

Моделирование динамики вихревых нитей в сверхтекучем гелии методом численного статистического моделирования на суперкомпьютере*

Д.Д. Смирнов¹, Л.П. Кондаурова²

¹Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук,

²Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук

Стохастическая динамика квантовых вихревых нитей является одним из важнейших направлений в физике квантовых жидкостей. Соответствующую область обычно называют теорией квантовой турбулентности. Сфера применения теории стохастических квантовых вихрей необычайно широка: от теории фазовых переходов до свойств бозе-эйнштейновского конденсата. Данная статья посвящена моделированию динамики вихревых нитей методом численного статистического моделирования. Нахождение оценок вероятностных характеристик решения этой задачи с высокой точностью является очень трудоемкой задачей, поэтому для её решения используются параллельные алгоритмы, реализованные на суперкомпьютере.

Ключевые слова: квантовые вихревые нити, система стохастических дифференциальных уравнений, метод численного статистического моделирования, параллельные алгоритмы.

1. Введение

Многие физические явления очень хорошо описываются с помощью систем стохастических дифференциальных уравнений, так как в них учитывается влияние случайных факторов, действующих на физическую систему, но так как их аналитическое решение часто не удаётся найти, то на первый план выходит метод численного статистического моделирования. С помощью этого метода оцениваются различные вероятностные характеристики от решения системы стохастических дифференциальных уравнений [1]. Для достижения высокой точности оценок вероятностных характеристик от решения системы стохастических дифференциальных уравнений требуется моделировать большое число реализаций решения этой системы, например, чтобы достигнуть точности 5 знаков после запятой, нужно смоделировать 10^{10} реализаций решения этой системы. Статистическая погрешность оценок вероятностных характеристик от решения системы стохастических дифференциальных уравнений и погрешность численного метода решения этой системы должны быть одного порядка. Это означает, что при больших размерах ансамбля моделируемых реализаций решения этой системы требуется брать малый шаг интегрирования для используемого численного метода решения этой системы, например, при размере ансамбля 10^{10} моделируемых реализаций решения этой системы требуется брать шаг интегрирования 10^{-5} для численного метода Эйлера-Маруямы [2]. В задачах квантовой турбулентности особый интерес представляет исследование системы при её выходе на стационар, поэтому решение таких задач проводится на длинных временных интервалах. Из-за наличия большого количества частиц сверхтекучего гелия возникает система стохастических дифференциальных уравнений большой размерности. Решение этой системы определяет положение частиц сверхтекучего гелия в пространстве в заданный момент времени [3]. Большой размер ансамбля моделируемых реализаций решения системы, малый шаг интегрирования численного метода решения системы, длинный временной интервал и большой размер системы стохастических

* Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ проект № 17-01-00698 А и гранта РФФИ проект № 18-01-00599 А и в рамках государственного задания ИТ СО РАН (АААА-Ф17-117022850027-5).

ческих дифференциальных уравнений – это причины, по которым персональный компьютер не справляется с такими задачами за приемлемое время. Требуется использовать суперкомпьютер, на котором можно реализовать параллельный метод численного статистического моделирования. В данной же работе с помощью параллельного метода численного статистического моделирования исследуется влияние случайной силы, заданной с помощью белого шума, на динамику вихревых нитей в сверхтекучем гелии и исследуются некоторые вероятностные характеристики вихревого клубка [4]. Это так называемый подход Ланжевена. Подход Ланжевена даёт возможность контролировать различные типы случайных воздействий, что позволяет исследовать случаи от сильно неравновесного (сверхтекучая турбулентность) до равновесного термодинамического. Такой подход является новым к подобным задачам. До этого подобные задачи решались без учёта случайной силы Ланжевена, поэтому особый интерес представляет разработка численных методов для решения таких задач, что позволит исследовать динамику вихревых нитей в сверхтекучем гелии и по возможности сравнить это с реальными физическими опытами.

2. Постановка задачи и её решение методом численного статистического моделирования

2.1 Подход Ланжевена при моделировании динамики вихревых нитей в сверхтекучем гелии

Скорость вихревой точки определяется выражением следующего вида:

$$\frac{d\vec{S}_p(t)}{dt} = \vec{V}_s + \vec{V}_{s_i} + \alpha \vec{s}' \times (\vec{V}_{ns} - \vec{V}_{s_i}) - \alpha' \vec{s}' \times (\vec{s}' \times (\vec{V}_{ns} - \vec{V}_{s_i})) + \vec{q}(t), \quad (1)$$

где \vec{S}_p – радиус-вектор, проведённый из начала координат в эту точку, $p = 1, \dots, P$, \vec{V}_{s_i} – наведённая скорость от конфигурации всех нитей, $\vec{V}_{ns} = \vec{V}_n - \vec{V}_s$ – скорость противотока, \vec{V}_n – скорость нормальной компоненты, \vec{V}_s – скорость сверхтекучей компоненты, \vec{s}' – первая производная по параметру L , \vec{s}'' – вторая производная по параметру L , параметр L – длина дуги, α и α' – коэффициенты трения. Наведённая скорость \vec{V}_{s_i} от конфигурации всех нитей определяется выражением следующего вида:

$$\vec{V}_{s_i} = \beta \vec{s}' \times \vec{s}'' + \frac{k}{4\pi} \int_C \frac{(s_i - s_j) \times ds_j}{|s_i - s_j|^3}, \quad (2)$$

где $\beta = \frac{k}{4\pi} \ln \left(\frac{2\sqrt{s_+ s_-}}{\sqrt{e} a_0} \right)$, $k = h/m_{He}$ – квант циркуляции, h – постоянная Планка, m_{He} – масса атома гелия, C означает, что интегрирование ведётся по всей конфигурации вихревых нитей, исключая прилежащие сегменты нити к точке s_i , $s_+ = s_{i+1} - s_i$, $s_- = s_i - s_{i-1}$, индексы i и j это метки точек на линии, a_0 – радиус ядра вихревой нити, $\vec{q}(t)$ – гауссовский случайный процесс с нулевым средним $\langle \vec{q}(t) \rangle = 0$ и корреляционной функцией $\langle \vec{q}(t_1) \vec{q}(t_2) \rangle = D \delta(t_1 - t_2) I$, D – интенсивность силы Ланжевена, $\delta(t_1 - t_2)$ – дельта-функция Дирака, I – единичная матрица. Такой случайный процесс называют белым шумом. В формуле (2) первое слагаемое определяет часть скорости, связанной с прилежащими к вихревой точке сегментами нити s_+ , s_- , второе слагаемое определяет вклад от всей конфигурации нитей, исключая соседние сегменты. Далее полагая, что в уравнении (1) $\vec{V}_s = 0$, $\vec{V}_{ns} = 0$, $\alpha' = 0$, получаем уравнение динамики вихревой точки нити, которое определяется выражением следующего вида:

$$d\vec{S}_p(t) = (\vec{V}_{s_i} - \alpha \vec{s}' \times \vec{V}_{s_i}) dt + D d\vec{W}(t), \quad t \in [t_0, t_T]. \quad (3)$$

Это система стохастических дифференциальных уравнений в смысле Ито, а белый шум определяется через дифференциал от Винеровского процесса $\vec{W}(t)$ [4].

2.2 Система стохастических дифференциальных уравнений в смысле Ито

Система стохастических дифференциальных уравнений в смысле Ито имеет следующий вид:

$$d\vec{X}(t) = \vec{f}(\vec{X}(t), t)dt + G(\vec{X}(t), t)d\vec{W}(t), t \in [t_0, t_T], \quad (4)$$

где $\vec{X}(t) = (X_1(t), \dots, X_d(t))^T$ – непрерывный случайный процесс размера d , $\vec{f} : \mathbb{R}^m \times [t_0, t_T] \rightarrow \mathbb{R}^m$, $\vec{f}(\vec{X}(t), t)$ – вектор сноса размера d , $G : \mathbb{R}^d \times [t_0, t_T] \rightarrow \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^m$, $G(\vec{X}(t), t)$ – матрица диффузии размера $d \times m$, $\vec{W}(t) = (W_1(t), \dots, W_m(t))^T$ – Винеровский процесс размера m – это многомерный случайный процесс, принимающий значения в \mathbb{R}^m , с непрерывными траекториями и независимыми приращениями, выходящий из начала координат, который имеет многомерное гауссово распределение со средним ноль и матрицей ковариации tI , где I – единичная матрица. Приращения Винеровского процесса $\vec{W}(t_2) - \vec{W}(t_1)$ имеют многомерное гауссово распределение со средним ноль и матрицей ковариации $(t_2 - t_1)I$, где $0 \leq t_1 < t_2$, I – единичная матрица. Задавая начальные условия $\vec{X}(t_0) = \vec{X}_0$, где $\vec{X}_0 = (X_{1,0}, \dots, X_{d,0})$ – случайный вектор размера d , получаем задачу Коши для системы стохастических дифференциальных уравнений в смысле Ито (4) [5].

2.3 Численный метод решения системы стохастических дифференциальных уравнений в смысле Ито

На отрезке $[t_0, t_T]$ вводится равномерная расчётная сетка: $t_0 < t_1 < \dots < t_N$ с шагом $h_t = \frac{t_T - t_0}{N}$, где N – количество разбиений, $t_{n+1} = t_n + h_t$, $n = 1, \dots, N - 1$. Для численного решения системы стохастических дифференциальных уравнений в смысле Ито (4) используется наименее трудоёмкий явный метод Эйлера-Маруямы, который очень прост в реализации и для многомерного случая $i = 1, \dots, d$ имеет следующий вид:

$$\vec{X}_{n+1} = \vec{X}_n + \vec{f}(\vec{X}_n, t_n)h_t + \sum_{j=1}^m G_{ij}(\vec{X}_n, t_n) \Delta W_j(t_n), n = 0, \dots, N - 1, \quad (5)$$

где $\Delta W_j(t_n) = W_j(t_{n+1}) - W_j(t_n) = \sqrt{h_t} Z_n$, Z_n – последовательность независимых стандартных нормальных случайных величин, то есть $Z_n \sim N(0,1)$ [5]. Моделирование стандартных нормальных случайных величин происходит по двум известным формулам, которые имеют следующий вид:

$$Z_n = \sqrt{-2 \ln \alpha_1} \sin 2\pi\alpha_2, \quad (6)$$

$$Z_n = \sqrt{-2 \ln \alpha_1} \cos 2\pi\alpha_2, \quad (7)$$

где α_1, α_2 – независимые случайные величины, равномерно распределённые в интервале $(0,1)$, то есть $\alpha_1, \alpha_2 \sim U(0,1)$, и генерируемые с помощью датчика псевдослучайных чисел. Одновременное использование формул (6) и (7) при численном статистическом моделировании уменьшает трудоёмкость расчётов, так как на две независимые случайные величины α_1, α_2 , равномерно распределённых в интервале $(0,1)$, сгенерированные датчиком псевдослучайных чисел, приходится две независимые стандартные нормальные случайные величины. Об этом факте часто забывают, используя только одну формулу из формул (6) и (7) [6].

2.3 Параллельный алгоритм численного решения систем стохастических дифференциальных уравнений в смысле Ито

Для того, чтобы вычислить оценки вероятностных характеристик от решения систем стохастических дифференциальных уравнения в смысле Ито (4) с высокой точностью, требуется моделировать большой объём реализаций случайного процесса $\vec{X}(t)$, заданного этой системой, и использовать малый шаг интегрирования метода Эйлера-Маруямы (5) на заданном длинном временном интервале $[t_0, t_T]$. В связи с этим, становится актуальным использование параллельного алгоритма для этой задачи. Для того, чтобы ошибка численного метода и статистическая ошибка при оценке функционалов от решения системы стохастических дифференциальных уравнений в смысле Ито (4) были одного порядка, надо, чтобы выполнялось равенство $M = O(h_t^{2\nu})$, где M – количество реализаций случайного процесса $\vec{X}(t)$, заданного этой системой, h_t – шаг численного метода для решения этой системы, ν – порядок слабой сходимости численного метода для решения этой системы.

На рис. 1 показан последовательный код программы для моделирования M реализаций случайного процесса $\vec{X}(t)$ в каждый момент времени t_n , заданного с помощью системы стохастических дифференциальных уравнений в смысле Ито (4).

```

int main(void)
{

int i, n, k, L, N, D;
double *Xinitial, *Xn, *Xl, t0, tn, ht;
//Далее выделение памяти под массивы и обнуление его
элементов и инициализация других переменных.
for(i = 1; i <= L; i++)
{
    for(k = 1; k <= D; k++)
    {
        Xinitial[k] = rnd128();
        Xl[k] = Xinitial[k];
    }

    for(n = 0; n <= N-1; n++)
    {
        tn = t0+n*ht;
        for(k = 1; k <= D; k++)
        {
            Xn[k] = Xl[k]+f(Xl[k], tn)*ht+GdWtn(Xl[k], tn);
            Xl[k] = Xn[k];
        }
    }
}

return (0);
}

```

Рис. 1. Алгоритм моделирования M реализаций случайного процесса $\vec{X}(t)$

Как видно из алгоритма на рис. 1 можно реализовать трёхуровневое распараллеливание метода численного статистического моделирования: распараллеливание по независимым реализациям, распараллеливание с применением декомпозиции расчётной сетки и распараллеливание с применением декомпозиции уравнений системы стохастических дифференциальных уравнений в смысле Ито (4). Распараллеливание по независимым реализациям состоит в распределении моделирования независимых реализаций по вычислительным ядрам с периодическим осреднением полученных выборочных значений по статистически эффективной формуле следующего вида:

$$\bar{\zeta} = \left[\sum_{q=1}^Q M_q \right]^{-1} \sum_{q=1}^Q M_q \bar{\zeta}_q, \quad (8)$$

где Q – общее число ядер, M_p – количество реализаций, полученное на q -ом ядре, $\bar{\zeta}_q$ – оценка среднего, полученная на q -ом ядре. При распараллеливании статистического моделирования допустимо использовать вычислительные ядра с разной производительностью. При этом обмен данными можно свести к минимуму, допуская только начальную "загрузку" вычислительных ядер и финальное получение оценок средних. Действуя так, можно добиться обратной пропорциональной зависимости величины трудоемкости "распределенной" случайной оценки от числа ядер, при условии, что используемые ядра имеют одинаковую производительность. Как правило, при параллельной реализации необходимый объём выборки базовых случайных чисел очень велик, поэтому целесообразно использовать длиннопериодные псевдослучайные последовательности. А именно, предлагается использовать 128-битный конгруэнтный генератор псевдослучайных чисел с длиной периода $L = 2^{126} \approx 10^{38}$, который вызывается с помощью процедуры **rnd128()**, входящей в библиотеку PARMONC [7]. Такого большого периода у генератора псевдослучайных чисел из библиотеки PARMONC вполне хватает для решения данной задачи. Распараллеливание с применением декомпозиции расчётной сетки состоит в разбиении множе-

ства точек расчётной сетки $t_0 < t_1 < \dots < t_N$ на блоки, каждый из которых содержит по k точек. В каждом блоке нумерация точек будет следующей: $t_{r,i}$, где r – номер блока, $r = 1, \dots, R$, $i = 0, \dots, k$, то есть $t_{r,0}$ – начало блока, $t_{r,k}$ – конец блока, отсюда следует, что $t_{r,k} = t_{r+1,0}$. Начальная точка в блок не включается, тогда при решении системы стохастических дифференциальных уравнений в смысле Ито (4) численным методом Эйлера-Маруямы блочного вида для каждого следующего блока новые k значений решения вычисляются одновременно с использованием значения только в последней точке предыдущего блока. Распараллеливание с применением декомпозиции уравнений системы стохастических дифференциальных уравнений в смысле Ито (4) состоит в разбиении всех уравнений системы на F блоков, каждое f -ое ядро вычисляет компоненты решения только в рамках своего блока, после чего переходит к следующей итерации. Такая схема требует синхронизации процессов после проведения вычислений на каждой итерации, поэтому эта схема показывает большую эффективность в случае трудоёмкого вычисления правой части системы стохастических дифференциальных уравнений в смысле Ито (4).

2.4 Численные эксперименты

Расчёты для системы стохастических дифференциальных уравнений в смысле Ито (3) были проведены методом Эйлера-Маруямы (5) с шагом $h_t = 10^{-7}$ и моделировалось $M = 10^7$ реализаций случайного процесса $\vec{S}_p(t)$ со следующими параметрами: $\alpha = 0.0098$, $D = 4 \cdot 10^{-4}$. В начальный момент времени задавался шаг вдоль вихревых нитей $\Delta\xi_0 = 4\pi \cdot 10^{-5}$. Для сохранения точности расчётов добавлялись и убирались вихревые точки, то есть в процессе счёта контролировался шаг вдоль линии $\Delta\xi$ так, чтобы выполнялось условие $\Delta\xi_0/1.8 \leq \Delta\xi \leq 1.8 \cdot \Delta\xi_0$. Добавление точек осуществлялось с помощью круговой интерполяции. Малые петли состоящие из менее трёх сегментов, убирались из расчётов. На рис. 2 показана начальная конфигурация вихревых колец. В качестве начальной конфигурации были взяты 6 колец, расположенные симметрично относительно начала координат и ориентированные таким образом, чтобы суммарный импульс данной системы был равен нулю. Радиус колец $R = 2 \cdot 10^{-3}$, расстояние между ними $d = 10^{-3}$.

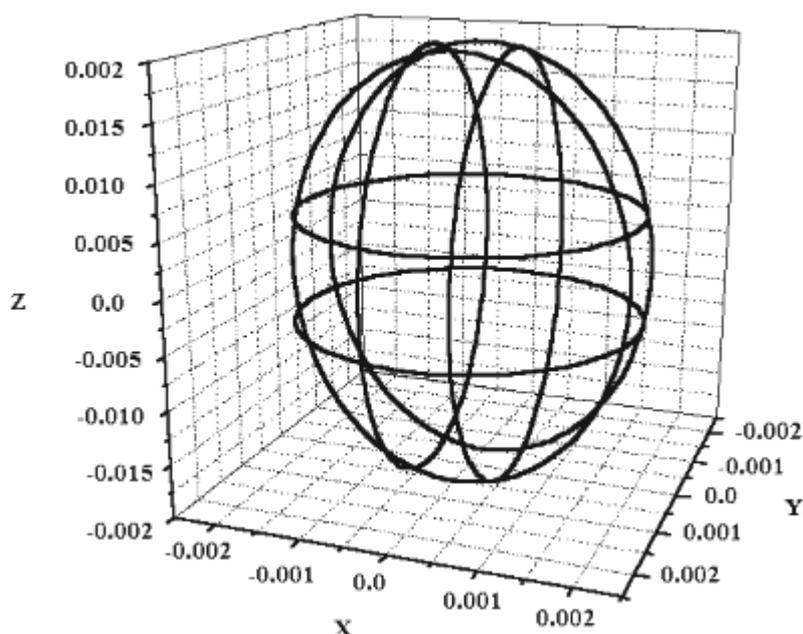


Рис. 2. Начальная конфигурация вихревых колец

На рис. 3 показаны конфигурации вихревых петель в разные моменты времени в проекции на плоскость XZ : $t_1 = 4.3 \cdot 10^{-2}$, $t_2 = 9.79 \cdot 10^{-2}$, $t_3 = 1.14 \cdot 10^{-1}$.

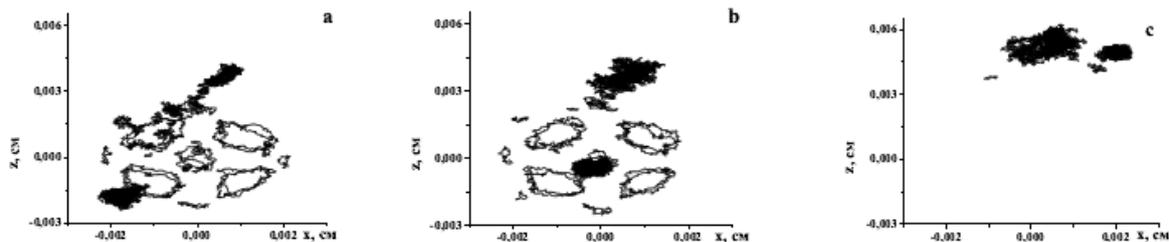


Рис. 3. Конфигурация вихревых петель в разные моменты времени

Как видно из рис. 3, конфигурация вихревых петель со временем очень сильно видоизменяется. Система из 6 колец эволюционирует в сильно запутанный вихревой клубок с неоднородной вихревой структурой, которая сильно флуктуирует. Участки с повышенной концентрацией вихревых петель образуются и исчезают в различных областях пространства. Также были найдены некоторые оценки вероятностных характеристик вихревой структуры, а именно распределение количества вихревых петель относительно их длин, а также спектр энергии. На рис. 4 показано распределение петель по их длинам, усреднение проведено по конфигурациям вихревых петель в диапазоне времени $t: (1.1443 - 0.1000) \cdot 10^{-3} \leq t \leq (1.1443 + 0.1000) \cdot 10^{-3}$.

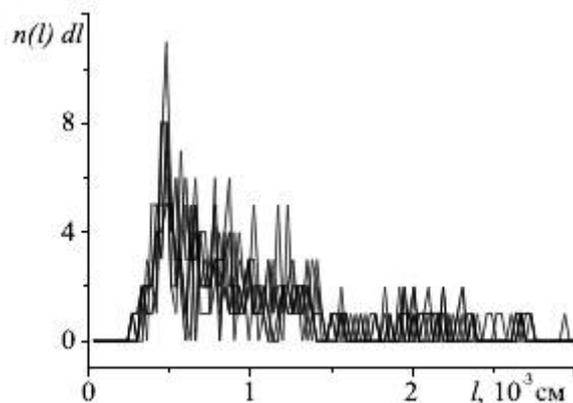


Рис. 4. Распределение петель $n(l)$ по их длинам l

Уменьшение количества петель описывается функцией $n(l)dl \sim l^{-1}$. Подобная зависимость наблюдалась как в различные моменты времени, так и для отдельной области с повышенной завихрённостью внутри вихревой структуры. Это распределение отличается от $n(l)dl \sim l^{-2.5}$, которое, как предполагалось, имеет место в равновесном состоянии.

3. Заключение

Полученные численные результаты показали, что при действии случайной силы, являющейся белым шумом по времени, изначально гладкие вихревые кольца трансформируются в хаотический вихревой клубок. Визуализация численного эксперимента показала, что клубок неоднороден, во время эволюции области с повышенной плотностью вихревых нитей рождаются и исчезают в различных областях пространства. Данная динамика сходна с явлением перемежаемости в обычной турбулентности. С помощью метода численного статистического моделирования найдены оценки вероятностных характеристик вихревого клубка, например, функция распределения вихревых петель по размерам их длин. Таким образом, распараллеливание метода численного статистического моделирования даёт возможность вычислять за приемлемое время оценки вероятностных характеристик от решения системы стохастических дифференциальных уравнений в смысле Ито, описывающего динамику вихревых нитей в сверхтекучем гелии под воздействием случайной силы, заданной в виде белого шума. Сильным местом параллельного метода численного статистического моделирования для решения данной поставленной задачи является распараллеливание по реализациям случайного процесса. Так как моделируются независимые между собой реализации случайного процесса, то обмен между процессорами сведён

к минимуму и происходит на начальном и конечно этапе. Слабым же местом параллельного метода численного статистического моделирования для решения данной поставленной задачи является распараллеливание с применением декомпозиции уравнений, так как требуется синхронизировать процессы после проведения вычислений на каждой итерации. Ввиду трудоёмкости вычислений правой части системы уравнений, этот метод распараллеливания актуален. Многочасовые расчёты данной поставленной задачи были проведены на гибридных кластерах НКС-30Т и НКС-1П [8]. В дальнейшем планируется исследовать и продемонстрировать ускорение и эффективность параллельного метода численного статистического моделирования и сравнить эти показатели при использовании параллельных вычислительных систем с общей и разделённой памятью, графические процессоры общего назначения и их комбинации для создания гибридных параллельных алгоритмов.

Литература

1. Артемьев С.С., Марченко М.А., Корнеев В.Д., Якунин М.А., Иванов А.А., Смирнов Д.Д. Анализ стохастических колебаний методом Монте-Карло на суперкомпьютерах. Новосибирск: Издательство СО РАН, 2016. 294 с.
2. Артемьев С.С., Иванов А.А., Смирнов Д.Д. Новые частотные характеристики численного решения стохастических дифференциальных уравнений, Сиб. журн. вычисл. матем., 18:1 (2015), 15–26; Num. Anal. Appl., 8:1 (2015), 13–22.
3. K. W. Schwarz, Phys. Rev. B 31, 5782 (1985).
4. L. Kondaurova, V. L'vov, A. Pomyalov, and I. Procaccia, Phys. Rev. B 89, 014502 (2014).
5. Kloeden P.E., Platen E. Numerical Solution of Stochastic Differential Equations. Springer, 1995. - 636 pages.
6. Михайлов Г.А. Численное статистическое моделирование. Методы Монте-Карло. Москва: Издательский центр «Академия», 2006. 368 с.
7. Марченко М.А. Библиотека PARMONC для решения «больших» задач по методу Монте-Карло // Вестник нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2012. С. 392–397.
8. Сибирский Суперкомпьютерный Центр ИВМиМГ СО РАН. URL: <http://www.ssc.icmmg.nsc.ru/hardware.html> (дата обращения: 14.04.2019).