

Центр Микро- и наномасштабной динамики
дисперсных систем, БашГУ, Уфа

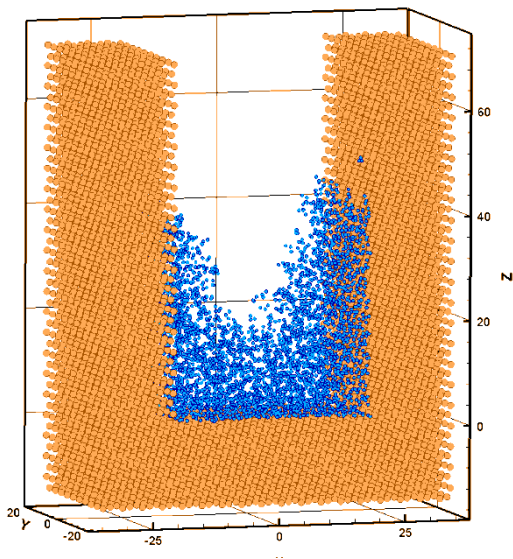
Новая структура данных для расчета ближнего взаимодействия в методах молекулярной динамики

Малышев В.Л.

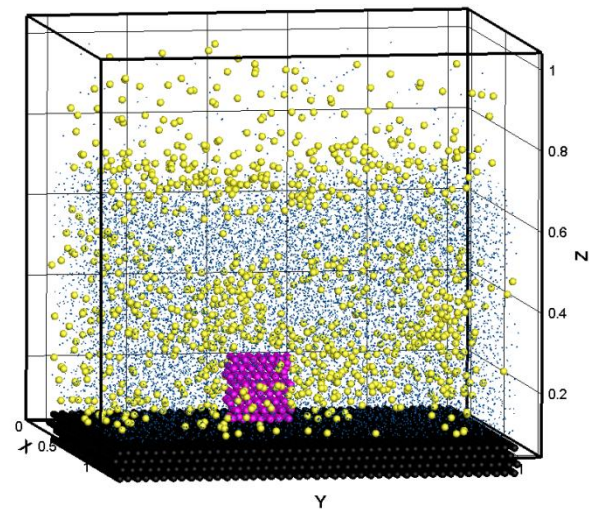
Абрау-Дюрсо, 16-21 сентября, 2013

Применение МД

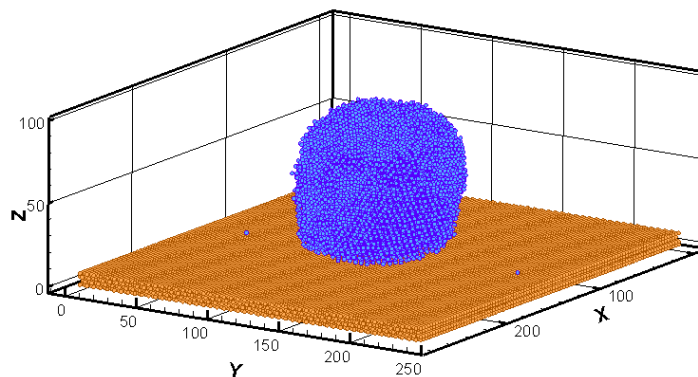
- ◆ Жидкости с различными свойствами
- ◆ Различная геометрия
- ◆ Большие области моделирования



Жидкость в траншее



Частицы на подложке



Капля жидкости на твердой поверхности

Математическая модель

$$F_i = m_i \ddot{r}_i = \sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i)}}^{N_m} f_{ij}$$

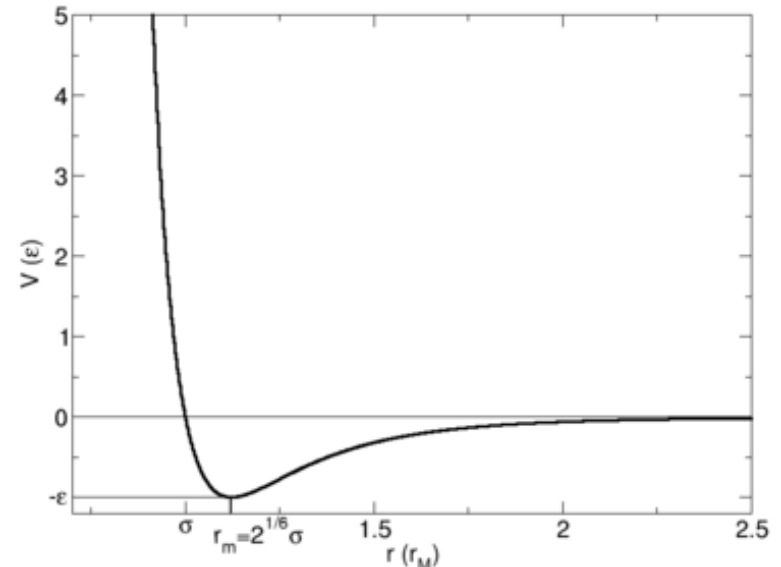
$$F = -\nabla u(r)$$

$$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

$$U(r_{ij}) = \begin{cases} 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], & r_{ij} < r_c \\ 0, & r_{ij} \geq r_c \end{cases}$$

$$f_{ij} = \left(\frac{48}{\sigma^2} \right) \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{14} - \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^8 \right] r_{ij}$$

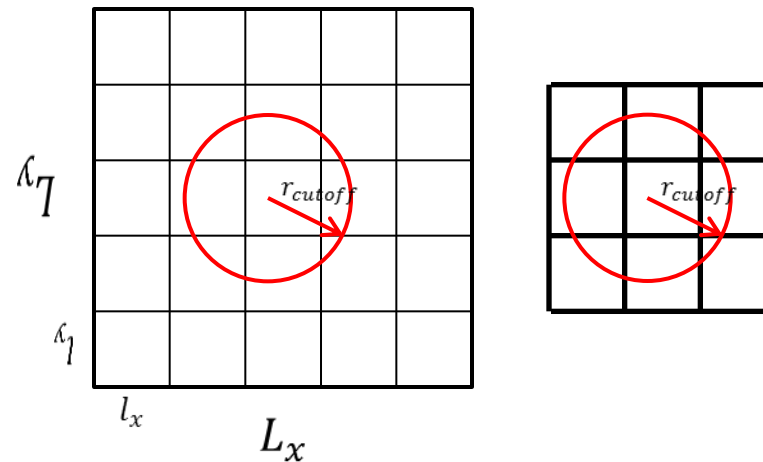
$u(r_{ij})$ – потенциал Леннарда-Джонса
 ε – энергия взаимодействия



Потенциал Леннарда-Джонса

σ – характерное расстояние
 N_m – число молекул

Структура данных



Число боксов в каждом направлении

$$N_{xBox} = \left\lceil \frac{L_x}{r_{cutoff}} \right\rceil \quad N_{yBox} = \left\lceil \frac{L_y}{r_{cutoff}} \right\rceil$$

Размеры бокса

$$l_x = \frac{L_x}{N_{xBox}} \quad l_y = \frac{L_y}{N_{yBox}}$$

Структура данных

Связь между системами нумерации

4	20	21	22	23	24
3	15	16	17	18	19
2	10	11	12	13	14
1	5	6	7	8	9
0	0	1	2	3	4
	0	1	2	3	4

От «декартовой» к «сквозной»

$$n = j \cdot N_{xBox} + i$$

$$[1;3] \rightarrow 16$$

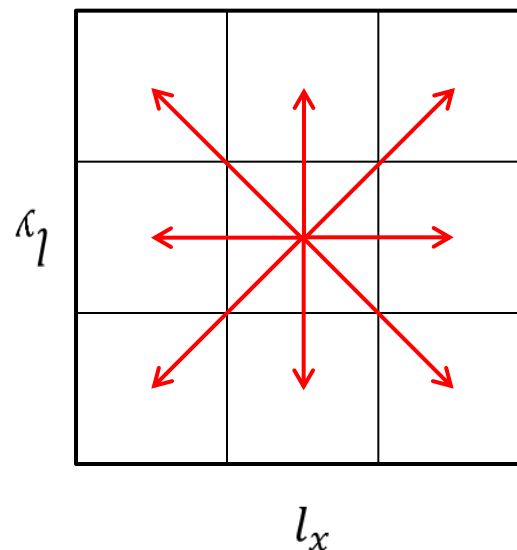
От «сквозной» к «декартовой»

$$i = n - \left[\frac{n}{N_{xBox}} \right] \cdot N_{xBox} \quad j = \frac{n - i}{N_{xBox}}$$

$$14 \rightarrow [4;2]$$

Периодизация системы

4	0	1	2	3	4	0
24	20	21	22	23	24	20
19	15	16	17	18	19	15
14	10	11	12	13	14	10
9	5	6	7	8	9	5
4	0	1	2	3	4	0
24	20	21	22	23	24	20

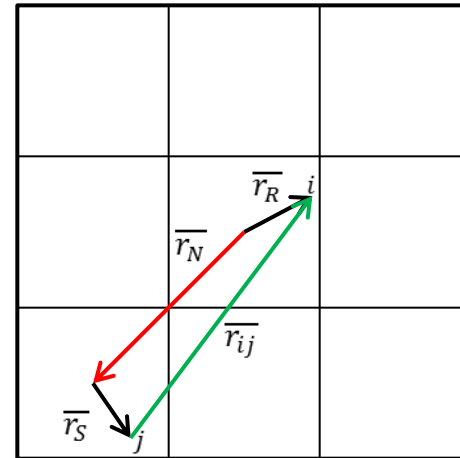


Для бокса с координатами $[i, j]$ соседи:
 $[i - 1, j - 1], [i, j - 1], [i + 1, j - 1], \dots, [i + 1, j + 1]$

Введем вектора соединяющие центры соседних боксов:
 $[-l_x, -l_y], [0, -l_y], [l_x, -l_y], \dots, [l_x, l_y]$

Локальные координаты

4	0	1	2	3	4	0
24	20	21	22	23	24	20
19	15	16	17	18	19	15
14	10	11	12	13	14	10
9	5	6	7	8	9	5
4	0	1	2	3	4	0
24	20	21	22	23	24	20



$$\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$$

$$\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j + L_x$$

$$\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j - L_x$$

Преобразуем все координаты в вектор

$$\vec{r}_i^* = \vec{r}_i - \vec{r}_{BoxCenter(i)}$$

где \vec{r}_i - позиция частицы, $\vec{r}_{BoxCenter(i)}$ - центр бокса, в котором находится i -ая частица.

$$\vec{r}_{ij} = \vec{r}_R - \vec{r}_N - \vec{r}_S$$

Структура данных

Алгоритм построения структуры данных

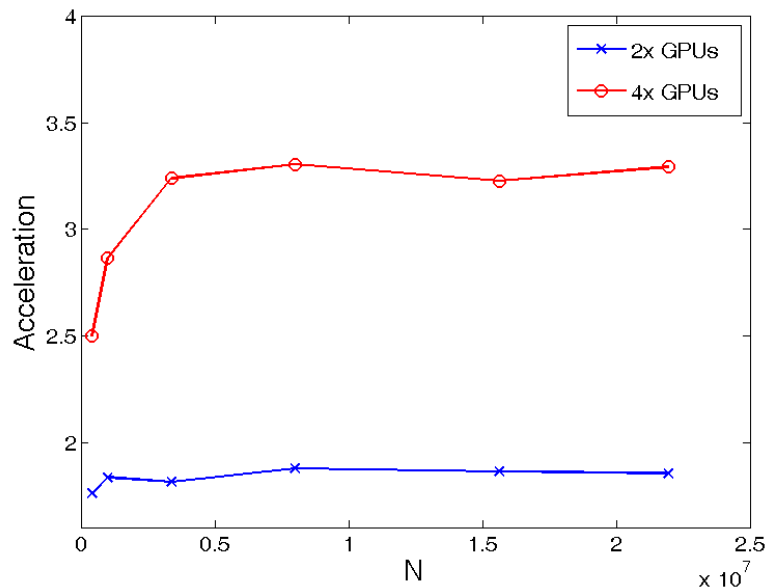
- ◆ Построение сетки. Определение основных параметров: количество боксов, их линейные размеры, порядок нумерации, положение центра каждого бокса.
- ◆ Построение списка соседей для каждого бокса и централизованного вектора соседей.
- ◆ Сортировка частиц по боксам и вычисление "маркеров".
- ◆ Преобразование позиций в локальные координаты.

Результаты

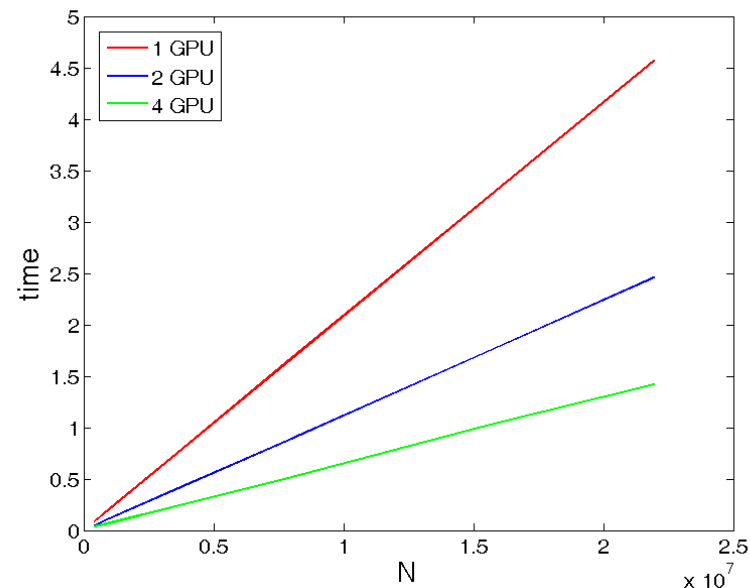
*Intel Xeon 5660 2.8 GHz (всего 24 ядра), 12 GB RAM,
4x GPU NVIDIA Tesla C2075 с 6 GB RAM*



Результаты



Ускорение работы алгоритма при использовании 2х и 4х GPU



Время расчета одного шага алгоритма при использовании multi-GPU

Заключение

- ◆ Построена новая структура данных для расчета ближнего взаимодействия

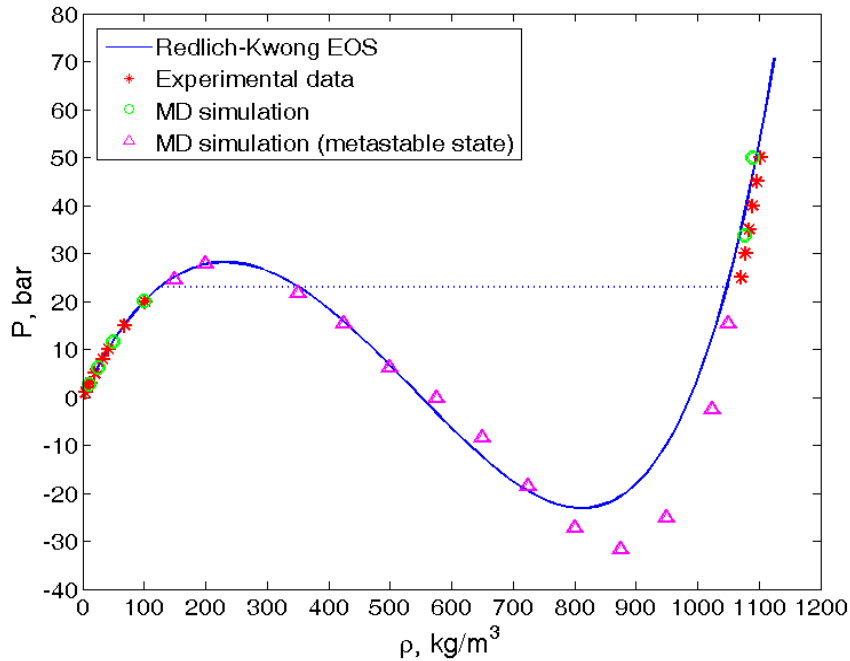
- ◆ Алгоритм написан на языке CUDA с использованием multi_GPU

- ◆ Расчет одного шага алгоритма для 20 миллионов частиц занимает менее 2 секунд

Спасибо за внимание!

Validation

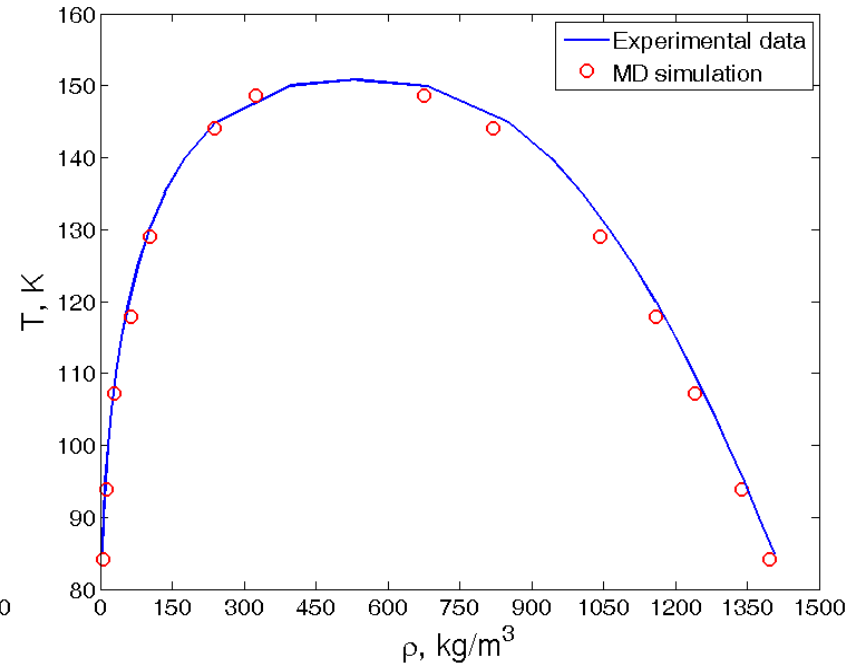
Isotherm T=130K



Redlich-Kwong equation of state

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{T^{0.5}V(V + b)}$$

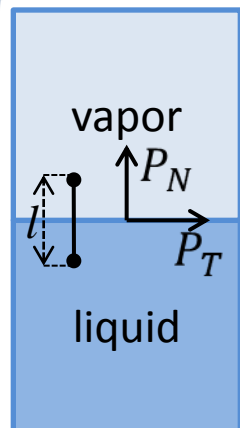
Saturation curve



Pressure computation (MD):

$$PV = NT + \frac{1}{d} \left\langle \sum_{i < j} \vec{r}_{ij} \cdot \vec{f}_{ij} \right\rangle$$

Surface tension

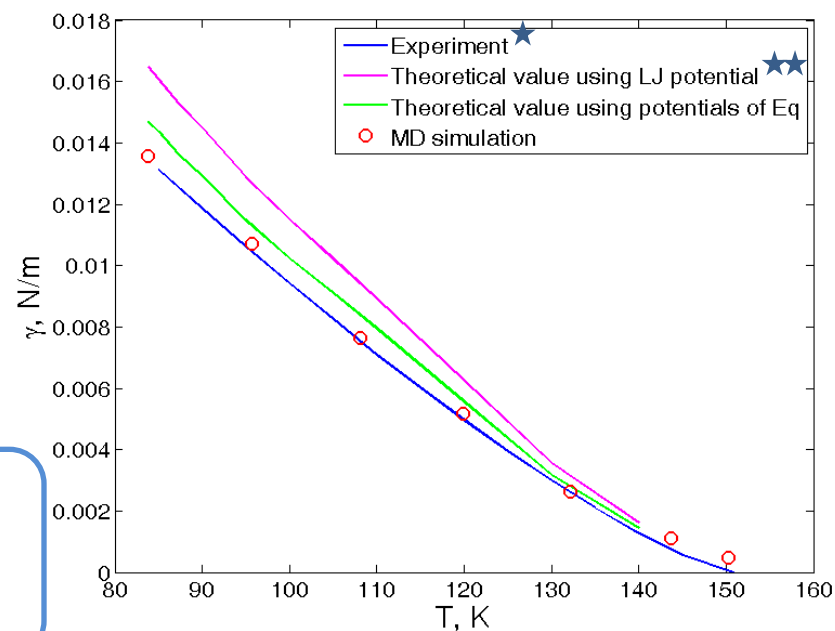


$$\gamma = \int_{-\infty}^{+\infty} [P_N - P_T] dz$$

$$P_N(z) = P_{zz}(z),$$

$$P_T(z) = \frac{P_{xx}(z) + P_{yy}(z)}{2}$$

$$\gamma = \left\langle \sum_{i>j} \sum_j \frac{x_{ij}^2 + y_{ij}^2 - 2z_{ij}^2}{2Ar_{ij}} f_{ij} \right\rangle$$



P_N, P_T - normal and tangential components of traction
 A - area parallel to x-y plane
 f_{ij} - intermolecular force

$$\varepsilon/k_B = 119.8 K$$

$$\sigma = 3,405 \times 10^{-10} m$$

$$M = 0,03994 \text{ kg/mol}$$

- ★ E. A. Guggenheim, J. Chern. Phys. 13, 253 (1945)
- ★★ J. A. Barker and D. Henderson, Rev. Mod. Phys. 48, 587 (1976)