

ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ

СЕРИЯ:

**Математическое моделирование
физических процессов**

ВЫПУСК 4

2011

ФГУП
"РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР —
ВНИИЭФ"

ВОПРОСЫ
АТОМНОЙ НАУКИ
И ТЕХНИКИ

СЕРИЯ:

Математическое моделирование
физических процессов

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ СБОРНИК

ВЫПУСК 4

Издается с 1978 г.

Саров — 2011

Главный редактор Р. М. Шагалиев

Редакционная коллегия:

Ю. Г. Бартенев (ВНИИЭФ), Ю. А. Бондаренко (ВНИИЭФ) — зам. главного редактора,
А. Н. Быков (ВНИИЭФ), Н. Н. Залялов (ВНИИЭФ), А. Д. Зубов (ВНИИТФ),
Н. В. Иванов (ВНИИЭФ), В. Л. Ковалев (МГУ), М. Ю. Козманов (ВНИИТФ),
В. Е. Неуважаев (ВНИИТФ), Е. В. Соколовская (ВНИИЭФ) — ответственный секретарь,
А. А. Соловьев (ВНИИЭФ), В. Ф. Спиридонов (ВНИИЭФ),
В. Ф. Тишкин (ИММ РАН) — зам. главного редактора, А. А. Холостов (ВНИИЭФ),
А. Н. Чекалин (Казанский ГУ), В. Н. Чубариков (МГУ)

УДК 517.958:536.2

АНАЛИЗ НЕКОТОРЫХ СХЕМ ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЯ КВАЗИДИФFUЗИОННЫМ МЕТОДОМ

С. А. Грабовенская, А. А. Шестаков
(РФЯЦ-ВНИИТФ)

Рассматриваются четыре схемы для решения переноса теплового излучения квазидиффузионным методом, условия устойчивости, положительности и монотонности для них. Показано, что в отличие от старых схем две построенные новые схемы положительны в параболическом квазидиффузионном приближении.

Ключевые слова: перенос теплового излучения, квазидиффузионное приближение.

Введение

Система уравнений переноса излучения и уравнения энергии представляет собой сложную, нелинейную систему, поэтому ее часто решают в более простом приближении. Одним из широко применяемых является квазидиффузионное приближение [1]. Для нестационарной задачи оно приводит к гиперболической системе уравнений. Из теоремы Годунова известно, что для гиперболической системы не существует монотонной схемы второго порядка в классе линейных схем. Если пренебречь временной производной от потока излучения, то гиперболическая система перейдет в параболическое уравнение [2]. Для параболического уравнения с постоянным коэффициентом квазидиффузии $D = 1/3$ нет проблемы с построением монотонной схемы второго порядка. Однако при переменном коэффициенте квазидиффузии это проблематично, так как в дифференциальном случае не выполняется принцип максимума. Больше того, для такой системы не всегда удастся построить монотонную схему первого порядка. Применявшаяся ранее схема РОМБ [3, 4] не всегда позволяла получать монотонные и положительные решения для параболического уравнения с переменным коэффициентом квазидиффузии.

Одним из путей к построению монотонной схемы второго порядка для гиперболического уравнения является использование TVD-схем [5]. Однако, во-первых, они нелинейные, т. е. более сложные в реализации и менее экономичные, чем линейные схемы. Во-вторых, эти схемы требуют специальных видоизменений для счета односторонних производных у границ. В-третьих, они используют переход к инвариантам, применяемый для гиперболической системы уравнений. Дифференциальную систему переноса в квазидиффузионном приближении привести к инвариантам не удастся. В разностном виде переход к инвариантам возможен, но в параболическом случае использование TVD-схем с переходом к инвариантам затруднено. Наконец, реализация этих схем чрезвычайно сложна для многомерных геометрий и неструктурированных сеток.

В данной работе, не нарушая идеологии двухточечной схемы РОМБ, аппроксимирующей уравнения в рамках ячейки, предлагаются два варианта линейных разностных схем, улучшающих условия положительности решения. Для одного из них проводится численное сравнение с используемыми ранее схемами РОМБ [4] и TVD [5]. Суть новых схем заключается, во-первых, в разделении члена $\Delta_i(DU)$ на два слагаемых $D\Delta_i U$ и $U\Delta_i D$, а во-вторых, в использовании особой аппроксимации слагаемого $U\Delta_i D$. Разделение члена $\Delta_i(DU)$ на два слагаемых приводит к аппроксимации второго уравнения квазидиффузионной системы в неконсервативной форме. Однако это не нарушает консервативности схемы, так как в уравнении баланса участвует только первое уравнение с потоками

на границах, вычисляемыми с помощью второго уравнения. Первое слагаемое $D\Delta_i U$ не представляет сложности в аппроксимации, так как при подстановке в первое уравнение квазидиффузионной системы превращается в диффузионный член. Аппроксимация второго слагаемого имеет первый порядок по времени и второй порядок по пространству, а при получении отрицательного решения снижает порядок по пространству до первого. В новой схеме впервые применены разные соотношения связи для плотности излучения в разных уравнениях системы квазидиффузии. Значения плотности излучения, полученные из разных соотношений связи, отличаются в членах второго порядка аппроксимации. Особая аппроксимация плотности излучения во втором уравнении не нарушает консервативности схемы и отличается от аппроксимации плотности излучения в первом уравнении в худшем случае в членах первого порядка.

Постановка задачи

Рассмотрим одномерную систему переноса лучистой энергии в многогрупповом квазидиффузионном виде [1]:

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \frac{\partial U_g}{\partial t} + \frac{\partial (r^\sigma S_g)}{r^\sigma \partial r} + \alpha_{cg} U_g &= \alpha_{cg} B_g; \\ \frac{\beta}{c} \frac{\partial S_g}{\partial t} + \frac{\partial (D_g U_g)}{\partial r} + \alpha_g S_g + d_g U_g &= 0; \\ \frac{\partial E}{\partial t} &= \sum_{g=1}^G \alpha_{cg} (U_g - B_g). \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь t — время; r — координата; c — скорость света; g — индекс энергетической группы, $g = 1, \dots, G$; $U_g = \int_{-1}^1 J_g d\mu$ — плотность излучения, умноженная на скорость света; $S_g = \int_{-1}^1 \mu J_g d\mu$ — поток излучения; J_g — интенсивность излучения; ε_g — энергия; $B_g = \frac{8\pi}{c^2 \tilde{h}^3} \int_{\Delta\varepsilon_g} \frac{\varepsilon^3}{\exp(\varepsilon/T) - 1} d\varepsilon$ —

функция Планка, умноженная на скорость света; \tilde{h} — постоянная Планка; α_{cg} — коэффициент поглощения фотонов; α_{sg} — коэффициент рассеяния фотонов; α_g — коэффициент ослабления, $\alpha_g = \alpha_{cg} + \alpha_{sg}$; E — внутренняя энергия вещества; $D_g, D_{g,1}$ — коэффициенты квазидиффузии; тип приближения характеризуется следующими значениями параметров:

- $\beta = 1$ — квазидиффузионное приближение (КД);
- $\beta = 0$ — квазидиффузионное приближение в параболическом случае (РД);
- $\beta = 1; D_g = 1/3$ — P_1 -приближение;
- $\beta = 0; D_g = 1/3$ — диффузионное приближение;

σ — тип геометрии:

- при $\sigma = 0$ — плоская геометрия с коэффициентами $d_g = 0, D_g = \frac{1}{U_g} \int_{-1}^1 \mu^2 J_g d\mu$;
- при $\sigma = 1$ — цилиндрически-симметричная геометрия, $d_g = \frac{1}{r} (2D_g + D_{g,1} - 1)$,
 $D_g = \frac{1}{U_g} \int_0^{2\pi} \int_0^1 \cos^2 \varphi \int_{-1}^1 (1 - \mu^2) J_g d\mu d\varphi, D_{g,1} = \frac{1}{U_g} \int_0^{2\pi} \int_0^1 \mu^2 J_g d\mu d\varphi, U_g = \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 J_g d\mu d\varphi$;
- при $\sigma = 2$ — сферически-симметричная геометрия, $d_g = \frac{1}{r} (3D_g - 1), D_g = \frac{1}{U_g} \int_{-1}^1 \mu^2 J_g d\mu$.

Граничные условия имеют вид

$$\alpha_{0,g} U_g + \beta_{0,g} S_g = \varphi_{0,g}; \quad \alpha_{1,g} U_g + \beta_{1,g} S_g = \varphi_{1,g},$$

где $\alpha_{0,g}, \beta_{0,g}, \varphi_{0,g}, \alpha_{1,g}, \beta_{1,g}, \varphi_{1,g}$ — параметры для задания граничных условий.

Разностная аппроксимация

Рассмотрим разностную аппроксимацию системы (1) в рамках одной ячейки. Тогда система разностных КД-уравнений принимает вид (для упрощения записи здесь опущены индексы g и $i + 1/2$)

$$\begin{aligned} \frac{1}{c\tau}U^{n+1} + \frac{1}{V_i}\Delta_i(r^\sigma S^{n+1}) + \alpha_c U^{n+1} &= \frac{1}{c\tau}U^n + \alpha_c B^{n+1}; \\ \frac{\beta}{c\tau}S^{n+1} + \frac{D}{h}\Delta_i U^{n+1} + \alpha S^{n+1} + (d + \lambda)U^{n+1} &= \frac{\beta}{c\tau}S^n, \end{aligned} \quad (2)$$

где $\alpha = \alpha_c + \alpha_s$; $\tau = t^{n+1} - t^n$; $h = r_{i+1} - r_i$; $V_i = \frac{r_{i+1}^{\sigma+1} - r_i^{\sigma+1}}{\sigma + 1}$; $\lambda = \frac{\Delta_i D}{h}$.

Система уравнений (2) является незамкнутой. Для ее замыкания надо задавать дополнительные соотношения связи искомых величин в центрах ячеек с их аналогами на гранях. Эти соотношения определяют точность и монотонность схемы. Будем вводить указанные соотношения связи попарному. Дело в том, что в классе линейных разностных схем не удастся подобрать дополнительных соотношений связи для получения монотонного решения даже первого порядка аппроксимации. Поэтому в данной работе сравниваются три варианта соотношений связи для аппроксимации системы (1) в рамках одной ячейки.

Сначала рассмотрим соотношения связи для U и S по схеме РОМБ (первая схема), применяемые для решения системы КД-уравнений в работе [4]:

$$U_{i+1/2} = 0,5(U_i + U_{i+1}) + \delta\Delta_i S; \quad S_{i+1/2} = 0,5(S_i + S_{i+1}) + \theta\Delta_i U, \quad (3)$$

где δ, θ — параметры разностной схемы.

Подставляя (3) в систему (2), получаем следующие уравнения:

$$\begin{aligned} a_i^0 U_i + b_i^0 U_{i+1} + c_i^0 S_i + d_i^0 S_{i+1} &= f_i^0; \\ a_i^1 U_i + b_i^1 U_{i+1} + c_i^1 S_i + d_i^1 S_{i+1} &= f_i^1, \end{aligned} \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned} a_i^0 &= b_i^0 = 1, \quad c_i^0 = -2a, \quad d_i^0 = 2\bar{a}; \quad a = \delta + \frac{r_i^\sigma}{q_1 V_i}, \quad \bar{a} = \delta + \frac{r_{i+1}^\sigma}{q_1 V_i}; \\ a_i^1 &= -2m + p, \quad b_i^1 = 2m + p, \quad c_i^1 = 1 - 2\delta p, \quad d_i^1 = 1 + 2\delta p, \quad p = \frac{d + \lambda}{q}, \quad m = \theta + \frac{D}{qh}; \\ f_i^0 &= \frac{2}{q_1} \left(\frac{1}{c\tau}U^n + \alpha_c B^{n+1} \right); \quad f_i^1 = \frac{2\beta}{c\tau q} S^n; \quad q_1 = \frac{1}{c\tau} + \alpha_c; \quad q = \frac{\beta}{c\tau} + \alpha. \end{aligned}$$

Заметим, что при $\delta \geq 0$ коэффициенты $a_i^0, b_i^0, -c_i^0, d_i^0$ положительны, а коэффициенты $a_i^1, b_i^1, c_i^1, d_i^1$ из-за знакопеременности p могут менять знак. Знакопостоянными они становятся только при $p = 0$.

Во второй схеме используем следующую аппроксимацию системы (1)

$$\begin{aligned} \frac{1}{c\tau}U^{n+1} + \frac{1}{V_i}\Delta_i(r^\sigma S^{n+1}) + \alpha_c U^{n+1} &= \frac{1}{c\tau}U^n + \alpha_c B^{n+1}; \\ \frac{\beta}{c\tau}S^{n+1} + \frac{D}{h}\Delta_i U^{n+1} + \alpha S^{n+1} + (d + \lambda)U_h^{n+1} &= \frac{\beta}{c\tau}S^n. \end{aligned} \quad (5)$$

Соотношения связи для системы (5) имеют вид

$$\begin{aligned} U_{i+1/2} &= \nu_i U_i + (1 - \nu_i) U_{i+1} + \delta_i \Delta_i (r^\sigma S); \\ (r^\sigma S)_{i+1/2} &= \mu_i (r^\sigma S)_i + (1 - \mu_i) (r^\sigma S)_{i+1} + \theta_i \Delta_i U; \\ (U_h)_{i+1/2} &= \gamma_i U_i + (1 - \gamma_i) U_{i+1} + \xi_i \Delta_i (r^\sigma S), \end{aligned} \quad (6)$$

где $\delta, \theta, \xi, \nu, \mu, \gamma, 0 \leq \nu_i \leq 1, 0 \leq \mu_i \leq 1, 0 \leq \gamma_i \leq 1$ — параметры разностной схемы.

В соотношениях связи (6) используется разная аппроксимация в центре ячейки плотности излучения в первом и втором уравнениях системы (5). В общем случае разность $(U_h)_{i+1/2} - U_{i+1/2} = O(h)$ имеет первый порядок малости, при $\gamma = \nu = 0,5, \delta = O(h), \xi = O(h)$ эта разность имеет второй порядок малости, а при $\gamma = \nu, \delta = \xi$ она всегда обращается в нуль. Хотя второе уравнение системы (1) аппроксимируется в неконсервативной форме с другими соотношениями связи для U , это не нарушает консервативности схемы, так как в уравнении баланса участвует только первое уравнение с потоками на гранях, вычисляемыми с помощью второго уравнения.

Подставляя соотношения связи (6) в систему (5), получаем относительно $U_i, \bar{S}_i = (r^\sigma S)_i$ уравнения (4) с коэффициентами

$$\begin{aligned} a_i^0 &= \nu_i, & b_i^0 &= 1 - \nu_i, & c_i^0 &= -a_i, & d_i^0 &= a_i, & a_i &= \delta_i + \frac{1}{q_{1,i}V_i}; \\ a_i^1 &= -m_i + \gamma_i p_i, & b_i^1 &= m_i + (1 - \gamma_i) p_i, & c_i^1 &= \mu_i - p_i \xi_i, & d_i^1 &= 1 - \mu_i + p_i \xi_i; \\ p_i &= r_{i+1/2}^\sigma \frac{d_i + \lambda_i}{q_i}, & m_i &= \theta_i + \frac{D_i r_{i+1/2}^\sigma}{q_i h_i}; \\ f^0 &= \frac{1}{q_1} \left(\frac{1}{c\tau} U^n + \alpha_c B^{n+1} \right), & f^1 &= \frac{\beta r^\sigma}{c\tau q} S^n. \end{aligned}$$

Заметим, что при $\delta \geq 0$ коэффициенты $a_i^0, b_i^0, -c_i^0, d_i^0$ положительны, а коэффициенты $a_i^1, b_i^1, c_i^1, d_i^1$ из-за знакопеременности p могут менять знак, но в отличие от схемы РОМБ могут стать знакопостоянными не только при $p = 0$, но также при $\xi_i = 0$ и $\gamma_i = 0$ или $\gamma_i = 1$.

В третьей схеме разностная аппроксимация члена $\frac{\partial(DU)}{\partial r}$ производится в консервативной форме:

$$\begin{aligned} \frac{1}{c\tau} U^{n+1} + \frac{1}{V_i} \Delta_i (r^\sigma S^{n+1}) + \alpha_c U^{n+1} &= \frac{1}{c\tau} U^n + \alpha_c B^{n+1}; \\ \frac{\beta}{c\tau} S^{n+1} + \frac{1}{h} \Delta_i (DU^{n+1}) + \alpha S^{n+1} + dU_h^{n+1} &= \frac{\beta}{c\tau} S^n. \end{aligned} \tag{7}$$

Для системы (7) рассмотрим соотношения связи в виде

$$\begin{aligned} (DU)_{i+1/2} &= 0,5 [(DU)_i + (DU)_{i+1}] + \delta \Delta_i (r^\sigma S); \\ (r^\sigma S)_{i+1/2} &= 0,5 [(r^\sigma S)_i + (r^\sigma S)_{i+1}] + \theta \Delta_i (DU); \\ (DU_h)_{i+1/2} &= \gamma_i (DU)_i + (1 - \gamma_i) (DU)_{i+1} + \xi_i \Delta_i (r^\sigma S), \end{aligned} \tag{8}$$

где $\delta, \theta, \gamma, \xi$ — параметры разностной схемы.

Подставляя (8) в систему (7), получаем уравнения (4) относительно $\bar{U}_i = (DU)_i, \bar{S}_i = (r^\sigma S)_i$ вместо U, S с коэффициентами

$$\begin{aligned} a_i^0 &= b_i^0 = 1, & c_i^0 &= -2a, & d_i^0 &= 2a, & a &= \delta + \frac{D_{i+1/2}}{q_1 V_i}; \\ a_i^1 &= 2p\gamma - 2m, & b_i^1 &= 2p(1 - \gamma) + 2m, & c_i^1 &= 1 - 2p\xi, & d_i^1 &= 1 + 2p\xi; \\ p &= \frac{dr_{i+1/2}^\sigma}{qD_{i+1/2}}, & m &= \theta + \frac{r_{i+1/2}^\sigma}{qh}; \\ f^0 &= \frac{2D_{i+1/2}}{q_1} \left(\frac{1}{c\tau} U^n + \alpha_c B^{n+1} \right); & f^1 &= \frac{2\beta}{c\tau q} (r^\sigma S^n)_{i+1/2}. \end{aligned}$$

Заметим, что при $\delta \geq 0$ коэффициенты $a_i^0, b_i^0, -c_i^0, d_i^0$ положительны, а коэффициенты $-a_i^1, b_i^1, c_i^1, d_i^1$ можно сделать положительными за счет выбора параметров γ, ξ .

Достоинством данной схемы по сравнению со схемой (5), (6) является то, что коэффициент $p = \frac{dr_{i+1/2}^\sigma}{qD_{i+1/2}}$ становится более знакоопределенным, так как в большинстве задач $D > 1/3$ и $d > 0$.

Недостатком данной схемы является то, что граничные условия для прогонки надо ставить относительно \bar{U}_i, \bar{S}_i вместо U, S , что предполагает интерполяцию коэффициента квазидиффузии на границе. Вторым недостатком данной схемы является то, что если коэффициент квазидиффузии считается не на итерациях, а один раз на шаге, то возникает рассогласование при получении плотности излучения в центрах ячеек на итерациях:

$$U_{i+1/2}^\nu = \frac{0,5 [(DU)_i^\nu + (DU)_{i+1}^\nu] + \delta\Delta_i (r^\sigma S^\nu)}{D_{i+1/2}^n}.$$

Система линейных уравнений (4) решается методом потоковой прогонки. Предполагаем связь между U_i и S_i в виде $X_i U_i + Y_i S_i = Z_i$, $X_i + Y_i = 1$, где X_i, Y_i, Z_i — прогоночные коэффициенты, которые вычисляются по рекуррентным формулам

$$\begin{aligned} X_{i+1} &= L_i (X_i \langle cb \rangle_i + Y_i \langle ba \rangle_i); \\ Y_{i+1} &= L_i (X_i \langle cd \rangle_i + Y_i \langle da \rangle_i); \\ Z_{i+1} &= L_i (X_i \langle cf \rangle_i + Y_i \langle fa \rangle_i + Z_i \langle ac \rangle_i); \\ L_i^{-1} &= X_i (\langle cb \rangle_i + \langle cd \rangle_i) + Y_i (\langle ba \rangle_i + \langle da \rangle_i); \\ X_0 &= \frac{\alpha_0}{\alpha_0 + \beta_0}; \quad Y_0 = \frac{\beta_0}{\alpha_0 + \beta_0}; \quad Z_0 = \frac{\varphi_0}{\alpha_0 + \beta_0}; \\ \langle ab \rangle &= a^1 b^0 - a^0 b^1; \quad \langle ca \rangle = c^1 a^0 - c^0 a^1; \dots \end{aligned} \tag{9}$$

Формулы обратной прогонки:

$$\begin{aligned} U_i &= L_i Y_{i+1}^{-1} (\langle bd \rangle_i Y_i U_{i+1} + \langle df \rangle_i Y_i + \langle cd \rangle_i Z_i), \quad S_i = Y_i^{-1} (Z_i - X_i U_i), \quad i = I-1, \dots, 1, 0; \\ U_I &= (\beta_1 Z_I - \varphi_1 Y_I) (\beta_1 X_I - \alpha_1 Y_I)^{-1}, \quad S_I = (\varphi_1 X_I - \alpha_1 Z_I) (\beta_1 X_I - \alpha_1 Y_I)^{-1}. \end{aligned} \tag{10}$$

При $Y_0 = 0$, а это возможно только на границе, поток вычисляем по формуле

$$S_i = L_i X_{i+1}^{-1} (\langle bd \rangle_i X_i S_{i+1} - \langle bf \rangle_i X_i + \langle ba \rangle_i Z_i).$$

Найдем условия устойчивости, положительности и монотонности рассмотренных выше схем.

Условия устойчивости, положительности и монотонности

Для системы (9) видно, что если выполняются условия

$$\langle cb \rangle_i \geq 0; \quad \langle ba \rangle_i \geq 0; \quad \langle cd \rangle_i \geq 0; \quad \langle da \rangle_i \geq 0; \quad X_0 \geq 0; \quad Y_0 \geq 0; \quad X_0 + Y_0 > 0, \tag{11}$$

то прогоночные коэффициенты X_i, Y_i всегда лежат в интервале $[0, 1]$, т. е. вычисляются устойчиво. Устойчивое вычисление коэффициента Z_i требует выполнения условия

$$|L_i \langle ac \rangle_i| \leq 1. \tag{12}$$

Требование положительности коэффициента Z_i приводит к дополнительным условиям:

$$\langle cf \rangle_i \geq 0; \quad \langle fa \rangle_i \geq 0; \quad \langle ac \rangle_i \geq 0; \quad Z_0 \geq 0. \tag{13}$$

Для устойчивости формул обратной прогонки (10) необходимо, чтобы при вычислении U выполнялись условия $|L_i Y_{i+1}^{-1} \langle bd \rangle_i Y| \leq 1$, или при выполнении условий (11)

$$|\langle bd \rangle_i| Y_i \leq \langle cd \rangle_i X_i + \langle da \rangle_i Y_i \tag{14}$$

и на границе $\beta X_I \neq \alpha Y_I$.

Требование положительности U приводит к условиям

$$\langle bd \rangle_i \geq 0; \quad \langle df \rangle_i \geq 0; \quad U_I \geq 0. \quad (15)$$

Устойчивость вычисления потока при $Y_i \neq 0$ следует из устойчивости Z_i, U_i при ограниченности X_i и Y_i^{-1} .

Первая схема (РОМБ). Выполнение условий (11), (12), (14) при $a \geq 0, m \geq 0$ гарантирует устойчивость прогонки и вместе с ней устойчивость разностной схемы РОМБ. Выполнение условия положительности U зависит от выбора параметров δ, θ .

Счет задач начинается по схеме с параметрами, обеспечивающими второй порядок аппроксимации по пространству. При отрицательности U в каждой конкретной точке можно переходить на схему первого порядка аппроксимации по пространству с другими параметрами δ, θ в данной точке. В этом случае необходимо пересчитать коэффициенты a, b, c, d в данной точке и прогоночные коэффициенты X, Y, Z во всех точках. Чтобы упростить процедуру пересчета и не повторять вычисление коэффициентов X, Y, Z , можно проверять условия (13)–(15) сразу и в зависимости от этого выбирать параметры δ, θ . Это накладывает более жесткие требования на параметры схемы, так как положительное решение может получаться и при нарушении этих условий. Однако если не повторять вычисление коэффициентов X, Y, Z и плотности излучения U при пересчете, то счет заметно удешевляется.

Для устойчивости схемы РОМБ из условий (11), (12), (14) следует необходимость выполнения условий

$$a \geq 0; \quad m \geq 0; \quad m \geq 0,5p; \quad \delta |p| \leq 0,5; \quad (16)$$

$$V \geq 2 |p| \frac{r^\sigma}{q_1}. \quad (17)$$

Условие (17) является очень жестким, так как не зависит от параметров схемы и даже в РД-приближении ограничивает размер ячейки снизу. В диффузионном случае при $p = 0$ (17) выполняется всегда и остаются только условия $a \geq 0$ и $m \geq 0$.

Из условий положительности (13), (15) с учетом (16), (17) и знакопеременности коэффициента f^1 следует

$$(1 - 2\delta p) f^0 \geq 2a |f^1|, \quad 2\delta p \leq 1; \quad (18)$$

$$(2m - p) f^0 \geq |f^1|, \quad 2m \geq p. \quad (19)$$

Эти условия всегда выполняются в диффузионном случае при $\beta = 0, \delta \geq 0, m \geq 0$. При $\beta = 1$ условия (18), (19) выполняются не всегда и построить положительную схему именно из-за этих условий в гиперболическом случае не удастся, поэтому без их выполнения можно гарантировать только устойчивость прогонки.

Параметры δ, θ в работах [4, 5–9] для данной схемы выбираются в виде

$$\delta = \frac{1}{4m}; \quad \theta = \frac{h}{4} \Lambda \left(\frac{D}{q} \right), \quad (20)$$

где $\Lambda(A)$ — разностный оператор второй производной по пространству:

$$\Lambda(A)_{i+1/2} = \frac{A_{i-1/2} - 2A_{i+1/2} + A_{i+3/2}}{h^2}.$$

Для параметров δ, θ из (20) выполнены условия $a \geq 0, m \geq 0$ и схема имеет второй порядок аппроксимации по пространству. Однако остальные условия (16), (17) могут нарушаться, поэтому схема не является устойчивой. Переход на схему первого порядка с $\delta = \frac{1}{2|p|}, \theta = 0,5 |p|$ помогает выполнить все условия (16). Однако при произвольных δ, θ условия (16) могут нарушаться.

Отсюда следует, что в P_1 -приближении при $p = 0$ схема РОМБ является устойчивой, но неположительной [7–9]. В диффузионном приближении при $p = \beta = 0$ схема РОМБ является устойчивой и положительной. Условие монотонности выполняется только в диффузионном случае. Это показано в работах [5, 8, 9].

В результате получаем, что схема РОМБ в КД- и РД-приближениях может быть неустойчивой, в P_1 -приближении она устойчива, но неположительна и немонотонна, в диффузионном приближении — устойчива, положительна и монотонна.

Вторая схема. Рассмотрим вторую схему с соотношениями связи (6). Для выполнения устойчивости схемы РОМБ из условий (11), (12), (14) следуют условия

$$m \geq 0; \quad a \geq 0; \quad a = \xi; \quad \nu = \gamma; \quad (21)$$

$$am \geq 1 + \nu\mu - \mu - \nu. \quad (22)$$

Условия положительности (13), (15) с учетом (21), (22) выполняются, если

$$\begin{aligned} (\mu - p\xi) f^0 &\geq a |f^1|, \quad \mu - p\xi \geq 0; \\ (1 - \mu + p\xi) f^0 &\geq a |f^1|, \quad 1 - \mu + p\xi \geq 0; \\ (m - p\gamma) f^0 &\geq \nu |f^1|, \quad m - p\gamma \geq 0. \end{aligned} \quad (23)$$

Эти условия всегда выполняются в диффузионном случае при $p = \beta = 0$. При $\beta = 1$ условия (23) выполняются не всегда и построить положительную схему именно из-за этих условий в гиперболическом случае сложно, а без их выполнения можно гарантировать только устойчивость схемы.

Для выполнения условий (23) при нарушении условия $\mu - p\xi \geq 0$ или условия $1 - \mu + p\xi \geq 0$ потребуем зануления коэффициента ξ , при нарушении условия $m - p\gamma \geq 0$ — зануления коэффициента γ . Тогда условия (23) для любых значений функции Планка будут выполняться при

$$\beta \max(x, z, s) |S^n| \leq U^n, \quad x = \frac{a\omega}{\mu - p\xi} \geq 0, \quad z = \frac{a\omega}{1 - \mu + p\xi} \geq 0, \quad s = \frac{\nu\omega}{m - p\gamma} \geq 0, \quad \omega = \frac{q_1 r^\sigma}{q}. \quad (24)$$

В случае, если такой выбор параметров не помогает выполнению условий (23), в этой точке можно занулять коэффициент β , т. е. считать в данной точке стационарные уравнения.

Счет задачи начинается по схеме с параметрами $\nu = \mu = \gamma = 0,5$; $\xi = \delta + \frac{1}{q_1 V_i} \geq 0$; $\delta = \frac{1}{4m}$; $\theta = \frac{h}{4} \Lambda \left(\frac{Dr^\sigma}{q} \right)$. При этих параметрах схема имеет второй порядок аппроксимации по пространству и первый порядок аппроксимации по времени.

Соотношения связи принимают вид

$$\begin{aligned} U_{i+1/2} &= \frac{U_i + U_{i+1}}{2} + \delta_i \Delta_i (r^\sigma S); \\ (r^\sigma S)_{i+1/2} &= \frac{(r^\sigma S)_i + (r^\sigma S)_{i+1}}{2} + \theta_i \Delta_i U; \\ (U_h)_{i+1/2} &= \frac{U_i + U_{i+1}}{2} + \left(\delta + \frac{1}{q_1 V_i} \right) \Delta_i (r^\sigma S). \end{aligned}$$

При выполнении условия $m \geq 0,5p$ и нарушении условия $|p| \xi \leq 0,5$ полагаем $\xi = 0$, т. е. получаем

$$(U_h)_{i+1/2} = \frac{U_i + U_{i+1}}{2}.$$

Это не нарушает второго порядка аппроксимации по пространству. Поэтому при нарушении условий (22) и при $p \leq 0$ полагаем $\gamma = 1$ — получаем схему первого порядка аппроксимации $(U_h)_{i+1/2} = U_i$.

При нарушении условий (22) и при $p \geq 0$ полагаем $\gamma = 0$ — получаем схему первого порядка аппроксимации $(U_h)_{i+1/2} = U_{i+1}$.

При выполнении условия $|p|\xi \leq 0,5$ и нарушении условия $m \geq \gamma p$ в системе (23) (это возможно только при $p \geq 0$) полагаем $\gamma = 0$, т. е. получаем

$$(U_h)_{i+1/2} = U_{i+1} + \left(\delta + \frac{1}{q_1 V_i} \right) \Delta_i (r^\sigma S).$$

В этом случае имеем схему первого порядка аппроксимации.

При нарушении условия $a \geq 0,5\xi$ полагаем $\xi = 0$, т. е. получаем $(U_h)_{i+1/2} = U_{i+1}$.

В результате можно сформулировать

Утверждение 1. *Схема (5), (6) с вышеперечисленным алгоритмом выбора параметров положительна, если в начальный момент выполняется условие $U_{i+1/2}^{n=0} \geq 0$, на границах $X_0 \geq 0, Y_0 \geq 0, Z_0 \geq 0, X_0 + Y_0 > 0, U_I \geq 0$ и выполняется условие ограничения потока (24).*

Следствие 1. *В диффузионном случае при $\beta = 0, D = 1/3$ схема (5), (6) положительна без условия ограничения потока и имеет второй порядок аппроксимации по пространству.*

Следствие 2. *В параболическом квазидиффузионном случае при $\beta = 0$ схема (5), (6) положительна без условия ограничения потока, но может снижать порядок аппроксимации по пространству до первого при нарушении условия $m \geq 0,5p$.*

Следствие 3. *В P_1 -приближении при $\beta = 1, D = 1/3, p = 0$ схема (5), (6) положительна при условии ограничения потока (24) и имеет второй порядок аппроксимации по пространству.*

Можно показать, что для выполнения условия монотонности схемы требуется более жесткое условие ограничения изменения потока

$$\beta \max(x_1, x_2) |\Delta_{i-1/2} S^n| \leq \Delta_{i-1/2} U^n, \quad x_1 = \frac{aq_1}{d_1 q}, \quad x_2 = \frac{q_1}{q} \frac{Xa + Y}{X(0,5 - p\xi) + Y(m - \gamma p)} \geq 0. \quad (25)$$

Утверждение 2. *Схема (5), (6) монотонна в линейном случае. Это означает, что U_i^{n+1} монотонно возрастает, если выполняется условие $\Delta_{i-1/2} U^n \geq 0$, на границах $(Z_1 - Z_0) \geq 0, (U_I - U_{I-1}) \geq 0$, источник возрастает, $\Delta_{i-1/2} B^{n+1} \geq 0$, и выполняется условие ограничения изменения потока (25). Решение U_i^{n+1} монотонно убывает, если в начальный момент выполняется условие $\Delta_{i-1/2} U^n \leq 0$, на границах $(Z_1 - Z_0) \leq 0, (U_I - U_{I-1}) \leq 0$, источник убывает, $\Delta_{i-1/2} B^{n+1} \leq 0$, и выполняется условие ограничения изменения потока (25).*

Следствие 1. *В зависимости от выполнения условий ограничения потока (24), (25) схема может быть положительной, но немонотонной и монотонной, но неположительной.*

Сформулируем утверждение о положительности и монотонности схемы.

Утверждение 3. *Если выполняются условия на поток (24), (25), то схема (5), (6) положительна и монотонна при соответствующих начальных и граничных условиях.*

Следствие 1. *В параболическом квазидиффузионном случае при $\beta = 0$ схема (5), (6) положительна и монотонна без условий на поток, но может снижать порядок аппроксимации по пространству до первого при нарушении условия $m \geq 0,5p$.*

Следствие 2. *В P_1 -приближении при $\beta = 1, D = 1/3, p = 0$ схема (5), (6) положительна и монотонна при условиях ограничения потока и имеет второй порядок аппроксимации по пространству.*

Следствие 3. *В диффузионном случае при $\beta = 0, D = 1/3$ схема (5), (6) положительна и монотонна без условий на поток и имеет второй порядок аппроксимации по пространству.*

Следствие 4. *Если все коэффициенты $a_i^0, b_i^0, -c_i^0, d_i^0, f_i^0, -a_i^1, b_i^1, c_i^1, d_i^1, f_i^1$ системы (4)–(6) положительны, то схема (5), (6) положительна и монотонна при выполнении условий (23) и соответствующих начальных и граничных условиях.*

Третья схема. Для получения ограничений на выбор параметров δ , θ , γ , ξ в третьем варианте (соотношения связи (8)) раскроем угловые скобки в прогоночных коэффициентах (9), (10). Получим ограничения, аналогичные полученным для второй схемы.

Счет задачи начинается по схеме с параметрами $\gamma = 0,5$, $\xi = \delta + \frac{D}{q_1 V_i} \geq 0$, $\delta = \frac{1}{4m}$, $\theta = \frac{h}{4} \Lambda \left(\frac{r^\sigma}{q} \right)$. При этих параметрах схема имеет второй порядок аппроксимации по пространству и первый порядок аппроксимации по времени.

Соотношения связи принимают вид

$$\begin{aligned} (DU)_{i+1/2} &= \frac{(DU)_i + (DU)_{i+1}}{2} + \delta_i \Delta_i (r^\sigma S); \\ (r^\sigma S)_{i+1/2} &= \frac{(r^\sigma S)_i + (r^\sigma S)_{i+1}}{2} + \theta_i \Delta_i (DU); \\ (DU_h)_{i+1/2} &= \frac{(DU)_i + (DU)_{i+1}}{2} + \left(\delta + \frac{D}{q_1 V_i} \right) \Delta_i (r^\sigma S). \end{aligned}$$

При выполнении условия $m \geq 0,5p$ и нарушении условия $|p| \xi \leq 0,5$ полагаем $\xi = 0$.

При нарушении одного из условий (23) и при $p \leq 0$ полагаем $\gamma = 1$. Если $p \geq 0$ полагаем $\gamma = 0$.

При выполнении условия $|p| \xi \leq 0,5$ и нарушении условия $m \geq \gamma p$ полагаем $\gamma = 0$.

При нарушении условия $a \geq 0,5\xi$ полагаем $\xi = 0$.

При нарушении одного из условий $\langle df \rangle_i \geq 0$, $\langle cf \rangle_i \geq 0$, $\langle fa \rangle_i \geq 0$ полагаем $\beta = 0$. В вакууме при $\beta = 0$ коэффициент $q = \frac{\beta}{c\tau} + \alpha$ может обратиться в нуль, поэтому при переходе на $\beta_i = 0$ и $p_i = 0$ для вакуума полагаем $f^1 = 0$ и $\theta = \frac{c\tau h}{4} \Lambda (Dr^\sigma)$.

Выбор параметров можно осуществлять, анализируя коэффициенты a , b , c , d . Коэффициенты a_i^0 , b_i^0 , $-c_i^0$, d_i^0 всегда положительны. При $c_i^1 \leq 0$ (эквивалентно условию $p\xi \geq 0,5$) полагаем $\xi = 0$; при $d_i^1 \leq 0$ ($p\xi \leq -0,5$) также $\xi = 0$; при $b_i^1 \leq 0$ ($m \leq \gamma p - 1$) полагаем $\gamma = 0$; при $-a_i^1 \leq 0$ ($m \leq \gamma p$) полагаем $\gamma = 1$.

При выполнении условий, аналогичных условиям для второй схемы, для данной схемы выполняются утверждения 1—3 относительно \bar{U} , \bar{S} , $\Delta_i \bar{U}$. В третьей схеме в формуле (24) для параметра ω отсутствует множитель $r_{i+1/2}^\sigma$.

Для совместного решения системы уравнений энергии и переноса излучения используется метод выделения диагональной матрицы ВДМ [10].

Численные расчеты

В данной работе сравниваются результаты численных расчетов, полученные по схеме (5), (6), схемам РОМБ [4] и TVD [5]. Рассматриваемые схемы исследовались на двух задачах в сферически-симметричной геометрии.

Задача 1 (первая задача Флека) имеет гладкое решение, поэтому она используется для определения численных порядков сходимости схем. Задача 2 (вторая задача Флека) характеризуется большим числом итераций из-за резких отличий оптических толщин в соседних областях, поэтому в ней анализируются профиль теплового фронта и скорость сходимости итераций. Достаточно сказать, что эту задачу практически невозможно решить с помощью классических схем и методом простой итерации. Схема второго порядка с параметрами $\delta = \theta = 0$ приводит к большим осцилляциям в решении, а схема первого порядка с параметрами $\delta = \theta = 0,5$ сильно размывает фронт. При методе простой итерации из-за медленной сходимости может наступать ложная сходимость, при которой правильное решение не достигается.

В новой схеме (5), (6) использовался следующий алгоритм выбора параметров. Счет задач начинается с параметрами $\nu = \mu = \gamma = 0,5$, $\xi = \delta + \frac{1}{q_1 V_i}$, $\delta = \frac{1}{4m}$, $\theta = \frac{h}{4} \Lambda \left(\frac{Dr^\sigma}{q} \right)$. При $c_i^1 \leq 0$ или $d_i^1 \leq 0$

полагаем $\xi = 0$, при $b_i^1 \leq 0$ полагаем $\gamma = 0$, при $a_i^1 \geq 0$ полагаем $\gamma = 1$. При нарушении одного из условий $\langle df \rangle_i \geq 0$, $\langle cf \rangle_i \geq 0$, $\langle fa \rangle_i \geq 0$ полагаем $\beta_i = 0$.

Задача 1. На левой границе ($1 \leq r \leq 5$) задано излучение планковского источника температуры $B_\nu(T = 1)$, на правой — условие *свободной поверхности*. Коэффициент поглощения равен $\kappa_g = 27(1 - e^{-\varepsilon_g/T})/\varepsilon_g^3$; $E = 0,81T$; $k = 0$; $T^0 = 0,001$. Критерий сходимости: $|T^{\nu+1} - T^\nu| \leq 10^{-4}(1 + T^{\nu+1})$. По пространству использовалась равномерная сетка с измельчением, шаг последовательно уменьшался в два раза: $\Delta r = 0,08; 0,04; 0,02; 0,01$. По времени шаг выбирался с последовательным уменьшением в 4 раза: $\tau = 2 \cdot 10^{-6}; 0,5 \cdot 10^{-6}; 1,25 \cdot 10^{-7}; 3,125 \cdot 10^{-8}$.

На рис. 1 приведены профили температуры вещества, полученные по схеме РОМБ на четырех сетках с $\Delta r = 0,08; 0,04; 0,02; 0,01$. Видно, что профили температуры вещества на сетках с $\Delta r < 0,02$ практически совпадают. На подробной сетке с $\Delta r < 0,02$ результаты, полученные по новой схеме (6) и схеме TVD, практически совпадают с результатами, полученными по схеме РОМБ.

В табл. 1 приведены порядки сходимости разных схем. Видно, что порядок сходимости линейных схем (6) и схемы РОМБ в норме L_1 близок ко второму, а порядок сходимости нелинейной схемы TVD дает большой разброс по значениям. Это объясняется нелинейностью задачи и схемы TVD.

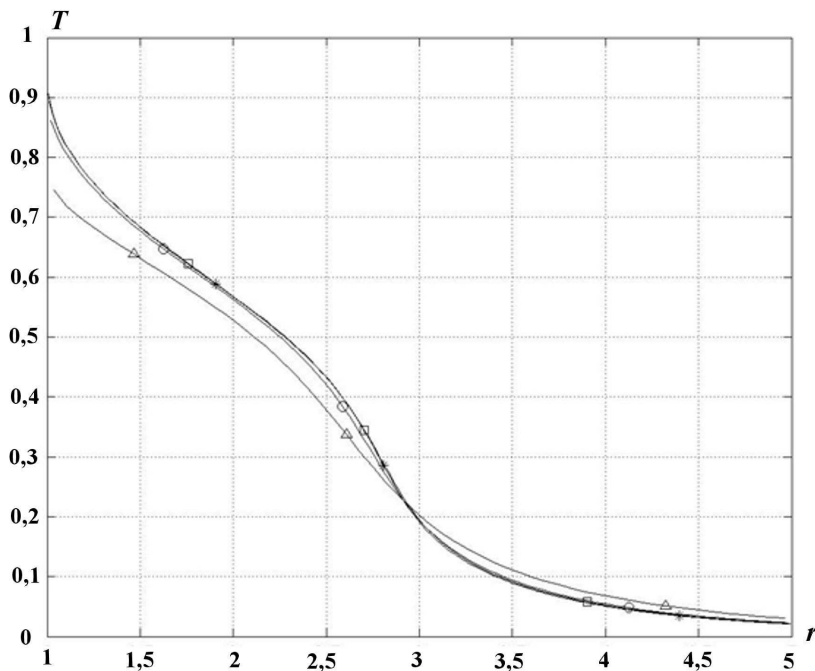


Рис. 1. Профили температуры вещества на момент времени $t = 0,01$: $\triangle - \Delta r = 0,08$; $\circ - \Delta r = 0,04$; $\square - \Delta r = 0,02$; $*$ — $\Delta r = 0,01$

Таблица 1

Порядки сходимости схем

Тип схемы	Число интервалов	
	56/112/224*	112/224/448
TVD	0,4	2,5
РОМБ	2,3	3,2
Схема (6)	1,9	1,8

* Знак "/" отделяет число интервалов сетки в трех проведенных расчетах.

Задача 2. На левой границе задано излучение планковского источника температуры $B_\nu (T = 1)$, на правой — условие свободной поверхности. В областях 1 ($1 \leq r \leq 3$) и 3 ($3,4 \leq r \leq 5$) коэффициент поглощения равен $\kappa_g = 27 (1 - e^{-\varepsilon_g/T}) / \varepsilon_g^3$, в области 2 ($3 \leq r \leq 3,4$) $\kappa_g = 10\,000 (1 - e^{-\varepsilon_g/T}) / \varepsilon_g^3$. Всюду $E = 0,81T$; $k = 0$ и $T^0 = 0,001$. Критерий сходимости: $|T^{\nu+1} - T^\nu| \leq 10^{-4} (1 + T^{\nu+1})$.

Использовались следующие сетки:

- 1) по пространству: $r_1 = 1; 1,004; 1,04; r_4 = 1,1; \dots; r_{22} = 2,9 (\Delta r = 0,1); r_{23} = 2,987; 2,999; 3; 3,001; 3,004; 3,013; r_{29} = 3,04; \dots; r_{37} = 3,36 (\Delta r = 0,04); r_{38} = 3,396; 3,4; 3,404; 3,44; r_{42} = 3,5; \dots; r_{57} = 5 (\Delta r = 0,1)$;
- 2) по группам: $g_{1\dots 16} = 0; 0,3; 0,6; 0,8; 1,2; 1,5; 1,8; 2,4; 2,7; 3; 4; 5; 7; 9; 11; 15$;
- 3) по времени: $\tau = 0,0002$.

В качестве *точного* решения использовался результат, полученный в расчетах на сходимость по кинетическому уравнению.

На рис. 2 приведены профили температуры вещества на три момента времени. Выбраны характерные моменты движения тепловой волны: $t = 0,004$ — прогрев области 1; $t = 0,028$ — вхождение и начало распространения излучения в плотном веществе; $t = 0,15$ — прогрев области 2 и выход на стационарный режим.

Из рис. 2 видно, что на первый момент времени $t = 0,004$ прогрев области 1 быстрее всего осуществляется при использовании схемы (6), по-видимому, за счет диссипативной добавки $\frac{1}{q_1 V_i} \Delta_i (r^\sigma S)$ в соотношениях связи $(U_h)_{i+1/2} = \gamma_i U_i + (1 - \gamma_i) U_{i+1} + \xi_i \Delta_i (r^\sigma S)$, $\xi = \delta + \frac{1}{q_1 V_i}$ (это может происходить также из-за перехода на диффузионный режим $\beta_i = 0$, но в данной задаче таких переходов нет). Однако прогрев области 2 на первый и последующие моменты времени происходит медленнее, чем при использовании TVD-схемы (профили температуры вещества круче). Схема РОМБ на первый и второй моменты времени дает наилучшие результаты. На последний момент времени при выходе на стационарный режим наилучшие результаты дает схема (6).

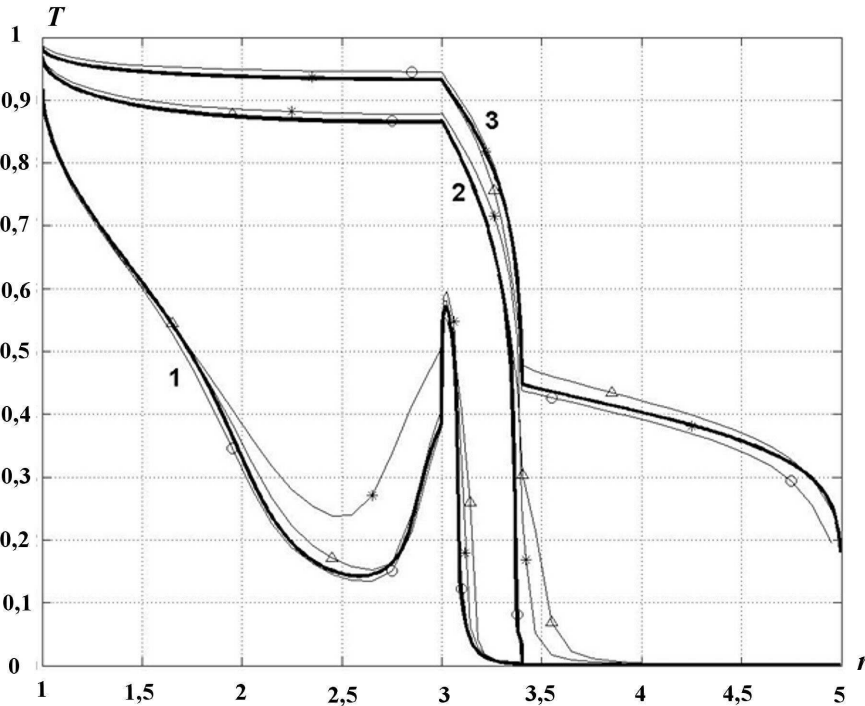


Рис. 2. Профили температуры вещества: 1 — $t = 0,004$; 2 — $t = 0,028$; 3 — $t = 0,15$; \circ — схема РОМБ; Δ — схема TVD; * — схема (6); — — точное решение

Более быстрый прогрев области 1 по схеме (6) объясняется еще тем, что переход на диффузионный режим осуществляется не при условии $U_i < 0$, а при нарушении более жестких условий $\langle df \rangle_i \geq 0$, $\langle cf \rangle_i \geq 0$, $\langle fa \rangle_i \geq 0$, которые удобны при выборе параметров схемы, но могут вносить излишнюю диффузионность в решение задачи. В данной задаче при $\beta_i = 0$ коэффициент $q = \frac{\beta}{\sigma\tau} + \alpha$ не обращается в нуль, поэтому не нужно рассматривать шесть вариантов, рассмотренных для задачи 1.

Вторая задача Флека характеризуется большим числом итераций, поэтому проанализируем сходимость итераций в разных схемах.

В табл. 2 приведены суммарное, среднее и максимальное числа итераций за первые 20 шагов. В строке с максимальным числом итераций приводится (через /) шаг, на котором этот максимум достигается. Далее число итераций быстро уменьшается, поэтому суммарное и среднее число итераций достаточно приводить за первые 20 шагов.

Из табл. 2 видно, что наилучшую скорость сходимости итераций имеет схема РОМБ. Это объясняется в первую очередь тем, что линейные и однородные схемы проще, а схема РОМБ является линейной и однородной. Схема TVD является нелинейной, поэтому у нее сходимость наихудшая. Новые схемы (5), (6) и (7), (8) являются линейными, но неоднородными с переключателями при нарушении условий положительности решения.

Анализ проведенных расчетов показывает, что все схемы дают положительное решение по T и U . Результаты, полученные по новой схеме (6), хорошо согласуются с результатами, полученными по схемам РОМБ и TVD. Но в отличие от этих схем для схемы (6) аналитически гарантируется возможность получения положительного решения.

Авторы считают, что в данной работе впервые предложена разностная схема для решения переноса теплового излучения квазидиффузионным методом с аналитическим обоснованием получения положительного решения в параболическом случае.

Таблица 2

Сходимость итераций в разных схемах при $\tau = 0,0002$, $\varepsilon_{\text{сх}} = 0,0001$

Число итераций	Тип схемы		
	TVD	РОМБ	Схема (6)
Суммарное за 20 шагов	305	190	236
Среднее	15,25	9,5	11,8
Максимальное	22/4	14/6	18/3

Список литературы

1. Гольдин В. Я. Квазидиффузионный метод решения кинетического уравнения // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1964. Т. 4, № 6. С. 1078–1087.
2. Антоненко Э. Н., Долголёва Г. В., Крупина С. Н. Программа расчета одномерных задач лазерного термоядерного синтеза (SND) // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1993. Вып. 2. С. 3–9.
3. Гаджиев А. Д., Писарев В. Н. Неявный конечно-разностный метод РОМБ для численного решения уравнений газовой динамики с теплопроводностью // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1979. Т. 19, № 5. С. 1288–1303.
4. Гаджиев А. Д., Селезнев В. Н., Романова Е. М., Шестаков А. А. Методика ТОМ4-КД для математического моделирования двумерных уравнений переноса излучения в многогрупповом квазидиффузионном приближении // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2001. Вып. 4. С. 48–59.
5. Гаджиев А. Д., Грабовенская С. А., Завьялов В. В., Шестаков А. А. Применение TVD-подхода к решению уравнения переноса теплового излучения квазидиффузионным методом // Там же. 2010. Вып. 3. С. 3–14.

6. Писарев В. Н. О параметрическом семействе схем РОМБ для нелинейного уравнения теплопроводности // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1985. Вып. 1. С. 30–42.
7. Гаджиев А. Д., Шестаков А. А. Метод РОМБ для решения многогруппового уравнения переноса излучения в P_1 -приближении // Там же. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1989. Вып. 3. С. 66–70.
8. Гаджиев А. Д., Шестаков А. А. Об устойчивости и сходимости конечно-разностной схемы РОМБ для совместного решения уравнения энергии и уравнения переноса излучения в P_1 -приближении // Там же. 1993. Вып. 1. С. 31–37.
9. Шестаков А. А. Безусловно устойчивые разностные схемы для решения задачи переноса лучистой энергии в диффузионном и P_1 -приближениях // Там же. Вып. 3. С. 47–53.
10. Гаджиев А. Д., Шестаков А. А. Метод выделения диагональной матрицы для численного решения уравнения переноса излучения в P_1 -приближении по схеме РОМБ // Там же. 2006. Вып. 1. С. 3–13.

Статья поступила в редакцию 15.10.10.

УДК 621.039.548.2.016.22:621.039.546.8

ЭФФЕКТИВНЫЕ ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ НА ПОВЕРХНОСТИ ТОНКИХ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ТЕЛ И НА ГРАНИЦЕ ПОЛЫХ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ КАНАЛОВ

В. А. Старков, И. Ф. Поливанов
(ГНЦ НИИАР, г. Димитровград)

Формулируются эффективные граничные условия на поверхности тонкого ($d \ll h$) цилиндрического стержня, расположенного в замедляющей среде. Плотность потока нейтронов в замедлителе описывается уравнением переноса в P_1 -приближении, при этом предполагается отсутствие азимутальной зависимости плотности потока нейтронов на поверхности стержня. Аналогичная задача решена для пустого цилиндрического канала с учетом зависимости плотности потока нейтронов от высоты и периметра канала. Приводятся аналитические выражения и табличные значения функций, входящих в граничные условия.

Ключевые слова: исследовательские реакторы, P_1 -приближение уравнения переноса, сечения реакций, матрица взаимодействий, функции Бесселя, плотность потока нейтронов, односторонний ток нейтронов, альbedo.

Введение

Исследование поведения различных материалов под облучением обычно проводят в исследовательских реакторах, имеющих ярко выраженную гетерогенную структуру активной зоны (АЗ). Качество этих экспериментов и интерпретация результатов в значительной степени зависят от точности определения нейтронного поля и энерговыделения в испытываемой сборке. Но эти характеристики могут сильно изменяться в процессе облучения под влиянием ряда факторов, главным из которых является изменение физических свойств сборки с выгоранием в ней топлива. Кроме того, на эти характеристики могут оказывать существенное влияние перемещение органов системы управления и защиты и изменение загрузки в близлежащих каналах реактора.

Непосредственные измерения поля нейтронов и энерговыделения в экспериментальном устройстве в процессе испытания весьма трудоемки и не всегда возможны. Все это указывает на важность и необходимость развития расчетных методов, дающих решение указанной задачи. При этом конструктивное исполнение экспериментальныхборок и неравномерность выгорания топлива в них приводят к тому, что в расчете нужно учитывать гетерогенность структуры не только АЗ реактора, но и облучательных устройств. *Гетерогенная* методика расчета такого реактора становится сложной и требует больших затрат машинного времени. Поэтому для выполнения поисковых, с целью оптимизации конструкции облучательного устройства, и инженерных расчетов целесообразно провести в методике такие упрощения, основанные на физических особенностях конструкции облучательных каналов, которые привели бы к значительному сокращению объема памяти и затрат времени на расчет при достаточной достоверности результатов.

В данной работе на основе некоторых физических допущений формулируется простое граничное условие альбедного типа на поверхности тонкого стержня, используя которое можно детально учесть гетерогенную структуру облучательного устройства.

Очень часто в составе рассчитываемой АЗ имеются пустые каналы, в которых поглощение и рассеяние нейтронов пренебрежимо мало. Для таких каналов получены эффективные граничные условия на поверхности.

Сформулированные граничные условия позволяют упростить гетерогенную методику расчета реактора при достаточной детальности описания нейтронного поля в облучательных устройствах. Значения функционалов, входящих в полученные соотношения, затабулированы и могут быть использованы в инженерных расчетах.

Постановка задачи

Часто в межблочном пространстве реактора, как правило, заполненном замедлителем, для определения плотности потока нейтронов используют P_1 -приближение уравнения переноса. Поэтому для углового распределения нейтронов, влетающих из замедлителя в блок, можно записать [1]

$$\vec{\varphi}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \left[\vec{\Phi}(\vec{r}) - 3\varepsilon \hat{D}(\vec{\Omega} \nabla \vec{\Phi}(\vec{r})) \right] \text{ при } \vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0, \quad \vec{r} \in S. \quad (1)$$

Здесь $\vec{\Omega}$ — орт направления полета нейтронов; $\vec{\varphi}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \{\varphi_1(\vec{r}, \vec{\Omega}), \dots, \varphi_m(\vec{r}, \vec{\Omega})\}^T$ — m -мерный вектор-столбец, i -я компонента которого имеет смысл плотности потока нейтронов i -й энергетической группы, двигающихся с разбросом направлений внутри единичного телесного угла вокруг направления $\vec{\Omega}$, в точке \vec{r} ; $\vec{\Phi}(\vec{r}) = \{\Phi_1(\vec{r}), \dots, \Phi_m(\vec{r})\}^T$ — m -мерный вектор-столбец изотропной плотности потока нейтронов в замедлителе; \hat{D} — матрица диффузии в замедлителе; \vec{n} — внешняя нормаль к поверхности блока S ; ε — поправка к P_1 -приближению, учитывающая кривизну блока.

Вычислим число нейтронов, влетающих через единицу поверхности блока в единицу времени по всем направлениям (рис. 1):

$$\vec{j}_-(\vec{r}) = \int_{\Omega} d\Omega \vec{\varphi}(\vec{r}, \vec{\Omega}) |\vec{\Omega} \cdot \vec{n}| \text{ для } \vec{n} \cdot \vec{\Omega} < 0, \quad \vec{r} \in S, \quad (2)$$

где

$$\vec{\Omega} = \cos \theta \vec{i} + \sin \theta \sin \psi \vec{j} + \sin \theta \cos \psi \vec{k}. \quad (3)$$

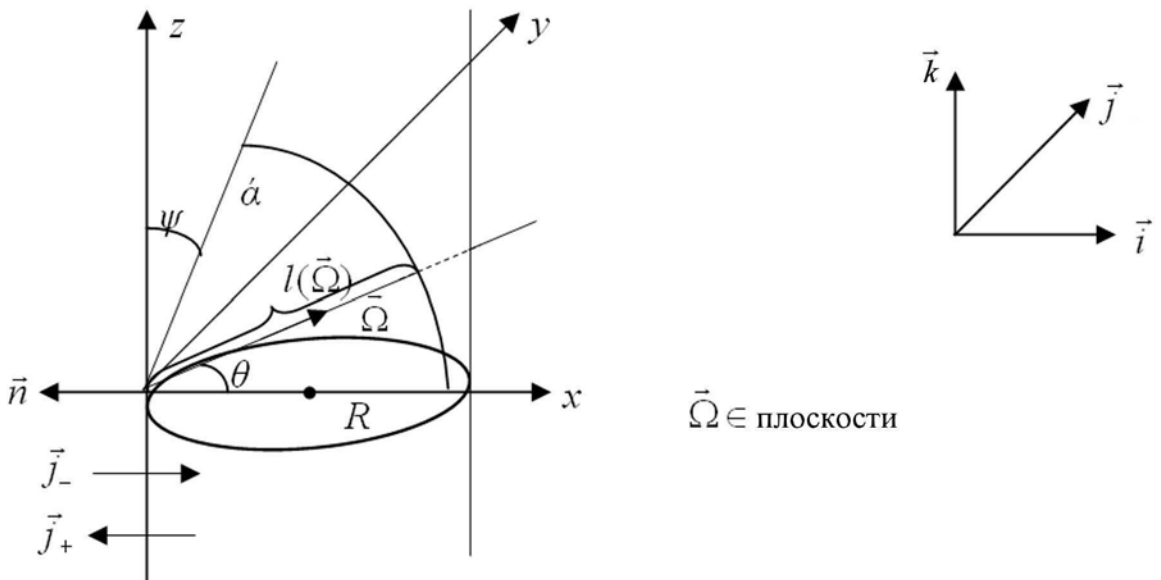


Рис. 1. Схема движения нейтрона в блоке

Выполним интегрирование по единичной полусфере с центром в точке влета нейтрона. Тогда с использованием (1) и (3) получим

$$\vec{j}_-(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi/2} d\theta \left[\vec{\Phi}(\vec{r}) - 3\varepsilon \hat{D} \left(\vec{\Omega} \nabla \vec{\Phi}(\vec{r}) \right) \right] \sin \theta \cos \theta, \quad \vec{r} \in S.$$

Используя очевидные соотношения

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \nabla \vec{\Phi}(\vec{r}) &= \frac{\partial \vec{\Phi}(\vec{r})}{\partial x} \cos \theta + \frac{\partial \vec{\Phi}(\vec{r})}{\partial y} \sin \theta \sin \psi + \frac{\partial \vec{\Phi}(\vec{r})}{\partial z} \sin \theta \cos \psi, \quad \vec{r} \in S; \\ \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi/2} d\theta \sin \theta \cos \theta &= \pi; \quad \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi/2} d\theta \sin \theta \cos^2 \theta = \frac{2}{3}\pi; \\ \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi/2} d\theta \sin^2 \theta \sin \psi \cos \theta &= \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi/2} d\theta \sin^2 \theta \cos \theta \cos \psi = 0, \end{aligned} \quad (4)$$

имеем окончательно

$$\vec{j}_-(\vec{r}) = \frac{1}{4} \vec{\Phi}(\vec{r}) + \frac{\varepsilon \hat{D}}{2} \frac{\partial \vec{\Phi}(\vec{r})}{\partial \rho} \Big|_{\rho=R}, \quad \vec{r} \in S. \quad (5)$$

Аналогичное соотношение можно записать для плотности потока вылетающих из блока нейтронов:

$$\vec{j}_+(\vec{r}) = \frac{1}{4} \vec{\Phi}(\vec{r}) - \frac{\varepsilon \hat{D}}{2} \frac{\partial \vec{\Phi}(\vec{r})}{\partial \rho} \Big|_{\rho=R}, \quad \vec{r} \in S. \quad (6)$$

Задача заключается в том, чтобы установить связь между (5) и (6), не прибегая к вычислению плотности потока нейтронов внутри блока.

Постановка граничных условий на тонком цилиндрическом стержне

Предположим, что:

- 1) плотность нейтронов на поверхности блока не зависит от азимутального угла:

$$\vec{\Phi}(\vec{r}) \Big|_{\vec{r} \in S} = \vec{\Phi}(R);$$

- 2) влетевшие в блок нейтроны претерпевают не более одного взаимодействия, после которого распределение скоростей изотропно.

Вычислим количество нейтронов, влетевших в блок в единицу времени через единичную площадку поверхности, которые должны провзаимодействовать в блоке с уходом из своей энергетической группы:

$$\vec{j}_1(\vec{r}) = \int_{\Omega} \hat{P}(\vec{\Omega}) \vec{\varphi}(\vec{r}, \vec{\Omega}) \left| \vec{n} \cdot \vec{\Omega} \right| d\Omega, \quad \vec{n} \cdot \vec{\Omega} < 0, \quad \vec{r} \in S. \quad (7)$$

Здесь

$$\hat{P}(\vec{\Omega}) = \|\delta_{ij} P_i\|_m = \left\| \delta_{ij} \left(1 - e^{-\Sigma_{ef}^{(i)} l(\vec{\Omega})} \right) \right\|_m$$

— диагональная матрица вероятностей взаимодействий нейтронов на пути $l(\vec{\Omega})$ пролета их внутри блока с ядрами материала блока, приводящих к уходу из группы; $\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{при } i = j; \\ 0 & \text{при } i \neq j; \end{cases} \Sigma_{cfd}^{(i)}$ — полное сечение увода из i -й группы. Нетрудно показать [2], что (см. рис. 1)

$$l(\vec{\Omega}) = l(\psi, \theta) = \frac{2R \cos \theta}{1 - \sin^2 \theta \cos^2 \psi}.$$

Интегрируя (7) по поверхности единичной полусферы, с учетом (1), (3), (4) и предположения 1 получаем

$$\vec{j}_1(\vec{r}) = \vec{j}_1(R) = \hat{\chi}_0(\lambda) \frac{\vec{\Phi}(R)}{4} + \hat{y}_0(\lambda) \frac{\varepsilon \hat{D}}{2} \frac{d\vec{\Phi}(\rho)}{d\rho} \Big|_{\rho=R}. \quad (8)$$

Здесь $\lambda = \{\lambda_i\}_m$, $\lambda_i = \Sigma_{cfd}^i R$; $\hat{\chi}_0(\lambda)$ и $\hat{y}_0(\lambda)$ — диагональные матрицы вероятностей взаимодействий, выводящих нейтрон из своей группы соответственно при изотропном распределении скоростей падающих на блок нейтронов и при наличии градиента плотности потока на границе блока. Диагональные элементы этих матриц определяются формулами

$$\chi_0(\lambda_i) = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi/2} d\theta \left(1 - e^{-\lambda_i \frac{\cos \theta}{1 - \sin^2 \theta \cos^2 \psi}} \right) \cos \theta \sin \theta; \quad (9)$$

$$y_0(\lambda_i) = \frac{3}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^{\pi/2} d\theta \left(1 - e^{-2\lambda_i \frac{\cos \theta}{1 - \sin^2 \theta \cos^2 \psi}} \right) \cos^2 \theta \sin \theta. \quad (10)$$

Проинтегрировав (9), следуя работе [2], а также выражение (10), получим следующие результаты:

$$\hat{\chi}_0(\lambda) = \frac{4}{3} \hat{\lambda}^2 \left\{ 2 \left[\hat{\lambda} \left(\hat{K}_1(\lambda) \hat{I}_1(\lambda) + \hat{K}_0(\lambda) \hat{I}_0(\lambda) \right) - \hat{E} \right] + \hat{\lambda}^{-1} \hat{K}_1(\lambda) \hat{I}_1(\lambda) - \hat{K}_0(\lambda) \hat{I}_1(\lambda) + \hat{K}_1(\lambda) \hat{I}_0(\lambda) \right\}; \quad (11)$$

$$\hat{y}_0(\lambda) = \hat{E} + \frac{1}{10} \left[18 \hat{K}_1(\lambda) \hat{I}_1(\lambda) \left(\hat{E} + \hat{\chi}^2 \right) + 10 \hat{\lambda}^2 \left(\hat{K}_0(\lambda) \hat{I}_0(\lambda) - \hat{K}_1(\lambda) \hat{I}_1(\lambda) \right) - 2 \hat{\lambda}^2 \hat{K}_0(\lambda) \hat{I}_0(\lambda) + 4 \hat{\lambda} \left(\hat{K}_0(\lambda) \hat{I}_1(\lambda) - \hat{K}_1(\lambda) \hat{I}_0(\lambda) \right) - \hat{\chi}_0(\lambda) \left(\frac{15}{2} \hat{\lambda}^{-1} + 8 \hat{\lambda} \right) \right]. \quad (12)$$

Здесь $\hat{\lambda} = \|\delta_{ij} \lambda_i\|_m$; $\hat{K}_p(\lambda) = \|\delta_{ij} K_p(\lambda_i)\|_m$; $\hat{I}_p(\lambda) = \|\delta_{ij} I_p(\lambda_i)\|_m$; $K_p(\lambda_i)$, $I_p(\lambda_i)$ ($p = 0, 1$) — функции Бесселя мнимого аргумента.

Формулы (11), (12) являются точными, числовые значения диагональных элементов ($\chi_0(\lambda)$ и $y_0(\lambda)$) этих матриц при непрерывном изменении параметра λ приведены в табл. 1. Некоторые значения функции $\chi_0(\lambda)$ можно найти также в книге [3]. Там же дается методика учета неоднократного рассеяния нейтронов в блоке при изотропном падающем на блок потоке нейтронов.

Могут оказаться полезными асимптотические соотношения:

$$\text{— при } \lambda \gg 1 \quad \chi_0(\lambda) \cong 1 - \frac{1}{4} \lambda^{-2}; \quad y_0(\lambda) \cong 1 + \frac{1}{20} \lambda^{-1} (1 - 3\lambda^{-2});$$

$$\text{— при } \lambda \ll 1 \quad \chi_0(\lambda) \cong 2\lambda - \frac{8}{3} \lambda^2 + \frac{7}{4} \lambda^3 - \lambda^3 \ln \frac{\lambda}{2} + 0(\lambda^3); \quad y_0(\lambda) \cong 2\lambda - \frac{5}{2} \lambda^2 + \frac{\lambda^2}{10} \ln \frac{\lambda}{2} + 0(\lambda^2).$$

Таблица 1

Значения функций $\chi_0(\lambda)$ и $y_0(\lambda)$

λ	$\chi_0(\lambda)$	$y_0(\lambda)$
0,0	0	0
0,1	0,177005	0,179390
0,2	0,3172136	0,323868
0,3	0,429894	0,4409226
0,4	0,5212926	0,5361976
0,5	0,595953	0,6140442
0,6	0,6572976	0,6778656
0,7	0,7073588	0,7303473
0,8	0,7499854	0,7736316
0,9	0,785000	0,809421
1,0	0,8138955	0,8396088
1,1	0,8388849	0,8637527
1,2	0,85961400	0,8842975
1,3	0,8771889	0,9014553
1,4	0,89212569	0,9156984
1,5	0,9047177	0,92787236
1,6	0,91556106	0,9380114
1,7	0,92486444	0,9465608
1,8	0,9328747	0,9537872
1,9	0,93979506	0,9599116
2,0	0,9457960	0,96511254

Количество нейтронов, влетевших в единицу времени через единичную площадку поверхности блока и не претерпевших взаимодействия в блоке или взаимодействовавших без ухода из группы, определяется выражением

$$\vec{j}_2(R) = \int_{\Omega} \left(\hat{E} - \hat{P}(\vec{\Omega}) \right) \vec{\varphi}(R, \vec{\Omega}) \left| \vec{n} \cdot \vec{\Omega} \right| d\Omega, \quad \vec{n} \cdot \vec{\Omega} < 0,$$

или с учетом (2) и (7)

$$\vec{j}_2(R) = \vec{j}_-(R) - \vec{j}_1(R). \quad (13)$$

Количество нейтронов, родившихся в блоке в единицу времени в результате захвата с делением и согласно предположению 2 изотропно вылетающих из блока через единицу поверхности, вычисляется по формуле

$$\vec{j}_+^f(R) = \frac{1}{k_{\Phi}} \vec{\chi} \nu_f \vec{\Sigma}_f \hat{\Sigma}_{cfd}^{-1} \vec{j}_1(R), \quad (14)$$

$$\hat{\Sigma}_{cfd}^{-1} = \left\| \delta_{ij} \Sigma_{cfd}^{(i)-1} \right\|_m.$$

Здесь $\vec{\chi}$ — вектор-столбец, i -я компонента которого есть доля нейтронов i -й группы в спектре деления; $\nu_f \vec{\Sigma}_f$ — вектор-строка групповых сечений деления.

Количество нейтронов, вылетающих из блока через единицу поверхности после рассеяния на ядрах блока с переходом в соседнюю группу, выражается соотношением

$$\vec{j}_+^s = \sum_{j>i}^{i \rightarrow j} \hat{\Sigma}_{cfd}^{-1} \vec{j}_1(R). \quad (15)$$

Здесь

$$\sum_{j>i}^{i \rightarrow j} = \left\| \begin{array}{cccccc} 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \Sigma_0^{1 \rightarrow 2} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \Sigma_0^{2 \rightarrow 3} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \cdot & 0 & \Sigma_0^{m-1 \rightarrow m} & 0 \end{array} \right\|_m.$$

Очевидно, плотность потока нейтронов, вылетающих из блока, будет состоять из трех компонентов:

$$\vec{j}_+(R) = \vec{j}_+^f(R) + \vec{j}_+^s(R) + \vec{j}_2(R). \quad (16)$$

После подстановки (13)—(15), (8), (5) и (6) в уравнение (16) получим

$$\hat{\omega} \hat{\Sigma}_{cfd}^{-1} \hat{\chi}_0(\lambda) \vec{\Phi}(R) + 2\varepsilon \left(\hat{\omega} \hat{\Sigma}_{cfd}^{-1} \hat{y}_0(\lambda) + 2\hat{E} \right) \hat{D} \frac{d\vec{\Phi}(\rho)}{d\rho} \Big|_{\rho=R} = 0. \quad (17)$$

Здесь

$$\widehat{\omega} = \frac{1}{k_{\text{эф}}} \overrightarrow{\chi} \nu_f \overrightarrow{\Sigma}_f + \sum_{j>i}^{i \rightarrow j} \widehat{\Sigma}_{cf} - \widehat{\Sigma}_{cfd}.$$

Если учесть, что $\widehat{D} \frac{d\vec{\Phi}(\rho)}{d\rho} \Big|_{\rho=R} = -\vec{J}(R)$, выражение (17) можно записать в виде

$$\widehat{\omega} \widehat{\Sigma}_{cfd}^{-1} \widehat{\chi}_0(\lambda) \vec{\Phi}(R) + 2\varepsilon \left(\widehat{\omega} \widehat{\Sigma}_{cfd}^{-1} \widehat{y}_0(\lambda) + 2\widehat{E} \right) \vec{J}(R) = 0, \quad (18)$$

или

$$\vec{\Phi}(R) - 2\varepsilon \left(\widehat{\chi}_0^{-1}(\lambda) \widehat{y}_0(\lambda) + 2\widehat{\chi}_0^{-1}(\lambda) \widehat{\Sigma}_{cfd} \widehat{\omega}^{-1} \right) \vec{J}(R) = 0. \quad (19)$$

Выражения (17), (18), или (17), (19), являются искомыми граничными условиями.

Постановка граничных условий на поверхности пустого цилиндрического канала

Плотность потока нейтронов, вылетающих из канала через единичную площадку вокруг точки A (рис. 2), можно записать в виде

$$\vec{j}(\vec{r}) = \int_s \vec{\varphi}(\vec{r}', \vec{\Omega}') \frac{|\vec{e}_{R'} \cdot \vec{\Omega}'| |\vec{e}_R \cdot \vec{\Omega}|}{l^2(\vec{r}', \vec{r})} ds'. \quad (20)$$

Здесь

$$l(\vec{r}', \vec{r}) = \sqrt{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2} = \sqrt{4R^2 \sin^2 \frac{\varphi' - \varphi}{2} + (z-z')^2} \quad (21)$$

— длина пути пролета нейтронов в канале; $\vec{e}_{R'}$, $\vec{e}_{\varphi'}$, $\vec{e}_{z'}$ — орты аффинных координат в точке влета нейтрона в блок; \vec{e}_R , \vec{e}_{φ} , \vec{e}_z — орты аффинных координат в точке вылета нейтрона из блока; $\vec{\Omega}' = -\frac{2R}{l(\vec{r}', \vec{r})} \sin^2 \frac{\varphi' - \varphi}{2} \vec{e}_{R'} - \frac{2R}{l(\vec{r}', \vec{r})} \sin \frac{\varphi' - \varphi}{2} \cos \frac{\varphi' - \varphi}{2} \vec{e}_{\varphi'} - \frac{z' - z}{l(\vec{r}', \vec{r})} \vec{e}_{z'}$ — единичный вектор направления полета нейтрона в точке влета в блок; $\vec{\Omega} = -\frac{2R}{l(\vec{r}', \vec{r})} \sin^2 \frac{\varphi' - \varphi}{2} \vec{e}_R - \frac{2R}{l(\vec{r}', \vec{r})} \sin \frac{\varphi' - \varphi}{2} \times \cos \frac{\varphi' - \varphi}{2} \vec{e}_{\varphi} - \frac{z' - z}{l(\vec{r}', \vec{r})} \vec{e}_z$ — единичный вектор направления полета нейтрона в точке вылета; $ds' = R d\varphi' dz'$.

Представим плотность потока нейтронов $\vec{\Phi}(\vec{r})$ в выражении (1) в виде

$$\begin{aligned} \vec{\Phi}(\vec{r}') &= \vec{\Phi}(R, \varphi', z') = \\ &= \cos \chi z' \sum_{n=0}^{\infty} \vec{\Phi}_n(R) \cos n(\varphi' + \alpha). \end{aligned} \quad (22)$$

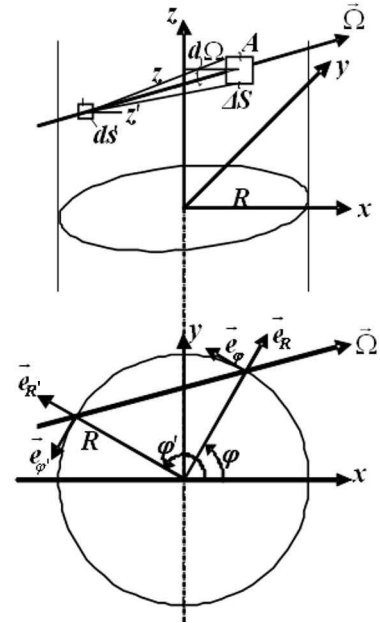


Рис. 2. Схема движения нейтрона в пустом канале

Подставляя (22) в (1), с учетом (21) получаем

$$\begin{aligned}
 \vec{\varphi}(\vec{r}', \vec{\Omega}') = & \frac{1}{4\pi} \left\{ \cos \chi z' \sum_{n=0}^{\infty} \vec{\Phi}_n(R) \cos n(\varphi' + \alpha) - \right. \\
 & - 3\varepsilon \hat{D} \sum_{n=0}^{\infty} \left[-\vec{\Phi}'_n(R) \cos n(\varphi' + \alpha) \cos \chi z' \frac{2R}{\sqrt{4R^2 \sin^2 \frac{\varphi^*}{2} + (z' - z)^2}} \sin^2 \frac{\varphi^*}{2} + \right. \\
 & + n \vec{\Phi}_n(R) \sin n(\varphi' + \alpha) \cos \chi z' \frac{2 \sin \frac{\varphi^*}{2} \cos \frac{\varphi^*}{2}}{\sqrt{4R^2 \sin^2 \frac{\varphi^*}{2} + (z' - z)^2}} + \\
 & \left. \left. + \vec{\Phi}_n(R) \chi \sin \chi z' \cos n(\varphi' + \alpha) \frac{z' - z}{\sqrt{4R^2 \sin^2 \frac{\varphi^*}{2} + (z' - z)^2}} \right] \right\}. \quad (23)
 \end{aligned}$$

Здесь использовались следующие выражения:

$$\begin{aligned}
 \varphi^* = \varphi' - \varphi; \quad \vec{\Phi}'_n(R) = & \left. \frac{d\vec{\Phi}_n(\rho)}{d\rho} \right|_{\rho=R}; \\
 \nabla \vec{\Phi}(\vec{r}') = & \frac{\partial \vec{\Phi}(\vec{r}')}{\partial R} \vec{e}_{R'} + \frac{\partial \vec{\Phi}(\vec{r}')}{\partial \varphi'} \frac{1}{R} \vec{e}_{\varphi'} + \frac{\partial \vec{\Phi}(\vec{r}')}{\partial z'} \vec{e}_{z'} = \sum_{n=0}^{\infty} \left[\vec{\Phi}'_n(R) \cos n(\varphi' + \alpha) \cos \chi z' \vec{e}_{R'} - \right. \\
 & \left. - \frac{n}{R} \vec{\Phi}_n(R) \sin n(\varphi' + \alpha) \cos \chi z' \vec{e}_{\varphi'} - \vec{\Phi}_n(R) \chi \sin \chi z' \cos n(\varphi' + \alpha) \vec{e}_{z'} \right].
 \end{aligned}$$

Подставив соотношение (23) в (20), с учетом (21) получаем

$$\begin{aligned}
 \vec{j}(\vec{r}) = & \frac{R}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi^* \int_{-h}^{+h} dz' \left\{ \left\{ \cos \chi z' \sum_{n=0}^{\infty} \vec{\Phi}_n(R) \cos n(\varphi' + \alpha) + \right. \right. \\
 & + 3\varepsilon \hat{D} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\vec{\Phi}'_n(R) \cos \chi z' \cos n(\varphi' + \alpha) \frac{2R \sin^2 \frac{\varphi^*}{2}}{\sqrt{4R^2 \sin^2 \frac{\varphi'}{2} + (z' - z)^2}} - \right. \\
 & - n \vec{\Phi}_n(R) \sin n(\varphi' + \alpha) \cos \chi z' \frac{2 \sin \frac{\varphi^*}{2} \cos \frac{\varphi^*}{2}}{\sqrt{4R^2 \sin^2 \frac{\varphi^*}{2} + (z' - z)^2}} - \\
 & \left. \left. - \vec{\Phi}_n(R) \chi \sin \chi z' \cos n(\varphi' + \alpha) \frac{z' - z}{\sqrt{4R^2 \sin^2 \frac{\varphi^*}{2} + (z' - z)^2}} \right] \right\} \left. \frac{4R^2 \sin^4 \frac{\varphi}{2}}{\left[4R^2 \sin^2 \frac{\varphi^*}{2} + (z' - z)^2 \right]^2} \right\}. \quad (24)
 \end{aligned}$$

Применив следующие легко проверяемые соотношения

$$\int_0^{2\pi} d\varphi^* f\left(\sin^2 \frac{\varphi^*}{2}\right) \cos n\varphi^* = 2 \int_0^{2\pi} f\left(\sin^2 \frac{\varphi^*}{2}\right) \cos n\varphi^* d\varphi^*;$$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi^* f\left(\sin^2 \frac{\varphi^*}{2}\right) \sin \varphi^* \sin n\varphi^* = 2 \int_0^{\pi} f\left(\sin^2 \frac{\varphi^*}{2}\right) \cos n\varphi^* d\varphi^*;$$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi^* f\left(\sin^2 \frac{\varphi^*}{2}\right) \sin n\varphi^* = \int_0^{2\pi} d\varphi^* f\left(\sin^2 \frac{\varphi^*}{2}\right) \sin \varphi^* \cos n\varphi^* = 0$$

и известные формулы

$$\begin{aligned} \cos n(\varphi' + \alpha) &= \cos n\varphi^* \cos n(\varphi + \alpha) - \sin n\varphi^* \sin n(\varphi + \alpha); \\ \sin n(\varphi' + \alpha) &= \sin n\varphi^* \cos n(\varphi + \alpha) + \sin n\varphi^* \sin n(\varphi + \alpha), \end{aligned}$$

выражение (24) перепишем в виде

$$\begin{aligned} \vec{j}(\vec{r}) &= \frac{R}{4\pi} \int_0^{\pi} d\varphi^* \int_{-h}^{+h} dz' \frac{4R^2 \sin^4 \frac{\varphi^*}{2}}{\left[(z - z')^2 + 4R^2 \sin^2 \frac{\varphi^*}{2}\right]^2} \left\{ \cos \chi z' \sum_{n=0}^{\infty} \vec{\Phi}_n(R) \cos n\varphi^* \cos n(\varphi + \alpha) + \right. \\ &+ 3\varepsilon \hat{D} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\vec{\Phi}'_n(R) \frac{2R \sin^2 \frac{\varphi^*}{2}}{\sqrt{(z' - z)^2 + 4R^2 \sin^2 \frac{\varphi^*}{2}}} \cos \chi z' \cos n\varphi^* - \right. \\ &- n \vec{\Phi}_n(R) \frac{2 \sin \frac{\varphi^*}{2} \cos \frac{\varphi^*}{2}}{\sqrt{(z' - z)^2 + 4R^2 \sin^2 \frac{\varphi^*}{2}}} \cos \chi z' \sin n\varphi^* - \\ &\left. \left. - \vec{\Phi}_n(R) \chi \sin \chi z' \frac{z' - z}{\sqrt{4R^2 \sin^2 \frac{\varphi^*}{2} + (z' - z)^2}} \right] \cos n(\varphi + \alpha) \right\}. \end{aligned} \quad (25)$$

Будем вычислять функцию $\vec{j}(\vec{r})$ в точках, достаточно удаленных от концов канала. Тогда, используя тот факт, что длина канала велика по сравнению с его диаметром, заменим в (25) пределы интегрирования во внутреннем интеграле на бесконечные. Преобразуем (25), сделав замену переменных $z' - z = 2tR \sin \frac{\varphi^*}{2}$ и используя тождества

$$\begin{aligned} \cos \chi z' &= \cos \chi(z' - z) \cos \chi z - \sin \chi(z' - z) \sin \chi z; \\ \sin \chi z' &= \sin \chi(z' - z) \cos \chi z + \cos \chi(z' - z) \sin \chi z, \end{aligned}$$

к следующему виду:

$$\begin{aligned} \vec{j}(\vec{r}) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} d\varphi^* \int_0^{\infty} dt \sin \frac{\varphi^*}{2} \frac{1}{(t^2 + 1)^2} \left\{ \cos \left(2\pi \sin \frac{\varphi^*}{2} t \right) \cos \chi z \sum_{n=0}^{\infty} \vec{\Phi}_n(R) \cos n(\varphi + \alpha) \cos n\varphi^* + \right. \\ &+ 3\varepsilon \hat{D} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\vec{\Phi}'_n(R) \frac{\sin \frac{\varphi^*}{2} \cos \left(2\lambda \sin \frac{\varphi^*}{2} t \right)}{\sqrt{t^2 + 1}} \cos \chi z \cos n(\varphi + \alpha) - \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & - n \vec{\Phi}_n(R) \frac{\cos \frac{\varphi^*}{2} \cos \left(2\lambda \sin \frac{\varphi^*}{2} t \right) \sin n\varphi^*}{R\sqrt{t^2+1}} \cos \chi z \cos n(\varphi + \alpha) - \\
 & - \vec{\Phi}_n(R) \frac{\lambda}{R} \frac{t}{\sqrt{t^2+1}} \sin \left(2\lambda \sin \frac{\varphi^*}{2} t \right) \cos n\varphi^* \cos \chi z \cos n(\varphi + \alpha) \Big] \Big\}. \quad (26)
 \end{aligned}$$

Здесь учтено, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(t)}{(t^2+1)^2} dt = \begin{cases} 2 \int_0^{\infty} \frac{f(t)}{(t^2+1)^2} dt & \text{при } f(t) = f(-t); \\ 0 & \text{при } f(t) = -f(-t); \end{cases}$$

$\lambda = \chi R$.

Известно, что [4, 5]

$$\begin{aligned}
 \int_0^{\infty} \frac{\cos \left(\left(2\lambda \sin \frac{\varphi^*}{2} \right) t \right)}{(t^2+1)^2} dt &= \frac{\pi}{4} \left(1 + 2\lambda \sin \frac{\varphi^*}{2} \right) e^{-2\lambda \sin \frac{\varphi^*}{2}}; \\
 \int_0^{\infty} \frac{\cos \left(\left(2\lambda \sin \frac{\varphi^*}{2} \right) t \right)}{(t^2+1)^{2+\frac{1}{2}}} dt &= \frac{4}{3} \lambda^2 \sin^2 \frac{\varphi^*}{2} K_2 \left(2\lambda \sin \frac{\varphi^*}{2} \right); \\
 \int_0^{\infty} \frac{t \sin \left(2\lambda \left(\sin \frac{\varphi^*}{2} \right) t \right)}{(t^2+1)^{2+1/2}} dt &= \frac{4}{3} \lambda^2 \sin^2 \frac{\varphi^*}{2} K_1 \left(2\lambda \sin \frac{\varphi^*}{2} \right).
 \end{aligned} \quad (27)$$

С учетом выражений (27) соотношение (26) преобразуется к виду

$$\begin{aligned}
 \vec{j}(\vec{r}) &= \cos \chi z \sum_{n=0}^{\infty} \cos n(\varphi + \alpha) \left[\frac{1}{4} \vec{\Phi}_n(R) y_n^{(1)}(\lambda) + \right. \\
 & \left. + \frac{\varepsilon \hat{D}}{2} \left(\vec{\Phi}'_n(R) y_n^{(2)}(\lambda) - \frac{1}{R} \vec{\Phi}_n(R) y_n^{(3)}(\lambda) - \frac{1}{R} \vec{\Phi}_n(R) y_n^{(4)}(\lambda) \right) \right], \quad (28)
 \end{aligned}$$

где

$$y_n^{(1)}(\lambda) = \frac{1}{2} \int_0^{\pi} d\varphi^* \sin \frac{\varphi^*}{2} \left(1 + 2\lambda \sin \frac{\varphi^*}{2} \right) e^{-2\lambda \sin \frac{\varphi^*}{2}} \cos n\varphi^*; \quad (29)$$

$$y_n^{(2)}(\lambda) = \frac{4\lambda^2}{\pi} \int_0^{\pi} d\varphi^* \sin^4 \frac{\varphi^*}{2} \cos n\varphi^* K_2 \left(2\lambda \sin \frac{\varphi^*}{2} \right); \quad (30)$$

$$y_n^{(3)}(\lambda) = n \frac{4\lambda^2}{\pi} \int_0^{\pi} d\varphi^* \sin^3 \frac{\varphi^*}{2} \cos \frac{\varphi^*}{2} \sin n\varphi^* K_2 \left(2\lambda \sin \frac{\varphi^*}{2} \right); \quad (31)$$

$$y_n^{(4)}(\lambda) = \frac{4\lambda^3}{\pi} \int_0^{\pi} d\varphi^* \sin^3 \frac{\varphi^*}{2} \cos n\varphi^* K_1 \left(2\lambda \sin \frac{\varphi^*}{2} \right). \quad (32)$$

Вычисление интегралов (29)–(32) дает результаты, окончательные выражения для которых имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}
 y_n^{(1)}(\lambda) &= \frac{1}{1-4n^2} \left(I_0(2\lambda) - 2\lambda I_1(2\lambda) \right) + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k R_{nk} \left(I_{2k}(2\lambda) - \lambda I_{2k-1}(2\lambda) - \lambda I_{2k+1}(2\lambda) \right) + \\
 &\quad + (-1)^n \frac{\pi}{2} \left[2\lambda I_{2n}(2\lambda) + (n-1) I_{2n-1}(2\lambda) - (n+1) \lambda I_{2n+1}(2\lambda) \right], \\
 R_{nk} &= 2 \frac{1-4n^2-4k^2}{(4k^2-4n^2+1)^2-16k^2}; \\
 y_n^{(2)}(\lambda) &= \frac{\lambda^2}{4} \left(I_{n-2}(\lambda) K_{n-2}(\lambda) + K_{n+2}(\lambda) I_{n+2}(\lambda) - 4I_{n-1}(\lambda) K_{n-1}(\lambda) - \right. \\
 &\quad \left. - 4I_{n+1}(\lambda) K_{n+1}(\lambda) + 6K_n(\lambda) I_n(\lambda) \right) - \\
 &\quad - \frac{\lambda}{2} \left(K_{n+2}(\lambda) I_{n+1}(\lambda) + I_{n-1}(\lambda) K_{n-2}(\lambda) + 3K_n(\lambda) I_{n-1}(\lambda) + 3K_n(\lambda) I_{n+1}(\lambda) \right) + 2; \\
 y_n^{(3)} &= n \left[\frac{\lambda^2}{4} \left(2I_{n-1}(\lambda) K_{n-1}(\lambda) - 2K_{n+1}(\lambda) I_{n+1}(\lambda) - I_{n-2}(\lambda) K_{n-2}(\lambda) + K_{n+2}(\lambda) I_{n+2}(\lambda) \right) + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{\lambda}{2} \left(I_{n-1}(\lambda) K_{n-1}(\lambda) + I_{n-1}(\lambda) K_n(\lambda) - I_{n+1}(\lambda) K_n(\lambda) - I_{n+1}(\lambda) K_{n+1}(\lambda) \right) \right]; \\
 y_n^{(4)} &= \frac{\lambda^3}{2} \left(2I_n(\lambda) K_{n-1}(\lambda) + 2I_n(\lambda) K_{n+1}(\lambda) - I_{n-1}(\lambda) K_{n-2}(\lambda) - \right. \\
 &\quad \left. - I_{n-1}(\lambda) K_n(\lambda) - I_{n+1}(\lambda) K_n(\lambda) - I_{n+1}(\lambda) K_{n+2}(\lambda) \right).
 \end{aligned}$$

Граничные условия на поверхности полого цилиндра следуют из соотношения

$$\vec{j}(\vec{r}) = \vec{j}_+(\vec{r}), \quad \vec{r} \in S. \quad (33)$$

Подставляя в (33) выражения (28) и (6), получаем

$$\frac{\vec{\Phi}_n(R)}{4} - \frac{\varepsilon \hat{D}}{2} \vec{\Phi}'_n(R) = \frac{1}{4} \vec{\Phi}_n(R) y_n^{(1)}(\lambda) + \frac{\varepsilon \hat{D}}{2} \left(\vec{\Phi}'_n(R) y_n^{(2)}(\lambda) - \frac{\vec{\Phi}_n(R)}{R} \tilde{y}_n(\lambda) \right), \quad (34)$$

где $\tilde{y}_n(\lambda) = y_n^{(3)}(\lambda) + y_n^{(4)}(\lambda)$.

После несложных преобразований выражения (34) получим вид граничных условий:

$$\left(\beta_n \hat{E} + \frac{1}{R} \alpha_n \hat{D} \right) \vec{\Phi}_n(R) + 2\vec{J}_n(R) = 0,$$

где $\beta_n = \frac{1-y_n^{(1)}(\lambda)}{1+y_n^{(2)}(\lambda)}$; $\alpha_n = \frac{2\tilde{y}_n(\lambda)}{1+y_n^{(2)}(\lambda)}$; $\vec{J}_n(R) = -\hat{D} \vec{\Phi}'_n(R)$.

Значения функций $\beta_n(\lambda)$ и $\alpha_n(\lambda)$ приведены в табл. 2, 3.

Заключение

В статье представлены результаты методических разработок граничных условий альбедного типа для цилиндрического блока с размножением, рассеянием и радиационным захватом нейтронов и для пустого канала. В совокупности с известными граничными условиями аналогичного типа на блоктированных поглотителях (см., например, [6]) материалы могут представлять методическую основу

Таблица 2

Значение функции $\beta_n(\lambda)$

n/λ	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0
0	0	0,00595395	0,0214608	0,0438582	0,0713056	0,1024885	0,1364304	0,1723756	0,2097141	0,2479358	0,286617
1	2,6666666	2,6269670	2,5232794	2,3808779	2,2218883	2,0621162	1,9111521	1,7739228	1,6521500	1,5457951	1,45384738
2	1,06666666	1,0688601	1,0743263	1,0815855	1,0894729	1,09712145	1,10392095	1,10947384	1,11355486	1,11607467	1,11704692
3	1,02857140	1,02870257	1,02911717	1,02982946	1,03082186	1,03205006	1,03345215	1,03495778	1,03649525	1,03799728	1,03940359
4	1,0158730	1,0159077	1,01601212	1,0161865	1,0164302	1,01673998	1,0171105	1,0175337	1,0179998	1,0184972	1,0190135
5	1,01010101	1,0101143	1,0101541	1,0102202	1,0103116	1,0104285	1,0105684	1,0107302	1,0109114	1,0111098	1,0113221
6	1,0069930	1,006999	1,0070178	1,0070486	1,0070913	1,0071457	1,0072111	1,0072870	1,0073729	1,0074674	1,0075699
7	1,0051282	1,0051315	1,0051413	1,0051576	1,0051803	1,0052093	1,0052440	1,0052847	1,0053307	1,0053817	1,0054374
8	1,0039218	1,0039235	1,0039292	1,0039386	1,0039517	1,0039686	1,0039888	1,0040125	1,0040345	1,0040695	1,0041024
9	1,0030960	1,0030972	1,0031007	1,0031065	1,0031146	1,0031251	1,0031377	1,0031525	1,0031694	1,0031882	1,0032089
10	1,0025100	1,0025070	1,0025093	1,0025132	1,0025185	1,0025253	1,0025336	1,0025433	1,0025543	1,0025667	1,0025804
11	1,0020703	1,0020703	1,0020703	1,0020704	1,0020704	1,0020704	1,0020705	1,0020705	1,0020706	1,0020708	1,0020710
12	1,00173913	1,00173913	1,00173913	1,00173913	1,00173913	1,00173913	1,00173913	1,00173917	1,00173926	1,00173937	1,00173943

Таблица 3

Значение функции $\alpha_n(\lambda)$

n/λ	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0
0	0	0,00968334	0,0364768	0,0763563	0,12544391	0,18037215	0,23832803	0,29700369	0,35453481	0,40944339	0,46059344
1	2,0	1,9520149	1,82434720	1,64830579	1,45317884	1,26020415	1,08215095	0,925192239	0,79115236	0,67932778	0,58773427
2	0	0,00478409	0,01758899	0,03567305	0,05648246	0,07796496	0,09861178	0,11741068	0,1337668	0,14741699	0,15834526
3	0	0,3498·10 ⁻⁴	0,36644·10 ⁻³	0,00133132	0,00314503	0,00588775	0,00952461	0,01393908	0,01897716	0,024446163	0,03021961
4	0	0,154·10 ⁻⁵	0,2258·10 ⁻⁴	0,1052·10 ⁻³	0,30181·10 ⁻³	0,66686·10 ⁻³	0,00116382	0,00206624	0,0031511	0,00450287	0,00611288
5	0	0,14·10 ⁻⁶	0,410·10 ⁻⁵	0,1758·10 ⁻⁴	0,536·10 ⁻⁴	0,12548·10 ⁻³	0,24981·10 ⁻³	0,43962·10 ⁻³	0,70906·10 ⁻³	0,10705·10 ⁻²	0,00153289
6	0	0,11·10 ⁻⁶	0,92·10 ⁻⁶	0,496·10 ⁻⁵	0,148·10 ⁻⁴	0,354·10 ⁻⁴	0,716·10 ⁻⁴	0,12640·10 ⁻³	0,2128·10 ⁻³	0,33·10 ⁻³	0,485·10 ⁻³
7	0	—	—	0,12·10 ⁻⁵	0,500·10 ⁻⁵	0,1284·10 ⁻⁴	0,258·10 ⁻⁴	0,47·10 ⁻⁴	0,8·10 ⁻⁴	0,1252·10 ⁻³	0,1866·10 ⁻³
8	0	—	—	—	0,242·10 ⁻⁵	0,552·10 ⁻⁵	0,118·10 ⁻⁴	0,21·10 ⁻⁴	0,35·10 ⁻⁴	0,5558·10 ⁻⁴	0,834·10 ⁻⁴
9	0	—	—	—	0,134·10 ⁻⁵	0,262·10 ⁻⁵	0,58·10 ⁻⁵	0,102·10 ⁻⁴	0,176·10 ⁻⁴	0,2740·10 ⁻⁴	0,414·10 ⁻⁴
10	0	—	—	—	0,54·10 ⁻⁶	0,148·10 ⁻⁵	0,32·10 ⁻⁵	0,58·10 ⁻⁵	0,90·10 ⁻⁵	0,152·10 ⁻⁴	0,230·10 ⁻⁴
11	0	—	—	—	—	0,100·10 ⁻⁵	0,18·10 ⁻⁵	0,28·10 ⁻⁵	0,560·10 ⁻⁵	0,84·10 ⁻⁵⁴	0,132·10 ⁻⁴
12	0	—	—	—	—	0,46·10 ⁻⁵	0,14·10 ⁻⁵	0,26·10 ⁻⁵	0,340·10 ⁻⁵	0,589·10 ⁻⁵	0,84·10 ⁻⁵

для создания инженерной программы для расчета нейтронно-физических характеристик гетерогенных каналов или реактора. Предложенные подходы могут быть с успехом применены к решению аналогичной задачи для более простых геометрий (плоскости и шара).

Некоторые результаты работы носят оригинальный характер: полученные в работе интегралы (10), (29)—(32) в литературе авторам не встречались и могут быть использованы для других приложений.

Список литературы

1. Пономарев-Степной Н. Н., Крутов А. М., Лобынцев В. А. и др. Распределение энерговыделения в топливном сердечнике твэлов // Атомная энергия. 1973. Т. 34. С. 197—198.
2. Бекури К., Виртц К. Нейтронная физика. М.: Атомиздат, 1968.
3. Марчук Г. И. Методы расчета ядерных реакторов. М.: Атомиздат, 1961.
4. Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Физматгиз, 1962.
5. Лебедев Н. Н. Специальные функции и их приложения. М.: Физматгиз, 1963.
6. Галанин А. Д. Теория ядерных реакторов на тепловых нейтронах. М.: Атомиздат, 1959.

Статья поступила в редакцию 03.12.11.

УДК 533.9

ТЕСТЫ ДЛЯ ПРОГРАММ, ИСПОЛЬЗУЮЩИХ ГИБРИДНУЮ МОДЕЛЬ ПРИ ЧИСЛЕННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ДИНАМИКИ ПЛАЗМЫ

А. И. Голубев, Н. П. Пятаков
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Найдены аналитические решения двух модельных задач: задачи Коши для кинетического уравнения Власова со специальным начальным распределением ионов при их движении в заданном однородном магнитном поле и задачи для системы уравнений электронной гидродинамики и уравнений Максвелла в случае идеально проводящей плазмы. Решение второй задачи получено методом пробных функций. Эти решения могут быть использованы при тестировании прикладных программ, реализующих гибридную модель плазмы.

Ключевые слова: кинетическое уравнение Власова, задача Коши, метод характеристик, уравнения электронной гидродинамики, уравнения Максвелла, метод пробных функций.

Введение

Первые публикации, содержащие уравнения гибридной модели плазмы, относятся к середине 70-х годов прошлого столетия [1, 2]. В рамках этой модели для описания динамики ионных компонентов плазмы используется кинетический подход, а электроны представляются жидкостью, нейтрализующей заряд ионов. Эта модель оказалась чрезвычайно продуктивной и нашла широкое применение в последующие годы при изучении взаимодействия потоков разреженной плазмы в магнитном поле. Так, например, программы, реализующие гибридную модель плазмы, использовались при теоретических исследованиях динамики плазмы [3–6], при интерпретации результатов лабораторных экспериментов и активных экспериментов в космосе [7–9] и в других областях физики плазмы [10].

Численные алгоритмы, применяемые при решении уравнений гибридной модели, используют хорошо известный метод *частица в ячейке* для моделирования поведения ионных компонентов плазмы [11] и различные разностные схемы для решения уравнений электронной гидродинамики совместно с уравнениями Максвелла (см., например, [12–15]).

Следует отметить, что, несмотря на хорошо развитую общую теорию моделирования плазмы методом *частица в ячейке* [11], при решении этим методом конкретных прикладных задач требуется уделять особое внимание отдельным деталям метода, в частности, заданию начального распределения ансамбля модельных частиц. Большую помощь при этом могут оказать представительные тестовые задачи, в которых заранее известно временное поведение ансамбля модельных частиц. Так, при изучении взаимодействия ионизованного облака с окружающей плазмой в магнитном поле (см., например, [4, 6]) весьма полезной, по мнению авторов, оказывается задача о движении ансамбля ионов в пространственно однородном магнитном поле. Хотя решение задачи о движении *отдельной* заряженной частицы в заданном магнитном поле хорошо известно (см., например, [16]), аналитическое описание поведения средних величин для *ансамбля* таких частиц при движении в заданном однородном магнитном поле, по-видимому, отсутствует. Вместе с тем, как показал опыт авторов в процессе разработки программ моделирования динамики разреженной плазмы на основе гибридной модели, эта задача оказывается весьма полезной для выяснения свойств алгоритмов

расчета траекторий модельных частиц и их вкладов в средние характеристики плазмы. В данной работе получено аналитическое решение задачи Коши для кинетического уравнения Власова со специальным начальным распределением ионов при их движении в заданном однородном магнитном поле. Функция распределения в рассмотренной модельной задаче найдена методом характеристик.

В гибридной модели плазмы совокупность уравнений электронной гидродинамики и уравнений Максвелла является существенно нелинейной системой, имеющей сложные дисперсионные свойства [15]. Теоретическое исследование разностных схем, используемых при их решении, может быть выполнено лишь при значительных упрощающих предположениях и не всегда дает полного представления о свойствах этих схем, в частности реальных условиях их устойчивости. В данной работе предложено аналитическое решение модельной задачи для этой нелинейной системы в случае идеально проводящей плазмы. Решение получено методом пробных функций. При этом пространственно-временное поведение компонент самосогласованного магнитного поля выбрано сходным с их поведением в задаче о взаимодействии ионизованного облака с окружающей плазмой в магнитном поле [4, 6], а движение ионных компонентов плазмы подобрано таким образом, чтобы уравнения рассматриваемой системы удовлетворялись без явного введения в них, как это обычно делается в методе пробных функций, каких-либо фиктивных источников.

Уравнения упрощенной гибридной модели плазмы

В данной работе рассмотрим упрощенный вариант гибридной модели, предполагая плазму идеально проводящей и пренебрегая влиянием электронного давления на движение частиц. В этом случае уравнения гибридной модели можно записать в следующем виде (см., например, [10, 12]; используется гауссова система единиц):

- кинетическое уравнение для функции распределения $f_k(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ ионов сорта k

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f_k}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\mathbf{F}_k}{m_k} \frac{\partial f_k}{\partial \mathbf{v}} = 0. \quad (1)$$

Здесь $\mathbf{F}_k = Z_k (\mathbf{E} + [\mathbf{v} \times \mathbf{B}] / c)$, где Z_k, m_k — заряд и масса ионов; c — скорость света в вакууме; \mathbf{E}, \mathbf{B} — напряженность электрического поля и индукция магнитного поля соответственно. При известной функции распределения концентрация ионов сорта k и их средняя скорость определяются следующими соотношениями:

$$n_k = \int f_k(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}; \quad n_k \mathbf{u}_k = \int \mathbf{v} f_k(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}; \quad (2)$$

- уравнения для электронов

$$en_e = \sum_k Z_k n_k; \quad \mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{u}_e \times \mathbf{B}] = 0, \quad (3)$$

где $(-e)$ — заряд электрона; n_e — концентрация электронов; \mathbf{u}_e — их скорость;

- уравнения Максвелла, не содержащие тока смещения:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}; \quad \nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{J}. \quad (4)$$

Отметим, что скорость электронов равна

$$\mathbf{u}_e = \mathbf{u} - \frac{\mathbf{J}}{en_e}, \quad \mathbf{u} = \frac{1}{en_e} \sum_k Z_k n_k \mathbf{u}_k. \quad (5)$$

Будем получать аналитические решения уравнений (1)–(5) применительно к задаче о взаимодействии ионизованного облака с окружающей плазмой во внешнем магнитном поле, предполагая

при этом, что окружающая облако плазма пространственно однородна, а начальное распределение частиц облака сферически-симметрично. В этом случае единственным выделенным направлением в модели остается направление внешнего магнитного поля и задача становится осесимметричной с осью симметрии, направленной вдоль этого поля и проходящей через точку, являющуюся центром начального распределения частиц облака. Для задачи с осевой симметрией удобно записать уравнения гибридной модели в сферической системе координат (r, θ, φ) с центром в этой точке и полярной осью, направленной вдоль внешнего магнитного поля. В этой системе координат все величины не будут зависеть от переменной φ .

Кинетическое уравнение (1) для ионов сорта k примет вид [17] (индекс k для сокращения записи опустим)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f + v_r \frac{\partial}{\partial r} f + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} f + \left(\frac{v_\theta^2 + v_\varphi^2}{r} + \frac{F_r}{m} \right) \frac{\partial}{\partial v_r} f + \left(\frac{v_\varphi^2}{r} \operatorname{ctg} \theta - \frac{v_r v_\theta}{r} + \frac{F_\theta}{m} \right) \frac{\partial}{\partial v_\theta} f + \\ + \left(-\frac{v_\varphi v_\theta}{r} \operatorname{ctg} \theta - \frac{v_r v_\varphi}{r} + \frac{F_\varphi}{m} \right) \frac{\partial}{\partial v_\varphi} f = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Функция f в (6) имеет смысл плотности числа частиц в фазовом пространстве $(r, \theta, v_r, v_\theta, v_\varphi)$, приходящейся на единицу азимутального угла.

Для дальнейшего изложения удобно в уравнениях (2)–(6) перейти к безразмерным переменным и функциям. Используем в качестве основных следующие единицы измерения ($[a]$ означает единицу измерения величины a):

$$[r] = r_0; \quad [v] = u_0; \quad [n] = n_0; \quad [B] = B_0; \quad [m_k] = m_0; \quad [Z_k] = e,$$

где B_0 — индукция внешнего магнитного поля. Для остальных величин положим

$$[t] = \tilde{t}_0 = \frac{r_0}{u_0}; \quad [f] = f_0 = \frac{n_0}{u_0^3}; \quad [E] = E_0 = \frac{u_0}{c} B_0; \quad [J] = J_0 = e n_0 u_0.$$

Тогда, сохраняя для безразмерных величин те же обозначения, что и для размерных, будем иметь

$$\mathbf{F}_k = q Z_k (\mathbf{E} + [\mathbf{v} \times \mathbf{B}]); \quad n_e = \sum_k Z_k n_k; \quad \mathbf{E} + [\mathbf{u}_e \times \mathbf{B}] = 0; \quad (7)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}; \quad \nabla \times \mathbf{B} = q M^2 \mathbf{J}, \quad (8)$$

где

$$q = \frac{r_0 e B_0}{u_0 m_0 c}; \quad M^2 = \frac{4\pi m_0 n_0 u_0^2}{B_0^2}.$$

Остальные уравнения своего вида не изменят.

Движение ансамбля ионов в пространственно однородном магнитном поле

Предположим, что поле $\mathbf{E} = 0$, а внешнее магнитное поле пространственно однородно и направлено вдоль полярной оси введенной ранее сферической системы координат (r, θ, φ) . Нетрудно получить следующие формулы для характеристики уравнения (6), проходящей при $t = t_0$ через точку $(r_0, \theta_0, v_{r0}, v_{\theta0}, v_{\varphi0})$:

$$r = \left[r_0^2 + (\alpha^2 + \beta^2) v_{\perp 0}^2 + v_{z0}^2 \tau^2 + 2\rho_0 (\alpha v_{\rho 0} + \beta v_{\varphi 0}) + 2z_0 \tau v_{z0} \right]^{1/2}; \quad (9)$$

$$\sin \theta = \frac{\rho}{r}; \quad \cos \theta = \frac{z}{r}; \quad (10)$$

$$v_r = \frac{\rho v_\rho + z v_z}{r}; \quad v_\theta = \frac{z \rho v_\rho - \rho^2 v_z}{\rho r}; \quad v_\varphi = \frac{\rho_0 (-s v_{\rho 0} + c v_{\varphi 0}) - \beta v_{\perp 0}^2}{\rho}. \quad (11)$$

В этих формулах

$$\begin{aligned}
 \tau &= t - t_0; & s &= \sin(\omega\tau); & c &= \cos(\omega\tau); & \alpha &= \frac{s}{\omega}; & \beta &= \frac{1-c}{\omega}; & \omega &= \frac{qZ}{m}; \\
 \rho^2 &= \rho_0^2 + (\beta^2 + \alpha^2) v_{\perp 0}^2 + 2\rho_0 (\alpha v_{\rho 0} + \beta v_{\varphi 0}); & z &= z_0 + v_{z 0}\tau; & r^2 &= \rho^2 + z^2; \\
 \rho v_{\rho} &= \rho_0 (c v_{\rho 0} + s v_{\varphi 0}) + \alpha v_{\perp 0}^2; & v_z &= v_{z 0}; \\
 v_{\perp 0}^2 &= v_{\rho 0}^2 + v_{\varphi 0}^2; & v_{\rho 0} &= v_{r 0} \sin \theta_0 + v_{\theta 0} \cos \theta_0; & v_{z 0} &= v_{r 0} \cos \theta_0 - v_{\theta 0} \sin \theta_0; \\
 \rho_0 &= r_0 \sin \theta_0; & z_0 &= r_0 \cos \theta_0.
 \end{aligned}$$

Примечание. При получении формул (9)–(11) удобно сначала найти выражения для характеристик кинетического уравнения в декартовой системе координат (x, y, z) с осью z , совпадающей с полярной осью сферической системы координат, а затем перейти по известным формулам к выражениям (9)–(11) в сферической системе координат.

Отметим важный частный случай, когда начальная скорость модельной частицы имеет вид $\mathbf{v}_0 = (v_{r 0}, 0, 0)$, где $v_{r 0} = r_0/t_0$. Для него получим

$$\rho^2 = \frac{\rho_0^2}{\omega^2 t_0^2} \left[(\omega t_0 + s)^2 + (1 - c)^2 \right]; \quad z = z_0 + \frac{r_0 \cos \theta_0}{t_0} (t - t_0) = z_0 \frac{t}{t_0}.$$

Отсюда следует, что отношение ρ/ρ_0 не зависит от начальных координат частицы и для всех частиц одинаково в любой момент времени t .

Обратимся теперь к получению решения задачи Коши для кинетического уравнения (6). Пусть при $t = t_0$ начальное условие в задаче Коши для уравнения (6) имеет вид

$$f(t = t_0) = \frac{N}{\frac{4}{3}\pi t_0^3} \tilde{\theta}(r_0 - t_0) \delta\left(v_{r 0} - \frac{r_0}{t_0}\right) \delta(v_{\theta 0}) \delta(v_{\varphi 0}),$$

где N — суммарное число ионов в ансамбле (в принятых выше единицах измерения); $\tilde{\theta}(x) = 1$ при $x < 0$ и $\tilde{\theta}(x) = 0$ при $x > 0$. Тогда при $t > t_0$ решением задачи Коши будет функция

$$f = \frac{N}{\frac{4}{3}\pi t_0^3} \tilde{\theta}(r_0(\bullet) - t_0) \delta(w_r(\bullet)) \delta(w_{\theta}(\bullet)) \delta(w_{\varphi}(\bullet)), \quad (12)$$

где $r_0(\bullet)$, $w_r(\bullet) = v_{r 0}(\bullet) - \frac{r_0(\bullet)}{t_0}$, $w_{\theta}(\bullet) = v_{\theta 0}(\bullet)$, $w_{\varphi}(\bullet) = v_{\varphi 0}(\bullet)$ являются функциями аргументов t , r , θ , v_r , v_{θ} , v_{φ} . Для того, чтобы записать решение задачи Коши в явном виде через эти аргументы, следует выразить через них начальные условия r_0 , θ_0 , $v_{r 0}$, $v_{\theta 0}$, $v_{\varphi 0}$. Воспользуемся формулами (9), (11). Заменяем в них τ на $-\tau$, величины с индексом 0 — на соответствующие величины без индекса, а величины без индекса — на величины с индексом 0. Тогда получим

$$r_0^2 = \rho_0^2 + z_0^2; \quad \rho_0^2 = \rho^2 + (\beta^2 + \alpha^2) v_{\perp}^2 + 2\rho(-\alpha v_{\rho} + \beta v_{\varphi}); \quad z_0 = z - v_z \tau; \quad (13)$$

$$\left. \begin{aligned}
 r_0 v_{r 0} &= \rho_0 v_{\rho 0} + z_0 v_z; \\
 \rho_0 r_0 v_{\theta 0} &= z_0 \rho_0 v_{\rho 0} - \rho_0^2 v_z; \\
 \rho_0 v_{\varphi 0} &= \rho (s v_{\rho} + c v_{\varphi}) - \beta v_{\perp}^2,
 \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

где $\rho_0 v_{\rho 0} = \rho (c v_{\rho} - s v_{\varphi}) - \alpha v_{\perp}^2$.

Не будем приводить явный вид функции f , поскольку в итоге потребуются лишь выражения для средних характеристик $n(t, r, \theta)$, $\mathbf{u}(t, r, \theta)$. При их вычислении необходимо провести интегрирование по переменным v_r, v_θ, v_φ . Для упрощения выкладок будем интегрировать в других переменных, а именно в переменных w_r, w_θ, w_φ . Как следует из формул (14), переход к этим переменным упростится, если предварительно ввести промежуточные переменные интегрирования

$$\widehat{v}_\rho = cv_\rho - sv_\varphi; \quad \widehat{v}_\varphi = sv_\rho + cv_\varphi; \quad \widehat{v}_z = v_z. \quad (15)$$

Якобиан \widehat{J} перехода от переменных v_r, v_θ, v_φ к переменным (15) равен $\widehat{J} = 1$. Перепишем соотношения (13), (14) в новых переменных:

$$r_0^2 = \rho_0^2 + z_0^2; \quad \rho_0^2 = \rho^2 + (\beta^2 + \alpha^2) \widehat{v}_\perp^2 - 2\rho(\alpha\widehat{v}_\rho + \beta\widehat{v}_\varphi); \quad z_0 = z - \widehat{v}_z\tau; \quad (16)$$

$$\left. \begin{aligned} r_0 v_{r0} &= \rho_0 v_{\rho 0} + z_0 \widehat{v}_z; \\ \rho_0 r_0 v_{\theta 0} &= z_0 \rho_0 v_{\rho 0} - \rho_0^2 \widehat{v}_z; \\ \rho_0 v_{\varphi 0} &= \rho \widehat{v}_\varphi - \beta \widehat{v}_\perp^2, \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

где теперь $\rho_0 v_{\rho 0} = \rho \widehat{v}_\rho - \alpha \widehat{v}_\perp^2$. Отметим, что $\widehat{v}_\perp^2 = \widehat{v}_\rho^2 + \widehat{v}_\varphi^2 = v_\rho^2 + v_\varphi^2 = v_\perp^2 = v_{\perp 0}^2 = v_{\rho 0}^2 + v_{\varphi 0}^2 = \widehat{v}_{\rho 0}^2 + \widehat{v}_{\varphi 0}^2$.

Найдем нули аргументов δ -функций в формуле (12), т. е. решим относительно переменных $\widehat{v}_\rho, \widehat{v}_z, \widehat{v}_\varphi$ систему уравнений

$$w_r = \frac{1}{r_0} \left(\rho_0 v_{\rho 0} + z_0 v_{z0} - \frac{r_0^2}{t_0} \right) = 0; \quad w_\theta = \frac{1}{r_0} (z_0 v_{\rho 0} - \rho_0 v_{z0}) = 0; \quad w_\varphi = v_{\varphi 0} = 0.$$

Из нее имеем

$$v_{\rho 0} = \frac{\rho_0}{t_0}; \quad v_{z0} = \frac{z_0}{t_0}; \quad v_{\varphi 0} = 0.$$

Тогда, учитывая уравнения (17) и то, что $\widehat{v}_z = v_z = v_{z0}$, находим

$$\rho \widehat{v}_\rho = \alpha \widehat{v}_\perp^2 + \frac{\rho_0^2}{t_0}; \quad \rho \widehat{v}_\varphi = \beta \widehat{v}_\perp^2; \quad \widehat{v}_z = \frac{z_0}{t_0}. \quad (18)$$

При этом

$$\widehat{v}_\perp^2 = v_{\rho 0}^2 + v_{\varphi 0}^2 = v_{\rho 0}^2 = \frac{\rho_0^2}{t_0^2}. \quad (19)$$

Подставляя формулы (18), (19) в (16), в нулях аргументов δ -функций получаем

$$\rho_0^2 = \frac{\rho^2 t_0^2}{(t_0 + \alpha)^2 + \beta^2}; \quad z_0 = \frac{z t_0}{t_0 + \tau} = \frac{z t_0}{t}. \quad (20)$$

Введем новое обозначение $\Delta = (t_0 + \alpha)^2 + \beta^2$, тогда $r_0^2 = \frac{\rho^2 t_0^2}{\Delta} + \frac{z^2 t_0^2}{t^2}$. Учитывая (19), (20), из (18) имеем

$$\rho \widehat{v}_\rho = (t_0 + \alpha) \frac{\rho_0^2}{t_0^2} = (t_0 + \alpha) \frac{\rho^2}{\Delta}; \quad \rho \widehat{v}_\varphi = \beta \frac{\rho_0^2}{t_0^2} = \beta \frac{\rho^2}{\Delta}; \quad \widehat{v}_z = \frac{z_0}{t_0} = \frac{z}{t}. \quad (21)$$

Теперь при вычислении моментов перейдем от функции распределения (12) к переменным w_r, w_θ, w_φ . Эти переменные выражаются через промежуточные переменные $\widehat{v}_\rho, \widehat{v}_\varphi, \widehat{v}_z$ по формулам

$$\begin{aligned} w_r &= v_{r0} - \frac{r_0}{t_0} = \frac{1}{r_0} \left(\rho_0 v_{\rho 0} + z_0 v_{z0} - \frac{r_0^2}{t_0} \right) = \frac{1}{r_0} \left(\rho \widehat{v}_\rho - \alpha \widehat{v}_\perp^2 + z_0 \widehat{v}_z - \frac{r_0^2}{t_0} \right); \\ w_\theta &= v_{\theta 0} = \frac{1}{r_0} (z_0 v_{\rho 0} - \rho_0 v_{z0}) = \frac{1}{r_0 \rho_0} \left[z_0 (\rho \widehat{v}_\rho - \alpha \widehat{v}_\perp^2) - \rho_0^2 \widehat{v}_z \right]; \\ w_\varphi &= v_{\varphi 0} = \frac{1}{\rho_0} (\rho \widehat{v}_\varphi - \beta \widehat{v}_\perp^2). \end{aligned} \quad (22)$$

Вычислим якобиан $J = \left| \frac{D(w_r, w_\theta, w_\varphi)}{D(\widehat{v}_\rho, \widehat{v}_\varphi, \widehat{v}_z)} \right|$ в нулях аргументов δ -функций в формуле (12). Заметим, что в этом случае при вычислении производных в формулах (22) можно ограничиться дифференцированием только выражений в скобках. Искомый якобиан J равен

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\rho}{r_0 \Delta} [(t_0 + \alpha)^2 - \beta^2] & \frac{1}{r_0} \frac{2\beta\rho}{\Delta} (t_0 + \alpha) & \frac{z_0}{r_0} \frac{t}{t_0} \\ \frac{z_0}{\rho_0} \frac{\rho}{r_0 \Delta} [(t_0 + \alpha)^2 - \beta^2] & \frac{z_0}{\rho_0} \frac{1}{r_0} \frac{2\beta\rho}{\Delta} (t_0 + \alpha) & -\frac{\rho_0 t}{r_0 t_0} \\ -\frac{2\beta}{\rho_0 t_0^2} \frac{\rho(\alpha + t_0)}{\Delta} & \frac{\rho}{\rho_0} \frac{(t_0 + \alpha)^2 - \beta^2}{\Delta} & 0 \end{vmatrix} = \frac{t}{t_0^3} \Delta.$$

Зная якобиан, нетрудно вычислить распределение концентрации частиц:

$$n(r, \theta, \varphi) = \int f d\mathbf{v} = \frac{N}{\frac{4}{3}\pi t \Delta} \tilde{\theta} \left(\sqrt{\frac{\rho^2}{\Delta} + \frac{z^2}{t^2}} - 1 \right).$$

При вычислении поля скоростей потребуются выражения для v_r , v_θ , v_φ в нулях аргументов δ -функций. Подставив выражения (21) в (15), получим

$$\begin{aligned} v_\rho &= c\widehat{v}_\rho + s\widehat{v}_\varphi = c \frac{\rho(\alpha + t_0)}{\Delta} + s \frac{\beta\rho}{\Delta} = \rho \frac{ct_0 + \alpha}{\Delta}; \\ v_\varphi &= -s\widehat{v}_\rho + c\widehat{v}_\varphi = -s \frac{\rho(\alpha + t_0)}{\Delta} + c \frac{\beta\rho}{\Delta} = -\rho \frac{st_0 + \beta}{\Delta}; \\ v_z &= \widehat{v}_z = \frac{z}{t}. \end{aligned}$$

Чтобы перейти к v_r , v_θ , v_φ , нужно воспользоваться формулами (11). Окончательно для компонент средней скорости частиц $\mathbf{u}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{n} \int \mathbf{v} f d\mathbf{v}$ находим

$$u_r = \frac{1}{r} \left(\rho^2 \frac{ct_0 + \alpha}{\Delta} + z^2 \frac{1}{t} \right); \quad u_\theta = \frac{z\rho}{r} \left(\frac{ct_0 + \alpha}{\Delta} - \frac{1}{t} \right); \quad u_\varphi = -\rho \frac{st_0 + \beta}{\Delta}.$$

Замечание 1. Если положить, что частота $\omega = 0$, получим задачу о свободном разлете шарового облака в пустоту. В этом случае $s = 0$, $c = 1$, $\alpha = \tau$, $\beta = 0$, $\Delta = t^2$ и получаются хорошо известные выражения

$$n(r, \theta, \varphi) = \frac{N}{\frac{4}{3}\pi t^3} \tilde{\theta}(r - t); \quad u_r = \frac{r}{t}; \quad u_\theta = 0; \quad u_\varphi = 0.$$

Аналитическое решение модельной задачи для системы уравнений электронной гидродинамики и уравнений Максвелла

Для задачи с осевой симметрией удобно ввести в рассмотрение компоненту A_φ векторного потенциала \mathbf{A} такого, что $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. В этом случае из уравнений Максвелла получаются два скалярных уравнения для вычисления компонент A_φ, B_φ :

$$\frac{\partial A_\varphi}{\partial t} + E_\varphi = 0; \quad \frac{\partial B_\varphi}{\partial t} = \frac{1}{r} \left(\frac{\partial E_r}{\partial \theta} - \frac{\partial r E_\theta}{\partial r} \right). \quad (23)$$

В этих уравнениях согласно (7)

$$E_r = u_{e\varphi} B_\theta - u_{e\theta} B_\varphi; \quad E_\theta = u_{er} B_\varphi - u_{e\varphi} B_r; \quad E_\varphi = u_{e\theta} B_r - u_{er} B_\theta. \quad (24)$$

В свою очередь,

$$B_r = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} A_\varphi \sin \theta; \quad B_\theta = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r A_\varphi, \quad (25)$$

а компоненты скорости электронов \mathbf{u}_e определяются из уравнений (5):

$$u_{er} = u_r - \frac{1}{M^2 q n_e} \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (B_\varphi \sin \theta); \quad u_{e\theta} = u_\theta + \frac{1}{M^2 q n_e} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r B_\varphi); \quad (26)$$

$$u_{e\varphi} = u_\varphi - \frac{1}{M^2 q n_e} \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} r B_\theta - \frac{\partial}{\partial \theta} B_r \right). \quad (27)$$

В дальнейшем для сокращения записи используем обозначение $M^2 q n_e = n$.

При получении аналитического решения уравнений (23)–(27) воспользуемся методом пробных функций [18, 19], определяя при этом компоненты средней скорости ионов таким образом, чтобы они приводили к заранее заданному магнитному полю. Отметим, что уравнения (23)–(27) существенно упростятся, если предположить, что

$$u_\theta = -\frac{1}{nr} \frac{\partial}{\partial r} r B_\varphi.$$

В этом случае $u_{e\theta} = 0$ и в уравнениях (23)–(27) можно явно выделить угловую зависимость, если предположить, что концентрация электронов не зависит от переменной θ .

Введем новые неизвестные a_φ , b_φ , b_r , b_θ , α_φ , $\alpha_{e\varphi}$, e_φ , e_r , e_θ , полагая при этом, что они будут зависеть лишь от переменных r , t :

$$\begin{aligned} A_\varphi &= a_\varphi \sin \theta; & B_\varphi &= b_\varphi \sin \theta \cos \theta; & B_r &= b_r \cos \theta; & B_\theta &= b_\theta \sin \theta; \\ u_\varphi &= \alpha_\varphi \sin \theta; & u_{e\varphi} &= \alpha_{e\varphi} \sin \theta; & E_r &= e_r \sin^2 \theta; & E_\theta &= e_\theta \sin \theta \cos \theta; & E_\varphi &= e_\varphi \sin \theta. \end{aligned}$$

Если теперь положить

$$u_r = \alpha_r(r, t) - \frac{3}{nr} b_\varphi \sin^2 \theta,$$

то согласно (26) компонента u_{er} не будет зависеть от угла θ :

$$u_{er} = \alpha_r - \frac{2}{nr} b_\varphi. \quad (28)$$

Предположим, что зависимости $n(r, t)$, $a_\varphi(r, t)$, $b_\varphi(r, t)$ известны; по формулам (25) можно вычислить функции $b_r(r, t)$, $b_\theta(r, t)$. С учетом сделанных выше предположений найдем функции $\alpha_r(r, t)$, $\alpha_\varphi(r, t)$ таким образом, чтобы удовлетворялись уравнения (23)–(27). С учетом (23), (24), (28) имеем

$$\alpha_r = u_{er} + \frac{2}{nr} b_\varphi = \frac{1}{b_\theta} \frac{\partial a_\varphi}{\partial t} + \frac{2}{nr} b_\varphi.$$

Определение зависимости $\alpha_\varphi(r, t)$ проведем с использованием второго соотношения в (23). Предварительно заметим, что согласно (27)

$$\alpha_\varphi = \alpha_{e\varphi} + \frac{1}{nr} \left(b_r + \frac{\partial r b_\theta}{\partial r} \right). \quad (29)$$

Из второго уравнения (23) для функции $\alpha_{e\varphi}(r, t)$ получим соотношение вида

$$\frac{2a_\varphi}{r} \left(\frac{\partial \alpha_{e\varphi}}{\partial r} - \frac{\alpha_{e\varphi}}{r} \right) = \frac{\partial b_\varphi}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial r u_{er} b_\varphi}{\partial r}.$$

Из этого соотношения, полагая, что $\alpha_{e\varphi}(r=0, t) = 0$, можно численно или аналитически определить функцию $\alpha_{e\varphi}(r, t)$ и по формуле (29) вычислить $\alpha_\varphi(r, t)$.

Приведем результаты изложенного выше подхода для случая, когда магнитное поле имеет вид

$$B_r = (1 - e^{-\alpha r^2/t^2}) \cos \theta; \quad B_\theta = - \left[1 + \left(\alpha \frac{r^2}{t^2} - 1 \right) e^{-\alpha r^2/t^2} \right] \sin \theta; \quad B_\varphi = B_{\varphi 0} \frac{r^2 t}{2} e^{-\beta r/t} \sin \theta \cos \theta, \quad (30)$$

где $\alpha, \beta, B_{\varphi 0}$ — некоторые параметры; в этом случае $A_\varphi = \frac{r}{2} (1 - e^{-\alpha r^2/t^2}) \sin \theta$. Отметим, что если построить проекции силовых линий этого поля на плоскость $\varphi = \text{const}$, то их распределение будет качественно согласовываться с распределением проекций силовых линий в задачах, рассмотренных в работах [4, 6].

В этом случае компоненты скорости ионов определяются функциями вида

$$\begin{aligned} u_r &= \alpha_r - \frac{3}{2} \sin^2 \theta B_{\varphi 0} \frac{rt}{M^2 q n_e} e^{-\beta r/t}; \quad u_\theta = \frac{B_{\varphi 0}}{M^2 q n_e} \frac{rt}{2} e^{-\beta r/t} \left(\beta \frac{r}{t} - 3 \right) \sin \theta \cos \theta; \\ u_\varphi &= \left[\tilde{\alpha}_\varphi + \frac{e^{-\alpha r^2/t^2}}{M^2 q n_e} \alpha \frac{r}{t^2} \left(2\alpha \frac{r^2}{t^2} - 5 \right) \right] \sin \theta, \end{aligned} \quad (31)$$

где

$$\begin{aligned} \alpha_r &= \frac{\alpha \frac{r^3}{t^3} e^{-\alpha r^2/t^2}}{1 + \left(\alpha \frac{r^2}{t^2} - 1 \right) e^{-\alpha r^2/t^2}} + B_{\varphi 0} \frac{rt}{M^2 q n_e} e^{-\beta r/t}; \\ \tilde{\alpha}_\varphi &= -r B_{\varphi 0} \int_r^\infty \frac{e^{-\beta r/t}}{1 - e^{-\alpha r^2/t^2}} \left[\frac{r}{2} \left(1 + \beta \frac{r}{t} \right) + \frac{3}{2} u_{er} t \left(1 - \frac{\beta r}{3t} \right) + \frac{r}{2} t \frac{\partial u_{er}}{\partial r} \right] dr; \\ u_{er} &= \frac{\alpha \frac{r^3}{t^3} e^{-\alpha r^2/t^2}}{1 + \left(\alpha \frac{r^2}{t^2} - 1 \right) e^{-\alpha r^2/t^2}}. \end{aligned}$$

Решение (30) не зависит ни от значений M^2, q , ни от концентрации электронов $n_e(r, t)$. Задавая в тестируемой программе движение ионов согласно (31), можно, сравнивая численное решение и решение (30), получить представление о свойствах разностной схемы решения уравнений (4), (5).

Замечание 2. Как это обычно принято в гибридных моделях плазмы, плотность заряда электронов полагается равной суммарной плотности зарядов ионов (см. формулы (3)), поэтому непосредственно само уравнение непрерывности для концентрации электронов в этих моделях не используется. Если бы оно применялось наряду с другими уравнениями электронной гидродинамики, то и тогда можно было бы воспользоваться полученными выше результатами. Однако при этом пришлось бы добавить в уравнение непрерывности фиктивный источник электронов, поскольку в рассмотренной выше модельной задаче концентрация электронов является заранее задаваемой функцией.

Заключение

В данной работе приведены аналитические решения двух модельных задач, а именно аналитическое описание поведения средних величин для ансамбля ионов при их движении в заданном однородном магнитном поле и аналитическое решение модельной задачи для нелинейной системы уравнений электронной гидродинамики и уравнений Максвелла в случае идеально проводящей плазмы. Эти решения могут быть использованы при тестировании прикладных программ, реализующих гибридную модель плазмы.

Отметим, что аналитическое решение для двумерной нелинейной системы уравнений электронной гидродинамики и уравнений Максвелла, найденное в данной работе для сферической системы координат, несложно переписать для декартовых координат и получить в результате представительный тест для программ, предназначенных для численного моделирования динамики плазмы в трехмерной геометрии.

Список литературы

1. *Chodura R. A.* Hybrid-fluid-particle model of ion heating in high-max-number shock waves // Nucl. Fusion. 1975. Vol. 15. P. 55—61.
2. *Sgro A. G., Nielson C. W.* Hybrid model studies of ion dynamics and magnetic field diffusion during pinch implosion // Phys. Fluids. 1976. Vol. 19, No 1. P. 126—133.
3. *Голубев А. И., Соловьёв А. А., Терёхин В. А.* О бесстолкновительном разлете ионизованного облака в однородную замагниченную плазму // ПМТФ. 1978. № 5. С. 33—42.
4. *Башурин В. П., Голубев А. И., Терёхин В. А.* О бесстолкновительном торможении ионизованного облака, разлетающегося в однородную замагниченную плазму // Там же. 1983. № 5. С. 10—17.
5. *Гаранин С. Ф., Голубев А. И., Исмаилова Н. А.* Двумерное моделирование перпендикулярной бесстолкновительной ударной волны // Физика плазмы. 2000. Т. 26, № 5. С. 426—433.
6. *Winske D., Gary P. S.* Hybrid simulation of debris-ambient ion interactions in astrophysical explosions // J. Geophys. Res. 2007. Vol. 112. P. A10303(1—11).
7. *Антонов В. М., Башурин В. П., Голубев А. И. и др.* Экспериментальное исследование бесстолкновительного взаимодействия сверхальфвеновских взаимопроникающих потоков плазмы // ПМТФ. 1985. № 6. С. 3—9.
8. *Антонов В. М., Башурин В. П., Голубев А. И. и др.* Исследование взаимодействия потоков бесстолкновительной плазмы при больших числах Альфвена—Маха // Докл. АН СССР. 1986. Т. 289, № 1. С. 72—75.
9. *Delamere P. A., Swift D. W., Stenbaek-Nielson H. C.* A three-dimensional hybrid code simulation of the december 1984 solar wind AMPTE release // Geophys. Res. Letters. 1999. Vol. 26, No 18. P. 2837—2840.
10. *De Bartolo R., Greco A., Veltri P.* A 3D kinetic-fluid numerical code for stationary equilibrium states in magnetized plasmas // Comput. Phys. Commun. 2008. Vol. 178. P. 647—664.
11. *Бэдсел Ч., Ленгдон А.* Физика плазмы и численное моделирование. М.: Энергоатомиздат, 1989.
12. *Голубев А. И., Соловьёв А. А.* Алгоритм численного решения задачи о сильном взрыве в разреженной плазме // Числ. методы мех. спл. среды. 1979. Т. 10, № 4. С. 23—41.
13. *Harned D. S.* Quasineutral hybrid simulation of macroscopic plasma phenomena // J. Comput. Phys. 1982. Vol. 47, No 3. P. 452—462.
14. *Matthews A. P.* Current advance method and cyclic leapfrog for 2D multispecies hybrid plasma simulations // Ibid. 1994. Vol. 112, No 1. P. 102—116.
15. *Башурин В. П., Голубев А. И., Шагалиева В. С.* О численном решении уравнений электронной гидродинамики при высокой замагниченности электронов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1995. Вып. 3. С. 20—24.
16. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теория поля. М.: Наука, 1967.
17. *Коган М. Н.* Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967.
18. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1977.

19. *Голубев А. И.* Некоторые вопросы методики численного моделирования двумерных течений бесстолкновительной замагниченной плазмы // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1982. Вып. 1(9). С. 24–27.

Статья поступила в редакцию 09.03.11.

УДК 681.324

РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ. 3. РЕЗУЛЬТАТЫ ТЕСТОВЫХ РАСЧЕТОВ

В. Н. Софронов, К. С. Мокина, В. Е. Шемарулин
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Представлены результаты расчетов тестовых задач, построенных на основе точных решений для потенциалов Ньютона, Морзе и Леннарда-Джонса. Данные задачи использовались для проверки устойчивости, точности и консервативных свойств разностной схемы Verlet, самой распространенной в расчетах молекулярной динамики, и выбранной в качестве ее альтернативы трехстадийной схемы RKN4, принадлежащей к классу схем, сохраняющих каноничность фазового потока. Исследованы особенности поведения разностных схем и численных решений в случае нарушения условий устойчивости аналитических решений.

Схема RKN4 продемонстрировала высокие консервативные свойства на асимптотически больших временах, а по соотношению *точность-экономичность* — значительное превосходство над схемой Verlet.

Ключевые слова: молекулярная динамика, потенциал Ньютона, классический и модифицированный потенциалы Морзе, потенциал Леннарда-Джонса, разностные схемы молекулярной динамики.

Введение

В работе [1] представлена система тестов, созданная на основе точных решений задач для потенциалов Ньютона, Морзе и Леннарда-Джонса. Данная система тестов предназначена для проверки устойчивости, точности и консервативных свойств разностных схем молекулярной динамики.

Рассмотрим примеры численных расчетов задач, представленных в [1]. Для потенциала Ньютона полагаем $\gamma = 1$ (γ — гравитационная постоянная). Задачи Эйлера и Лагранжа интересны для выяснения особенностей поведения разностных схем и численных решений в случае нарушения условий устойчивости аналитических решений. Потеря устойчивости систем с большим количеством частиц является актуальной при решении задач молекулярной динамики. Однако определение границ областей устойчивости для таких задач весьма проблематично.

Ограничимся рассмотрением двух разностных схем — Verlet и RKN4. Первая из них — самая распространенная в расчетах молекулярной динамики. Вторая схема (RKN4) является ее альтернативой. Она продемонстрировала высокие консервативные свойства на асимптотически больших временах. Трехстадийная схема RKN4 принадлежит к классу схем, сохраняющих каноничность фазового потока [2].

В качестве меры точности численных расчетов выбрано суммарное отклонение положения частиц от эталонного (аналитического) решения:

$$dr(t) = \sqrt{\frac{\sum_i |\vec{r}_i(t) - \vec{r}_{ia}(t)|^2}{\sum_i |\vec{r}_{ia}(0)|^2}}.$$

Структура разностных уравнений молекулярной динамики такова, что закон сохранения импульса выполнен автоматически. Отличительной особенностью гамильтоновых схем является выполнение еще одного закона — сохранения момента импульса. Что касается закона сохранения полной энергии системы частиц, то его выполнение не гарантируется разностной схемой. По этой причине для всех расчетов приведены данные либо по дисбалансу полной энергии (в виде функции времени), либо по максимальному дисбалансу для заданного временного интервала (в виде функции временного шага):

$$dE(t) = \left| \frac{0,5 \sum_i m_i |\vec{u}_i|^2 + \sum_i \sum_{j \neq i} U(\vec{r}_i, \vec{r}_j) - E_0}{E_0} \right|; \quad dE_{\max}(T) = \max_{t < T} dE(t).$$

1. Задача Эйлера

Рассматривается задача о коллинеарном движении системы трех материальных точек $m_1 = 3$, $m_2 = 2$, $m_3 = 1$ вокруг начала координат (центра масс). Начальные данные

$$\begin{aligned} (x_i, y_i) &= (r_i \cos \varphi_i, r_i \sin \varphi_i); & (u_{xi}, u_{yi}) &= (-r_i \omega_0 \sin \varphi_i, r_i \omega_0 \cos \varphi_i), & i &= 1, 2, 3; \\ r_1 &= 1; & r_2 &= \frac{m_1 - \kappa m_3}{m_2 + (\kappa + 1) m_3}; & r_3 &= \frac{(\kappa + 1) m_1 + \kappa m_2}{m_2 + (\kappa + 1) m_3}; \\ \varphi_1(0) &= \pi; & \varphi_2(0) &= 0; & \varphi_3(0) &= 0 \end{aligned}$$

соответствуют решению, приведенному в [1]. Система материальных точек вращается вокруг начала координат с постоянной угловой скоростью

$$\omega = \omega_0 = \sqrt{\left[\frac{m_2 + (\kappa + 1) m_3}{m_1 + m_2 + m_3} \right]^3 \left[\frac{m_1}{(\kappa + 1)^3} + \frac{(\kappa^2 + 1) m_2}{\kappa^2 (\kappa + 1)} + \frac{m_3}{(\kappa + 1)^3} \right]} = 0,958\,801\,579\,9,$$

где $\kappa = 0,780\,671\,8588$ является положительным корнем уравнения $(m_1 + m_2) \kappa^5 + (3m_1 + 2m_2) \kappa^4 + (3m_1 + m_2) \kappa^3 - (m_2 + 3m_3) \kappa^2 - (2m_2 + 3m_3) \kappa - (m_2 + m_3) = 0$.

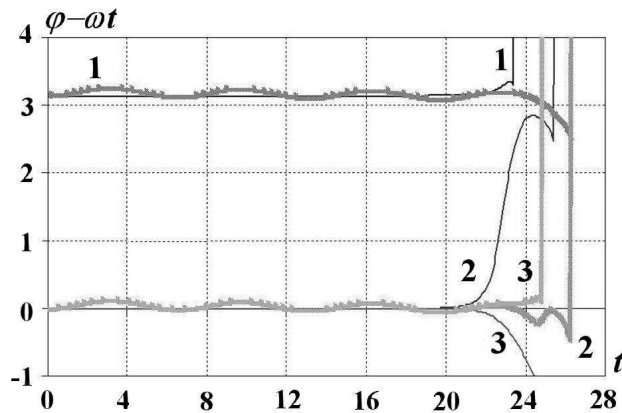


Рис. 1. Зависимость полярного угла частиц (1–3) от времени для задачи Эйлера: — — RKN4; — — Verlet

Решение задачи Эйлера — $r_i(t) = r_i(0)$, $\varphi_i(t) = \varphi_i(0) + \omega_0 t$, $i = 1, 2, 3$. Известно, что данное решение является неустойчивым, поэтому в численных расчетах частицы уходят со стационарных траекторий после трех периодов вращения. Результаты расчетов, преобразованные в полярную систему координат, изображены на рис. 1. Шаг интегрирования $\Delta t = 0,01 \times 2\pi/\omega_0$. Отметим также, что использование схемы RKN4 позволяет существенно уменьшить дисбаланс полной энергии частиц (рис. 2) и погрешность численных расчетов (рис. 3).

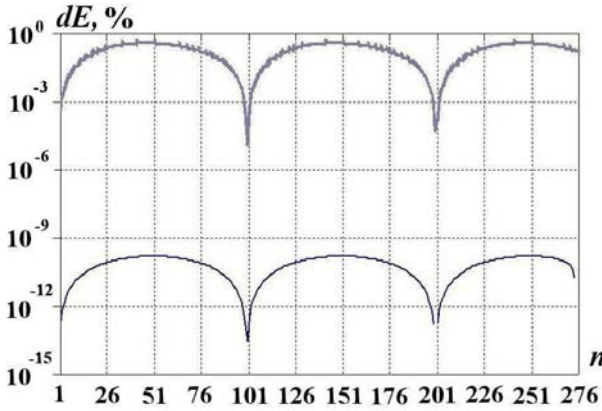


Рис. 2. Зависимость дисбаланса суммарной энергии частиц от номера шага. Расчет задачи Эйлера с шагом $\Delta t = 0,01 \cdot 2\pi/\omega_0$: — — RKN4; — — Verlet

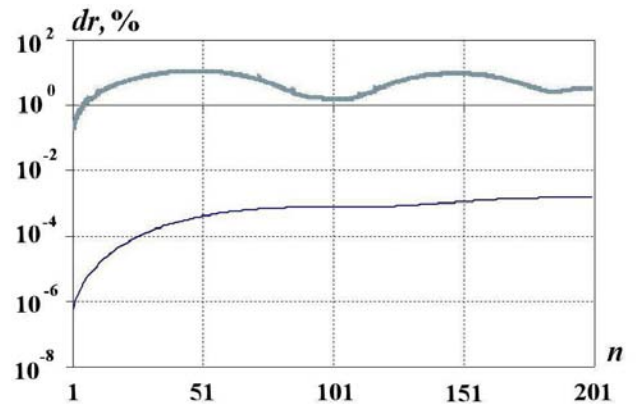


Рис. 3. Мера погрешности численного решения. Расчет задачи Эйлера с шагом $\Delta t = 0,01 \cdot 2\pi/\omega_0$: — — RKN4; — — Verlet

2. Задачи Лагранжа с устойчивыми и неустойчивыми траекториями частиц

В задаче Лагранжа частицы m_1, m_2, m_3 расположены в вершинах равностороннего треугольника, вращающегося с постоянной угловой скоростью вокруг центра масс $\omega = \omega_0 = \sqrt{\frac{\gamma(m_1 + m_2 + m_3)}{l^3}}$. Начальные данные соответствуют решению, приведенному в [1], со значением свободного параметра $l = \sqrt[3]{m_1 + m_2 + m_3}$:

$$(x_i, y_i) = (r_i \cos \varphi_i, r_i \sin \varphi_i); \quad (u_{xi}, u_{yi}) = (-\omega_0 r_i \sin \varphi_i, \omega_0 r_i \cos \varphi_i), \quad i = 1, 2, 3,$$

где

$$r_1 = \frac{l\sqrt{m_2^2 + m_2 m_3 + m_3^2}}{m_1 + m_2 + m_3}; \quad r_2 = \frac{l\sqrt{m_1^2 + m_1 m_3 + m_3^2}}{m_1 + m_2 + m_3}; \quad r_3 = \frac{l\sqrt{m_1^2 + m_1 m_2 + m_2^2}}{m_1 + m_2 + m_3}; \quad (1)$$

$$\varphi_1 = 0; \quad \varphi_2 = \arccos\left(\frac{r_1^2 + r_2^2 - l^2}{2r_1 r_2}\right); \quad \varphi_3 = 2\pi - \arccos\left(\frac{r_1^2 + r_3^2 - l^2}{2r_1 r_3}\right). \quad (2)$$

Решение задачи Лагранжа — $r_i(t) = r_i(0)$, $\varphi_i(t) = \varphi_i(0) + \omega_0 t$, $i = 1, 2, 3$, устойчиво в первом приближении при выполнении условия Раусса

$$27 < \frac{(m_1 + m_2 + m_3)^2}{m_1 m_2 + m_1 m_3 + m_2 m_3}. \quad (3)$$

Рассмотрим варианты этой задачи:

- 1) устойчивый: $m_1 = 0,97$, $m_2 = 0,015$, $m_3 = 0,015$;
- 2) неустойчивый: $m_1 = 1$, $m_2 = 2$, $m_3 = 3$.

Результаты расчетов с шагом интегрирования $\Delta t = 0,01T = 0,01 \cdot 2\pi/\omega_0$ представлены на рис. 4–7.

В устойчивом варианте частицы остаются на стационарных траекториях на всем временном интервале $0 < t < 200T$. В расчетах Verlet наблюдается заметная фазовая ошибка. На момент времени $t = 200T$ отставание по углу от эталонного решения составляет $\sim \pi$ (см. рис. 4). В расчетах с использованием схемы RKN4 положение частиц после 200 периодов вращения с точностью до графического изображения совпадает с аналитическим решением. Суммарная ошибка положения частиц в указанном интервале не превысила 0,15 %; для схемы Verlet эта ошибка составила ~ 20 % (см. рис. 5).

В неустойчивом варианте задачи частицы уходят со стационарных траекторий в момент времени $t \approx 8T$. Отметим также, что с течением времени увеличиваются расхождения в расчетах, полученных по двум разностным схемам (см. рис. 6).

Точность расчетов RKN4 в интервале устойчивости увеличена по сравнению с расчетами Verlet примерно на три порядка (см. рис. 7).

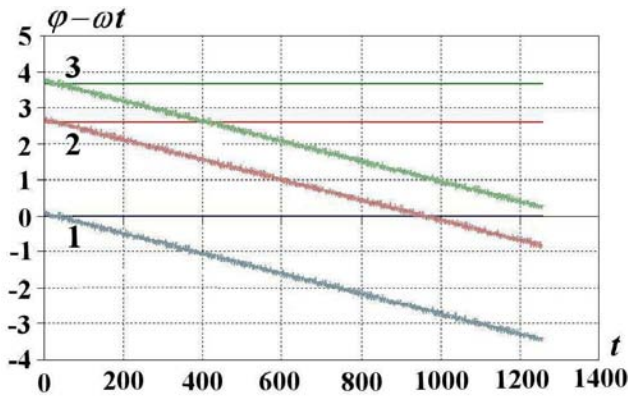


Рис. 4. Зависимость полярного угла частиц (1–3) от времени для устойчивого варианта задачи Лагранжа: — — RKN4; — — Verlet

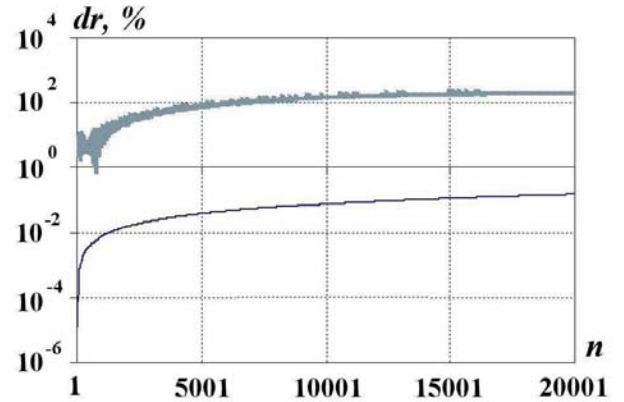


Рис. 5. Мера погрешности численного решения. Расчет устойчивого варианта задачи Лагранжа с шагом интегрирования $\Delta t = 0,01 \cdot 2\pi/\omega_0$: — — RKN4; — — Verlet

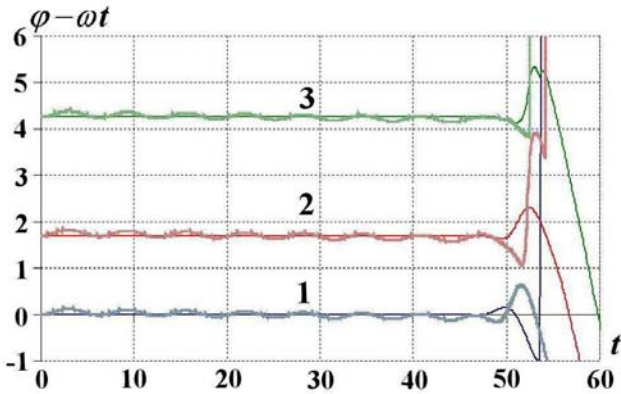


Рис. 6. Зависимость полярного угла частиц (1–3) от времени для неустойчивого варианта задачи Лагранжа: — — RKN4; — — Verlet

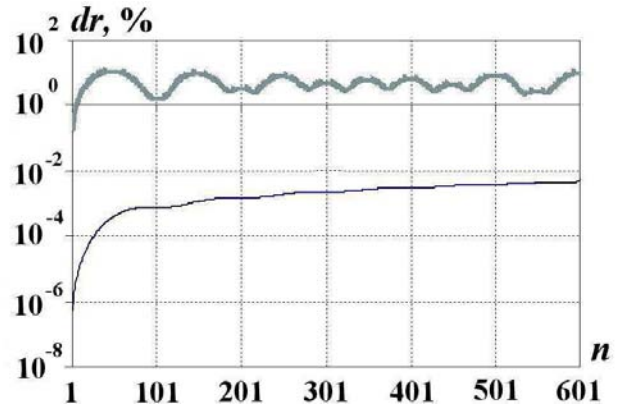


Рис. 7. Мера погрешности численного решения. Расчет неустойчивого варианта задачи Лагранжа с шагом интегрирования $\Delta t = 0,01 \cdot 2\pi/\omega_0$: — — RKN4; — — Verlet

3. Гомографическая задача трех тел

Начальные данные для гомографической задачи однозначно определяются заданием масс частиц m_i ($i = 1, 2, 3$) и эксцентриситета e траекторий:

$$(x_i, y_i) = (r_i \cos \varphi_i, r_i \sin \varphi_i); \quad (u_{xi}, u_{yi}) = (-r_i \sqrt{1+e} \sin \varphi_i, r_i \sqrt{1+e} \cos \varphi_i), \quad i = 1, 2, 3.$$

Как и в задаче Лагранжа, частицы расположены в вершинах равностороннего треугольника со стороной $l = \sqrt[3]{m_1 + m_2 + m_3}$. Координаты (r_i, φ_i) вычисляются по формулам (1), (2). Период обращения по орбитам для $e < 1$ равен $T = 2\pi (1 - e)^{-3/2}$. Для гомографических решений выполнен закон сохранения энергии для каждой частицы i :

$$E_i = \frac{m_i (u_{xi}^2 + u_{yi}^2)}{2} - \frac{m_i r_{0i}^3}{|\vec{r}_i|} = E_{0i} = \frac{m_i r_{0i}^2 (e - 1)}{2}$$

и для всей системы:

$$E = \sum_{i=1}^3 \left[\frac{m_i (u_{xi}^2 + u_{yi}^2)}{2} - \sum_{j \neq i} \frac{m_i m_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right] = \sum_{i=1}^3 E_{0i} = \frac{e-1}{2} \sum_{i=1}^3 m_i r_{0i}^2.$$

В полярной системе координат траектории частиц имеют вид

$$r_i(\varphi) = \frac{r_{0i}(1+e)}{1+e \cos(\varphi - \varphi_{0i})}, \quad i = 1, 2, 3.$$

Зависимость координат частиц от времени может быть представлена в параметрическом виде. Выпишем уравнения эллиптических ($e < 1$) и параболических ($e = 1$) траекторий:

– для эллиптических орбит ($e < 1$)

$$x_i(t) = \frac{r_{0i}(1 - e \cos \xi(t)) \cos \varphi_i(t)}{1 - e}; \quad y_i(t) = \frac{r_{0i}(1 - e \cos \xi(t)) \sin \varphi_i(t)}{1 - e},$$

$$\varphi_i(t) = \varphi_{0i} + \text{sign}(\sin \xi(t)) \arccos\left(\frac{\cos \xi(t) - e}{1 - e \cos \xi(t)}\right).$$

Функция $\xi(t)$ определяется из уравнения $\xi - e \sin(\xi) - (1 - e)^{3/2} t = 0$;

– для параболических орбит ($e = 1$)

$$x_i(t) = r_{0i}(1 + \eta(t)^2) \cos \varphi_i(t); \quad y_i(t) = r_{0i}(1 + \eta(t)^2) \sin \varphi_i(t);$$

$$\varphi_i(t) = \varphi_{0i} + \arccos\left(\frac{1 - \eta(t)^2}{1 + \eta(t)^2}\right); \quad \eta(t) = \left(\sqrt{1 + \frac{9t^2}{8}} - \frac{3t}{2\sqrt{2}}\right)^{1/3} - \left(\sqrt{1 + \frac{9t^2}{8}} + \frac{3t}{2\sqrt{2}}\right)^{1/3}.$$

В качестве начальных данных выберем массы частиц $m_1 = 1$, $m_2 = 2$, $m_3 = 3$ и два варианта орбит: $e = 0,75$ и $e = 1$. Для обоих вариантов шаг интегрирования полагался равным $\Delta t = 0,01T = 0,50265$, где T — период обращения по орбите с $e = 0,75$. Отметим, что в данной постановке задача является неустойчивой, так как для нее не выполнено условие Раусса (3).

Результаты расчетов эллиптических траекторий $e = 0,75$ представлены на рис. 8 (см. также цветную вкладку). Для гомографических решений частицы в каждый момент времени расположены в вершинах равностороннего треугольника. Как видим, это свойство выполняется и для численного решения. Отметим, что в расчетах Verlet частицы значительно отклоняются от стационарных траекторий. В то же время, в расчетах со схемой RKN4 положение частиц в интервале времени $t \lesssim 6T \simeq 300$ близко к аналитическому решению. При больших временах численное решение теряет устойчивость. Максимальный дисбаланс полной энергии во временном интервале, не выходящем за пределы устойчивости, уменьшен в расчетах RKN4 на несколько порядков (рис. 9).

Результаты расчетов параболических траекторий представлены на рис. 10 (см. также цветную вкладку). Весьма значительный дисбаланс схемы Verlet приводит к тому, что полученное по этой схеме численное решение соответствует гиперболическому типу орбит. Так как полная энергия системы для этого варианта траекторий равна нулю, то дисбаланс нормировался на начальную кинетическую энергию частиц (рис. 11).

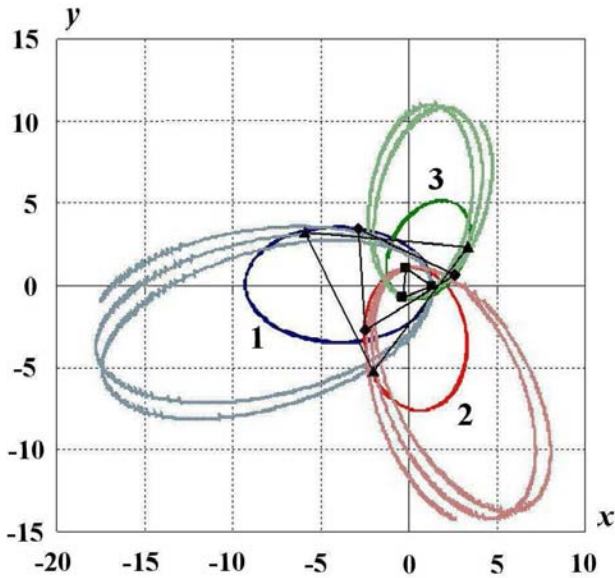


Рис. 8. Задача трех тел. Эллиптические траектории частиц (1–3) в интервале времени $0 < t < 6T$, $e = 0,75$: —◆— RKN4; —■— Verlet; маркерами отмечено положение частиц в моменты времени $t = 0; 5,03; 10,01$

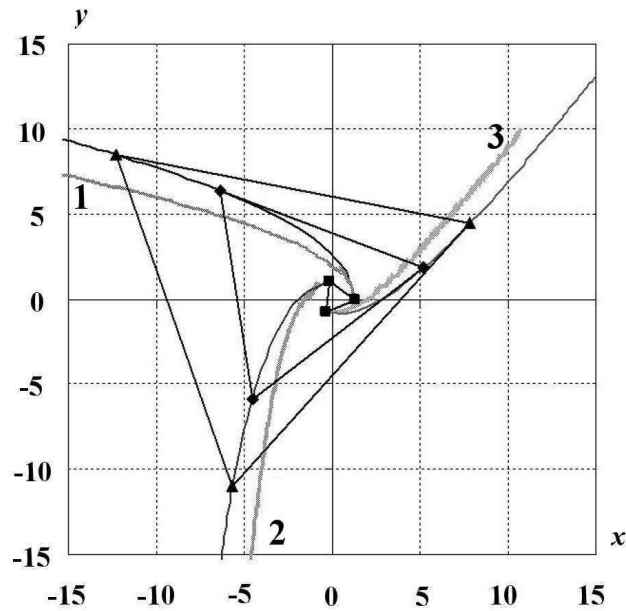


Рис. 10. Задача трех тел. Параболические траектории частиц (1–3) в интервале времени $0 < t < 25$, $e = 1$: —◆— RKN4; —■— Verlet; маркерами отмечено положение частиц в моменты времени $t = 0; 5,03; 10,01$

4. Гомографическая задача пяти тел

Для гомографической задачи пяти тел получить в явном виде решение нелинейной системы уравнений ([1], формула (11)) не представляется возможным. Начальные данные получены с использованием численного решения этой системы при заданных массах частиц $m_1 = 5$, $m_2 = 6$, $m_3 = 7$, $m_4 = 8$, $m_5 = 9$:

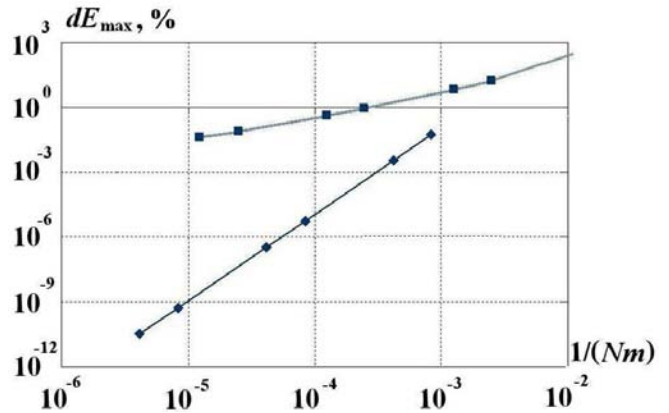


Рис. 9. Расчет эллиптических траекторий трех тел. Зависимость максимального (в интервале времени $0 < t < 4T$) дисбаланса полной энергии частиц от числа обращений к функции вычисления сил: —◆— RKN4; —■— Verlet (N — число шагов, m — количество стадий разностной схемы)

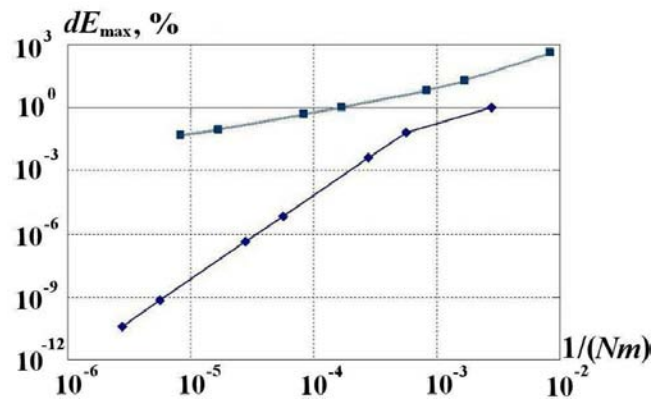


Рис. 11. Расчет параболических траекторий трех тел. Зависимость максимального (в интервале времени $0 < t < 50$) дисбаланса полной энергии частиц от числа обращений к функции вычисления сил: —◆— RKN4; —■— Verlet

$$\begin{aligned}
 (x_1, y_1) &= (1,653\ 168\ 149\ 232\ 52; -1,785\ 811\ 020\ 808\ 70); \\
 (x_2, y_2) &= (-2,603\ 123\ 828\ 153\ 07; -1,785\ 811\ 020\ 808\ 70); \\
 (x_3, y_3) &= (-1,118\ 723\ 159\ 839\ 59; -0,705\ 916\ 706\ 154\ 389); \\
 (x_4, y_4) &= (1,539\ 561\ 308\ 964\ 25; 2,366\ 306\ 680\ 768\ 69); \\
 (x_5, y_5) &= (0,318\ 608\ 207\ 768\ 776; 0,628\ 320\ 525\ 091\ 879); \\
 (u_{xi}, u_{yi}) &= (-y_i\sqrt{1+e}, x_i\sqrt{1+e}).
 \end{aligned}$$

Как и ранее, период обращения по орбитам для $e < 1$ равен $T = 2\pi(1-e)^{-3/2}$. В зависимости от начальных скоростей траектории (орбиты) точек являются эллипсами ($E < 0$), параболлами ($E = 0$) или гиперболами ($E > 0$).

Полная энергия всей системы

$$E = \sum_{i=1}^5 \left[\frac{m_i(u_{xi}^2 + u_{yi}^2)}{2} - \sum_{j \neq i} \frac{m_i m_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right] = \sum_{i=1}^5 E_{0i} = \frac{e-1}{2} \sum_{i=1}^5 m_i r_{0i}^2.$$

Задача решена для эллиптических орбит с $e = 0,75$. Шаг интегрирования полагался равным $\Delta t = 0,01T = 0,502\ 65$, где T — период обращения по орбите.

На рис. 12 (см. также цветную вкладку) представлены траектории движения частиц, полученные в расчетах со схемами Verlet и RKN4. В расчетах с RKN4 положение частиц в интервале устойчивости $t \lesssim T$ близко к аналитическому решению. Как и ранее, в расчетах Verlet частицы значительно отклоняются от стационарных траекторий. Данные о дисбалансе полной энергии также свидетельствуют о превосходстве схемы RKN4 (рис. 13).

Условия устойчивости для общей задачи пяти тел авторам не известны. Выяснилось, что диапазон устойчивости численного решения для данной задачи сузился и составил примерно один период (в отличие от задачи трех тел, где он составлял примерно шесть периодов).

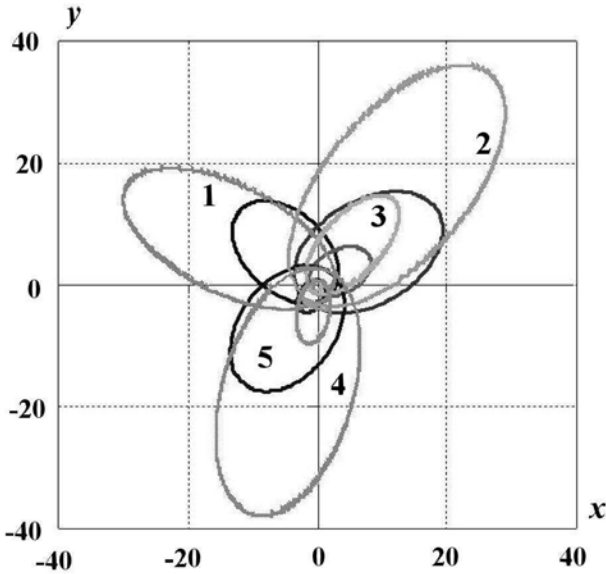


Рис. 12. Задача пяти тел. Эллиптические траектории частиц (1–5) в интервале времени $0 < t < T$; $e = 0,75$: — RKN4; - - Verlet

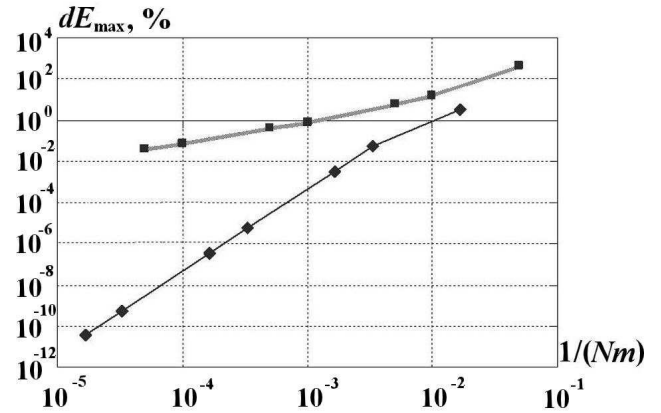


Рис. 13. Расчет эллиптических траекторий пяти тел. Зависимость максимального (в интервале времени $0 < t < T$) дисбаланса полной энергии частиц от числа обращений к функции вычисления сил: —◆— RKN4; - - Verlet

5. Движение частиц в центральном поле потенциала Морзе

Рассматривается движение двух частиц массой $m_1 = m_2 = m$ с потенциалом межчастичного взаимодействия Морзе:

$$U_M(r) = D \left[e^{-2\beta(r-a)} - 2e^{-\beta(r-a)} \right], \quad D, \beta, a = \text{const.}$$

В момент $t = 0$ задана скорость разлета частиц, направленная вдоль прямой линии, соединяющей эти частицы. Их начальное положение соответствует равновесному состоянию: $r_1 = 0,5a$; $r_2 = -0,5a$; $u_1 = u_0$, $u_2 = -u_0$. Значения параметров потенциала $\beta = 4$, $D = \frac{1}{4\beta^2} = 0,015625$ выбираем так, чтобы частота малых колебаний была равна единице: $\omega = 2\sqrt{\frac{D\beta^2}{m}} = 1$.

При $b = \sqrt{\frac{mu_0^2}{D}} < 1$ частицы колеблются около положения равновесия с периодом $T = \frac{\pi}{\beta} \sqrt{\frac{m}{D(1-b^2)}}$. Значению $b = 1$ соответствует режим разлета, при котором частицы останавливаются на бесконечности. Если начальная кинетическая энергия частиц больше размера потенциальной ямы ($b > 1$), то частицы разлетаются на бесконечность с конечной скоростью, отличной от нуля.

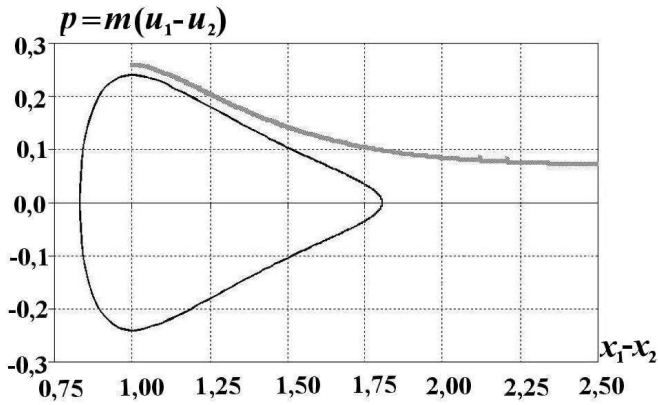


Рис. 14. Траектории относительного движения частиц на фазовой плоскости, $\Delta t = 0,01 \cdot 2\pi/\omega_0$: — — $u_0 = 0,12$; — — — $u_0 = 0,13$

Значению параметра $b = 1$ соответствует начальная скорость частиц $u_0 = b\sqrt{\frac{D}{m}} = \frac{1}{8} = 0,125$.

На рис. 14 представлены результаты расчетов для двух режимов движения частиц с замкнутой ($u_0 = 0,12$, $b = 0,96$) и расходящейся ($u_0 = 0,13$, $b = 1,04$) траекториями на фазовой плоскости. Использование схемы RKN4 позволяет уменьшить меру погрешности по сравнению со схемой Verlet примерно на три порядка (рис. 15, 16).

Значению параметра $b = 1$ соответствует начальная скорость частиц $u_0 = b\sqrt{\frac{D}{m}} = \frac{1}{8} = 0,125$. На рис. 14 представлены результаты расчетов для двух режимов движения частиц с замкнутой ($u_0 = 0,12$, $b = 0,96$) и расходящейся ($u_0 = 0,13$, $b = 1,04$) траекториями на фазовой плоскости. Использование схемы RKN4 позволяет уменьшить меру погрешности по сравнению со схемой Verlet примерно на три порядка (рис. 15, 16).

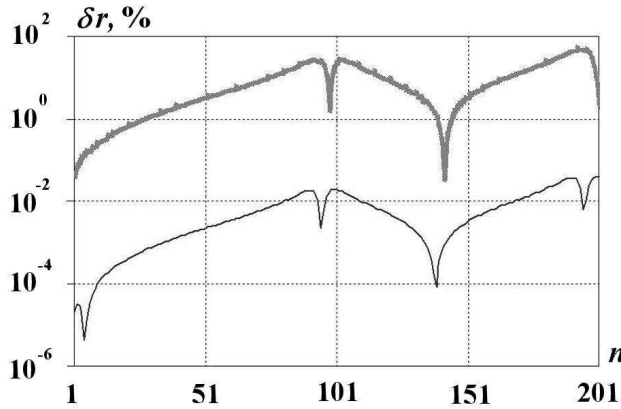


Рис. 15. Мера погрешности численного решения при $b = 0,96$, $\Delta t = 0,01T$: — — — RKN4; — — — Verlet

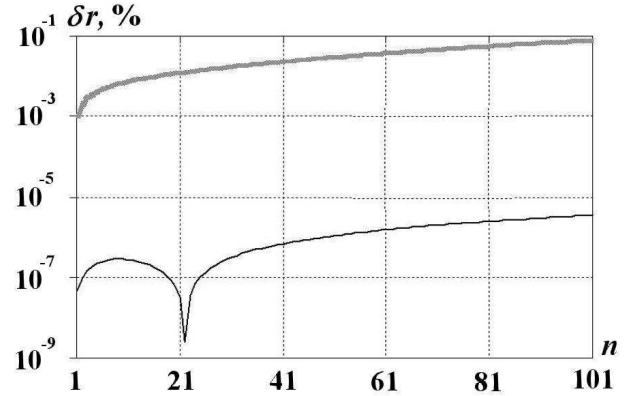


Рис. 16. Мера погрешности численного решения при $b = 1,04$, $\Delta t = 0,01 \cdot 2\pi/\omega_0$: — — — RKN4; — — — Verlet

6. Движение частицы в поле сил модифицированного потенциала Морзе

Модифицированный потенциал Морзе не является центральным, так как зависит не только от расстояния между частицами, но и от полярного угла:

$$U_{MM}(r, \varphi) = U_M(r) \theta(\varphi), \quad U_M(r) = D [e^{-2\beta(r-a)} - 2e^{-\beta(r-a)}], \quad \theta(\varphi) = d + b \cos^2 \varphi, \quad (4)$$

$$d, b \in R, \quad d \geq 0, \quad b > 0, \quad d + b = 1.$$

В двух частных случаях (движение вдоль лучей и движение по окружности) решение задачи о движении частицы в поле потенциала $U_{MМ}(r, \varphi)$ может быть представлено в элементарных функциях.

6.1. Движение частицы вдоль лучей покоя модифицированного потенциала Морзе. Пусть $d = 0, b = 1$. В этом случае в поле модифицированного потенциала Морзе существуют два луча покоя: $\varphi = \pi/2$ и $\varphi = 3\pi/2$. На этих лучах сила, действующая на частицу, равна нулю: $F = -\text{grad } U = 0$. Если в начальный момент времени угловая координата принимает значение $\varphi = \pi/2$ или $\varphi = 3\pi/2$, а скорость направлена вдоль этого луча, то частица движется по инерции:

$$\begin{aligned} x(t) &= x(0) + tu_x(0); & y(t) &= y(0) + tu_y(0); \\ u(t) &= u_x(0) = U_0 \cos \varphi; & u_y(t) &= u_y(0) = U_0 \sin \varphi; & \varphi &= \pi/2, 3\pi/2. \end{aligned}$$

Расчеты по схемам Verlet и RKN4 не выявили признаков неустойчивости при движении частицы вдоль лучей покоя.

6.2. Круговое движение частицы. Параметры модифицированного потенциала Морзе: $D = 1, a = 1, \beta = 4, d = 0, b = 1$. Начальные данные:

$$x_0 = r_0 \cos \varphi_0; \quad y_0 = r_0 \sin \varphi_0; \quad u_{x0} = -r_0 \omega \sin \varphi_0; \quad u_{y0} = r_0 \omega \cos \varphi_0.$$

Здесь $\varphi_0 = 0$, параметры $\omega = \sqrt{-\frac{2U_M(r_0)}{r_0^2} \theta(\varphi_0)} = 1,240\,132\,348$, $r_0 = 1,088\,508\,355$ определены из уравнений (14) работы [1]. Решение задачи представлено в [1, разд. 3]:

$$r(t) = r_0; \quad \varphi(t) = \arcsin(\text{th}(\omega t)).$$

Согласно аналитическому решению траекторией движения частицы является четверть окружности — частица, стремясь к точке $(r_0, \pi/2)$, никогда не достигает ее:

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \varphi(t) = \pi/2.$$

Расчетные траектории частицы изображены на рис. 17, 18 (см. также цветную вкладку). Точки $(r_0, \pm\pi/2)$ являются точками неустойчивого равновесия для потенциала $U_{MМ}(r, \varphi)$ (4). Этим объясняется поведение численного решения: после продолжительного нахождения на очередной полочке $\varphi = \pi/2, \varphi = 3\pi/2$, или $\varphi = 5\pi/2$ траектория уходит на следующую ветвь решения, расположенную в соседней полуплоскости. При уменьшении шага интегрирования частица пересекает границу $\varphi = \pi/2$ в более поздний момент времени. В расчетах Verlet частица после пересечения линии $\varphi = \pi/2$ остается в левой полуплоскости (см. рис. 17, 18).

Потенциальная энергия частицы обращается в нуль на лучах $\varphi = \pm\pi/2$, поэтому отсутствие дисбаланса гарантирует невозможность пересечения частицей этих лучей. Таким образом, точность расчета напрямую зависит от выполнения

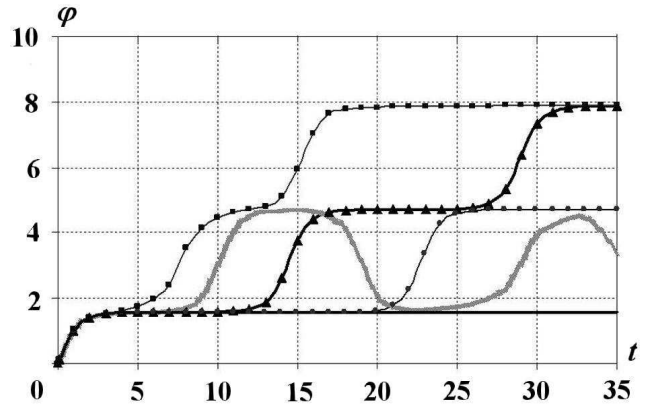


Рис. 17. Зависимость полярного угла частицы от времени при ее круговом движении: —▲— RKN4, $dt = 0,1$; —●— RKN4, $dt = 0,01$; —■— Verlet, $dt = 0,1$; —■— Verlet, $dt = 0,01$; — — аналитическое решение

в разностном решении закона сохранения энергии. Максимальный дисбаланс полной энергии уменьшен в расчетах RKN4 на несколько порядков (рис. 19). Так как полная энергия частицы при ее круговом движении равна нулю, то дисбаланс нормировался на начальную кинетическую энергию.

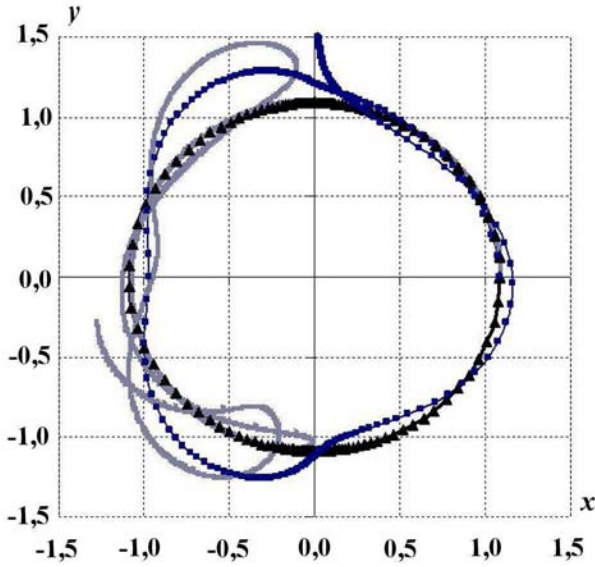


Рис. 18. Траектория кругового движения частицы в поле сил модифицированного потенциала Морзе: —▲— RKN4, $dt = 0,1$; —■— Verlet, $dt = 0,1$; — Verlet, $dt = 0,01$

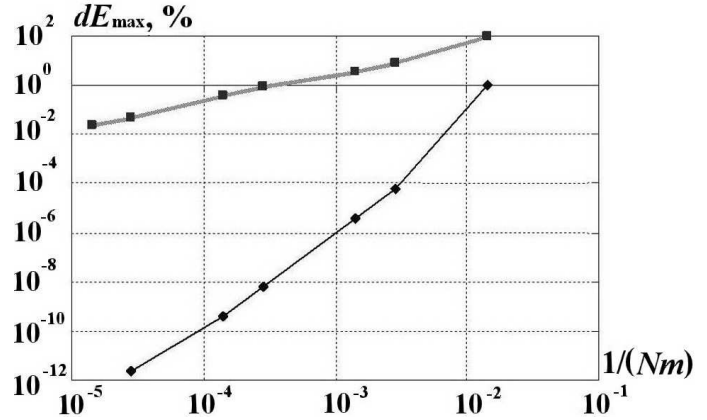


Рис. 19. Расчет круговой траектории. Зависимость максимального (в интервале времени $0 < t < 35$) дисбаланса полной энергии частицы от числа обращений к функции вычисления сил: —◆— RKN4; —■— Verlet

7. Движение системы тел, взаимодействие которых описывается потенциалом Леннарда-Джонса

Тест о пространственном движении семи частиц предложен в [3]. Рассматривается потенциал типа Леннарда-Джонса:

$$U_{LD}(r) = U_0 \frac{nm}{n-m} \left[\frac{1}{n} \left(\frac{r_0}{r} \right)^n - \frac{1}{m} \left(\frac{r_0}{r} \right)^m \right], \quad n, m = \text{const}, \quad U_0 = \text{const}, \quad r_0 = \text{const}.$$

В момент времени $t = 0$ первая частица ($i = 1$) расположена в центре системы координат: $\vec{r}_1 = (0, 0, 0)$. Остальные шесть находятся на координатных осях на одинаковом расстоянии от центра:

$$\begin{aligned} \vec{r}_2 &= (0, 75r_0, 0, 0); & \vec{r}_3 &= (-0, 75r_0, 0, 0); & \vec{r}_4 &= (0, 0, 75r_0, 0); \\ \vec{r}_5 &= (0, -0, 75r_0, 0); & \vec{r}_6 &= (0, 0, 0, 75r_0); & \vec{r}_7 &= (0, 0, 0, -0, 75r_0). \end{aligned}$$

Начальные скорости всех частиц равны нулю. В последующие моменты времени центральная частица остается неподвижной; другие шесть движутся вдоль координатных осей так, что все они оказываются удаленными на одинаковое расстояние от начала координат. Для частного случая ($n = 2, m = 1, U_0 = 1$) получено [3] точное решение (в элементарных функциях):

$$\begin{aligned} \frac{r}{r_0} + \frac{\alpha}{2} &= -\beta \cos \left(\frac{2}{\alpha} \left[\sqrt{\beta^2 - \left(\frac{r}{r_0} + \frac{\alpha}{2} \right)^2} + \sqrt{-\frac{H_{07}}{2}t} \right] \right), \\ H_{07} &= \frac{2 - 12\sqrt{2}}{9}, \quad \alpha = \frac{5 + 4\sqrt{2}}{4H_{07}}, \quad \beta = \sqrt{\left(\frac{\alpha}{2} \right)^2 + \frac{17}{16H_{07}}}. \end{aligned} \quad (5)$$

Период колебаний $T = 2\pi \left(-\frac{\alpha}{\sqrt{-2H_{07}}} \right)$, амплитуда $r_{\min} = r_0 \left(-\frac{\alpha}{2} - \beta \right) = 0,75r_0$, $r_{\max} = r_0 \left(-\frac{\alpha}{2} + \beta \right)$. Полученные в расчетах RKN4 и Verlet ($\Delta t = 0,01T$) (r, t) -диаграммы движения частиц, $i = 2, 3, \dots, 7$, с точностью до графического изображения совпадают между собой и с аналитическим решением (5). По сравнению с расчетами Verlet дисбаланс полной энергии в расчетах RKN4 уменьшен примерно на четыре порядка (рис. 20).

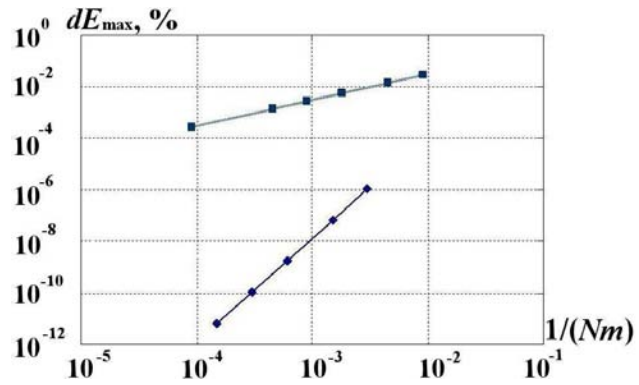


Рис. 20. Расчет пространственного движения семи частиц. Зависимость максимального (в интервале времени $0 < t < 2T$) дисбаланса полной энергии частиц от числа обращений к функции вычисления сил: —◆— — RKN4; —■— — Verlet

Выводы

1. Проведены расчеты тестовых задач для потенциалов Ньютона, Морзе и Леннарда-Джонса, позволившие оценить точность разностных схем RKN4 и Verlet и выяснить особенности поведения этих схем и численных решений в случае нарушения условий устойчивости аналитических решений.
2. Тестовые расчеты показали существенное превосходство схемы RKN4 по сравнению с широко используемой в расчетах молекулярной динамики схемой Verlet.

Список литературы

1. Шемарулин В. Е., Софронов В. Н., Мокина К. С. Разностные схемы молекулярной динамики. Система двумерных тестов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып. 3. С. 3—15.
2. Софронов В. Н., Мокина К. С., Шемарулин В. Е. Разностные схемы молекулярной динамики. 1. Сравнительный анализ устойчивости, точности и экономичности // Там же. Вып. 2. С. 18—32.
3. Алейников А. Ю., Барабанов Р. А., Бутнев О. И. и др. Программа МДП-СОВЦ решения задач молекулярной динамики на параллельных ЭВМ с распределенной памятью // Там же. 2001. Вып. 1. С. 3—13.

Статья поступила в редакцию 09.11.10.

УДК 519.6

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС "МОЛОХ" ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛАХ

Ф. А. Сапожников, Г. В. Ионов, В. В. Дрёмов
(РФЯЦ-ВНИИТФ)

В течение последних десяти лет в РФЯЦ-ВНИИТФ разрабатывается программа "Молох", используемая для проведения *параллельных* расчетов на суперкомпьютерах методом классической молекулярной динамики с высоким коэффициентом распараллеливания. Был разработан набор тестов для анализа эффективности реализованных алгоритмов. Он может быть использован для сравнения различных молекулярно-динамических комплексов.

Ключевые слова: молекулярная динамика, список соседей, кристаллическая структура, эффективность распараллеливания.

Введение

Теоретическое и экспериментальное исследование свойств плотного вещества является одним из основных направлений научной работы РФЯЦ-ВНИИТФ. Метод молекулярной динамики (МД) является новым методом исследований в области материаловедения. Современные суперкомпьютеры позволяют напрямую моделировать совместные эффекты в образцах, состоящих из миллиардов атомов, что дает возможность моделировать на атомистическом уровне различные процессы: поведение материала при динамическом нагружении, радиационные повреждения, влияние дефектов и легирующих добавок на механические свойства материала, старение актинидов.

В течение последних десяти лет в РФЯЦ-ВНИИТФ разрабатывается программа "Молох". Это программа для проведения расчетов на суперкомпьютерах в режиме распараллеливания (*параллельных* расчетов). Использование современных средств программирования позволило достичь очень высокой эффективности. В программе реализованы практически все необходимые для моделирования средства: построение потенциалов для различных материалов, моделирование различных процессов в произвольной трехмерной геометрии, автоматический анализ результатов.

Был разработан набор тестов для анализа эффективности использованных алгоритмов. Он может быть использован для сравнения между собой комплексов с разными способами реализации МД.

Проблемы моделирования близкодействия методом МД

Для моделирования близкодействия методом МД необходимо решить ряд задач, в том числе разработать и реализовать алгоритм поиска соседних атомов в пределах заданного радиуса и методы разбиения моделируемого образца для параллельного счета. От успешного решения этих задач зависит гибкость программы.

Поиск соседей в пределах заданного радиуса. Для быстрого расчета энергии взаимодействия атома с другими атомами образца в МД был введен *радиус обрезания взаимодействия*, т. е. считается, что с атомами, выходящими за окружность этого радиуса, данный атом не взаимодействует.

Один из подходов к организации счета МД связан с построением списка соседей для каждого атома, для чего необходимо быстро определить атомы, находящиеся в пределах радиуса обрезания. С этой целью в мире широко исполь-

зуется так называемый метод Link Cell (LCM) как самый простой в реализации и достаточно быстрый при выполнении. В программном комплексе "Молох" был реализован оригинальный алгоритм поиска атомов в заданном радиусе — метод упорядоченного пространства (OSM).

Метод LCM делит пространство с атомами на кубические элементы с постоянной длиной ребра, равной радиусу обрезания (или меньше), и распределяет все атомы по этим кубикам (слева на рис. 1, см. также цветную вкладку). Соседние атомы располагаются в 27 ближайших кубиках. Метод легко реализуется и работает быстро, но его основной недостаток — проблемы с памятью, которой не хватает для увеличивающегося образца (рис. 2, см. также цветную вкладку).

Этот недостаток порождается бесспорным преимуществом метода LCM — постоянной длиной ребра. Разрабатывая новый метод поиска, было решено отказаться от константной длины ребра кубика. Но это приводит к существенному усложнению процедуры поиска кандидатов в соседи данного атома.

Метод OSM делит пространство на области с приближенно равными концентрациями атомов (справа на рис. 1, см. также цветную вкладку), чтобы не зависеть от размера образца. Этот метод работает медленнее, чем LCM, на 15 % для потенциалов типа Леннарда-Джонса (для ГЦК-решетки при радиусе обрезания 10 \AA получим ~ 140 соседей) и на 30 % для потенциалов типа ММПА (для ГЦК-решетки при радиусе обрезания 4 \AA получим ~ 14 соседей), но он никогда не дает сбоя.

Метод распараллеливания. Существует несколько подходов к распараллеливанию МД: по силам, по атомам, по пространству. Как было показано в [1], распараллеливание по простран-

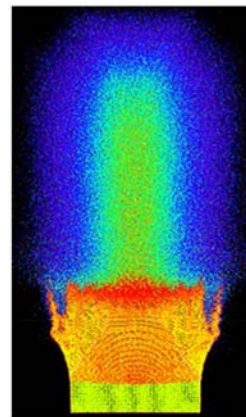


Рис. 2. Контрольный образец (детонация цилиндра из ТАТЬ-подобного ВВ)

ству является наиболее эффективным при большом количестве атомов и процессоров.

В "Молохе" использована иерархическая пространственная декомпозиция (рис. 3), что позволяет с высокой точностью определять *зоны ответственности* процессоров в зависимости от локальной концентрации атомов. Это также позволяет проводить эффективную динамическую балансировку счетной нагрузки на процессоры с локальным изменением этих зон, которая производится вместе с обменом атомами и может запускаться как на каждом шаге, так и по условию превышения порога дисбаланса.

Алгоритм построения зон состоит из нескольких этапов (см. рис. 3):

1. Разрезаем образец вдоль оси X на равные по концентрации атомов слои.
2. Разрезаем каждый слой в отдельности, независимо от других, вдоль оси Y на равные по концентрации атомов бруски.
3. Разрезаем каждый брусок в отдельности, независимо от других, вдоль оси Z на равные по концентрации атомов зоны.



Рис. 1. Примеры систем и способов построения списка соседей

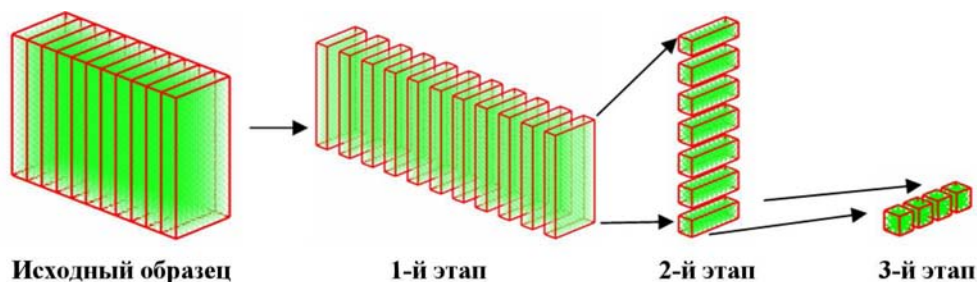


Рис. 3. Иерархическая пространственная декомпозиция

Каждому процессору присваивается своя зона контроля пространства с атомами (или без них, такое может произойти при высокой скорости потока атомов, когда балансировка просто не успевает изменить зоны).

Программный комплекс "Молох"

Любой МД-расчет подразумевает три стадии: построение образца, МД-моделирование, обработка полученных данных. Получение *физически неадекватных* результатов хотя бы на одной из этих стадий ставит под вопрос правильность всего расчета. В программном комплексе "Молох" реализованы эффективные алгоритмы, позволяющие получать достоверные результаты.

Построение образца. Для получения физически правдоподобных образцов в "Молохе" реализован строитель моно- и поликристаллов методом ячеек Вороного (рис. 4, *а*, см. также цветную вкладку). Есть возможность внедрить примеси и дефекты. Существует специальная библиотека предварительно насчитанных дефектов, таких как, например, пузырек гелия в решетке плутония (рис. 4, *б*), петлевая дислокация (рис. 4, *в*). Применяется наложение условий сложной геометрии: полуплоскость,

сфера, цилиндр, прямоугольный параллелепипед (рис. 4, *г*).

Проведение расчетов.

Потенциалы. В "Молохе" реализованы следующие широко известные потенциалы: Леннарда-Джонса, EXP-6, МПА, ММПА, Brenner REBO 2002, AIREBO, *молекулярно-механическое силовое поле* (рис. 5). Непосредственно авторами были разработаны потенциалы GEAM (Generalized Embeded Atom Model) для моделирования материалов со сложной электронной структурой, Modified REBO ABCD — модифицированный REBO с добавлением дальнего действия (до 8 \AA) для расчета модельной взрывчатки из четырех типов атомов (параметризация для ТАТБ) [2].

Для улучшения параметров существующих потенциалов и подбора параметров для новых потенциалов в "Молохе" реализован *параллельный генетический* алгоритм, который минимизирует ошибку описания потенциалом заданных экспериментальных или рассчитанных данных.

"Молох" написан на языке C++, что позволяет с легкостью добавлять новые потенциалы при минимальном изменении существующего кода.

Моделирование. Моделирование можно производить в NVE-, NVT-, NPT-ансамблях с ис-

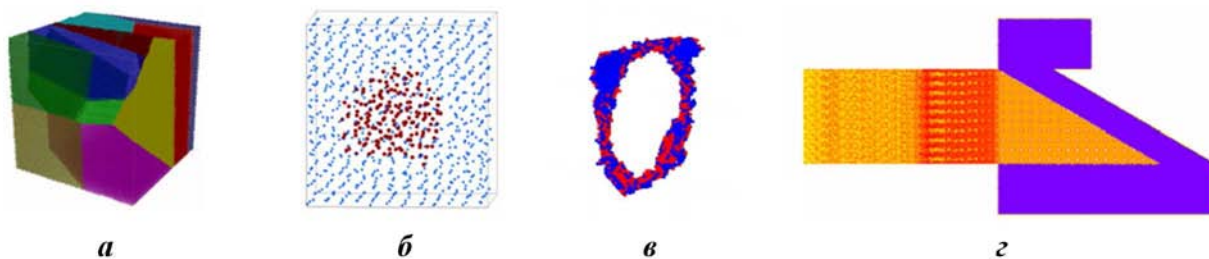


Рис. 4. Построение образца: *а* — поликристалл; *б* — пузырек гелия; *в* — петлевая дислокация; *г* — сложная геометрия

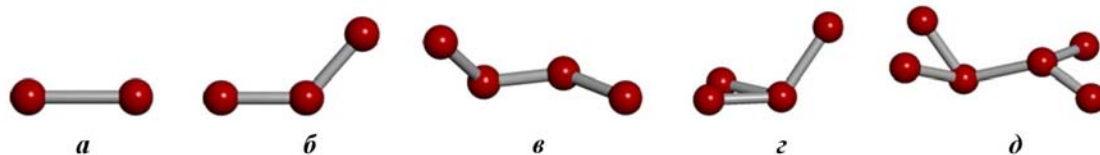


Рис. 5. Элементы молекулярно-механического поля: *a* — ковалентная связь; *b* — валентный угол; *в* — торсионный угол; *г* — хиральный угол; *д* — двойной хиральный угол

пользованием нескольких потенциалов одновременно, с варьированием шага по времени. Реализовано наложение сложных движущихся геометрических ограничений (движущийся схлопывающийся сферический поршень).

Автоматизация расчетов. Были автоматизированы процедуры расчета фоновых дисперсионных кривых и DOS при желаемой температуре (рис. 6, *a*), упругих модулей (рис. 6, *б*, см. также цветную вкладку), ударной адиабаты (методом гюгониостата), изотермы, холодной кривой, псевдоизэнтропы.

Анализ результатов. В "Молохе" реализованы построение трехмерных сеток макроскопических характеристик (температура, давление, плотность), определение ковалентных связей и химического состава образца (например, при моделировании испарения нанокластера углерода), а также автоматическое распознавание структур.

После анализа существующих алгоритмов определения кристаллической структуры (центральной симметрии [3], общих соседей [4], распределений углов [5]) и определения области их применимости авторами статьи было принято решение разработать собственный алгоритм автоматического распознавания кристаллической

структуры и дефектов в образце — *метод адаптивного шаблона* (МАШ) [6]. Он определяет такие решетки, как ОЦК, ГЦК, ГПУ, алмазную, листы Графена (легко добавить и другие структуры) и восстанавливает вакансии, идентифицирует междоузлия и разделенные междоузлия, дислокации и дефекты упаковки. МАШ не имеет подстраиваемых параметров и мало чувствителен к температурному разупорядочению.

Эффективность распараллеливания. Динамическая балансировка счетной нагрузки на процессоры (обычно производится при дисбалансе выше 5%) позволяет добиться высокой эффективности распараллеливания даже на задачах неравновесной МД.

На рис. 7, *a* показан результат выполнения на 64 процессорах теста на *умножение* образца. Расчет проводился для монокристалла меди, $240 \times 25 \times 25$ периодов решетки (600 000 атомов), в периодике по направлениям *Y* и *Z*. Рассчитывалось столкновение $1/3$ образца с $2/3$ образца (по *X*) со скоростью $V = 1000$ м/с. Умножения образца производились по направлениям *Y* и *Z* ($240 \times 25 \times 50$, $240 \times 50 \times 50$, $240 \times 50 \times 100$, $240 \times 100 \times 100$).

На рис. 7, *б* показан результат теста на *деление* образца для монокристалла меди, $120 \times 70 \times 70$ периодов решетки (2 352 000 атомов), в периоди-

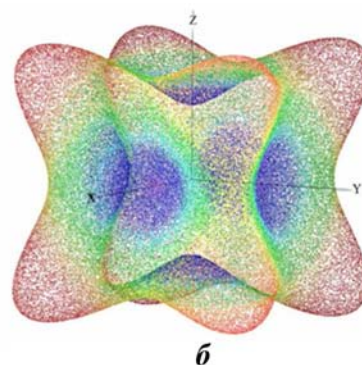
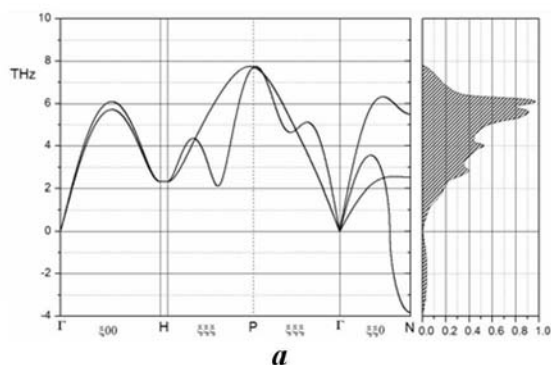


Рис. 6. Результаты выполнения процедур автоматизации расчетов: *a* — фоновые дисперсионные кривые и DOS; *б* — угловая зависимость модуля Юнга для ОЦК-решетки меди

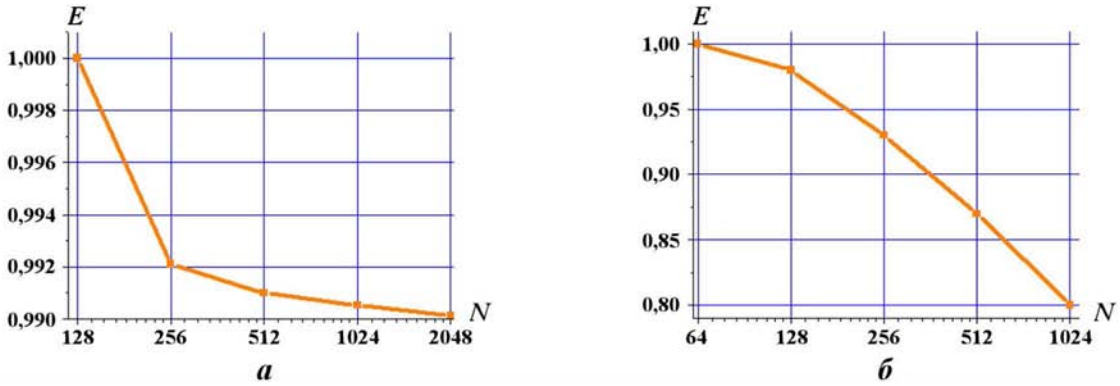


Рис. 7. Эффективность распараллеливания E в тестах на умножение (а) и деление (б) образца; N — количество процессоров

ке по направлениям Y и Z , при столкновении $1/3$ образца с $2/3$ образца (по X) со скоростью $V = 1000$ м/с.

В обоих тестах наблюдается высокая эффективность распараллеливания (дисбаланс меньше 5%) даже на сильно неравновесной задаче.

Система тестов МД-комплексов

Существует множество тестов для оценки физической адекватности результатов, получаемых с помощью МД-комплексов, однако необходимо иметь тесты, оценивающие программную эффективность как конкретных алгоритмов, так и всего подхода при реализации МД в данном комплексе. Далее будут приведены тесты, направленные на оценку таких важных алгоритмов, как динамическая балансировка, расчет многопотенциальной задачи и построение списка соседей.

В "Молохе" балансировка счетной нагрузки на процессоры осуществляется по сумме времени построения списка соседей и времени вычисления энергии и сил. Дисбаланс D вычисляется по следующей формуле:

$$D = \frac{\max\{t_i\} - \min\{t_i\}}{\langle t_i \rangle},$$

где $t_i = t_i^{cc} + t_i^{sc}$ — суммарное время использования i -го процессора; t_i^{cc} — время построения списка соседей на i -м процессоре, t_i^{sc} — время вычисления энергии и сил на i -м процессоре; $\langle t_i \rangle$ — среднее значение t_i .

Тест 1 ("Death Star"). Данный тест направлен на оценку эффективности реализованной в МД-комплексе динамической балансировки счетной нагрузки на процессоры (если она вообще есть), которая не должна зависеть от осевых направлений течений атомов. В данной задаче полностью реализуется трехмерная деформация тонкой оболочки (рис. 8, см. также цветную вкладку). Динамическая балансировка крайне необходима при моделировании физических процессов, приводящих к большим высокоскоростным деформациям, — ударного нагружения различных материалов. Значительные трехмерные деформации приводят к потокам атомов, которые сложно распределить между процессорами без нарушения баланса.

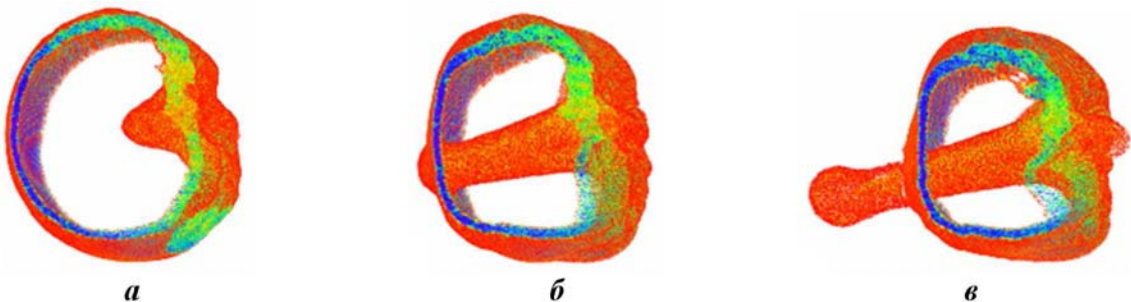


Рис. 8. Срез оболочки $R_{big} = 722 \text{ \AA}$ на разные моменты времени: а — $t = 15$ пс; б — $t = 30$ пс; в — $t = 45$ пс

Тестируемый образец — оболочка с центром в начале координат, внешним и внутренним радиусами R_{big} и $R_{small} = 0,95R_{big}$ соответственно — вырезается из монокристалла меди (ЕАМ [7]) (рис. 9, а). Скорость каждого атома вычисляется по формуле

$$v = V_{max} e^{-\arccos(\cos \theta \cos \theta_0 + \sin \theta \sin \theta_0 \cos(\varphi - \varphi_0))}, \quad (1)$$

где $V_{max} = 3000$ м/с — максимальная скорость, и направлена к центру оболочки (рис. 9, б, см. также цветную вкладку).

Сферические координаты выделенного направления нагружения: $\varphi_0 = \pi/6$; $\theta_0 = \pi/3$. Сферические координаты атома: $\varphi = \text{atan2}(y/R_{big}, x/R_{big})$, $\theta = \arccos(z/R_{big})$, где x, y, z — его декартовы координаты (atan2 — функция математической библиотеки C++).

Контрольный образец — куб с ребром $L = 0,995 \sqrt[3]{(R_{big}^3 - R_{small}^3)} 4\pi/3$ — вырезается из монокристалла меди (рис. 9, в) с начальной температурой 300 К. Он имеет почти такое же количество атомов, что и тестируемая оболочка.

При расчете задавались свободные граничные условия, шаг по времени 1,5 фс. Считалось 30 000 шагов.

Отношение μ полного времени счета тестируемого образца к полному времени счета контрольного образца должно быть близко к единице. Значительное увеличение данного отношения говорит о низкой эффективности балансировки.

В результате расчетов по программному комплексу "Молох" получено:

- 1) для $R_{big} = 361 \text{ \AA}$ (100 периодов решетки, 2,39 млн. атомов) на 128 процессорах $\mu = 0,95$. Средний дисбаланс при счете обо-

лочки составил 4,6 %, при счете кубика — 4,3 %;

- 2) для $R_{big} = 722 \text{ \AA}$ (200 периодов решетки, 19 млн. атомов) на 1024 процессорах $\mu = 1,1$. Средний дисбаланс при счете оболочки составил 15 %, при счете кубика — 7 %.

Тест 2 ("Cocktail B-52"). Данный тест направлен на оценку эффективности реализованного в МД-комплексе счета с несколькими потенциалами, имеющими сильно различающийся радиус обрезания: МЕАМ (3,5 Å) и LJ (10 Å). Данная ситуация возникает при моделировании неустойчивости границы между двумя средами.

При этом время трехатомных взаимодействий, рассчитываемых с использованием потенциала МЕАМ, сильно зависит от радиуса обрезания, что может привести к замедлению расчета в несколько раз на простом поиске среди ненужных для этого потенциала троек атомов.

Тестируемый образец — брусок, состоящий из кубиков, сделанных из Ве (МЕАМ [8]) и Аг (потенциал Леннарда-Джонса с $\sigma = 3,4^{-10}$, $\epsilon = 1,7^{-21}$) (рис. 10, а), с начальной температурой 300 К. Взаимодействие Ве—Аг игнорируется.

Контрольный образец — каждый из кубиков в отдельности (рис. 10, б, в).

При расчете задавались свободные граничные условия, шаг по времени 1,5 фс. Считалось 1000 шагов.

Отношение μ полного времени счета тестируемого образца к сумме полных времен счета контрольных образцов Ве и Аг должно быть близко к единице. Значительное увеличение данного отношения говорит о низкой эффективности реализации счета.

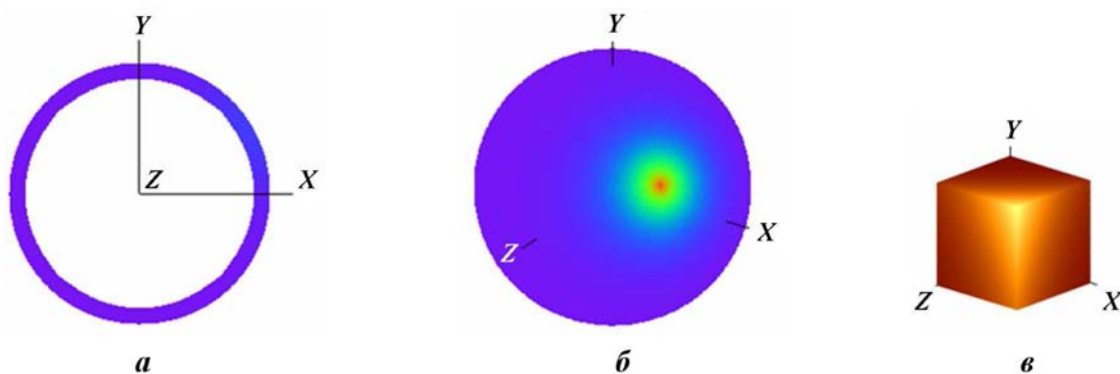


Рис. 9. Тест 1: а — продольный срез тестируемой оболочки; б — раскраска оболочки по кинетической энергии атомов; в — контрольный образец

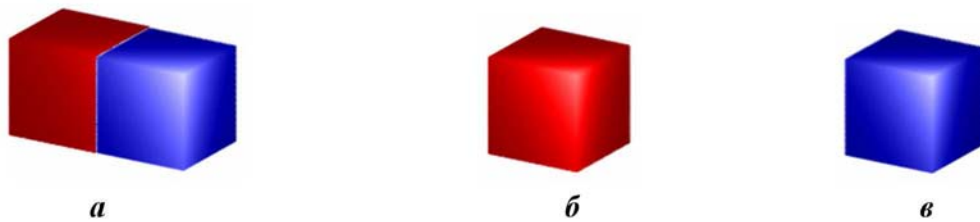


Рис. 10. Тест 2: *a* — тестируемый образец; *b* — контрольный бериллиевый куб; *v* — контрольный аргоновый куб

В результате расчетов получено:

- 1) для $L = 200 \text{ \AA}$ (988 130 атомов Be, 376 785 атомов Ar) на 128 процессорах $\mu = 1,8$. Средний дисбаланс при счете тестируемого образца составил 5 %, при счете кубиков Be и Ar — соответственно 6,8 % и 10 %;
- 2) для $L = 400 \text{ \AA}$ (7901 960 атомов Be, 2997 722 атомов Ar) на 1024 процессорах $\mu = 1,7$. Средний дисбаланс при счете тестируемого образца составил 7,8 %, при счете кубиков Be и Ar — соответственно 9 % и 16 %.

По мнению авторов, $\mu \sim 1,7$ — это хороший результат, добиться которого удалось введением сортировки списка соседей по возрастанию расстояния до них для каждого атома в отдельности. Это позволяет для близких взаимодействий (MEAM) полностью прекращать рассмотрение соседей при достижении предельного радиуса, на котором количество соседей менее 10, что на порядок меньше полного количества соседей. Время, затраченное на сортировку, приводит к замедлению расчета менее чем в 2 раза, тогда как время счета потенциала увеличилось менее чем на 1 %, что и требовалось.

Тест 3 ("Supernova"). Данный тест направлен на оценку возможности счета с использованием МД-комплекса разлетающихся образ-

цов. При моделировании детонации, например при расчете критического диаметра, возникают ситуации, когда концентрация частиц становится сильно неоднородной, а линейные размеры образца увеличиваются на несколько порядков. Даже в такой ситуации необходимо провести безотказный расчет без остановки на действия, связанные с *ручной* перестройкой данных в программе.

Проблема, которую при этом требуется решить: во время построения списка соседей с помощью методов LCL с константной длиной ребра (радиус обрезания) может возникнуть переполнение памяти для больших пористых образцов.

Тестируемый образец — медный (EAM [7]) шар, атомы которого имеют начальную скорость 1000 м/с, направленную из центра наружу.

Расчет проводился со свободными граничными условиями, шаг по времени задавался равным 1,5 фс. Считалось 200 000 шагов. Цель расчета заключалась в том, чтобы получить результат с сохранением энергии, избежав сообщения об ошибке.

Тест был пройден на образце $R = 200 \text{ \AA}$ (2,85 млн. атомов) на 128 процессорах без остановок. Средний дисбаланс за весь расчет составил 10 %. Объем образца увеличился в 224 140 раз (рис. 11, см. также цветную вкладку).

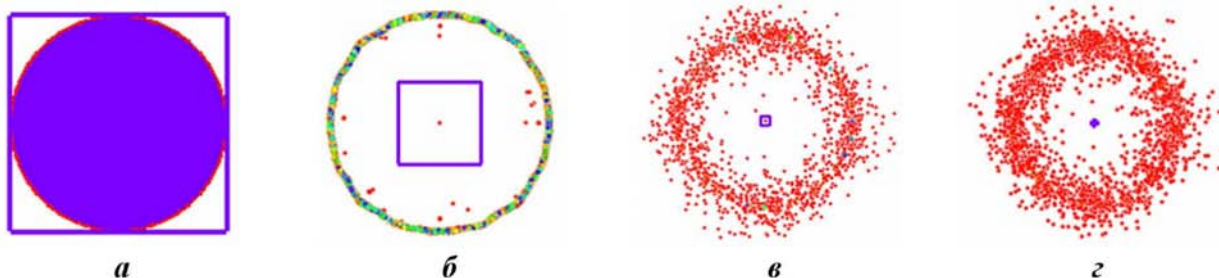


Рис. 11. Тест 3. Продольный срез образца (разные масштабы) на разные моменты времени: *a* — $t = 0$ пс; *b* — $t = 15$ пс; *v* — $t = 150$ пс; *z* — $t = 300$ пс. Квадрат соответствует начальному размеру

Заключение

Решение методом МД физических задач, разнородных с точки зрения геометрии, набора моделируемых веществ и сложности используемых при этом моделей межатомного взаимодействия, требует разработки универсального программного комплекса. Функциональные части такого комплекса должны с максимальной эффективностью использовать вычислительные ресурсы суперкомпьютера, на котором проводятся вычисления.

В настоящей статье, кроме описания собственно программного комплекса "Молох", впервые приведена система тестов, позволяющая оценить ту или иную программу, реализующую метод МД, с точки зрения такой эффективности. В предлагаемых тестах рассмотрены три задачи, принципиально отличающиеся друг от друга по используемой физической модели и, по мнению авторов, наилучшим образом подходящие для тестирования балансировки счетной нагрузки, эффективности алгоритма поиска соседей и эффективности совместной (в рамках одной моделируемой системы) обработки нескольких потенциалов, характеризующихся разной сложностью и радиусом действия.

Предложенная система тестов не претендует на полноту и будет дополнена по мере расширения круга решаемых физических задач.

Список литературы

1. *Plimpton S.* Fast parallel algorithms for short range molecular dynamics // *J. Comp. Phys.* 1995. Vol. 117. P. 1—19.
2. *Sapozhnikov F. A., Dremov V. V., Derbenev I. V. et al.* Molecular dynamics simulation of TATB-like explosive // *AIP Conf. Proc.* 2007. Vol. 955. P. 463—466.

3. *Kelchner C. L., Plimpton S. J., Hamilton J. C.* Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation // *Phys. Rev. B.* 1998. Vol. 58. P. 11085-11088.
4. *Honeycutt J. D., Anderson H. C.* Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters // *J. Phys. Chem.* 1987. Vol. 91. P. 4950—4963.
5. *Ackland G. J., Jones A. P.* Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation // *Phys. Rev. B.* 2006. Vol. 73. P. 054104 (1—6).
6. *Сапожников Ф. А., Ионов Г. В., Дрёмов В. В.* Метод адаптивного шаблона для анализа кристаллических структур и дефектов при молекулярно-динамическом моделировании высокоскоростных деформаций // *Химическая физика.* 2008. Т. 27, № 3. С. 63—70.
7. *Mishin Y., Papaconstantopoulos D. A., Voter A. F., et al.* Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding and embedded-atom calculations // *Phys. Rev. B.* 2001. Vol. 63. P. 224106 (1—15).
8. *Dremov V., Karavaev A., Sapozhnikov F. et al.* Molecular dynamic simulation of thermodynamic and mechanical properties and behaviour of Be when high-rate straining // *DYMAT 2009 Conf. Proc. Brussels, Belgium,* 2009. P. 1277—1283.

Статья поступила в редакцию 21.02.11.

УДК 519.6

НЕРАВНОВЕСНАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ РАСЧЕТА ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ РАСПЛАВОВ

В. П. Гинкин, С. М. Ганина, К. Г. Чернов
(ГНЦ РФ-ФЭИ, г. Обнинск)

Предлагается неравновесная модель процесса кристаллизации двухкомпонентных расплавов, в которой численно решается задача Стефана с двумя границами: *твердая фаза — двухфазная переходная зона* и *двухфазная зона — жидкая фаза*. Двухфазная зона представлена пористой средой с переменной пористостью. Учитывается дополнительная сила сопротивления течению расплава в пористой среде по аналогии с законом Дарси. Сравниваются решения с линейной и квадратичной зависимостями объемной доли жидкой фазы от температуры. Приведены результаты расчетов эксперимента по кристаллизации расплава Sn с 20 %-ным содержанием Pb методом направленной вертикальной кристаллизации, которая ведется сверху вниз по направлению вектора гравитации.

Ключевые слова: двухкомпонентные расплавы, кристаллизация, математическая модель, течение в пористых средах, задача Стефана, численный метод расчета, расчет эксперимента.

Введение

Одним из ключевых условий создания новых материалов с заданными потребительскими характеристиками является установление критического соответствия между составом, структурой и свойствами материала. Создание воспроизводимой сбалансированной двухфазной структуры сплава с оптимальными пространственно-размерными и ориентационными параметрами является сложной многопараметрической задачей, которую невозможно решить без создания математической модели тепломассопереноса и проведения параметрических численных исследований.

Для указанных целей была разработана квазистационарная модель [1], описывающая процесс тепломассопереноса при кристаллизации расплава в среде с широкой переходной двухфазной областью. В этой модели численно решается задача Стефана с двумя границами: *твердая фаза — промежуточная переходная двухфазная зона* и *двухфазная зона — жидкая фаза* с учетом конвекции в расплаве и двухфазной зоне с неоднородным распределением твердой фазы по объему переходной зоны. В жидкой области решаются уравнения Навье—Стокса в приближении

Буссинеска, в переходной двухфазной зоне — модифицированные уравнения Навье—Стокса, в которых учитывается дополнительная сила сопротивления течению расплава вследствие тормозящего воздействия зарождающейся и прорастающей в расплав твердой фазы. Двухфазная зона моделируется пористой средой; в ней твердая фаза представляет неподвижный пористый *скелет*, через который течет расплав. Температура в двухфазной зоне предполагается равной температуре *ликвидус* и зависит только от концентрации примеси в жидкой фазе. Это условие следует из сделанного в работе [1] предположения о квазистационарности процесса затвердевания расплава.

В работе [1] также был предложен численный бенчмарк, предназначенный для верификации данной модели. Вышеупомянутая модель реализована в коде GIGAN-2D и использована для расчета данного бенчмарка. Сравнение результатов расчетов с результатами, полученными другими авторами, показало хорошее согласие между ними [2, 3]. Однако расчеты экспериментов с помощью модели из работы [1] не привели к удовлетворительному согласию расчетных и экспериментальных результатов.

В настоящей работе предложена неравновесная модель затвердевания, в которой вместо предположения о квазистационарности процесса используется экспериментально наблюдаемая зависимость распределения твердой фазы в двухфазной области. Реальное распределение твердой фазы в двухфазной области аппроксимируется квадратичной зависимостью от температуры.

Для валидации модели был выполнен расчет эксперимента из работы [4] по кристаллизации расплава Sn с 20 %-ной примесью Pb методом вертикальной направленной кристаллизации. В этом эксперименте кристаллизация осуществлялась сверху вниз, чтобы искусственно вызвать сравнительно сильное конвективное течение и использовать полученные экспериментальные результаты для валидации программ расчета процесса кристаллизации двухкомпонентных расплавов с учетом конвективного теплопереноса. Для сравнения был выполнен расчет этого же эксперимента с использованием линейной зависимости доли твердой фазы от температуры, заимствованной из работы [5]. Приводятся результаты расчетов с использованием квадратичной и линейной зависимостей доли жидкой фазы от температуры и сравнение их с экспериментом.

Уравнения теплопереноса

В области моделирования вещество может находиться в твердом, жидком или промежуточном двухфазном состоянии, представляющем смесь двух фаз, твердой и жидкой, с разными объемными долями. Зону, содержащую смесь двух фаз, будем называть двухфазной зоной. Для модельного состава сплава Sn + 20 % Pb эта зона по определению ограничена снизу температурой образования эвтектики T_e (или температурой *солидус* для неэвтектических сплавов, таких как TiAl), а сверху — температурой ликвидус T_{liq} , зависящей от концентрации C_l примеси в расплаве. Обычно предполагается, что зависимость T_{liq} от C_l линеаризована:

$$T_{liq} = T_m + mC_l,$$

где m — наклон линии ликвидус на фазовой диаграмме (заданная константа); T_m — температура плавления чистого материала (т. е. при $C_l = 0$).

Введем объемные доли фаз в единице объема двухфазной области: ε_l и ε_s . Здесь и ниже индексы l и s означают принадлежность к жидкой

или твердой фазе соответственно. Объемная доля жидкой фазы называется также пористостью вещества. По определению

$$\varepsilon_l + \varepsilon_s = 1.$$

Рассмотрим процесс затвердевания двухкомпонентного расплава, причем один компонент будем считать основным, а второй — примесью.

Так как плотности вещества в жидкой (ρ_l) и твердой (ρ_s) фазах различны, то плотность вещества в двухфазной зоне определяется выражением

$$\rho = \varepsilon_l \rho_l + \varepsilon_s \rho_s.$$

Аналогично определяются коэффициент теплопроводности k , коэффициент диффузии примеси D и теплоемкость c_p в двухфазной зоне:

$$k = \varepsilon_l k_l + \varepsilon_s k_s; \quad D = \varepsilon_l D_l + \varepsilon_s D_s;$$

$$c_p = \varepsilon_l c_{pl} + \varepsilon_s c_{ps}.$$

Диффузией примеси в твердой фазе традиционно пренебрегаем, т. е. полагаем $D_s = 0$; $D = \varepsilon_l D_l$. На межфазной границе $C_s = k_0 C_l$, где k_0 — коэффициент распределения примеси.

Введем обозначения:

$$\mathbf{V} = \varepsilon_l \mathbf{v}_l; \quad p = p_l;$$

$$h_s = c_{ps} (T - T_e); \quad h_l = c_{pl} (T - T_e) + L;$$

$$\langle h \rangle = c_p (T - T_e) + \varepsilon_l L;$$

$$\langle C \rangle = \varepsilon_l C_l + \varepsilon_s C_s = [\varepsilon_l + (1 - \varepsilon_l) k_0] C_l,$$

где \mathbf{V} — скорость фильтрации расплава; \mathbf{v}_l — истинная скорость течения расплава; p — давление; T — температура материала; h_s , h_l — удельная энтальпия вещества в твердой и жидкой фазах соответственно; $\langle h \rangle$ — удельная энтальпия вещества в двухфазной зоне; L — скрытая теплота фазового перехода.

Предположим, что для течения расплава применимо приближение Буссинеска, где предполагается, что плотность расплава линейно зависит от температуры и концентрации примеси:

$$\tilde{\rho} = \rho_l \left[1 - \beta_T (T - T_0) - \beta_C (C_l - C_0) \right],$$

где ρ_l — плотность расплава при $T = T_0$; $C = C_0$ (считаем константой); β_T , β_C — коэффициенты температурного и концентрационного расширения. Тогда уравнения теплопереноса имеют следующий вид:

– уравнение движения

$$\rho_l \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \frac{\rho_l}{\varepsilon_l} (\nabla \mathbf{V}) \mathbf{V} = \nabla (\mu \nabla \mathbf{V}) - \varepsilon_l \nabla p + \varepsilon_l \tilde{\rho} \vec{g} - \frac{\mu \varepsilon_l}{K} \mathbf{V}, \quad (1)$$

где μ – вязкость (константа);

– уравнение неразрывности

$$\nabla \mathbf{V} = 0; \quad (2)$$

– уравнение сохранения энергии

$$\frac{\partial \rho \langle h \rangle}{\partial t} + \nabla (\rho c_p T) \mathbf{V} - \nabla (k \nabla T) = 0; \quad (3)$$

– уравнение переноса примеси

$$\frac{\partial \langle C \rangle}{\partial t} + \nabla C_l \mathbf{V} - \nabla (D \nabla C_l) = 0. \quad (4)$$

Последний член в уравнении движения (1) учитывает силу сопротивления течению расплава при течении в пористой среде по аналогии с законом Дарси:

$$F = -\frac{\mu \varepsilon_l}{K} \mathbf{V},$$

где K – проницаемость пористой среды для жидкостных потоков. Примем для проницаемости K формулу Козени–Кармана в виде, предложенном в работе [1]:

$$K = \frac{\lambda_2^2 \varepsilon_l^3}{180 \varepsilon_s^2},$$

где λ_2 – характеристическое расстояние между вторичными ветвями поликристаллических дендритов.

Система четырех уравнений (1)–(4) содержит пять неизвестных: \mathbf{V} , p , $\langle h \rangle$, C_l , ε_l . Поэтому необходимо еще одно дополнительное уравнение. В качестве такого уравнения выберем зависимость ε_l от энтальпии $\langle h \rangle$

$$\varepsilon_l = \varepsilon_l (\langle h \rangle),$$

явное выражение для которой будет определено ниже.

Зависимость пористости от энтальпии

Сначала найдем зависимость пористости от температуры. Она может быть определена из

эксперимента. В частности, для поликристаллического TiAl (Nb) методом закалки процесса направленной кристаллизации получена экспериментальная картина распределения твердой и жидкой фаз в двухфазной зоне в продольном срезе слитка (рис. 1). Видно, что двухфазная зона действительно является средой с неравномерной пористостью, а не гомогенной смесью твердой и жидкой фаз. В ней твердая фаза образует неподвижный пористый скелет, в порах которого течет расплав.

Компьютерное разделение фаз при обработке этого изображения позволило получить экспериментальную зависимость $\varepsilon_s(T)$ в двухфазной зоне, представленную на рис. 2. Эту зависимость можно приближенно аппроксимировать параболой (сплошная линия на рис. 2)

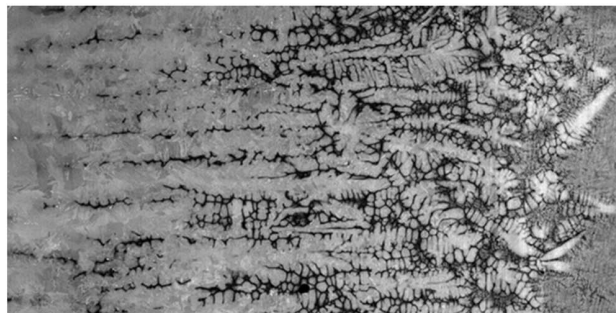


Рис. 1. Двухфазная зона, выявленная при структурных исследованиях слитка TiAl после резкого замораживания (закалки) процесса его направленной кристаллизации. Кристаллизация протекала слева направо

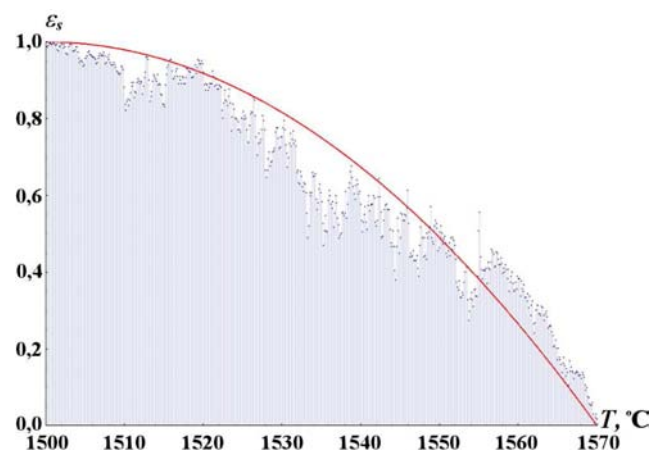


Рис. 2. Аппроксимация распределения объемной доли твердой фракции в двухфазной зоне параболой как функцией температуры

$$\varepsilon_s = 1 - \left(\frac{T - T_e}{T_{liq} - T_e} \right)^2,$$

где $T_e = 1500^\circ\text{C}$, $T_{liq} = 1570^\circ\text{C}$. Соответственно для пористости $\varepsilon_l = 1 - \varepsilon_s$ получим следующее выражение:

$$\varepsilon_l = \left(\frac{T - T_e}{T_{liq} - T_e} \right)^2, \quad T_e \leq T \leq T_{liq}.$$

Выберем за начало отсчета температуры температуру образования эвтектики T_e . Тогда получим следующие формулы для вычисления пористости в зависимости от температуры:

$$\varepsilon_l = \begin{cases} 0, & T < 0; \\ \left(\frac{T}{T_{liq}} \right)^2, & 0 \leq T \leq T_{liq}; \\ 1, & T > T_{liq}. \end{cases}$$

Подставив это выражение в формулу для энтальпии в двухфазной зоне $\langle h \rangle = c_p T + \varepsilon_l L$, получим уравнение, связывающее температуру T с удельной энтальпией $\langle h \rangle$, решением которого является

$$T = \begin{cases} \frac{\langle h \rangle}{c_{ps}}, & \langle h \rangle \leq 0; \\ \frac{c_p T_{liq}^2}{2L} \left(\sqrt{1 + \frac{4L\langle h \rangle}{c_p^2 T_{liq}^2}} - 1 \right), & 0 < \langle h \rangle < c_p T_{liq} + L; \\ \frac{\langle h \rangle - L}{c_{pl}}, & \langle h \rangle \geq c_p T_{liq} + L. \end{cases}$$

Отсюда с учетом квадратичной зависимости пористости от температуры находим выражение для пористости в зависимости от энтальпии:

$$\varepsilon_l = \begin{cases} 0, & \langle h \rangle \leq 0; \\ \frac{c_p^2}{4L^2} \left(\sqrt{1 + \frac{4L\langle h \rangle}{c_p^2 T_{liq}^2}} - 1 \right)^2, & 0 < \langle h \rangle < c_p T_{liq} + L; \\ 1, & \langle h \rangle \geq L. \end{cases} \quad (5)$$

Таким образом, искомое замыкающее соотношение найдено.

Из рис. 2 видно, что распределение объемной доли твердой фазы можно также приближенно аппроксимировать линейной функцией от температуры:

$$\varepsilon_l = \begin{cases} 0, & T < 0; \\ \frac{T}{T_{liq}}, & 0 \leq T \leq T_{liq}; \\ 1, & T > T_{liq}. \end{cases}$$

В этом случае получим следующую зависимость пористости от энтальпии:

$$\varepsilon_l = \begin{cases} 0, & \langle h \rangle \leq 0; \\ \frac{\langle h \rangle}{c_p T_{liq} + L}, & 0 < \langle h \rangle < c_p T_{liq} + L; \\ 1, & \langle h \rangle \geq L. \end{cases} \quad (6)$$

Линейная зависимость пористости от температуры в двухфазной зоне была использована в работе [5].

Для решения системы уравнений Навье—Стокса (1)–(4) с учетом замыкающего соотношения (5) или (6) был использован неявный метод установления, описанный в работе [2] и реализованный в коде GIGAN-2D.

Результаты тестовых расчетов

Для верификации разработанной модели был рассчитан методом направленной кристаллизации эксперимент из работы [4] по затвердеванию расплава Sn с 20 %-ной примесью Pb в вертикально расположенной цилиндрической ампуле. Расчет проводился в двумерной (x, y) -геометрии. Число узлов по осям X и Y задавалось 150 и 56 соответственно. Шаг по времени задавался равным 0,001 с.

Кристаллизация проводилась в вертикальном направлении, по оси X , сверху вниз. До начала процесса кристаллизации расплав находился в адиабатических условиях при температуре $T_0 = 211^\circ\text{C}$. Сила тяжести направлена сверху вниз. Концентрация примеси перед началом процесса кристаллизации постоянна и равна 20 %.

В начальный момент времени на верхнем торце емкости задавался отвод тепла по закону

$$q_b = h_T (T - T_{ext}),$$

где $h_T = 2100t^{-0,001}$, t — время в с; $T_{ext} = 25^\circ\text{C}$.

Теплофизические данные, использованные в расчетах, взяты из работ [1, 6] и приведены в таблице.

Из-за появившихся градиентов температур и концентраций в емкости развивалась свободная конвекция. В расчетах оценивались параметры кристаллизации, такие как распределение температур, распределение концентрации примеси, положение границы ликвидус, скорость охлаждения на границе ликвидус и др.

Теплофизические данные, использованные в расчетах

Величина	Значение
Температура плавления	232 °С
Температура образования эвтектики	183 °С
Теплоемкость твердой фазы	200 Дж/(кг · К)
Теплоемкость жидкой фазы	231 Дж/(кг · К)
Теплопроводность твердой фазы	59 Вт/(м · К)
Теплопроводность жидкой фазы	32 Вт/(м · К)
Теплота кристаллизации	52 580 Дж/кг
Плотность твердой фазы	8 250 кг/м ³
Плотность жидкой фазы	7 860 кг/м ³
β_T	$6,0 \cdot 10^{-5} (\text{°C})^{-1}$
β_C	$-5,3 \cdot 10^{-3} (\%)^{-1}$
Молекулярная вязкость	$10^{-3} \text{ кг}/(\text{м} \cdot \text{с})$
Коэффициент распределения k_0	0,0656
m	$-1,5 \text{ °C} \cdot (\%)^{-1}$
λ_2	$6,5 \cdot 10^{-5}$

Скорость охлаждения (cooling rate) оценивалась в каждой точке границы ликвидус по значениям температуры в текущий и предыдущий моменты времени. Существует корреляция между значением скорости охлаждения и температурным градиентом на границе ликвидус, с одной стороны, и положением микроструктурного перехода в кристаллизующемся материале, определяющим смену морфологии кристаллизующих дендритов (Columnar to Equiaxed Transition — CET), с другой. Эта корреляция позволяет использовать позицию CET в кристаллизационной системе как реперную модельную точку. В эксперименте [4] было найдено, что CET происходит при значении скорости охлаждения на границе ликвидус $r = 0,03 \text{ K/s}$. Это соответствует расстоянию позиции CET от охлаждаемого торца $X = 76 \text{ мм}$. В расчете по представленной модели было получено, что критическое значение скорости охлаждения $r = 0,03 \text{ K/s}$ достигается при $X = 70 \text{ мм}$.

На рис. 3 приведено сравнение экспериментальной и двух расчетных кривых скоростей охлаждения в зависимости от расстояния по оси ампулы от охлаждаемого торца X . Обе расчетные кривые хорошо согласуются с результатами измерений, что подтверждает адекватность предложенной модели. Следовательно, использование формул (5) или (6) в качестве замыкающих соотношений дает практически один и тот же результат.

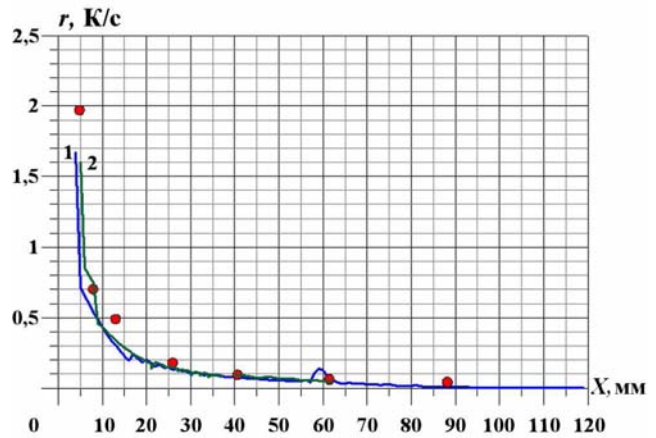


Рис. 3. Зависимость скорости охлаждения на границе ликвидус от расстояния по оси ампулы от охлаждаемого торца: 1 — расчет с использованием квадратичной зависимости пористости от температуры; 2 — расчет с использованием линейной зависимости пористости от температуры; ● — экспериментальные данные (с графика из работы [6])

На рис. 4 приведены поля скоростей конвективного течения в различные моменты времени, полученные с использованием квадратичной зависимости пористости от температуры. Сплошной линией на них указано положение границы ликвидус. Черным цветом окрашена зона твердой фазы. Зона, лежащая между твердой фазой и границей ликвидус, является переходной двухфазной зоной и окрашена оттенками серого цвета, причем более темный оттенок означает большую долю твердой фазы. Из рисунка видно, что в начале эксперимента в жидкой фазе вдоль границы фазового перехода развиваются два симметричных конвективных вихря, направленных друг к другу и к центру емкости. В переходную двухфазную зону течение проникает сравнительно неглубоко. Со временем ширина двухфазной зоны и глубина проникновения течения в двухфазную зону возрастают. Характер течения тоже со временем меняется в связи с тем, что двухвихревое течение в данном случае является неустойчивым. Постепенно один вихрь уменьшается в размерах, а второй увеличивается, и к 100-й секунде течение становится практически одновихревым. Линия ликвидус искривляется со временем вследствие развития конвективного течения.

На рис. 5 приведены аналогичные поля скоростей конвективного течения, полученные с использованием линейной зависимости пористо-

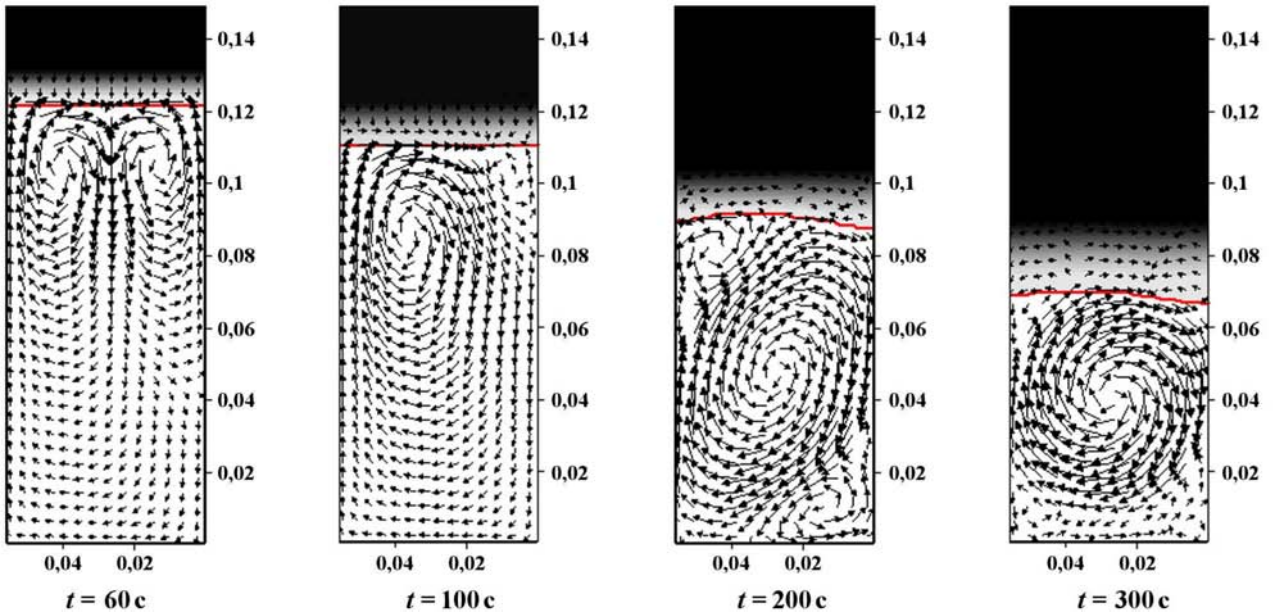


Рис. 4. Поля скоростей конвективного течения в процессе затвердевания расплава, полученные с использованием квадратичной зависимости пористости от температуры в различные моменты времени

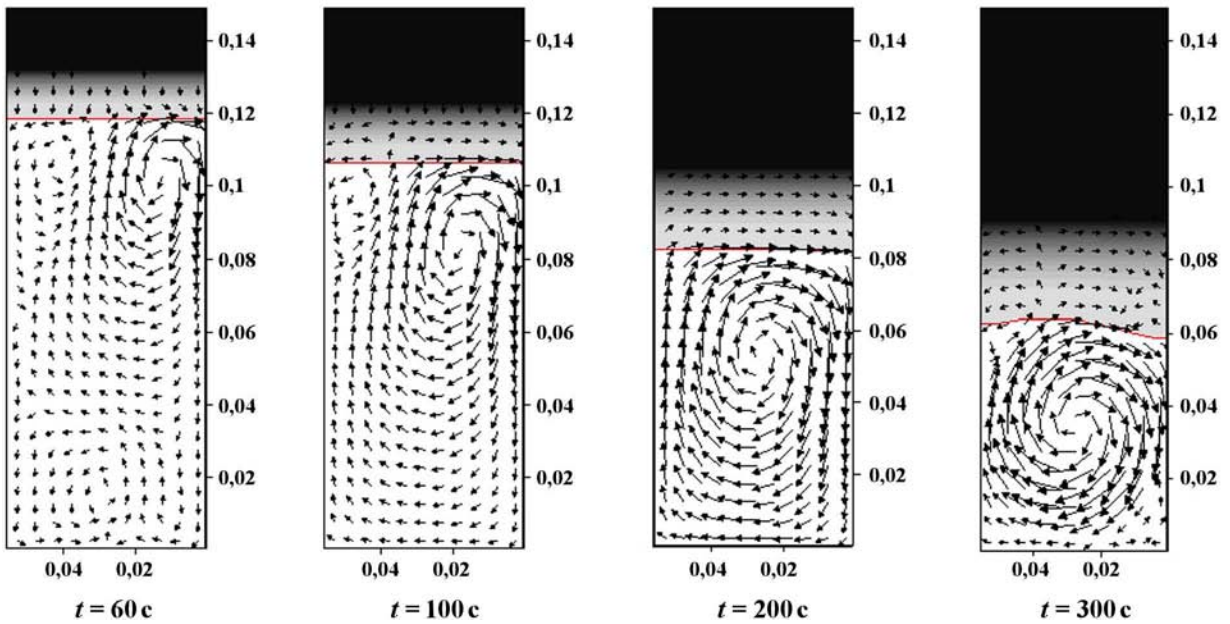


Рис. 5. Поля скоростей конвективного течения в процессе затвердевания расплава, полученные с использованием линейной зависимости пористости от температуры в различные моменты времени

сти от температуры. Качественно они похожи на распределения скоростей, представленные на рис. 4, однако имеются и существенные различия. При использовании линейной модели пористости конвективное течение глубже проникает внутрь двухфазной зоны, чем при использовании квадратичной модели. Положение границы

ликвидус при использовании линейной зависимости пористости от температуры опережает положение границы ликвидус при использовании квадратичной зависимости.

На рис. 6 приведены распределения изолиний концентраций свинца в затвердевшем слитке, полученные с использованием линейной и квадра-

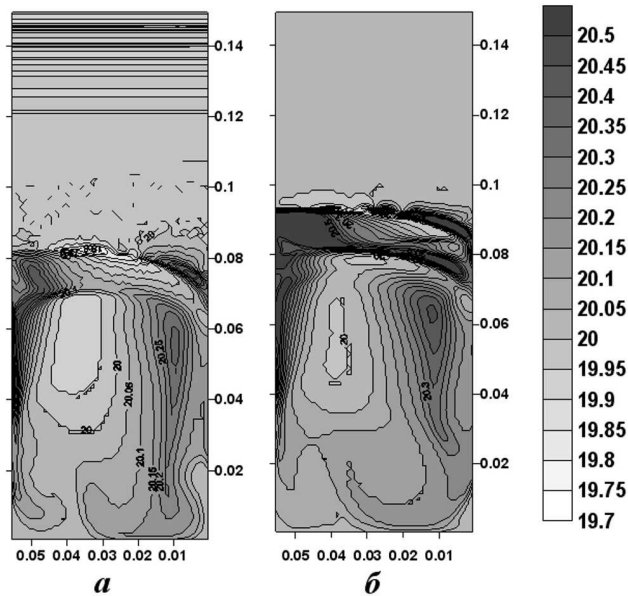


Рис. 6. Распределения концентрации примеси в затвердевшем слитке, полученные с использованием линейной (а) и квадратичной (б) зависимостей пористости от температуры

тичной зависимостей пористости от температуры. Видно, что они также заметно отличаются друг от друга. В сечении $X = 70$ мм, соответствующем СЕТ, наблюдаются сильное сгущение изолиний и локальный максимум концентрации примеси. Особенно ярко это видно на рис. 6, б, соответствующем квадратичной зависимости пористости от температуры.

Полученный результат дает возможность качественно объяснить причину возникновения СЕТ, связав его с возрастанием концентрации примеси. Действительно, атомы примеси в переохлажденном расплаве служат центрами зародышеобразования твердой фазы с равноосной микроструктурой (кристаллитов). Чем выше концентрация примеси в переохлажденном расплаве, тем выше вероятность образования кристаллитов. Зародившиеся кристаллиты быстро растут, достигая сравнительно больших размеров. Выделяющаяся при этом скрытая теплота фазового перехода повышает локальную температуру и снимает в данной области переохлаждение. С другой стороны, продолжается рост дендритов. При встрече фронтов дендритного и кристаллитного роста твердой фазы и происходит СЕТ, т. е. переход от столбчатой микроструктуры слитка к равноосной.

При использовании линейной зависимости пористости от температуры (см. рис. 6, а) также наблюдается локальное возрастание концентрации примеси, но это возрастание выражено значительно слабее. В целом, можно констатировать, что линейная модель зависимости пористости от температуры дает примерно такие же результаты, как и более точная квадратичная модель.

Заключение

В работе представлена новая математическая модель кристаллизации двухкомпонентных расплавов, учитывающая конвективный теплоперенос в расплаве и переходной двухфазной зоне. В отличие от предыдущего варианта в новой модели не делается предположения о квазистационарности процесса затвердевания расплава. Вместо этого предполагается, что в промежуточной двухфазной зоне пористость квадратично зависит от температуры. Эта зависимость получена с помощью компьютерной обработки результатов измерений пространственного распределения фаз в переходной двухфазной зоне. Двухфазная зона ограничена температурой образования эвтектики (или температурой солидус для неэвтектических материалов) и температурой ликвидус, причем последняя зависит от концентрации примеси в жидкой фазе. Решается задача Стефана с двумя границами: *жидкая фаза — переходная двухфазная зона, двухфазная зона — твердая фаза*. Сопротивление течению расплава в двухфазной зоне учитывается дополнительной силой, определяемой по аналогии с законом Дарси для течения в пористых средах.

Представленная модель реализована в программе GIGAN-2D, разработанной в ГНЦ РФ-ФЭИ, г. Обнинск. Метод расчета включает неявную аппроксимацию по времени, неявный метод установления, экспоненциальную аппроксимацию конвективных членов. Численный расчет эксперимента по кристаллизации расплава Sn с 20 %-ной примесью Pb методом вертикальной направленной кристаллизации показал хорошее совпадение расчетных и экспериментальных результатов.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проекты 09-08-00844-а и 10-03-00338-а).

Список литературы

1. *Bellet M., Combeau H., Fautrelle Y. et al.* Call for contributions to a numerical benchmark problem for 2D columnar solidification of binary alloys // *Int. J. of Thermal Sci.* 2009. Vol. 48. P. 2013–2016.
2. *Ганина С. М., Гинкин В. П.* Верификация модели расчета конвективного переноса примеси на примере кристаллизации двухкомпонентных расплавов Pb-Sn // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов.* 2010. Вып. 3. С. 65–72.
3. *Budencova O., Ganina S., Ginkin V., Terrail Y. Du.* // *Proc. of the Fifth Int. Conf. "Multiscale Materials Modeling" (MMM-2010).* Freiburg, Germany. October 4–8, 2010. P. 36–39.
4. *Spinelli J. E., Ferreira I. L., Garcia A.* Influence of melt convection on the columnar to equiaxed transition and microstructure of downward unsteady-state directionally solidified Sn-Pb alloys // *J. Alloys Compounds.* 2004. P. 384 (217–226).
5. *Browne D. J., Hunt J. D.* // *Numer. Heat. Trans.* 2004. Vol. B 45. P. 395–419.
6. *Arvind Kumar, Pradip Dutta.* Numerical studies on columnar-to-equiaxed transition in directional solidification of binary alloys // *J. Mater. Sci.* 2009. Vol. 44. P. 3952–3961.

Статья поступила в редакцию 18.10.10.

УДК 519.6

ПРОГРАММНО-АППАРАТНЫЕ КОМПЛЕКСЫ НА БАЗЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ С АРИФМЕТИЧЕСКИМИ УСКОРИТЕЛЯМИ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО И МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Б. Л. Воронин, С. А. Грушин, А. К. Житник, А. Н. Залялов,
С. В. Копкин, И. А. Крючков, А. Г. Малькин, С. П. Огнев,
В. И. Рослов, А. С. Рыбкин, С. А. Степаненко, Р. М. Шагалиев, В. В. Южаков
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Представлены результаты исследования возможностей создания программно-аппаратных комплексов на базе вычислительных систем, интегрирующих процессоры архитектуры x86 и арифметические ускорители, предназначенных для моделирования методом Монте-Карло и методом молекулярной динамики при решении специальных классов задач атомной энергетики.

Ключевые слова: гибридные вычислительные системы, арифметические ускорители, метод Монте-Карло, метод молекулярной динамики.

Введение

Одним из современных направлений развития средств математического моделирования является применение вычислительных систем с арифметическими ускорителями (АрУ), называемых также гибридными системами [1]. Вследствие конструктивных особенностей АрУ эти системы по сравнению с обычными универсальными микропроцессорами позволяют существенно ускорить вычислительный процесс на определенных классах задач. Такими задачами, в частности, являются расчет нейтронно-физических характеристик ядерных энергетических установок методом Монте-Карло [2] и моделирование свойств ядерного топлива и конструкционных материалов реакторов, а также транспортных упаковочных комплексов методами молекулярной (наноуровень) и кластерной (микроуровень) динамики [3].

В данной работе представлены результаты исследования возможностей создания программно-аппаратных комплексов на базе вычислительных систем, интегрирующих процессоры архитектуры x86 и АрУ, предназначенных:

- для расчета методом Монте-Карло критических параметров активных зон ядерных ре-

акторов, мест хранения ядерного топлива, транспортно-упаковочных комплексов для перевозки топлива и других средств обращения с топливом на АЭС, а также проектирования технических объектов атомной энергетики;

- для моделирования свойств материалов методом молекулярной динамики при решении специальных классов задач атомной энергетики и других наукоемких отраслей промышленности.

Известные отечественные программы, предназначенные для решения указанных задач методом Монте-Карло, — ПРИЗМА (РФЯЦ-ВНИИТФ) [4] и МСУ (РНЦ "Курчатовский институт") [5] — реализованы лишь для универсальных процессоров. Данные о реализации программы МСНР (Лос-Аламосская национальная лаборатория, США) [6] для гибридных вычислительных систем отсутствуют.

Зарубежным аналогом комплекса молекулярной динамики является программа Lammps (Сандийская национальная лаборатория, США) [7]. Ее адаптация для АрУ лишь анонсирована.

Вычислительные системы с АрУ

Структура гибридной вычислительной системы и оценки ускорения вычислений.

Гибридная вычислительная система, также именуемая для краткости гибридным вычислителем, содержит q универсальных процессоров, реализующих MIMD-вычисления, и r АрУ, каждый из которых выполняет SIMD-вычисления. Структура гибридного вычислителя показана на рис. 1.

Гибридный вычислитель, содержащий одно ядро и один АрУ, назовем элементарным гибридным вычислителем.

Длительность вычислительного процесса, выполняемого гибридным вычислителем, зависит от соотношения длительностей процессов, выполняемых MIMD- и SIMD-компонентами.

Пусть для решения задачи одним универсальным процессором требуется временной интервал длительностью T_1 . Полагаем, что процесс решения этой же задачи элементарным гибридным вычислителем занимает интервал длительностью

$$T_{1,1} = T_M + T_S, \quad (1)$$

где $T_M = T_1\varphi$ — длительность вычислений, выполняемых универсальным процессором, $0 \leq \varphi \leq 1$ — доля этих вычислений от всего вычислительного процесса (доля MIMD-фрагмента); $T_S = (1 - \varphi)T_1/\rho$ — длительность вычислений,

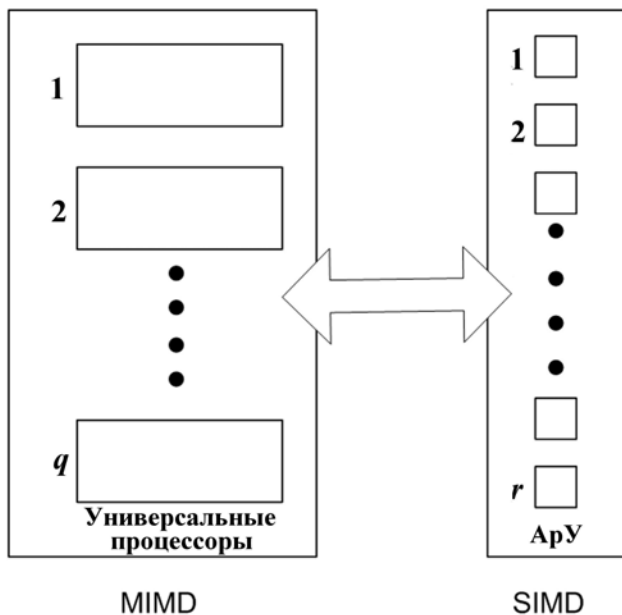


Рис. 1. Структура гибридного вычислителя

выполняемых АрУ, $\rho > 1$ — коэффициент ускорения по сравнению с универсальным процессором, достигаемый применением АрУ (на SIMD-фрагменте).

Значения коэффициентов ускорения, достигаемых гибридными вычислителями по сравнению с одним процессором в режимах деления и умножения вычислительного процесса (закон Амдала и закон Густафсона), приведены в [8]; их формульные представления даются в табл. 1.

Отметим идентичность этих коэффициентов для обоих режимов при одинаковых количественном и качественном составе вычислителей. Целесообразность увеличения количества ядер либо ускорителей зависит от параметров вычислительного процесса. Как для режима деления, так и для режима умножения целесообразно увеличивать количество ядер, если $\rho \geq (1 - \varphi)/\varphi$.

Выбор тех или иных значений q и r определяется свойствами вычислительного процесса, в частности, особенностями процессов моделирования методом Монте-Карло и методом молекулярной динамики.

Таблица 1

Коэффициенты ускорения K в режиме выполнения умножения/деления

Состав вычислителя	Коэффициент ускорения
q ядер, 1 ускоритель	$K_{q,1} = \frac{q}{\varphi + (1 - \varphi)\frac{q}{\rho}},$ $\lim_{q \rightarrow \infty} K_{q,1} = \frac{\rho}{1 - \varphi}$
1 ядро, r ускорителей	$K_{1,r} = \frac{r}{\varphi r + \frac{1 - \varphi}{\rho}},$ $\lim_{r \rightarrow \infty} K_{1,r} = \frac{1}{\varphi}$
q ядер, r ускорителей, $q > r, \mu = \frac{q}{r}$ — целое	$K_{q,r} = \frac{\mu}{\varphi + (1 - \varphi)\frac{\mu}{\rho}}$
q ядер, r ускорителей, $r > q, \mu = \frac{r}{q}$ — целое	$K_{q,r} = \frac{\mu}{\varphi\mu + \frac{1 - \varphi}{\rho}}$
q ядер, q ускорителей	$K_{q,q} = \frac{q}{\varphi + \frac{1 - \varphi}{\rho}}$

Параметры экспериментальных образцов вычислительных систем (ЭОВС) с АрУ. В соответствии с требованиями, предъявляемыми программными комплексами моделирования методом Монте-Карло и методом молекулярной динамики, созданы ЭОВС с АрУ двух типов.

ЭОВС первого типа содержит АрУ Tesla C2050 фирмы NVIDIA; пиковая производительность экспериментального образца 1,588 Тфлопс (64 бит), максимальная потребляемая мощность 1,3 кВт.

ЭОВС второго типа содержит АрУ ATI Radeon HD 5970 фирмы AMD; пиковая производительность образца 1,904 Тфлопс (64 бит), максимальная потребляемая мощность 1,0 кВт.

Преимуществами АрУ фирмы NVIDIA являются архитектурные особенности (меньшее количество потоковых процессоров, большее количество регистров и т. п.), большая емкость оперативной памяти, развитый инструментарий разработки прикладного программного обеспечения. Преимущества АрУ фирмы AMD — сравнительно малые значения удельной стоимости операции и потребляемой мощности.

В табл. 2 приведены значения параметров созданных ЭОВС с АрУ NVIDIA и AMD и аналогичных систем российских и зарубежных фирм.

Базовое системное программное обеспечение (БСПО) ЭОВС с NVIDIA включает набор следующих средств:

- операционную систему (ОС) Windows 2003 Server / Scientific Linux 5.3 [9] с ядром 2.6.27.38;
- систему программирования на языках высокого уровня Fortran, C, C++ INTEL v10.1.018 [10];
- коммуникационную библиотеку с реализацией MPI—MPICH 1.2.5 [11];
- драйвер и средства разработчика для исполнения программ на АрУ: для NVIDIA — CUDA v.2.3 [12], для AMD — ATI Stream SDK [13].

БСПО обеспечивает возможность подключения внешних источников и носителей данных (Ethernet, USB). Для этого в его состав входят ОС и драйверы подключаемых устройств.

Разработанные образцы не уступают анонсированным другими производителями. Удельная цена единицы производительности гибридной системы и мощность, требуемая для этой единицы, примерно на порядок меньше по сравнению с универсальными аналогами. Показатели пиковой производительности, потребляемой мощности и цены для гибридных вычислитель-

Таблица 2

Параметры вычислительных систем с ускорителями

Параметр	ЭОВС, NVIDIA	ЭОВС, AMD	Arbyte SC, Россия	Supermicro, США	Colfax, США
Тип универсального процессора	Intel i7920, 4 ядра	AMD	Intel Xeon 5500	Intel Xeon 5500	Intel Xeon 5500
Количество процессоров	1	1	2	2	2
Тип АрУ	Tesla C2050	AMD Radeon HD 5970	Tesla C2050	Tesla C2050	Tesla C2050
Количество АрУ	3	2	3	4	8
Теоретическая пиковая производительность, Гфлопс/с (64 разряда)	1565	1904	1625	2220	4280
Оперативная память универсального процессора, Гбайт	24	8	24	96	144
Оперативная память АрУ, Гбайт	9	4	9	12	24
Макс. потребляемая мощность, Вт	1300	1000	1300	1500	2400
Система охлаждения	Жидкостно-воздушная		Воздушная	Воздушная	Воздушная

ных систем лучше по сравнению с универсальными аналогами.

Параметры

программно-аппаратного комплекса моделирования методом Монте-Карло

Метод Монте-Карло является одним из основных методов для определения эффективного коэффициента размножения нейтронов активных зон ядерных реакторов, обоснования радиационной и ядерной безопасности транспортных упаковочных комплектов для перевозки и длительного хранения отработанного ядерного топлива АЭС.

В созданном экспериментальном образце программно-аппаратного комплекса Монте-Карло задействованы АрУ Tesla C2050 фирмы NVIDIA. Программное обеспечение ориентировано на трехмерное потвэльное описание активных зон реакторов.

В процессе создания комплекса с целью обеспечения его эффективности:

- получены емкости оперативной памяти АрУ, требуемые для решения методом Монте-Карло задач с различной размерностью;
- проведен анализ длительности выполнения различных фрагментов вычислительного процесса для определения целесообразности задействования АрУ на этих фрагментах;
- показано, что ускорение вычислительного процесса возрастает с увеличением размера задачи;
- разработаны соответствующие алгоритмы, написаны и отлажены программы для АрУ, реализующие эти алгоритмы.

Подробное изложение перечисленных аспектов приведено в докладе [14] и будет опубликовано в следующем выпуске журнала.

Проведены тестовые расчеты моделирования тепловыделяющей системы и активной зоны реактора ВВЭР-1000. Расчеты выполнялись на элементарной гибридной вычислительной системе, содержащей одно ядро универсального процессора и один АрУ. Активная зона реактора рассчитывалась с учетом ее пространственной симметрии. Одна шестая часть зоны включает 28 тепловыделяющих систем 7 различных типов с 331 твэлом в каждой тепловыделяющей

системе. Результаты расчетов совпадают с эталонными.

Длительность вычислительного процесса, выполняемого элементарной гибридной системой, для определенного размера задачи меньше длительности вычислительного процесса, выполняемого ядром универсального процессора, в 3–4,4 раза для расчета эффективного коэффициента размножения нейтронов ТВС и в 2,7–3,7 раза для расчета эффективного коэффициента размножения нейтронов активной зоны реактора ВВЭР-1000.

Дополнительные (пока незадействованные) возможности ускорения вычислений обусловлены модернизацией сортировки данных и декомпозицией вычислительного процесса.

Новизна результатов определяется отсутствием отечественных программ для гибридных вычислительных систем, позволяющих моделировать методом Монте-Карло параметры ядерных реакторов и других объектов атомной энергетики, для которых характерна сложная постановка расчетов. В частности, к числу особенностей разработанной программы следует отнести возможность моделирования в весьма сложных трехмерных геометриях, включающих большое количество неоднородных по составу физических областей.

Параметры программно-аппаратного комплекса моделирования методом молекулярной динамики

Одним из основных инструментов изучения процессов упругопластики и поведения материалов, находящихся в условиях радиационного воздействия, является моделирование методом молекулярной динамики. Применение этого метода требует вычисления значений парных и многочастичных потенциалов.

Экспериментальный образец программно-аппаратного комплекса молекулярной динамики создан на базе вычислительной системы с АрУ Tesla C2050 фирмы NVIDIA. В процессе разработки программного обеспечения:

- проведен анализ длительности выполнения различных фрагментов вычислительного процесса;
- оптимизированы дисциплина обращения к памяти АрУ и массивы данных;
- показано, что ускорение вычислительного процесса возрастает с увеличением размера задачи;

— разработаны соответствующие алгоритмы, написаны и отлажены программы для АрУ, реализующие эти алгоритмы.

Особенности реализации программного обеспечения были изложены в докладе [15] и будут опубликованы в следующем выпуске журнала.

Проведены тестовые расчеты процессов развития радиационных каскадов с парными и многочастичными потенциалами, предназначенными для молекулярно-динамического моделирования свойств материалов тепловыделяющих элементов. Расчеты выполнялись на элементарной гибридной вычислительной системе. Результаты расчетов совпадают с эталонными.

Длительность вычислительного процесса, выполняемого элементарной гибридной системой, в 9—15 раз меньше (в зависимости от размера задачи) по сравнению с длительностью процесса, выполняемого ядром универсального процессора.

Новизна результатов определяется тем, что для гибридных вычислительных систем разработаны эффективные алгоритмы моделирования методом молекулярной динамики процессов, определяющих свойства конструкционных материалов, подвергающихся интенсивным радиационным воздействиям.

Заключение

Область рекомендуемого внедрения описанных в данной статье программно-аппаратных комплексов — НИИ и КБ, занимающиеся проектированием объектов атомной энергетики, в частности, расчетным обоснованием режимов работы реакторов (включая аварийные режимы) и решением проблем создания композитных материалов. Перспективы внедрения программно-аппаратных комплексов определяются высокой производительностью, низкими энергопотреблением и ценой, возможностью эксплуатации в рабочем помещении без применения специальных систем электропитания и микроклимата. Разрабатываемые средства характеризуются новизной и уникальностью.

Областью применения создаваемых программно-аппаратных комплексов является решение задач математического моделирования объектов атомной энергетики, в частности, расчет критических параметров активных зон реакторов с использованием трехмерного потвельного описания их геометрии, а также описание свойств ма-

териалов, находящихся в условиях мощного радиационного воздействия.

Экономическая эффективность результатов подтверждается не только техническими параметрами (производительность, мощность), конкурентоспособной ценой создаваемых вычислительных систем, не требующих специально обустроенных систем жизнеобеспечения, но и созданием комплексных программно-аппаратных средств моделирования сложных физических процессов. Их применение позволит обеспечить снижение сроков разработки и проектирования ядерных энергетических установок.

Список литературы

1. *Sim L. C., Schroder H., Leedham G.* MIMD-SIMD hybrid system — towards a new low cost parallel system // *Parallel Computing*. 2003. Vol. 29. P. 21—36.
2. *Zhitnik A. K., Tarasov V. A., Ognev S. P. et al.* Code TDMCC for Monte-Carlo computations of spatial reactor cores kinetics // *Monte-Carlo 2005 Topical Meeting*. Chattanooga, Tennessee. April 17—21, 2005.
3. *Воронин Б. Л., Ерофеев А. М., Копкин С. В. и др.* Применение графических арифметических ускорителей для расчета задач молекулярной динамики по программному комплексу МД // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов*. 2009. Вып. 2. С. 55—61.
4. *Кандиев Я. З., Серова Е. В.* Меченые частицы в расчетах переноса излучения методом Монте-Карло по программе ПРИЗМА // *Атомная энергия*. 2005. Т. 98. Вып. 3. С. 386—393.
5. *Gomin E., Kalugin M., Oleynik D.* VVER-1000 MOX Core Computational Benchmark. Specification and Results. France, OECD Nuclear Energy Agency, 2006.
6. MCNP — A General Monte-Carlo N-Particle Transport Code. Version 4a / Ed. by J. F. Briesmeister. Los Alamos National Laboratory Report LA-12625-M. 1993.
7. Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator. <http://lammmps.sandia.gov>.
8. *Степаненко С. А.* Оценки ускорения вычислений гибридными системами // *Пленарные*

- доклады Пятой межд. конф. "Параллельные вычисления и задачи управления" (РАСО 2010). Москва, 26—28 октября 2010 г. М.: Институт проблем управления им. В. А. Трапезникова РАН, 2010. С. 61—71.
9. Официальный сайт разработчиков Scientific Linux. <http://www.scientificlinux.org/>.
 10. Компиляторы Intel. <http://software.intel.com/ru-ru/intel-compilers/>.
 11. Коммуникационная библиотека MPICH. <http://unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich1/>.
 12. CUDA Zone. http://nvidia.com/object/cuda_home.html.
 13. ATI Stream SDK. <http://developer.amd.com/Downloads/>.
 14. *Рыбкин А. С., Залялов А. Н., Малькин А. Г. и др.* Программный комплекс на базе гибридных вычислительных систем для расчета критических параметров методом Монте-Карло // XII Межд. семинар "Супервычисления и математическое моделирование". Саров, 11—15 октября 2010 г.
 15. *Крючков И. А., Копкин С. В.* Адаптация алгоритма расчета взаимодействия для многочастичного потенциала MEAM на гибридных вычислительных системах // XI Межд. семинар "Супервычисления и математическое моделирование". Саров, 5—9 октября 2009 г.

Статья поступила в редакцию 12.01.11.

УДК 519.6

ПРОГРАММНЫЕ СРЕДСТВА STK ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ВЫПОЛНЕНИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ПРИЛОЖЕНИЙ

Д. А. Новаев, Ю. Г. Бартнев, Д. И. Липов, С. И. Колпаков,
А. Б. Киселев, Т. Н. Серова, Л. В. Худякова
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Описаны состав и возможности программных средств для сбора и представления данных по эффективности использования вычислительных ресурсов многопроцессорных ЭВМ задачами, выполняющимися в режиме распараллеливания.

Ключевые слова: многопроцессорная ЭВМ, эффективность выполнения *параллельных* задач, интерфейс межпроцессорных обменов (MPI), ввод-вывод, средства профилирования параллельных приложений.

Введение

Эффективное управление и использование больших многопроцессорных ЭВМ требует специализированного программного обеспечения, которое включает в себя средства мониторинга и анализа эффективности выполнения задач в режиме распараллеливания (*параллельных* задач) как непосредственно во время счета (*online*), так и после его завершения (*offline*). Для реализации данных средств необходимо измерение большого количества параметров, характеризующих эффективность использования аппаратных ресурсов параллельными задачами, таких как процессор, память и коммуникационная среда.

Современные средства анализа и отладки выполнения параллельных задач (программ) включают отладчики и средства профилирования (Vampir [1], MPE [2], Intel Trace and Analyzer Collector [3] и др.). Цель профилирования — обеспечить механизм, с помощью которого разработчики параллельных приложений могли бы анализировать поведение программ с целью улучшения их производительности посредством сбора информации о программе (трассировки) во время ее выполнения. Обычно для целей трассировки в исследуемую программу встраиваются *профилировочные вызовы*, которые фиксируют наступление определенных событий или продолжительность интервалов и записывают собираемую информацию в журнал трассиров-

ки. Затем полученная *трасса* просматривается и анализируется.

Следует отметить, что к недостаткам всех существующих на сегодня в мире средств анализа можно отнести, во-первых, отсутствие унифицированных форматов трасс — трассировщики обычно ориентированы на конкретную библиотеку передачи сообщений. Во-вторых, возможности настройки фильтров событий, с помощью которой задается, какие события и какую информацию следует или не следует включать в трассу (журнал характеристик программы при ее выполнении), достаточно слабы. Кроме того, средства трассировки достаточно сильно влияют на поведение программы, а также приводят к нежелательному увеличению накладных расходов при возрастающей потребности в вычислительных ресурсах.

Указанные недостатки не дают возможности использовать существующие средства профилирования в условиях длительного счета задач с неограниченным числом MPI-вызовов на большом количестве процессоров (1 000 и более), а также в качестве штатных (постоянно работающих) систем сбора данных по эффективности счета параллельных задач и эффективности использования многопроцессорных ЭВМ. Поэтому в РФЯЦ-ВНИИЭФ разработаны собственные программные средства STK [4].

STK (Statistics Tool Kit) — это программные средства для исследования эффективности вы-

полнения параллельных задач, которые используют MPI (интерфейс передачи сообщений) [5, 6] и OpenMP (интерфейс многопоточного распараллеливания на вычислительных SMP-узлах с общей памятью) [7] на многопроцессорных ЭВМ под управлением операционной системы Linux [8, 9]. Прежде всего система STK разрабатывалась для мониторинга и анализа эффективности использования вычислительных ресурсов многопроцессорных ЭВМ программными комплексами с целью контроля над выполняемыми пользовательскими задачами и обеспечения более эффективного их счета. В то же время STK выполняет роль *специализированного профилировщика* параллельных задач, предоставляющего разработчикам параллельных программ средства для определения признаков и причин неэффективной работы как всей программы в целом, так и отдельных ее фрагментов. Все это помогает оптимизировать как программные комплексы, так и использование дорогостоящего оборудования, применяемого при таких расчетах.

В STK эффективность выполнения задачи основана на подсчете отношения времени полезных вычислений ко всему времени выполнения, а именно:

- 1) для каждого MPI-процесса параллельной задачи измеряются $T_{\text{обмена}}$ — время, затраченное на выполнение вызовов функций MPI и ввода-вывода (IO), а также $T_{\text{общее}}$ — общее время выполнения; затем вычисляются

$$T_a = T_{\text{общее}} - T_{\text{обмена}};$$

$$E_i = \frac{T_a}{T_a + T_{\text{обмена}}} \cdot 100 \%,$$

где T_a считается временем арифметической работы, а E_i — показателем эффективности выполнения i -го MPI-процесса задачи;

- 2) для всей задачи вычисляется

$$E = \frac{\sum_{i=1}^N T_a}{\sum_{i=1}^N (T_a + T_{\text{обмена}})} \cdot 100\%,$$

где N — количество процессов; E считается показателем эффективности выполнения параллельной задачи (средней эффективностью выполнения MPI-процессов задачи).

Кроме того, среди всех E_i находятся E_{\min} и E_{\max} , которые вместе с E дают представление

о дисбалансе вычислений параллельной задачи. Близость E к E_{\max} свидетельствует о слабом вычислительном дисбалансе (небольшое число MPI-процессов выполняют вычислительную работу меньше, чем остальные); близость E к E_{\min} при $E \ll E_{\max}$ свидетельствует о сильном вычислительном дисбалансе (небольшое число MPI-процессов выполняет существенно большую вычислительную работу, чем остальные).

Отметим, что эти показатели эффективности STK вычисляет в каждый момент счета параллельной задачи.

Программные компоненты STK

В состав STK входят следующие компоненты (рис. 1):

- ядро STK для сбора данных об использовании процессами параллельной задачи вычислительных ресурсов;
- транспортная подсистема STK для доставки и объединения собираемой информации;
- пользовательские средства (API) для разработки собственных приложений обработки данных по эффективности выполнения параллельных задач;
- база данных (БД) STK для хранения информации;
- система многомерного анализа данных, реализованная с использованием OLAP-технологии;
- система графического представления данных.

Ядро STK. Предназначено для сбора данных об использовании многопоточными MPI-процессами вычислительных ресурсов. При реализации ядра STK было выбрано направление, при котором оно интегрируется в пользовательскую задачу.

Ядро STK представлено в виде двух библиотек: статической и динамической. В статической библиотеке собраны *функции-обертки* MPI-вызовов и операций ввода-вывода, в динамической — их обработчики. Применение динамической библиотеки ядра STK позволяет модифицировать и внедрить ядро STK в пользовательскую программу без ее перетрансляции. Это технологически очень полезно, так как новые возможности в STK автоматически становятся доступными для всех программ, собранных с динамической библиотекой ядра STK.

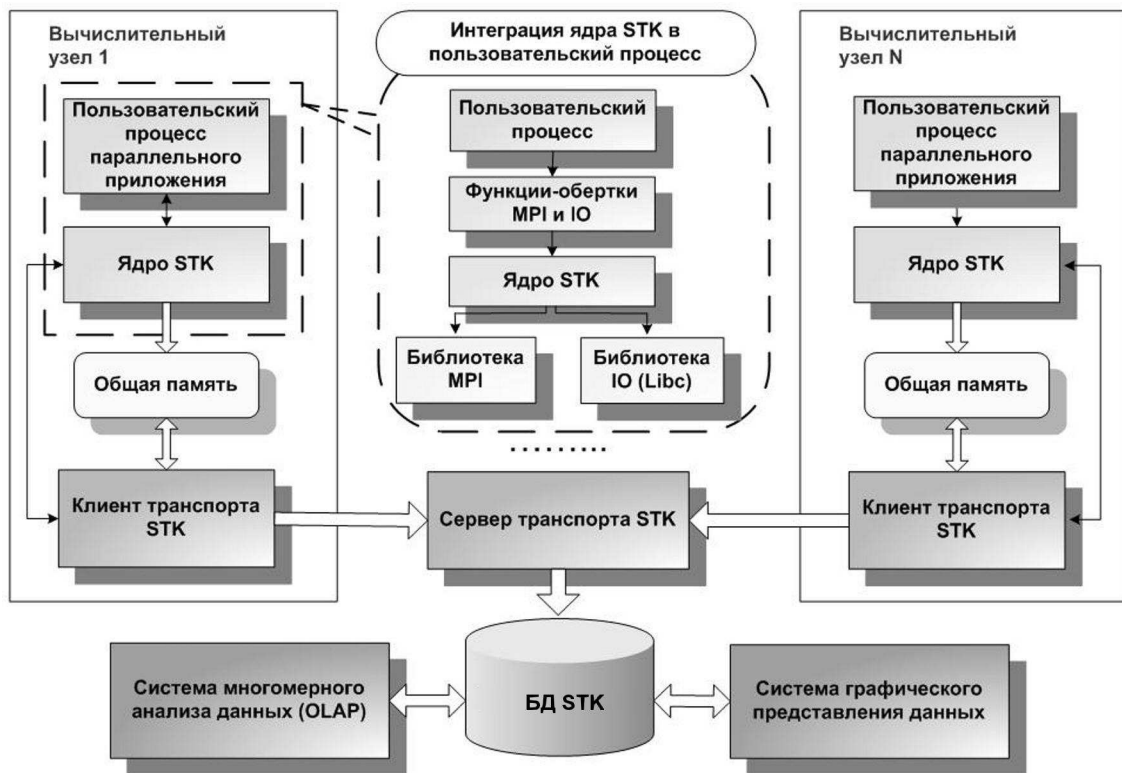


Рис. 1. Архитектура STK

Транспортная подсистема STK. Это распределенная система, предназначенная для получения от ядра STK данных по выполнению процессов параллельных программ, их транспортировки и хранения.

Транспортная подсистема разрабатывалась с той целью, чтобы реализовать не зависящий от системной конфигурации используемой многопроцессорной ЭВМ механизм получения и пересылки данных в течение всего времени выполнения процессов параллельной программы, обеспечив при этом минимальные накладные расходы.

Средства разработки пользователя (API). Написаны на языке С и реализованы в виде Фортран- и С-интерфейсов, которые позволяют использовать API-функции в программах, написанных на языках С/С++ и Фортран. API является расширением основных функциональных возможностей STK для разработчиков параллельных программ. Используя API-функции, разработчики параллельных программ могут получить в них доступ к любым данным, которые предоставляются средствами STK, а также сохранить эти данные в файлах для дальнейшего анализа.

БД STK. В STK реализован механизм хранения оперативной информации о работе параллельных программных комплексов в БД STK, что позволяет всем авторизованным пользователям получить доступ к единому банку данных, проводить различные выборки данных по всем полям БД, переложить часть вычислений на сервер БД. Также в БД STK поддерживается механизм записи информации в режиме реального времени. Это позволяет получать необходимую информацию в ходе выполнения параллельных задач.

В настоящее время в STK реализована возможность сохранения данных в собственной файловой БД, а также в широко используемых СУБД, таких как MySQL [10], Oracle [11], PostgreSQL [12]. Кроме того, для хранения данных были опробованы, а в дальнейшем применены кластерные СУБД, которые позволяют оптимизировать время отклика на этапе анализа и визуализации требуемой информации.

Система многомерного анализа данных. Разработка БД STK позволила применить OLAP-технологии [13] для визуализации данных.

OLAP (On-Line Analytical Processing) — это технология комплексного анализа многомерных данных. OLAP является оптимальным решением для большого класса приложений, где пользователи имеют дело с данными, зависящими от многих параметров.

Технология OLAP включает в себя следующие компоненты:

- OLAP-сервер, который получает и обрабатывает данные из БД с помощью соответствующего провайдера;
- OLAP-клиент (MS Excel) для визуализации данных, который позволяет получать двух- и трехмерные сечения гиперкуба данных, полученного с помощью OLAP-сервера.

Пользователь может построить по своему усмотрению итоговую диаграмму любого вида, а также включить ее в интерактивном виде в документ MS Word.

Пример использования технологии OLAP показан на рис. 2, который содержит объемную гистограмму, представляющую эффективность счета различных программных комплексов за определенный год. На графике можно видеть суммарные оценки времен на использование MPI, ввод-вывод, полезный счет для различных

методик, показывающие, насколько данные методики эффективны. Также можно построить любую диаграмму как по всем задачам, рассчитываемым по определенной методике, так и по задачам конкретного исполнителя.

Система графического представления данных (рис. 3). Реализована на языке Java и поэтому может быть легко интегрирована как приложение в браузер, доступный в операционной системе пользователя.

Система имеет удобный пользовательский интерфейс, позволяет сократить время обработки большого объема информации, а также может функционировать в различных операционных системах и на различных платформах.

Данные могут быть представлены для конкретной задачи, выбранной пользователем, в виде таблиц и графиков (рис. 4, 5) как после завершения задачи, так и во время ее выполнения.

В системе имеется возможность сохранения таблиц в Excel-формате, а графиков — в графическом формате PNG. Для получения различных видов статистики пользователь может задать дополнительные настройки для фильтрации данных, просмотра статистики по задачам за определенный промежуток времени. Также можно сохранить собственные настройки.

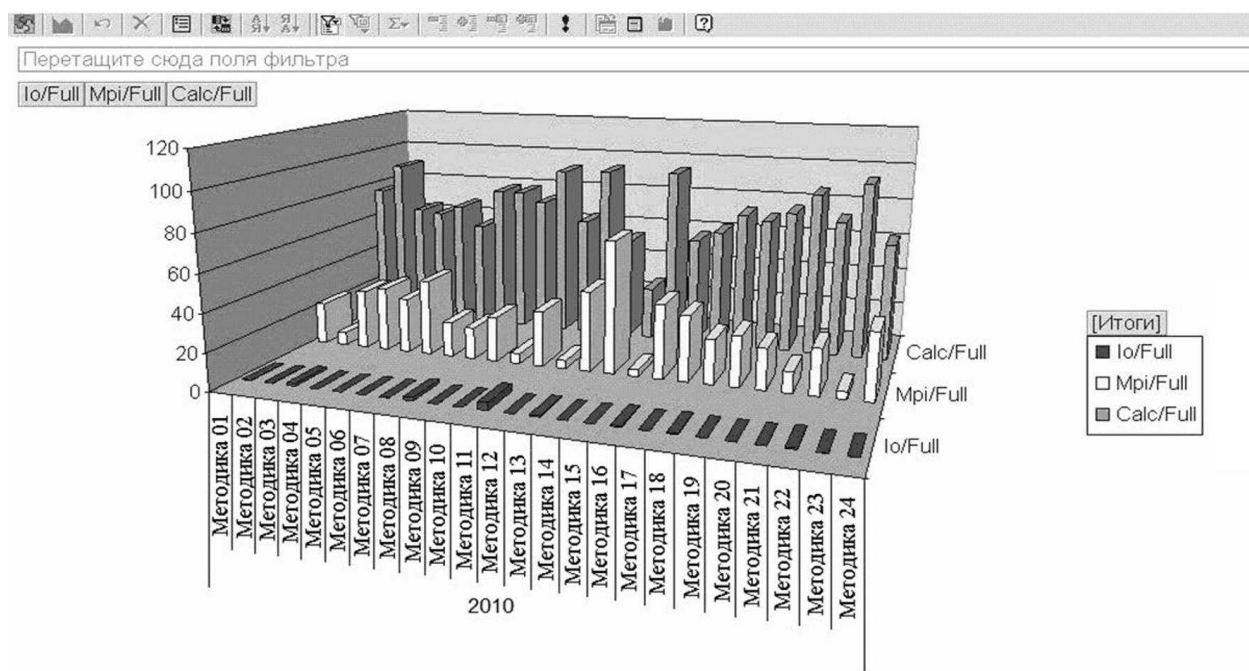


Рис. 2. Пример использования OLAP-технологии

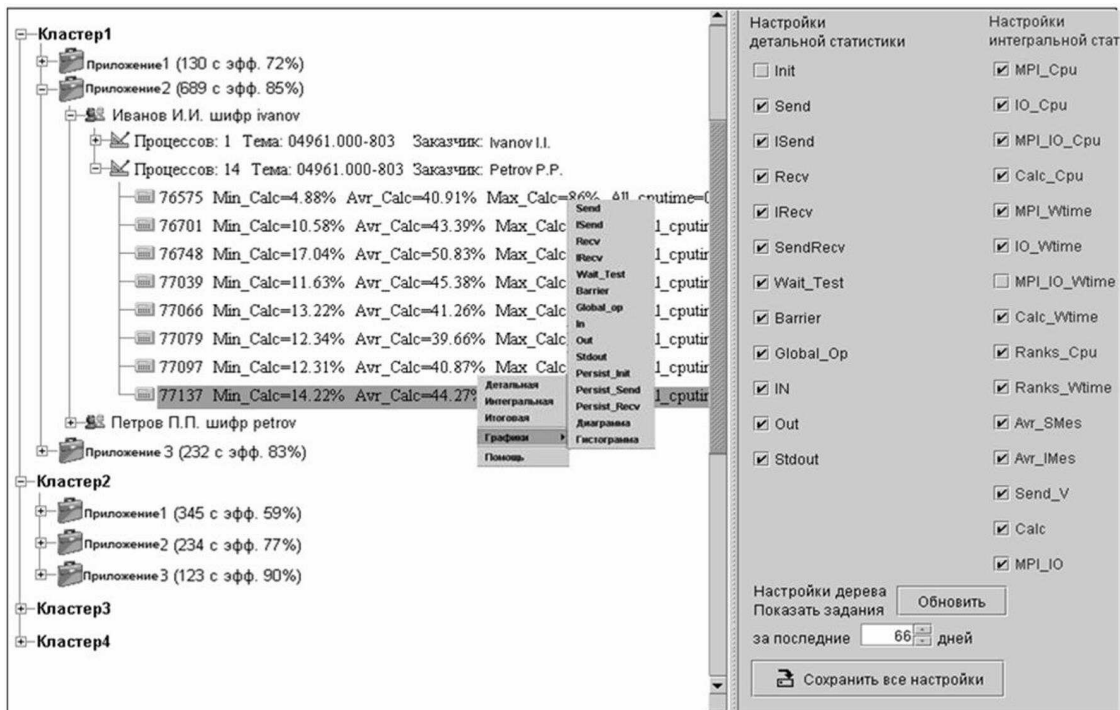


Рис. 3. Главная форма системы графического представления данных

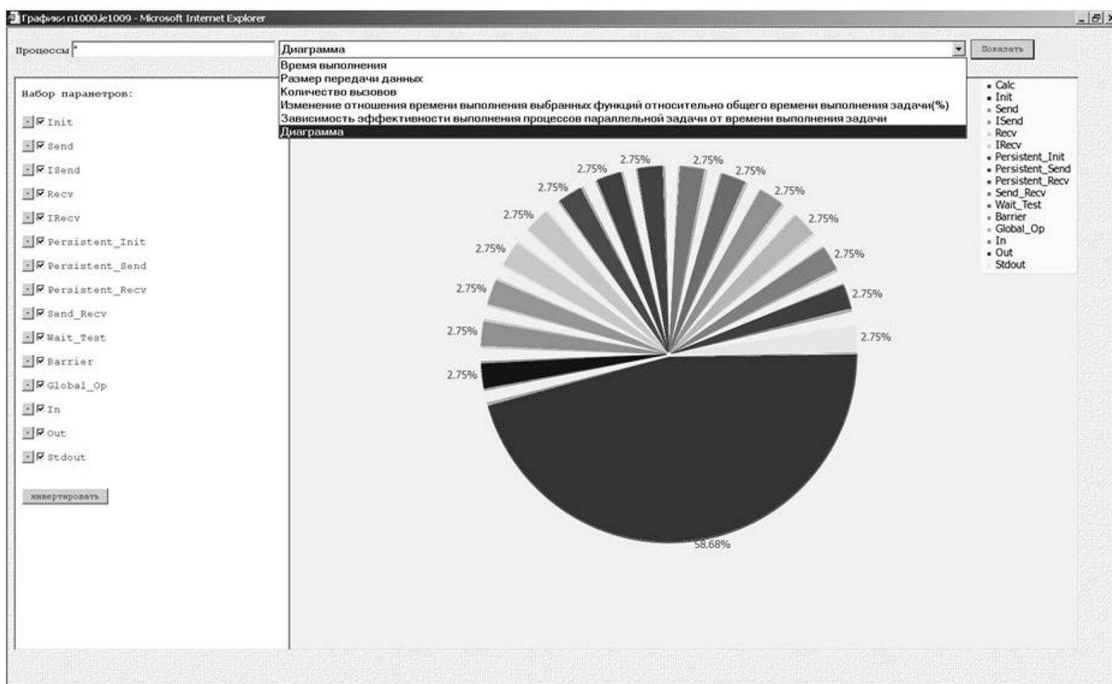


Рис. 4. График долевого распределения времен на выполнение полезных вычислений, групп MPI-функций и операций ввода-вывода относительно календарного времени счета задачи

Важным свойством системы является возможность представления в интегральной, структурированной форме (рис. 6) коммуникационной нагрузки (частота двухточечных и глобальных об-

менов и объем передаваемой информации) при выполнении параллельных задач. Это позволяет получить экспериментальные данные по счету реальных задач, необходимые для создания усо-

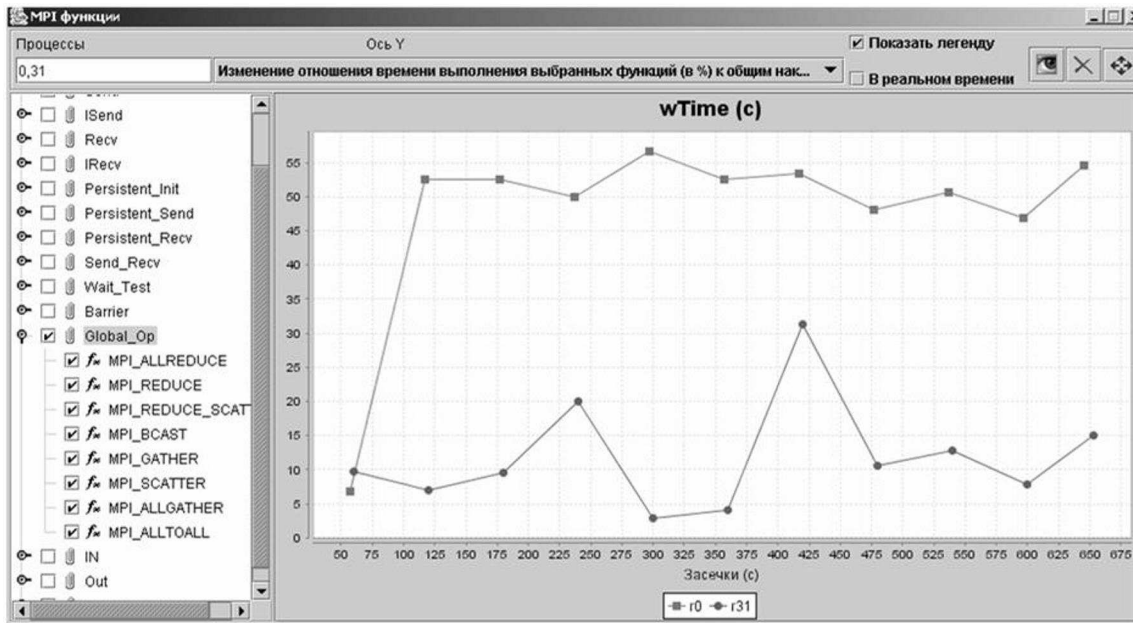


Рис. 5. График изменения отношения времени выполнения коллективных операций обменов MPI относительно общего времени выполнения для MPI-процессов

Расширенная интегральная статистика										
N_RANK	POINT2POINT_RATE	COLLECTIVE_RATE	ALL_RATE	P2P_SENDBYTE	COLLECTIVE_SENDBYTE	WAIT_TEST_RATE	BARRIER_RATE	BCAST_RATE	SCAT	
1	0	252,56	65,26	523,35	20244,685	2758,420	205,53	13,32	5,705	0,0
2	1	482,84	162,30	1052,85	17283,092	2973,327	397,70	35,22	15,082	0,0
3	2	282,92	59,85	548,83	18731,666					
4	3	718,06	150,85	1425,44	15992,507					
5	4	279,03	58,82	540,41	18618,390					
6	5	690,03	144,45	1367,41	15885,922					
7	6	160,75	33,86	311,78	21112,386					
8	7	688,56	144,65	1366,87	15992,507					
9	8	85,35	28,57	179,55	22433,704					
10	9	482,60	160,56	1036,60	16062,016					
11	10	197,17	65,80	414,19	18717,151					
12	11	534,02	175,86	1140,81	15548,393					
13	12	277,99	58,60	539,26	17353,137					
14	13	694,51	145,90	1378,68	14625,041					
15	14	282,21	59,28	546,57	17277,338					
16	15	694,14	145,31	1375,56	14527,896					
17	16	159,95	33,70	310,24	19751,806					
18	17	718,74	150,99	1426,78	14625,041					
19	18	85,70	28,56	179,45	20828,621					
20	19	489,35	162,80	1051,09	14385,462					

Расширенная итоговая статистика			
ПАРАМЕТР	MIN	AVG	MAX
POINT2POINT_RATE	85,35	272,25	718,74
COLLECTIVE_RATE	28,56	66,89	175,86
BARRIER_RATE	5,75	14,72	38,17
WAIT_TEST_RATE	65,19	208,18	557,04
ALL_RATE	179,45	547,32	1426,78
P2P_SENDBYTE	14385,46	17463,39	22433,70
COLLECTIVE_SENDBYTE	24,91	1167,55	2973,33
BCAST_RATE	2,87	6,41	16,34
SCATTER_RATE	0,00	0,00	0,00
GATHER_RATE	0,00	0,00	0,01
ALLGATHER_RATE	2,04	5,22	13,54
ALL2ALL_RATE	0,00	0,00	0,00
ALLREDUCE_RATE	13,79	29,99	80,47
REDUCE_RATE	4,12	10,54	27,33
REDUCE_SCATTER_RATE	0,00	0,00	0,00
BCAST_SENDBYTE	0,00	136,18	1220,47
SCATTER_SENDBYTE	0,00	0,00	0,00
GATHER_SENDBYTE	656,00	1221,82	3768,00
ALLGATHER_SENDBYTE	9,60	10761,60	26889,60
ALL2ALL_SENDBYTE	0,00	0,00	0,00
ALLREDUCE_SENDBYTE	11,31	97,95	433,20
REDUCE_SENDBYTE	83,35	83,35	83,35

Рис. 6. Структура коммуникационной нагрузки, выдаваемой параллельной задачей

вершенствованных параллельных программ и многопроцессорных ЭВМ следующего поколения.

Возможности STK

Собираемые характеристики выполнения параллельных задач. В STK по умолчанию собираются данные по 17 группам функций, используемых в параллельных программ-

ных комплексах: инициализация и завершение среды выполнения MPI, блокирующие передача или прием, неблокирующие передача или прием, операции передачи-приема, синхронизация процессов при выполнении неблокирующих обменов, барьерная синхронизация, коллективные операции, создание возобновляемых коммуникационных запросов, возобновляемые запросы на передачу или прием, чтение данных из файла, запись данных в файл, передача данных на стан-

дартный вывод, работа с метаданными файлов, открытие или закрытие файлов. Существует возможность детализировать эти группы, что позволяет предоставлять детальную информацию по выполнению конкретных функций из групп.

Исходя из 129 параметров, собираемых по каждому процессу параллельной задачи, вырабатываются интегральные характеристики выполнения параллельных задач:

- 1) время арифметической работы MPI-процессов задачи, т. е. время полезных вычислений без включения времени обменов;
- 2) время ожидания окончания обменов между процессами задачи;
- 3) объемы данных, передаваемых между процессами задачи;
- 4) объемы данных, записанных во время файловых операций;
- 5) объем информации на стандартном потоке вывода задачи;
- 6) время простоев задачи из-за обменов с файлами;
- 7) темпы вызовов операций MPI или ввода-вывода;
- 8) процент временных затрат на выполнение полезных вычислений относительно общего времени выполнения, т. е. показатель эффективности выполнения параллельной задачи.

В отличие от средств профилирования параллельных приложений STK накапливает не историю вызовов MPI-функций, а интенсивность вызовов различных типов MPI-функций и их основные параметры. Это позволяет использовать небольшой объем памяти, накапливать и собирать данные нужного типа в течение долговременного счета задачи с неограниченным числом MPI-вызовов.

Режимы сбора данных. Работа STK состоит из накопления данных по выполнению каждого MPI-процесса в оперативной памяти вычислительного узла, не доступной пользовательской программе, и сбора этих данных на внешнем носителе (в БД), обеспечивающем их сохранение в ходе счета задач.

Сбор данных может происходить в двух режимах: производственном и отладочном. Производственный режим (режим по умолчанию) осуществляет сбор накопленных STK данных через

каждые 30 минут и по окончании выполнения задачи, что обеспечивает минимальные затраты как времени на обработку, так и ресурсов для хранения информации. Отладочный режим осуществляет сбор и предоставление данных в ходе выполнения задачи через определенный пользователем временной интервал.

Управляет режимами сам пользователь при помощи переменной окружения *STK_MODE*. Можно задать следующие ее значения: 0 — отключить сбор статистики, 1 — установить производственный режим, 2 — установить отладочный режим.

Диагностика случаев "зависания" программ при выполнении функций MPI. STK обладает функцией диагностики *зависания* (тупика в процессе выполнения) MPI-процессов задачи из-за невозможности завершения MPI-функций, предназначенных для синхронизации или блокирующего приема, таких как *MPI_Barrier*, *MPI_Wait*, *MPI_Recv* и др. Распечатка функций MPI, приведших к тупику, позволяет пользователю найти ошибку в своей программе.

Анализ эффективности выполнения участков кода параллельных задач. STK поддерживает возможность сбора данных по выполнению отдельных участков кода параллельных задач. Это позволяет найти и устранить "узкие" места в параллельных программах. Участки кода параллельной задачи формируются пользователем при помощи двух API-функций: *stk_codepart_start* и *stk_codepart_stop*, задающих начало и конец участка кода параллельной задачи соответственно. Затем в системе визуализации можно увидеть статистику по эффективности выполнения отмеченных участков кода параллельной задачи.

Накладные расходы и масштабируемость STK. STK реализована как масштабируемая система. В зависимости от количества вычислительных узлов многопроцессорной ЭВМ и используемого транспортного протокола сбора параметров администратор может сконфигурировать систему таким образом, чтобы соотношение количеств серверов сбора статистики и обслуживаемых каждым сервером вычислительных узлов было оптимальным.

Алгоритмы STK, связанные со сбором и хранением данных, имеют низкие накладные расходы в условиях использования задачами большого числа (1000 и более) процессоров. Это позволяет использовать STK в качестве *штатной* (постоянно работающей) системы сбора данных о нагрузке на коммуникационную сеть и систему ввода-вывода, об эффективности счета параллельных задач и эффективности использования параллельных ЭВМ [14].

Накладные расходы STK в ВЦ РФЯЦ-ВНИИЭФ не превышают 1% от времени выполнения параллельной задачи, а в среднем они гораздо меньше и составляют ~ 1 мкс на обработку одного MPI-вызова. Оценка накладных расходов получена на широком спектре реальных параллельных задач с высоким темпом MPI-обменов (до 10 000 обменов в секунду).

Применение STK

Для использования STK пользователю не нужно модифицировать свои исходные тексты программ. Вместо стандартных команд для компиляции и сборки параллельных программ (mpicc, mpiCC, mpif77, mpif90) достаточно указать команды mpicc_stk, mpiCC_stk, mpif77_stk, mpif90_stk.

Используя STK, пользователь может получить основные показатели эффективности выполнения своих параллельных программ (рис. 7) — доли от общего времени выполнения:

- затрат на коммуникационные обмены (MPI);
- затрат на ввод-вывод;
- полезных вычислений.

Если пренебречь возрастанием времени вычислений на многопроцессорных узлах с общей памятью (выполнение ряда параллельных вычислительных алгоритмов существенно замедляется из-за снижения скорости обмена нескольких процессоров с памятью) и затратами на подготовку данных для обмена в программе пользователя (они обычно крайне малы), то эффективность выполнения параллельной задачи, вычисленная STK, как показала практика, с хорошей точностью совпадает (STK ее немного завывает) с эффективностью распараллеливания, измеренной самим пользователем.

Таким образом, эффективность *по STK* с достаточной точностью позволяет оценивать эффективность распараллеливания задачи.

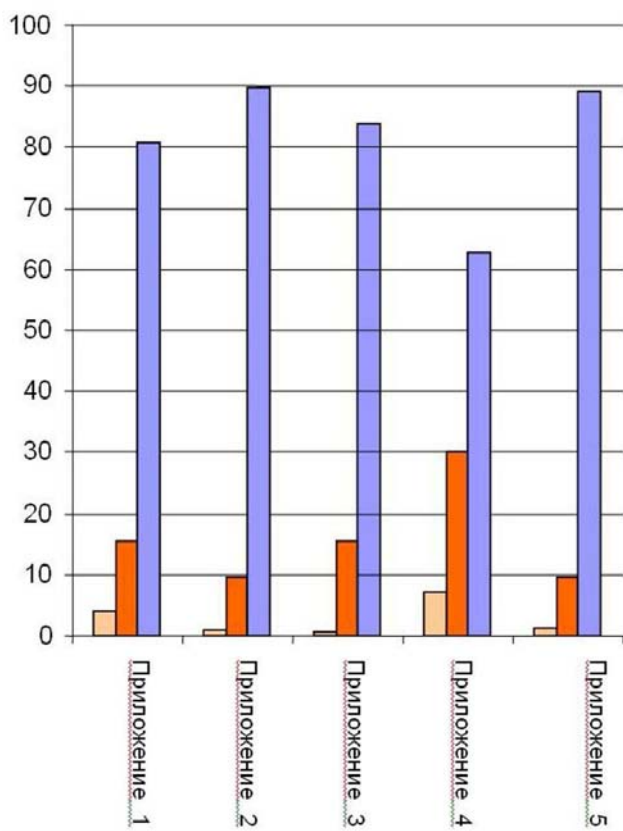


Рис. 7. Показатели эффективности выполнения параллельных задач: 1-й столбец — ввод-вывод; 2-й столбец — коммуникационные обмены (MPI); 3-й столбец — вычисления

Затраты на MPI и ввод-вывод данных составляют основные накладные расходы при выполнении параллельных задач. Одной из основных задач разработчиков параллельных программных комплексов является снижение этих накладных расходов с увеличением при этом доли полезных вычислений параллельной программы.

STK позволяет определить интегральные показатели эффективности счета параллельных программных комплексов на различных аппаратно-программных вычислительных системах (рис. 8). Это помогает выбрать оптимальную вычислительную систему для эффективного счета таких программных комплексов.

STK дает возможность наблюдать за эффективностью выполнения параллельных задач в процессе счета (рис. 9). Пользователи и службы управления производственным счетом могут своевременно завершить выполнение параллельной задачи с нехарактерно низким показателем эффективности счета (например, обусловленно-

зывать на этой основе контроль производственного счета потока задач.

Заключение

Система STK прошла длительный путь верификации, модернизации и применения на различных аппаратно-программных платформах.

Использование STK во всех параллельных задачах и на всех вычислительных комплексах ВЦ РЯЦ-ВНИИЭФ является обязательным, что помогает при отладке параллельных программ и позволяет в реальном времени наблюдать за эффективностью выполнения всех параллельных задач и эффективностью использования всех многопроцессорных ЭВМ.

В ходе эксплуатации STK собрано большое количество информации, которая помогла оптимизировать как счетные программные комплексы, так и использование дорогостоящего оборудования при проведении расчетов по этим комплексам.

Использование STK позволило определить требования различных параллельных программных комплексов к оборудованию и программному обеспечению, что помогло для каждого из них выбрать оптимальную вычислительную систему. Кроме того, эти требования были учтены при проектировании последующих многопроцессорных вычислительных систем.

Список литературы

1. Vampir — Performance Optimization. <http://www.vampir.eu>.

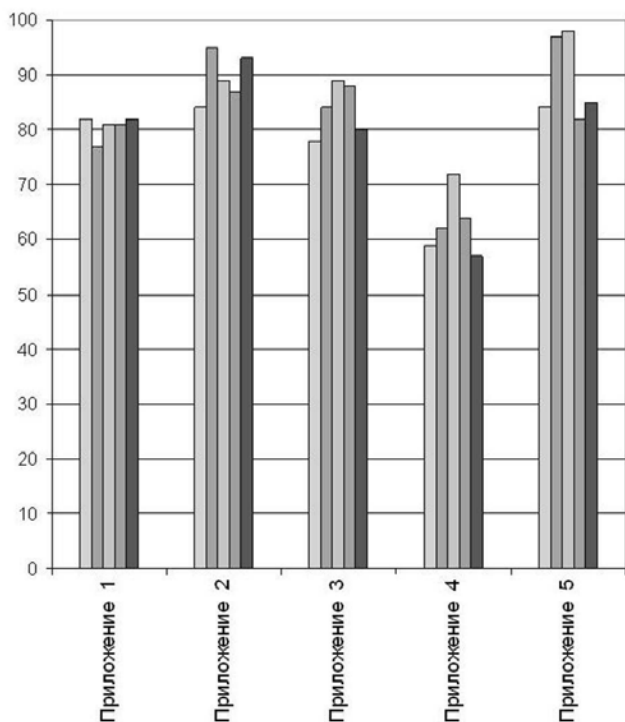


Рис. 8. Показатели эффективности выполнения параллельных задач на различных вычислительных системах (номер столбца диаграммы соответствует номеру вычислительной системы)

го неоптимально выбранной декомпозицией задачи), препятствуя неэффективному использованию вычислительных ресурсов.

STK позволяет удовлетворить требованиям широкого круга пользователей, таких как администраторы, аналитики, разработчики параллельных программ, диспетчерские службы управления производственным счетом, и органи-

Режим отображения: все задания								
	Статус	ID сессии	Исполнитель	Проц-ов	Исп.врем	minЭфф	avgЭфф	maxЭфф
1	▶	377383	...	288	249:44:24	6,37	22,78	98,17
2	▶	382744	...	320	58:03:48	68,68	74,51	81,53
3	▶	382808	...	320	57:12:45	72	77,15	83,85
4	▶	383407	...	40	29:38:30	1,96	77,32	87,45
5	▶	383388	...	40	23:20:37	0,26	84,01	89,3
6	▶	383235	...	240	15:28:13	79,46	85,13	89,57

Рис. 9. Мониторинг эффективности выполнения параллельных задач во время счета

2. MPE — MultiProcessing Environment. <http://www.mcs.anl.gov/research/projects/mpi/www/wwww4/MPE.html>.
3. Intel Trace and Analyzer Collector. <http://software.intel.com/ru-ru/intel-trace-analyzer>.
4. *Новаев Д. А., Бартенев Ю. Г., Варгин А. М. и др.* Инструментальные средства исследования эффективности параллельных приложений — STK // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2007. Вып. 11. С. 92—99.
5. *Snir M., Otto S., Huss-Lederman S. et al.* MPI: The Complete Reference. MIT Press, 1996.
6. MPICH 2: High Performance and Widely Portable Implementation of the Message Passing Interface (MPI) Standard. <http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich>.
7. The OpenMP API Specification for Parallel Programming. <http://openmp.org>.
8. *Керниган Б., Пайк П.* UNIX — универсальная среда программирования. М.: Финансы и статистика, 1992.
9. *Робачевский А. М.* Операционная система Unix. С-Пб.: БХВ—Петербург, 2003.
10. MySQL. <http://www.mysql.com>.
11. Oracle. <http://www.oracle.com/ru/products/database>.
12. PostgreSQL: The World's Most Advanced Open Source Database. <http://postgresql.org>.
13. OLAP: Business Intelligence-Effective Data Mining & Analysis. <http://www.olap.ru>.
14. *Бартенев Ю. Г., Близнюк Г. Г., Логвин Ю. В., Шатохина Ю. В.* Интегральные показатели оценки работы многопроцессорных вычислительных систем // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2010. Вып. 4. С. 44—51.

Статья поступила в редакцию 05.04.11.

УДК 519.254

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ КЛАССИФИКАЦИИ МНОГОКАНАЛЬНЫХ СИГНАЛОВ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ СЕРДЦА

И. П. Полякова, Т. Б. Феофанова, Н. В. Лукьянова
(НЦ ССХ им. А. Н. Бакулева, МГИУ, г. Москва)

Предлагаются нейросетевые модели для понижения размерности массива данных, полученных при многоканальной регистрации электрокардиограммы. Для выявления во множестве входных данных существенных признаков применяется модель, основанная на алгоритме обучения без учителя. Для классификации сигнала используется нейронная сеть, основанная на алгоритмах самоорганизации. Проведена апробация предлагаемых моделей для определения локализации аномального пути проведения электрического импульса в сердце пациентов с синдромом предвозбуждения.

Ключевые слова: нейронные сети, обобщенный алгоритм Хебба, карты самоорганизации, многоканальные сигналы электрокардиограммы.

Введение

Наиболее признанным направлением в кардиологии и ведущим в диагностике различных заболеваний сердца является изучение деятельности сердца путем исследования его электрической активности. При возбуждении определенного участка сердца на его поверхности и в его тканях возникает разность потенциалов, закономерно меняющаяся по величине и направлению по мере того, как вовлекаются в возбуждение новые участки сердца. Биоэлектрическая активность разных отделов сердца возникает в строго определенной последовательности, повторяющейся в каждом сердечном цикле возбуждения. Возникающие при этом изменения зарядов поверхности сердца создают в окружающей сердце проводящей среде динамическое электрическое поле, регистрируемое с поверхности тела-проводника в виде переменной разности потенциалов.

Широко известный метод кардиологической диагностики — электрокардиография — основан на регистрации электрической активности сердца в определенных точках на поверхности тела человека. Традиционно регистрируют 12 характерных кривых (из них 6 — на строго определенных участках на поверхности грудной клетки), совокупность которых получила название электрокардиограммы (ЭКГ).

Изучение основных электрофизиологических процессов в миокарде — активации (деполяризации) и процессов восстановления (реполяризации) в разных отделах сердца — важная составляющая кардиологической диагностики, основанная на том, что при различных заболеваниях сердца форма ЭКГ существенно меняется. Однако хорошо известны неоднозначность, двусмысленность некоторых изменений ЭКГ [1, 2] и, как следствие, затруднения в интерпретации данных ЭКГ и сложность диагностики некоторых видов сердечной патологии.

В связи с этим большой интерес вызывает современная модификация электрокардиографии — исследование электрического поля сердца с помощью многоканальной регистрации ЭКГ со всей поверхности грудной клетки, или поверхностное ЭКГ-картирование (ПК). В настоящее время данный метод рассматривают как неинвазивный (исследующий организм без повреждения кожных покровов или слизистых оболочек) метод исследования электрофизиологических процессов в сердце человека.

Регистрация большого числа каналов ЭКГ со всей поверхности грудной клетки является одним из наиболее информативных методов исследования электрической активности миокарда и позволяет получить максимальную информацию об особенностях электрического поля сердца в

любой момент деполяризации и реполяризации сердечной мышцы. В отличие от традиционной ЭКГ-12 здесь важна не только динамика потенциала во времени, но в первую очередь анализ интенсивности потенциалов в конкретный момент сердечного цикла в различных пространственных точках.

Для отображения полученных данных традиционно используют карты распределения кардиоэлектрического потенциала на развертке поверхности торса с указанием анатомических ориентиров: изопотенциальные карты в различные фазы сердечного цикла, изоинтегральные и разностные карты [3, 4]. В клинической практике поверхностные распределения или поверхностные карты анализируются программными или визуальными методами, при этом учитывается только малая часть полученной информации, необходимая точность классификации не обеспечивается, часто врачу трудно уточнить подкласс уже установленного класса заболевания.

С целью создания современных диагностических средств для выделения существенных признаков и классификации сигналов ПК, проведенного в ходе обследования кардиологических больных, была начата разработка математических моделей, методик и соответствующего автоматизированного программного комплекса.

Для обработки сигналов, как правило, используются статистические методы. Однако применение нейросетей на основе самоорганизации (или обучения без учителя) также позволяет эффективно обрабатывать сигнал. Модели нейросетей, обучаемые на основе принципа самоорганизации, хорошо отражают свойства биологических структур, что делает их использование более предпочтительным. Применение нейросетей при обработке полученных данных позволяет учесть наиболее важные характеристики ЭКГ и провести правильную классификацию имеющихся патологий.

Обобщенный алгоритм Хебба для анализа главных компонент

Основной сложностью при анализе многоканальных сигналов является выделение существенных признаков исследуемого массива данных без потери информативности. В представляемой работе для этого использовался обобщенный алгоритм Хебба (ГНА) — нейросетевой аналог анализа главных компонент [5]. Применение

данного алгоритма позволило выявить наиболее значимые признаки обрабатываемых сигналов и уже по ним провести классификацию.

При использовании статистического метода пространство данных преобразуется в пространство признаков, теоретически имеющее ту же размерность, что и исходное пространство. Однако обычно преобразования выполняются так, чтобы пространство данных могло быть представлено сокращенным количеством *эффективных* признаков. Таким образом, остается только существенная часть информации, содержащейся в данных, т. е. множество данных подвергается сокращению размерности.

Предположим, что существует \mathbf{x} — m -мерный случайный вектор, имеющий нулевое среднее значение, который необходимо представить в виде l компонент, где $l < m$. Требуется выяснить, существует ли такое линейное преобразование A , для которого обрезание вектора $A\mathbf{x}$ будет оптимальным в смысле среднеквадратичной ошибки. При этом преобразование A должно обладать малой дисперсией своих отдельных компонент.

Пусть \mathbf{q} — единичный вектор, на который проецируется вектор \mathbf{x} . Эта проекция определяется следующим образом: $A = \mathbf{x}^T \mathbf{q}$ при ограничении $\|\mathbf{q}\| = (\mathbf{q}^T \mathbf{q})^{\frac{1}{2}} = 1$.

Дисперсия A равна

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= E(A^2) = E\left((\mathbf{q}^T \mathbf{x})(\mathbf{x}^T \mathbf{q})\right) = \\ &= \mathbf{q}^T E(\mathbf{x}\mathbf{x}^T) \mathbf{q} = \mathbf{q}^T R \mathbf{q}. \end{aligned} \quad (1)$$

Матрица R является матрицей корреляции случайного вектора \mathbf{x} . Из выражения (1) видно, что дисперсия σ^2 проекции A является функцией единичного вектора и данную функцию можно представить как дисперсионный зонд:

$$\psi(\mathbf{q}) = \sigma^2 = \mathbf{q}^T R \mathbf{q}.$$

Взяв в качестве единичного вектора собственные векторы \mathbf{q}_j матрицы корреляции R , получим основные направления, вдоль которых дисперсионный зонд $\psi(\mathbf{q}_j)$ принимает экстремальные значения, а собственные значения матрицы корреляции R определяют экстремальные значения дисперсионного зонда $\psi(\mathbf{q}_j)$:

$$\psi(\mathbf{q}_j) = \lambda_j, \quad j = 1, 2, \dots, m.$$

Исходный вектор \mathbf{x} может быть реконструирован в следующем виде (Q — матрица, составленная из собственных векторов \mathbf{q}_j):

$$\mathbf{x} = Q\mathbf{a} = \sum_{j=1}^m a_j \mathbf{q}_j.$$

Количество признаков, необходимых для эффективного представления данных, можно сократить, устранив те линейные комбинации, которые имеют малые дисперсии, и оставив те, чьи дисперсии велики. Если взять l наибольших собственных значений матрицы R , то можно аппроксимировать вектор \mathbf{x} , отсекая члены разложения после l -го слагаемого:

$$\hat{\mathbf{x}} = \sum_{j=1}^l a_j \mathbf{q}_j.$$

Вектор ошибки аппроксимации \mathbf{e} равен разности между вектором исходных данных \mathbf{x} и вектором приближенных данных $\hat{\mathbf{x}}$:

$$\mathbf{e} = \mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}} = \sum_{j=l+1}^m a_j \mathbf{q}_j. \quad (2)$$

Таким образом, для того чтобы обеспечить сокращение размерности входных данных, нужно вычислить собственные значения и векторы матрицы корреляции векторов входных данных, а затем ортогонально спроецировать эти данные на подпространство, задаваемое собственными векторами, соответствующими доминирующим собственным значениям этой матрицы [6].

Существует тесная взаимосвязь между поведением самоорганизующихся нейронных сетей и статистическим методом анализа главных компонент. Один линейный нейрон с хеббовским правилом адаптации синаптических весов [7] может быть преобразован в фильтр для выделения первой главной компоненты входного распределения. Линейная модель с одним нейроном может быть расширена до сети прямого распространения с одним слоем линейных нейронов с целью анализа главных компонент для входного сигнала произвольной размерности.

Рассмотрим m -мерное пространство. Вектор входного пространства и матрицу синаптических весов обозначим так:

$$\mathbf{x}(n) = \{x_1(n), x_2(n), \dots, x_m(n)\}^T, \\ W(n) = \{\mathbf{w}_1(n), \mathbf{w}_2(n), \dots, \mathbf{w}_l(n)\}^T.$$

В данном случае используется сеть прямого распространения, имеющая следующую структуру: — все нейроны выходного слоя сети являются линейными;

- сеть имеет m входов и l выходов ($m < l$);
- обучению подлежит только множество синаптических весов w_{ij} , соединяющих узлы i входного слоя с вычислительными узлами j выходного слоя ($i = 1, 2, \dots, m; j = 1, 2, \dots, l$).

Теорема [8]. Если элементы матрицы синаптических весов $W(n)$ на шаге $n = 0$ принимают случайные значения, то с вероятностью 1 обобщенный алгоритм Хебба будет сходиться к фиксированной точке, а $W^T(n)$ достигнет матрицы, столбцы которой являются первыми l собственными векторами матрицы корреляции R , упорядоченными по убыванию собственных значений.

Данная теорема гарантирует нахождение по обобщенному алгоритму Хебба первых l собственных векторов матрицы корреляции R (в предположении, что соответствующие собственные значения отличны друг от друга). При этом важен факт, что саму матрицу R не требуется вычислять: ее первые l собственных векторов определяются непосредственно на основании входных данных.

Выходной сигнал $y_j(n)$ нейрона j в момент времени n определяется по формуле

$$y_j(n) = \sum_{i=1}^m w_{ji}(n) x_i(n), \quad j = 1, 2, \dots, l.$$

Синаптический вес $w_{ji}(n)$ настраивается в соответствии с обобщенной формой правила Хебба:

$$\Delta w_{ji}(n) = \\ = \eta \left(y_j(n) x_i(n) - y_j(n) \sum_{k=1}^j w_{ki}(n) y_k(n) \right), \quad (3)$$

где $\Delta w_{ji}(n)$ — коррекция, применяемая к синаптическому весу $w_{ji}(n)$ в момент времени n ; η — параметр скорости обучения. Как правило, параметр η берут зависимым от времени: $\eta(n) = 1/n$.

Перепишем уравнение (3) в следующем виде:

$$\Delta w_{ji}(n) = \eta y_j(n) (x'_i(n) - w_{ji}(n) y_j(n)),$$

где $x'_i(n) = x_i(n) - \sum_{k=1}^{j-1} w_{ki}(n) y_k(n)$, или в векторном представлении

$$\Delta \mathbf{w}_j(n) = \eta y_j(n) \mathbf{x}'(n) - \eta y_j^2(n) \mathbf{w}_j(n), \quad (4)$$

где вектор $\mathbf{x}'(n) = \mathbf{x}(n) - \sum_{k=1}^{j-1} \mathbf{w}_k(n) y_k(n)$ представляет собой модифицированную форму входного вектора.

Основываясь на представлении (4), можно заметить следующее: для первого нейрона ($j = 1$) сети прямого распространения $\mathbf{x}'(n) = \mathbf{x}(n)$. Как было показано выше, этот нейрон извлекает первую главную компоненту входного вектора $\mathbf{x}(n)$.

Для второго нейрона ($j = 2$) сети можно записать

$$\mathbf{x}'(n) = \mathbf{x}(n) - \mathbf{w}_1(n) y_1(n).$$

Поскольку первый нейрон уже извлек первую главную компоненту, второй нейрон "видит" входной вектор $\mathbf{x}'(n)$, из которого удален первый собственный вектор матрицы корреляции R . Таким образом, второй нейрон извлекает первую главную компоненту вектора $\mathbf{x}'(n)$, что эквивалентно второй главной компоненте исходного входного вектора $\mathbf{x}(n)$.

Продолжая эту процедуру для оставшихся нейронов сети прямого распространения, получаем, что каждый из выходов сети, обученный с помощью обобщенного алгоритма Хебба, представляет собой отклик на конкретный собственный вектор матрицы корреляции входного вектора, причем отдельные выходы упорядочены по убыванию ее собственных значений.

Увеличение параметра η ведет к более быстрой сходимости и увеличению асимптотической среднеквадратичной ошибки.

Далее необходимо оценить количество главных компонент, требуемых для восстановления сигнала с минимальной среднеквадратичной ошибкой. Вектор ошибки аппроксимации \mathbf{e} определяется по формуле (2).

Однако алгоритм Хебба не позволяет найти ошибку таким образом, так как при обучении сети получается только l собственных векторов. Поэтому найдем ошибку экспериментальным путем.

Возьмем в качестве обучающей выборки 100 сигналов ЭКГ. Обучим сеть для выделения l главных компонент. Полученные веса сохраним. Возьмем тестовую выборку — 100 сигналов ЭКГ. Найдем главные компоненты и восстановим по полученным данным исходный сигнал ЭКГ.

На рис. 1 приведен график зависимости средней ошибки восстановления сигнала от количества главных компонент для тестовой выборки (100 сигналов). Из графика видно, что

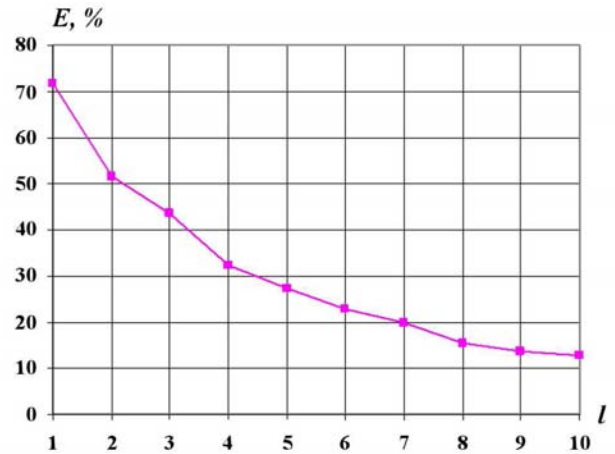


Рис. 1. Зависимость средней ошибки восстановления сигнала от количества главных компонент

8-10 компонент достаточно для восстановления сигнала и дальнейшее увеличение количества главных компонент существенного выигрыша не даст.

Пример восстановленного сигнала для 1, 3, 5 и 7 компонент приведен на рис. 2. Видно, что с ростом количества главных компонент восстановленный сигнал приближается к исходному. При небольшом количестве главных компонент (1—3) разница между исходным и восстановленным сигналами заметна. Однако уже при 5 главных компонентах ошибка восстановления достаточно мала.

Качество восстановленного сигнала для разных тестовых данных было также разным. Некоторые сигналы имели маленькую ошибку восстановления уже при 4-5 главных компонентах, а некоторые давали большую погрешность и при 10 главных компонентах. В данном случае это свидетельствует о несовершенстве обучающей выборки.

В условиях НИЦ ССХ для многоканальной регистрации ЭКГ используются 80 датчиков. Сигнал каждого из датчиков был подвергнут обработке с помощью обобщенного алгоритма Хебба. Для каждого сигнала было выделено 8 главных компонент. Для последующей классификации использовался вектор, составленный из главных компонент всех 80 датчиков.

Классификация при помощи самоорганизующихся карт Кохонена

Для определения принадлежности сигнала к той или иной группе использовались самоорга-

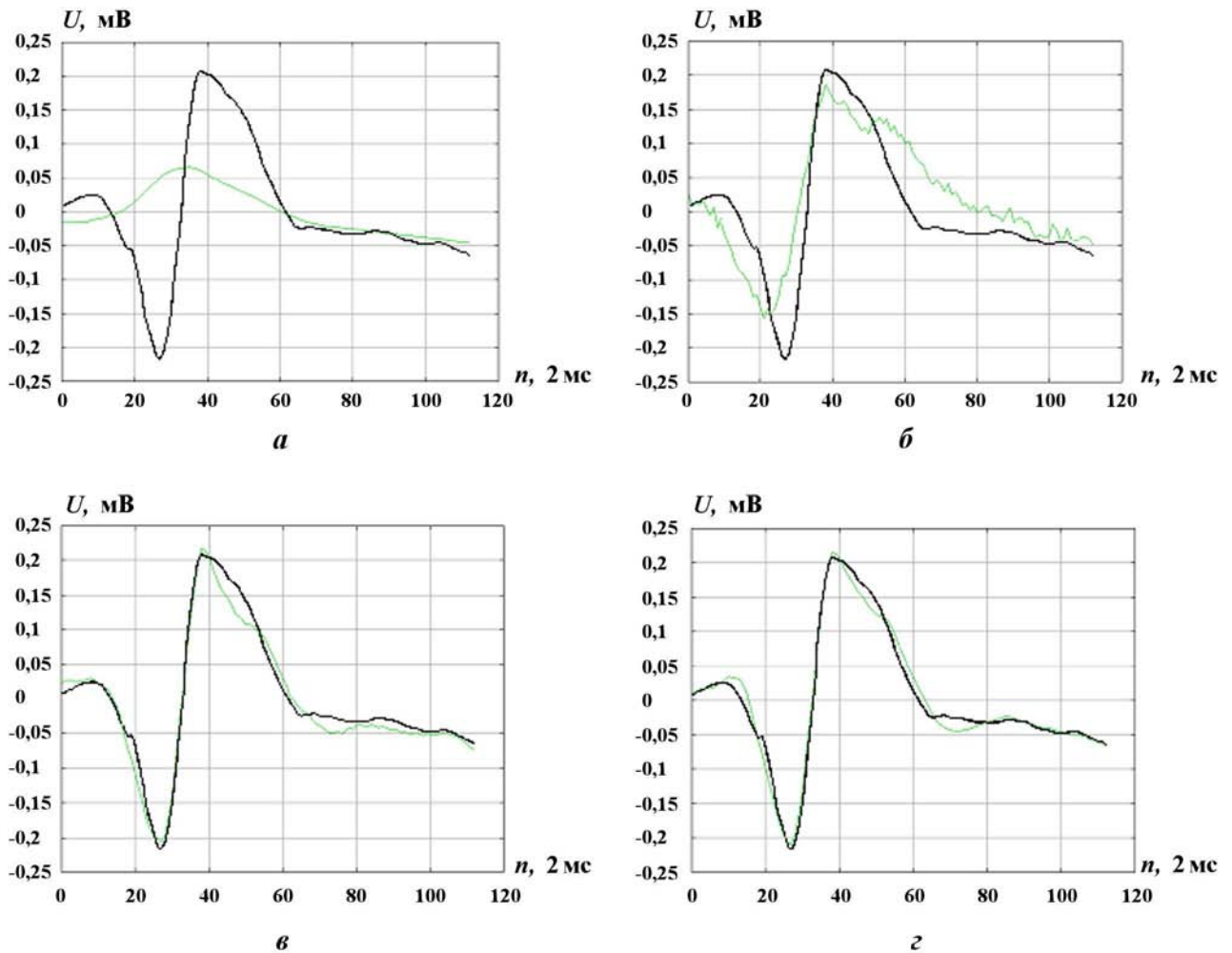


Рис. 2. Примеры сигналов, восстановленных по 1 (а), 3 (б), 5 (в), 7 (г) главным компонентам: — — исходный сигнал; — — восстановленный сигнал

низующиеся карты Кохонена [5]. Основной целью карт самоорганизации является преобразование поступающих векторов сигналов, имеющих произвольную размерность, в одно- или двумерную карту. При этом преобразование осуществляется адаптивно, в топологически упорядоченной форме. После окончания обучения самоорганизующихся карт Кохонена получается карта с разделением на области, где каждая область соответствует определенному классу.

Алгоритм формирования самоорганизующихся карт начинается с инициализации синаптических весов сети. После корректной инициализации сети активизируются три основных процесса: конкуренции, кооперации и синаптической адаптации [8].

Сущность алгоритма самоорганизации, предложенного Кохоненом, состоит в вычислении

свойств хеббоподобного правила обучения и латеральных взаимодействий. Существенными характеристиками этого алгоритма являются следующие:

- непрерывное входное пространство образов активации, которые генерируются в соответствии с некоторым распределением вероятности;
- топология сети в форме решетки, состоящей из нейронов (она определяет дискретное входное пространство);
- зависящая от времени функция окрестности, которая определена в окрестности *нейрона-победителя*;
- параметр скорости обучения, для которого задается начальное значение и который постепенно убывает во времени, но никогда не достигает нуля.

Рассмотрим m -мерное пространство. Вектор входного пространства и вектор синаптических весов обозначим так:

$$\mathbf{x}(n) = \{x_1(n), x_2(n), \dots, x_m(n)\}^T;$$

$$\mathbf{w}_j(n) = \{w_{j1}(n), w_{j2}(n), \dots, w_{jm}(n)\}^T,$$

$$j = 1, 2, \dots, l,$$

где l — общее количество нейронов в решетке.

После инициализации весов выбираем вектор из входного пространства. Находим наиболее подходящий ("победивший") нейрон на шаге n , используя критерий минимума евклидова расстояния (процесс конкуренции):

$$i(\mathbf{x}) = \arg \min_j \|\mathbf{x} - \mathbf{w}_j\|, \quad j = 1, 2, \dots, l.$$

Затем корректируем векторы синаптических весов всех нейронов, используя следующую формулу (синаптическая адаптация):

$$\mathbf{w}_j(n+1) = \mathbf{w}_j(n) + \eta(n) h_{j,i(\mathbf{x})}(n) (\mathbf{x} - \mathbf{w}_j(n)),$$

где $h_{j,i(\mathbf{x})}$ — функция окрестности с центром в победившем нейроне (процесс кооперации); $\eta(n)$ — параметр скорости обучения. Для улучшения процесса обучения рекомендуется использовать следующие значения указанных параметров [5]:

$$h_{j,i(\mathbf{x})}(n) = e^{\frac{-d_{j,i}^2}{2\sigma^2(n)}}; \quad \eta(n) = \eta_0 e^{\frac{-n}{\tau_2}}; \quad \sigma(n) = \sigma_0 e^{\frac{-n}{\tau_1}}.$$

Параметр σ называется эффективной шириной топологической окрестности. Этот параметр определяет уровень, до которого нейроны из окрестности победившего нейрона участвуют в обучении.

Процесс обучения можно условно разбить на два этапа: этап самоорганизации и этап сходимости.

На первом этапе происходит топологическое упорядочение векторов весов. Фактически на данном этапе происходит грубая настройка нейронной сети. В начале этапа функция окрестности $h_{j,i(\mathbf{x})}$ должна охватывать практически все нейроны сети и иметь центр в победившем нейроне. Когда размер $h_{j,i(\mathbf{x})}$ сократится до малого значения и будет содержать в себе только ближайших соседей победившего нейрона или только сам нейрон-победитель, первый этап закончится и начнется второй.

На втором этапе происходит тонкая настройка нейронной сети. Обычно количество итераций

на данном этапе в несколько сотен раз превышает количество нейронов сети. Параметр скорости обучения $\eta(n)$ во время второго этапа должен быть достаточно мал, но не приближаться к нулю. После завершения процесса сходимости (стабилизации нейронной сети) вычисленная карта признаков отображает важные статистические характеристики исходного пространства [9].

Обозначим символом Φ нелинейное преобразование, которое отображает входное пространство X в выходное пространство A : $\Phi: X \rightarrow A$. Для данного входного вектора \mathbf{x} по алгоритму, с использованием карты Φ , определяется наиболее подходящий нейрон $i(\mathbf{x})$ в выходном пространстве A . Вектор синаптических весов \mathbf{w}_i нейрона $i(\mathbf{x})$ можно рассматривать как указатель на этот нейрон из входного пространства X . Это значит, что синаптические элементы вектора \mathbf{w}_i можно рассматривать как координаты образа нейрона i , проецируемые во входное пространство.

Нейронам в двумерной решетке назначаются метки классов в зависимости от того, как каждый из векторов обучающей выборки возбудил конкретный нейрон в самоорганизующейся сети. В результате нейроны в двумерной решетке разбиваются на некоторое количество связанных областей [10], каждая из которых соответствует определенному классу патологий.

Результаты исследований

Проанализированы данные обследования 40 пациентов с синдромом предвозбуждения; это заболевание обусловлено наличием дополнительных аномальных путей проведения электрического импульса в сердце [2]. В исследовании участвовали данные пациентов с левой и правой локализацией аномального пути, установленной в ходе инвазивного электрофизиологического исследования сердца. Всем пациентам проведено ПК в покое с помощью электрокардиографической системы "Cardiag", которая обеспечивает синхронную запись 80 датчиков ЭКГ на поверхности всей грудной клетки. Анализировались данные, представленные в виде интегральных карт или массивов значений интегралов, рассчитанных в каждой точке регистрации от кривой ЭКГ на интервале QRS, соответствующем активации миокарда желудочков сердца.

Все данные делились на две группы. По данным первой группы происходило обучение, а по

данным второй группы — тестирование полученных результатов. В процессе исследования было случайным образом сформировано 10 обучающих выборок. Каждая выборка содержала данные из 20 многоканальных ЭКГ (20 векторов), 10 из которых — с левой локализацией аномального пути, 10 — с правой. Данные из остальных 20 ЭКГ (по 10 с левой и правой локализацией) использовались при формировании тестовых выборок — их также было взято 10.

На рис. 3 представлена карта Кохонена, построенная для одной из обучающих выборок. Светлосерая область соответствует левой локализации аномального пути, темная — правой локализации. Более светлым цветом выделены нейроны-победители для векторов из обучающей выборки.

Для всех тестовых выборок был получен высокий результат: от 17 до 20 правильно классифицированных локализаций аномального пути, что в среднем составило 92,5%. В большинстве случаев ошибки происходили на одних и тех же данных, как правило, полученных от пациентов с серьезными сопутствующими заболеваниями сердца. Однако после включения этих данных в обучающую выборку правильная классификация достигала 100%.

Синдром предвозбуждения представляет собой достаточно простую электрофизиологическую модель, что объясняет столь хорошие результаты уже при малых выборках. Однако использование рассмотренных математических моделей для других классов сердечно-сосудистых заболеваний также показывает высокое качество их применения уже при небольших обучающих выборках.

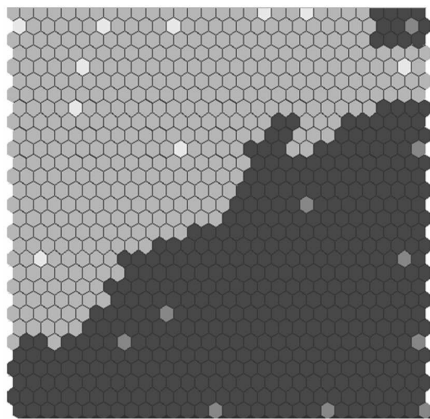


Рис. 3. Пример карты Кохонена

Таким образом, предлагаемые математические модели могут применяться для выделения существенных признаков и последующей классификации многоканальных сигналов электрического поля сердца.

Список литературы

1. Теоретические основы электрокардиологии / Под ред. К. В. Нельсона и Д. Б. Гезеловица. М.: Медицина, 1979.
2. *Морман Д., Хеллер Л.* Физиология сердечно-сосудистой системы. С.-Пб.: Питер, 2000.
3. Поверхностное картирование как метод диагностики нарушений ритма сердца // Клиническая аритмология. М.: Медпрактика-М, 2009. С. 157—175.
4. *Полякова И. П.* Диагностические возможности многоканального поверхностного ЭКГ-картирования // Креативная кардиология. 2007. № 1—2. С. 256—269.
5. *Хайкин С.* Нейронные сети. Полный курс. С.-Пб.: Вильямс, 2006.
6. *Oja E.* Subspace Methods of Pattern Recognition. Letchworth, England: Research study press, 1983.
7. *Brawn T. H.* Hebbian synapses: Biophysical mechanisms and algorithms // Annual Review of Neuroscience. 1990. Vol. 13. P. 475—511.
8. *Sanger T. D.* Optimal unsupervised learning in a single layer linear feedforward neural network // Neural Networks. 1989. Vol. 12. P. 459—473.
9. *Kohonen T.* Self-organized formation of topologically correct feature maps // Biological Cybernetics. 1982. Vol. 3. P. 59—69.
10. *Kohonen T.* Exploration of very large databases by self-organized maps // Int. Conf. on neural networks. Houston: IEEE Service Center, 1997. Vol. 1. P. PL1—PL6.

Статья поступила в редакцию 29.07.11.

ПЕРЕЧЕНЬ

статей, опубликованных в 2011 г. в научно-техническом сборнике
Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое
моделирование физических процессов

Бондаренко Ю. А. Применение вариационных принципов механики для построения дискретных по времени разностных моделей газодинамики. 7. Сохранение фазового объема и каноничности в конечно-разностных схемах типа "крест". Вып. 1. С. 3–16.

Житник А. К., Донской Е. Н., Огнев С. П., Горбунов А. В., Залаялов А. Н., Иванов Н. В., Малькин А. Г., Рослов В. И., Семёнова Т. В., Субботин А. Н. Методика С-007 решения методом Монте-Карло связанных линейных уравнений переноса нейтронов, гамма-квантов, электронов и позитронов. Вып. 1. С. 17–24.

Арсентьев А. П., Писарев В. Н. Особенности применения TVD-подхода к DS_n -методу решения трехмерного уравнения переноса нейтронов в криволинейной системе координат. Вып. 1. С. 25–39.

Певная П. И., Тихомиров Б. П. Тепловые волны от сосредоточенных и объемных источников в двумерных осесимметричных и плоских областях. Вып. 1. С. 40–48.

Бондаренко Ю. А., Голубев А. А., Горбунов А. А., Наумов А. О., Панов А. И. О "шахматном эффекте" в некоторых разностных схемах для двумерной и трехмерной теплопроводности. Вып. 1. С. 49–53.

Пронин В. А. Методы распараллеливания решения двумерных задач газодинамики на неструктурированных сетках с переменной топологией в методике МЕДУЗА. Вып. 1. С. 54–67.

Крутько Н. А. Универсальная программная оболочка TSS3 для построения пользовательского интерфейса программных комплексов на языке Фортран. Вып. 1. С. 68–80.

Ободан Н. И., Гук Н. А., Пацюк А. Г. Теоретико-экспериментальный анализ теплофизических свойств материалов при неоднородном нагреве. Вып. 1. С. 81–89.

Бондаренко Ю. А. Применение вариационных принципов механики для построения дискретных по времени разностных моделей газодинамики. 8. Сохранение фазового объема и каноничности в неявных конечно-разностных схемах. Вып. 2. С. 3–17.

Софронов В. Н., Мокшина К. С., Шемарулин В. Е. Разностные схемы молекулярной динамики. 1. Сравнительный анализ устойчивости, точности и экономичности. Вып. 2. С. 18–32.

Карлыханов Н. Г., Уракова А. В., Шнитко С. А. Применение метода квазидиффузии для решения задач переноса излучения в спектральной кинетической постановке в двумерном осесимметричном случае на квадратной сетке. Вып. 2. С. 33–43.

Бочков А. И., Сучкова В. В., Трубицын А. П. DS_n -метод решения двумерного кинетического уравнения переноса, записанного в сферической системе координат. Вып. 2. С. 44–55.

Шестаков А. А. О диффузионных свойствах схемы РОМБ для P_1 -уравнений. Вып. 2. С. 56–62.

Гинкин В. П., Гинкина О. М., Ганина С. М. Математическое моделирование процесса выращивания биокристаллов методом свободной диффузии. Вып. 2. С. 63–69.

Тарасов В. И., Козуб А. Г., Сырова И. В., Чухманов Н. В., Меньшикова А. К., Фролова Е. А., Овчинников А. М., Овсянников А. Ю. Технология глобальной перестройки пространственной сетки и пересчета сеточных величин на примере двумерных расчетов по методике КОРОНА. Вып. 2. С. 70–77.

Осипов М. Ю., Бондарь И. Л., Семенов Р. А., Серова Т. Ю. Виртуализация как технология повышения эффективности использования технических средств ИТ-инфраструктуры. Вып. 2. С. 78–84.

Шемарулин В. Е., Софронов В. Н., Мокина К. С. Разностные схемы молекулярной динамики. 2. Система двумерных тестов. Вып. 3. С. 3–15.

Янилкин Ю. В., Карпенко И. И., Гаврилова Е. С., Дегтяренко Л. И., Маерина Е. А., Топорова О. О. Методы численного моделирования детонации и горения ВВ в эйлеровых газодинамических расчетах. Вып. 3. С. 16–28.

Егорова А. С., Карлыханов Н. Г. Решение кинетического уравнения переноса излучения методом усредненных косинусов. Вып. 3. С. 29–38.

Игнатова О. Н., Раевский В. А. Энергетическая модель упрочнения металлов. Вып. 3. С. 39–44.

Галиуллина Н. Е., Храмченков М. Г., Храмченков Э. М., Чекалин А. Н., Михайлов В. В. О некоторых особенностях моделей механики многофазных грунтов. Вып. 3. С. 45–51.

Сидоров М. Л. Модификация алгоритма Боуэра–Уотсона генерации топологически двумерных неструктурированных сеток в областях произвольной формы. Вып. 3. С. 52–62.

Жуков Д. А., Вялухин В. М. Особенности реализации коммуникационного программного обеспечения КС-ЭВМ при использовании бескоммутаторной технологии. Вып. 3. С. 63–67.

Басалов В. Г. Управление единой коммуникационной средой из программно-независимых коммуникационных подсистем. Вып. 3. С. 68–74.

СОДЕРЖАНИЕ

<p><i>Грабовенская С. А., Шестаков А. А.</i> Анализ некоторых схем для решения уравнения переноса излучения квазидиффузионным методом 3</p> <p><i>Старков В. А., Поливанов И. Ф.</i> Эффективные граничные условия на поверхности тонких цилиндрических тел и на границе полых цилиндрических каналов 16</p> <p><i>Голубев А. И., Пятаков Н. П.</i> Тесты для программ, использующих гибридную модель при численном моделировании динамики плазмы 29</p> <p><i>Софронов В. Н., Мокина К. С., Шемарулин В. Е.</i> Разностные схемы молекулярной динамики. 3. Результаты тестовых расчетов 39</p> <p><i>Сапожников Ф. А., Ионов Г. В., Дрёмов В. В.</i> Программный комплекс "Молох" для молекулярно-динамического моделирования процессов в конденсированных материалах 50</p> <p><i>Гинкин В. П., Ганина С. М., Чернов К. Г.</i> Неравновесная модель для расчета процесса кристаллизации двухкомпонентных расплавов 58</p> <p><i>Воронин Б. Л., Грушин С. А., Житник А. К., Залялов А. Н., Копкин С. В., Крючков И. А., Малькин А. Г., Огнев С. П., Рослов В. И., Рыбкин А. С., Степаненко С. А., Шагалиев Р. М., Южаков В. В.</i> Программно-аппаратные комплексы на базе вычислительных систем с арифметическими ускорителями для моделирования методом Монте-Карло и методом молекулярной динамики 66</p> <p><i>Новаев Д. А., Бартнев Ю. Г., Липов Д. И., Колпаков С. И., Киселев А. Б., Серова Т. Н., Худякова Л. В.</i> Программные средства STK для исследования эффективности выполнения параллельных приложений 72</p> <p><i>Полякова И. П., Феофанова Т. Б., Лукьянова Н. В.</i> Математические модели классификации многоканальных сигналов электрического поля сердца 82</p>	
--	--

CONTENTS

<p><i>Grabovenskaya S. A., Shestakov A. A.</i> Analysis of some schemes for solving radiation transport equations using the quasidiffusion method 3</p> <p><i>Starkov V. A., Polivanov I. F.</i> Efficient boundary conditions on the surfaces of thin cylindrical bodies and on the boundaries of hollow cylindrical channels 16</p> <p><i>Golubev A. I., Pyatakov N. P.</i> Tests for the programs using a hybrid model for plasma dynamics numerical simulation 29</p> <p><i>Sofronov V. N., Mokina K. S., She-marulin V. E.</i> Molecular dynamics difference schemes. 3. Test simulation results 39</p> <p><i>Sapozhnikov F. A., Ionov G. V., Dry-omov V. V.</i> Program complex "Molokh" for molecular-dynamic simulation of processes in condensed materials 50</p> <p><i>Ginkin V. P., Ganina S. M., Chernov K. G.</i> Non-equilibrium model for the calculation of the two-component liquid crystallization 58</p> <p><i>Voronin B. L., Grushin S. A., Zhitnik A. K., Zalyalov A. N., Kopykin S. V., Kryuchkov I. A., Mal'kin A. G., Ognev S. P., Roslov V. I., Rybkin A. S., Stepanenko S. A., Shagaliev R. M., Yuzhakov V. V.</i> Software-hardware complexes based on the computer systems with arithmetic accelerators for simulations using the Monte-Carlo code and molecular dynamics method 66</p> <p><i>Novaev D. A., Bartenev Yu. G., Lipov D. I., Kolpakov S. I., Kiselev A. B., Serova T. N., Hudyakova L. V.</i> An STK software for the study of the execution efficiency for parallel applications 72</p> <p><i>Polyakova I. P., Feofanova T. B., Luk'yanova N. V.</i> Mathematical classification models for multi-channel signals of the electric field of a heart 82</p>	
---	--

Перечень статей, опубликованных в 2011 г. в научно-техническом сборнике "Вопросы атомной науки и техники". Сер. Математическое моделирование физических процессов 89

The list of papers published in the sci-tech collected edition "Voprosy atomnoi nauki i tekhniki". Ser. Matem. Model. Fiz. Proc. during 2011 89

Ответственный за выпуск Е. В. Соколовская

Редакторы Л. В. Мазан,
Е. Н. Старченко

Корректоры В. В. Барышникова,
Е. А. Окатьева
А. В. Федоренко

Подписано в печать 3.11.11

Офсетн. печ. Усл. печ. л. ~ 9,4

Тираж 1000 экз. Зак. тип. 9 статей

Формат 60×84/8

Уч.-изд. л. ~ 12

Индекс 3642

Оригинал-макет подготовлен в Математическом отделении
Всероссийского научно-исследовательского института
экспериментальной физики

Отпечатано в ИПК ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ"
607188 г. Саров Нижегородской обл.

ВНИМАНИЮ АВТОРОВ

Редакция н/т сборника "Вопросы атомной науки и техники" серии "Математическое моделирование физических процессов" просит авторов, направляющих статьи в журнал, придерживаться следующих правил.

1. Автор представляет редакции 2 экземпляра рукописи основного текста статьи на русском языке, а также аннотацию и реферат с обязательным указанием ключевых слов. Текст набирается на компьютере (шрифт не менее 12 пунктов) на одной стороне листа формата А4 через два интервала. Рекомендуемый объем статьи — не более 25 страниц указанного формата, включая рисунки. Все страницы должны быть пронумерованы. Рукопись должна быть подписана всеми авторами.

Редакции также передается (по электронной почте) соответствующий текстовый файл в формате WinWord или LaTeX (с использованием стандартного стиля article).

2. Статью обязательно должны сопровождать следующие документы:

1) направление от организации, в которой выполнена работа, с указанием информации о первичном или повторном опубликовании материала статьи (отдельных ее страниц);

2) разрешение на открытое опубликование от организации, в которой выполнена работа.

Название статьи и список авторов, указанные в документах, должны полностью соответствовать указанным в представленной рукописи. Необходимо также сообщить номер телефона или электронный адрес для обратной связи.

3. Название статьи должно быть конкретным и лаконичным. Перед названием статьи необходимо указать УДК. Разделы и подразделы текста должны иметь заголовки.

4. Необходимо соблюдать единство терминологии, соответствующее стандартам по теме статьи.

5. Для нумерации формул, на которые имеются ссылки в тексте, используются последовательные натуральные числа. Формулы, на которые нет ссылок, не нумеруются.

6. Все обозначения должны расшифровываться. Не рекомендуется использовать одинаковые обозначения для разных величин и разные обозначения для одной и той же величины.

Для различия букв с одинаковым или сходным начертанием (например, a и α ("альфа"), v и ν ("ню"), c и C) желательнее делать пометки. При этом строчные (малые) буквы следует помечать двумя черточками сверху (например, \bar{c} , \bar{k} , \bar{z} , \bar{d}), а прописные (большие) — двумя черточками снизу (например, \underline{C} , \underline{K} , \underline{Z} , \underline{Q}). Для отличия цифры 0 от буквы O цифру следует перечеркивать косой чертой. Должны различаться по написанию единица, штрих и запятая в индексах, а также буквы e и l , I и J . Необходимо выделять (жирным шрифтом или стрелкой) векторные величины.

7. Рисунки должны быть четкими и обязательно иметь подрисовочные подписи. Рисунки также необходимо представить в виде графических файлов в формате .eps или .jpg. Текстовые надписи на самих рисунках не рекомендуются, их заменяют символьными (цифровыми) обозначениями, которые объясняются в тексте или подрисовочной подписи.

Таблицы должны иметь заголовки.

На все таблицы и рисунки в тексте статьи должны быть ссылки.

8. Список литературы должен быть составлен по порядку ссылок в тексте. Ссылки на неопубликованные работы (отчеты) не допускаются.

В библиографическое описание источника обязательно включаются фамилии и инициалы авторов, название книги или статьи. Для книг указывается город, издательство и год издания, для статей — название журнала, год издания, том, выпуск (номер), страницы начала и конца статьи. Описания иностранных источников должны быть напечатаны латинским шрифтом. Если источник размещен в Интернете, указывается адрес сайта.

9. Все материалы по статьям должны направляться по адресу:

607188 г. Саров Нижегородской обл., пр. Мира, 37, РФЯЦ-ВНИИЭФ, отделение 08.

В редакцию журнала ВАНТ, сер. "Математическое моделирование физических процессов".

Тел. (83130)2-84-06; e-mail:sokol@vniief.ru