

На правах рукописи



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

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург — 2010

Работа выполнена в Государственном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»

- Научный руководитель — доктор физико-математических наук
Кривцов Антон Мирославович
- Официальные оппоненты — доктор физико-математических наук, профессор
Беляев Александр Константинович
- доктор физико-математических наук, профессор
Мелькер Александр Иосифович
- Ведущая организация — Учреждение Российской Академии наук
Ордена Ленина и Ордена Октябрьской революции
Институт геохимии и аналитической химии
им. В.И. Вернадского РАН (Москва)

Защита состоится “1” декабря 2010 г. в 16.00 на заседании диссертационного совета Д 212.229.13 при ГОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет» по адресу:

195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29, корп. 1 ауд. 41.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ГОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет».

Автореферат разослан “_____” _____ 2010 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор технических наук, профессор



Григорьев Б.С.

Актуальность темы. Метод динамики частиц — один из широко используемых методов компьютерного моделирования. Будучи принципиально дискретным, он имеет ряд преимуществ, проявляющихся при описании процессов, связанных с нарушением континуальности материала. Являясь типичным методом компьютерного моделирования, метод динамики частиц позволяет получать качественно новые результаты за счет наращивания количественной сложности компьютерной модели. Одним из наиболее существенных ограничений, накладываемых на применимость метода, до сих пор остается ограниченность вычислительных ресурсов. Особенно это проявляется при наличии дальнедействующих потенциалов взаимодействия, таких как гравитационный потенциал.

Гравитационное влияние тела, находящегося даже на сильном удалении, может быть существенно больше влияния тел, находящихся в непосредственной близости. При численном моделировании это вызывает необходимость расчета сил взаимодействия всех частиц со всеми, что приводит к асимптотической сложности алгоритма расчета сил $O(N^2)$ относительно числа частиц на каждом шаге интегрирования уравнений движения. Однако существуют различные методы приближенного расчета, позволяющие достичь сложности $O(N)$. Некоторые из таких алгоритмов предназначены для расчетов бесстолкновительной динамики частиц с использованием только гравитационного взаимодействия. Другие группы методов более универсальны и позволяют проводить расчет с наличием близкодействующей и дальнедействующей компонент потенциала и учитывать взаимодействие частиц при столкновениях. Однако все подобные методы очень чувствительны к пространственному распределению частиц. При высокой концентрации частиц в небольшом объеме расчетной области эффективность алгоритма может существенно понизиться.

Данная диссертационная работа посвящена разработке и реализации алгоритмов расчета столкновительной динамики частиц, применимых при существенно неоднородном распределении частиц в пространстве. Подобные алгоритмы необходимы, например, во многих астрофизических задачах, где рассматривается формирование достаточно плотных скоплений частиц. Кроме того, они могут использоваться для ускорения расчетов в любых других случаях, когда распределение частиц не однородно. Алгоритмы реализованы в виде комплекса программ для расчетов с применением как близкодействующих, так и дальнедействующих потенциалов. Для использования возможностей современной компьютерной техники разработаны и реализованы параллельные версии алгоритмов. Практически любой современный персональный компьютер имеет внутри себя не одно, а несколько вычислительных ядер, что в еще недалеком прошлом было привилегией лишь суперкомпьютеров. Таким образом, использование алгоритмов многопроцессорных вычис-

лений приобретает актуальность при работе как с настольными системами, так и с крупными вычислительными комплексами.

Разработанные алгоритмы, реализованные в виде комплекса программ для моделирования методом динамики частиц, применяются для решения двух прикладных задач, на примере которых показана возможность моделирования с далекодействующими и близкодействующими потенциалами с различным пространственным распределением частиц. Первая задача связана с исследованием влияния дефектов материала Леннарда-Джонса на теплопроводность. Теплопроводящие свойства материалов с микроструктурой в настоящее время являются объектом активного изучения. Исследования в данном направлении находят широкое практическое применение в самых разных отраслях промышленности, таких как строительство, металлургия, энергетика и др.

Последняя часть работы посвящена задаче об исследовании процесса гравитационного коллапса газопылевого облака с формированием кластеров — конденсированных скоплений частиц. Эти исследования сопряжены с работами в рамках крупного научного проекта по разработке альтернативной гипотезы формирования планетной системы Земля-Луна. Отметим, что до сих пор в науке нет единого мнения о механизмах формирования данных планет, поэтому исследования в данном направлении актуальны и представляют научный интерес.

Методика исследований. Метод частиц заключается в представлении вещества в виде совокупности взаимодействующих материальных точек (или твердых тел), поведение которых описывается законами классической механики. Существуют также и квантово-механические обобщения метода, однако они не рассматриваются в рамках данной работы. С вычислительной точки зрения метод представляет собой расчет траекторий движения большого числа взаимодействующих между собой частиц. Численное интегрирование уравнений движения частиц является единственным способом решения данной задачи. Но для расчета траекторий движения частиц необходимо вычислять действующие в системе силы. Их прямое вычисление приводит к асимптотической сложности $O(N^2)$ относительно числа частиц на каждом шаге интегрирования. Для молекулярной динамики (МД) эта проблема решается довольно просто путем обрезания межчастичного потенциала. Однако при наличии далекодействующих силовых факторов, таких как гравитационное взаимодействие, приходится использовать алгоритмы приближенного расчета сил.

Ограничение применения метода динамики частиц во многом связано с конечностью вычислительных ресурсов. Применение многопроцессорных вычислительных систем поз-

воляет существенно раздвинуть эти границы. При использовании радиуса обрезания в МД достигается практически полное распараллеливание вычислений. При наличии далекодействующих потенциалов ввиду сложности алгоритмов расчета сил и большого объема пересылаемых данных добиться подобной эффективности уже не удастся, однако и в этом случае целесообразно применение многопроцессорных комплексов.

Цель работы. Целью данной работы является разработка и развитие алгоритмов моделирования столкновительной динамики частиц, способных эффективно применяться при различном, в том числе существенно неоднородном, пространственном распределении частиц, с использованием далекодействующих и близкодействующих потенциалов взаимодействия различной природы; а также в реализации данных алгоритмов в виде комплекса программ для расчетов на многопроцессорных вычислительных системах и демонстрации работы программ на примере решения конкретных прикладных задач.

Научную новизну составляют следующие **результаты работы, выносимые на защиту**.

1. Разработана и реализована модификация алгоритма Барнса-Хата для учета далекодействующих и близкодействующих сил при моделировании методом динамики частиц. Преимуществом данной модификации является возможность моделирования столкновительной динамики частиц, взаимодействующих посредством далекодействующего потенциала, при существенно неоднородном распределении частиц в пространстве. А именно, алгоритм позволяет проводить эффективные вычисления в случае, когда до 30% массы системы сосредоточено в конденсированных кластерах, занимающих объем менее 0.01% расчетной области.
2. Разработана и реализована версия алгоритма для моделирования с использованием многопроцессорных вычислительных систем. Алгоритм обеспечивает высокую равномерность процессорной загрузки при концентрации существенной доли материала в малых областях расчетного пространства. Комплекс программ может применяться для исследования различных процессов методом динамики частиц с использованием далекодействующих и близкодействующих потенциалов взаимодействия, что подтверждается его успешным применением для решения двух прикладных задач из разных областей физики с наличием далекодействующих и близкодействующих потенциалов взаимодействия различной природы.
3. На примере задачи об исследовании влияния дефектов на теплопроводность кристаллической структуры показана возможность использования программ для моле-

кулярно-динамического моделирования с близкодействующим потенциалом взаимодействия. В ходе решения задачи по результатам компьютерных экспериментов получена эмпирическая зависимость коэффициента температуропроводности кристаллической структуры от плотности дефектов, согласующаяся с экспериментальными данными.

4. На примере задачи об изучении гравитационного коллапса газопылевого облака с последующим формированием конденсированных тел показана возможность моделирования систем с далекодействующим гравитационным потенциалом при существенно неоднородном распределении частиц в пространстве. Проведены работы по развитию модели газопылевого диска, представленной в работах Э.М. Галимова и соавторов. Произведен переход к трехмерной модели. Найдена область начальных параметров, в которой наиболее вероятно формирование двойной системы планет. Исследовано влияние угловой и хаотической компонент скоростей на эволюцию газопылевого диска.

Достоверность полученных результатов. Достоверность результатов достигается использованием апробированных физических моделей; применением современных методов и вычислительных средств и известных методик моделирования; использованием тестовых моделей при вычислениях, допускающих точное аналитическое решение; сравнением полученных результатов с результатами натурального эксперимента.

Практическая значимость работы. Практическая значимость работы определяется возможностью эффективного применения разработанных вычислительных методов при проведении расчетов в различных областях механики и физики. Алгоритмы многопроцессорных вычислений, реализованные в виде комплекса программ, могут использоваться для моделирования динамических процессов в конденсированном веществе с использованием моделей высокой количественной сложности, что подтверждается их успешным применением для решения двух прикладных задач.

Апробация работы. Результаты работы докладывались на семинарах кафедры “Теоретическая механика” СПбГПУ, Института проблем машиноведения РАН (Санкт-Петербург), Института Геохимии и Аналитической Химии им. Вернадского В.И. РАН (Москва), а также на всероссийских и международных конференциях “Актуальные проблемы механики” (Санкт-Петербург, 2005, 2006, 2008, 2010), “Математическое моделирование в механике деформируемых тел и конструкций. Методы граничных и конечных элементов (BEM&FEM)” (Санкт-Петербург, 2006, 2007), II Всероссийская школа-

конференция “Актуальные проблемы прикладной математики и механики”, посвященная памяти академика А.Ф. Сидорова (Абрау-Дюрсо, 2004), Всероссийский съезд по теоретической и прикладной механике (Нижний Новгород, 2006).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 5 научных работ. Список публикаций приведен в конце автореферата.

Структура и объем работы. Работа состоит из введения, трех глав и заключения. Работа содержит 137 страниц, в том числе 39 рисунков, 3 таблицы, список литературы содержит 189 наименований.

Во введении дана общая характеристика работы, обоснована актуальность разработки алгоритмов расчета столкновительной динамики частиц, описана методика исследований. Кратко перечисляются преимущества метода динамики частиц, а также обсуждаются вопросы, связанные с ограниченностью его применения из-за конечности вычислительных ресурсов. В частности, указывается, что при наличии далекодействующих потенциалов межчастичного взаимодействия прямой расчет сил при моделировании приводит к асимптотической сложности $O(N^2)$, где N — число частиц, на каждом шаге интегрирования. Однако существуют эффективные алгоритмы приближенного расчета сил, позволяющие существенно повысить скорость вычислений и добиться линейной асимптотической сложности вычислений.

Во представлении проведен обзор литературы, в котором дана краткая история развития метода динамики частиц применительно к описанию физических процессов в конденсированном веществе, а также история развития соответствующих вычислительных алгоритмов. Приведен ряд работ, в которых разрабатываются и исследуются алгоритмы расчетов для моделирования методом динамики частиц. На основании этих литературных данных делается вывод о том, что наиболее подходящими для расчета столкновительной динамики частиц при наличии далекодействующих сил являются иерархические методы вычислений и, в частности, алгоритм Барнса-Хата. Вместе с тем, отмечается, что эффективность подобных алгоритмов сильно зависит от однородности пространственного распределения частиц.

Работоспособность предложенных алгоритмов в данной диссертационной работе показывается на примере решения двух прикладных задач. В связи с этим во введении проведен краткий анализ литературы в соответствующих предметных областях науки. А именно, дан обзор работ, посвященных исследованию теплопроводности в кристаллах с дефектами, а также работ, касающихся моделирования динамики гравитирующих систем и процессов, связанных с эволюцией Солнечной системы. Отмечается, что приведенные

литературные данные позволяют сделать вывод об актуальности исследований в этих направлениях.

Первая глава посвящена алгоритмическим аспектам моделирования методом динамики частиц с использованием многопроцессорных систем. С вычислительной точки зрения метод сводится к интегрированию системы дифференциальных уравнений движения частиц. Основные вычислительные ресурсы при этом затрачиваются на расчет сил взаимодействия. В данной главе анализируются существующие методы расчета сил для случая близкодействующих и далекодействующих потенциалов; а также предлагается модифицированный алгоритм расчета, основанный на классическом методе Барнса-Хата. Особенностью алгоритма является возможность его эффективного использования при существенно неоднородном распределении частиц в пространстве, когда до 30% массы системы сосредоточено в менее 0.01% от объема расчетной области.

Глава состоит из четырех параграфов. **Первый параграф** вводный. В нем указывается на необходимость использования эффективных алгоритмов расчета сил при моделировании, а также говорится о преимуществах применения многопроцессорных вычислительных систем.

В **параграфе 1.2** описываются алгоритмы, применяющиеся при моделировании с использованием близкодействующих потенциалов взаимодействия. Они основаны на использовании радиуса обрезания и делении пространства на ячейки для определения списков взаимодействия при расчетах. Указывается, что эти алгоритмы позволяют достичь сложности $O(N)$ на каждом шаге интегрирования. Проводится аналогия с иерархическими методами, рассматриваемыми в параграфе 1.3. Кроме того, рассматриваются вопросы, связанные с расчетами на многопроцессорных вычислительных системах, где также явно прослеживается аналогия с распараллеливанием иерархических методов расчета сил.

Параграф 1.3 посвящен алгоритмам учета далекодействующих силовых факторов. В первых разделах параграфа обсуждается специфика моделирования столкновительной динамики частиц при наличии далекодействующих потенциалов взаимодействия. Проводится сравнительный анализ существующих методов расчета, в частности сеточных и иерархических алгоритмов. Сеточные методы обладают большей эффективностью, но в классическом варианте не подходят для моделирования столкновительной динамики. А модификации сеточных методов, направленные на учет близкодействующих сил, лишают их главного преимущества — скорости расчетов. Между тем, именно наличие близкодействующей компоненты в потенциале взаимодействия позволяет проводить моделирование динамических процессов в конденсированной среде.

Для расчета столкновительной динамики наиболее подходящими представляются иерархические методы. Метод Барнса-Хата основан на разложении в ряд Тейлора потенциала группы частиц относительно центра масс и иерархической декомпозиции пространства на ячейки. Несколько членов ряда позволяют получить аппроксимацию потенциального поля соответствующей группы и использовать ее для приближенного вычисления силы, действующей на произвольно взятую частицу, что позволяет достичь асимптотической сложности алгоритма вычислений $O(N \log N)$, где N — число частиц в системе. Однако метод Барнса-Хата чувствителен к однородности пространственного распределения частиц, в связи с чем при высокой концентрации частиц в относительно небольшом объеме пространства производительность метода существенно уменьшается.

В разделе 1.3.4 данного параграфа подробно обсуждается метод Барнса-Хата, приводятся результаты других исследователей относительно погрешности вычислений в зависимости от расчетных параметров метода, таких как тип критерия допустимости мультипольной аппроксимации или угол раскрытия ячеек. В разделе 1.3.5 описан модифицированный метод Барнса-Хата, позволяющий достичь лучшей производительности в случае неоднородного распределения частиц в пространстве. Определены следующие критерии, влияющие на скорость вычислений при расчете сил: 1) скорость построения структур данных, 2) используемый размер памяти, 3) скорость обхода, 4) адаптированность к неоднородному распределению частиц. На этом основании строится метод, позволяющий сохранить оптимальный баланс между приведенными факторами.

В разделе 1.3.5 описывается структура данных — восьмеричное дерево ячеек, развернутое в линейный массив. Корень дерева ассоциируется со всей расчетной областью, которая рекурсивно делится на восемь равных частей. Узлы дерева — ячейки — пронумерованы и отсортированы в памяти таким образом, что потомки одного уровня любой частицы любого уровня хранятся непрерывно. Такая нумерация на первый взгляд выглядит весьма трудоемкой, но на практике вычисление номера ячейки превращается в простой набор битовых операций. Частицы сортируются аналогичным образом. Это позволяет, не дублируя набор частиц, задать их список в ячейках всех уровней иерархии, что помогает ускорить обход дерева.

Обход дерева отличается от обхода в классическом алгоритме Барнса-Хата. Здесь применяются идеи так называемого быстрого мультипольного метода. В методе Барнса-Хата для каждой частицы происходит обход дерева, при этом решение о раскрытии ячейки принимается при помощи критерия допустимости. Можно преобразовать критерий допустимости так, чтобы он определял, возможно ли раскрытие ячейки по классическому

алгоритму сразу для группы частиц. После этого многократный обход дерева может быть заменен одним обходом, в ходе которого производится расчет сразу всех сил взаимодействия в системе. Обход начинается с пары ячеек “корень-корень”. После применения критерия допустимости происходит либо расчет сил через мультипольную аппроксимацию, либо раскрытие наибольшей из ячеек. Ячейки, содержащие малое число частиц, не раскрываются. Используемая структура данных позволяет получить список частиц любой ячейки, именно это дает возможность реализовать подобный алгоритм.

В ходе моделирования некоторые частицы могут вылетать за первоначальные границы расчетной области. Увеличение расчетной области негативно сказывается на производительности, поэтому некоторое количество вылетевших частиц может не участвовать в построении дерева и при расчете сил обрабатываться по стандартному алгоритму Барнса-Хата.

В заключительной части параграфа 1.3 рассматриваются аспекты, связанные с численным интегрированием уравнений движения частиц. Приводятся факторы, влияющие на выбор численного метода решения дифференциальных уравнений — сохранение энергии, кинетического момента и других макроскопических величин для конкретной задачи, однократный расчет сил на каждом шаге. Приводится алгоритм, позволяющий проводить интегрирование с переменным временным шагом.

Параграф 1.4 посвящен описанию параллельной версии алгоритма, приведенного в параграфе 1.3. Приводятся два основных критерия, влияющих на эффективность распараллеливания — объем пересылаемых данных и равномерность процессорной загрузки. Описывается разработанный исходя из этих критериев алгоритм распределения нагрузки, обеспечивающий эффективность при неоднородном распределении частиц в пространстве. Алгоритм основан на разделении расчетной области между процессами. Для этого выбирается определенный уровень иерархии ячеек. Затем пустые ячейки и ячейки, содержащие малое число частиц, объединяются в более крупные. После этого происходит распределение ячеек между процессами. При этом очередная ячейка отдается преимущественно процессу, который уже содержит смежную с данной ячейку, либо наименее загруженному процессу. Затем смежные ячейки, относящиеся к одному процессу, вновь по возможности объединяются в более крупные. Данная процедура периодически повторяется в ходе расчета по мере того, как из-за перемещения частиц баланс процессорной загрузки нарушается.

Также в параграфе 1.4 описывается параллельная модификация непосредственно алгоритма вычисления сил. Основное отличие здесь заключается в том, что процессы

должны передать друг другу необходимую информацию о частицах и коэффициентах мультипольного разложения. Эффективность этого процесса достигается, во-первых, алгоритмом распределения процессорной загрузки, во-вторых, составлением предварительных списков рассылки.

Автор/проект	Год	Параметры конфигурации	N	t_s , с	P	t_p , мкс
Le-Zakharov	2009	эллипсоид (модель газопыл. облака)	1M	70	1	70
Le-Zakharov	2009	эллипсоид (модель газопыл. облака)	1M	1.37	64	88
Le-Zakharov	2009	эллипсоид (модель газопыл. облака)	1M	0.98	128	125
Le-Zakharov	2009	эллипсоид (модель газопыл. облака)	10M	6.7	256	172
Le-Zakharov	2009	модель газопыл. облака, заверш. стадия	1M	6.9	64	442
GRAPE-6	2004		2M	3	12 + 1	20
Anh & Lee	2008	распр. Пламмера	2.56M	20	32	250
Stock & Gharakhani, CPU	2008	куб	500K	251.5	2	1006
Stock & Gharakhani, CPU+GPU	2008	куб	500K	14.9	3	89
Li, Johnson & Krasny	2008	8 сфер	1M	345	1	345
Belleman, Berdorf & Zwart	2007		1M	733	1	733
Hamada & others, CPU	2009	сфера	1M	635	1	635
Hamada & others, GPU	2009	сфера	1M	7.94	1	8
Hamada & others, GPU	2009	сфера	1M	0.13	128	17

Таблица 1: *Результаты замеров производительности параллельной реализации модифицированного алгоритма Барнса-Хата в сравнении с результатами других исследователей. Замеры в рамках данной работы производились на компьютере МВС-100К в 2009 году. N — число частиц, t_s — время, затрачиваемое на один шаг интегрирования, P — число вычислительных ядер, $t_p = \frac{t_s P}{N}$ — процессорное время, затрачиваемое на расчет сил для одной частицы.*

Также в параграфе 1.4 приведены данные о производительности разработанных алгоритмов, реализованных в виде комплекса программ для моделирования методом динамики частиц (табл. 1). Показано, что в диапазоне до 10^6 частиц наблюдается преимущественно линейная зависимость скорости вычислений от числа частиц. Эффективность распараллеливания для конфигурации из 1 млн. частиц на 64 вычислительных ядрах достигает 80%, что является хорошим показателем для подобных алгоритмов. Максимальная конфигурация, для которой проводились замеры производительности составляет 10^7 частиц, при расчете на 256 вычислительных ядрах 1 шаг интегрирования занимает около 6.7 секунд. Замеры проводились на компьютере МВС-100К МСЦ РАН. Кроме того, в параграфе 1.4 приводятся данные о производительности, опубликованные в ряде работ, где в качестве алгоритма расчета сил применяются иерархические методы вычислений (табл. 1). Отмечается, что полученная в данной работе реализация модифицированно-

го метода Барнса-Хата по производительности превосходит многие современные аналоги, уступая лишь реализациям на специализированных аппаратно-программных комплексах, в том числе с использованием графических процессоров.

При существенно неоднородном распределении частиц производительность снижается в 3 — 5 раз, что, однако, позволяет проводить эффективные расчеты. Отметим, что в литературе обычно не приводятся данные о скорости расчетов для неоднородного распределения частиц. Однако чувствительность иерархических методов к пространственному распределению признается многими авторами. К примеру, в работе П. Ли, Х. Джонсона и Р. Красного говорится о уменьшении скорости расчетов почти в 3 раза просто при изменении распределения без образования плотных скоплений частиц.

Глава 2 посвящена применению разработанного комплекса программ для решения прикладной задачи, на примере которой демонстрируется возможность проведения МД моделирования с использованием короткодействующего потенциала взаимодействия. Исследуется процесс теплопроводности в модельном материале Леннарда-Джонса, изучается влияние дефектов решетки на теплопроводность кристаллической структуры.

Параграф 2.1 содержит вводную информацию. В частности, в параграфе отмечено, что влияние микроструктуры вещества на его теплопроводность является актуальным предметом исследования, и это касается как реальных, так и модельных материалов.

В **параграфе 2.2** описана методика численных экспериментов. Рассматривается бесконечный стержень, начальное распределение температуры в котором имеет вид синусоиды:

$$T|_{t=0} = T_1 + T_2 \sin kx, \quad k = 2\pi/L, \quad (1)$$

где T_1 — это среднее значение температуры, T_2 — амплитуда температурных отклонений, а L — пространственный период температурных отклонений. Классическое уравнение теплопроводности

$$\dot{T} - \beta T'' = 0, \quad (2)$$

где β — это коэффициент температуропроводности, с начальными условиями в форме (1) имеет простое аналитическое решение

$$T = T_1 + T_2 e^{-\beta k^2 t} \sin kx. \quad (3)$$

В МД эксперименте роль стержня выполняет прямоугольный образец материала. Материал представлен набором частиц, расположенных в узлах плотноупакованной кристаллической решетки и взаимодействующих через модифицированный потенциал Леннарда-Джонса. На образец наложены периодические граничные условия. Температура считается

пропорциональной средней кинетической энергии движения частиц, для трехмерного случая эта зависимость имеет вид

$$T = \frac{2}{3\tilde{k}} \left\langle \frac{mv^2}{2} \right\rangle, \quad (4)$$

где \tilde{k} — постоянная Больцмана, под $\langle \dots \rangle$ подразумевается усредненное значение по некоторому набору частиц.

Для расчета коэффициента температуропроводности рассматривается интеграл

$$J(t) = \int_0^L (T(x, t) - T_1)^2 dx. \quad (5)$$

Он может быть легко вычислен в процессе компьютерных экспериментов. С другой стороны, для решения в форме (3) этот интеграл может быть представлен в виде

$$J(t) = \frac{T_2^2 L}{2} e^{-2\beta k^2 t}. \quad (6)$$

Из выражения (6) следует формула для вычисления коэффициента β через два известных значения интеграла J

$$\beta = \frac{1}{2k^2(t_2 - t_1)} \ln \frac{J(t_1)}{J(t_2)}, \quad (7)$$

где t_1 и t_2 — два произвольно выбранных момента времени.

В **параграфе 2.3** приведены результаты компьютерных экспериментов. Исследуется зависимость теплопроводности от плотности дефектов решетки. В качестве дефектов рассматриваются равномерно распределенные вакансии. Результаты численных экспериментов (рис. 1) для двухмерного и трехмерного монокристалла позволили получить эмпирическую зависимость коэффициента температуропроводности β от плотности дефектов решетки:

$$\beta = A \left(\frac{1}{\sqrt{p}} - \frac{1}{\sqrt{p_0}} \right), \quad (8)$$

где A — размерный коэффициент, p_0 — критическое значение плотности дефектов, при котором теплопроводность обращается в ноль.

В **разделе 2.4** приводятся результаты численного эксперимента по моделированию теплопроводности в материале Леннарда-Джонса с атомами различной массы. По аналогии с зависимостью (8) построена эмпирическая зависимость в форме

$$\beta = \frac{A}{\sqrt{p}} + \frac{B}{\sqrt{1-p}} + C, \quad (9)$$

где A , B и C — размерные коэффициенты, которая с высокой степенью точности аппроксимирует результаты численного эксперимента.

Раздел 2.5 посвящен сравнению полученных результатов с аналитическими моделями и экспериментальными данными ряда других исследователей. В частности, приводятся

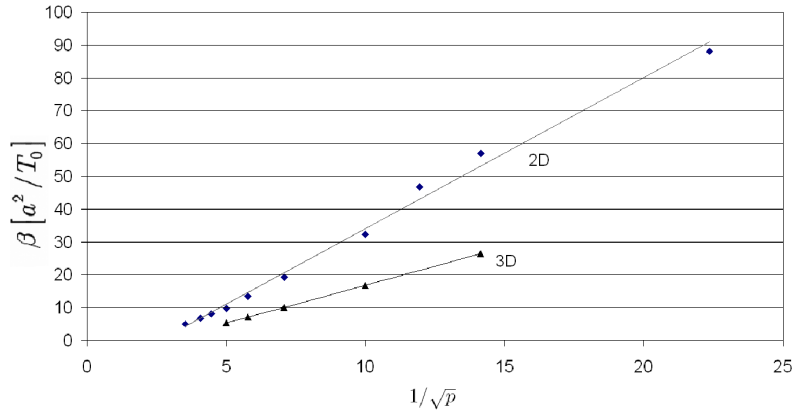


Рис. 1: Изменение коэффициента температуропроводности β в зависимости от величины $1/\sqrt{p}$, где p — плотность дефектов решетки. Маркерами отмечены результаты численного эксперимента. Сплошными линиями изображены зависимости в форме (8).

модели Хассельмана-Джонса, Волша, Максвелла-Эукена, Лоеба. Указывается, что все эти модели подтверждают сильное влияние дефектов материала, таких как пористость, наличие примесей или дефектов кристаллической решетки, на теплопроводность. При этом с ростом плотности дефектов теплопроводность существенно уменьшается, что также подтверждается рядом экспериментальных исследований. Отмечается, что результаты, полученные в данной диссертационной работе, находятся в полном соответствии с этими выводами. Кроме того, в разделе 2.4 приводятся экспериментальные данные Т. Энтони, В. Банхользера и др. о влиянии на теплопроводность наличия изотопов C^{13} в монокристалле алмаза. На рис. 2 они отмечены прямоугольными маркерами, сплошной линией изображена эмпирическая зависимость (9) в форме

$$K = K_0 \left(\frac{1}{\sqrt{p}} + \frac{1}{\sqrt{1-p}} \right), \quad (10)$$

где K — коэффициент теплопроводности, p — отношение числа изотопов C^{13} к общему числу атомов, $K_0 = 2.45 \text{ Вт}/(\text{см} \cdot \text{К})$ — размерный параметр.

Раздел 2.6 заключительный для данной главы и содержит выводы об успешном использовании комплекса программ для МД моделирования. Отмечается, что по результатам компьютерного эксперимента удалось измерить коэффициент температуропроводности при различной плотности дефектов и на этой основе построить эмпирические зависимости в виде простых аналитических выражений для двух типов дефектов.

Глава 3 посвящена моделированию формирования планетной системы в результате гравитационного коллапса пылевого облака. **Параграф 3.1** является вводным. В нем, в частности, отмечается, что работы в данном направлении связаны с проектом по разработке альтернативной гипотезы одновременного формирования системы Земля-

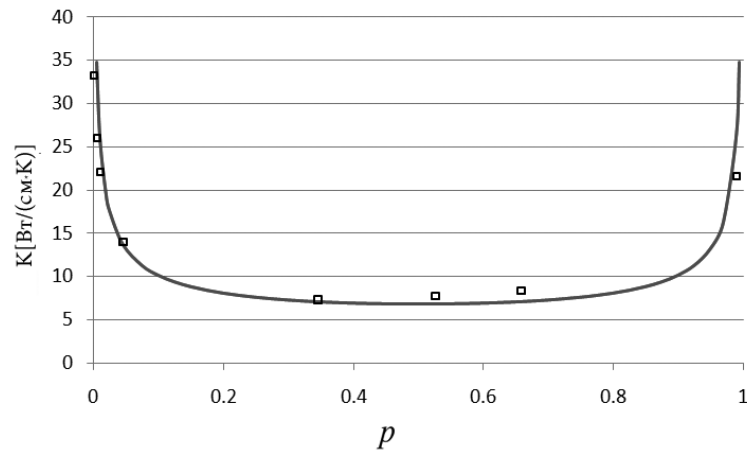


Рис. 2: Изменение коэффициента теплопроводности K в зависимости от отношения изотопов C^{13} к общему числу атомов в монокристалле алмаза. Прямоугольными маркерами отмечены экспериментальные данные. Сплошной линией изображен график эмпирической зависимости для коэффициента теплопроводности в форме (10).

Луна, проводимым в рамках программы президиума РАН. Модель ротационного коллапса газопылевого облака (развитая в работах Э.М. Галимова и др.) модифицирована для трехмерного случая. На примере данной задачи демонстрируется возможность моделирования систем с наличием дальнедействующего гравитационного взаимодействия. Также показывается работоспособность алгоритма в условиях неоднородного распределения частиц, когда до 30% массы системы сосредоточено в объеме менее 0.01%, а иногда и менее 0.0001% от объема расчетной области.

В параграфе 3.2 приводится краткая историческая справка о спорах в научном сообществе относительно вопроса возникновения Луны. Там же описывается предложенная ранее двухмерная модель ротационного коллапса газопылевого облака. В конце параграфа определяются начальные условия для аналогичной трехмерной модели.

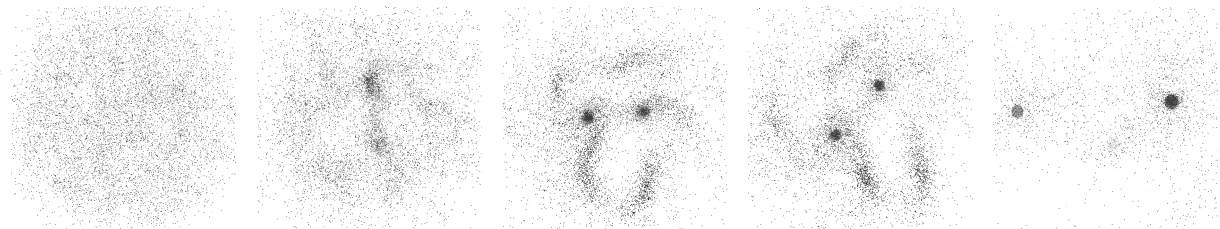


Рис. 3: Пример расчета — формирование системы двух тел в результате гравитационного коллапса пылевого облака.

В параграфе 3.3 приведены результаты компьютерного моделирования. На рис. 3 приведен пример типичного расчета с формированием системы двух тел. В ходе числен-

ных экспериментов качественно изучено влияние основных параметров модели — начальной угловой скорости вращения облака, хаотической компоненты скоростей, коэффициента диссипации на поведение системы. На рис. 4 приведена диаграмма зависимости числа образующихся тел от начального распределения скоростей. На графиках отчетливо видна область значений параметров, в которой формирование двойной системы планет является наиболее вероятным. В конце параграфа приводится сводная таблица, в которой отражены общие тенденции в поведении системы при изменении начальных условий.

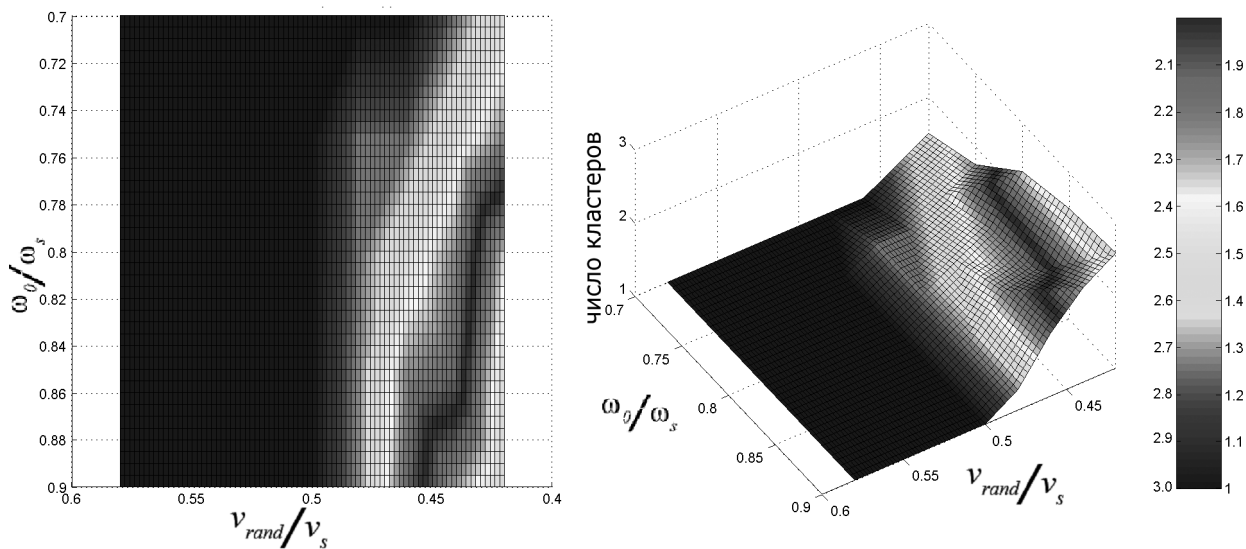


Рис. 4: Зависимость числа кластеров от начальной угловой скорости вращения облака ω_0 и максимальной начальной хаотической скорости v_{rand} (статистические результаты более 400 трехмерных расчетов с 20000 частиц); $\omega_s = \sqrt{\frac{3\pi}{4} \frac{\gamma M}{R_0^3}}$ — угловая скорость твердотельного вращения плоской системы, M — масса системы, R_0 — начальный радиус облака, $v_s = \omega_s R_0$.

Параграф 3.4 заключительный для данной главы. В нем, в частности, отмечается, что удалось добиться высокой производительности расчетов при использовании модели с существенно неоднородным распределением частиц, а также провести многочисленные серии компьютерных экспериментов с числом частиц до 2×10^5 и единичные расчеты с несколькими миллионами частиц.

В заключении сформулированы основные результаты работы.

1. Разработан алгоритм приближенных вычислений дальнедействующих сил при моделировании методом динамики частиц, основанный на классических иерархических методах вычислений — алгоритме Барнса-Хата и быстром мультипольном методе. Преимуществом алгоритма является высокая эффективность вычислений при су-

щественно неоднородном распределении частиц, когда до 30% массы системы сосредоточено в небольшом объеме пространства (менее 0.01% от объема расчетной области). Разработана параллельная версия данного алгоритма для расчетов на многопроцессорных вычислительных системах.

2. Алгоритмы реализованы в виде комплекса программ для расчетов на ПК и многопроцессорных системах. Программные модули подходят для решения различных прикладных задач методом динамики частиц и, в частности, методом МД. В качестве потенциалов взаимодействия могут выступать различные межмолекулярные потенциалы, электромагнитное и гравитационное взаимодействие, а также другие виды взаимодействия различной природы. Комплекс программ был опробован на решении двух прикладных задач с наличием дальнедействующих и близкодействующих потенциалов, а именно, на задаче об исследовании влияния дефектов на теплопроводность материала Леннарда-Джонса и на задаче о моделировании процесса формирования системы Земля-Луна в результате гравитационного коллапса пылевого диска.
3. Задача об исследовании влияния дефектов на теплопроводность кристаллической структуры показала возможность применения комплекса программ для МД моделирования с короткодействующим потенциалом взаимодействия. В ходе исследований были получены эмпирические зависимости влияния плотности дефектов на коэффициент температуропроводности для различных видов дефектов, которые согласуются с экспериментальными данными.
4. Было проведено детальное трехмерное моделирование гравитационного коллапса пылевого облака, что показало возможность использования комплекса программ при наличии дальнедействующего гравитационного потенциала взаимодействия и при неоднородном распределении частиц в пространстве. На основе существующей модели были проведены исследования влияния различных параметров на эволюцию системы. В частности, было исследовано влияние коэффициента диссипации, начальных вращательной и хаотической компонент скоростей частиц. Вследствие перехода к трехмерной модели было изменено начальное распределение скоростей и координат частиц вдоль оси аксиальной симметрии облака. Была найдена область параметров, в которой наиболее вероятным является формирование двойной планетной системы.

Публикации по теме исследования

1. **Ле-Захаров, А.А. Исследование процесса теплопроводности в кристаллах с дефектами методом молекулярной динамики** [Текст] / А.А. Ле-Захаров, А.М. Кривцов // Доклады Российской Академии наук, 2008.— т.420.— №1.— С.45–49.
2. **Ле-Захаров, А.А. Разработка алгоритмов расчета столкновительной динамики гравитирующих частиц для моделирования образования системы Земля-Луна в результате гравитационного коллапса пылевого облака** [Текст] / А.А. Ле-Захаров, А.М. Кривцов // Проблемы зарождения и эволюции биосферы: сб. науч. работ под ред. Э.М. Галимова.— М.:Изд. Книжный дом Либроксом, 2008.— С.329–345.
3. **Le-Zakharov, A.A. Parallel implementation of Barnes-Hut algorithm for simulation of planet system formation** [Текст] / А.А. Le-Zakharov, I.B. Volkovets, А.М. Krivtsov // Proceedings of XXXIII International Summer School — Conference APM'2005.— 2005.— С.237–242.
4. **Krivtsov A.A. Molecular dynamics investigation of heat conductivity in monocystal material with defects** [Текст] / А.М. Krivtsov, А.А. Le-Zakharov // Proceedings of XXXV International Summer School — Conference APM'2007.— 2007.— С.264–276.
5. **Le-Zakharov, A.A. Molecular dynamics modeling of heat wave propagation in crystals** [Текст] / А.А. Le-Zakharov, А.М. Krivtsov // Proceedings of XXXVI International Summer School — Conference APM'2008.— 2008.— С.420–424.