Ле-Захаров Александр Аневич

Моделирование динамических процессов в конденсированном веществе методом динамики частиц с использованием многопроцессорных вычислительных систем

Специальность 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Научный руководитель А.М. Кривцов

Санкт-Петербург, 2010

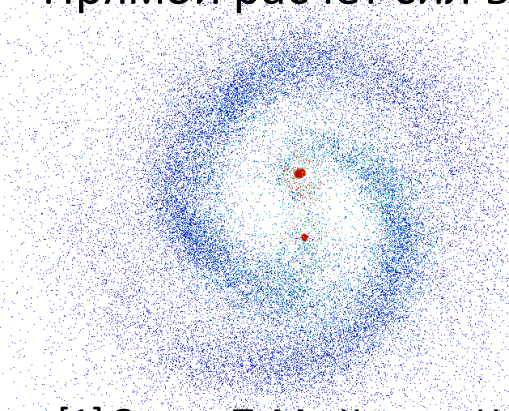
Актуальность темы

Метод динамики частиц – представление вещества в виде совокупности частиц, движущихся согласно уравнениям динамики при заданных законах взаимодействия.

Метод применяется на различных масштабных уровнях:

- метод молекулярной динамики;
- метод дискретных элементов;
- метод динамики частиц в астрофизике.

Прямой расчет сил взаимодействия – сложность $O(N^2)$, где N – число частиц.



Нехватка вычислительных ресурсов особенно проявляется

- в задачах с дальнодействующим потенциалом взаимодействия
- при неоднородном распределении частиц

[1] Энеев Т. М., Козлов Н. Н., Модель аккумуляционного процесса формирования планетных систем // Астрономический вестник, 1981.

[2] Снытников В.Н. и др., Численное моделирование гравитационных систем многих тел с газом // Вычислительные технологии, 2002.

[3] Morishima R., Stadel J., Moore B., From planetesimals to terrestrial planets: N-body simulations including the effects of nebular gas and giant planets // Icarus, 2010, pp. 517-535.

Цели работы

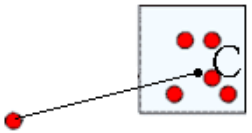
Разработка методов учета дальнодействующих и близкодействующих силовых факторов при моделировании методом динамики частиц в задачах с неоднородным пространственным распределением.

Реализация разработанных методов и алгоритмов в виде комплекса программ для проведения расчетов с использованием моделей высокой количественной сложности с применением многопроцессорных вычислительных систем.

Тестирование методов, алгоритмов и комплекса программ на решении прикладных задач:

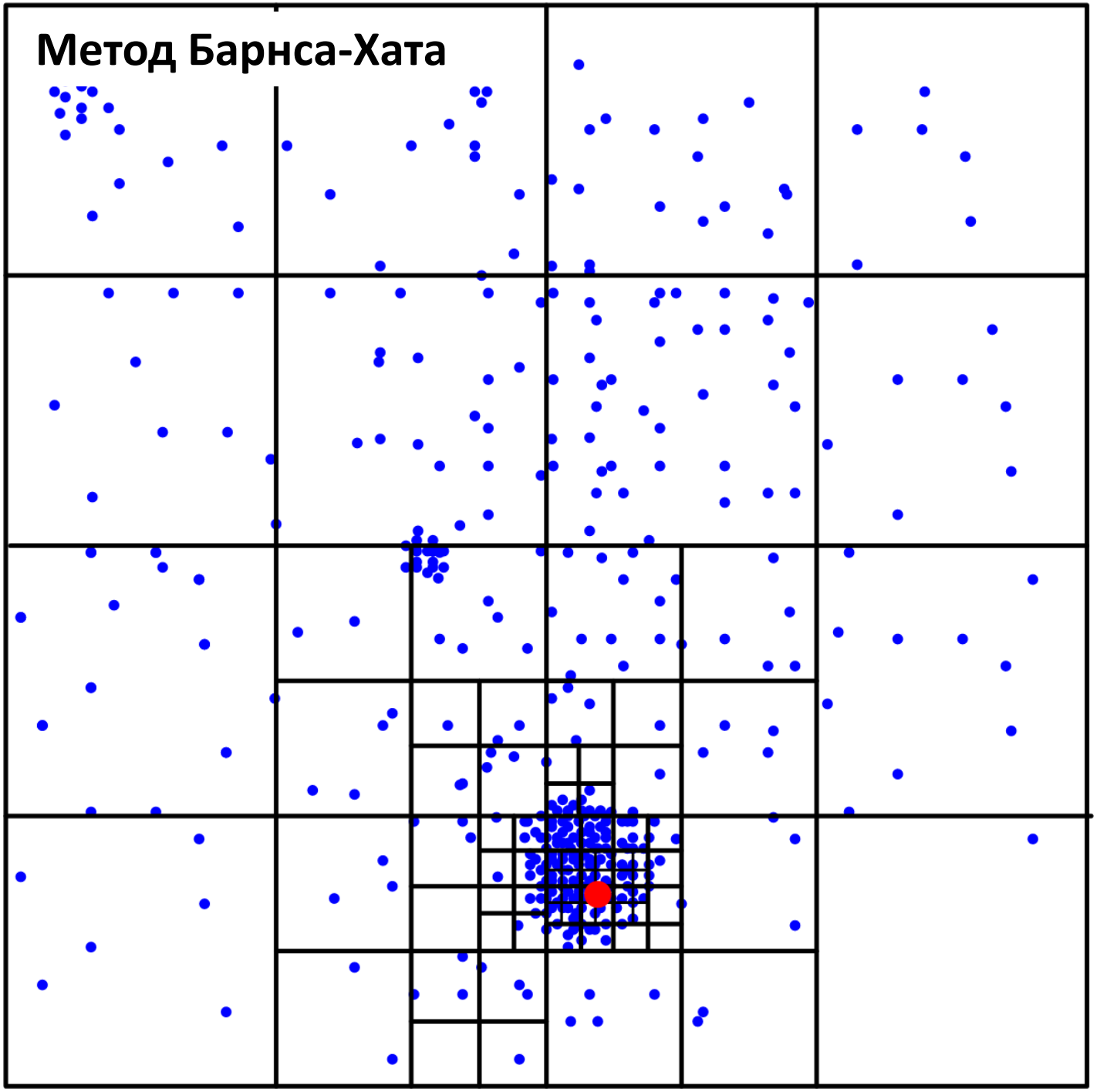
- исследование влияния дефектов на теплопроводность кристаллической структуры;
- моделирование формирования планетной системы Земля-Луна в рамках гипотезы совместного формирования планет в результате гравитационного коллапса газопылевого облака.

Метод Барнса-Хата



Аппроксимация потенциала от группы частиц.

Для разбиения на ячейки используется критерий допустимости аппроксимации.

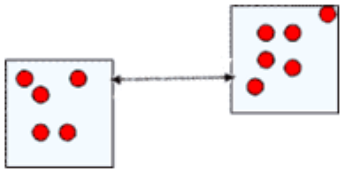


Метод неэффективен в задачах с неоднородным распределением частиц.

В областях высокой плотности используется разбиение на ячейки малого размера.

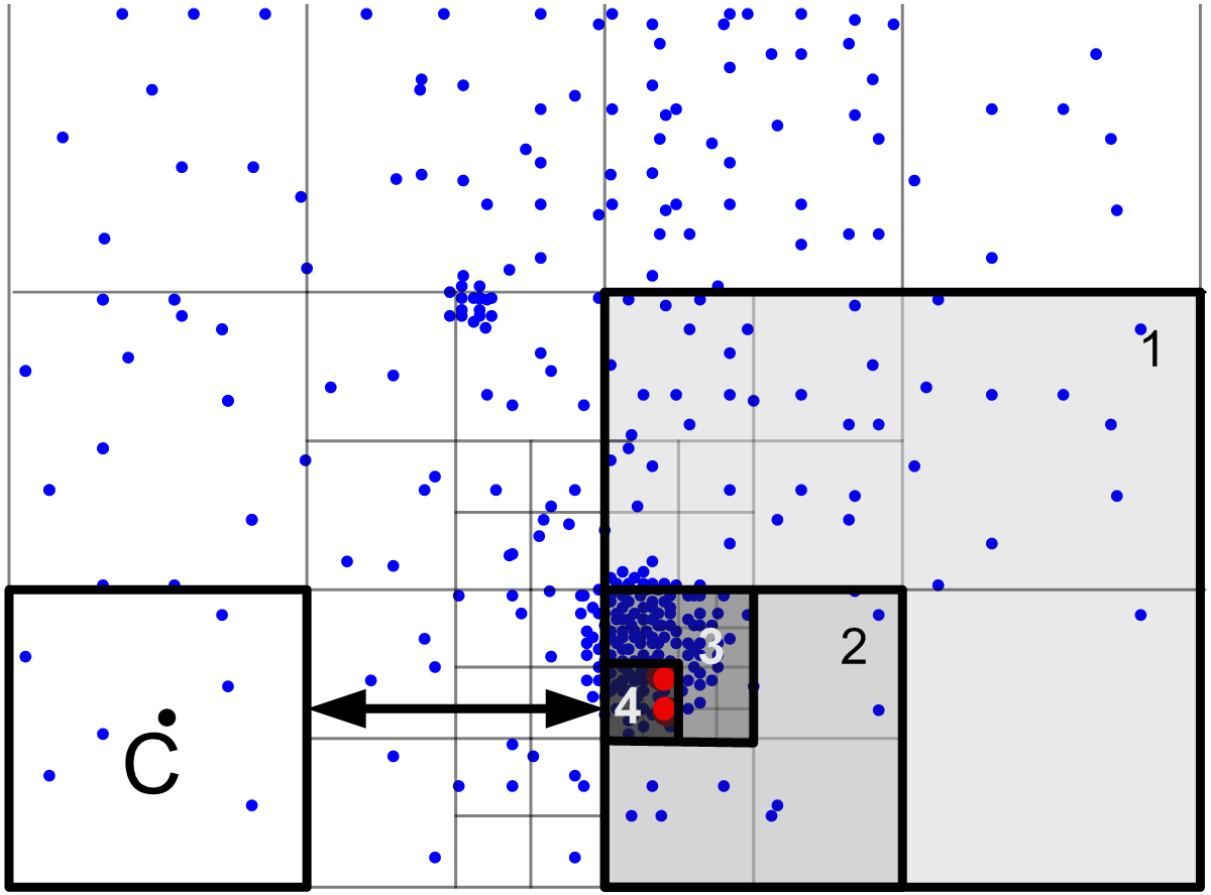
Разбиение повторяется для частиц, находящихся рядом

Разработан модифицированный метод, эффективный при неоднородном распределении



Критерий допустимости аппроксимации определяет возможность аппроксимации потенциала от одной группы (ячейки) частиц для всех частиц другой группы:

$s/r<\theta$, где θ – параметр метода, r – минимальное расстояние между ячейками, s – размер ячейки



Частицы объединяются в группы.

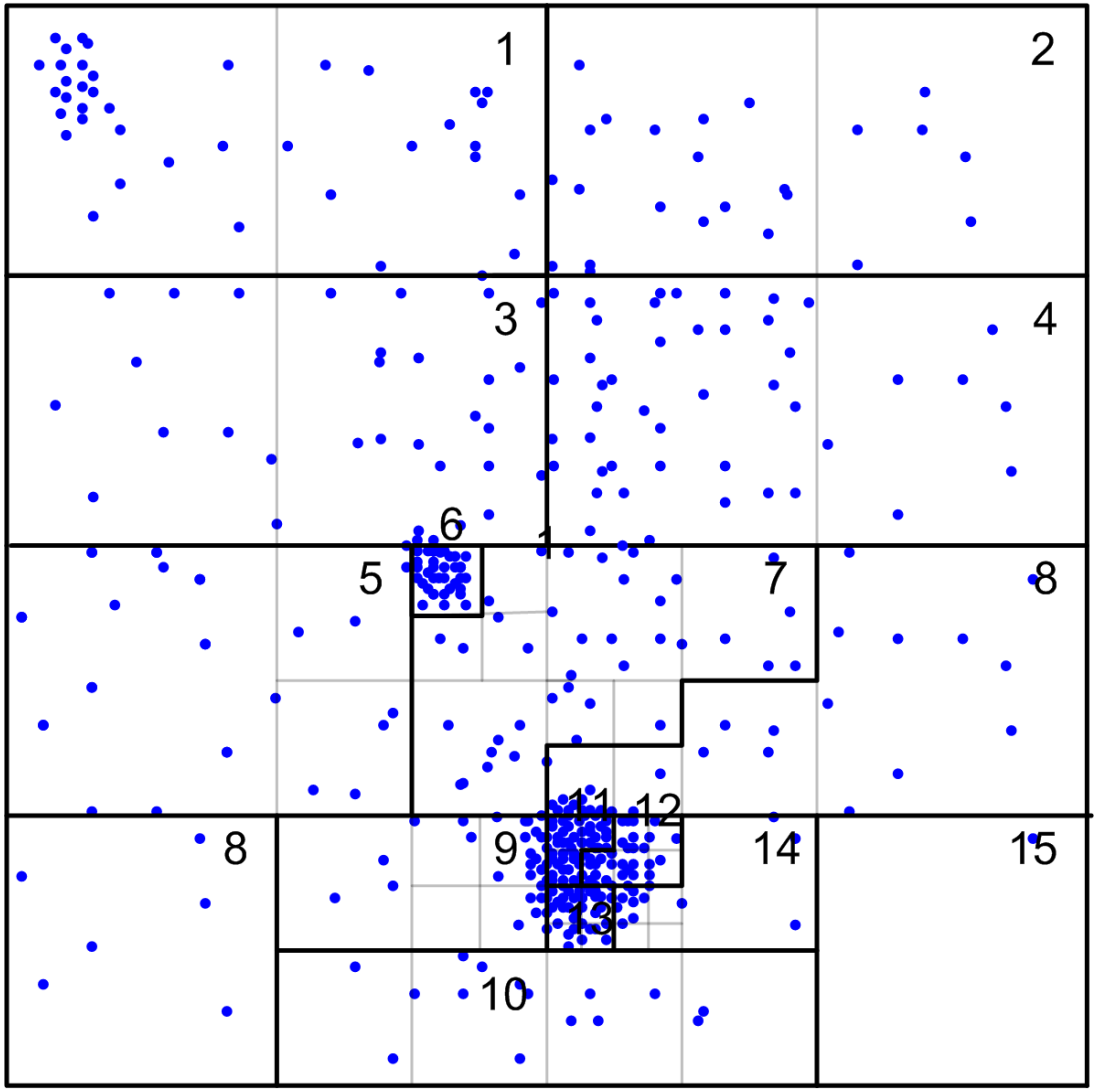
Расчет сил одновременно для всех частиц группы.

Сила от дальних частиц/ячеек рассчитывается для группы одинаково.

Для расчета силы от ближних частиц/ячеек группа делится на подгруппы

Многопроцессорные расчеты

Разработан алгоритм распределения процессорной загрузки, эффективный при неоднородном распределении частиц.

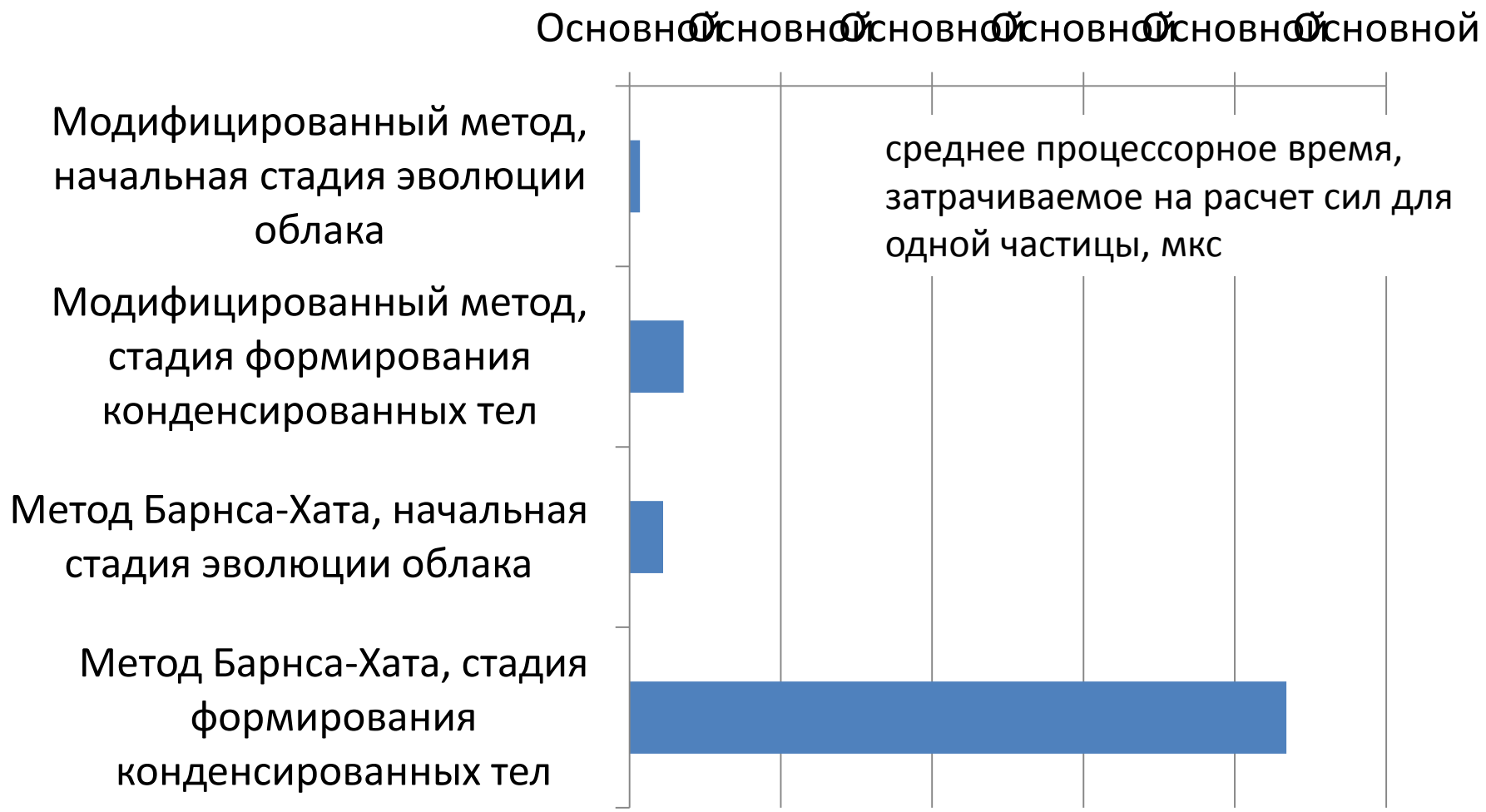


1. Расчетная область делится на ячейки различного размера в зависимости от плотности.

2. Ячейки раздаются процессам.
   a) Если есть процесс, содержащий смежную ячейку, и он не заполнен, то ячейка отдается ему.
   b) Иначе отдается наименее загруженному процессу.

Сравнение стандартного и модифицированного методов

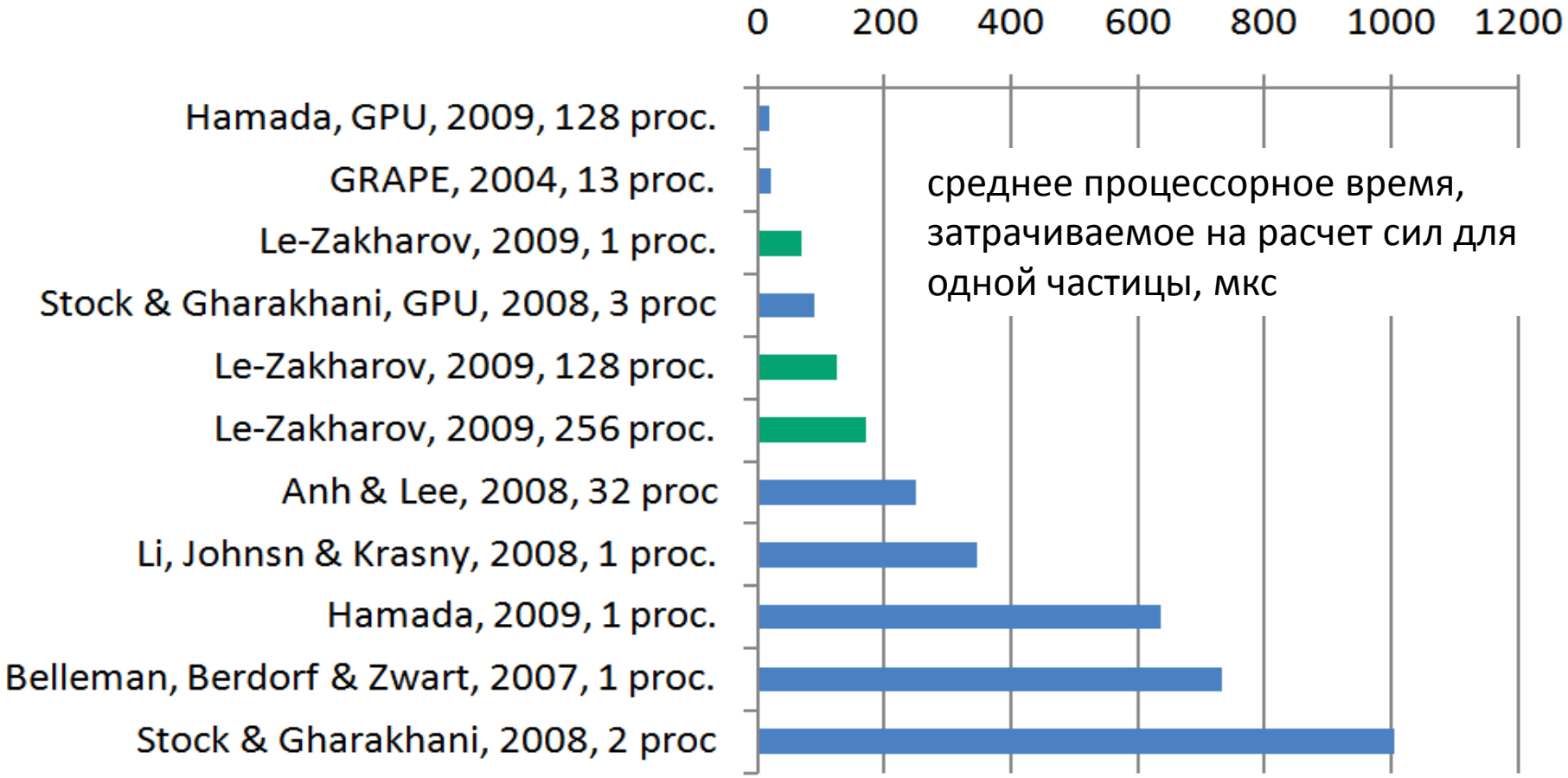
Метод дает существенное преимущество в задачах с неоднородным распределением



Для расчетов использовался компьютер МВС-100К МСЦ РАН

Сравнение различных реализаций

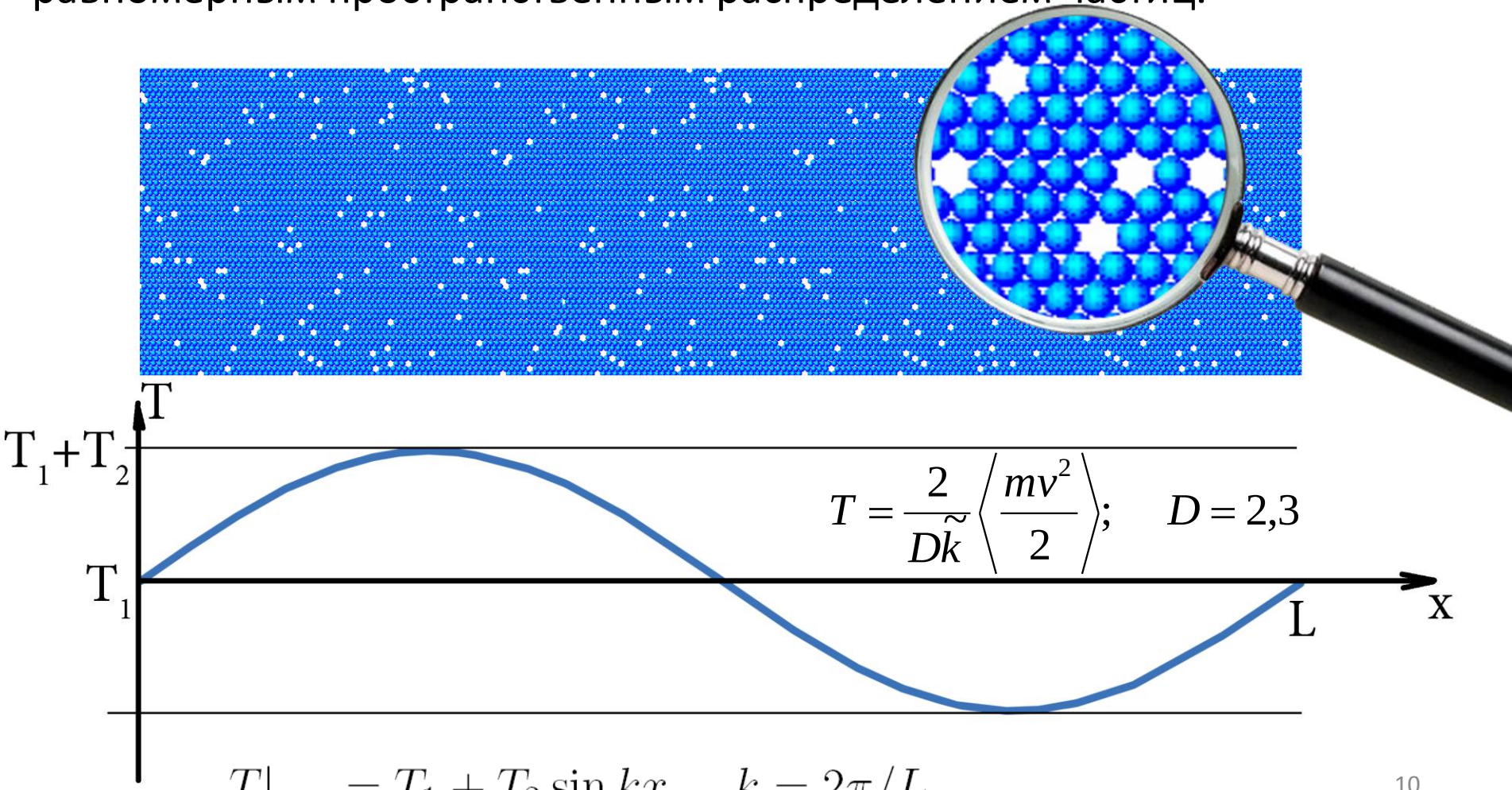
Комплекс программ по скорости превосходит многие современные аналоги



Для расчетов использовался компьютер МВС-100К МСЦ РАН

Исследование влияния дефектов решетки на теплопроводность кристаллической структуры

Тестирование методов и комплекса программ на задаче с короткодействующим потенциалом взаимодействия и равномерным пространственным распределением частиц.



Сравнение аналитического решения и МД моделирования

Введем величину J(t):

$$J(t) = \int_0^L (T(x,t) - T_1)^2 \, dx$$

– значение может быть вычислено в ходе МД моделирования

Рассмотрим уравнение теплопроводности:

$$\dot{T} - \beta T'' = 0$$

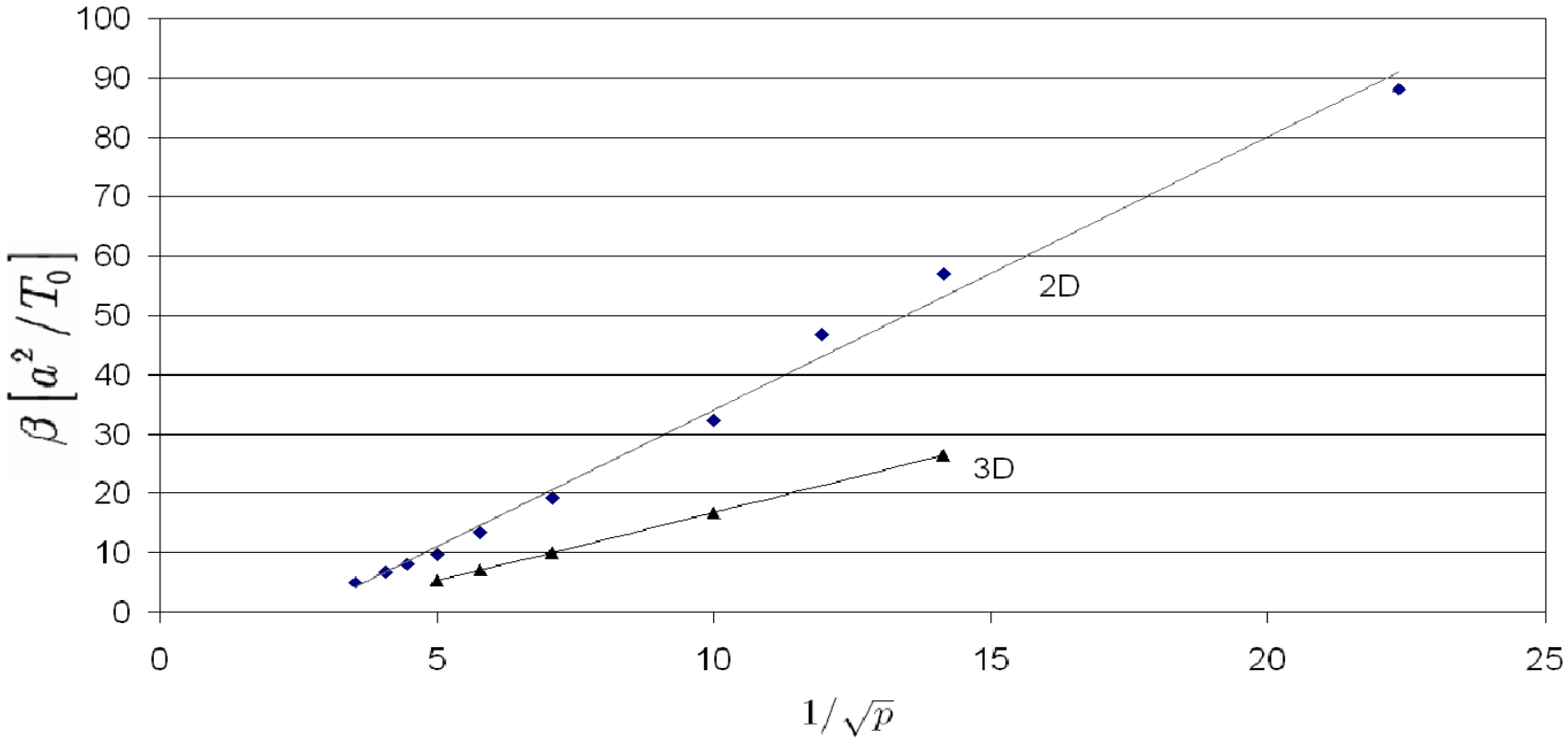
$$T|_{t=0} = T_1 + T_2 \sin kx, \quad k = 2\pi/L$$

$$T = T_1 + T_2 e^{-\beta k^2 t} \sin kx$$

$$J(t) = \frac{T_2^2 L}{2} e^{-2\beta k^2 t} \longrightarrow \boxed{\beta = \frac{1}{2k^2(t_2 - t_1)} \ln \frac{J(t_1)}{J(t_2)}}$$

Формула для рассчета коэффициента температуропроводности по результатам МД моделирования

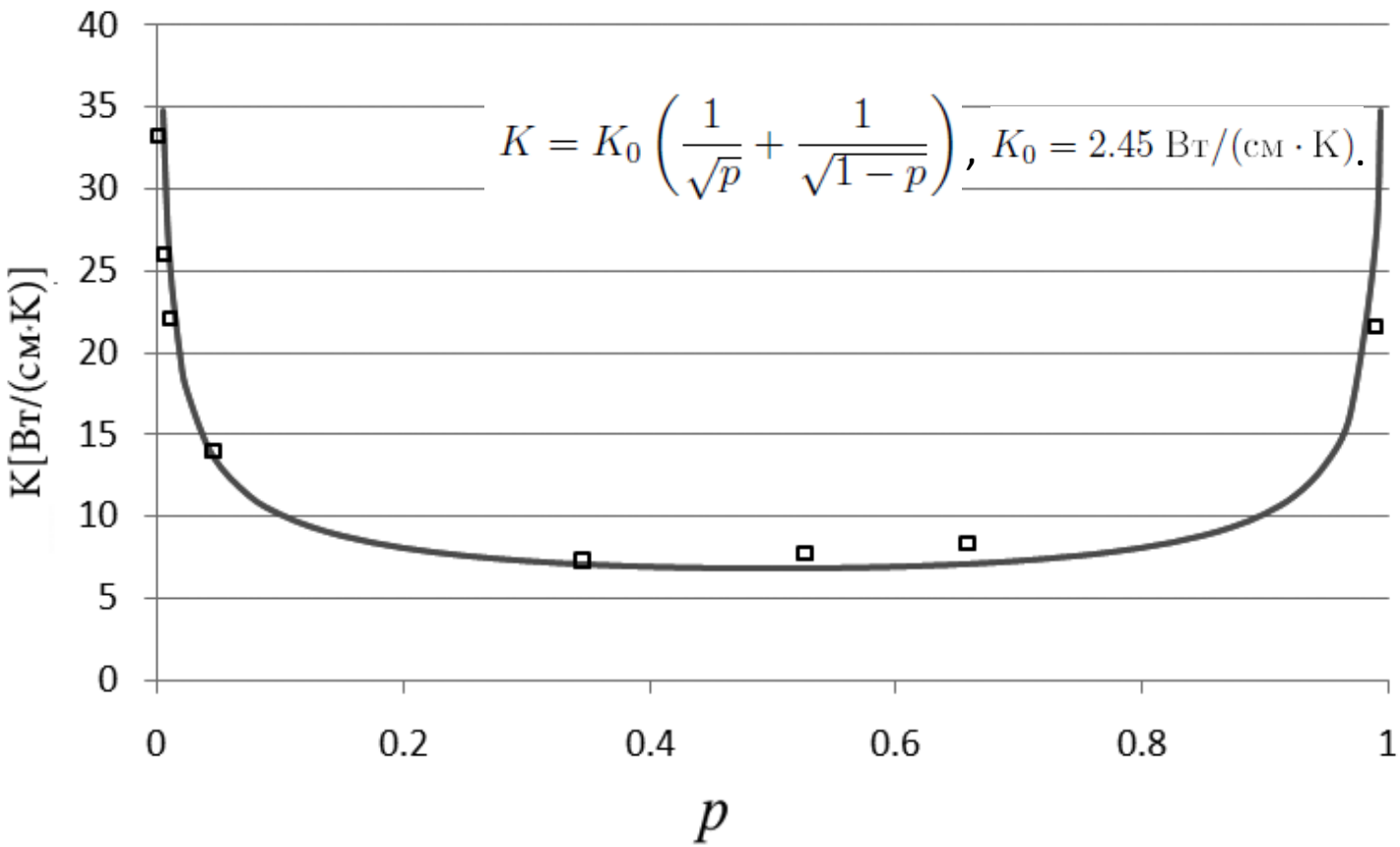
Зависимость температуропроводности от плотности дефектов-вакансий



Результаты компьютерного эксперимента хорошо аппроксимируются эмпирической зависимостью

$$\beta = A\left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{p_0}}\right)$$

Дефекты в виде включения атомов большей массы



Маркерами отмечены экспериментальные данные для монокристалла алмаза с включениями изотопов C^{13}, полученные в работах Т.Р. Энтони и В.Ф. Банхользера.

Данные эксперимента хорошо аппроксимируются эмпирической зависимостью, полученной по результатам молекулярно-динамического моделирования.

Аналитические модели

[1] Callaway J., **Model for Lattice Thermal Conductivity at Low Temperatures** // Physical Review, 1959 . 113 . pp.1046-1051.
[2] Ziman J.M., **Electrons and Phonons** // Oxford University Press, London, 1963 . 412 pp.

Другие модели:
Klemens, Anthony & Banholzer, модели для пористых материалов

Экспериментальные работы

[3] W.F. Banholzer, T.R. Anthony, **Diamond properties as a function of isotopic composition** // *Thin Solid Films, 212, (1992), 1-10*

[4] Yu X.G. , Liang X.G., **Effect of isotope on lattice thermal conductivity of lateral epitaxial overgrown GaN** // Diamond & Related Materials, 2007, 16, 1711–1715

МД моделирование теплопроводности

[5] Ladd A.J.C., Moran B., Hoover W.G., **Lattice thermal conductivity: A comparison of molecular dynamics and anharmonic lattice dynamics** // Physical Review B, 1986, Vol.34, N.8, pp.5058-5064.

[6] Mountain R.D., MacDonald R.A., **Thermal conductivity of crystals: A molecular-dynamics study of heat flow in a two-dimensional crystal** // Physical Review B, 1983, Vol.28, N.6, pp.3022-3025.

[7] B. Qiu, X. Ruan, **Molecular dynamics simulations of lattice thermal conductivity of bismuth telluride using two-body interatomic potentials** // Physical Review B, 2009, 80, pp.165203.

Моделирование формирования системы Земля-Луна в результате гравитационного коллапса пылевого облака

- Мегаимпакт

  Протолунное вещество было выброшено на околоземную орбиту в результате столкновения Земли с телом по размеру сопоставимым с Марсом.

[1] *Hartmann W.K., Davis D.R*., Satellite-sized planetesimals and lunar origin // *Icarus, 24*, 504-515, 1975.

[2] *Cameron A.G.W., Ward W.,* The origin of the Moon // *Science, 7,* 120-122, 1976.

[3] *Canup, R. M.,* Formation of the Moon // *Ann. Revs. Astron. Astrophy.*, 42, 441-475, 2004.

[4] *Canup, R. M.,* Simulations of a Late Lunar Forming Impact // *Icarus,* 168, 433-456, 2004.

- Гравитационный коллапс

  Одновременное формирование планет в процессе гравитационного коллапса газопылевого облака.

[5] *Галимов Э.М.,* Проблема происхождения Луны // В кн.: “Основные направления геохимии”, (под. ред. Э.М. Галимова), М. Наука, 1995, С.8-45.

[6] *Galimov E.M.,* On the origin of lunar material // *Geochem. Intern., 42(7)*, 595-609, 2004.

[7] *Галимов Э.М., Кривцов А.М., Забродин А.В., Легкоступов М.С., Энеев Т.М*., Динамическая модель образования системы Земля-Луна // *Геохимия, 11, 2005*.

Модель пылевого протопланетного облака

Сила взаимодействия

$$f(r,\dot{r}) = \frac{A_1}{r^2} + \frac{A_2}{r^p} + \frac{A_3}{r^q}\dot{r}$$

Гравитация

Отталкивание

Диссипация

$$f(r,\dot{r}) = \gamma \frac{m^2}{a^2}\left[\left(\frac{a}{r}\right)^{13}\left(1-\beta\frac{\dot{r}}{r}\right)-\left(\frac{a}{r}\right)^2\right]$$

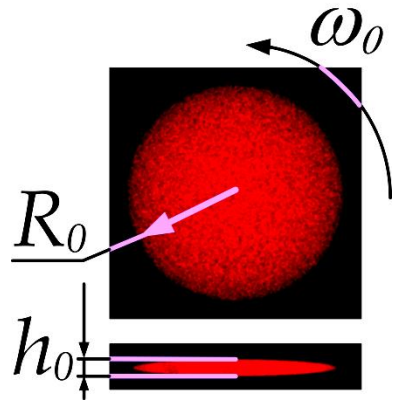
m – масса частицы

γ – гравитационная постоянная

β – коэффициент диссипации

a – равновесное расстояние

Начальные условия



$\frac{h_0}{R_0}$ – соотношение полуосей эллипсоида

N – число частиц

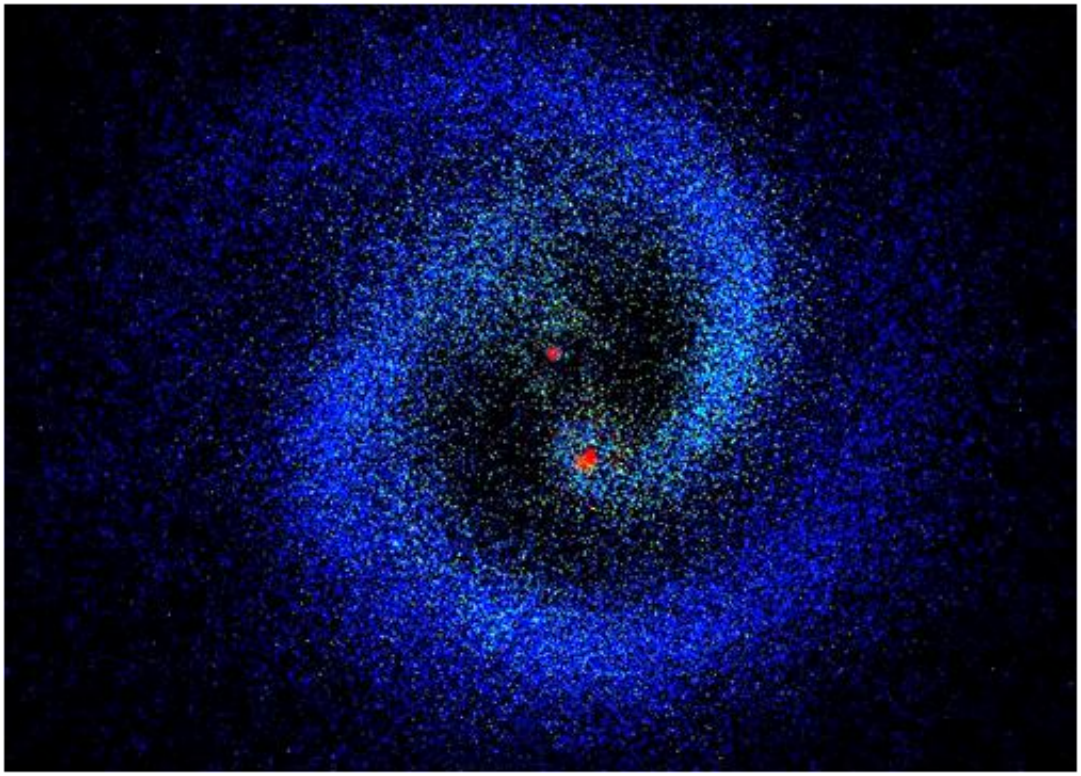
$\frac{d_0}{a}$ – соотношение среднего расстояния между ближайшими частицами и равновесного расстояния

$\frac{\omega_0}{\omega_s}$ – отношение скорости вращени эллипсоида к «скорости твердотельного вращения»

$\frac{v_{rand_xy}}{v_s}$ – величина максимальной хаотической начальной скорости

$\frac{v_{rand_z}}{v_{rand_xy}}$ – отношение полуосей эллипсоида случайных скоростей

Результаты трехмерного моделирования

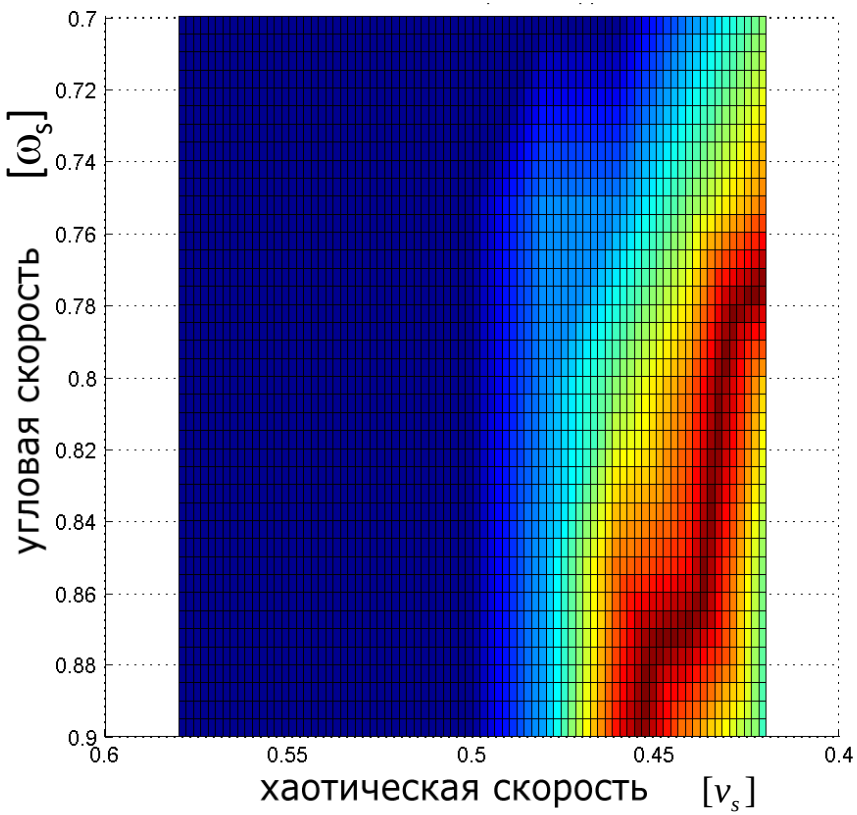


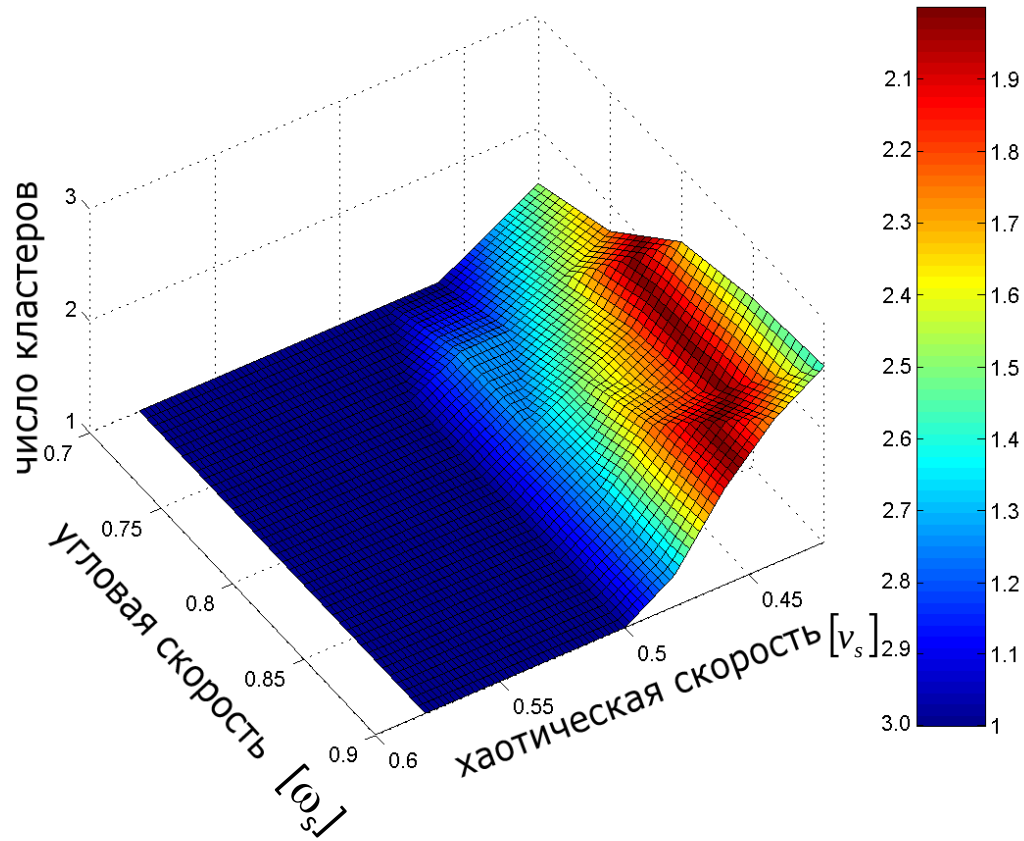
Пример результатов моделирования формирования планетной системы Земля-Луна в результате гравитационного коллапса пылевого облака.

Влияние начального распределения скоростей

Статистические результаты более 400 трехмерных расчетов с 20 000 частиц и более 100 расчетов с 200 000 частиц

среднее число кластеров в зависимости от угловой и хаотической компонент скорости





Результаты работы, выносимые на защиту, научная новизна

Разработана модификация метода Барнса-Хата для учета дальнодействующих и близкодействующих сил при моделировании методом динамики частиц, позволяющая проводить эффективные вычисления в задачах с существенно неоднородным распределением частиц в пространстве.

Метод реализован в виде комплекса программ для многопроцессорных вычислительных систем, разработаны алгоритмы эффективного разделения процессорной загрузки при неоднородном распределении частиц и алгоритмы проведения параллельных расчетов. Комплекс программ протестирован на решении двух прикладных задач из разных областей физики с наличием дальнодействующих и близкодействующих потенциалов взаимодействия различной природы.

В ходе решения задачи о влиянии дефектов на теплопроводность кристаллической структуры получена эмпирическая зависимость коэффициента температуропроводности от плотности дефектов решетки.

В рамках разработки альтернативной гипотезы формирования системы Земля-Луна доработана существующая модель ротационного коллапса для проведения трехмерного моделирования. Определена область значений параметров, приводящих к формированию двойной системы.