepsilon E_y, & \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} &= -i\mu H_y, \\ \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} &= i\varepsilon E_z, & \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} &= -i\mu H_z,\end{aligned}\tag{1}$$

выразим из двух верхних уравнений E_x и H_x и подставим их в оставшиеся четыре уравнения. Решения для адиабатических волноводных мод [6-7] ищем в виде

$$\begin{pmatrix} \vec{E} \\ \vec{H} \end{pmatrix}(x, y, z, t) = \begin{pmatrix} \vec{E} \\ \vec{H} \end{pmatrix}(x, y, z) \frac{\exp\{i\omega t - i\varphi(y, z)\}}{\sqrt{\beta(y, z)}},\tag{2}$$

где $\beta^2 = \beta_y^2 + \beta_z^2$ и $\beta_y = \frac{\partial \varphi}{\partial y}$, $\beta_z = \frac{\partial \varphi}{\partial z}$, для которого выполняются соотношения

$$\frac{\partial \Psi}{\partial z} = p_z \Psi, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial y} = p_y \Psi, \quad \text{где } p_z = -i \frac{d\varphi}{dz} - \frac{1}{\beta} \frac{d\beta}{dz}, \quad p_y = -i \frac{d\varphi}{dy} - \frac{1}{\beta} \frac{d\beta}{dy}.$$

Подстановка (2) в преобразованные четыре уравнения Максвелла приводит к виду:

$$\frac{dH_z}{dx} = -\frac{1}{i\mu} \left(\left(\frac{\partial p_y}{\partial z} + p_y p_z \right) E_z - \left(\frac{\partial p_z}{\partial z} + p_z^2 + \varepsilon \mu \right) E_y \right) \quad (3)$$

$$\frac{dH_y}{dx} = \frac{1}{i\mu} \left(\left(\frac{\partial p_z}{\partial y} + p_y p_z \right) E_y - \left(\frac{\partial p_y}{\partial y} + p_y^2 + \varepsilon \mu \right) E_z \right) \quad (4)$$

$$\frac{dE_z}{dx} = \frac{1}{i\varepsilon} \left(\left(\frac{\partial p_y}{\partial z} + p_y p_z \right) H_z - \left(\frac{\partial p_z}{\partial z} + p_z^2 + \varepsilon \mu \right) H_y \right) \quad (5)$$

$$\frac{dE_y}{dx} = \frac{1}{i\varepsilon} \left(\left(\frac{\partial p_z}{\partial y} + p_y p_z \right) H_y - \left(\frac{\partial p_y}{\partial y} + p_y^2 + \varepsilon \mu \right) H_z \right) \quad (6)$$

для факторов $\Psi(x, y, z)$. В выражениях (5) и (6) отброшены слагаемые пропорциональные $\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)$ и $\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\varepsilon} \right)$. Эти слагаемые малы по сравнению с

остальными величинами в градиентных плавно-нерегулярных волноводах и равны нулю тождественно в многослойных плавно-нерегулярных волноводах.

В методе адиабатических мод разложения полей содержат «перепутанные» слагаемые по гибридным модам с коэффициентами $C_\beta^\pm(y, z)$:

$$(\mathbf{E}, \mathbf{H})^T(x, y, z; t) = \int d\tilde{p}(\beta) C_\beta^\pm(y, z) (\mathbf{E}^\beta, \mathbf{H}^\beta)^T(x; y, z) e^{[i\omega t \mp i\varphi^\beta(y, z)]} / \sqrt{\beta(y, z)} \quad (7)$$

Здесь интеграл берется по спектральному множеству $p(0)$ несамосопряженного оператора, которое обладает более сложной структурой по сравнению с вещественным спектром регулярного планарного волновода. При этом в разложении (7) присутствует конечный набор точек $\beta = \beta_j$, $j = 1, \dots, N$ с точечными мерами $\delta(\beta - \beta_j) d\beta$, но уже не вещественных, а комплекснозначных $\beta_j = \text{Re } \beta_j + i \text{Im } \beta_j$, соответствующих набору корневых собственных векторов [5-6]. Далее в уравнения Максвелла (1) подставим решение метода адиабатических волноводных мод вида (7), в котором удержаны (на первом этапе) лишь направляемые волноводные моды, соответствующие дискретному спектру:

$$u(x, y, z, t) = \sum_j C_j(y, z) \Psi_j(x, y, z, t) \quad (8)$$

После ряда преобразований и учета соотношений (3)-(6) получаем следующие соотношения для решений вида (8):

$$\sum_j \left(\frac{\partial^2 C_j}{\partial z^2} E_{jy} - \frac{\partial^2 C_j}{\partial z \partial y} E_{jz} - \frac{\partial C_j}{\partial z} (p_{jy} E_{jz} - 2p_{jz} E_{jy}) - \frac{\partial C_j}{\partial y} p_{jz} E_{jz} \right) = 0 \quad (9)$$

$$\sum_j \left(\frac{\partial^2 C_j}{\partial y^2} E_{jz} - \frac{\partial^2 C_j}{\partial y \partial z} E_{jy} + \frac{\partial C_j}{\partial y} (2p_{jy} E_{jz} - p_{jz} E_{jy}) - \frac{\partial C_j}{\partial z} p_{jy} E_{jy} \right) = 0 \quad (10)$$

$$\sum_j \left(\frac{\partial^2 C_j}{\partial z^2} H_{jy} - \frac{\partial^2 C_j}{\partial z \partial y} H_{jz} - \frac{\partial C_j}{\partial z} (p_{jy} H_{jz} - 2p_{jz} H_{jy}) - \frac{\partial C_j}{\partial y} p_{jz} H_{jz} \right) = 0 \quad (11)$$

$$\sum_j \left(\frac{\partial^2 C_j}{\partial y^2} H_{jz} - \frac{\partial^2 C_j}{\partial y \partial z} H_{jy} - \frac{\partial C_j}{\partial y} (p_{jz} H_{jy} - 2p_{jy} H_{jz}) - \frac{\partial C_j}{\partial z} p_{jy} H_{jy} \right) = 0 \quad (12)$$

Из этой системы соотношений, развивая далее метод Канторовича, можно получить систему дифференциальных уравнений в частных производных второго порядка относительно неопределенных коэффициентных функций Канторовича $C_j(y, z)$.

Метод волноводов сравнения [8] и неполный метод Галеркина [9] применяются при условии изменения параметров волноводной структуры (толщин, эффективных показателей преломления) вдоль одной координаты. Положим в качестве такой координаты – z . В таком случае $\frac{\partial}{\partial y} \equiv 0$. При данных ограничениях на задачу система из четырех соотношений (9)-(12) можно привести к системе из двух соотношений следующего вида

$$\sum_j \left(\frac{\partial^2 C_j}{\partial z^2} E_{jy} + \frac{\partial C_j}{\partial z} 2p_{jz} E_{jy} \right) = 0 \quad (13)$$

$$\sum_j \left(\frac{\partial^2 C_j}{\partial z^2} H_{jy} + \frac{\partial C_j}{\partial z} 2p_{jz} H_{jy} \right) = 0 \quad (14)$$

В нашей работе рассмотрен метод Канторовича в применении к решению системы уравнений Максвелла в интегрально-оптическом волноводе с нерегулярным изменением параметров вдоль двух переменных. Трехмерные векторные решения уравнений Максвелла, подчиненные точным краевым условиям на границе раздела сред нерегулярного интегрально-оптического трехмерного многослойного волновода ищутся в виде разложения по набору адиабатических волноводных мод. Коэффициентные функции зависят от двух независимых горизонтальных – «медленных» переменных, параметрические координатные функции зависят от независимой вертикальной – «быстрой» переменной, а от медленных переменных зависят как от параметров.

Полученные системы соотношений (9)-(12) можно с помощью скалярного произведения с соответствующими координатными функциями привести к системе дифференциальных уравнений в частных производных второго порядка для коэффициентных функций Канторовича $C_j(y, z)$. В свою очередь, полученную систему следует впоследствии решать численными методами, если дополнить ее аналогом парциальных условий излучения.

Заключение

В работе рассмотрен метод Канторовича с базисом из адиабатических волноводных мод для решения задач моделирования эволюции электромагнитных волн в плавнонерегулярных интегрально оптических волноводах нерегулярных по двум направлениям. Целью исследования является получение из уравнений Максвелла системы дифференциальных уравнений в частных производных относительно коэффициентных функций Канторовича с ее последующим численным решением. Таким образом, получается алгоритм численного решения задачи распространения электромагнитного излучения в плавно-нерегулярных интегрально оптических волноводных структурах.

Авторы благодарны проф. Виницкому С.И. и Гусеву А.А. за стимулирующие дискуссии.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке грантов РФФИ № 13-01-00595, 14-01-00628.

Список литературы

1. Л.А. Севастьянов, А.А. Егоров. Теоретический анализ волноводного распространения электромагнитных волн в диэлектрических плавно-нерегулярных интегральных структурах. // Оптика и спектроскопия. 2008. Т.105. № 4. С. 632-640.
2. А.А. Егоров, Л.А. Севастьянов. Структура мод плавно-нерегулярного интегрально-оптического четырехслойного трехмерного волновода. // Квантовая Электроника. 2009. Т.39. № 6. С. 566-574.
3. А.А. Егоров, К.П. Ловецкий, А.Л. Севастьянов, Л.А. Севастьянов. Моделирование направляемых (собственных) мод и синтез тонкопленочной обобщенной волноводной линзы Люнеберга в нулевом векторном приближении. // Квантовая Электроника. 2010. Т.40. № 9. С. 830-836.
4. А.А. Егоров, А.Л. Севастьянов, Э.А. Айрян, К.П. Ловецкий, Л.А. Севастьянов. Адиабатические моды плавнонерегулярного оптического волновода: нулевое приближение векторной теории. // Математическое моделирование. 2010. Т.22. № 8. С. 42-54.
5. L.A. Sevastyanov, A.L. Sevastyanov, A.A. Tyutyunnik. Analytical Calculations in Maple to Implement the Method of Adiabatic Modes for Modelling Smoothly Irregular Integrated Optical Waveguide Structures. // LNCS 8660, pp. 421-433, 2014 (in print).
6. Л.А. Севастьянов, А.А. Егоров, А.Л. Севастьянов. Метод адиабатических мод в задачах плавнонерегулярных открытых волноведущих структур. // Ядерная Физика. 2013. Т.76. № 2. С. 252-268.
7. Л.В. Канторович, В.И. Крылов. Приближенные методы высшего анализа. – Л.: Физматгиз, 1962.
8. В.В. Шевченко. Плавные переходы в открытых волноводах. – М.: Наука, 1969.
9. А.Г. Свешников, А.С. Ильинский. Расчет волноводного перехода сложной формы. // ЖВМ и МФ. 1963. Т.3. № 3. С. 478-488.

ГИПЕРСПЕКТРАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ ПЕРЕНОСА СОЛНЕЧНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В АНИЗОТРОПНОЙ СРЕДЕ С УЧЕТОМ ПОЛЯРИЗАЦИИ

В.А. Фалалеева¹, Т.А. Сушкевич²

victory@phystech.edu, tamaras@keldysh.ru

¹ Московский физико-технический институт

² Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

Введение

Перспективные системы дистанционного зондирования природных сред и объектов техногенной сферы связаны с гиперспектральными подходами, которые позволят перейти от качественных и визуальных характеристик изображений к идентификации и количественным оценкам наблюдаемых компонент среды или объектов. Носителями информации о наблюдаемых средах и объектах в видимом диапазоне спектра являются характеристики электромагнитного излучения, т.е. рассеянного солнечного света. В настоящее время одной из актуальных задач дистанционного зондирования Земли (ДЗЗ) является исследование облаков и аэрозолей – самых динамичных и неопределённых факторов в радиационном форсинге на климат. Особенно остро стоит проблема исследований их структуры и наиболее эффективным подходом является поляриметрия – это метод исследования облаков и

аэрозолей по характеристикам рассеянного солнечного света с учетом его поляризации и деполяризации. Рассеянные лучи несут важную информацию о свойствах частиц, в том числе об их размере, форме, показателе преломления и химическом составе. Для решения проблемы в последнее время интенсивно развивается метод, основанный на регистрации спектров высокого разрешения и гиперспектров отражённого поляризованного солнечного излучения в области полос поглощения атмосферных компонент (наземная сеть AERONET и спутниковый прибор POLDER [1]).

В данной работе представлена прямая одномерная гиперспектральная модель переноса солнечного излучения FLBLM (Fast Line-by-Line Model) [2], которая позволяет моделировать поляризационные характеристики уходящей солнечной радиации с высокой точностью и любым спектральным разрешением с учетом влияния температуры и давления.

Математическая модель и численный алгоритм

Модель FLBLM совмещает в себе полинейный (Line-by-Line) метод для строгого учета молекулярного (континуального и селективного) газового поглощения и метод локальных оценок Монте-Карло для учета многократного рассеяния в вертикально неоднородной атмосфере с поглощающими компонентами. Монохроматический коэффициент газового поглощения K_ν в любой точке оси волновых чисел ν вычисляется по формуле: $K_\nu = \sum_i f_i(\nu, \nu_i^*)$, где $f_i(\nu, \nu_i^*)$ – профиль поглощения

каждой существенной i -й спектральной линии, а ν_i^* ее центр. В модели FLBLM использованы численный алгоритм быстрого суммирования спектральных линий, разработанный Б.А. Фоминым [3], последняя версия континуума MT-CKD и база спектроскопических данных HITRAN-2009.

Перенос солнечной радиации в неоднородном плоском слое описывается векторным интегро-дифференциальным кинетическим уравнением ([4]):

$$\mu \frac{\partial \mathbf{I}(\tau; \mu, \varphi)}{\partial \tau} = \mathbf{I}(\tau; \mu, \varphi) - \frac{\varpi(\tau)}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \mathbf{R}(\alpha) \mathbf{P}(\tau, \mu, \varphi; \mu', \varphi') \mathbf{R}(\alpha') \mathbf{I}(\tau, \mu', \varphi') d\mu' d\varphi',$$

где $\mathbf{I}(\tau; \mu, \varphi) = \begin{pmatrix} I(\tau; \mu, \varphi) \\ Q(\tau; \mu, \varphi) \\ U(\tau; \mu, \varphi) \\ V(\tau; \mu, \varphi) \end{pmatrix}$ – вектор Стокса излучения, распространяющегося в

направлении с косинусом зенитного угла μ и азимутальным углом φ ; $\mathbf{P}(\tau, \mu, \varphi; \mu', \varphi')$ – фазовая матрица, характеризующая вероятность перерассеяния кванта из направления μ', φ' в направление μ, φ ; $\mathbf{R}(\alpha)$ – матрица поворота на угол α ; $\varpi = \sigma_s / (\sigma_s + \sigma_a + K_\nu)$ – альбеда однократного рассеяния или вероятность выживания кванта ($0 < \varpi \leq 1$); σ_s и σ_a – объёмные коэффициенты рассеяния (молекулярное + аэрозольное) и аэрозольного поглощения, соответственно;

$\tau(H) = \int_H^\infty (\sigma_s(Z) + \sigma_a(Z) + K_\nu(Z)) dZ$ – оптическая толщина на высоте H . Граничные условия: на верхней границе атмосферы параллельный солнечный поток, на нижней границе – отражение по закону Ламберта. Подробности модели описаны в монографии [4].

Для моделирования процессов рассеяния выбран метод Монте-Карло (МК), поскольку он легко объединяется с полинейным LbL (Line-by-Line) методом, а

относительные (статистические) погрешности метода МК уменьшаются с увеличением размера ансамбля разыгрываемых «фотонов» $\left(\sim \frac{1}{\sqrt{N}}\right)$ и слабо зависят от других факторов. Важное преимущество: время LbL расчёта с методом МК, в отличие от других методов, слабо зависит от числа рассматриваемых спектральных точек (1 или 10^7 почти всё равно) [3].

Пример результата моделирования

Для расчетов использована модель атмосферы лета средних широт (Mid-Latitude Summer) с информацией о профилях водяного пара, углекислого газа, озона и кислорода.

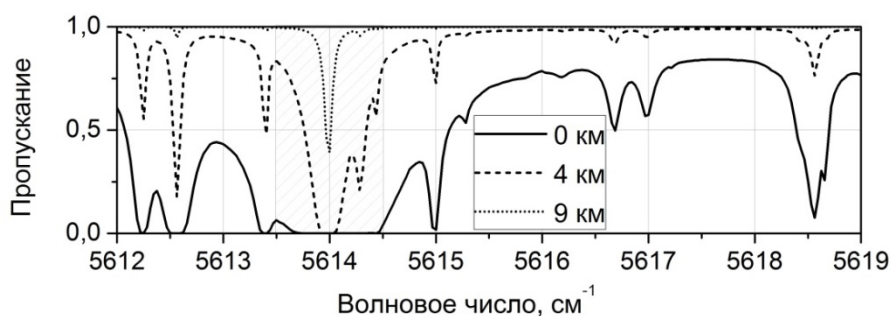


Рисунок 1. Пропускание атмосферы на уровнях 0, 4 и 9 км в спектральном диапазоне 5612 – 5619 см⁻¹.

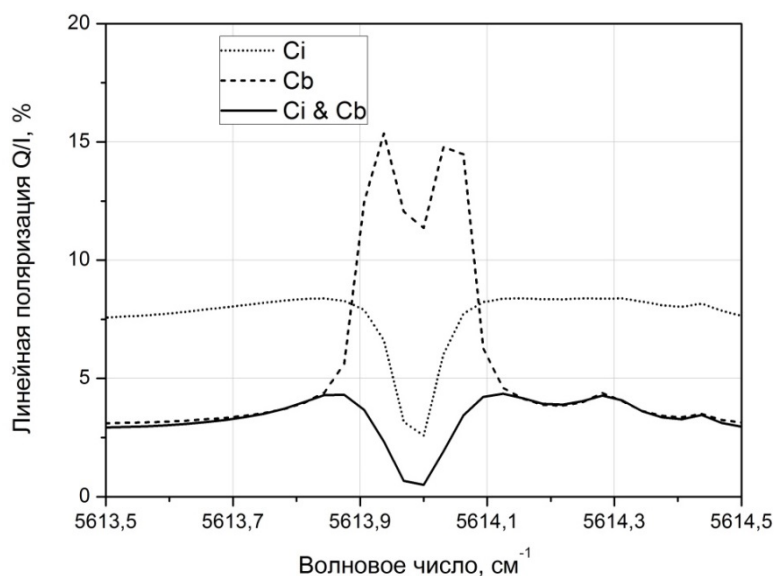


Рисунок 2. Линейная поляризация Q/I (%) уходящего солнечного излучения кучево-дождевыми и перистыми облаками в спектральном диапазоне 5613,5 – 5614,5 см⁻¹. Линия визирования фиксирована (зенитный угол 30°, азимутальный угол 180°).

Как видно на рис. 1, в пределах диапазона спектра 5613,9 – 5614,1 см⁻¹ уходящее солнечное излучение практически не содержит информации об атмосфере ниже 4 км, а в диапазоне 5613,5 – 5614,5 см⁻¹ – информации у поверхности. В данном спектральном интервале были произведены расчеты поляризационных характеристик уходящего солнечного излучения в атмосфере с облаками. На рис. 2 показано, как изменяется

линейная поляризация при наличии в атмосфере кучево-дождевого (Cb) и перистого (Ci) облаков отдельно и вместе. Видно, что можно обнаруживать оптически тонкие перистые облака (анизотропная среда) над оптически толстыми кучево-дождевыми облаками (изотропная среда) с помощью данных о поляризации. Причем весь эффект кроется на крыльях линий, поскольку диапазон $5613,9 - 5614,1 \text{ см}^{-1}$ не информативен ниже уровня 4 км.

Заключение

Моделирование спектра с помощью FLBLM в интервале 100 см^{-1} со спектральным разрешением 0.5 см^{-1} на обычном компьютере без параллельной реализации занимает 10-100 минут (в зависимости от заданной точности). Моделирование спектров со средним спектральным разрешением, например, для POLDER, займет всего несколько минут. Поскольку задача векторная, а метод МК, она естественным способом распараллеливается на графических процессорах. Ускорение расчетов позволит использовать прямую модель для решения обратной задачи по восстановлению профилей атмосферы.

Авторы выражают благодарность Борису Алексеевичу Фомину за помощь в работе. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 14-31-50047-мол_нр, 12-01-00009, 14-01-00197).

Список литературы

1. *Jacqueline Lenoble*. Scattering and Polarization of the Solar Radiation in the Earth's Atmosphere Historical Review and Present Applications. // CURRENT PROBLEMS IN ATMOSPHERIC RADIATION (IRS 2008): Proceedings of the International Radiation Symposium (IRC/IAMAS). AIP Publishing, 2009, V.1100. №1.
2. *B.A. Fomin, V.A. Falaleeva*. Polarized Atmospheric Radiative Transfer Model for Calculations of Spectra of the Stokes Parameters of Shortwave Radiation Based on the Line-by-Line and Monte Carlo Methods. // Atmosphere. 2012. V.3(4). Pp. 451-467.
3. *B.A. Fomin*. Effective interpolation technique for line-by-line calculations of radiation absorption in gases. // Journal Quant. Spectrosc. Rad. Transfer. 1995. V.53. Pp. 663-669.
4. *Т.А. Сушкевич*. Математические модели переноса излучения. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2005. 661 с.

РАЗРАБОТКА КРИТЕРИЕВ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЖАНРА МУЗЫКАЛЬНОГО ПРОИЗВЕДЕНИЯ

К.А. Червякова

ksenia_cher09@mail.ru

Международный университет природы, общества и человека «Дубна»

Введение

Настоящее исследование посвящено разработке критериев для определения жанра музыкального произведения. Автоматическая классификация музыкальных жанров полезна для индексации музыки и ее поиска.

В данной работе получаем особенности аудио образцов принадлежащих двум музыкальным жанрам. Жанр рок-музыки и поп-музыки.

Набор особенностей каждого трека извлекается с помощью системы идентификационных отпечатков (audio fingerprinting) и используется для выявления музыкального контента.

Для определения оптимальной границы между двумя различными музыкальными жанрами используется опорная машина векторов.

Упомянутая выше система идентификационных отпечатков (audio fingerprinting) способна распознавать звуковые сигналы на основе конкретных характеристик. Эти характеристики уникальны для каждого аудио объекта. Система идентификационных отпечатков представляет собой краткое описание аудио объекта, которое использует ограниченное число бит.

Опишем общий подход к обработке музыкальных файлов, выделению признаков и их использование для обучения методом опорных векторов.

Основная часть

Разработка критериев для разделения жанров проводилась в нескольких направлениях:

1. Ориентирование на понятие лэндмарков. В качестве основы использовался алгоритм SHAZAM, а именно выделения пиков максимумов и построения ключевых особенностей. Подробнее о понятии ключевая особенность (landmark) можно ознакомиться в статье Avery Wang, приведенной в списке используемой литературы [1]. Берем его за основу, чтобы получить нечеткое соответствие. По частоте с разбиением на 50 бинов, а по времени на 30 бинов. В результате получаем 80 характеризующих каждый трек чисел. Проверка алгоритма осуществлялась сначала на небольшой выборке в размере 80 треков. Каждый трек был продолжительностью 10 секунд. Первоначальная база данных была собрана вручную, все треки были прослушаны и подобраны в соответствии с человеческим восприятием похожести композиций. Модель SVM была обучена на набранных данных и показала высокие результаты. Для обучения было 70 треков (каждого жанра по 35 представителей) Для классификации использовали выборку из 5 треков каждого жанра - всего 10. После обучения получили следующие результаты - 2 трека из 70 были не распознаны, количество опорных векторов – 53. Корректное распознавание составляет примерно 97 процентов. При классификации 10 треков получены следующие результаты: 9 треков распознано правильно – один неправильно. Точность составила приблизительно 90 процентов. Далее полученная модель была проверена на большей базе данных, сгенерированной автоматически. Точность распознавания уменьшилась на 10 процентов. Если точность на небольшой выборке составляла 90, то теперь точность составила 80 процентов. Это связано с неоднородностью полученных треков.

2. Разработка алгоритма выделения ритма. Ритм является очень важной характеристикой, по которой можно разделить жанры. Алгоритм основан на анализе спектрограмм и выделении локальных экстремумов, которые были подвергнуты дальнейшей обработке. Данный алгоритм отдельно дает хорошие результаты. На известном примере было проверено, что он правильно строит ритм музыкального произведения. Однако, использование выделенной ритмической составляющей напрямую в качестве дополнительных параметров к дескриптору, характеризующему композицию, дало отрицательный результат, то есть точность резко упала до 60 процентов. Такой результат имеет место быть, поскольку, скорее всего, ритмическая составляющая смешивается с временной составляющей, входящей в лэндмарки.

3. Также был разработан альтернативный подход, состоящий в формировании дескриптора, отражающего основные особенности спектрограммы, но имеющего намного меньший размер. На исходной базе данных так же была обучена модель SVM с использованием в качестве входного параметра данного дескриптора. На небольшой базе данных, отобранной на слух, подход показал следующие результаты: 2 трека из 70 были не распознаны, количество опорных векторов – 40. Корректное распознавание составляет примерно 97 процентов. При классификации 10 треков получены

следующие результаты: 9 треков распознано правильно – один неправильно. Точность составила 90 процентов. Результат аналогичен первому подходу. Нераспознанный трек тот же. Но зато при проверке полученной модели на большой базе данных, сгенерированной автоматически, результаты получились лучше, чем при первом подходе. Если тогда точность составила 80 процентов, то теперь она достигает так же 90 процентов. Следует отметить, что в отличие от обычной практики, когда тестовая выборка составляет меньший или максимум сравнимый объем с обучающей выборкой, в нашем случае тестовая выборка много больше (в 4 раза) обучающей выборки. Этот факт свидетельствует в пользу эффективности полученной модели.

Далее приведем результат работы программы для двух треков выбранных жанров. Первый трек является представителем жанра рок-музыки (Three Days Grace с композицией “Animal I Have Become”), второй – поп-музыки (Максим с композицией «Дождь»).

Заключение

В ходе работы была набрана база данных, состоящая из треков двух различных музыкальных жанров продолжительностью 10 секунд.

Был извлечен набор особенностей каждого трека с помощью системы идентификационных отпечатков.

В ходе работы были исследованы три подхода для разделения жанров: метод, основанный на понятии лэндмарков, алгоритм, выделяющий ритм и подход, который отражает основные особенности спектрограммы.

Для реализации вышеперечисленных алгоритмов был использован пакет прикладных программ MATLAB R2012b. В качестве SVM (Support Vector Machine) использовалась программа SVM light версия 6.02.

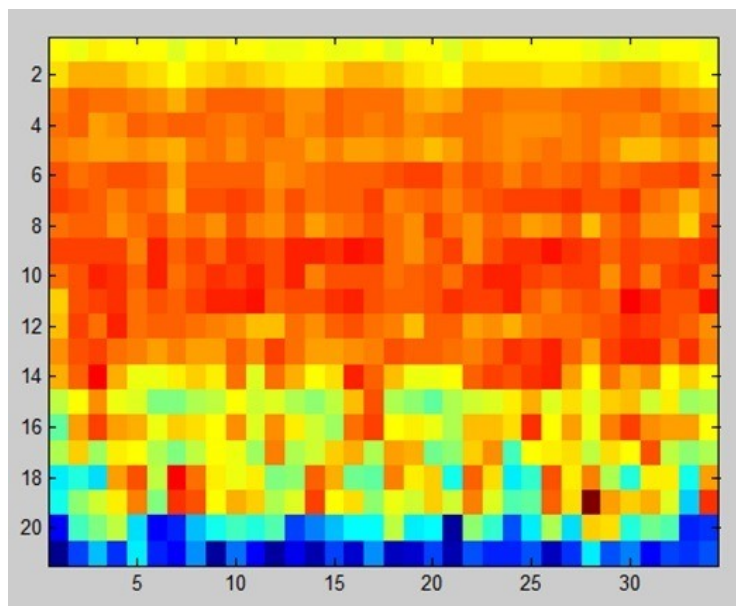


Рисунок 5. Результат работы программы для композиции “Animal I Have Become”.

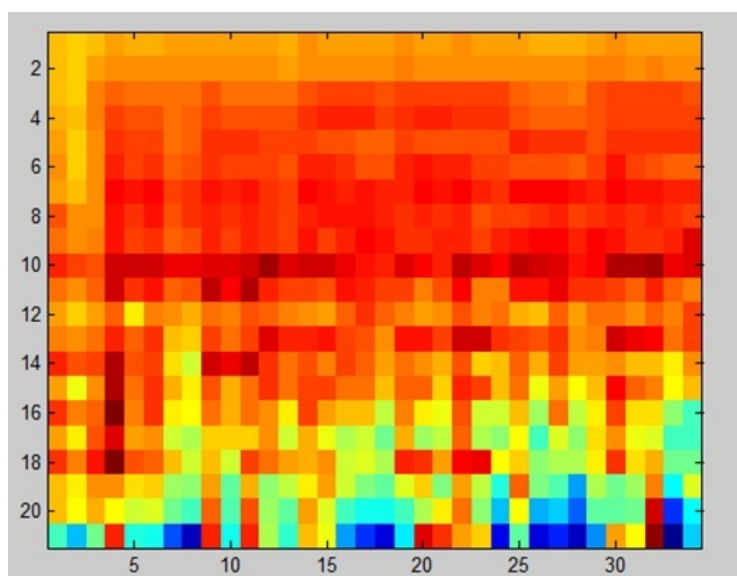


Рисунок 6. Результат работы программы для композиции «Дождь».

Список литературы

1. Avery Wang. An Industrial-Strength Audio Search Algorithm. // Proc. 2003 ISMIR International Symposium on Music Information Retrieval, Baltimore, MD, Oct. 2003.
2. D. Ellis. Robust Landmark-Based Audio Fingerprinting. 2009.
3. Jaap Haitsma, Ton Kalker. A Highly Robust Audio Fingerprinting System. 2002.
4. Crisian Quirante Catalan. Quality assessment and enhancement of an industrial strength audio fingerprinting system. 2009.
5. Stephen Shum. The basics of audio fingerprinting. Oct. 2011.

ТЕМАТИЧЕСКИЕ ТЕЗАУРУСЫ В АГЕНТНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ ПОИСКА НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ В ИНТЕРНЕТ (НА ПРИМЕРЕ ТЕЗАУРУСА ПО «ФИЗИКЕ ПЛАЗМЫ»)

А.А. Артамонов, И.Ю. Галин, К.А. Соколова, В.С. Николаев, А.И. Черкасский
aaartamonov@mephi.ru, acherkasskey@gmail.com, k.sokolina@mail.ru, vsnikolayev@mephi.ru,
aicherkasskij@mephi.ru

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

В современных информационно-аналитических системах различного назначения все шире используются агентные технологии [1-3].

Научные базы данных создаются высококвалифицированными и авторитетными специалистами в предметной области. Семантическая основа тезауруса по физике плазмы была также создана физиками высокой квалификации из Ливерморской национальной лаборатории, США [4] и из Национального исследовательского ядерного университета МИФИ [5].

Понятие «тезаурус» используется в докладе в общепринятом смысле. Это профессиональные термины предметной области, вместе с их определениями, а также те или иные семантические отношения между ними.

Первый толковый словарь по физике плазмы был опубликован на английском языке на сайте Ливерморской национальной лаборатории [1].

Из глоссария Ливерморской лаборатории профессором НИЯУ МИФИ В.А. Курнаевым был составлен англо-русский словарь на 276 базовых терминов по тематическому направлению «Физика плазмы». Для использования тезауруса в многоязычных агентных поисковых системах словарь должен быть преобразован в базу данных в международном стандарте TMX 1.4b specification. Стандарт ориентирован на разработку инструментальных средств автоматизированного перевода. Полученная форма тезауруса позволяет организовать агентный поиск на различных языках.

Помимо автоматизированного перевода текстов «языковые пары» прямо используются для настройки поисковых агентов на тематический многоязычный поиск.

Настройка агентов на поиск текстов, релевантных запросу пользователя, осуществляется набором ключевых слов. В мультиагентных системах инициализация поисковых программ осуществляется не по команде пользователя, а по графику сканирования тематического кластера и пополнения текстовой базы данных. Поэтому по каждому тематическому направлению в системе должен быть тезаурус в форме базы данных и механизм ее пополнения.

Список литературы

1. *Tim Berners-Lee*. 2001, The Semantic Web (A new form of Web content that is meaningful to computers will unleash a revolution of new possibilities), Scientific American: May 2001.
2. *В.И. Будзко, Д.В. Леонов, В.С. Николаев, Б.Н. Оныкий, К.А. Соколина*. Развитие информационно-аналитической поддержки научно-технической деятельности в Национальном исследовательском ядерном университете «МИФИ». // Системы Высокой доступности. 2011. Т.7. №4. С. 4-17.
3. *V.I. Budzko, D.V. Leonov, V.S. Nikolayev, B.N. Onykiy, K.A. Sokolina*. Development of Information and Analytical Support for Scientific and Research Activities in the National Nuclear Research University «МЕРФИ». // Highly available systems. 2011. V.7. №4. Pp. 4-17.
4. Сайт Ливерморской лаборатории. URL: <https://www.llnl.gov>
5. Сайт кафедры №65 «Анализ конкурентных систем» НИЯУ МИФИ. URL: www.kaf65.mephi.ru

MODERN MATHEMATICAL METHODS OF SPEAKER IDENTIFICATION

A.V. Ermilov

alvalerm@mail.ru

National Research University “Higher School of Economics”

Introduction

In recent years tasks of speaker identification and verification gained additional attention. Indeed, systems of automatic speaker identification and verification seem to be the most natural and economical methods for solving the problems of unauthorized use of computer and mobile devices. Such an approach has several advantages. For example, a person’s voice cannot be forgotten or misplaced unlike password or key, the system can be made robust against noise and channel variations, human changes and mimicry by humans or records.

It worth noting what is the difference between speaker identification and verification. During identification a system decides which one from a group of voices best matches the input voice sample. Speaker verification is a process of verification a person’s claimed identity from her voice.

This article is an attempt to make a review of mathematical methods and models used

to construct a modern system of automatic speaker identification. We consider such methods as Gaussian Mixture Models with Universal background, Support Vector Machines, Sparse representation methods. These models are presented and some experimental results are provided.

1 Gaussian Mixture Models with Universal Background Model

Gaussian Mixture Models used to be the main tool in a probabilistic framework of modeling each speaker in a given database. It can be credited to such factors as high accuracy and scalability. It is possible to upgrade the GMM model using Bayesian approach. To use a Bayesian approach we need to specify a prior distribution of the speech features. Thus the Universal Background Model (UBM) is a large GMM trained to represent the distribution of features which is speaker – independent. Next we use Maximum-A-Posteriori adaptation to get a specific speaker's model. GMM-UBM is generally more robust model. Moreover, the UBM might be used to formulate alternative hypothesis in likelihood ratio test.

2 Support Vector Machines

Support Vector Machines (SVM) has proven to be a very effective method for speaker recognition. SVM performs nonlinear mapping from an input space to an SVM feature space. Then linear techniques are applied to this high-dimensional space. The crucial component in an SVM is the kernel, which is an inner product in the SVM feature space. The basic goal in SVM kernel design is to find a kernel relevant to the classification task. An SVM is built by solving optimization problem that relies upon a maximum margin concept. In case of separable data set, the system places a hyperplane in the high dimensional space in such a way that the hyperplane maximizes the margin. The data points from training set that lies on the boundaries are the support vectors. The SVM is a two-class classifier constructed from sums of a kernel function $K(\cdot, \cdot)$,

$$f(x) = \sum_{i=1}^N \alpha_i t_i K(x, x_i) + d,$$

where x_i are support vectors, t_i are the ideal outputs (1 or –1 depending upon the class of the corresponding support vector x_i), $\alpha_i > 0$, $\sum_{i=1}^N \alpha_i t_i = 0$.

SVM may be a good choice for a classifier for a speaker identification problem. First, the task of training SVM has a unique solution and convergence is guaranteed. Second, the SVMs are robust and thus well suited for the task. Third, they can handle vectors of high dimensions.

It is also noted that in this case we could also use UBM: it refers to the collection data used as negative examples during SVM's training.

3 Sparse Representation

It is possible to represent a speaker in high dimensional space (so called the *speaker space*) using GMM-UBM approach. So it might be interesting to apply dimension reduction techniques to the speaker identification problem. Assume that feature vectors from the same class lie on a linear subspace. Thus the test vector y could be represented as a linear combination of all test vectors:

$$y = Ax,$$

where only those entries of x are nonzero that correspond to the class of y .

References

1. V.N. Vapnik. The Nature of Statistical Learning Theory. – Springer, 1995.

2. *D.A. Reynolds, T.F. Quatieri, R.B. Dunn.* Speaker verification using adapted Gaussian mixture models. // Digital Signal Processing. 2000. 10(1-3).
3. *J. Wright, A. Yang, A. Ganesh, S. Sastri, S.Y. Ma.* Robust face recognition via sparse representation. // IEEE Trans. PAMI. 2008.

MODELING OF BOUND STATES OF QUANTUM SYSTEMS IN A TWO-DIMENSIONAL GEOMETRY OF ATOMIC TRAPS

O.A. Koval

avcovi2006@yandex.ru

Joint Institute for Nuclear Research,
Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics

Numerical modeling of two-particle quantum systems in two-dimensional (2D) space is presented. The dependence of two atoms energy spectrum on the scattering length in the geometry of the confining trap was calculated. In the correspondent computational scheme we use conventional methods for solving the eigenvalue and the scattering problems. Agreement of numerical results with the analytical data, obtained in [1] with the zero-range potential approximation of the interatomic interaction, was shown. The dependence of the energy levels of the two-particle system on the one-dimensional optical trap potential parameter and the scattering length was calculated.

PROOF OF THE CONJECTURE AGT AND GENERALIZED JACK POLYNOMIALS

S. Mironov

sa.mironov_1@physics.msu.ru

Institute for Nuclear Research, RAS
Institute for Theoretical and Experimental Physics

The idea of the talk is to describe the construction of generalised Jack polynomials and present a way to prove the AGT conjecture. It could be done in two ways: via bosonisation procedure or with use of selberg averages. The talk is going to cover cases of $SU(2)$, $SU(3)$ and general $SU(N)$ group.

A GEOPHYSICAL METHOD FOR DENSITY RECONSTRUCTION USING WAVELET DECOMPOSITION AND WATERSHED SEGMENTATION

S.V. Mitsyn, G.A. Ososkov

svm@jinr.ru, ososkov@jinr.ru

Joint Institute for Nuclear Research,
Laboratory of Information Technologies

A method for density reconstruction of a geophysical object by its gravity field based on composition of wavelet transform and watershed segmentation is presented. The problem

is well-known ill-posed and ill-conditioned inverse problem. Many constrained methods giving solution to this problem exist, but suffered from various shortcomings: some of them impose unrealistic restrictions on solution, while others, like continuous wavelet transform, produce continuous density, which is unrealistic [1]. The proposed method overcomes those shortcomings by utilizing composition of continuous wavelet transform and image segmentation method “watershed” [2] to introduce sharp edges, thus making another step towards realistic models.

References

1. *А.И. Кобрунов. Математические основы теории интерпретации геофизических данных. – Ухта: УГТУ, 2007. 286 с.*
2. *J. Cousty, G. Bertrand, L. Najman, M. Couprie. Watershed Cuts: Minimum Spanning Forests and the Drop of Water Principle. // Pattern Analysis and Machine Intelligence, IEEE Transactions on, V.31. №8. Pp.1362-1374, Aug. 2009.*

CABLING PROCEDURE FOR THE HOMFLY POLYNOMIALS

A. Morozov

andrey.morozov@itep.ru

Lomonosov Moscow State University

Institute for Theoretical and Experimental Physics

The Chern-Simons theory is quite a hot topic in mathematical physics at the moment. In this talk we discuss the procedure which allows one to construct one of the most general knot polynomials – the HOMFLY polynomials (which are equal to the Wilson-loop averages of the Chern-Simons theory). The cabling procedure in principle allows one to find HOMFLY polynomial of any knot in any representation.

MATHEMATICAL MODELING OF PULSATING DETONATION WAVE USING NON-OSCILLATING NUMERICAL SCHEMES OF DIFFERENT APPROXIMATION ORDERS

A.I. Lopato^{1,2}, P.S. Utkin¹

lopato2008@rambler.ru, utkin@icad.org.ru

¹ Institute of Computer Aided Design of the Russian Academy of Sciences

² Moscow Institute of Physics and Technology

Introduction

The mathematical modeling of pulsating detonation wave (DW) propagation was carried out apparently for the first time in the works of V.P. Korobeinikov, V.A. Levin and V.V. Markov (see, for example, review [1]). A lot of numerical studies have been devoted to the problem of one-dimensional (1D) DW propagation with the use of Euler equations with different chemical reaction models. For instance, the stability of steady detonations was considered in [1] where second-order Godunov type scheme and single irreversible reaction kinetics model were used to carry out numerical experiments. It was shown that the size of numerical perturbations in the induction zone is determined by the half-reaction length points number. The research given in [2] is focused on the activation energy influence over the

detonation development. The authors marked out four types of pulsating dynamics based on the period of oscillations depending on the activation energy value. The dynamics of DW was computed by Roe solver and two-step (induction and exothermic reaction component) model.

The majority of similar works are characterized by the usage of some particular numerical scheme to the investigation of DW propagation with fixed physical and mathematical parameters. The goal of the work is to solve the problem of 1D DW propagation at fixed physical parameters using non-oscillating schemes of various approximation orders.

1 Statement of the problem

We have chosen the “physical” statement of the problem similar to [3] with direct DW initiation near the closed end of the channel. The channel is filled with quiescent stoichiometric acetylene-air or hydrogen-air mixture under normal conditions. Detonation is initiated by setting a region adjacent to the left boundary of the computational domain at high pressure and temperature as a simulated spark. The non-penetrating conditions are imposed on both boundaries. Physical-chemical parameters of the mixture are taken from [4, 5].

Four numerical experiments for each mixture are performed – each with the same statement described above but for different numerical scheme both time and space AO – from the first to the fourth. The goal is to identify the differences in the obtained DW propagation patterns.

2 Mathematical model and numerical method

Mathematical model is based on the Euler equations supplemented by one-step chemical reaction model described by the first-order Arrhenius kinetics [4, 5]. The equation of state is that of an ideal gas. The computational algorithm is based on the physical processes splitting technique when on the time step at first the gas dynamics equations are integrated and then the chemical reactions are taken into account without convection. The key point in gas dynamics equations integration procedure is the combination of: (a) ENO-reconstruction approach [6] which is applied to build an interpolation polynomial for the local representation of grid function; (b) monotone Courant-Isaacson-Rees numerical scheme in conservative formulation [7]; (c) Runge-Kutta time stepping [8]. Recursive ENO-reconstruction algorithm provides to obtain numerical schemes of the required approximation order (AO) in a single manner. Chemical kinetics equations for the reactant mass fraction and temperature are solved with the use of implicit Euler method.

The correctness of numerical algorithm realization is verified on the basis of the set of standard Riemann problems [11] and Shu-Osher test [10]. In the last one the interaction of moving shock wave with sine waves in density is considered. The solution includes the leading shock and the adjacent continuous oscillated part so the test is a good model for the DW propagation problem. Fig. 1 illustrates how the low AO scheme fails to resolve all the solution structures. The “exact” profile corresponds to the solution from [10] obtained with the use of third AO ENO-scheme.

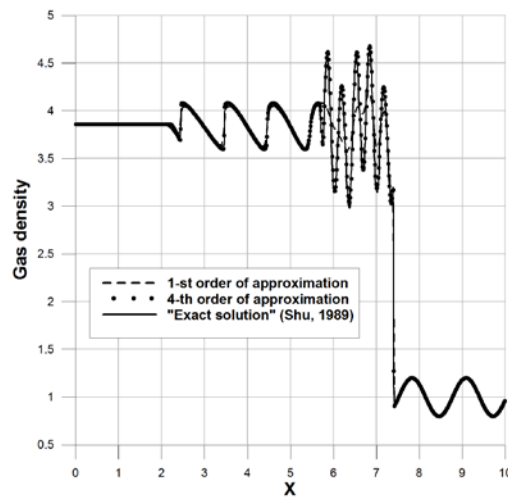


Figure 1. Computed and “exact” density profiles for the Shu-Osher test problem. Cells number – 1600, CFL – 0.3, time moment – 1.8.

3 Results of modeling

The spatial distributions of gas dynamics parameters behind the DW in acetylene-air mixture have classical profiles with the leading shock, von Neumann (vN) spike and smooth Taylor expansion wave. The convergence of the predicted profiles is obtained with the increase of the scheme AO. The calculated Chapman-Jouguet parameters of the DW coincide with the theoretical predictions.

Consider the results of the numerical experiment for the case of hydrogen-air mixture and the first AO scheme. After the initial stage of the “spark” influence to the DW pressure profile it obtains the classical form. The DW remains overdriven and the successive reduction of the vN spike pressure is observed (see Fig. 2a, area I). With the coming to the theoretical value of vN spike pressure which is about 32 atm the regular high-frequency regime of DW propagation (area I) changes to the regular low-frequency high-amplitude mode (area II) that is in agreement with the findings in [4]. The amplitude of the oscillation process increases and the regular modes go into marginal irregular detonation (area III) which finally fails at about 0.19 ms. So the longtime 1D DW propagation in the considered statement and model assumptions using the first AO numerical scheme fails.

The results of the numerical experiment for the case of second AO scheme essentially differs from those described above. With the better resolution of the chemical reactions zone the DW propagates in low-frequency mode in the form of successive well identified local explosions (see Fig. 2b, area I). The spatial distribution of the parameters behind the DW for such mode is characterized by the regular structures on the Taylor wave. The local explosions mode however also goes into marginal detonation at about 0.14 ms that completely fails after 0.28 ms.

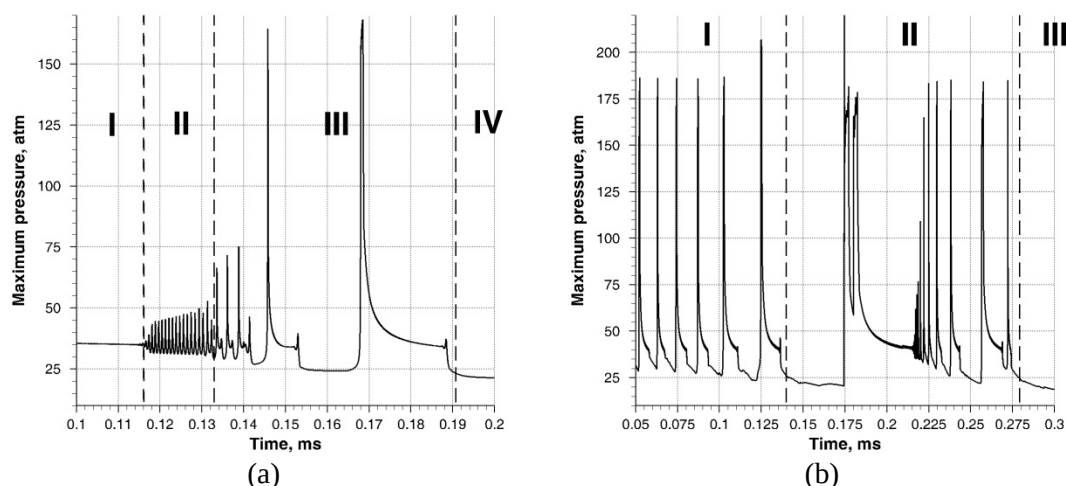


Figure 2. Predicted maximum pressures in the computational area for the case of (a) first AO and (b) second AO numerical schemes.

The usage of the numerical schemes of the third and the fourth AO doesn't lead to the longtime stable 1D DW propagation either. The maximum pressure graphs obtained with the use of higher AO schemes differs from that depicted in Fig. 2b by the existence of additional substructures on the regular low-frequency parts.

Conclusions

The mathematical modeling of one-dimensional detonation wave propagation in the context of one-step chemical reaction model corresponded to the acetylene-air and hydrogen-air mixtures in the “physical” statement with the direct detonation initiation near the closed end of the channel is carried out. The character of detonation wave propagation in acetylene-air mixture qualitatively and quantitatively corresponds to the theoretical predictions. At the same time the longtime detonation wave evolution in hydrogen-air mixture fails for the numerical schemes with approximation orders from the first to the fourth. The detonation wave propagation patterns are different for the different schemes but all of them include the transition from some regular mode to the irregular marginal one with subsequent detonation breakup. Taking into account the findings in [4] the usage of detailed chemical kinetics model apparently will significantly change the pattern of detonation wave propagation for the high approximation orders numerical schemes but the mechanism of such changing is a matter of question. Note also that as the detonation wave propagation in gases is characterized by essentially multidimensional effects the obtained results should be treated first of all as the clarification of the concrete modeling issues rather than the investigation of the physical nature of real detonations.

References

1. *L.I. Sedov, V.P. Korobeinikov, V.V. Markov.* The theory of propagation of blast waves. // Proc. Steklov Inst. Math. 1988. Issue 2. Pp. 187-228.
2. *G.J. Sharpe, S.A. Falle.* Numerical simulations of pulsating detonations: I. Nonlinear stability of steady detonations. // Combust. Theor. Model. 2000. V.4. Pp. 557-574.
3. *C. Leung, M.I. Radulescu, G.J. Sharpe.* Characteristics analysis of the one dimensional pulsating dynamics of chain-branching detonations. // Physics of Fluids. 2010. V.22. Paper 126101, 15 p.
4. *L.K. Cole, A.R. Karagozian, J.-L. Cambier.* Stability of Flame-Shock Coupling in Detonation Waves: 1D Dynamics. // Comb. Sci. Tech. 2012. V.184. Pp.1502-1525.
5. *E.S. Oran, V.N. Gamezo.* Origins of the deflagration-to-detonation transition in gas-phase combustion. // Comb. Flame. 2007. V.148. Pp. 4-47.

6. V. Gamezo, T. Ogawa, E. Oran. Flame acceleration and DDT in channels with obstacles: Effect of obstacle spacing. // Comb. Flame. 2008. V.155. Pp. 302-315.
7. C.-W. Shu. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws. // NASA/CR-97-206253, ICASE Report N 97-65. 1997.
8. A.S. Kholodov. Construction of difference schemes with positive approximation for hyperbolic equations. // USSR Comp. Math. and Math. Phys. 1978. V.18. №6. Pp. 116-132.
9. C.-W. Shu, S. Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. // J. Comp. Phys. 1988. V.77. Pp. 439-471.
10. C.-W. Shu, S. Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, II. // J. Comp. Phys. 1989. V.83. Pp. 32-78.
11. E.F. Toro. Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics. Third Edition. – Springer. 2009. 738 p.

LASER INDUCED SPIN-1/2 DYNAMICS BEYOND THE DIPOLE APPROXIMATION IN THE SEMI-RELATIVISTIC REGIME

A. Khvedelidze¹, I. Rogojin²

akhved@jinr.ru, virus-atl@inbox.ru

¹ A. Razmadze Mathematical Institute of I. Javakhishvili Tbilisi State University

² Joint Institute for Nuclear Research,
Laboratory of Information Technologies

1 Introduction

With this article we aim to discuss quantum effects in charged spin-1/2 particle dynamics caused by a high intensity of a laser field.

A charged particle's dynamics in the electromagnetic background, classical as well as quantum strongly depends on the values of a electromagnetic field strength. When the intensity of a time dependent electromagnetic field is low the standard dipole approximation is well justifiable and consistent with the non-relativistic treatment of a charged particle dynamics [1]. With the growing intensity the retardation effects and the influence of the magnetic part of the Heaviside-Lorentz cannot be ignored. In another words a charged particle's classical motion is ruled out by a nonlinear equations. This, particularly, leads to a higher order harmonics appearance in the Thomson scattering radiation pattern (cf. [2, 3, 4]). Moreover, it turns that the background radiation intensity plays affects a charged particle's spin evolution as well. It is well established that for a vanishing field strength a charged particle's spin behaves adiabatically, linearly responding to the magnetic component of the electromagnetic field. When intensity is increasing the standard quantum-mechanical dipole approximation breaks down, non-linear effects come in force and the adiabatic non-relativistic picture of spin precession turns to be inadequate and relativistic treatment becomes necessary (see detailed discussion in [5, 6] and references therein).

In the present work, having in mind the necessity of the dipole approximation scheme modification, we will discuss the dynamics in an “intermediate regime”, when the values of a laser field strength lead to the post non-relativistic type of dynamics. We address the question what is the effect of complete treatment of the Heaviside-Lorentz force (non ignoring its magnetic part) on the particle's spin evolution. Concentrating on a charged spin-1/2 particle motion in a strong monochromatic plane wave and the induced evolution of particle's spin, the deviation from the standard spin precession will be demonstrated. The claimed results developed out of our studies of a charged particle's classical dynamics beyond the dipole approximation [4] and the semi-classical analysis of the spin-1/2 evolution in a strong laser field [5, 6].

2 Deviations from the dipole approximation results

Within the semi-classical approach, one can point several examples of deviations of particle's spin evolution from its non-relativistic adiabatic counterpart. The combined action of several factors, such as the retardation effect, the role of the magnetic part of Heaviside-Lorentz force in distortion of a particle's classical orbit as well as the Thomas correction, brings changes into the non-relativistic result of adiabatic spin precession. Taking into account all these factors we will show that instead of an expected adiabatic behavior of a particle's spin the following manifestations of a laser intensity impact occurs:

- A spin-flipping process in a strong monochromatic plane with the resonant form of the spin-flipping transition probability with respect to a laser intensity;
- Effect of non-linear dependence of a spin precession frequency on a laser intensity and polarization;
- Appearance of a non-trivial, intensity depended phase of a particle's wave function in a strong circularly polarized laser field background.

3 Concluding remarks

Analytical and numeric studies of the modified Pauli equation for a charged spin-1/2 particle's interacting with the elliptically laser field have been performed. Several effects, including the spin-flipping resonance depending on polarization, have been found taking into account the relativistic corrections due to the laser field intensity.

References

1. *J.D. Jackson*. Classical electrodynamics. – New York, Wiley. 1999.
2. *N.D. Sengupta*. On the scattering of electromagnetic waves by free electron. // Bull. of Calcutta Math. Soc. 1949. V.41. №1. Pp.187-198.
3. *E.S. Sarachik, G.T. Schappert*. Classical theory of the scattering of intense laser radiation by free electron. // Phys. Rev. D1. 2738. 1970.
4. *P. Jameson and A. Khvedelidze*. Classical dynamics of a charged particle in a laser field beyond the dipole approximation. // Phys. Rev.A77. 053403. 2008.
5. *M. Eliashvili, V. Gerdt and A. Khvedelidze*. On precession of entangled spins in a strong laser field. // Phys. of Atomic Nuclei. 2009. V.72. №5. Pp.786-793.
6. *V. Gerdt, S. Gogilidze, A. Khvedelidze, D. Mladenov and V. Sanadze*. Entanglement of spins under a strong laser influence. // Phys. Scr. 2013. T153. 014026.

NUMERICAL INVESTIGATION OF THE SHOCK WAVE – DENSE PARTICLES LAYER INTERACTION

P.S. Utkin

pavel_utk@mail.ru

Institute of Computer Aided Design of the Russian Academy of Sciences
Moscow Institute of Physics and Technology

Introduction

A lot of both experimental and theoretical investigations of two-phase flows with shock waves (SW) deal with dusty gas. But not much works address to the dense two-phase flows. The models based on the kinetic theory for granular flows [1] and Baer-Nunziato (BN) equations [1] are among the number of popular approaches which make it possible to describe the dense high-speed two-phase media motion in the Euler-Euler statement. Moreover the up to date problem is the construction of numerical procedures efficient for the calculation of two-phase flows with wide range of possible regimes – from dilute with low dispersed phase

volume fraction to the dense with the dispersed phase volume fraction close to the packing limit. Such low-dissipation numerical method for the solution of Gidaspow model equations was proposed in the recent paper [2].

A canonical problem that can be used to study modeling issues related to the dense high speed multiphase flows is a SW impacting a planar particle cloud [3]. The problem in [3] was solved numerically in two-dimensional statement and the obtained results were compared with predictions made by the specially derived one-dimensional phase-averaged equations.

Current work pursues two aims. The first one is the realization and comprehensive examination of Godunov method for BN equations proposed in [4]. The second one is the numerical investigation of the SW – dense particles cloud interaction with the use of Godunov solver for BN equations and the comparison of the obtained results with the experimental data [5].

1 Statement of the problem

Statement of the problem corresponds to one of the experiments in [5]. The part of the shock tube with the length $L = 1.8$ m filled with the air under normal conditions is considered (see Fig. 1). The non-penetrating and inflow conditions are imposed at the left and right boundaries respectively. The compression stage of the SW in the experiment allows to impose constant parameters at the right boundary corresponded to that behind the SW with Mach number 1.3 during the whole computational time 4 ms. The left boundary of the glass particles cloud with the length $H = 2$ cm is located at the distance $\Delta_1 = 0.89$ m from the left boundary of the computational area. The diameter of the particles $d = 1.5$ mm, initial dispersed phase volume fraction is equal to 0.65.

Gas pressure is measured in the experiment by means of two pressure transducers ($\Delta_2 = 0.11$ m – transducer No. 1, $\Delta_3 = 0.043$ m – transducer No. 2, see Fig. 1).

The major goal of the problem in consideration is to obtain the qualitatively and quantitatively correct wave structure which includes reflected wave (RW) and transmitted wave (TW) taking into account the motion of the particles cloud.

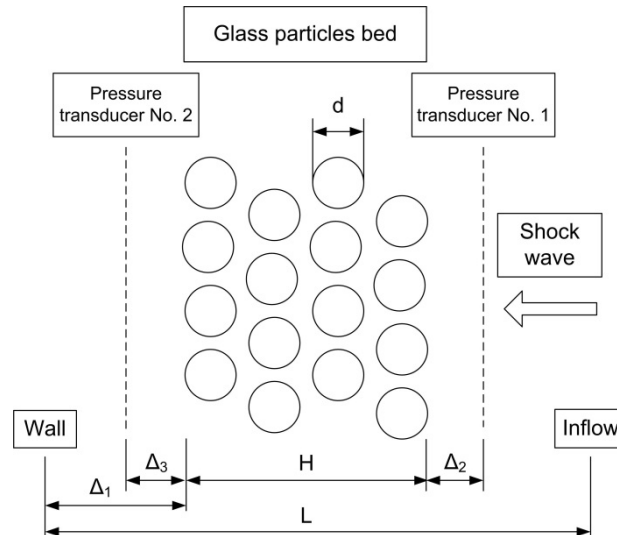


Figure 1. Schematic statement of the problem about SW – glass particles bed interaction.

2 Mathematical model and numerical algorithm

Mathematical model is based on the reduced BN system of equations for the two-phase compressible media problems [1]. The system comprises the mass, momentum and energy conservation equations for the gas and dispersed phases as well as the compaction equation for the dispersed phase volume fraction. The dispersed phase is described with the use of

stiffened gas equation of state. The non-differential right-hand side vector takes into account the inter-phase friction. The dispersed phase is considered to be weakly compressed media with the initial density 2500 kg/m^3 corresponded to the glass density. The drag coefficient is taken equal to the constant value 0.6 in accordance to the recommendations in [5].

The properties of homogeneous BN system are well known. It is hyperbolic under some constraints and has no conservative form. The fact of BN system of equations hyperbolicity provides the opportunity to construct Godunov-type solvers for BN equations numerical integration.

The computational algorithm is based on the physical processes splitting technique when on the time step at first the homogeneous BN systems of equations is integrated and then the inter-phase interaction terms are taken into account. The homogeneous BN system of equations is solved numerically using Godunov approach proposed in [4]. The exact solution of the Riemann problem also provides the exact integration of non-conservative differential right-hand side terms connected with gradients of dispersed phase volume fraction that appears as the non-conservative part of the numerical flux.

One of the main advantages of the Godunov approach for the numerical flux through the computational cell edge calculation is the intrinsic coupling between the phases without artificial splitting strategies for the most challenging case when the dispersed phase volume fraction to the left of the edge significantly differs from that to the right. Another important feature is the possibility of correct treatment of the special cases when the dispersed phase on one side of the initial discontinuity vanishes. To satisfy the hyperbolicity conditions the special cases demand very small but non-zero dispersed phase volume fraction in each cell of the computational area. So the correct modeling of the SW interaction with the particles bed is possible. Note that in the areas where the gradient of the dispersed phase volume fraction is small the non-conservative term can be omitted and the equations for gaseous and dispersed phases decouple.

Godunov method is verified on a series of Riemann problems [6] with the initial conditions which provide the main types of the flow that cause the difficulties in numerical modeling including the cases with huge, up to several orders variations in the parameters of phases and parameters to the left and to the right of the initial discontinuity.

3 Results of the numerical experiments

Interaction of the incident SW with the dense particles cloud produces two waves – the RW which is seen at the transducer No. 1 at the time moment about 2.4 ms in Fig. 2a and the TW noticeable at the transducer No. 2, time moment about 2.2 ms. The correct calculated time gap between the moments of RW and TW arrivals to the transducers in comparison with the experimental one testifies to the adequate model of the drag force in use. The relative error in the amplitude for the RW is about 5% and for the TW is about 9%. Note the similar discrepancy and tends for pressure curves in the calculations in [5]. It needs to mention that the correct wave-pattern within the framework of the mathematical model in use is obtained due to the careful treatment of the non-conservative right-hand side terms in the BN equations on the basis of Godunov approach.

Another important feature of the experiment is the motion of the particles cloud. The motion is conditioned by the difference of the gas pressures at boundaries of the cloud as well as by the friction force action. Fig. 2b illustrates the predicted position of the cloud at the time moment 3.6 ms – the left boundary displaced at about 1 cm from its original position.

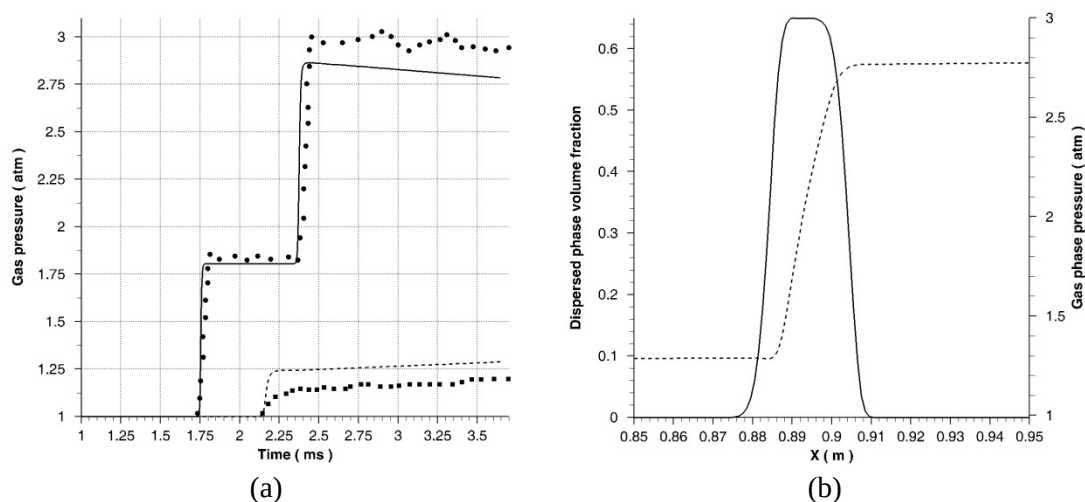


Figure 2. (a) Comparison of experimental (circles, transducer No. 1 and squares, transducer No. 2) and calculated (solid line, transducer No. 1 and dashed line, transducer No. 2) pressure curves and (b) predicted distributions of dispersed phase volume fraction (solid line) and the gas phase pressure (dashed line). Time moment 3.6 ms.

Conclusions

The mathematical modeling of shock wave interaction with dense particles bed is carried out. The investigation is performed by means of specially developed one-dimensional computer code which solves Baer-Nunziato equations with the use of Godunov method. Method realization is verified on a series of Riemann problems. The important feature of the Godunov approach is the possibility of correct treatment of the special cases when the dispersed phase on one side of the initial discontinuity vanishes.

The main features of the shock wave – particles bed interaction process are obtained in the calculations including reflected and transmitted waves as well as the motion of the particles cloud. The calculated quantitative characteristics of the process – waves amplitudes and velocities – are in good agreement with the natural experiment.

The investigation is supported by the scholarship of President of the Russian Federation for young scientists and Ph.D. students which perform promising scientific investigations and developments in top-priority modernization fields of Russian economy on 2012 – 2014.

References

1. D. Gidaspow. Multiphase flow and fluidization. – Academic Press, 1994. 467 p.
2. M.R. Baer, J.W. Nunziato. A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition in reactive granular materials. // Int. J. Multiphase Flow. 1986. V.21. №6. Pp. 861-889.
3. R.W. Houim, E.S. Oran. A low-dissipation technique for computing dense granular compressible flows with shock waves. // Submitted to J. Comp. Phys. arXiv:1312.1290v1 [physics.comp-ph] 4 Dec 2013.
4. J.D. Regele, J. Rabinovitch, T. Colonius, G. Blanquart. Unsteady effects in dense, high speed, particle laden flows. // Int. J. Multiphase Flow. 2014. V.61. Pp. 1-13.
5. D.W. Schwendeman, C.W. Wahle, A.K. Kapila. The Riemann problem and high-resolution Godunov method for a model of compressible two-phase flow. // J. Comp. Phys. 2006 V.212 Pp. 490-526.
6. X. Rogue, G. Rodriguez, J.F. Haas, R. Saurel. Experimental and numerical investigation of the shock-induced fluidization of a particles bed. // Shock Waves. 1998. V.8. Pp. 29-45.
7. S.A. Tokareva, E.F. Toro. HLLC-type Riemann solver for the Baer-Nunziato equations of compressible two-phase flow. // J. Comp. Phys. 2010. V.229. Pp. 3573-3604.

THE WAY OF INFORMATIONAL SUPPORT OF SCIENTIFIC PROJECTS IN COMPUTER CENTER

I.G. Gankevich, Yu.A. Tipikin, N.V. Yuzhanin, V.I. Zolotarev

afk.apmath@gmail.com

Saint Petersburg State University

This work describes the idea and implementation of the system of informational support for the scientific projects. Due to large requirements for computational experiments the problem of HPC tasks quantity growth becomes one of the most significant. So the problem of presentation of the information about HPC tasks requires a solution. Usage of the service desk system as a basic element of the computational task tracking and scientific project support system can be such solution. Particular attention also paid to the analysis and the satisfaction of the conflicting requirements to the task tracking subsystem from the different users. Also the web service set used for the integration of the task tracking subsystem and the datacenter environment is considered. This service set became the main interconnect between the parts of the scientific project support system and also such set allows to change the whole system composition quickly and safely.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ДВУХ СИМУЛЯТОРОВ КВАНТОВЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Д.А. Калёнов

kalionow@mail.ru

Международный университет природы, общества и человека «Дубна»

В докладе будет дан сравнительный анализ двух симуляторов квантовых вычислений, реализованных на классических компьютерах. К настоящему времени создано более 100 симуляторов квантовых вычислений, часть из которых указана на сайте [1], реализованных на различных языковых платформах (Си/Си++, Java, Python, Matlab, Mathematica, Maple и др.). Пока реалистические квантовые компьютеры не созданы, именно симуляторы являются инструментом разработки, анализа и моделирования квантовых алгоритмов. При этом даже те из симуляторов, которые реализованы на одной и той же языковой платформе отличаются особенностями внутреннего представления данных для многокубитных квантовых регистров, спецификой реализации в них квантовых алгоритмов, организации входных и выходных (получаемых в процессе «измерения» выходного квантовых состояний) данных и промежуточных состояний регистра в процессе квантового вычисления. Поэтому представляет интерес провести экспериментальное сравнение различных симуляторов, реализованных на одной той же языковой платформе. Для этой цели из списка сайта [1] мы выбрали два доступных (свободно распространяемых) симулятора Q++ [2] и Eqcs [3], реализованных на языке Си++. Для их количественного сравнения мы выбрали два наиболее ярких из всех известных квантовых алгоритмов [4], оба из которых реализованы в выбранных нами симуляторах:

Алгоритм Шора целочисленной факторизации [4], играющий принципиальную роль в применении реалистических квантовых компьютеров (с несколькими тысячами кубитов в регистре), как только последние будут созданы, поскольку на трудности целочисленной факторизации классическими алгоритмами основана наиболее широко используемая криптосистема RSA. Квантовый алгоритм Шора полиномиален (кубичен) по длине факторизируемого числа, в то время как самый быстрый из известных классических алгоритмов – суперполиномиален.

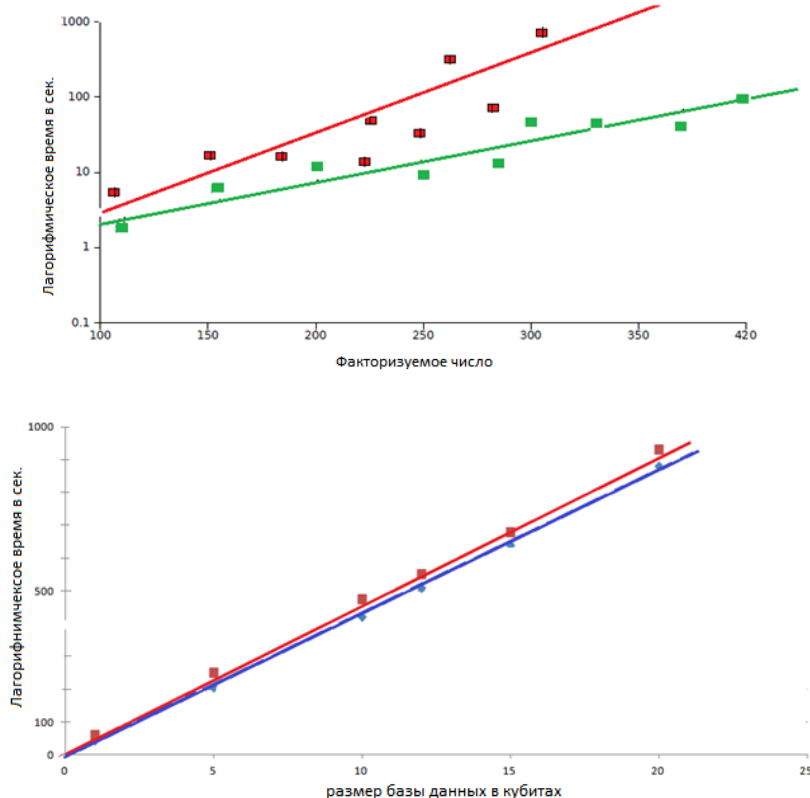
Алгоритм Гровера поиска в неотсортированной базе данных [5], который имеет

сложность $O(\sqrt{N})$ по числу записей в базе N , тогда как классический алгоритм имеет поведение $O(N)$.

На следующих двух графиках показано полученное нами поведение указанных алгоритмов.

Верхний из графиков показывает времена факторизации (разложения на множители), показанные в логарифмическом масштабе вдоль оси ординат, для целых десятичных чисел, значения которых показаны по оси абсцисс. Времена счета с симулятором Q++ показаны зеленым цветом, а Eqcs – красным цветом. Видно, что реализация алгоритма Шора в Q++ является экспоненциально (по длине факторизируемого числа) более быстрой, чем реализация этого алгоритма в Eqcs.

На нижнем графике сопоставлены времена поиска нужной записи в базе данных, размер которых (в кубитах, а размер базы по числу записей равен 2^n , где n – число кубитов) отложен по оси абсцисс и время поиска – по оси ординат. В этом случае время счета симулятора Q++ показано красным цветом, а время счета симулятора Eqcs – синим. Видно, что для алгоритма Шора различие времен счета является незначительным, хотя Eqcs и выявляет слегка более быстрое (по времени счета) поведение.



Список литературы

1. URL: http://www.quantiki.org/wiki/List_of_QC_simulators
2. URL: <http://sourceforge.net/projects/qplusplus/>
3. URL: <http://home.snafu.de/pbelkner/eqcs/>
4. URL: <http://math.nist.gov/quantum/zoo/>
5. P.W. Shor. Algorithms for quantum computation: Discrete logarithms and factoring. // Proceedings of the 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science, IEEE Computer Society Press, Los Alamitos, CA (1994). Pp. 124-134.
6. L.K. Grover. Quantum Mechanics Helps in Searching for a Needle in a Haystack. // Phys. Rev. Lett. 1997. 79. Pp. 325-328.