

На правах рукописи

УДК 519.6

Подрыга Виктория Олеговна

**Моделирование теплофизических свойств веществ  
методами молекулярной динамики с использованием  
параллельных вычислений**

Специальность 05.13.18 – математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

**АВТОРЕФЕРАТ**  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Москва – 2011

Работа выполнена в Институте прикладной математики имени М. В. Келдыша Российской академии наук.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,  
профессор,  
член-корреспондент РАН  
Четверушкин Борис Николаевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
профессор  
Попов Александр Михайлович

доктор физико-математических наук  
Поляков Сергей Владимирович

Ведущая организация: Московский физико-технический институт  
(государственный университет).

Защита диссертации состоится « 30 » ноября 2011 г. в 15 час. 30 мин. на заседании диссертационного совета Д 501.001.43 при Московском государственном университете имени М. В. Ломоносова по адресу: 119991, ГСП-1, Москва, Ленинские горы, МГУ, 2-й учебный корпус, факультет ВМК, аудитория 685.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке факультета ВМК МГУ имени М. В. Ломоносова. С текстом автореферата можно ознакомиться на официальном сайте ВМК МГУ имени М. В. Ломоносова <http://www.cmc.msu.ru> в разделе «Наука» - «Работа диссертационных советов» - «Д 501.001.43».

Автореферат разослан «     »                      2011 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета Д 501.001.43  
доктор физико-математических наук,  
профессор

Захаров Е. В.

## Общая характеристика работы

**Актуальность.** Современная вычислительная техника дает возможность с помощью компьютерного моделирования решать недоступные для аналитического решения задачи на микроскопическом уровне. Компьютерная молекулярная динамика является одним из наиболее мощных вычислительных методов, эффективно применяемых для моделирования физических, химических и биологических систем. В молекулярной динамике (МД) исследуемая система представляется совокупностью взаимодействующих атомов или молекул, движущихся по законам классической механики. Благодаря развитию и применению компьютерных технологий и графических методов анализа эффективность применяемых методов МД-моделирования неуклонно возрастает. Моделирование реальных физических систем, например, кристаллов или огромных биологических молекул на базе методов МД представляет собой определяющее перспективное направление в ближайшем будущем. Необходимым условием для расчета задач моделирования динамических процессов, решаемых с помощью метода молекулярной динамики, является равновесное макроскопическое состояние системы при выбранных тепловых условиях в начальный момент времени. Получение характеристик состояния термодинамического равновесия системы является отдельной задачей, и чаще всего их получают экспериментально, что является дорогостоящим, трудоемким и длительным процессом.

Одним из основных этапов решения задач в молекулярной динамике является выбор модели взаимодействия атомов системы, которая позволит получать в поставленных условиях реалистичные данные, наиболее схожие с результатами эксперимента. Взаимодействие частиц описывается с помощью потенциала, который определяется исходя из свойств моделируемого вещества, его агрегатного и термического состояний. Несмотря на существование большого количества различных видов потенциалов, ограничения в подборе параметров и их неспособности воспроизвести полный набор физических характеристик порождают существенные сложности в выборе подходящего потенциала при моделировании процессов в узконаправленных задачах.

На каждом шаге моделирования решается система обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка, соответствующая второму закону Ньютона и описывающая движение частиц молекулярно-динамической системы. При решении задачи необходимо подобрать оптимальную численную схему, аппроксимирующую уравнения движения. Выбор схемы численного интегрирования обуславливается требованиями устойчивости и минимальности затрат машинного времени при расчете точек фазовой траектории.

Важным моментом является выбор временного шага интегрирования уравнений движения. Следует учитывать, что достаточно большая его величина приводит к несохранению полной энергии и неустойчивым численным решениям, то есть к таким, которые все больше отклоняются с течением времени от истинного решения. С другой стороны, размер шага интегрирования определяет реальное время моделирования системы. Существенно малый временной шаг может привести к тому, что за время компьютерного эксперимента система не достигнет равновесия.

Одними из основных инструментов моделирования задач МД в России и мире являются пакеты прикладных программ, ориентированные на высокопроизводительные вычислительные системы. Ввиду развития суперкомпьютеров, построенных на основе графических плат, встает вопрос о переносе пакетов прикладных программ на новые платформы для повышения эффективности их использования и расширения диапазона решаемых задач за счет роста производительности вычислительных мощностей. По этой причине актуальным является развитие собственных компьютерных разработок – разработок программных комплексов, позволяющих моделировать задачи молекулярной динамики и являющихся более доступными в использовании.

Следует отметить, что в настоящее время все больший интерес у специалистов по математическому моделированию вызывают гетерогенные вычислительные системы, основанные на графических ускорителях; алгоритмы молекулярной динамики являются одними из алгоритмов, эффективно реализующихся на подобных архитектурах.

Вышесказанное приводит к необходимости разработки новых математических моделей, новых алгоритмов, параллельных программ и методов анализа результатов для исследования задач методом молекулярной динамики.

#### **Цели работы.**

1. Моделирование процесса установления термодинамического равновесия систем веществ, имеющих разные структуры, методами молекулярной динамики.
2. Исследование зависимости структуры и характеристик рассматриваемого вещества от геометрии расчетного объема, количества частиц и температуры.
3. Разработка алгоритмов моделирования и анализа результатов молекулярных расчетов для систем атомов в разных агрегатных состояниях.
4. Создание программной реализации с использованием высокопроизводительных технологий.

**Научная новизна.** Предложены и реализованы алгоритмы по моделированию процесса установления термодинамического равновесия методами молекулярной динамики систем веществ, имеющих разные структуры (газы, металлы).

#### **Теоретическая и практическая значимость.**

1. Создана оригинальная молекулярно-динамическая программа, позволяющая изучать зависимость структуры и характеристик исследуемого вещества от геометрии расчетного объема, разного количества частиц и от температуры.
2. Получены термодинамические характеристики для систем аргонового газа в объемной геометрии и алюминия в геометрии пластины.
3. Предложен и реализован адаптивный алгоритм подбора шага интегрирования, позволяющий обеспечивать контроль над изменением полной энергии системы в течение всего времени расчета.

4. Для определения значения средних температур в данной работе конструируются методы анализа, основанные на изучении экспоненциального показателя равновесного распределения.
5. Проведен анализ временного параметра алгоритма теплового контроля (термостата) для эффективного получения желаемой температуры в образце.
6. Разработаны и реализованы алгоритмы параллельных расчетов на гибридных вычислительных комплексах при моделировании установления термодинамического равновесия систем веществ в разных агрегатных состояниях. Параллельная реализация адаптирована для применения технологии CUDA с учетом эффективного распределения данных.

**Апробация работы.** Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на следующих конференции и семинарах:

1. XVIII-й Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов – 2011» в секции «Вычислительная математика и кибернетика», МГУ имени М. В. Ломоносова (Москва, апрель 2011);
2. научном семинаре «Математическое моделирование» под руководством профессора В. Ф. Тишкина и профессора А. А. Кулешова в ИПМ имени М. В. Келдыша РАН (Москва, май 2011);
3. научном семинаре кафедры вычислительных методов факультета ВМК МГУ имени М. В. Ломоносова под руководством профессора А. В. Гулина (Москва, май 2011);
4. научном семинаре кафедры информатики МФТИ под руководством профессора И. Б. Петрова (Москва, сентябрь 2011).

**Публикации.** Основные результаты диссертации опубликованы в трех работах, две из которых в изданиях, рекомендованных ВАК [1, 3].

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из оглавления, введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Полный объем диссертации составляет 114 страниц, включая 21 иллюстрацию и 2 таблицы, пронумерованные по главам. Список литературы содержит 112 наименований.

## Содержание работы

**Во введении** формулируются цели и задачи диссертации, показывается актуальность, научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы. Описывается структура диссертации.

**В первой главе**, носящей обзорный характер, рассмотрены различные модельные потенциалы межмолекулярного взаимодействия, являющиеся основой расчетов с позиций молекулярной и статистической физики. Кроме того, в этой главе описаны общие способы постановки и алгоритмы решения задач методами молекулярной динамики.

Постановка задачи включает в себя написание уравнений движения, условий поведения системы на границе рассматриваемой области в зависимости от формы материала, установление характеристик моделируемого вещества для задания начальных условий и определения принципа взаимодействия атомов в

системе, выбор численной схемы интегрирования уравнений движения с учетом внешних воздействий, если таковые имеются.

**Во второй главе** приведена постановка задачи для установления термодинамического равновесия в системе частиц. Данная глава содержит две основные части, в которых описываются частные постановки задач для системы атомов аргона и системы атомов алюминия.

В молекулярной динамике частицы двигаются согласно законам классической механики:

$$m \cdot \mathbf{a} = \mathbf{F} \quad (2.1)$$

где  $m$  – масса частицы,  $\mathbf{a}$  – ускорение частицы,  $\mathbf{F}$  – суммарная сила, действующая на данную частицу.

Применив замену вектора ускорения первой производной по времени вектора скорости  $\mathbf{V}_i$  для каждой частицы, значение которого соответствует первой производной по времени от величины радиус-вектора  $i$ -ой частицы  $\mathbf{r}_i$ , получим систему из  $2N$  обыкновенных дифференциальных уравнений движения для  $i$  частиц с массой  $m$ , решая которую получим характеристики динамики частиц:

$$\begin{cases} m \cdot \frac{d\mathbf{V}_i}{dt} = \mathbf{F}_i \\ \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{V}_i \end{cases}, \quad i = 1..N, \quad (2.2)$$

где  $\mathbf{F}_i$  – равнодействующая сил для  $i$ -ой частицы,  $N$  – общее число частиц, составляющих систему.

Правая часть уравнения движения (2.1) представляет собой суммарную силу взаимодействия, действующую на частицу с номером  $i$ . Силы выражаются через функцию, зависящую от потенциальной энергии.

Потенциальная энергия системы  $U$  вычисляется через сумму потенциальной энергии каждой частицы  $U_i$ :

$$U = \sum_{i=1}^N U(U_i) \quad (2.3)$$

Кинетическая энергия системы  $KE$  вычисляется как сумма кинетической энергии каждой частицы:

$$KE = \sum_{i=1}^N ke_i, \quad (2.4)$$

$$ke_i = \frac{m|\mathbf{V}_i|^2}{2}, \quad i = 1..N,$$

где  $ke_i$  – кинетическая энергия частицы с номером  $i$ ;

$|\mathbf{V}_i|$  – длина вектора скорости  $i$ -ой частицы.

Полная энергия системы  $E$  представляет собой сумму кинетической энергии системы и потенциальной энергии системы:

$$E = KE + U \quad (2.5)$$

**В первой части главы 2** рассмотрена постановка для системы атомов аргона. Целью задачи является получить равновесное состояние системы

частиц с расчетной областью в объемной геометрии, что означает определение на всех границах условия периодичности (рис. 2.1 а).

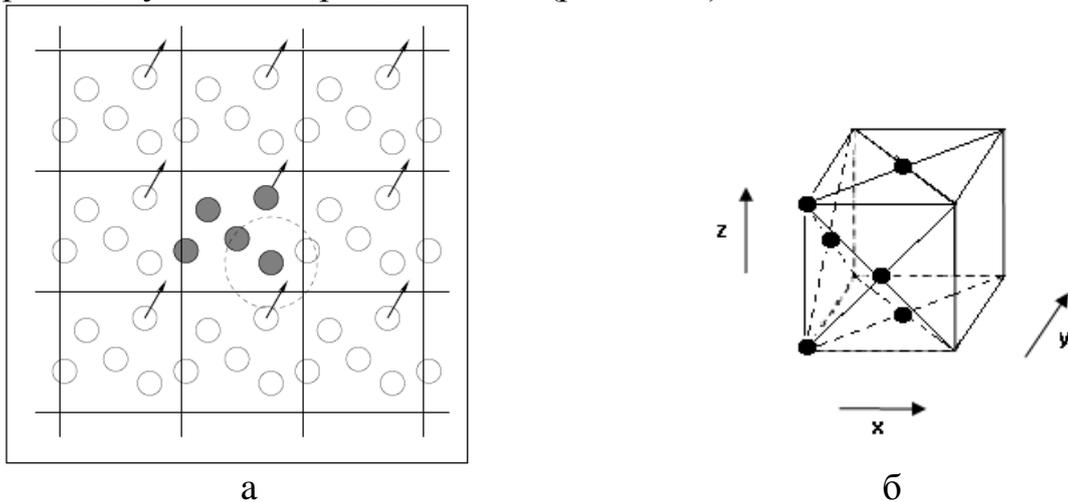


Рис. 2.1. Графическая реализация периодических граничных условий: а – частицы из рассматриваемой области закрашены в темный цвет [1]; б – распределение атомов алюминия в ГЦК решетке для одной ячейки.

Для моделирования бесконечной области вдоль координатных осей  $X, Y, Z$  используются периодические граничные условия с периодами  $L_x, L_y, L_z$  соответственно.

Для частицы, покидающей расчетную область через правую границу  $x = L_x$ :

$$\begin{cases} \mathbf{V}' = \mathbf{V} \\ x' = (x - L_x) \in [0, L_x) & \text{для } L_x \leq x < 2L_x \\ y' = y \\ z' = z \end{cases} \quad (2.6.1)$$

Аналогично для частицы, покидающей расчетную область через левую границу  $x = 0$ :

$$\begin{cases} \mathbf{V}' = \mathbf{V} \\ x' = (x + L_x) \in [0, L_x) & \text{для } -L_x \leq x < 0 \\ y' = y \\ z' = z \end{cases} \quad (2.6.2)$$

Взаимодействие с частицами, находящимися за пределами расчетной области  $L_x \leq x' < (L_x + r_c)$ , моделируется с использованием частиц  $0 \leq x < r_c$  из расчетной области, радиус-векторы которых корректируются следующим образом:

для частиц из расчетной области:

$$\mathbf{r}'_i = \mathbf{r}_i, \quad 0 \leq x_i < L_x,$$

для частиц за пределами расчетной области:

$$\mathbf{r}'_i = \mathbf{r}_i + \mathbf{e}_x L_x, \quad L_x \leq x'_i < (L_x + r_c),$$

здесь  $\mathbf{r}_i$  – радиус-вектор соответствующей частицы из расчетной области  $0 \leq x_i < r_c$ ;  $r_c$  – радиус «обрезания» используемого модельного потенциала.

Аналогичным образом определяются периодические граничные условия вдоль координатных осей  $Y$  и  $Z$ .

Начальные условия включают распределение координат и скоростей частиц.

Рассматривается область кубической формы, заполненная равномерно по осям частицами, количество которых рассчитывается следующим образом:

$$N = N_1 \cdot N_2 \cdot N_3, \quad (2.7)$$

где  $N_1, N_2, N_3$  – число частиц по каждой из осей  $X, Y, Z$  соответственно.

При условии равномерного заполнения области по осям с одинаковым шагом  $\Delta h$  имеем:

$$N_1 = N_2 = N_3, \quad \Delta h = \frac{L_x}{N_1} = \frac{L_y}{N_2} = \frac{L_z}{N_3}$$

$$\text{Тогда общее количество частиц (2.7): } N = (N_1)^3 \quad (2.8)$$

Координата каждой частицы вычисляется по формуле:

$$r_k^j = r_k^0 + l \cdot \Delta h, \quad j = 1..N \quad (2.9)$$

$$r^0 = (0; 0; 0), \quad l = 0..(N_k - 1), \quad k = 1; 2; 3$$

Начальные скорости частиц задавались с одинаковыми значениями по абсолютной величине  $|\mathbf{V}_0|$  и случайно распределенными по направлениям. Компоненты вектора скорости  $\mathbf{V}(V_x, V_y, V_z)$  одной частицы получаются следующим образом:

$$\begin{aligned} V_x &= |\mathbf{V}_0| \cdot \cos \theta \cdot \cos \varphi, \\ V_y &= |\mathbf{V}_0| \cdot \cos \theta \cdot \sin \varphi, \\ V_z &= |\mathbf{V}_0| \cdot \sin \theta, \end{aligned} \quad (2.10)$$

где случайная переменная  $\theta$  равномерно распределена в  $[-\pi/2; \pi/2)$ , а случайная переменная  $\varphi$  – в интервале  $[0; 2\pi)$ .

Выбран парный потенциал взаимодействия, потому межмолекулярный потенциал вычисляется как сумма потенциалов между каждыми двумя частицами с  $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$  – расстоянием между  $i$ -ой и  $j$ -ой частицами:

$$U_i = \sum_{j \neq i} u(r_{ij}), \quad j = 1..N, \quad (2.11)$$

Потенциальная энергия системы  $U$ :

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N U_i \quad (2.12)$$

В качестве потенциала взаимодействия выбран потенциал Леннарда-Джонса [2].

$$u(r_{ij}) = D \left[ \left( \frac{\alpha}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left( \frac{\alpha}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (2.13)$$

где  $D$  – энергия связи молекул (глубина потенциальной ямы в точке минимума потенциальной энергии);  $\alpha = \sqrt[6]{2} \sigma$  – «длина связи» (положение равновесия):  $|u(\alpha)| = D, u'(\alpha) = 0$ ;  $\sigma$  – газокINETический диаметр молекулы.

Для аргона эти величины равны:  $D = 165 \cdot 10^{-23}$  Дж,  $\alpha = 0,38$  нм,  $\sigma = 0,34$  нм.

С целью оптимальности расчетов рассматривается потенциал (2.13) в форме:

$$u(r_{ij}) = \begin{cases} D \left[ \left( \frac{\alpha}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left( \frac{\alpha}{r_{ij}} \right)^6 \right] - u_{cut}, & r_{ij} \leq r_c, \\ 0, & r_{ij} > r_c \end{cases}, \quad u_{cut} = D \left[ \left( \frac{\alpha}{r_c} \right)^{12} - 2 \left( \frac{\alpha}{r_c} \right)^6 \right] \quad (2.15)$$

Здесь  $u_{cut}$  способствует сглаживанию функции, то есть помогает избежать разрывность функции при  $r_{ij} = r_c$ ;  $r_c = 2,5 * \sigma$  – радиус «обрезания» потенциала, для аргона  $r_c = 0,85$  нм.

При большом удалении частиц друг от друга значение энергии взаимодействия таких частиц становится мало, поэтому значение потенциальной функции считается близким нулевому.

Силы, действующие на частицу с номером  $i$ , выражаются через потенциальную энергию этой частицы:

$$F_i = - \frac{d \sum_{j \neq i} u(r_{ij})}{dr_{ij}} = \sum_{j \neq i} f(r_{ij}), \quad (2.16)$$

где  $f(r_{ij})$  – силы взаимодействия между двумя частицами, которые для потенциала Леннарда-Джонса (2.13) принимают вид:

$$f(r_{ij}) = \frac{12D}{\alpha} \left[ \left( \frac{\alpha}{r_{ij}} \right)^{13} - \left( \frac{\alpha}{r_{ij}} \right)^7 \right] \quad (2.17)$$

Моделирование движения атомов выполнено при помощи разностной схемы Верле [3].

$$r^{n+1} = r^n + V^n \Delta t + \frac{a^n (\Delta t)^2}{2}, \quad (2.18)$$

$$V^{n+1} = V^n + \frac{(a^{n+1} + a^n) \Delta t}{2} \quad (2.19)$$

Здесь  $\Delta t$  – шаг интегрирования (по времени),  $n$  – номер шага,  $a$  – ускорение частицы, получаемое подстановкой рассчитанных по формуле (2.16) значений  $F$  в правую часть уравнений (2.1).

Для решения поставленной задачи используем следующий алгоритм:

1) Расчет по формуле (2.18) новых координат частиц  $\mathbf{r}_i^{n+1}$  для момента времени  $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ , где  $n$  – номер шага.

2) Проверка граничных условий (2.6).

3) Вычисление значения парциальной  $U_i^{n+1}$  (2.11) и суммарной потенциальной энергии системы  $U^{n+1}$  (2.12) частиц и сил  $\mathbf{F}_i^{n+1}$  (2.16), действующих на частицы.

4) Расчет новых скоростей частиц  $\mathbf{V}_i^{n+1}$  для момента времени  $t^{n+1}$  по выражению (2.19).

5) Вычисление кинетической энергии системы  $KE^{n+1}$  по формуле (2.4).

6) Вычисление полной энергии системы  $E^{n+1}$  (2.5) для момента  $t^{n+1}$ .

Этапы 1) – 6) повторяются на каждом шаге по времени.

С целью слежения за изменением полной энергии системы в работе предлагается алгоритм, в котором вычисляется на каждом шаге величину  $\delta_E = |E^{n+1} - E^n| / |E^n|$ , характеризующую относительное изменение полной энергии за время одного шага. Введем ограничение на эту величину сверху и снизу и свяжем ее с изменением временного шага согласно следующему правилу:

- 1) Если  $\delta_E > 10^{-4}$ , то  $\Delta t = \Delta t / 2$  и пересчитываем все величины с новым шагом.
- 2) Если  $\delta_E < 10^{-6}$ , то  $\Delta t = 3\Delta t / 2$  и пересчитываем все величины с этим новым шагом.
- 3) Если  $10^{-6} \leq \delta_E \leq 10^{-4}$ , то продолжаем счет программы с прежним шагом.

Необходимо отдельно отметить присутствие в знаменателе величины  $E^n$ . При большом числе частиц суммарная погрешность вычислений разности энергий на новом и предыдущем шагах может принимать большие значения, нормирование погрешности на величину  $E^n$  позволяет установить универсальные значения для допустимых границ ее изменения. Это позволяет обеспечивать контроль над изменением энергии в широком диапазоне ее значений.

**Во второй части главы 2** описана постановка задачи для системы атомов алюминия. Целью задачи является получить равновесное состояние системы при необходимой температуре. Расчетная область имеет геометрию бесконечной пластины, что означает определение по осям  $X$  и  $Y$  периодичных граничных условий с периодами  $L_x$  и  $L_y$  соответственно, по оси  $Z$  условия не накладываются.

Начальное распределение координат определяется в соответствии со структурой кристалла алюминия. Алюминий имеет кубическую гранецентрированную кристаллическую решетку (ГЦК) с параметром (ребром элементарной ячейки)  $rcr = 0.4$  нм.

Рассматриваемая система представляет собой параллелепипед со сторонами  $L_x, L_y, L_z$ .

$\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z) = \mathbf{k} \cdot rcr$  – размеры рассматриваемой области по осям  $X, Y, Z$ , где  $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$  – количество элементарных ячеек по направлениям  $X, Y, Z$  соответственно.

Таким образом, имеем параллелепипед из  $k_x \cdot k_y \cdot k_z$  кристаллов алюминия, решетка кристалла гранецентрированная, что соответствует количеству частиц:

$$N = N_1 + N_2,$$

где  $N_1 = k_x k_y (k_z + 1)$  – количество частиц в узлах решетки;

$N_2 = k_x k_y (k_z + 1) + 2k_x k_y k_z$  – количество частиц в центрах граней решетки.

$$\text{Общее количество частиц: } N = 2k_x k_y (2k_z + 1) \quad (2.20)$$

Учитывая граничные условия и используя (2.20), получаем для одного кристалла количество частиц  $N = 6$ , что можно увидеть на рис. 2.1 б и посчитать по формуле:  $N = 2 \cdot 1 \cdot 1 \cdot (2 \cdot 1 + 1) = 2 \cdot 3 = 6$ .

Координаты задаются следующим образом:

$$X_n^i = X_n^{\min} + l \cdot rcr, \quad i=1..N, \quad l=0..(j_n - 1), \quad n=1;2;3 \quad (2.22)$$

$$X^{\min} = (x^{\min}, y^{\min}, z^{\min}), \quad j = (j_1, j_2, j_3),$$

где  $x^{\min}, y^{\min}, z^{\min}$  – точки начала отсчета координат;  $j_1, j_2, j_3$  – количества точек по направлениям  $X, Y, Z$  соответственно.

Значения коэффициентов:

$$1) \quad \text{для частиц в узлах решетки: } X^{\min} = (0, 0, 0), \quad j = (k_x, k_y, k_z + 1), \quad i = 1..N_1, \\ N_1 = k_x k_y (k_z + 1)$$

$$2) \quad \text{для частиц в центрах граней, параллельных плоскости } (x, y): \\ X^{\min} = (\delta, \delta, 0), \quad \delta = rcr/2, \quad j = (k_x, k_y, k_z + 1), \quad i = (N_1 + 1)..N_2, \\ N_2 = N_1 + k_x k_y (k_z + 1)$$

$$3) \quad \text{для частиц в центрах граней, параллельных плоскости } (x, z): \\ X^{\min} = (\delta, 0, \delta), \quad \delta = rcr/2, \quad j = (k_x, k_y, k_z), \quad i = (N_2 + 1)..N_3, \\ N_3 = N_2 + k_x k_y k_z$$

$$4) \quad \text{для частиц в центрах граней, параллельных плоскости } (y, z): \\ X^{\min} = (0, \delta, \delta), \quad \delta = rcr/2, \quad j = (k_x, k_y, k_z), \quad i = (N_3 + 1)..N_4, \\ N_4 = N_3 + k_x k_y k_z, \quad \text{где } N_4 = N.$$

Значения начальных векторов скоростей генерируются из распределения Максвелла, соответствующего значению температуры  $T = 10$  К. Компоненты вектора скорости  $\mathbf{V}(V_x, V_y, V_z)$  получены с помощью преобразования Бокса-Мюллера [4]:

$$V_x = \sqrt{-2\sigma^2 \ln \xi_1} \cos(2\pi\xi_2), \\ V_y = \sqrt{-2\sigma^2 \ln \xi_1} \sin(2\pi\xi_2), \\ V_z = \sqrt{-2\sigma^2 \ln \xi_3} \cos(2\pi\xi_4), \quad (2.23)$$

где переменные  $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4$  – случайные независимые переменные, равномерно распределенные в  $(0;1)$ ;  $\sigma^2 = k_b T / m$  – параметр распределения;  $m$  – масса частицы, для алюминия  $m = M \cdot m_p = 6,8 \cdot 10^{-27}$  кг;  $k_b = 1,38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К – постоянная Больцмана.

Межмолекулярное взаимодействие описывается с помощью потенциала погруженного атома [5]:

$$U = \sum_i C(n_i) + \sum_{j < i} u(r_{ij}), \quad i = 1..N, \quad j = 1..N \quad (2.24)$$

$$n_i = \sum_{k \neq i} n(r_{ik}), \quad k = 1..N$$

где  $u(r_{ij}) = u(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = u(r)$  – потенциал парного взаимодействия между  $i$ -ой и  $j$ -ой частицами;  $C(n_i)$  – это энергия  $i$ -го атома за счет воздействия электронов соседних  $k$  атомов,  $n_i$  – суммарная электронная плотность, создаваемая атомами системы, окружающими  $i$ -ую частицу;  $n(r_{ik})$  – это

электронная плотность, создаваемая  $k$ -ым атомом в месте расположения  $i$ -ого атома.

В качестве функции парного взаимодействия  $u(r_{ij})$  и функции погружения  $i$ -го атома  $C(n_i)$  была выбрана форма, предложенная в работе [6]:

$$u(r_{ij}) = \left( \frac{1}{a_1 r_{ij}^2} - a_2 \right) \left( a_1 r_{ij}^2 - a_1 r_c^2 \right)^{10} \left( \left( a_1 r_{ij}^2 - a_1 r_c^2 \right)^6 + a_3 a_1^6 r_{ij}^{12} \right),$$

$$C(n_i) = \frac{b_1 n_i \left( b_2 + (b_3 + n_i)^2 \right)}{(1 + b_4 n_i)}, \quad n(r_{ik}) = \frac{c_1 (r_{ik}^2 - r_c^2)^2}{1 + (c_2 r_{ik}^2)^3}, \quad (2.25)$$

где  $r_c$  – радиус «обрезания» потенциала, для алюминия  $r_c \equiv 0.6875$  нм.

При большом удалении частиц друг от друга значение энергии взаимодействия таких частиц становится мало. С целью оптимальности расчетов принято рассматривать потенциал (2.24) в заданной форме (2.25) при условиях:

$$u(r \geq r_c) \equiv 0, \quad n(r \geq r_c) \equiv 0.$$

Константы  $a$ ,  $b$ ,  $c$  для алюминия принимают следующие значения [6]:

$$\begin{aligned} a_1 &= 2.9275228176598036; & b_3 &= 14.868297626731845; \\ a_2 &= 5.1028014804162156; & b_4 &= 1.608095393177309; \\ a_3 &= 111.37742236893590; & c_1 &= 0.58002942432410864; \\ b_1 &= 8.1106000931637006; & c_2 &= 8.2981185422063639 \\ b_2 &= -334.57493744623503; \end{aligned}$$

Величина силы взаимодействия зависит от потенциальной энергии и имеет следующий вид:

$$F_i = - \frac{d(C(n_i) + \sum_{j \neq i} u(r_{ij}))}{dr} \quad (2.26)$$

Для достижения системой необходимой температуры применяется специальный алгоритм - термостат. В работе выбран термостат Берендсена [7]. Изменение кинетической энергии моделируется путем перемасштабирования скоростей атомов молекулярной системы на каждом шаге:

$$\lambda = \sqrt{1 + \frac{\Delta t}{\tau_b} \left( \frac{T_b}{T(t - \Delta t)} - 1 \right)}, \quad (2.27)$$

где  $\lambda$  – коэффициент пересчета скоростей,  $T(t)$  – текущее значение температуры (в момент времени  $t$ ),  $T_b$  – температура термостата,  $\tau_b$  – характерное время взаимодействия с резервуаром.

В результате рассмотрения разных значений параметра  $\tau_b$  выбирается наиболее подходящее время взаимодействия с резервуаром в условиях поставленной задачи, с использованием которого система достигает равновесного состояния в более короткие периоды времени по сравнению с другими значениями данного параметра.

При интегрировании уравнений движения также используется схема Верле: (2.18), (2.19).

Для решения поставленной задачи используем следующий алгоритм:

- 1) Расчет по формуле (2.18) новых координат частиц  $\mathbf{r}_i^{n+1}$  для момента времени  $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ , где  $n$  – номер шага.
- 2) Проверка граничных условий.
- 3) Вычисление значения потенциальной энергии системы  $U^{n+1}$  (2.24) частиц и сил  $\mathbf{F}_i^{n+1}$  (2.26), действующих на частицы.
- 4) Расчет новых скоростей частиц  $\mathbf{V}_i^{n+1}$  для момента времени  $t^{n+1}$  по выражению (2.19).
- 5) Вычисление коэффициента  $\lambda^{n+1}$  по алгоритму Берендсена (2.27) и масштабирование скоростей.
- 6) Вычисление кинетической энергии системы  $KE^{n+1}$  по формуле (2.4).
- 7) Вычисление полной энергии системы  $E^{n+1}$  (2.5) для момента  $t^{n+1}$ .

Этапы 1) – 7) повторяются на каждом шаге по времени.

С целью слежения за отклонениями энергии системы в работе используется метод, рассмотренный в пункте 2.1, который позволяет обеспечивать контроль над изменением энергии в широком диапазоне ее значений.

**Третья глава** диссертации состоит из двух частей и посвящена деталям программной реализации в соответствии с выбранными математическими моделями, описанными во второй главе. Программная реализация была выполнена на современных высокопроизводительных вычислительных системах, на ее основе был создан комплекс программ для моделирования установления термодинамического равновесия для систем в различных агрегатных состояниях.

**В первой части главы 3** рассматривались методы минимизации компьютерных затрат на вычисления. Уменьшить затраты компьютерного времени, не пренебрегая точностью вычислений, можно, используя периодические граничные условия, радиус ограничения взаимодействия частиц и оптимизируя вычисления сил взаимодействия, которые представляют собой наиболее затратные части алгоритма расчета траекторий.

Использование периодических граничных условий при ограничении расстояния взаимодействия радиусом сферического отсечения заключается в том, что для всех пар частиц вычисляются расстояния между ними, а силы воздействия рассчитываются только для пар атомов, расстояние между которыми меньше радиуса «обрезания» потенциала, что значительно снижает количество операций и соответственно время расчета. Внутри сферы отсечения включаются молекулы, расположенные как в центральной ячейке, так и в соседних ячейках (рис. 3.1 а).

Алгоритм нахождения расстояния между двумя частицами тоже является весьма затратным, так как приходится для каждой пары частиц выполнять ряд арифметических операций в виде вычисления квадратного корня из суммы квадратов разностей координат, для того чтобы провести сравнение полученного значения с известной константой  $r_c$ .

Был предложен и реализован метод геометрического разбиения моделируемой области с учетом периодических условий на границах. Область разбивается на «ящики» кубической формы с тремя измерениями, равными радиусу «обрезания». Тогда если рассматриваемая частица находится в

определенном «ящике», то считается, что на нее могут действовать атомы из этого же «ящика» либо соседних «ящиков». В двумерном случае приходится проводить расчеты всего для 9 таких участков (рис. 3.1 б), в трехмерном – для 27 участков, что сокращает компьютерные затраты на порядки, и тем выше порядок сокращения затрат, чем больше размер системы.

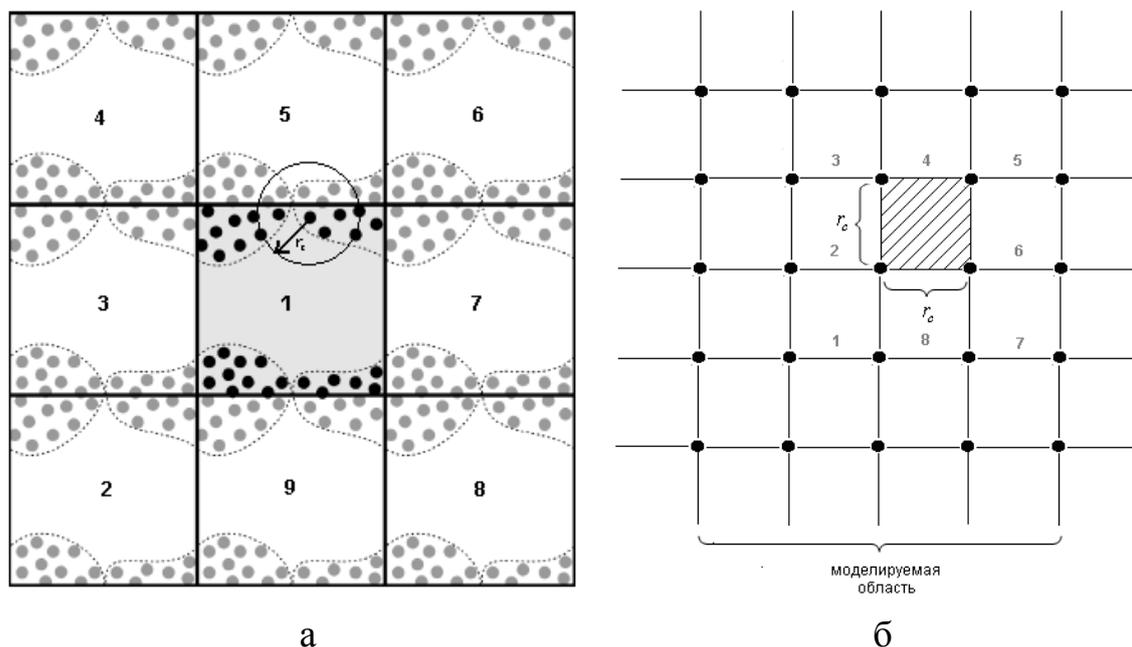


Рис. 3.1. Периодические граничные условия: а – в ячейке 1 моделируемая область, в ячейках 2–9 образы моделируемой области; б – разбиение моделируемой области на кубические «ящики» со стороной, соответствующей радиусу «обрезания» потенциала.

**Во второй части главы 3** описывается проблема, заключенная в быстрой деградации программных комплексов, рассчитанных на решение систем больших размерностей. Решением такой проблемы является использование параллельных вычислений.

В работе разработаны и реализованы алгоритмы параллельных расчетов на гибридных вычислительных комплексах при моделировании установления термодинамического равновесия систем веществ в разных агрегатных состояниях. Параллельная реализация адаптирована для применения технологии CUDA (Compute Unified Device Architecture – унифицированная вычислительная архитектура устройств) с учетом эффективного распределения данных.

Модель программирования в CUDA предполагает группирование нитей. Нити объединяются в блоки нитей — одномерные или двумерные сетки нитей, взаимодействующих между собой при помощи разделяемой памяти и точек синхронизации. Программа (ядро) исполняется над сеткой блоков нитей. Группировка блоков в сетки позволяет уйти от ограничений и применить ядро к большему числу нитей за один вызов.

Наиболее вычислительно сложным этапом задачи является подсчет сил взаимодействия и потенциальных энергий частиц системы. В основе параллельного алгоритма лежит модель «ящиков», описанная в первой части главы 3.

Параллелизм на данном этапе состоит в том, что разные «ящики» можно обрабатывать параллельно и независимо друг от друга. Чем больше число обрабатываемых «ящиков», тем полнее получается загрузить GPU работой.

Разработанный параллельный алгоритм формирует сетку блоков для GPU следующим образом. Запускается  $\text{NUMBOX}_X \times \text{NUMBOX}_Y$  блоков по  $\text{NUMBOX}_Z$  нитей в каждом, где  $\text{NUMBOX}_X$ ,  $\text{NUMBOX}_Y$ ,  $\text{NUMBOX}_Z$  – это количество «ящиков» по осям  $X, Y, Z$  соответственно. Таким образом, одна нить обрабатывает один «ящик». Перед работой ядра GPU необходимо скопировать координаты частиц и информацию о распределении частиц по «ящикам» в память GPU. По завершении работы полученные силы взаимодействия и потенциальные энергии частиц копируются из памяти GPU в память CPU. Результаты тестирования параллельного алгоритма приведены в таблице 3.1.

Как видно из таблицы 3.1, при увеличении размерности системы увеличивается ускорение, получаемое при использовании параллельного алгоритма. Это ожидаемый результат, объяснение которого состоит в том, что при увеличении числа блоков и нитей, работающих на GPU, лучше получается загрузить ресурсы GPU работой.

Анализ результатов проведения параллельных расчетов на суперкомпьютерах МВС-Экспресс и К-100 подтверждает высокую эффективность вычислительных систем на основе гибридной архитектуры для решения задач молекулярной динамики и перспективность развития данного направления.

Количество частиц, $N$	Размерность, $k_x \times k_y \times k_z$	Время выполнения последовательного алгоритма, $t_{cpu}$ , $10^{-2}$ сек.	Время выполнения параллельного алгоритма, $t_{gpu}$ , $10^{-2}$ сек.	Ускорение, $t_{cpu}/t_{gpu}$
2 952	6×6×20	12.068	30.223	0.4
4 200	10×10×10	16.169	23.497	0.69
20 200	10×10×50	84.504	40.627	2.08
181 800	30×30×50	795.381	268.71	2.96
901 800	30×30×250	3934.534	988.58	3.98
1 261 800	30×30×350	5497.431	1229.85	4.47
1 441 800	30×30×400	6326.291	1343.16	4.71
3 505 000	50×50×350	15494.465	2604.11	5.95
4 005 000	50×50×400	17681.408	2833.56	6.24
4 020 000	100×100×100	17260.045	2848.19	6.06
8 020 000	100×100×200	34762.332	5172.97	6.72

Таблица 3.1. Результаты тестирования программного комплекса.

**В четвертой главе** диссертационной работы по аналогии со второй главой, посвященной постановке задач, выделены две части, в которых обсуждаются результаты численного моделирования для разного количества частиц, разных размеров расчетной области и различных параметров алгоритма теплового воздействия.

**В первой части главы 4** рассматривается задача для системы частиц аргона. Расчеты заключались в определении времени установления равновесного распределения по скоростям для различного числа частиц и соответствующей температуры.

Расчетная область в форме куба с ребром  $L_x = L_y = L_z = 10$  нм.

Для  $N$  равномерно распределенных в расчетном кубе атомов аргона фиксировались начальные координаты. Скорости у всех частиц задавались одинаковыми по абсолютной величине ( $|V_0| = 50$  м/с) и случайно распределенными по направлениям.

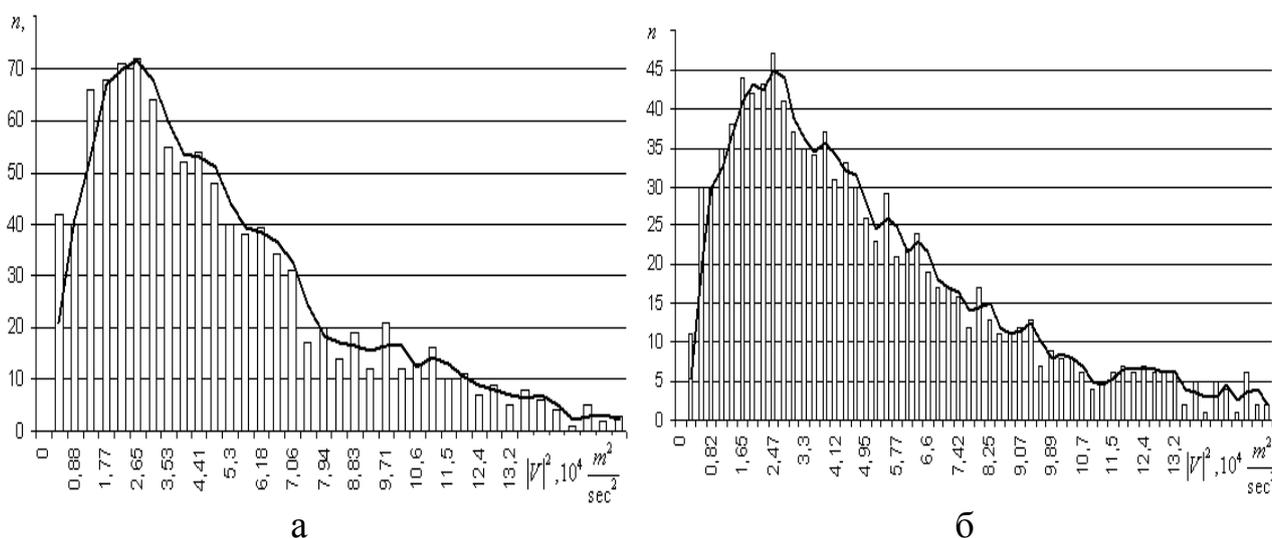


Рис. 4.1 Распределение по квадратам скоростей для количества частиц  $N = 10^3$  на момент времени: а – 432 пс; б – 621 пс. Контурная черная линия соответствует линии тренда для данного распределения.

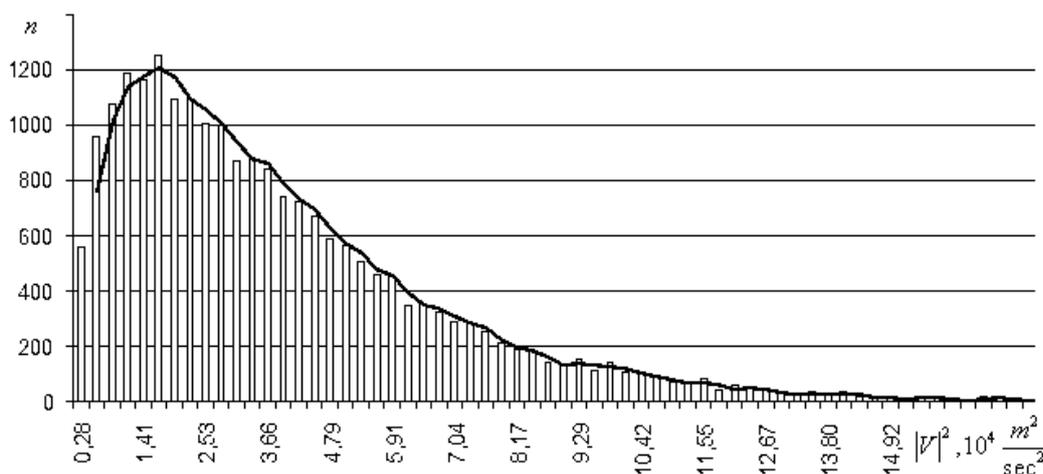


Рис. 4.2. Распределение частиц по квадратам скоростей для  $N = 28^3$  на момент времени 432 пс. Контурная черная линия соответствует линии тренда.

Расчеты проводились для количества частиц  $10^3$  и  $28^3$  со средним значением шага по времени  $\Delta t = 7 \cdot 10^{-3}$  пс в течение 60000 и 90000 шагов, общее время счета составило 432 пс и 621 пс соответственно.

Результаты вычислений для  $N = 10^3$  частиц в случаях 60000 и 90000 шагов представлены на рис. 4.1 в виде распределений по скоростям. Как можно

увидеть, система близка к равновесному состоянию уже на момент времени 432 пс (60000 шагов).

Аналогичный результат получается и для другого числа частиц  $N = 28^3$  в том же объеме, распределение для которого в случае 60000 шагов представлено на рис. 4.2.

При анализе распределения частиц по скоростям имеется проблема, связанная с наличием частиц с малыми и с очень большими скоростями, что усложняет процедуру определения температуры системы. Это характерно для случая моделирования с не очень большим числом частиц. Для преодоления обозначенной трудности вычисляется функция:

$$\gamma = \ln \left( \frac{2 \cdot n_h}{|V|} \frac{1}{\Delta |V|^2} \right), \quad (4.1)$$

где  $n_h$  – количество частиц с квадратами скоростей в интервале  $(|V|^2, |V|^2 + \Delta |V|^2)$ ;

$|V|$  – значение скорости по абсолютной величине;

$\Delta |V|^2$  – интервал квадрата скорости, полученный путем деления максимального значения квадрата скорости на число рассматриваемых в распределении секторов. Максвелловское распределение по квадратам скоростей можно записать в следующем виде

$$n_h(|V|^2, |V|^2 + \Delta |V|^2) = C(T) \exp \left( -\frac{m|V|^2}{2kT} \right) \sqrt{|V|^2} \Delta |V|^2 \quad (4.2)$$

Тогда функция  $\gamma(|V|^2)$ , определенная выше, отличается от показателя экспоненты в этом распределении лишь константой  $\ln(C(T))$ , которая не влияет на наклон отрезка, по которому возможно оценить температуру системы.

Таким образом, при достижении системой равновесного распределения по скоростям строится график зависимости функции  $\gamma$  (4.1) от значений квадратов скоростей  $|V|^2$ . Затем с помощью метода наименьших квадратов на участке с наиболее представительной выборкой определяем линейную зависимость вида

$$\gamma = \beta \cdot |V|^2,$$

в которой коэффициент  $\beta$  определяет наклон линии. Значение температуры вычисляется по этому коэффициенту:

$$T = -\frac{m}{2k_b} \frac{1}{\beta} \quad (4.3)$$

Расчет температуры системы, определенной таким образом, на момент времени 432 пс (60000-ый шаг) для числа атомов аргона  $N = 10^3$ , дает значение  $T = 88$  К, а для числа частиц  $N = 28^3$   $T = 63,1$  К.

Другой способ вычисления температуры через приходящуюся на одну частицу среднюю кинетическую энергию:

$$\frac{3}{2} k_b T = KE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{m|V_i|^2}{2}, \quad T = \frac{1}{3k_b} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N m|V_i|^2 \quad (4.4)$$

дает следующие результаты:

для  $N = 10^3$   $T = 87,2$  К, для  $N = 28^3$   $T = 62$  К.

Таким образом, температуры, полученные с помощью метода молекулярной динамики путем усреднения параметров движения классической системы частиц (4.4) и с помощью определения коэффициентов наклона по распределению частиц по скоростям (4.3), близки по своим значениям. Откуда следует, что в рассмотренный момент времени большинство частиц термализовалось, то есть распределение квадратов скоростей частиц близко к максвелловскому. Однако, профиль распределения при количестве частиц  $N = 28^3$  более похож на профиль максвелловского распределения, что говорит о том, что система при  $N = 28^3$  более сильно стремится к термодинамическому равновесию.

**Во второй части главы 4** рассматривается задача для системы частиц алюминия.

Расчет состоял в определении времени установления равновесного распределения по скоростям для различного числа частиц после достижения желаемой температуры.

В рассматриваемой области формы параллелепипеда для  $N$  частиц алюминия в ГЦК решетке фиксировались начальные координаты. Скорости у всех частиц задавались по распределению Максвелла, соответствующему небольшому значению температуры ( $T = 10$  К).

В ходе моделирования температура системы повышалась за счет использования термостата Берендсена. Целью данной работы являлось получить равновесное состояние системы при температуре  $T = 300$  К.

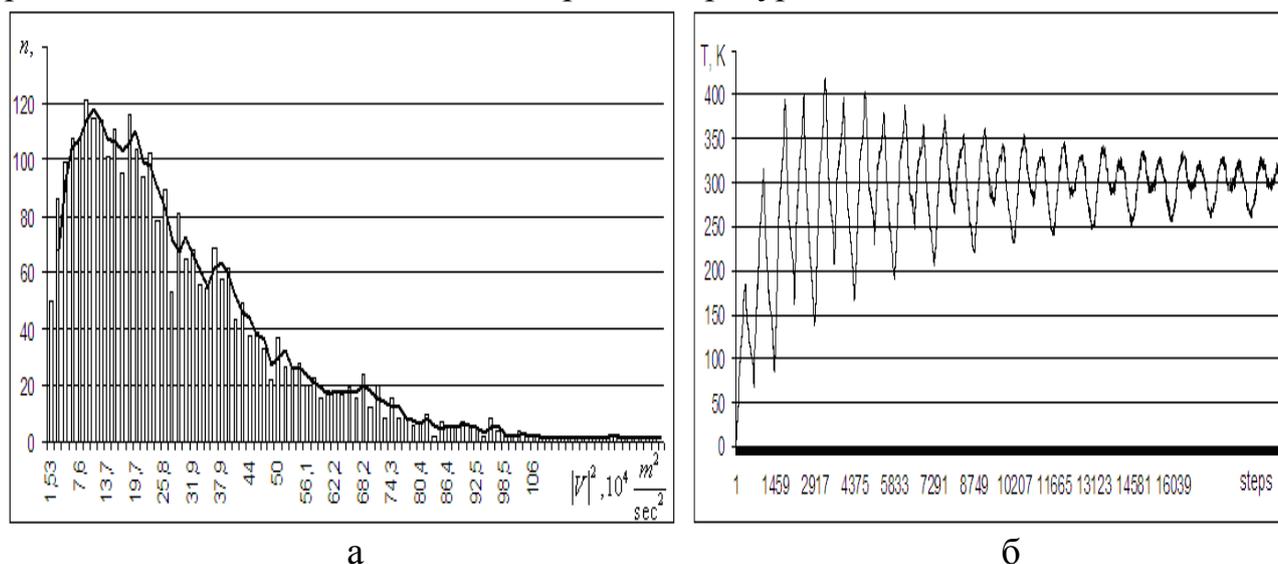


Рис. 4.3. Расчет для количества частиц  $N = 2952$  на момент времени 40 пс при параметре термостата  $\tau_b = 1$  пс: а – распределение частиц по квадратам скоростей (контурная черная линия соответствует линии тренда для данного распределения); б – график изменения температуры в процессе моделирования.

Вычисления проводились для расчетной области  $6 \times 6 \times 20$  кристаллов алюминия, что соответствует количеству частиц  $N = 2952$ , и  $10 \times 10 \times 50$  кристаллов, где  $N = 20200$  атомов. Среднее значение шага по времени было  $\Delta t = 2 \cdot 10^{-3}$  пс. Изучалось поведение системы при разных временах взаимодействия с резервуаром (разных значениях временного параметра алгоритма Берендсена), рассматривались времена порядка 1 пс и 10 пс. Расчеты

велись в течение 20000 и 40000 шагов, общее время счета составило 40 пс и 80 пс соответственно.

Результаты вычислений для  $N = 2952$  частиц в случае 20000 шагов при параметре термостата  $\tau_b = 1$  пс представлены на рис. 4.3 в виде распределения по скоростям и графика изменения температуры в процессе моделирования, при параметре  $\tau_b = 10$  пс – на рис. 4.4 соответственно.

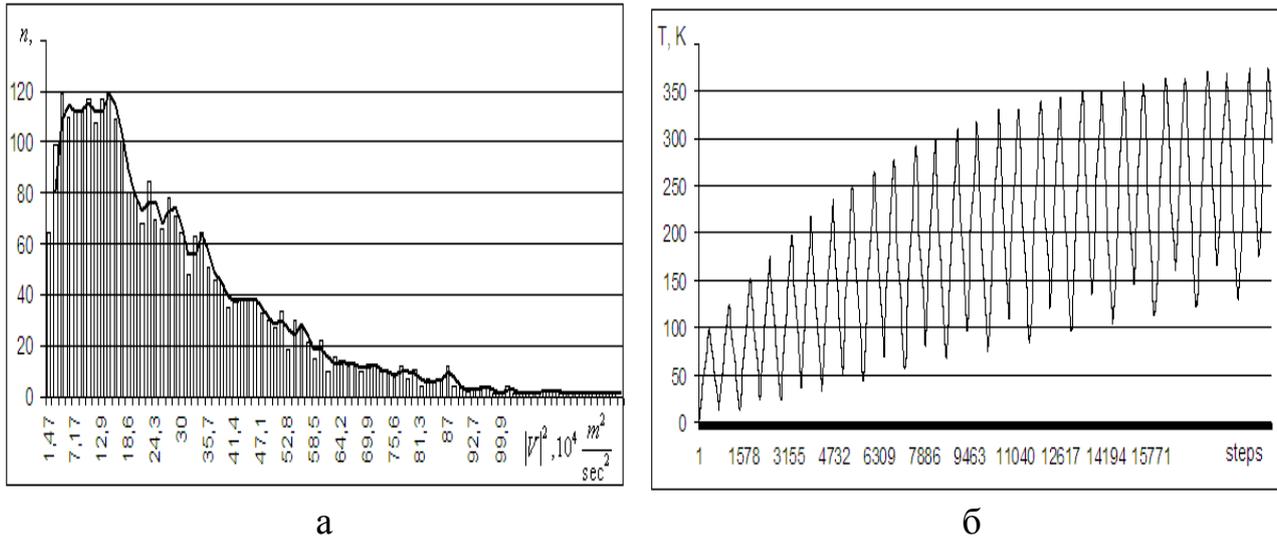


Рис. 4.4. Расчет для количества частиц  $N = 2952$  на момент времени 40 пс при параметре термостата  $\tau_b = 10$  пс: а – распределение частиц по квадратам скоростей (контурная черная линия соответствует линии тренда для данного распределения); б – график изменения температуры в процессе моделирования.

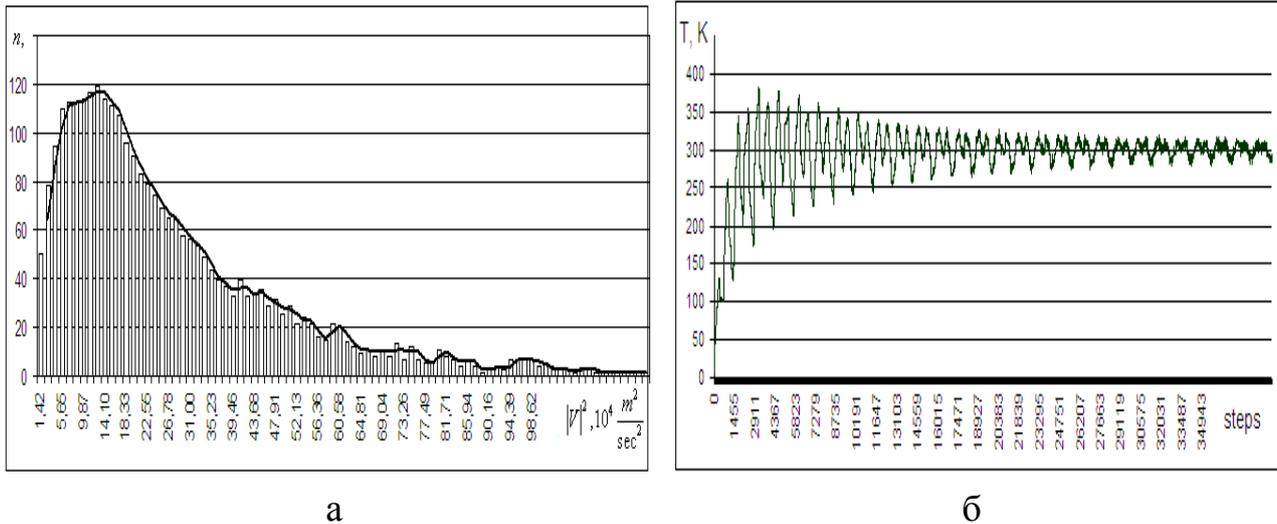


Рис. 4.5. Расчет для количества частиц  $N = 2952$  на момент времени 80 пс при параметре термостата  $\tau_b = 1$  пс: а – распределение частиц по квадратам скоростей (контурная черная линия соответствует линии тренда для данного распределения); б – график изменения температуры в процессе моделирования.

Система находится на переходе в равновесное состояние на момент времени 40 пс, но график температуры имеет большую амплитуду относительно желаемого значения. В случае 40000 шагов были сделаны аналогичные расчеты, которые для параметра термостата  $\tau_b = 1$  пс представлены на рис. 4.5. На момент времени 80 пс система близка к равновесному состоянию и колебания значений температуры минимальны – желаемый результат получен. Для параметра

термостата  $\tau_b = 10$  пс на момент времени 80 пс исследуемые графики изменились незначительно.

Вычисления для количества частиц  $N = 20200$  показали, что равновесное состояние системы и достижение небольших амплитуд относительно необходимой температуры достигаются при параметре термостата  $\tau_b = 1$  пс уже на момент расчета 40 пс, результаты представлены на рис. 4.6 в виде распределения по скоростям и графика изменения температуры в процессе моделирования.

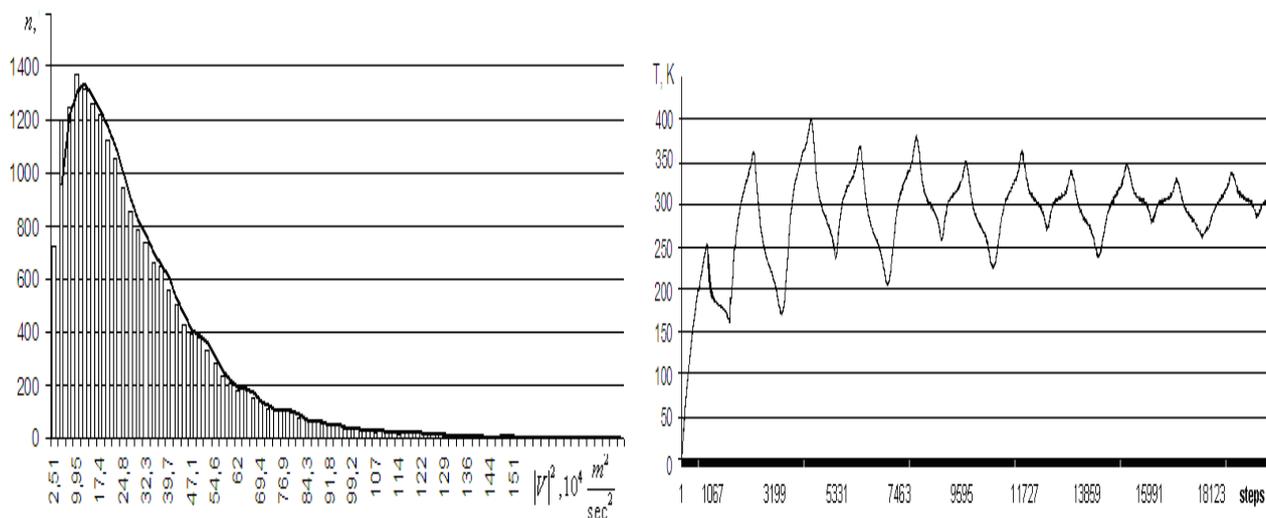


Рис. 4.6. Расчет для количества частиц  $N = 20200$  на момент времени 40 пс при параметре термостата  $\tau_b = 1$  пс: а – распределение частиц по квадратам скоростей (контурная черная линия соответствует линии тренда для данного распределения); б – график изменения температуры в процессе моделирования.

Аналогично первой части главы 4 с помощью (4.3) вычисляются значения средних температур, основанные на изучении экспоненциального показателя равновесного распределения. Для числа атомов  $N = 2952$  на момент времени 80 пс (40000-ый шаг) с параметром термостата  $\tau_b = 1$  пс получено значение  $T = 303,5$  К, а для числа частиц  $N = 20200$  с параметром термостата  $\tau_b = 1$  пс на момент времени 40 пс (20000-ый шаг)  $T = 305$  К.

Также была высчитана температура через приходящуюся на одну частицу среднюю кинетическую энергию по выражениям (4.4). Для числа атомов  $N = 2952$  получено значение  $T = 302$  К, для  $N = 20200$ :  $T = 304$  К.

Таким образом, температуры, полученные с помощью метода молекулярной динамики путем усреднения параметров движения классической системы частиц (4.4) и с помощью определения коэффициентов наклона по распределению частиц по скоростям (4.3), близки по своим значениям. Это означает, что в рассмотренный момент времени большинство частиц термализовалось, то есть распределение квадратов скоростей частиц близко к максвелловскому. Однако, профиль распределения при количестве частиц  $N = 20200$  более похож на профиль максвелловского распределения, что говорит о том, что система при  $N = 20200$  частиц более сильно стремится к термодинамическому равновесию и более быстро, о чем говорит меньшее значение времени счета.

**В заключении** сформулированы основные результаты диссертационной работы.

## Основные результаты работы

- 1) Исследованы алгоритмы и математические модели для молекулярно-динамических расчетов.
- 2) Создана молекулярно-динамическая программа на основе параллельных вычислений, позволяющая рассчитывать термодинамические характеристики веществ методами молекулярной динамики. Алгоритмы и программная реализация адаптированы для использования графических ускорителей.
- 3) Проведено исследование зависимости скорости установления равновесного распределения, структуры и характеристик рассматриваемого вещества от геометрии расчетного объема, количества частиц и температуры.

## Список цитируемой литературы

- 1) Allen M.P. Introduction to Molecular Dynamics Simulation // Computational Soft Matter: From Synthetic Polymers to Proteins. John von Neumann Institute for Computing, Julich, NIC Series. – 2004. – Vol. 23. – P. 1–28.
- 2) Lennard-Jones J. E. Wave functions of many-electron atoms // Proc. Camb. Phil. Soc. – 1931. – Vol. 27. – P. 469.
- 3) Verlet L. Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // Phys. Rev. – 1967. – Vol. 159. – P. 98–103.
- 4) Box G. E. P., Muller M. E. A Note on the Generation of Random Normal Deviates // The Annals of Mathematical Statistics. – 1958. – Vol. 29, No. 2. – P. 610–611.
- 5) Daw M. S. Model of metallic cohesion: The embedded-atom method // Phys. Rev. – 1989. – Vol. 39, No. 11. – P. 7441–7452.
- 6) Zhakhovskii V. V., Inogamov N. A., Petrov Yu. V., Ashitkov S. I., Nishihara K. Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials // Applied Surface Science. – 2009. – Vol. 1255. – P. 9592–9596.
- 7) Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., W.F. van Gunsteren et al. Molecular dynamics with coupling to an external bath // J. Chem. Phys. – 1984. – Vol. 81. – P. 3684–3690.

## Публикации автора по теме диссертации

- 1) Подрыга В.О. Моделирование процесса установления термодинамического равновесия методом молекулярной динамики // Математическое моделирование. – 2010. – Т. 22 , No. 11. – С. 39–48.  
Podryga V.O. Molecular Dynamics Method for Simulation of Thermodynamic Equilibrium. // Mathematical Models and Computer Simulations. – 2011. – Vol. 3, No. 3. – P. 381–388. ISSN 2070\_0482
- 2) Подрыга В.О. Алгоритм моделирования теплофизических свойств металлов методами молекулярной динамики // XVIII Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов – 2011», секция «Вычислительная математика и кибернетика»: Москва, МГУ имени М. В. Ломоносова, 11-15 апреля 2011 г.: Сб. тезисов. – М.: МАКС Пресс, 2011. – С. 134–136.
- 3) Подрыга В.О. Моделирование процесса установления термодинамического равновесия нагретого металла // Математическое моделирование. – 2011. – Т. 23 , No. 9. – С. 3–17.