

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУКФИЗИКА НАШИХ ДНЕЙФИЗИКА И ЭВМ

681.142+53

КОМПЬЮТЕРЫ В ФИЗИКЕ: ОБЩИЙ ОБЗОР*)**Д. Р. Хаманн**

Споря о том, какой алгоритмический язык лучше и какая «философия» вычислений правильнее, физики используют ЭВМ для изучения разнообразных объектов — от кварков до Вселенной.

В глазах среднего американца в последнее время компьютер превратился из неуправляемого и неизвестно где находящегося источника ошибок в ежемесячных счетах в дружелюбного и все более привычного домашнего помощника. Журнал «Таймс», который регулярно называет «самого популярного человека года», в 1982 г. назвал... компьютер! В «Нью-Йорк Таймс» существует постоянная рубрика, посвященная ЭВМ. Сейчас, когда даже популярная пресса не обходит вниманием эту тему, вряд ли нужно объяснять физикам, что ЭВМ состоит из центрального процессора, оперативной памяти, магнитных дисков и т. д. Большая часть научных работников, занимающихся как фундаментальными, так и прикладными исследованиями, имеют постоянный доступ к ЭВМ¹. Можно с уверенностью предположить, что большинство наших читателей знакомы с вычислительной техникой и с какими-нибудь примерами применения компьютеров в интересующих их областях физики. Поэтому в этой статье я буду говорить лишь о некоторых вопросах, особенно интересных для физиков, в надежде стимулировать этим дальнейшие дискуссии. Одно бесспорно — роль ЭВМ в науке будет возрастать на протяжении всей нашей жизни и время, потраченное на размышления о том, «куда мы идем и каким путем», во всяком случае, не пропадет впустую.

В физических журналах публикуется множество результатов, полученных с помощью компьютеров. Однако порой непросто понять, каким образом использовался компьютер и какую именно роль отводят авторы вычислениям в своей работе. Так, при подборе материалов для этой статьи выяснилось, что существуют совершенно несовпадающие точки зрения на роль вычислений в теории. Мы начнем поэтому с некоторых соображений, касающихся «философии» использования ЭВМ, которые относятся ко всем разделам физики. Затем мы для конкретности обсудим ряд примеров. Примеры эти охватывают как самые первые машинные вычисления, так и новейшие исследования и представляют как общеизвестные, так и весьма специальные результаты. Количество примеров, относящихся в какому-либо разделу физики, не обязательно соответствует степени использования ЭВМ в этой области.

*) Hamann D. R. Computers in Physics: an Overview.— Phys. Today, 1983, v. 36, No. 5, pp. 24—33.— (Doing Physics with Computers.) — Перевод И. И. Мазина. Проф. Дональд Р. Хаманн — руководитель Отдела физики поверхности лабораторий «Белл», Меррей-Хилл, шт. Нью-Джерси, США.

© American Institute of Physics 1983.

© Перевод на русский язык, издательство «Наука». Главная редакция физико-математической литературы, «Успехи физических наук», 1984.

Программирование, т. е. способ заставить машину делать то, что нам нужно, является той областью, в которой физики и профессиональные программисты *) существенно расходятся во взглядах, по крайней мере на практике. Мы рассмотрим некоторые стороны этой проблемы перед тем, как завершить статью кратким обзором существующих и доступных в настоящее время или в обозримом будущем ЭВМ.

«ФИЛОСОФИЯ»

Я считаю, что существуют две школы в вопросе о том, как надо использовать ЭВМ и численные расчеты в теоретической физике. В обоих вариантах вначале необходима модель, т. е. набор основных закономерностей, про которые известно или по крайней мере предполагается, что они правильно описывают изучаемую систему. В первом варианте упрощающие физические принципы, качественно описывающие поведение системы, должны быть известны заранее, и программа для ЭВМ должна учитывать их в максимально возможной степени. Целью вычислений в этом случае является получение количественных результатов для сравнения с экспериментом и определения пределов применимости теории, а также для изучения свойств систем, не поддающихся прямому физическому эксперименту. Я буду называть эту школу школой «численного анализа» или просто «анализа».

Другая школа пытается включить в программу основные принципы теории наиболее прямым путем. Целью вычислений, кроме перечисленных выше, в этом случае также является изыскание новых закономерностей путем изучения поведения численной модели. Поскольку представители этой школы обычно называют свою деятельность словом «имитация» (simulation), или «численный эксперимент», я буду пользоваться термином «имитационная школа».

В обоих случаях, естественно, чтобы сделать численное решение возможным, требуются определенные упрощающие приближения. Вообще говоря, этим приближениям не придается особого физического значения и в идеале вносимые ошибки могут быть оценены аналитически или найдены численно на некоторых более простых задачах того же класса. В худшем случае для выяснения влияния приближений необходимо либо иметь доступ к существенно более мощной вычислительной технике, либо сравнивать свои результаты с реальным экспериментом. Конечно, в последнем случае трудно отличить чисто вычислительные погрешности от неточностей теории или модели.

Разница между двумя школами проявляется не только в вычислениях, но и в позициях, занимаемых в дискуссиях научными работниками их критиками. Одна группа утверждает, что проблему следует весьма ясно понять, прежде чем приниматься за машинные вычисления. Включение в программу максимального числа аналитических результатов повышает ее эффективность и помогает распространить конкретные численные результаты на более общие случаи. Предварительные предположения о качественном поведении системы помогают тестировать программу: неожиданные результаты являются подозрительными. Идею всемогущего «черного ящика», который умеет точно рассчитывать любую желаемую величину, исходя из основных теоретических принципов, члены этой группы считают вредной — слишком много физики спрятано от исследователя внутри этого ящика.

Многие придерживаются другой точки зрения, а именно, что прямая имитация может использоваться для проверки предполагаемых механизмов поведения системы или же давать основания для нового взгляда на проблему и просто полезные результаты. С этой точки зрения черный ящик на самом деле вполне прозрачен — исследователь может заглянуть внутрь, чтобы

*) Автор широко использует термины «computer science», «computer scientist», которые не имеют адекватного русского эквивалента, поэтому в дальнейшем случаи употребления этих терминов отмечаются в скобках. (Прим. перев.)

проследить за внутренней динамикой процесса, что часто бывает невозможно в реальном эксперименте. Далее, чрезмерное включение в программу аналитических результатов может привести к тому, что на расчет будут оказывать влияние неверные или неполные теоретические предпосылки. Некоторые представители этой группы предлагают рассматривать вычислительную физику как совершенно новую дисциплину, принципиально отличную от прочих, основанных на классической методологии.

Спор между этими двумя школами в конечном счете связан с различным пониманием вопроса о том, достойны ли уважения вычисления в физике, об

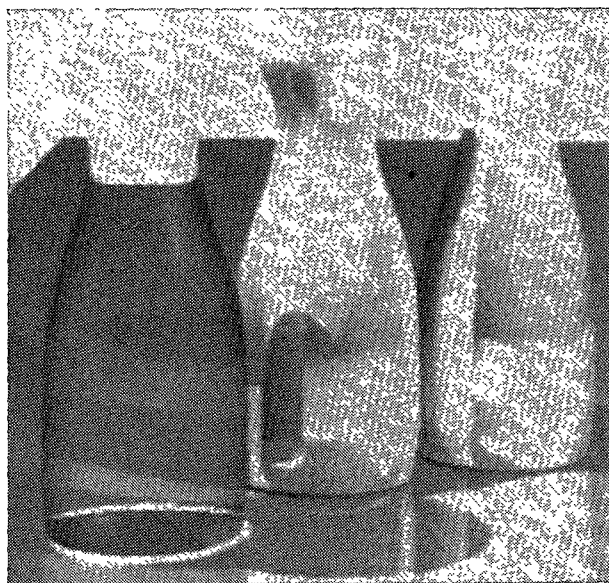


Рис. 1. Автор натюрморта — компьютер.

Этот пример демонстрирует современный уровень машинной графики, использующей законы преломления и отражения света в физической оптике. Повышение наглядности изображений, выводимых на экран дисплея, позволяет исследователям извлекать наиболее существенную информацию из большого количества чисел. (Получено Майклом Потмейслом (Лаборатория «Велл»).

их «интеллектуальной респектабельности». Тут, несомненно, существует разница, связанная с возрастом: некоторые взгляды тех, кто учился в те времена, когда компьютеры и программирование (computer science) еще не существовали как академические дисциплины, не могут разделяться нынешними выпускниками, которые обычно серьезно задумываются над тем, заниматься ли им физикой или ЭВМ (computer science). Те, которые возмущаются отупляющим влиянием телевизора на современную молодежь, могут усмотреть аналогию в видеотерминале. Борьба мнений в этой области оказывает воздействие на обучение студентов, на финансовую политику, на средства научно-технической информации.

На самом деле, возможно, вопрос об «интеллектуальной респектабельности» есть только внешнее выражение некоторой более глубокой проблемы, которую трудно сформулировать. В конце концов, машины не мыслят — физику делают физики. Критики могут говорить, что слишком мало хорошей физики делается с помощью ЭВМ, или, например, что слишком много времени тратится на программирование вместо размышлений. ЭВМ — это инструмент, такой же, как и все остальные, и может использоваться хуже или лучше. Компьютер не несет интеллектуальной ответственности.

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ

То, что здесь подразумевается под численным анализом, трудно разделить на более мелкие подкатегории, так что я начну с примера. Вольтамперная характеристика сверхпроводящего туннельного перехода обладает весь-

ма сложной структурой, и один из первых примеров применения ЭВМ в теории многих тел в физике твердого тела состоял в демонстрации количественной связи между этой структурой и фононным спектром сверхпроводника. Физической основой этих вычислений явилась теория сверхпроводимости Бардина — Купера — Шриффера. Когда эта теория была воплощена в системе интегральных уравнений, выведенных с помощью теории многих тел, приближенное аналитическое решение дало обнадеживающие результаты, качественно согласующиеся с туннельными экспериментами ².

Вильям Мак-Миллан, сотрудник лаборатории Белл, предложил вычислительную процедуру для решения полученных интегральных уравнений и итерационного уточнения модели до достижения количественного согласия фононного спектра с туннельными данными. Результаты настолько хорошо совпадали с фононными спектрами, измеренными нейтронографически, что туннельная спектроскопия вскоре стала альтернативным методом изучения фононов, а программа Мак-Миллана широко разошлась среди физиков и сейчас активно используется для этих целей ³. Этот пример подходит под мое определение «численного анализа», так как принципы теории сверхпроводимости были центральным моментом этих вычислений. Использование «первопринципного» подхода для моделирования сверхпроводящего состояния, конечно, было бы бесполезно.

Другой хороший пример можно найти в теории фазовых переходов. Давно было известно, что так называемое критическое поведение многих систем (например, ферромагнетиков вблизи точки Кюри T_c) не может быть описано в рамках теории среднего поля, которое дает качественно правильные результаты вдали от точки перехода. В частности, физические свойства меняются с температурой по степенному закону, $(T - T_c)^x$, и критический индекс x редко имеет «классическое» значение, предсказываемое теорией среднего поля. Блестящее решение Ларса Онзагера позволило точно аналитически описать поведение двумерной модели Изинга и показало, что даже в весьма идеализированной модели могут быть получены неклассические значения индексов. К сожалению, это аналитическое решение не поддается обобщению, и невозможно извлечь из него никаких общих упрощающих принципов для решения других задач.

Шагом вперед было выяснение того факта, что критические индексы, описывающие разные свойства системы, находятся в простой связи между собой, которая может быть найдена из условия масштабной инвариантности свободной энергии системы в критической точке. Образно говоря, это значит, что если бы у нас был микроскоп, через который можно наблюдать параметр порядка упорядоченной фазы (например, намагниченность ферромагнетика), то флуктуации параметра порядка выглядели бы одинаково при любом увеличении. Кеннет Вильсон в своей блестящей работе, отмеченной Нобелевской премией 1982 г., использовал эту идею, чтобы получить рекуррентные соотношения для последовательного «огрубления» масштабов для функционала свободной энергии. Чтобы численно применить приближенные рекуррентные соотношения к модели, тесно связанной с трехмерной моделью Изинга, он разработал программу для ЭВМ, и с ее помощью точно вычислил неклассические индексы для этого случая.

Сейчас этот метод, называемый методом группы перенормировок (или ренормгруппы), обобщен на широкий класс проблем, связанных с фазовыми переходами, и используется как в форме приближенных аналитических решений, так и более точных численных расчетов. В этом примере новый физический принцип позволил численно решить ряд задач, ранее представлявшихся неразрешимыми. Предварительная численная проверка этого принципа сыграла основную роль в его практическом подтверждении ⁴.

Электронная структура, которая изучается в физике конденсированных сред и в квантовой химии, является одной из важнейших

областей применения «аналитического» подхода к использованию ЭВМ в весьма широком масштабе. Предположим, например, что мы имеем уравнение Шрёдингера для 5—10 ядер и нескольких десятков электронов, взаимодействующих друг с другом по закону Кулона, с дополнительными условиями, основанными на принципе Паули, и попытаемся решить его с помощью стандартной программы для решения многомерных дифференциальных уравнений в частных производных. Вряд ли таким способом удастся промоделировать образование атомов и молекул, даже если в нашем распоряжении окажутся ЭВМ, на много порядков более мощные, чем сегодняшние.

Любые практические осуществимые расчеты такого сорта основываются на использовании самых разных предварительных сведений о системе, как, например, адиабатическое приближение, разумно выбранные положения ядер, поведение волновых функций вблизи каждого ядра в соответствии с центральной симметрией потенциала в этой области, ведущая роль самосогласованного электростатического потенциала. Основанные на этих принципах вычисления разумно описывают геометрию химических связей и уже достаточно скромны по объему для, скажем, молекул среднего размера.

Хорошо сходящиеся расчеты для молекулы бензола, например, требуют 5 мин на ЭВМ «Крэй-1». Чтобы достичь точности, достаточной для вычисления энергии связи, необходимо включить эффекты динамической корреляции электронов, что для молекул может быть сделано вполне последовательно. Из-за того, что динамические корреляции электронов должны рассматриваться глобально, во всей молекуле, вычислительная сложность современных методов быстро растет по мере увеличения молекул и усиления критерия сходимости. Подобные расчеты энергии связи для бензола требуют примерно 30 мин времени на «Крэй-1» *).

Для кристаллов и других макроскопических тел, в которых можно использовать периодичность решетки, сложность расчета определяется числом атомов в элементарной ячейке. Однако последовательное рассмотрение электронных корреляций, используемое в квантовой химии, не допускает обобщения на твердые тела, и поэтому широко используются приближения для обменной и корреляционной энергий, основанные на методе локального функционала плотности ⁵. Такие расчеты дают весьма точные результаты для свойств основного состояния: энергии связи, равновесной геометрии, силовых констант. С меньшим успехом удается вычислять, например, энергию возбужденных состояний, и не существует последовательной схемы для уточнения таких вычислений. Необходим новый подход, возможно, новая теория для описания корреляций полулокальным образом, для того чтобы существенно улучшить состояние дел в этой области.

В рамках описанного подхода можно также достаточно точно численно изучать системы с меньшей симметрией, чем в полностью упорядоченном кристалле. Примерами таких систем являются кристаллические поверхности, периодические в двух измерениях и кристаллы с отдельными дефектами. Некоторые из моих собственных результатов по изучению поверхностей могут служить иллюстрацией использования аналитической информации для упрощения сложных вычислений. На рис. 2 показана рассчитанная электронная плотность на поверхности [110] арсенида галлия. В такой системе волновая функция электронов вблизи атомов в первую очередь определяется сферической частью притягивательного потенциала, а вне кристалла — одномерной частью поверхностного потенциального барьера. Уравнение Шрёдингера для сферического или одномерного потенциалов легко решается, и решения нетрудно рассчитать для нескольких значений энергии в интересующем нас интервале. В промежуточной области волновые функции меняются медлен-

*) Производительность ЭВМ «Крэй-1» оценивается в 150 млн опер/с, т. е. примерно в 1,5⁷ раза больше производительности МВК «Эльбрус-2» и в 150 раз — ЭВМ «БЭСМ-6». (Прим. перев.)

но, и разложение по плоским волнам быстро сходится и обеспечивает необходимую трансляционную симметрию. Гладко сшивая волновые функции этих трех типов на соответствующих границах, можно получить хороший вариационный базис для поиска точного решения в полном потенциале. Сравнение

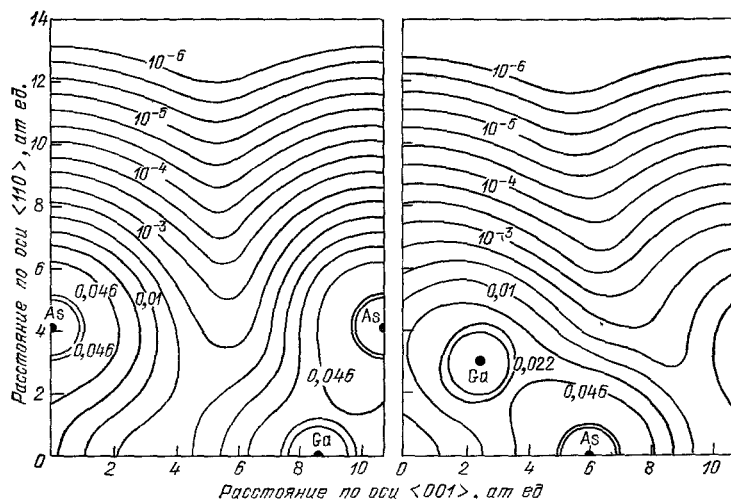


Рис. 2. Плотность заряда на поверхности арсенида галлия в двух плоскостях ⁶.

Изображены логарифмические линии равной электронной плотности, по три на каждый порядок, в отношении $1 \cdot 2,2 : 4,6$. Плотность заряда в электронах/ат. ед. ⁵. Классическая точка поворота атома галлия с энергией 20 МэВ соответствует контуру 10^{-4} . Эксперименты по дифракции атомов подтверждают форму этого контура.

рассчитанного распределения заряда (см. рис. 2) с результатами экспериментов по рассеянию гелиевых пучков ⁶ показывает, что этот метод дает достаточно точные волновые функции, — как минимум, в интервале от 3 до 5 Å от поверхности кристалла

ИМИТАЦИЯ

В большинстве случаев имитирующие расчеты можно отнести к одному из трех типов:

— Непрерывные модели широко используются в физике плазмы, гидродинамике и астрофизике. В численных экспериментах, основанных на таких моделях, на ЭВМ решается система нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих соответствующие силы и поля, обычно на дискретной сетке точек в пространстве и во времени;

— Модели второго типа описывают конечное множество частиц, взаимодействующих по заданному закону. В зависимости от того, относятся ли эти модели к астрофизике, физике конденсированных сред или к физике плазмы, «частицами» могут являться галактики, молекулы или электроны. Такая имитация, называемая иногда методом молекулярной динамики, состоит в интегрировании ньютоновских уравнений движения для каждой частицы в поле остальных. В задачу могут вводиться затухание или вязкость и случайная сила, зависящая от температуры реального или воображаемого теплового резервуара ⁷. Как пишут в своей статье в этом номере Брюс Коэн и Джон Киллин, в физике плазмы широко используются оба описанных типа моделей.

Численные эксперименты третьего типа скорее характерны спецификой техники, чем моделей. В них задача с многими переменными решается с помощью метода статистических испытаний, известного под названием «метода Монте-Карло» (по имени города, где с помощью этого метода была истори-

чески доказана необратимость процесса утечки денег *)). В статистической механике используется тот вариант метода Монте-Карло, в котором генерируются случайные блуждания в конфигурационном пространстве изучаемой системы, используя какой-либо алгоритм, основанный на принципе детального равновесия при заданной температуре. Согласно этому принципу вероятность перехода между состояниями системы определяется бoльцмановским множителем и алгоритм накладывает соответствующие требования на выбор следующего шага в случайных блужданиях. Когда система приходит в равновесие, средние по путям стремятся к термодинамическим средним. Варианты этого метода используются при изучении однородных квантово-механических систем типа жидкого гелия и некоторых довольно абстрактных физических моделей⁸, как, например, в последнее время некоторых моделей в квантовой теории поля при высоких энергиях.

Для всех описанных видов имитации характерны некоторые черты, из-за которых их точность находится в тесной связи с мощностью имеющихся ЭВМ. Более мелкая сетка или большее число частиц или спинов всегда дают более хорошее приближение к непрерывному или термодинамическому пределу. Максимальный допустимый шаг сетки или максимальная длина корреляции могут быть неизвестны заранее. Максимальный допустимый шаг по времени определяется максимальной скоростью распространения волн или минимальным периодом колебаний. Для достижения равновесия время работы программы должно в несколько раз превышать характерные времена диффузии доменных стенок или гидродинамических течений. Для того чтобы следить за сходимостью непосредственно по поведению численной модели, требуется подойти настолько близко к пределу, что это может оказаться весьма трудной задачей.

Можно привести яркий исторический пример успешного применения метода имитации, результат которого оказал огромное влияние на разные области физики. Началом явилась деятельность Энрико Ферми, Джона Пасты и Станислава Улама, которую можно назвать применением метода молекулярной динамики к цепочке частиц, связанных нелинейными пружинами. Целью работы было развитие теории старой проблемы конечной теплопроводности твердых тел. В расчетах длинноволновое возмущение накладывалось как начальное условие и наблюдалось, как оно распадается на квазислучайный набор более коротковолновых мод, как и ожидалось. Оказалось, однако, что через некоторое время система возвращалась к простым состояниям, почти идентичным начальному. Этот удивительный результат стимулировал дальнейшие исследования. Задача была сведена к нелинейному уравнению в частных производных, известному в гидродинамике под названием уравнения Кортевега — Де-Вриза. Было известно, что это уравнение, которое описывает волны на поверхности воды в мелком бассейне, имеет «уединенные» решения — волны типа импульсов, распространяющихся с постоянной скоростью и без изменения формы. Более тщательно изучая численные решения этого уравнения, Мартин Крускал и Норман Забуски сделали замечательное открытие: любое сколь угодно сложное решение можно представить в виде набора «солитонов», которые похожи на «уединенные» решения, когда они пространственно разделены и сохраняют свою индивидуальность, проходя друг сквозь друга. Затем последовал период быстрого развития теории и были найдены и доказаны аналитически многие новые свойства широкого класса нелинейных уравнений в частных производных, включая уравнения Кортевега — Де-Вриза и другие важные в физике уравнения. Забуски написал подробный обзор⁹ с объяснением «симбиоза» численного моделирования и аналитических методов в этом случае. Значительные успехи в понимании природы турбулентности также оказались возможными благодаря имитации. В связи с некоторыми задачами из области физики атмосферы и предска-

*) Речь идет о знаменитых игорных домах в Монте-Карло. (Прим. перев.)

зания погоды Эдвард Лоренц из Массачусетского технологического института аппроксимировал соответствующие гидродинамические уравнения системой нелинейных обычных дифференциальных уравнений, описывающих ограниченное число мод. Он обнаружил¹⁰, что в определенной области параметров эта система описывает хаотическое поведение, и исследовал это неожиданное явление, последовательно уменьшая число мод. В конечном счете выяснилось, что минимальное число мод, необходимых для появления хаотического поведения, равно трем, в противоречии с существовавшим мнением, что истинный хаос требует бесконечного числа степеней свободы.

Перечисленные примеры демонстрируют совершенно неожиданные результаты для весьма простых систем, результаты, вызвавшие важные математические обобщения. Обычно численные эксперименты и более сложны, и менее общи, и результаты их можно предвидеть (по крайней мере до некоторой степени). В современном исследовании одной проблемы из области гидродинамики, так называемой конвекции Рэлея — Бенара, проявились некоторые характерные черты, которые полезно рассмотреть здесь. Ячейка Рэлея — Бенара состоит из ящика (в данном случае прямоугольного), наполненного жидкостью, при фиксированной разнице температур между дном и крышкой. Если длина и ширина ящика велики по сравнению с высотой, при разности температур, ненамного превышающей ту, при которой начинается конвекция, конвективные течения принимают весьма сложную форму. Исследования показали, что полное трехмерное зависящее от времени уравнение течения жидкости слишком сложно и не поддается численному решению. В то же время, в самом начале конвекции в бесконечно широком ящике решение известно — это некоторая конкретная периодическая функция. Непосредственно вблизи начала конвекции решение может быть представлено в виде этой функции, умноженной на некоторую медленно меняющуюся амплитуду,

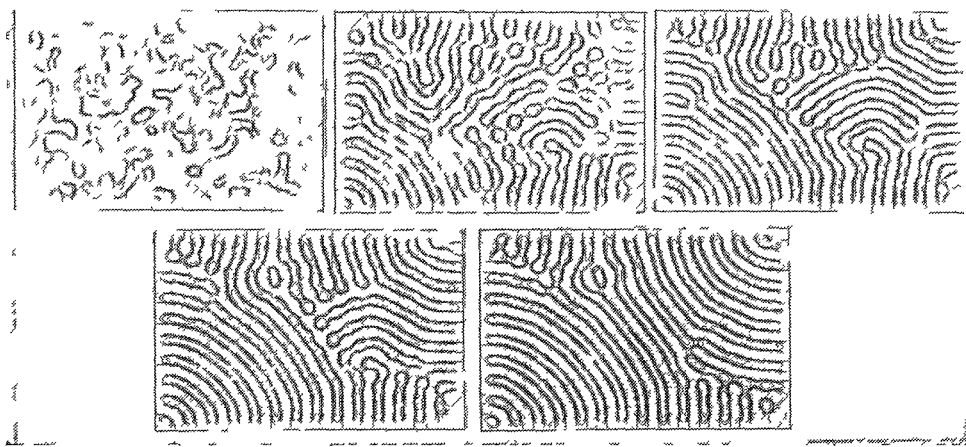


Рис. 3. Имитация конвекции в ячейке Рэлея — Бенара, длина и ширина которой, соответственно, в 29,2 и 19,5 раз больше высоты,

Показаны линии равной вертикальной скорости в среднем сечении ячейки. Сплошные и пунктирные линии отвечают, соответственно, отрицательной и положительной скоростям с абсолютной величиной $1/2$, $1/4$, $1/8$ и $1/16$ максимальной. Разность температур, вызывающая конвекцию, в 1,1 раза больше критического значения (для начала конвекции в неограниченной ячейке). Случайное распределение в начальный момент времени (вверху слева) превращается в сложное, но регулярное стабильное движение.

которая подчиняется определенному нелинейному бигармоническому уравнению в частных производных в двух горизонтальных измерениях и во времени.

Но даже в таком упрощенном виде эта задача смогла быть решена лишь потому, что для бигармонических уравнений был разработан новый, высоко-

эффективный алгоритм. В лабораториях «Белл» были проведены численные эксперименты, прослеживающие эволюцию течения жидкости при случайных начальных условиях путем построения серии карт вертикальной скорости в среднем горизонтальном сечении ящика (рис. 3). Гигантские ассоциативные способности человеческого мышления немедленно подсказывают аналогию для релаксации системы во времени: «отжиг» дефектов в изображении течения жидкости, процесс, наглядно прослеживающийся на серии рисунков 3. Три элемента — аналитическое упрощение, основанное на известной физической теории, хороший алгоритм и удачное графическое представление результатов — характерны для многих успешных применений численного моделирования¹¹.

Последний пример, тоже из практики лабораторий «Белл», иллюстрирует технику численного моделирования, которую можно охарактеризовать поговоркой: «вкладывай деньги туда, где пахнет жареным». Многие пытались

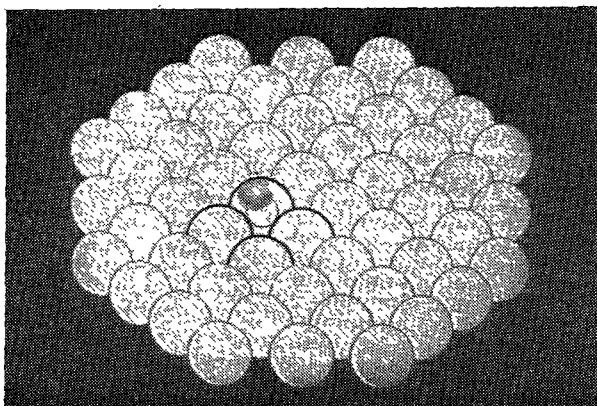


Рис. 4. Имитация в физике поверхности¹².

Один кадр из фильма, сделанного компьютером, иллюстрирует адсорбцию с диссоциацией окиси азота на платине. Малый темный атом — кислород, малый светлый — азот. Четыре крупные выделенные атома платины вблизи молекулы окиси являются «активной» зоной поверхности.

исследовать взаимодействие газа с поверхностью методами молекулярной динамики. Чтобы изобразить границу раздела, требуется огромное число атомов, и большая часть их практически все время совершает неинтересные тепловые колебания. Джон Тулли разработал технику, которая позволяет работать с такими атомами аналитически в гармоническом приближении, в то время как молекула газа и ближайшие к ней атомы поверхности детально исследуются численным образом. Набор атомов, подвергаемых такому исследованию, постоянно переопределяется по мере того, как молекула или ее составляющие передвигаются по поверхности, так что такая техника учитывает ангармонические эффекты вне зависимости от того, где именно имела место передача большого количества энергии. Кроме вычисления интересных с точки зрения сравнения с экспериментом средних величин, Тулли снял цветной фильм с использованием тонких возможностей машинной графики с объемной перспективой, теневыми эффектами и т. п. Кадр из этого фильма показан на рис. 4. Фильм, снятый «с точки зрения демона Максвелла», позволяет увидеть много нового в перераспределении кинетической энергии, энергии колебаний и вращений при рассеянии и хемосорбции¹².

Эксперимент. В экспериментальной физике ЭВМ сегодня играют важнейшую роль, и целесообразность их применения не вызывает дискуссий. Я еще не встречал человека, который бы доказывал интеллектуальную

ценность процесса переписывания показаний приборов в лабораторный журнал! Часто ЭВМ пронизывает весь эксперимент: проектирование установки, управление экспериментом, сбор и обработка данных. Масштабы меняются с масштабами эксперимента, от гигантских ускорителей элементарных частиц, включающих систему мощных компьютеров и специальное программное обеспечение в сотни тысяч операторов, до небольшой установки, обслуживаемой одним человеком, с миниЭВМ и несколькими небольшими программами. Некоторые из решаемых задач похожи на те, с которыми встречаются теоретики, как, например, имитация поведения частиц в ускорителе или изучение модели системы путем подгонки параметров под экспериментальные данные. Считать ли такую деятельность экспериментальной или теоретической, в большой степени вопрос определений.

Задачи же, связанные с управлением и сбором данных, отличаются качественно. Они требуют программирования в реальном масштабе времени и часто имеют дело с многочисленными одновременными операциями ввода/вывода в системе разделения времени. Иногда здесь требуется квалификация системного программиста, знание машинной архитектуры и языка системного программирования. Использование ЭВМ позволяет делать многое такое, что иначе было бы невозможно, например, одновременное измерение большого числа величин, предварительная обработка данных в процессе сбора и диалоговый режим обработки в процессе работы. К сожалению, все это мало отражено в физической литературе, включая и данную статью, за что автор, будучи сам теоретиком, приносит свои извинения читателям.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Когда результаты вычислений публикуются в физических журналах, то, как правило, даже в нескольких словах не освещается использованное математическое обеспечение. С этим связана главная проблема для читателя, который желает воспроизвести результаты, убедиться в их достоверности или расширить метод на другие задачи. Вероятно, традиция не писать о вычислительных процедурах связана с упоминавшейся дискуссией об «интеллектуальной респектабельности» вычислений. Похоже, эта традиция сама себя поддерживает, так как достоверность вычислительных результатов есть один из предметов спора. Эта практика в корне отличается от обычной практики описания экспериментальной процедуры или аналитических выкладок в той степени, чтобы была возможна детальная проверка. Иногда эту роль выполняют специальные журналы по вычислительной математике и физике, но лишь отчасти.

Проведение достаточно сложных вычислений на самом деле весьма нетривиальная работа и часто составляет значительную часть творческого вклада исследователя. Кроме того, программа для ЭВМ содержит немалую информацию о той задаче, для решения которой она предназначена. Большая часть этой информации не отражена в тексте журнальной статьи. Решение вопроса требует изменения привычек редакторов, референтов, да и самих авторов.

Сказанное не означает, что следует публиковать полный текст программы, но схематическое описание принципиальной структуры программы, перечисление и обсуждение использованных вычислительных алгоритмов и тех особенностей программы, которые связаны с ее физическим содержанием, было бы вполне ценным добавлением к физической статье. Требование о включении такого описания было бы столь же полезно для дисциплины мышления, как и письменное описание любого исследования. Вообще говоря, о таком описании следует подумать еще до того, как приступать к написанию программ — это является одной из черт профессионального программирования, чего не хватает многим физикам и что несомненно оказало бы большую

пользу. Не следует думать, что описанное предложение привело бы к существенному увеличению объема публикаций — многое из обсуждения программы могло бы заменить соответствующую часть традиционного текста.

Этот проклятый ФОРТРАН?

Вопрос о том, на каком языке писать программу, имеет, как правило, один ответ — ФОРТРАН. В то время, как этот первый алгоритмический язык высокого уровня, несомненно, играл важную роль в стимулировании научно-исследовательского программирования в пятидесятых годах, когда он появился, сейчас некоторые уже начинают проклинать его¹³. Причиной недовольства служит то, что ФОРТРАН не отражает того колоссального прогресса, который с тех пор был достигнут не только в программировании, но и в понимании методов вычислений и путей использования ЭВМ. Чаще всего ссылаются на отсутствие в ФОРТРАНе хорошего механизма передачи управления, неструктурность, нерекурсивность языка. Передача управления говорит об очередности выполнения и повторения отдельных частей программы, и многие программы на ФОРТРАНе напоминают, как говорят, блюдо спагетти. Рекурсивность состоит в возможности для подпрограммы вызывать саму себя, что часто бывает полезно. В более современных языках, как ПАСКАЛЬ, С и даже АЛГОЛ эти недостатки отсутствуют, однако среди физиков они не завоевали популярности.

Из-за проблем передачи управления *) бывает трудно или невозможно понять, модифицировать или даже просто использовать программу на ФОРТРАНе, писанную кем-то другим (или вами самими несколько лет назад). Я могу проиллюстрировать это анекдотическими случаями из собственной практики. Однажды я получил классическую программу для расчета электронной структуры атомов, которая была написана на одном из ранних диалектов ФОРТРАНа. Я хотел изменить тип сетки для радиальной переменной, но понял, что это минимальное изменение настолько трудно внести, что я предпочел переписать всю программу **). Другой пример относится к случаю, когда мне понадобилась программа для графического представления результатов на новом устройстве. Оказалось, что очень просто изменить для этой цели библиотечную программу, написанную на языке С. Последний пример с первого взгляда противоречит предыдущим: изменяя пакет библиотечных программ для диагонализации матриц с целью использовать векторный процессор «Крэй-1», к моему удивлению, несмотря на то, что программы были написаны на ФОРТРАНе, я быстро разобрался в них и смог внести необходимые изменения. Ознакомившись с документацией, я узнал, что пакет первоначально был написан на АЛГОЛе, а потом переписан на ФОРТРАН.

Еще два примера демонстрируют другие недостатки ФОРТРАНа. Первый относится к проблеме протекания в статистической механике. Связи, соединяющие соседние узлы решетки, появляются с вероятностью p и исследуется статистика кластеров из связанных узлов по мере приближения p к критическому значению p_c , при котором образуется бесконечно большой кластер. В стандартном подходе связи случайно распределяются в конечном объеме, например, в прямоугольном ящике. Программно это легко представить в виде массива, единственной структуры данных, с которой обычно знакомы программирующие на ФОРТРАНе. Научно-исследовательская группа с хорошим опытом теоретического программирования (computer science) предложила новый подход: в программе генерируются только связи на краю кластера с помощью рекурсивной процедуры, которая перебирает крайние

*) И вообще неструктурности языка. (Прим. перев.)

**) Речь идет об известной программе Германа — Скиллмана. Насколько мне известно, еще никто не преуспел в этой небольшой модификации, которая действительно, как правило, необходима. Абсолютно все либо переписывают программу либо делают переинтерполяцию результатов. (Прим. перев.)

точки и случайным образом добавляет связи или же отмечает, что точка является «пустой». Когда все точки на краю оказываются «пустыми», процедура окончена. Связи хранятся в виде структуры данных, называемой двусвязным графом, которая отражает главное свойство проблемы — связность. Такой подход позволил при той же оперативной памяти обрабатывать значительно большие кластеры, чем «метод ящика», а также избавиться от влияния границ ящика, причем время счета значительно медленнее растет с размерами кластера¹⁴. На рис. 5 показан один из полученных кластеров, раскрашенный (программно) так, чтобы выделить его «скелет».

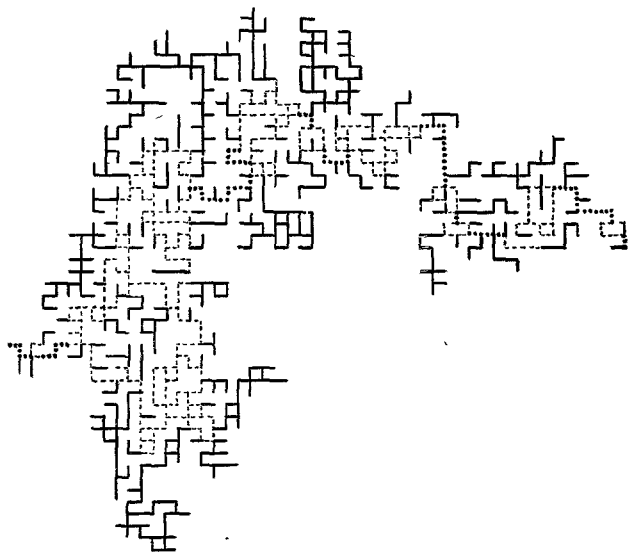


Рис. 5. Кластер из непрерывных связей для двумерной задачи о протекании, с вероятностью образования связи 0,45¹⁴.

Связи раскрашены согласно рекурсивному алгоритму, который оказался возможен благодаря структуре данных, описывающих кластер. Если рассматривать график как сеть сопротивлений, а ток идет слева направо, то по пунктирным связям идет полный ток, по штриховым — параллельно части полного тока, а сплошные связи — «тушковые», по ним ток не идет.

Второй пример, из области астрофизики, относится к эволюции большого числа галактик под действием гравитационных сил. Непосредственный подход состоит в интегрировании уравнений движения N материальных точек. При этом на каждом шаге для того, чтобы построить гравитационное поле, необходимо производить вычисления N^2 раз. Новый подход, разработанный в Принстонском университете, состоит во введении структуры данных типа «бинарного дерева», которая описывает множество галактик в виде иерархии пространственно разделенных «кустов», так что используемая рекурсивная процедура рассчитывает лишь взаимодействие между центрами масс достаточно удаленных друг от друга кустов. В результате на каждом шаге требуется лишь $N \ln N$ вычислений, что обеспечивает значительный выигрыш во времени, так как быстрые движения внутри разных кустов легко описываются отдельно друг от друга. В результате работы программы была обнаружена тенденция образования кластерной структуры из первоначально равномерного распределения галактик, как видно из рис. 6. Эта программа была написана на ПАСКАЛе, а программа для решения задачи о перколяции — на языке С. Эту последнюю я видел сам, и, хотя она невелика и хорошо понятна, я бы вряд ли смог написать ее на ФОРТРАНе.

Эти примеры говорят в пользу точки зрения, распространенной среди профессиональных программистов (computer scientists), что те, кто знают только ФОРТРАН, вряд ли могут писать ясные программы с эффективными алгоритмами. Обычно приводятся два аргумента в пользу ФОРТРАНа: то, что обычно программа на ФОРТРАНе транслируется в более эффективную программу в машинных кодах, чем программа на другом языке высокого уровня, и то, что на ФОРТРАНе существуют обширные библиотеки программ самого разного назначения. Первый аргумент относится не к алгоритмическим языкам, а к трансляторам. Трансляторы с ФОРТРАНа совершен-

существовали столько времени, что некоторые из них действительно работают чрезвычайно эффективно. Однако трансляторы с других, более современных языков становятся все лучше, и этот процесс будет продолжаться в будущем, особенно, если будут расти потребности. С точки зрения научных исследований многие часы, затраченные на программирование, вряд ли окупаются некоторым выигрышем во времени работы программы. Выигрыш в два раза не меняет принципиально класс задач, которые можно решать с помощью того же алгоритма. Если на другом языке можно запрограммировать более эффективный алгоритм, выигрыш во времени счета будет качественным.

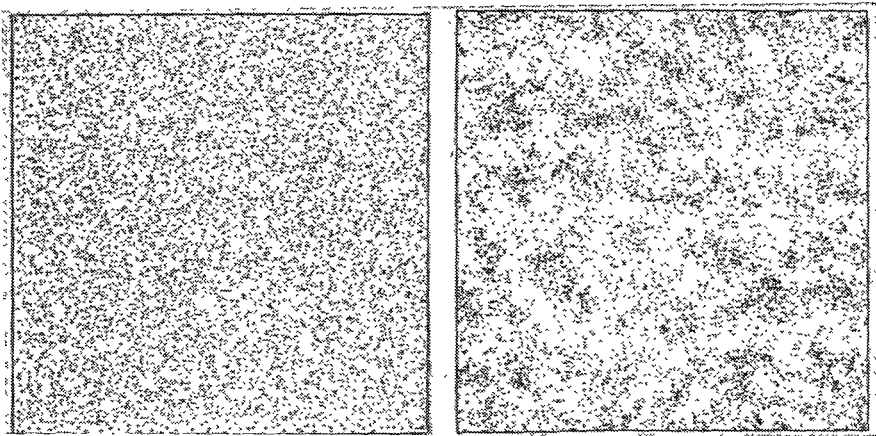


Рис. 6. Кластеризация галактики ¹⁵.

Показаны результаты имитации эволюции хаотического распределения 10 000 галактик (слева) к распределению, характеризующемуся образованием заметных кластеров справа. Это — двумерная проекция реальной трехмерной модели. Плотность масс бралась минимально возможной в закрытой Вселенной согласно общей теории относительности. Релятивистское увеличение масштаба длин за время эволюции было равно 7,1.

Вопрос о библиотеках более серьезный. В будущем можно ожидать появления библиотек на новых языках. Одна из возможных альтернатив сегодня состоит в использовании таких языков, которые смогут автоматически транслироваться в ФОРТРАН *). Так, языки ЭФЛ и РАТФОР, относящиеся к этому классу, имеют многие возможности других современных алгоритмических языков и не лишают пользователя преимуществ использования трансляторов с ФОРТРАНа и соответствующих библиотек.

Проблемно-ориентированные языки

Несмотря на большие преимущества перед ФОРТРАНОм, даже новые языки не позволяют писать программу в том виде, который наиболее адекватен решаемой задаче. Было бы идеально, если бы законченные смысловые части, как, например, основные уравнения, граничные условия, дискретизация переменных, можно было бы программировать в виде отдельных модулей. Кеннет Вильсон и другие считают создание алгоритмических языков для этой цели важнейшей задачей научного программирования. Конструирование трансляторов для подобных языков специального назначения сейчас облегчается наличием «трансляторов для трансляторов». Тем не менее, большие усилия требуются со стороны физиков и программистов (computer scientists) для создания подобных языков широкого применения.

*) Имеются в виду препроцессоры, которые генерируют на выходе программу на ФОРТРАНе; см., например: Хьюз Дж., Мичом Дж. Структурный подход к программированию. — М.: Мир, 1980. (Прим. перев.)

Сейчас уже существует ряд языков специального назначения для другой работы, необходимой в физике, — это символьные преобразования, или алгебраические вычисления. Один из таких примеров — язык МАКСИМА, разработанный в математической лаборатории Массачусетского технологического института. Это мощный язык с широкими возможностями, он позволяет дифференцировать, интегрировать, находить пределы, решать системы линейных или полиномиальных уравнений, разлагать полиномы на множители, разлагать функции в ряд Тэйлора или в ряд Лорана, решать дифференциальные уравнения, вычислять ряды Пуассона, строить кривые, работать с матрицами и тензорами.

Для расчета электронной структуры мне однажды понадобилось вычислить несколько сотен интегралов, которые все брались аналитически и выражались в виде суммы произведений частных производных сравнительно простой функции двенадцати переменных. Вероятность того, что я смог бы выполнить эту работу, не допустив при этом ошибок, была равна нулю. Всего месяц потребовался мне для того, чтобы изучить существовавший тогда язык для алгебраических вычислений, АЛБТРАН, и написать программу, генерирующую непосредственно операторы ФОРТРАНа для вычисления необходимых выражений. Язык МАКСИМА написан на ЛИСПе, языке для обработки списков, а АЛБТРАН, как ни странно, на ФОРТРАНе.

Еще перед тем, как выбрать себе алгоритмический язык, пользователь вступает во взаимодействие с другой частью математического обеспечения — с операционной системой. В операционных системах обычно отсутствует стандартизация главных алгоритмических языков, что создает массу неприятностей при переходе с одного компьютера на другой. Быстрое распространение операционной системы ЮНИКС¹⁶ на малых, средних и даже некоторых больших ЭВМ является обнадеживающим шагом к стандартизации *de facto*. Система ЮНИКС обладает многими приятными для программиста свойствами как для вычислений, так и для обработки текстов. Она даже позволяет пользоваться услугами других систем, не выходя за рамки данной. Например, набрав несколько команд на моей ЭВМ «ВЭКС», которая работает под управлением ОС ЮНИКС, я могу переслать свою программу и файлы данных через сеть ЭВМ на машину Хонивелл, расположенную в нашем ВЦ, и далее на «Крэй-1». После окончания работы программы результаты пересылаются обратно ко мне на ВЭКС, и при этом я могу не иметь никакого представления об операционных системах Хонивелл и «Крэй-1», не знать даже, какие команды были использованы, чтобы «прогнать» мою задачу. Сама система ЮНИКС написана на языке С, так что при необходимости на этом языке высокого уровня можно писать программы для управления экспериментом и сбора данных в реальном масштабе времени, что необходимо во многих случаях.

А л г о р и т м ы

Мы уже упоминали вопрос об алгоритмах в предыдущем обсуждении. Важность прогресса в этой области хорошо ясна математикам (*computer scientists*), но не всегда — физикам. На рис. 7 показана эволюция аппаратного и математического обеспечения по отношению к задаче, характерной для численного моделирования, — решению трехмерного уравнения в частных производных в прямоугольном ящике. По левой оси отложено время переключения для устройств, составляющих элементную базу ЭВМ (в последнее время производительность ЭВМ росла несколько медленнее, так как лимитирующим фактором сейчас является время передачи сигнала между элементами). По правой оси отложено число арифметических операций, необходимых для решения такого уравнения с заданной точностью. Включая алгоритмы, разработанные до 1950 г., когда практически никто не использовал их реально, или рассматривая граничные условия на произвольной

поверхности, можно получить линию, которая и сейчас еще идет вниз. Конечно, выигрыш для пользователя измеряется произведением обеих величин — математического и аппаратного обеспечения.

Не волшебство ли это — такое быстрое развитие алгоритмов? Алгоритм Кули-Тьюки для быстрого преобразования Фурье, появившийся в 1965 г., сейчас хорошо известен. Для N точек он уменьшает объем вычислений при больших N с порядка N^2 до порядка $O(N \ln N)$. Менее известно, что два N -значных числа можно перемножить за $O(N \ln \ln N \ln N)$ операций, а не $O(N^2)$, если это делать по школьным правилам, и что для умножения двух матриц $N \times N$ общего вида требуется $O(N^2,^{81})$ операций. Все эти примеры уменьшения вычислительной сложности алгоритмов не являются ни отдельными, ни случайными. Они связаны с применением известных принципов, которые приложимы также и к более сложным задачам, таким, как проблема протекания и динамика галактик.

Взаимодействие физиков с математическим обеспечением должно начинаться с высшей школы. Сегодня каждый студент-физик должен прослушать какие-либо курсы по научному программированию (computer science), в отличие от обычного курса ФОРТРАНа¹³. Тем же, кто уже вышел из студенческого возраста, следует для начала побеспокоиться о том, чтобы догнать молодежь. Программное окружение, в котором мы работаем, может меняться медленно, но, как говорил мне один знаток (computer scientist), программировать на ФОРТРАНе еще не беда, главное — не думать на ФОРТРАНе.

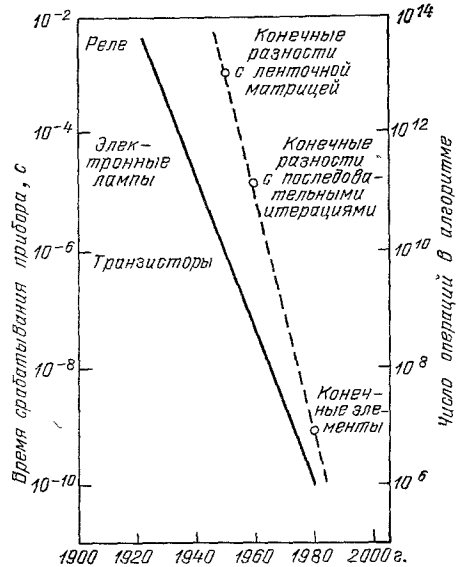


Рис. 7. Эволюция вычислительной техники и математического обеспечения²¹.

Показано развитие электронных компонент ЭВМ и вычислительных алгоритмов. Две прямых демонстрируют уменьшение времени переключения логических элементов ЭВМ и уменьшение числа арифметических операций, необходимых для решения некоторого дифференциального уравнения в частных производных. Выигрыш для пользователя определяется произведением обеих величин.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ТЕХНИКА

Последним достижением в области вычислительной техники являются два суперкомпьютера общего назначения — «Крэй-1» («Крэй резерч инкорпорейшн»), и «Сайбер-205» («Контрол дэита корпорейшн»). Производительность этих машин достигает 80 и 400 миллионов операций с действительными числами в секунду, или «мегафлопов»^{*}), соответственно, для тех задач, которые допускают векторную обработку. Практически, средняя скорость «Крэй-1» порядка 20 мегафлопов. (Фактически, все эти оценки весьма приблизительны, и я не настаиваю на числах, которые привожу.) Таких машин мало, и обычно физикам трудно получить доступ к ним. CDC-7600 и IBM-360/195, со средней производительностью 2 мегафлопа, более широко распространены. Выпуск ЭВМ «Крэй-2», с производительностью предположительно 800 мегафлопов, планируется в конце 1983 — начале 1984 г. Японское правительство объявило о проекте создания в 1989 г. суперЭВМ в 10 гигафлопов. Чтобы преуспеть в этом, придется разработать сверхбыстрые логические элементы и элементы памяти на другой по сравне-

^{*}) Megaflops — от английских слов «floating point operations». (Прим. перев.)

нию с кремниевыми полупроводниками основе и системы с высокой параллельностью обработки. Сейчас Министерством обороны США и Национальным Фондом организована комиссия для исследования крупномасштабных вычислений в науке и технике под руководством Питера Лэкса. В докладе комиссии ¹⁸ утверждается, что Соединенным Штатам необходимо проявить такую же инициативу, чтобы не потерять первенства в этой области. Комиссия делает вывод, что на первом этапе исследования будут опираться на поддержку правительства и университетов, и лишь впоследствии такой долгосрочный проект сможет быть поставлен на коммерческую основу.

Чего следует ожидать от подобных проектов? Вероятно, увеличение мощности ЭВМ в 10 раз не окажет существенного влияния на научные вычисления, но 1000-кратное увеличение уже является качественным. Исключением являются задачи управления экспериментом в реальном масштабе времени, где даже относительно небольшое увеличение скорости счета может обеспечить возможность управления новыми физическими процессами. Фактически, доступные вычислительные ресурсы определяются произведением скорости счета на время вычислений, так что вопрос о скорости, практически, отражается в увеличении времени счета в 10 раз, что допустимо, или в 1000 раз, что нереально. Чтобы правильно понять приведенные числа в мегафлопах, надо также учесть, что супер-ЭВМ широко используют векторную, т. е. параллельную обработку, и для полноценного использования возможностей ЭВМ необходима разработка соответствующих алгоритмов.

Больше всего современное развитие электроники влияет на миди-, мини- и персональные ЭВМ. Под мидиЭВМ я понимаю компьютер типа VAX-11/780 фирмы «Диджитал эквипмент корпорейшн», средняя скорость которого 0,2 мегафлопа. Современная технология производства больших интегральных схем ведет к быстрому снижению цен и уменьшению размеров ЭВМ этого класса. Через пять лет развитие электронной промышленности позволит разместить компьютер типа VAX на письменном столе, а стоимость его, включая твердый диск, упадет до 10 тыс. долларов. В то же время для соответствующего класса задач уже сейчас подключение векторных процессоров ценой до 500 тыс. долларов к мидиЭВМ приближает их по производительности к большим компьютерам.

Еще одна возможность, которая сейчас широко обсуждается, это процессоры специального назначения, как, например, шахматный чемпион — компьютер «Белль»¹⁹ или процессор для решения задачи Иизинга методом Монте-Карло, построенный в университете Санта-Барбара ²⁰. Такие процессоры могут даже превосходить суперЭВМ для узкоспециальных задач, при том, что стоят они заметно меньше. Решение о затратах времени и средств на разработку и изготовление специализированной ЭВМ в некотором смысле аналогично решению о создании новой экспериментальной установки.

Вычислительная техника, с которой мы будем иметь дело в будущем, имеет несколько компонент. Будет расширяться доступ к суперЭВМ, особенно если правительство последует рекомендациям комиссии Лэкса ¹⁸ о расширении национальной сети ЭВМ на основе существующих сетей — сети Исследовательского агентства Министерства обороны и сети ЭВМ для плазменного синтеза.

Наиболее очевидным изменением будет рост распределенных вычислительных ресурсов, что окажет серьезное влияние на физические исследования. Наличие в персональном пользовании компьютера типа VAX с хорошим графическим дисплеем будет стимулировать более свободное и творческое его использование. Крускал и Забуски открыли свои солитоны и Вильсон нашел свой первый критический индекс с помощью вполне скромных ЭВМ. Находясь в сети с большими машинами, такой «суперперсональный» компьютер позволит в диалоговом режиме изучать и анализировать результаты крупномасштабных численных экспериментов. Если при этом программа потребует значительного времени вычислений, уже не будет других пользо-

вателей, работающих в разделении времени и «толкающих друг друга», а в конце месяца не будет счета из вычислительного центра.

Какую роль будут играть первые 10-гигафлоповые компьютеры или «Крэй-2», когда они появятся? Я думаю, что наиболее подходящими для таких сверхмашин будут не столько исследовательские, сколько прикладные задачи. Прикладные задачи характеризуются техническим пределом, и работы, связанные с ними, следует планировать с учетом последних возможностей вычислительной техники. Вот пример из отчета Лэкса: аэродинамическая эффективность современных самолетов поддается лишь частичной оптимизации на «Крэй-1». Когда появится 10-гигафлоповая машина, можно будет оптимизировать весь самолет; можно ожидать большого экономического эффекта, но ни один ответственный руководитель проекта не возьмет на себя смелость первым организовать бригаду математиков и программистов для повышения в 10^3 раз эффективности существующих алгоритмов с целью решения этой задачи на «Крэй-1».

Физические исследования имеют иную природу и требуют иной стратегии. Если бы прямое моделирование по методу Монте-Карло было единственным методом, используемым для вычисления критических индексов, дела в этой области были бы печальны. В своем первоначальном виде задача о галактиках потребовала бы 30 часов на «Крэй-1». Однако правильный выбор стратегии в 400 раз сократил время счета до 20 часов на VAX. Это означает не только экономию средств (кстати, эта программа являлась студенческой дипломной работой), но и возможность дальнейших расширений. К счастью, ни задача о критических индексах, ни задача о кластеризации галактик не упирались в технический предел.

Большая часть материала статьи была почерпнута из неопубликованных отчетов и длительных бесед. Особенно я признателен А. В. Ахо, П. В. Андерсону, А. В. Аппелю, В. Д. Арнетту, В. Фихтнеру, Х. С. Гринсайду, П. Д. Лэксу, А. Ожельскому, Р. Пайку, Н. В. Шрайеру, Дж. К. Тьюли, В. А. Висоцкому, Дж. Д. Вику и К. Г. Вильсону.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Abelson P. H.— Science, 1982, v. 215, p. 751.— (Этот выпуск посвящен компьютерам).
2. Schrieffer J. R., Scalapino D. J., Wilkins J. W.— Phys. Rev. Lett., 1963, v. 10, p. 336.
3. McMillan W. L., Rowell J. M.— In: Superconductivity/Ed. R. D. Parks.— N. Y.: Dekker, 1969.— V. 1, p. 561.
4. Wilson K. G.— Phys. Rev. Ser. B, 1971, v. 4, p. 3184; Rev. Mod. Phys., 1975, v. 47, p. 773.
5. Sham L. J., Schlüter M.— Phys. Today, February 1982, v. 35, p. 36.
6. Hamann D. R.— Phys. Rev. Lett., 1981, v. 46, p. 1227.
7. Monte Carlo Methods in Statistical Physics/Ed. K. Binder.— Berlin: Springer-Verlag, 1979.
8. Hockney R. W., Eastwood J. W. Computer Simulation Using Particles.— N. Y.: McGraw-Hill, 1981.
9. Zabusky N. J.— J. Comp. Phys., 1981, v. 43, p. 195.
10. Lorenz E. N.— J. Atmos. Sci., 1963, v. 20, p. 130.
11. Greenside H. S., Coughran W. M., Jr., Schryer N. L.— Phys. Rev. Lett., 1982, v. 49, p. 726.
12. Tully J. C.— Ac. Chem. Res., 1981, v. 14, p. 188; Computers and Chem., 1981, v. 5, p. 159.
13. Pike R.— In: Proc. of CERN Workshop on Software in High Energy Physics.— Geneva: CERN, 1982.— P. 13.
14. Pike R., Stanley H. E.— J. Phys. Ser. A, 1981, v. 14, p. L169.
15. Appel A. W. An Investigation of Galaxy Clustering Using an Asymptotically Fast N-body Algorithm: Undergraduate Thesis.— Princeton, N. J.: Princeton University, April 1981.— Другой метод, позволяющий избежать N^2 с помощью частично-полевого подхода, описан в ⁸ (с. 440).
16. ЮНИКС — торговая марка Лабораторий «Белл».
17. Aho A. V., Hopcroft J. E., Ullman J. D. The Design and Analysis of Computer Algorithms.— Reading, Mass: Addison-Wesley, 1974.

18. Report of the Panel on Large Scale Computing and Science and Engineering. P. D. Lax. Chairman.— US Department of Defence and National Science Foundation, 1983.
19. C o n d o n J. H., T h o m p s o n K.— In: Advances in Computer Chess.3/Ed. M.R.B. Clark.— N.Y.: Pergamon, 1982.— P. 45.
20. P e a r s o n R. B., R i c h a r d s o n J. L., T o u s s a i n t D.— J. Comp. Phys. (to be published).
21. По оригиналу, представленному N. Schryer; данные по: K e y e s R. W.— IEEE Trans. Electr Devices, 1979, v. 26, p. 271; R i c e J. R.— ACM Signum News, 1976, v. 11, Nr. 4, p. 6.