

УДК 519.876.5

АДАПТИВНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ ЧАСТИЦ МЕТОДОМ СОБЫТИЙНО-УПРАВЛЯЕМОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Т. А. Белов, В. И. Иордан

Алтайский государственный университет,
г. Барнаул

Статья посвящена изучению способов оптимизации вычислительных затрат при моделировании неоднородных систем частиц путём совершенствования метода событийно-управляемой молекулярной динамики.

Ключевые слова: моделирование, молекулярная динамика, материалы, системы частиц.

В современных условиях актуальной является задача исследования и анализа физических систем. Как пример, одним из прогрессивных направлений науки является исследование свойств материалов и процессов с ними происходящих. Впоследствии, данные полученные в результате таких исследований могут быть использованы для идентификации, классификации и синтеза определённых материалов. Однако, экспериментальные исследования сложных систем, как правило, требуются ресурсы в больших объёмах.

Наряду с улучшением экспериментальных методик, компьютерное моделирование процессов, происходящих в системе, является одним из основных способов снижения затрат на исследования, необходимые как для проверки научных гипотез, так и при промышленном производстве. Несмотря на наращивание вычислительной мощности аппаратного обеспечения, необходимость в представлении всё более масштабных и сложных систем требует эффективной организации процесса моделирования для обеспечения приемлемого быстродействия. С другой стороны, разнообразие систем, требующих исследования, ведёт к снижению применимости излишне узкоспециализированных подходов. Следовательно, рациональной представляется разработка достаточно универсального программного продукта, обеспечивающего возможность физического моделирования различных систем на различных масштабах.

В настоящее время описаны и реализованы различные методы компьютерного моделирования физических систем, многие из которых применяются на практике. Так как целью моделирования обычно является не

получение точного представления об эволюции системы, а определение набора макроскопических характеристик множества частиц, выбор используемого в конкретном случае метода определяется не только объектом моделирования, но и может зависеть от варьирующейся требуемой точности и имеющихся ресурсов.

Принцип организации процесса моделирования, в широком спектре задач наиболее подходящий для обеспечения универсальности, высокой производительности и конфигурируемости, может быть основан на распространённом представителе дискретно-континуальных методов моделирования – методе молекулярной динамики. В качестве основы описания системы используется классическая механика. При этом частицы представляются как материальные точки, и процесс моделируется интегрированием уравнений движения отдельных частиц на основе простого потенциального взаимодействия. Несмотря на детерминированный характер механики Ньютона, добавление в модель хаотического термодинамического движения (например, заданием случайных начальных скоростей в соответствии с распределением Максвелла) позволяет приблизить результаты моделирования к реальному поведению системы и получить данные о макроскопических характеристиках объекта [1].

Несмотря на широкий спектр систем, эффективно моделируемых методом классической молекулярной динамики, моделирование с постоянным временным шагом не является оптимальным: для негладких потенциалов интегрирование с достаточной точностью создаёт необходимость в значительном

уменьшении глобального временного шага, влияющего и на расчёты траекторий движения частиц, не требующие в данный момент излишней точности. Так как это негативно сказывается на производительности вычислений, в алгоритм моделирования требуется включить эффективный анализ необходимости обработки различных взаимодействий частиц. Использование метода событийно-управляемой молекулярной динамики, заключающегося в обработке взаимодействий между частицами в виде последовательности событий, позволяет эффективно учитывать негладкие потенциалы и точно удовлетворить ограничения моделирования (например, в условиях недопустимости пересечения сталкивающихся твёрдых сфер) [2]. В таком случае, траектории движения частиц между событиями рассчитываются аналитически как перемещение под действием силы, принимаемой постоянной на временном шаге, достаточном для обеспечения необходимой точности расчёта потенциального взаимодействия.

При моделировании реальной системы, свойства составляющих её частиц могут значительно отличаться – система может состоять из различных групп элементарных частиц, молекул, расчёт взаимодействий частиц с различными скоростями может быть более эффективно выполнен различными способами и так далее. В условиях необходимости обеспечения максимальной производительности подобные различия становятся сложно инкапсулировать в функции взаимодействия и характеристиках однородно представленных частиц. К тому же размер ячеек пространственного разбиения, применяемого для оптимизации расчёта близких взаимодействий, может зависеть от параметров частиц. Например, необходимость расчёта столкновений между частицами зависит от радиусов этих частиц. При максимальной плотности заполнения объёма одинаковыми сферами с радиусом r количество частиц в каждой кубической ячейки со стороной $2R$ определяется как

$$n = \frac{(2R)^3 \cdot \frac{\pi}{3\sqrt{2}}}{\frac{4}{3}\pi r^3} = \frac{2}{\sqrt{2}} \left(\frac{R}{r}\right)^3. \quad (1)$$

Тогда для каждой ячейки (кроме внешнего слоя или при периодических граничных условиях) количество проверяемых столкновений будет равно

$$c = \frac{n(n-1)}{2} + 13n^2, \quad (2)$$

то есть имеет зависимость 6-й степени от стороны ячейки. Так как количество ячеек с уменьшением стороны ячейки растёт только кубически, и накладные расходы, связанные с увеличением числа ячеек, значительно меньше затрат на расчёт взаимодействий, рационально организовать различные виды разбиения пространства для различных типов частиц и производить взаимодействия между разными типами в разбиении на ячейки со стороной, равной сумме максимальных радиусов взаимодействия для этих типов.

Использование событийно-управляемого подхода требует определения момента времени изменения характера взаимодействия пары частиц. В простейшем примере столкновения твёрдых сфер взаимодействие описывается ступенчатой функцией потенциала, зависящей от расстояния между частицами. В таком случае для предсказания времени события необходимо определить момент времени, при котором расстояние между частицами будет равно сумме их радиусов, а обработка события заключается в изменении скоростей частиц на основе закона сохранения импульса.

Однако не все используемые на практике потенциалы адекватно представляются в виде ступенчатых функций. Например, часто применяемый при моделировании методом молекулярной динамики потенциал Морзе, описываемый выражением (3)

$$U(r) = D \cdot (\exp(-2\alpha(r - \sigma)) - 2\exp(-\alpha(r - \sigma))) \quad (3)$$

в случае представления в виде ступенчатой потенциальной ямы, теряет свойство притяжения частиц. Тем не менее, возможность эффективного расчёта момента времени событий сохраняется только для достаточно простых законов перемещения частиц, что ограничивает область прямого применения потенциала Морзе классическим методом молекулярной динамики. В связи с этим, для более точного описания взаимодействия частиц с применением событийно-управляемого подхода используется кусочно-линейная аппроксимация непрерывного потенциала. В случае потенциала, представленного в виде кусочно-линейной функции от расстояния между частицами, частицы перемещаются под действием постоянной силы в интервалах между узловыми точками функции потенциала. Определение момента времени события перехода к следующей узловой точке для двух частиц эквивалентно определению момента времени столкновения частиц с услов-

ным диаметром, равным расстоянию, соответствующему этой узловой точке. Обработка события заключается не в изменении скоростей взаимодействующих частиц, а в изменении суммарных сил, действующих на частицу путём вычитания силы, соответствующей предыдущему расстоянию, и добавления силы, соответствующей новому расстоянию. Добавление в процесс моделирования событий, изменяющих силы взаимодействия, создаёт возможность использования возникающего в системе динамического равновесия для сокращения вычислительных затрат. Например, после выхода частицы на круговую орбиту, расчёт событий взаимодействия с центром вращения автоматически прекращается.

Используемые приёмы оптимизации позволяют адаптировать процесс моделирования согласно как статическим (состав системы частиц), так и динамическим (использование заморозки частиц в областях низкой интенсивности исследуемого процесса) харак-

теристикам системы, что обеспечивает высокую эффективность моделирования без излишней специализации метода.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Товбин Ю.К. Метод молекулярной динамики в физической химии. М., Наука, 1996. 334 с.
2. Boris D. Lubachevsky. How to simulate billiards and similar systems // J. Comp Phys. 1991. Vol. 94. P. 255–283.
3. Girifalco L.A., Weizer V.G. Application of the Morse potential function to cubic metals // Ibid. 1959. Vol. 114. P. 687.

Белов Тимофей Анатольевич – аспирант каф. вычислительной техники и электроники АлтГУ, тел. (3852) 380-751, e-mail: SignOfOne@yandex.ru;
Иордан Владимир Иванович – к.ф.-м.н., доцент каф. вычислительной техники и электроники АлтГУ, тел. (3852) 380-751, e-mail: jordan@phys.asu.ru.