ДОПОВІДІ
НАЦІОНАЛЬНОЇ
АКАДЕМІЇ НАУК
УКРАЇНИ

9 • 2016

ІНФОРМАТИКА

http://dx.doi.org/10.15407/dopovidi2016.09.029

УДК 531.37:531.396:537.634:537.612.4:519.6

Член-корреспондент НАН Украины **С. И. Ляшко**[1], **С. И. Зуб**[2], **С. С. Зуб**[3], **Н. И. Ляшко**[4], **А. Ю. Чернявский**[5]

[1]Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко
[2]Национальный научный центр “Институт метрологии”, Харьков
[3]Харьковский национальный педагогический университет им. Г. С. Сковороды
[4]Институт кибернетики им. В. М. Глушкова НАН Украины, Киев
[5]Национальный аэрокосмический университет им. Н. Е. Жуковского “Харьковский авиационный институт”

E-mail: stah@univ.kiev.ua

Грид и облачные технологии для моделирования движения намагниченного асимметричного тела во внешнем магнитном поле

Сочетание метода Монте–Карло, Грид и облачных технологий для параллельных вычислений позволило провести обширное исследование устойчивости квазипериодических движений намагниченного асимметричного твердого тела во внешнем магнитном поле. Использование кватернионных переменных для описания гамильтоновой динамики асимметричного твердого тела существенно повышает эффективность численного моделирования.

Ключевые слова: Орбитрон, асимметричный волчок, квазиорбита, грид-технология.

С помощью теоретико-групповых методов гамильтоновой механики были получены аналитические доказательства устойчивости орбитальных движений в магнитных системах с высокой степенью симметрии [1, 2].

Хотя аналитический подход и является математически строгим и предпочтительным, но, во-первых, он далеко не всегда применим, а, во-вторых, имеющиеся теоремы не дают ответа на некоторые физически важные вопросы. Прежде всего, не дается оценка запаса устойчивости, т.е. максимальной величины отклонения от относительного равновесия, которая еще не ведет к потере устойчивости.

Что касается устойчивости по параметрам системы, то этот вопрос может вывести за пределы применимости теоретико-групповых методов, в частности, изменение параметров может привести к потере симметрии системы.

Численное решение системы ОДУ для любых начальных условий и параметров системы позволяет проводить моделирование не связанное непосредственно с требованиями симметрии. Таким образом, в отличие от работ [1–4] необходимо иметь уравнения движения для асимметричного твердого тела.

Известно, что кватернионы широко используются для описания кинематики твердого тела. Что касается динамики, то гамильтоновы уравнения динамики твердого тела в кватернионных переменных в системе, связанной с телом, впервые даны в работе [5] на основе пуассоновой структуры.

Различные теоретико-групповые аспекты гамильтоновой динамики в кватернионных переменных на основе канонической симплектической структуры группы единичных кватернионов даны в работах [6–9]. Там же исследованы связи между различными представлениями, а именно: гамильтоновы уравнения в системе, связанной с телом, в инерциальной системе, а также в смешанном представлении [2, 8, 9].

В данной работе используется смешанное представление, где описание поступательных степеней свободы дано в инерциальной системе отсчета, а вращательных – в системе отсчета, связанной с телом.

Использование кватернионных переменных для описания гамильтоновой динамики асимметричного твердого тела существенно повышает эффективность вычислений [10] и устойчивость решения системы ОДУ [5].

Основной целью нашей работы является численное исследование возможности устойчивого движения в системе Орбитрон [11], однако с отклонениями не только по начальным условиям, но и по параметрам системы, что влечет за собой утерю симметрии тела. Отклонение от симметрии в реальном эксперименте, очевидно, является неизбежным.

Применение Грид и облачных сервисов позволяет провести исследование для большого числа квазиорбит со случайно выбранными начальными условиями и параметрами системы.

Наша модель состоит из следующих элементов:

1. Магнитное поле Орбитрона.

На оси z в точках $\mp h$ расположим два разноименных магнитных полюса $\pm\kappa$. Таким образом, магнитное поле Орбитрона $\boldsymbol{B}$ имеет вид:

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = \sum_{\varepsilon=\pm 1} \boldsymbol{B}_\varepsilon(\boldsymbol{r}), \qquad \boldsymbol{B}_\varepsilon = -\frac{\mu_0}{4\pi}\varepsilon\kappa\frac{\boldsymbol{r}-\varepsilon h\boldsymbol{e}_z}{|\boldsymbol{r}-\varepsilon h\boldsymbol{e}_z|^3}. \tag{1}$$

По построению, поле $\boldsymbol{B}$ является аксиально симметричным (относительно оси z).

2. Магнитный диполь будем описывать как малое намагниченное твердое тело с массой m и главными моментами инерции I_1, I_2, I_3. Магнитный момент тела $\vec{\mu}$ является вектором, постоянным в системе, связанной с телом.

3. В работе [9] выведены гамильтоновы уравнения движения магнитного диполя во внешнем магнитном поле, которые представляют собой чисто алгебраическую форму записи уравнений вида ((9.2)–(9.5), [8])

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{x}} = \frac{1}{m}\boldsymbol{p}; \\ \dot{p}_i = |\vec{\mu}|\langle q^{-1}\mathbf{N}q, \partial_i \boldsymbol{B}\rangle; \\ \dot{q} = q\frac{\boldsymbol{\Omega}}{2}, \quad \Omega_i = \frac{1}{2}(I^{-1})_{ik}\mathrm{M}_k; \\ \dot{\mathbf{M}} = -\Im\left(\boldsymbol{\Omega}\mathbf{M} + 2|\vec{\mu}|(q^{-1}\boldsymbol{B}q)\mathbf{N}\right), \end{cases} \tag{2}$$

где x_{i} – координаты центра масс твердого тела; x_i $q = (q_0, \boldsymbol{q})$ – единичный кватернион, т.е.

$$q_0^2 + \boldsymbol{q}^2 = 1,$$

описывающий поворот от фиксированной (инерциальной) системы отсчета к системе отсчета, связанной с телом; p_{i} – компоненты импульса тела; M_{i} – компоненты собственного момента импульса в системе отсчета, связанной с телом; N – направляющий орт магнитного момента $\vec{\mu}$ в системе отсчета, связанной с телом; $\Im(q_0, \boldsymbol{q}) = \boldsymbol{q}$ – мнимая часть кватерниона.

Причем величины N, $\mathbf{B}$, $\boldsymbol{\Omega}$, $\mathbf{M}$ – чистые кватернионы, а q – единичный кватернион.

Здесь поступательные степени свободы даны в инерциальной системе отсчета, а вращательные – в системе отсчета, связанной с телом, т.е. в “смешаном” представлении.

В работе [4] для модели Орбитрона были найдены устойчивые орбиты, соответствующие реалистическим физическим параметрам системы. В этой работе магнитный диполь представляет собой твердое тело – симметричный волчок $(I_1 = I_2 = I_\perp)$ с магнитным моментом, направленным по оси волчка. Теоретически найденная устойчивая орбита магнитного диполя представляет собой относительное равновесие, т.е. такую траекторию гамильтоновой системы, которая одновременно является орбитой однопараметрической подгруппы группы инвариантности исследуемой системы [12].

При численном моделировании по уравнениям (2) будем рассматривать указанную выше систему с соответствующими физическими параметрами и начальными условиями как опорную, а затем будем случайным образом варьировать как начальные условия, так и параметры системы в заданных пределах. При этом тело, очевидно, утрачивает свойства симметричного волчка. Таким образом, для заполнения заданной окрестности параметров и начальных условий системы используется метод Монте–Карло [11].

При отклонениях от относительного равновесия, вызванных вариациями начальных условий и параметров системы движение приобретает квазиорбитальный характер. При этом квазиорбитой будем называть отрезок траектории между двумя последовательными пересечениями телом плоскости xz.

Из-за резкого изменения магнитной силы с расстоянием потеря равновесия имеет ярко выраженный характер – диполь либо быстро прилипает к полюсам магнита, либо быстро уходит из системы.

В статье [13] отмечается важность применения геометрических интеграторов при исследовании устойчивости систем с сохраняющейся энергией на больших временных интервалах. Не менее важно, что в нашем случае сохраняется еще функция Казимира (3). Нарушение этого условия означает выход за рамки рассмотрения твердого тела.

В отличие от [13], где реализуется матричный способ описания твердого тела, мы используем кватернионы, что, с одной стороны, существенно упрощает контроль ортогональности подвижного базиса асимметричного твердого тела, а с другой – требует нахождения аналитического решения 3-го уравнения системы (2).

Подобно [13] решение системы ОДУ (2) на одном шаге интегрирования разделяется на последовательное интегрирование уравнений для потенциальной и кинетической энергии. Причем кинетическая часть системы уравнений интегрируется полностью аналитически, а для интегрирования части, связанной с потенциальной энергией, применяется численный метод интегрирования 2-го порядка.

Аналитическое решение уравнения $\dot{q} = q\dfrac{\mathbf{\Omega}}{2}$, где $\mathbf{\Omega} = \mathrm{const}$ – чистый кватернион, имеет вид

$$q(t) = q(t_0)\exp\left(\frac{\mathbf{\Omega}(t-t_0)}{2}\right) = q(t_0)\left[\cos\left(\frac{|\mathbf{\Omega}|(t-t_0)}{2}\right) + \sin\left(\frac{|\mathbf{\Omega}|(t-t_0)}{2}\right)\frac{\mathbf{\Omega}}{|\mathbf{\Omega}|}\right].$$

Соответственно, решение уравнения $\dot{\boldsymbol{x}} = \dfrac{1}{m}\boldsymbol{p}$ имеет вид

$$\boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{x}(t_0) + \frac{\boldsymbol{p}(t_0)}{m}(t-t_0)$$

Таким образом, (4) и (5) дают выражения для нашего геометрического интегратора в кватернионном представлении.

Как уже было выше сказано, в качестве отправной точки, т.е. набора физических параметров и начальных условий, возьмем относительное равновесие в системе Орбитрон [4].

Одним из важнейших мотивом создания Грид была оптимизация использования вычислительных ресурсов университетов и исследовательских институтов (участников международных коллабораций).

Авторы статьи принимали непосредственное участие в создании вычислительных ресурсов коллаборации Compact Muon Solenoid (CMS). Основной задачей кластера ННЦ "ХФТИ" на то время было участие в подготовке к эксперименту на Large Hadron Collider (LHC). Однако свободные ресурсы предоставлялись исследователям других научных проектов в рамках программы создания Украинского академического грид.

Впервые задача о магнитном взаимодействии "гантелей" была запущена на CMS кластере ННЦ "ХФТИ" в начале 2008 г. [3].

Результаты этого исследования были доложены на теоретической секции семинара XII Advanced Computing and Analysis Techniques in Physics Research в ноябре 2008 г. (г. Эриче, Италия), проведенного под патронатом CMS.

На первых этапах работы над проблемой динамической устойчивости магнитных систем численный эксперимент был единственным инструментом исследования и требовал значительных вычислительных ресурсов. Исследования магнитных систем на CMS кластере ННЦ "ХФТИ" продолжались до 2010 г. включительно и результаты были представлены на VIII конференции по физике высоких энергий, ядерной физике и ускорителям (г. Харьков, Украина).

С 2012–2015 гг. для этих расчетов использовались вычислительные ресурсы Грид-кластеров Института теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова (UA-BITP) и Института сцинтилляционных материалов (UA-ISMA).

Эти работы продемонстрировали эффективность использования грид-технологий и облачных ресурсов в задачах численного моделирования динамики магнитных систем.

Начиная с мая 2014 г. традиционная грид-инфраструктура EGI была расширена облачными технологиями и мобильными услугами за счет использования открытых стандартов, что позволило также включать коммерческих провайдеров облачных услуг в инфраструктуру, которая ранее поддерживалась только научными учреждениями [14].

С 2015 г. массовое Монте–Карло моделирование динамики асимметричного твердого тела было перенесено в облако Microsoft Azure, где с использованием утилиты GNU Parallel [15] успешно эксплуатировалась программа на C++, которая использует библиотеку odeint из пакета Boost и скрипты, разработанные для моделирования на грид-кластерах.

Пакет основан на методах "метапрограммирования"[1], частично реализованных в новом стандарте C++0x. Он поддерживает шаблоны с переменным числом аргументов, что является важным элементов "метапрограммирования".

Чтобы использовать odeint просто, надо добавить соответствующие заголовочные файлы в программу. Речь идет о так называемой header only библиотеке, т.е. в ней нет ссылок на другие библиотеки.

В этом случае компилятор может проделать глубокую оптимизацию, что приводит кбыстромуисполняемомукоду.Итак,подключаемodeintвключениемвнашупрограммустроки

```
#include <boost/numeric/odeint.hpp>
```

Библиотека находится в пространстве имен

```
using namespace boost::numeric::odeint;
```

Определение уравнений движения для Орбитрона возможно либо как function, либо functor. При этом, как уже отмечалось, для хранения фазовой траектории мы используем стандартный тип vector. Мы интегрируем систему, используя функцию integrate_const.

Собственно, это все, что надо для вычисления наших уравнений движения.

Для интегрирования ОДУ библиотека располагает большим набором решателей. Среди них есть как одношаговые, так и многошаговые методы. Имеются также специальные симплектические решатели для сепарабельных гамильтоновых систем, однако наша система не удовлетворяет всем требованиям сепарабельности.

На данный момент, в odeint не реализован стандартный обработчик событий (наподобие MatLab), хотя это и планируется. Поэтому мы реализовали собственную обработку событий, используя observer, который вызывается функцией интегрирования.

С его помощью программа обрабатывает следующие события:

1 – "Падение'' тела на один из полюсов;

2. – "Выход'' тела за пределы системы;

3. Завершение квазиорбиты.

Первые два события приводят к остановке метода интегрирования с последующей диагностикой и предоставлением траектории для дальнейшего анализа. Третье событие отмечается в файле вывода, как завершение очередной квазиорбиты.

[1] Вид программирования, основанный на создании программ, которые могут порождать другие программы (в том числе и на стадии компиляции), а также могут менять себя в процессе выполнения

Любое из первых двух событий завершается сообщением о неустойчивости системы в заданном диапазоне вариаций начальных условий и параметров системы.

Грид-технологии и облачные ресурсы позволили выполнить моделирование миллионов квазиорбит с различными комбинациями числа испытаний и числа квазиорбит в этих испытаниях, отличающихся случайными вариациями параметров системы и начальных условий в диапазоне относительных отклонений ~1 % относительного равновесия симметричного Орбитрона.

Ни в одном из испытаний потери устойчивости зафиксировано не было.

Несмотря на то, что впервые устойчивые орбитальные движения были найдены для систем с симметриями, результаты данной работы показывают, что по отношению к проблеме динамической устойчивости требования симметрии не являются критическими.

Цитированная литература

1. *Grigoryeva L. V., Ortega J-P., Zub S. S.* Stability of Hamiltonian relative equilibria in symmetric magnetically confined rigid bodies // J. Geometric Mechanics. – 2014. – **6**, No 3. – P. 373–415.
2. *Zub S. S., Zub S. I.* Hamiltonian dynamics of a symmetric top in external fields having axial symmetry. Levitating Orbitron // Cornell Univ. Library. – 2015. – 1502.04674v1.
3. *Zub S. S.* Mathematical model of magnetically interacting rigid bodies // Proceedings of Science. – 2008. – PoS(ACAT08)116.
4. *Zub S. S.* Stable orbital motion of magnetic dipole in the field of permanent magnet // Phys. D: Nonlinear Phenomena. – 2014. – **275C**. – P. 67– 73.
5. *Борисов А. В., Мамаев И. С.* Нелинейные скобки Пуассона и изоморфизмы в динамике // Регулярная и хаотическая динамика. – 1997. – № 3. – С. 72–89.
6. *Зуб С. С., Зуб С. І.* Канонічна пуассонова структура на $T^*SE(3)$ в кватерніонних змінних // Вісн. Київ. нац. ун-ту. – 2013. – № 2. – С. 17–24.
7. *Зуб С. С., Зуб С. І.* Група одиничних кватерніонів S^3 та пов'язані з нею симплектична і пуассонова структури // Вісн. Київ. нац. ун-ту. – 2013. – № 4. – С. 108–113.
8. *Зуб С. С., Зуб С. І.* Рівняння гамільтонової динаміки твердого тіла в кватерніонних змінних. Магнітний диполь в зовнішньому полі // Вісн. Київ. нац. ун-ту. – 2014. – № 3. – С. 111–117.
9. *Zub S. S., Zub S. I.* Quaternions in Hamiltonian dynamics of a rigid body – Part III. Asymmetric Top in the Orbitron // Cornell Univ. Library. – 2015. – 1512.01703.
10. *Salamin E.* Applications of quaternions to computation with rotations // Working Paper of Stanford University. – Stanford, 1979. – P. 1–9.
11. *Зуб С. С., Ляшко В. С., Ляшко С. И.* Исследование устойчивости орбитального движения магнитно взаимодействующих тел методом численного эксперимента // Журн. обчисл. та прикл. математики. – 2012. – № 1. – С. 122–134.
12. *Patrick G. W.* Relative equilibria in Hamiltonian systems: The dynamic interpretation of nonlinear stability on a reduced phase space // J. Geom. Phys. – 1992. – № 9. – P. 111–119.
13. *Dullin H. R.* Poisson integrator for symmetric rigid bodies // Regular and chaotic dynamics. – 2004. – No 3. – P. 255–264.
14. *Tange O.* GNU Parallel: The Command-Line Power Tool // The USENIX Magazine. – 2011. – **36**, No 1. – P. 42–47.
15. *Fernandez-del-Castillo E., Scardaci D., Lopez Garcia A.* The EGI Federated Cloud e-Infrastructure // Procedia Computer Science. – 2015. – No 68. – P. 196–205.

References

1. *Grigoryeva L.V., Ortega J-P., Zub S.S.* J. Geometric Mechanics, 2014, **6** , No 3: 373–415.
2. *Zub S.S., Zub S.I.* Cornell Univ. Library, 2015: 1502.04674v1.
3. *Zub S.S.* Proceedings of Science, 2008, PoS(ACAT08)116.
4. *Zub S.S.* Phys. D: Nonlinear Phenomena, 2014,275C: 67–73.
5. *Borisov A.V., Mamaev I.S.* Regular and Chaotic Dynamics, 1997, No 3: 72–89 (in Russian).
6. *Zub S.S., Zub S.I.* Bull. of Taras Shevchenko Nat. Univ. of Kiev, 2013, No 2: 17–24 (in Ukrainian).
7. *Zub S.S., Zub S.I.* Bull. of Taras Shevchenko Nat. Univ. of Kiev, 2013, No 4: 108–113 (in Ukrainian).
8. *Zub S.S., Zub S.I.* Bull. of Taras Shevchenko Nat. Univ. of Kiev, 2014, No 3: 111–117 (in Ukrainian).
9. *Zub S.S., Zub S.I.* Cornell Univ. Library, 2015: 1512.01703.
10. *Salamin E.* Working Paper of Stanford University, Stanford, 1979: 1–9.
11. *Zub S.S., Lyashko V.S., Lyashko S.I.* J. of Computational and Appl. Math., 2012, No 1: 122–134 (in Russian).
12. *Patrick G.W.* J. Geom. Phys., 1992, No 9: 111–119.
13. *Dullin H.R.* Regular and chaotic dynamics, 2004, No 3: 255–264.
14. *Tange O.* The USENIX Magazine, 2011, **36**, No 1: 42–47.
15. *Fernandez-del-Castillo E., Scardaci D., Lopez Garcia A.* Procedia Computer Science, 2015, No 68: 196–205.

Поступило в редакцию 17.02.2016

Член-кореспондент НАН України **С.І. Ляшко**[1], **С.І. Зуб**[2], **С.С. Зуб**[3], **Н.І. Ляшко**[4], **А.Ю. Чернявський**[5]

[1]Київський національний університет ім. Тараса Шевченка
[2]Національний науковий центр “Інститут метрології”, Харків
[3]Харківський національний педагогічний університет ім. Г.С. Сковороди
[4]Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, Київ
[5]Національний аерокосмічний університет ім. М.Є. Жуковського “Харківський авіаційний інститут”
E-mail: stah@univ.kiev.ua

Грід та хмарні технології для моделювання руху намагніченого симетричного тіла в зовнішньому магнітному полі

Поєднання методу Монте-Карло, Ґрід і хмарних технологій для паралельних обчислень дозволило провести широке дослідження стійкості квазіперіодичних рухів намагніченого асиметричного твердого тіла в зовнішньому магнітному полі. Використання кватерніонних змінних для опису гамільтонової динаміки асиметричного твердого тіла суттєво підвищує ефективність чисельного моделювання.

Ключові слова: Орбітрон, асиметричний дзига, квазіорбіта, грід-технологія.

Corresponding Member of the NAS Ukraine **S.I. Lyashko**[1], **S.I. Zub**[2], **S.S. Zub**[3], **N.I. Lyashko**[4], **A.Yu. Chernyavskiy**[5]

[1]Taras Shevchenko National University of Kiev
[2]NSC Institute of Metrology, Kharkiv
[3]H.S. Skovoroda Kharkiv National Pedagogical University
[4]V.M. Glushkov Institute of Cybernetics of the NAS of Ukraine, Kiev
[5]National Aerospace University "KhAi"
E-mail: stah@univ.kiev.ua

Grid and cloud computing for the modeling of the motion of a magnetized assymmetric body in an external magnetic field

The combination of the Monte Carlo method with Grid and cloud computing for parallel computations allows us to carry out the extensive study of a stability of quasiperiodic motions of a magnetic asymmetric rigid body in an external magnetic field. The use of quaternion variables in the description of the Hamiltonian dynamics of the asymmetric rigid body substantially increases the efficiency of the numerical simulation.

Keywords: Orbitron, asymmetric top, quasiorbit, Grid technology.