

Отчет по этапам работ, завершенным в 2014 г. **в соответствии с планом НИР института**

Проект НИР I.2.1.2. Разработка алгоритмов статистического моделирования для суперкомпьютерного решения задач математической физики, а также индустриальной математики

Научный руководитель: член-корреспондент РАН Михайлов Г.А.

Разработан ряд модификаций, а также уточнений формулировок и обоснований практически эффективных алгоритмов статистического моделирования.

Предложен экономичный способ моделирования пар случайных номеров, в частности, взаимодействующих молекул для реализации стохастической эволюции разреженного газа.

Построена простая моделирующая формула для целочисленного распределения с минимальной дисперсией при фиксированном среднем значении, что полезно для реализации процесса размножения частиц.

Уточнены обоснование и корректирующая модификация моделирования гауссовского случайного вектора.

Разработан новый алгоритм «метода мажорантного сечения» для эффективного статистического моделирования переноса излучения в экспоненциально коррелированных средах с целью параметрического анализа вероятностей прохождения.

Рассмотрены некоторые важные аспекты использования и обоснования стандартного векторного алгоритма статистического моделирования переноса поляризованного излучения. В связи с тем, что соответствующие оценки могут иметь бесконечную дисперсию, построен алгоритм "L-кратной поляризации", свободный от этого недостатка.

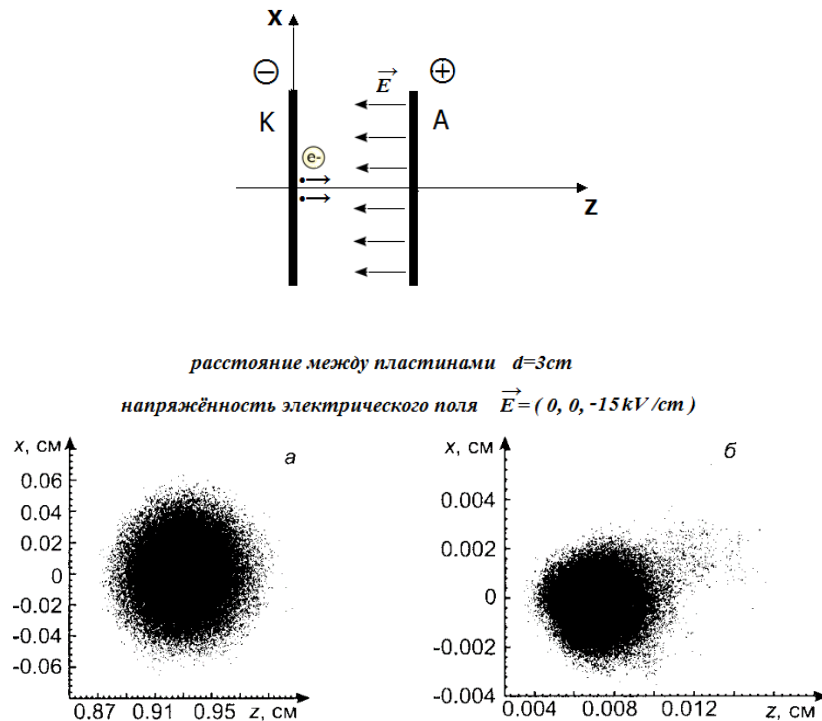
Проведено численное статистическое исследование влияния учета поляризации излучения на основные энергетические характеристики рассеянного излучения в атмосфере. На основе двойственных представлений средних квадратов векторных оценок функционалов исследован вопрос о конечности их дисперсий.

Предложены алгоритмы восстановления элементов матрицы аэрозольного рассеяния по наземным наблюдениям характеристик рассеянного поляризованного излучения.

Разработан трехмерный параллельный алгоритм метода Монте-Карло для моделирования развития электронных лавин в газе (ELSHOW). Параллельная реализация осуществляется с помощью хорошо зарекомендовавшей себя библиотеки PARMONC, что ускоряет получение таких интегральных характеристик, как число частиц в лавине, коэффициент ударной ионизации, скорость дрейфа и других, а также способов выбора подходящей величины шага по времени с использованием техники зависимых статистических испытаний. Составными частями алгоритма являются специальные методы моделирования распределений, лексикографическая схема реализации «ветвления» траекторий, «русская рулетка», обоснованное построение гистограммы и полигона частот и вычисление вероятностной погрешности оценок функционалов. Приводится сравнение полученных результатов для азота с опубликованными ранее теоретическими и экспериментальными данными.

Получены формулы для выбора временного шага в алгоритме численного статистического моделирования переноса заряженных частиц под влиянием взаимодействий (столкновений) с частицами среды и внешнего силового поля. Критерием выбора является подходящая детерминированная погрешность (смещение) статистических оценок изучаемых интегральных характеристик. Полученные теоретические результаты

относятся к общей постановке такой задачи, но для физической иллюстративности они формулируются для процесса развития электронных лавин в газах под влиянием взаимодействия со средой и внешнего электрического поля.



Электронные лавины в азоте при $p = 300$ Торр, $E_z/p = 50 \text{ В/(см} \cdot \text{Торр)}$, $t = 90 \text{ нс}$ (а) и при $p = 300$ Торр, $E_z/p = 500 \text{ В/(см} \cdot \text{Торр)}$, $t = 0.055 \text{ нс}$ (б)

Построена смещенная «оценка по столкновениям» для линейного функционала от решения линейного интегрального уравнения второго рода с заведомо конечной дисперсией на основе n -кратного итерационного весового метода для некоторого приближенного решения. Получены оценка нормы смещения и интегральное уравнение для второго момента построенной смещенной оценки. На примере модельной задачи переноса излучения через оптически толстый слой было продемонстрировано, что применение n -кратного итерационного весового метода существенно уменьшает трудоемкость классического «метода подобных траекторий». Для уменьшения величины дисперсии весовой оценки решения линейного интегрального уравнения были построены следующие модификации использования ветвления траектории для весовой оценки: только в случае, когда очередной весовой множитель q после каждого перехода больше 1 и когда «полный» вес после n переходов больше 1. Представлено исследование эффективности построенных модификаций весовых оценок с ветвлением траектории.

Построены новые алгоритмы статистического моделирования переноса излучения через стохастические экспоненциально коррелированные среды. Для этого разработана специальная геометрическая реализация «метода максимального сечения», позволяющая учитывать поглощение излучения весовым экспоненциальным множителем. Построены асимптотические по размеру среды, оценки параметров осредненной радиационной модели. Специальный «распределительный» способ реализации псевдослучайных чисел позволил провести сравнительный анализ результатов моделирования на основе соответствующего коррелирования статистических оценок.

Разработана программа для трёхмерной визуализации видимого излучения с использованием модели CIE 1931.

Рассмотрен весовой алгоритм для приближенного решения нелинейного кинетического уравнения Больцмана, в котором после каждого элементарного перехода вспомогательный вес домножается на величину, учитывающую номер реализовавшей взаимодействие пары частиц. Число таких переходов растет с увеличением количества частиц в моделируемом ансамбле; при этом усиливаются флуктуации веса; которые могут привести к существенному росту дисперсии используемой весовой оценки по столкновениям. Известно, что величину такой дисперсии можно уменьшить, используя ветвление траекторий. С этой целью предложена весовая модификация с ветвлением и рандомизацией. Эффективность данной модификации подтверждена на примере численно-статистического решения задачи о релаксации смеси двух газов с сильно различающимися концентрациями. При использовании построенной модификации существенно улучшаются оценки частот молекул малой примеси.

Построены весовые алгоритмы для оценки линейных функционалов от решения уравнения Смолуховского с линейными коэффициентами коагуляции, зависящими от двух параметров. Предложены алгоритмы, позволяющие одновременно оценивать как функционалы для различных наборов параметров, так и параметрические производные. Разработаны ценностные алгоритмы и показана их эффективность для вычисления функционалов: концентрации мономеров в ансамбле в заданный момент времени и концентрации мономеров и димеров. Разработан ценностный алгоритм, являющийся обобщением предложенных ранее алгоритмов для случая постоянных и аддитивных коэффициентов коагуляции.

Рассмотрены три подхода к построению верхней границы статистической погрешности метода ПСМ для решения нелинейного уравнения Больцмана: 1) приближенные формулы для дисперсий оценок метода ПСМ, полученные на основе теории равновесной статистической физики; 2) асимптотические формулы для дисперсий оценок метода ПСМ с уменьшением размера ячеек при фиксированном полном числе частиц в области; 3) формулы для асимптотических доверительных интервалов для оценок метода ПСМ на основе центральной предельной теоремы для Марковских процессов. Проведен теоретический и численный анализ, который позволил выявить взаимосвязь, преимущества, недостатки и области корректного применения рассмотренных подходов. Проведено сравнение на примере ряда характерных задач динамики разреженного газа с различной степенью неравновесности.

Для гибридных суперкомпьютеров с графическими сопроцессорами (NVidia GPU) разработана эффективная методика распределения независимых псевдослучайных чисел по отдельным CUDA-потокам на основе предложенного ранее параллельного 128-битного генератора.

Получены новые результаты для задачи статистического моделирования траекторий ветвящихся процессов на гибридных суперкомпьютерах с графическими сопроцессорами (NVidia GPU). Предложен способ отображения алгоритмов статистического моделирования траекторий ветвящихся случайных процессов на архитектуру графических процессоров. Рассматривалась возможность применения известной методики <русской рулетки> с целью снижения времени моделирования и уменьшения объема оперативной памяти, требуемой для хранения элементов траектории; исследована дисперсия и вычислительная трудоемкость модифицированных оценок. Исследован вопрос оптимального выбора параметров параллельного алгоритма с целью снижения времени моделирования траекторий ветвящегося процесса на графических процессорах. Разработанная технология апробировалась путем решения задач моделирования электронных лавин в газе. Для одной и той же задачи статистического моделирования лавин

проведено сравнение времени расчетов как при использовании только центральных процессоров на вычислительном узле, так и с использованием графических сопроцессоров; показан существенный выигрыш во времени моделирования в последнем случае.

Для решения пространственно неоднородных кинетических уравнений Больцмана с учетом химических реакций рассмотрен и апробирован на гибридных суперкомпьютерах с графическими сопроцессорами параллельный алгоритм статистического моделирования, в котором эффективно реализуется геометрия задачи.

Рассмотрена модель автотранспортного потока (АТП) с выделенным ускорением. Взаимодействия в системе проявляется в виде скачков ускорения, а не скачков скорости. Построено интегральное уравнение второго рода, описывающее эволюцию системы автомобилей, исходной вероятностной модели АТП. Предложены алгоритмы метода Монте-Карло для оценки функционалов от решения полученного уравнения. Практическая целесообразность данного подхода к решению автотранспортных задач продемонстрирована численными экспериментами по оценке распределения скорости и ускорения в пространственно-однородном случае с пороговыми профилями взаимодействия, зависящими от скорости.

Рассмотрена специальная постановка задачи переноса излучения через плоский слой - граничная задача, предложенная в свое время Амбарцумяном. Для ее решения введен оператор-матрица, образованный с помощью операторов отражения и пропускания излучения для слоя. Доказана теорема "сложения слоев". Рассмотрены примеры приложения полученных результатов.

Разработан численный алгоритм «хоккейной клюшки», использующий диалог с компьютером и позволяющий аппроксимировать вечерний профиль мелатонина кривой, составленной из отрезков прямой и параболы. Точка, где прямая переходит в (касается) параболу и рассматривается как надежная точка начала роста концентрации мелатонина. Показано, что метод «хоккейной клюшки» - надежный метод оценки момента начала выработки мелатонина и не зависит от величины порога и субъективных оценок.

Предложена модификация алгоритма конкуренции, работа которого напоминает искусственную нейронную сеть и позволяет различать любое число альтернатив. Для модифицированного алгоритма доказана теорема обучения.