



Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
механико-математический факультет

МЕТОД СОБЫТИЙНОГО МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ДИНАМИКИ РАЗРЕЖЕННОГО ГАЗА

А.Н. Якунчиков

Семинар

«Суперкомпьютерные технологии в науке, образовании и промышленности»

НОЦ «Суперкомпьютерные технологии», МГУ, 2 апреля 2018



КАФЕДРА ИНЖЕНЕРНОЙ
МЕХАНИКИ И ПРИКЛАДНОЙ
МАТЕМАТИКИ



ЛАБОРАТОРИЯ
МНОГОМАСШТАБНОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ

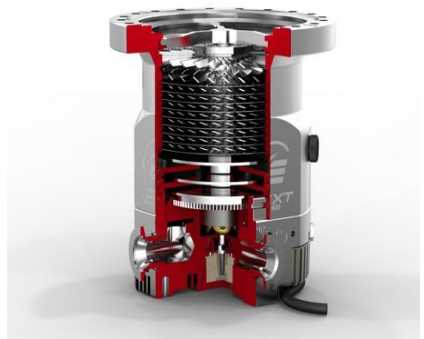


ЛАБОРАТОРИЯ
НАНОМЕХАНИКИ
НИИМ МГУ

www.enmech.ru

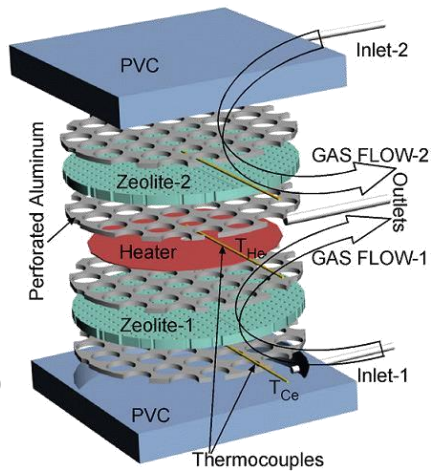
www.multiscale.ru

Течения в вакуумных системах

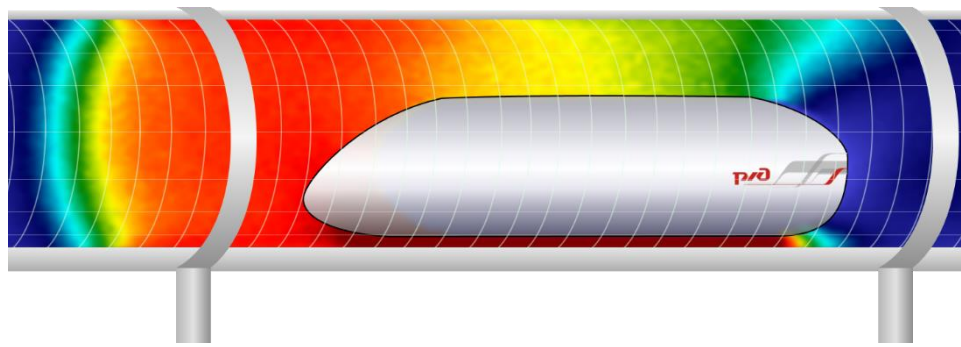


Turbomolecular pump, TMP

Течения в MEMS и пористых средах

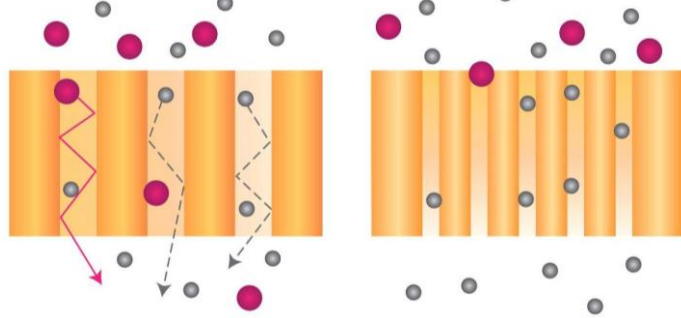


Высокоскоростные вакуумно-левитационные транспортные системы



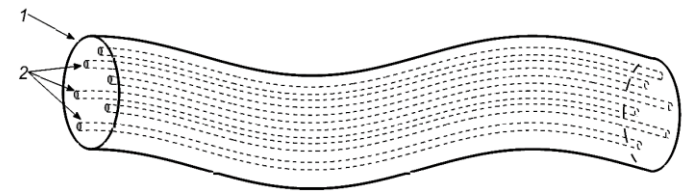
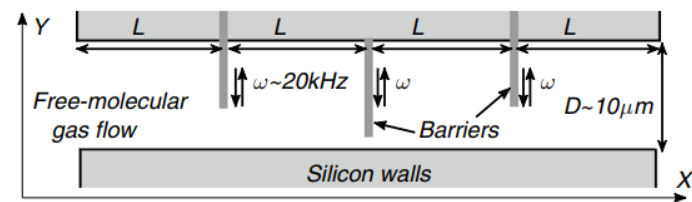
Сьюрпум
Криотехника

Сепарация в мембранах



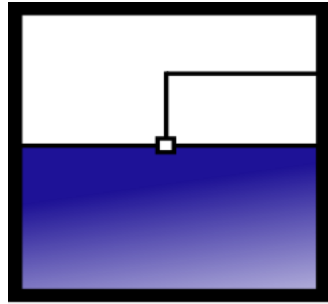
Диффузионные мембраны

Молекулярное сито

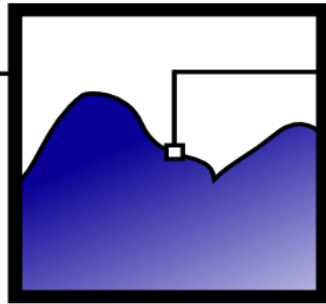


Течения в областях с подвижной и деформирующейся границей

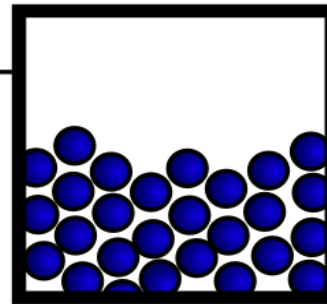
Уровни описания



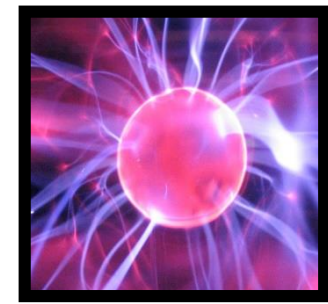
macro



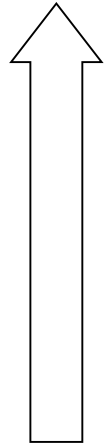
micro



nano



Квантово-химические расчеты



Механика сплошной среды



Методы кинетической теории, прямое статистическое моделирование (DSMC), **Событийное молекулярно-динамическое моделирование (EDMD)**



Молекулярно-динамическое моделирование (MD)

потенциалы взаимодействия

ядро рассеяния, модели релаксации при межмолекулярных столкновениях и т.п.

граничные условия

Методы

DSMC

EDMD

MD

Event-Driven Molecular Dynamics

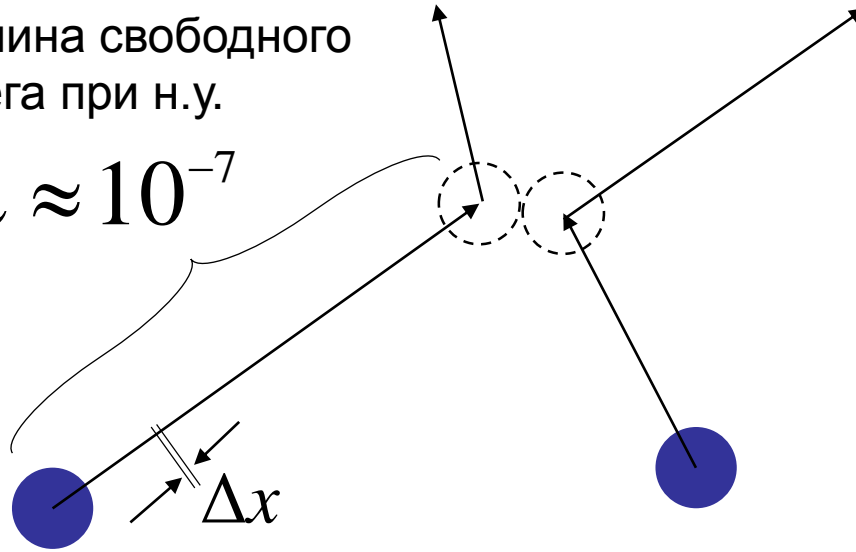
По ресурсоемкости и уровню
детализации модели EDMD
находится между DSMC и MD

Метод бессеточный!

- [1] B.J. Alder, T.E. Wainwright, Studies in molecular dynamics. General method, J. Chem. Phys. 31 (1959) 459. doi:10.1063/1.1730376.
- [2] S. Miller, S. Luding, Event-driven molecular dynamics in parallel, J. Comput. Phys. 193 (2004) 306–316. doi:10.1016/j.jcp.2003.08.009.
- [3] A. Donev, A.L. Garcia, B.J. Alder, Stochastic Event-Driven Molecular Dynamics, J. Comput. Phys. 227 (2008) 2644–2665. doi:10.1016/j.jcp.2007.11.010.
- [4] P. Valentini, T.E. Schwartzentruber, A combined Event-Driven/Time-Driven molecular dynamics algorithm for the simulation of shock waves in rarefied gases, J. Comput. Phys. 228 (2009) 8766–8778. doi:10.1016/j.jcp.2009.08.026.
- [5] M.N. Bannerman, R. Sargant, L. Lue, DynamO: A free O(N) general event-driven molecular-dynamics simulator, J. Comput. Chem. 32 (2011) 3329– 3338. doi:10.1002/jcc.21915.

Средняя длина свободного пробега при н.у.

$$\lambda \approx 10^{-7}$$



MD




$$\Delta t \approx 10^{-15}$$

$$\Delta x = \mathcal{V} \cdot \Delta t \approx 10^3 \cdot 10^{-15} = 10^{-12}$$

$$\frac{\lambda}{\Delta x} \approx 10^5$$

Каждая молекула в своем времени!

Molecule state

-  x, y, z - Координата
-  v_x, v_y, v_z - Скорость
-  t - Момент времени, в который молекула имела эти координату и скорость

Между столкновениями молекула движется по прямой линии

$$\vec{x}_i + \vec{v}_i \cdot (t - t_i)$$

i – номер молекулы

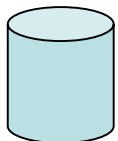
Определение момента столкновения с границей:

Решение линейного или квадратного уравнения:

Виды границ:



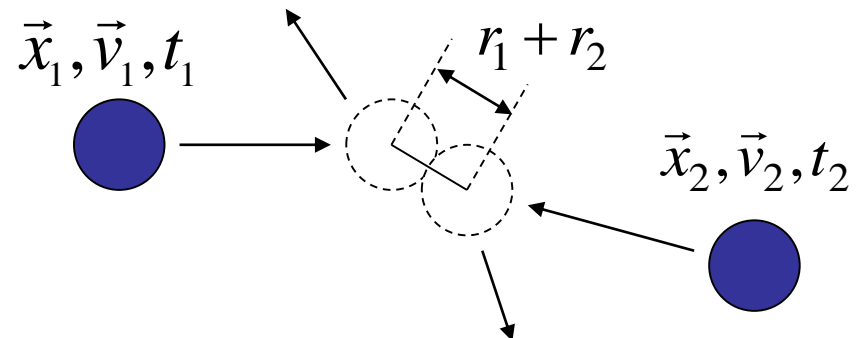
- Плоскости



- Поверхности второго порядка

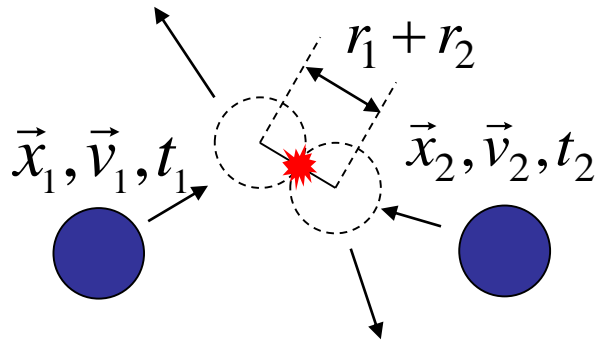
Определение момента столкновения с другой молекулой:

Решение квадратного уравнения:

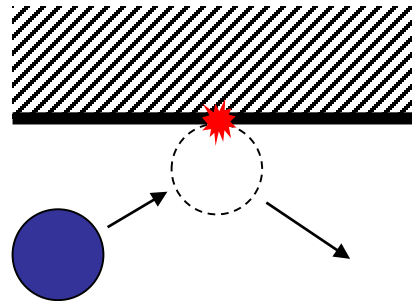


События

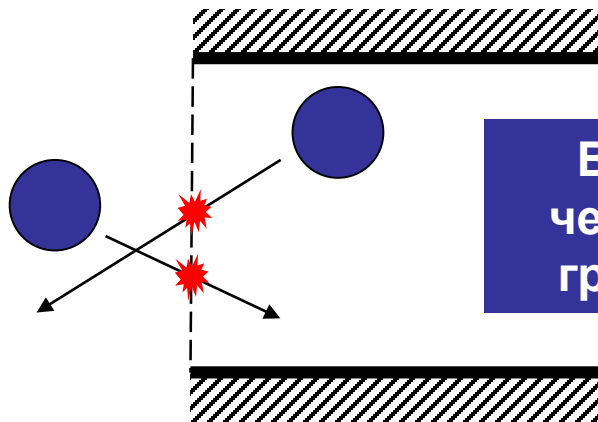
Межмолекулярное
столкновение



Столкновение с
поверхностью

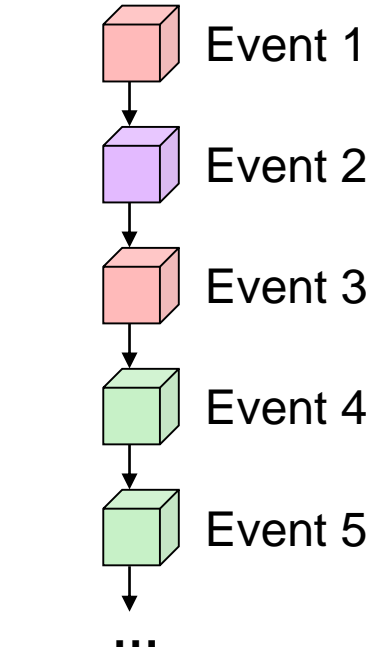


Вход и выход
через открытую
границу задачи



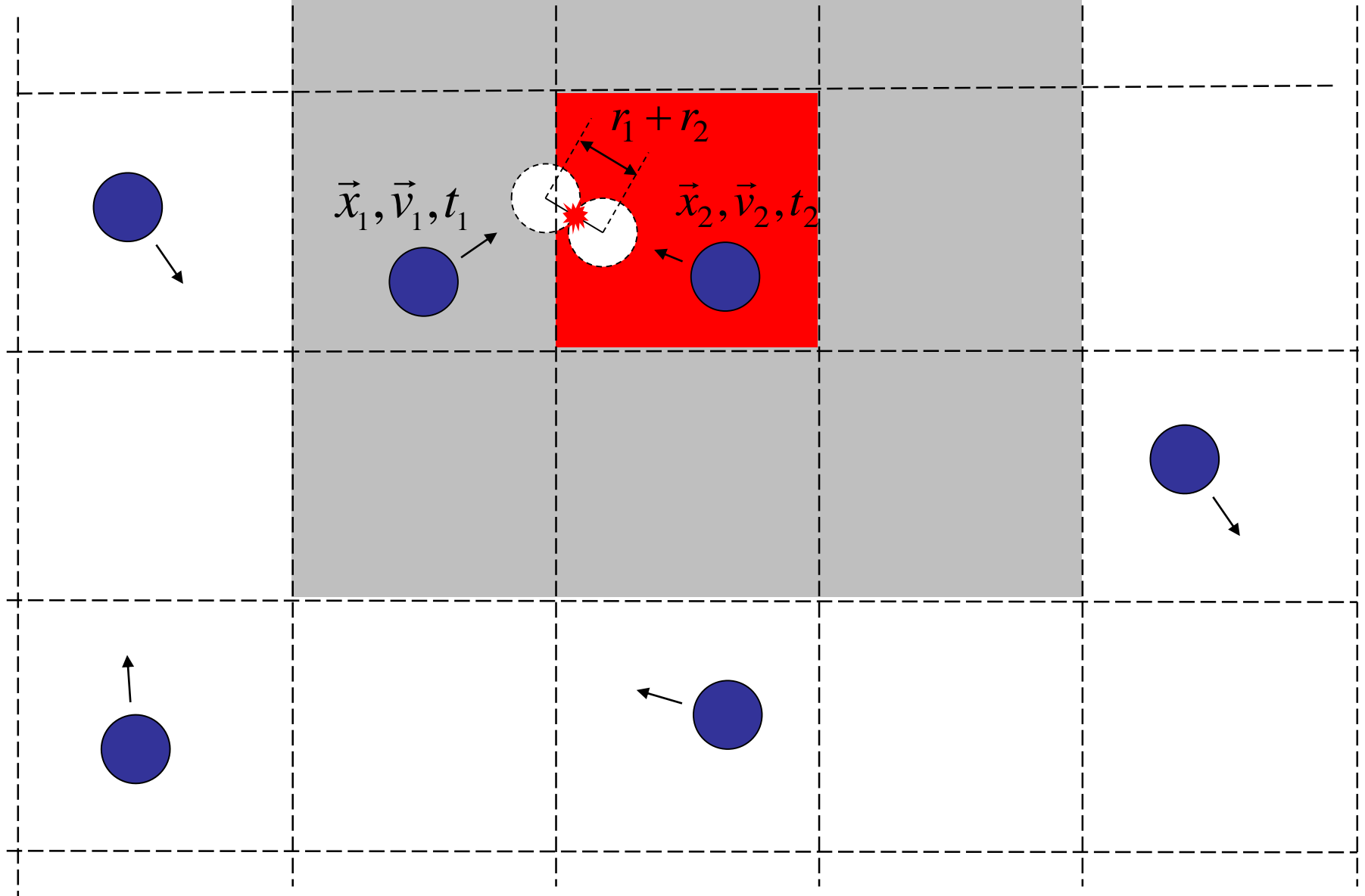
Очередь событий

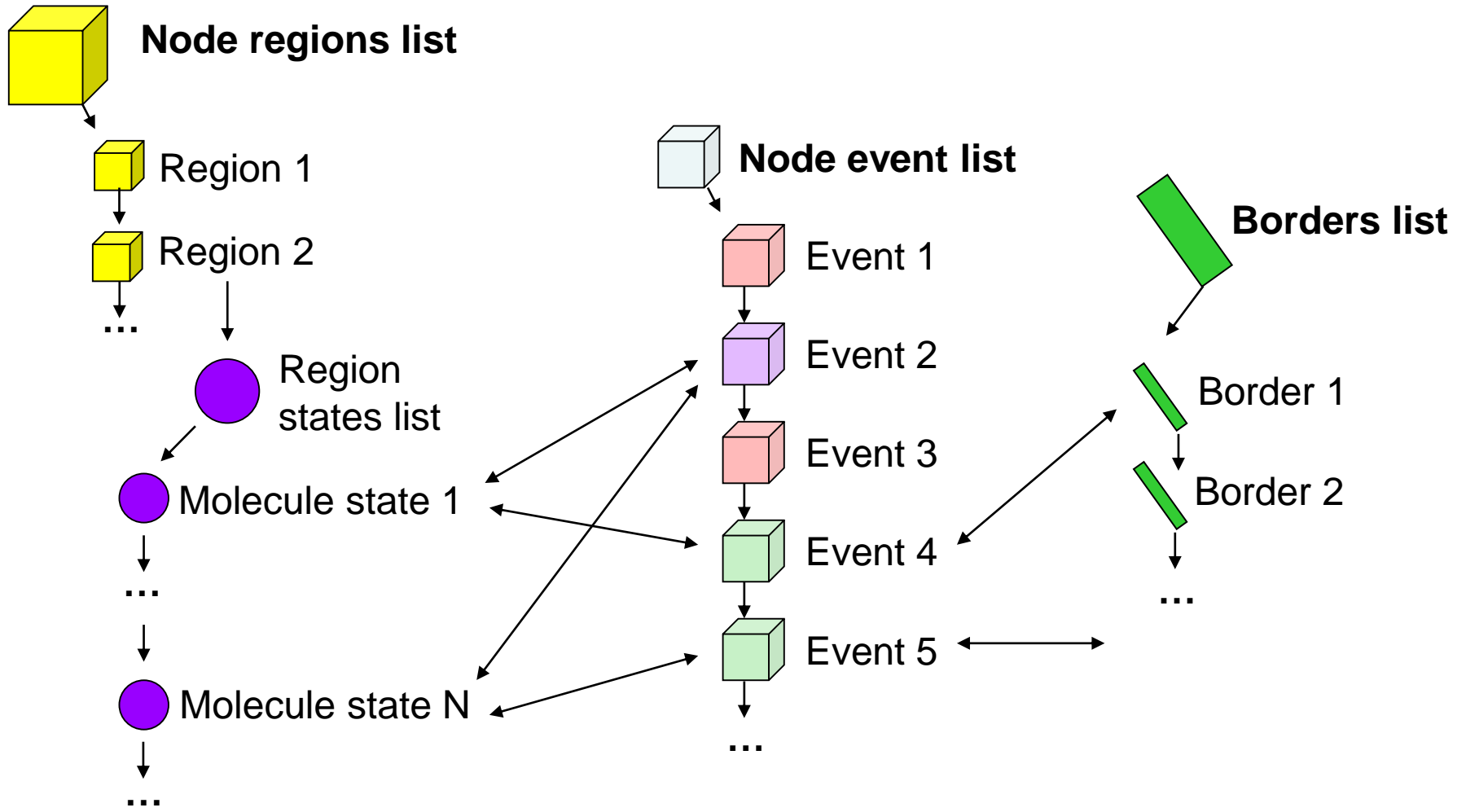
Node event list



Размер очереди
событий –
порядка количества
молекул в системе

Задача многих тел





Очередь событий

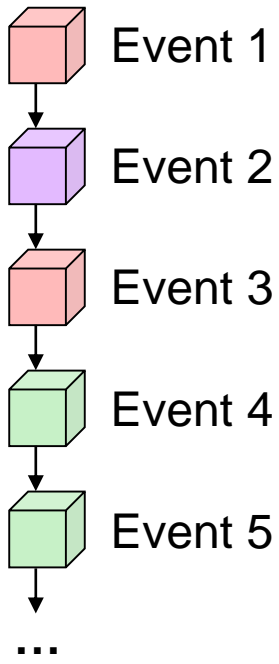
Варианты реализации

Сортированный список

Хеш-функция

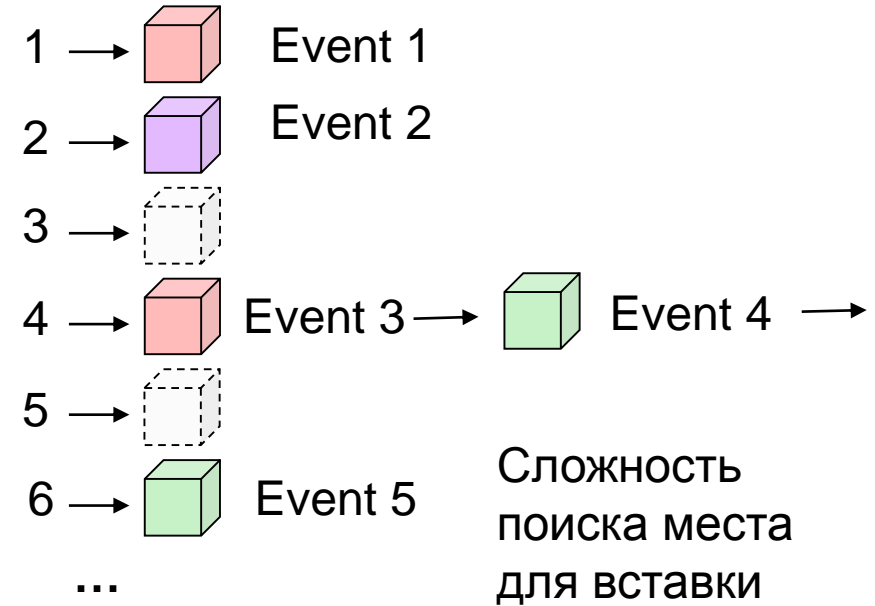
$$a(t) = \frac{t}{\delta} \bmod S$$

 Node event list



Сложность
поиска места
для вставки
события $\ln N$

a



Сложность
поиска места
для вставки
события = 1

Граничные условия

1. Поверхность твердого тела – полная аккомодация импульса и энергии

Плотность вероятности
для скорости после
столкновения

$$\rho(\vec{u}) = \frac{2\beta_w^4 u_n}{\pi} \exp(-\beta_w^2 u^2)$$

2. Открытая граница – равновесные условия с заданной числовой плотностью, средней скоростью и температурой

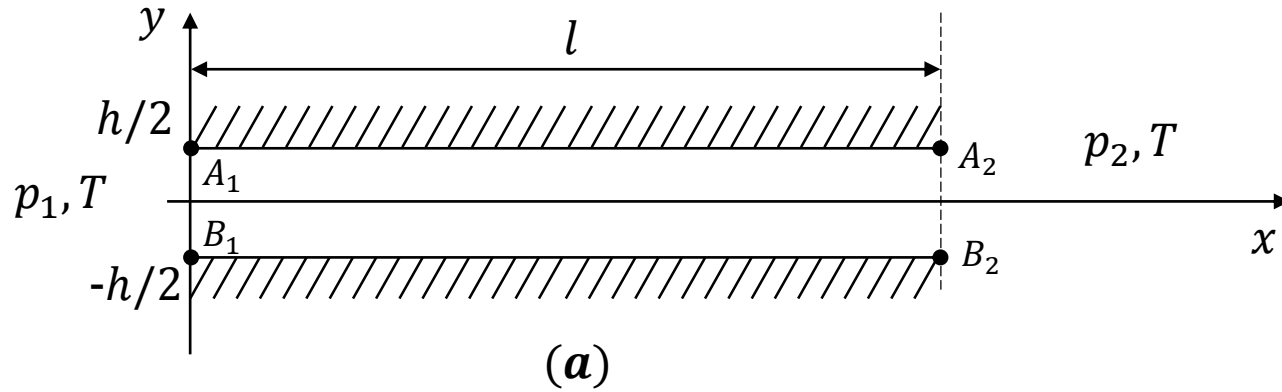
$v = (J_1 S)^{-1}$ – частота рождения частицы, где поток частиц:

$$J_1 = n \left(\frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \right)^3 \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} u_n \exp(-\beta^2 (\vec{u} - \vec{v})^2) d\vec{u} = \frac{n}{2\sqrt{\pi}\beta} \left(\exp(-\beta^2 v_n^2) + \sqrt{\pi}\beta v_n \operatorname{erfc}(-\beta v_n) \right)$$

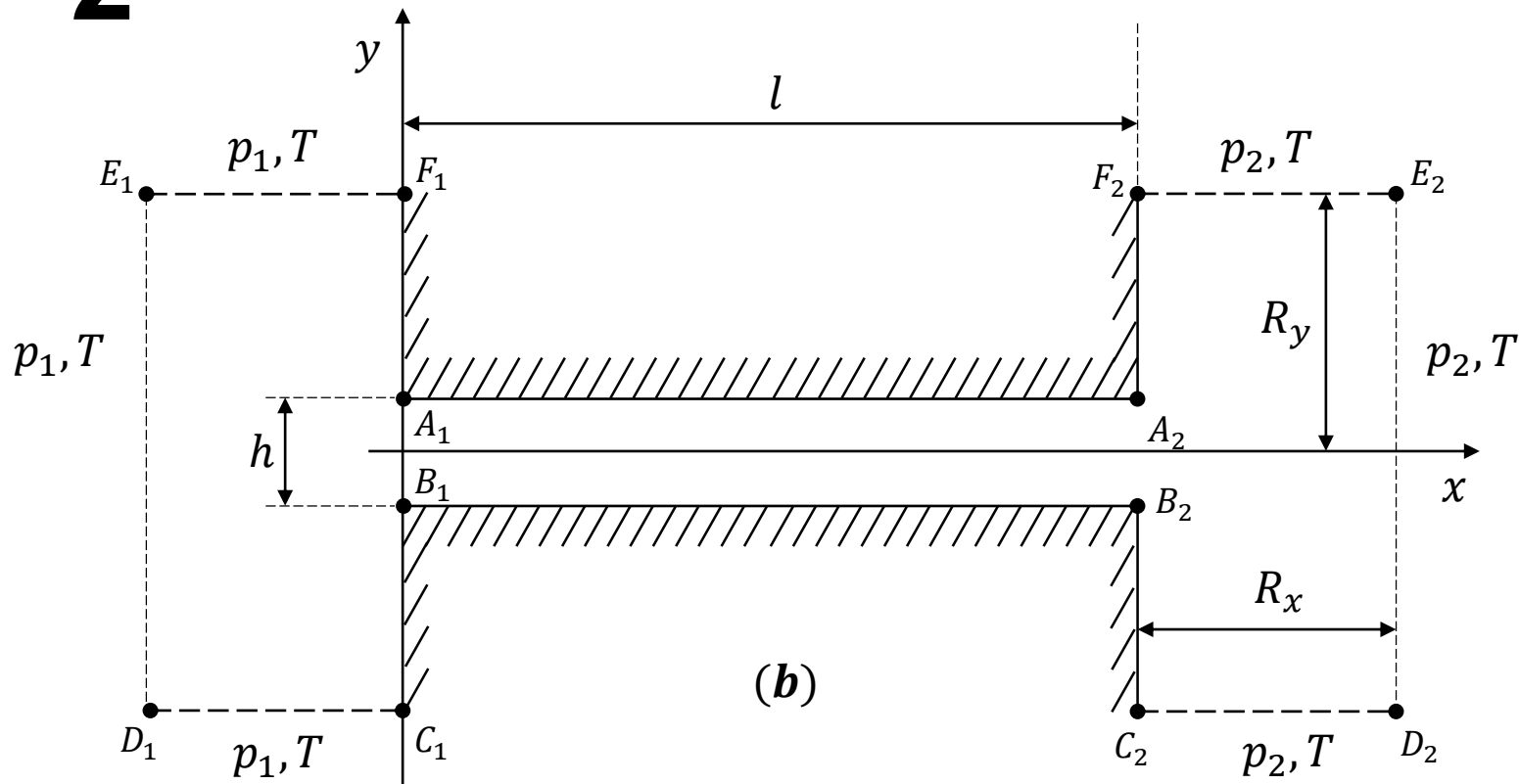
Плотность вероятности для скорости

$$\rho(\vec{u}) = \frac{n}{J_1} \left(\frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \right)^3 u_n \exp(-\beta^2 (\vec{u} - \vec{v})^2) = \frac{2\beta^4 u_n \exp(-\beta^2 (\vec{u} - \vec{v})^2)}{\pi \left(\exp(-\beta^2 v_n^2) + \sqrt{\pi}\beta v_n \operatorname{erfc}(-\beta v_n) \right)}$$

1

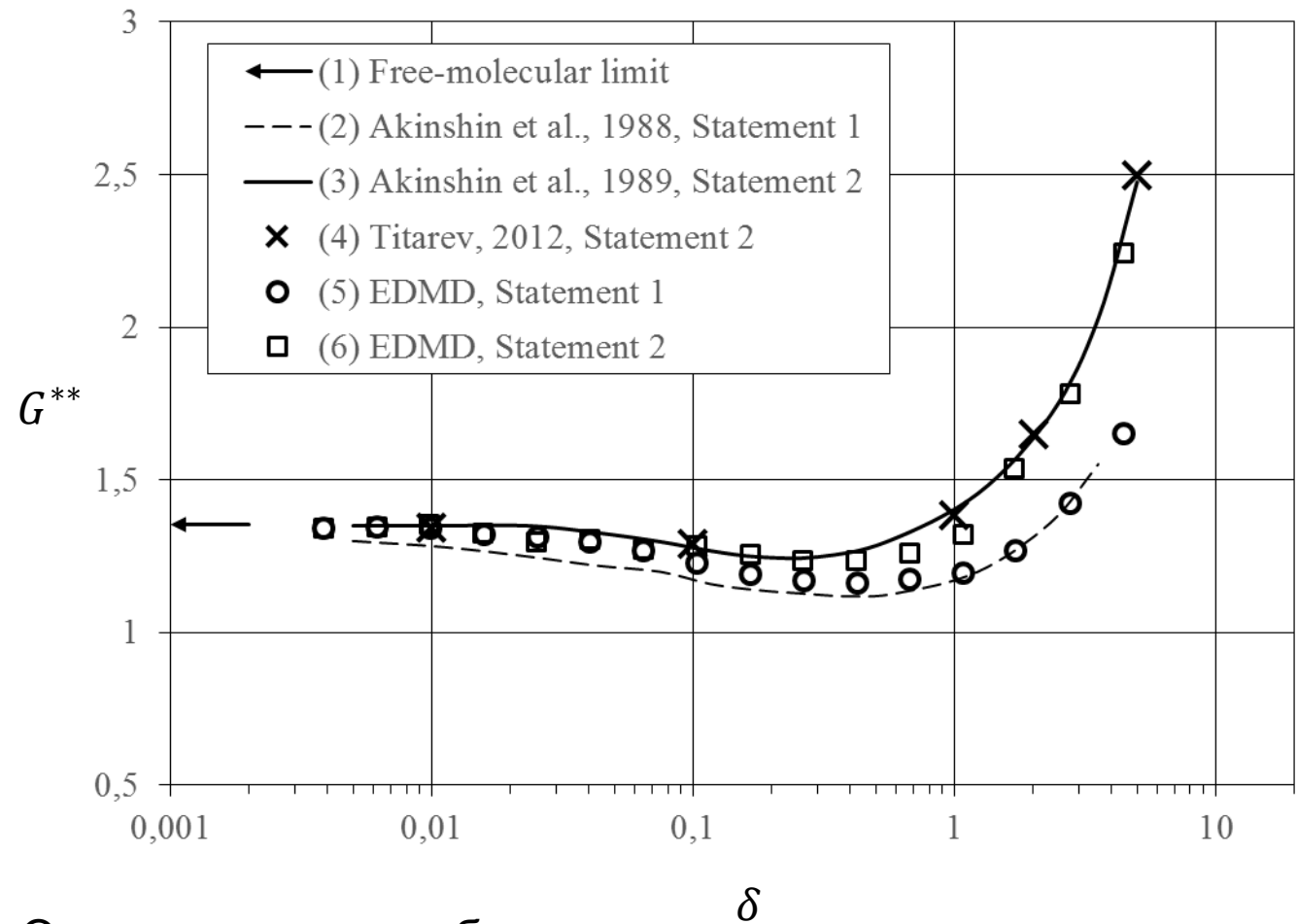


2



$$p_1/p_2 = 1.1$$

Тестовые расчеты № 1 – Течение в плоском канале



$$G = -\frac{(p_2 - p_1)}{l} \frac{h^2}{\sqrt{2RT}} G^{**}$$

$$\delta = h \sqrt{\pi} / (4\lambda)$$

$$p_1/p_2 = 1.1$$

П1 – $0.5 \cdot 10^6$ частиц
 П2 – $2 \cdot 10^6$ частиц

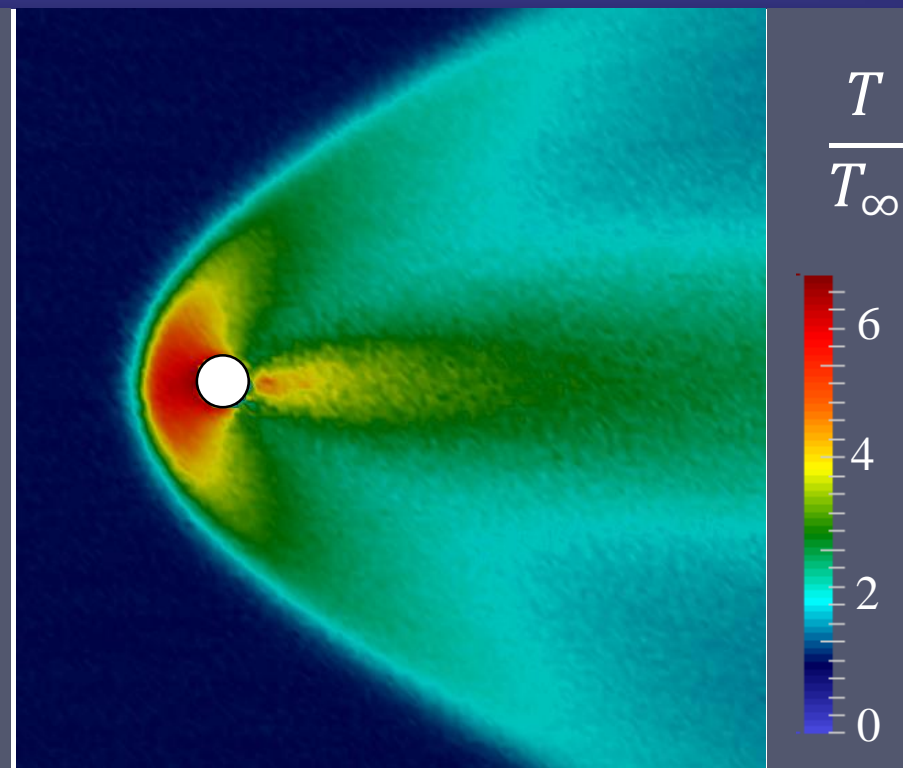
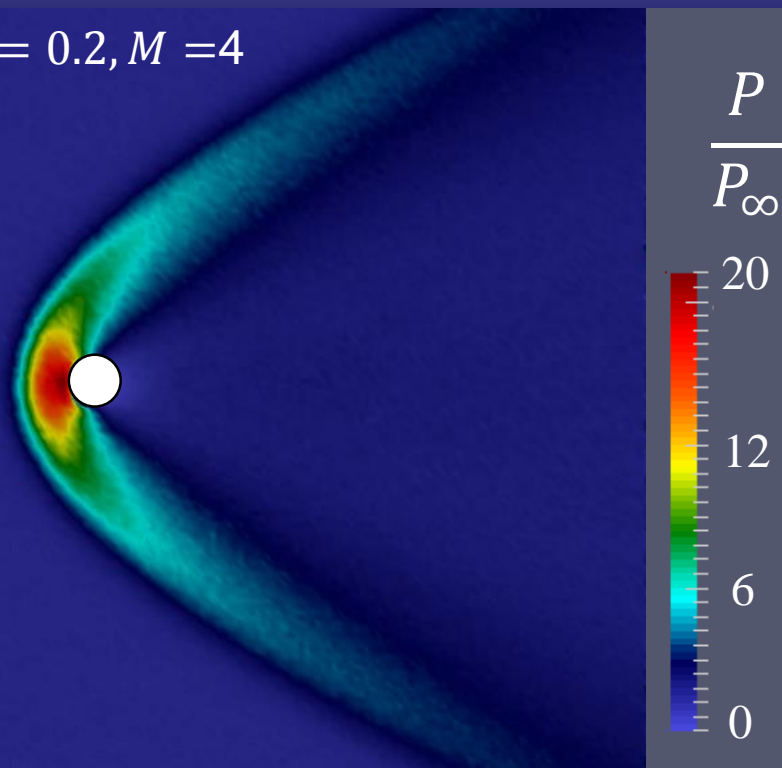
Относительная ошибка
 массового расхода

$$e = \frac{\sigma}{a\sqrt{N}} = \frac{2}{N_+ - N_-} \sqrt{\frac{N_+ N_-}{N}} < 1\%$$

СК Ломоносов (Intel Xeon X5570 2.93GHz)
 Statement 1 – less than **400MB RAM per core**
 Statement 2 – **1.3GB RAM per core**
50 hours

Тестовые расчеты № 2 – Сверхзвуковое обтекание цилиндра

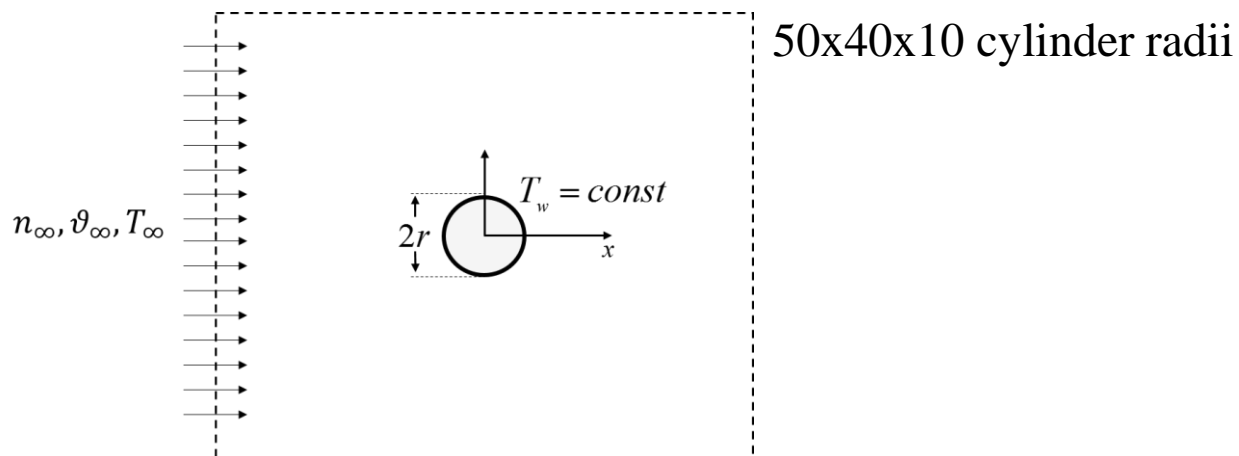
$$Kn = 0.2, M = 4$$



$$Kn = \lambda_\infty / 2r$$

$$M_\infty = v_\infty / \sqrt{\gamma R T_\infty}$$

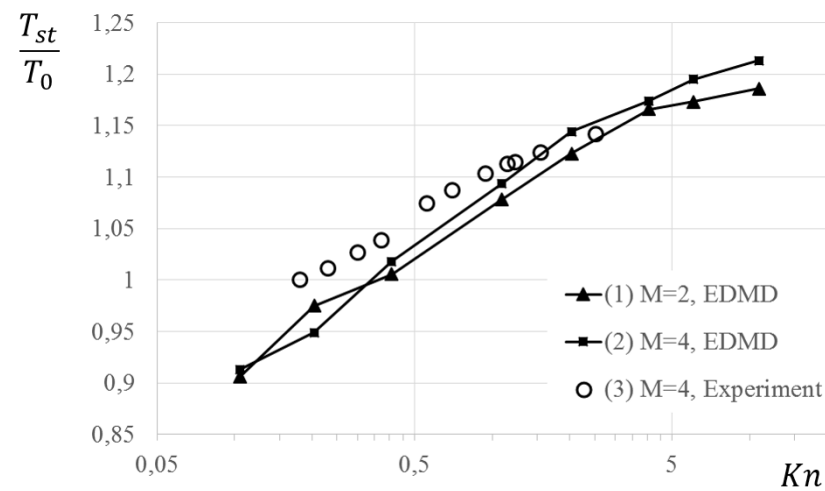
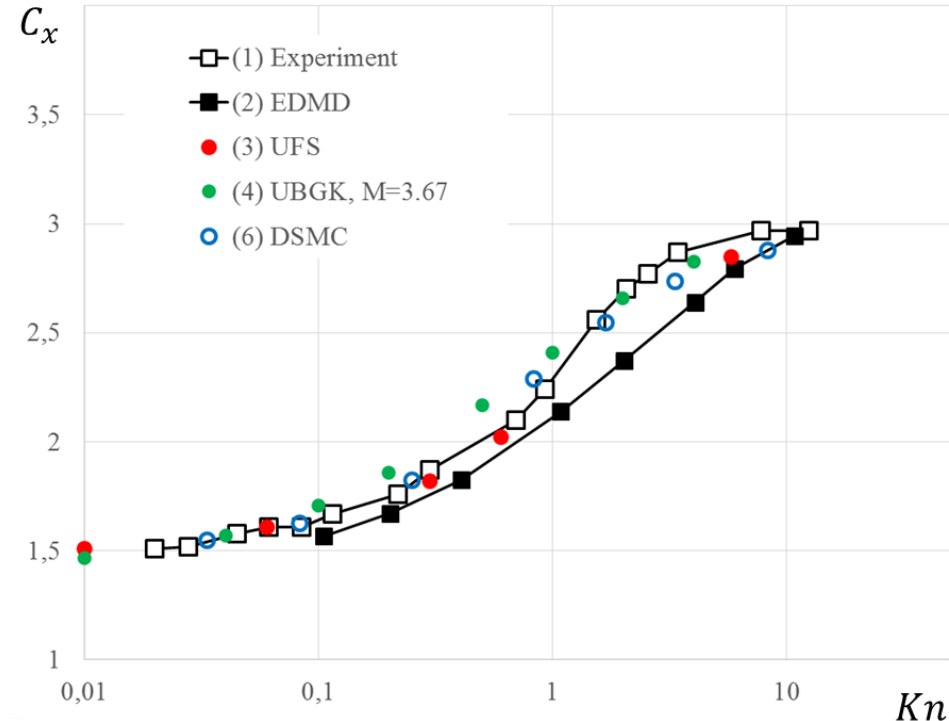
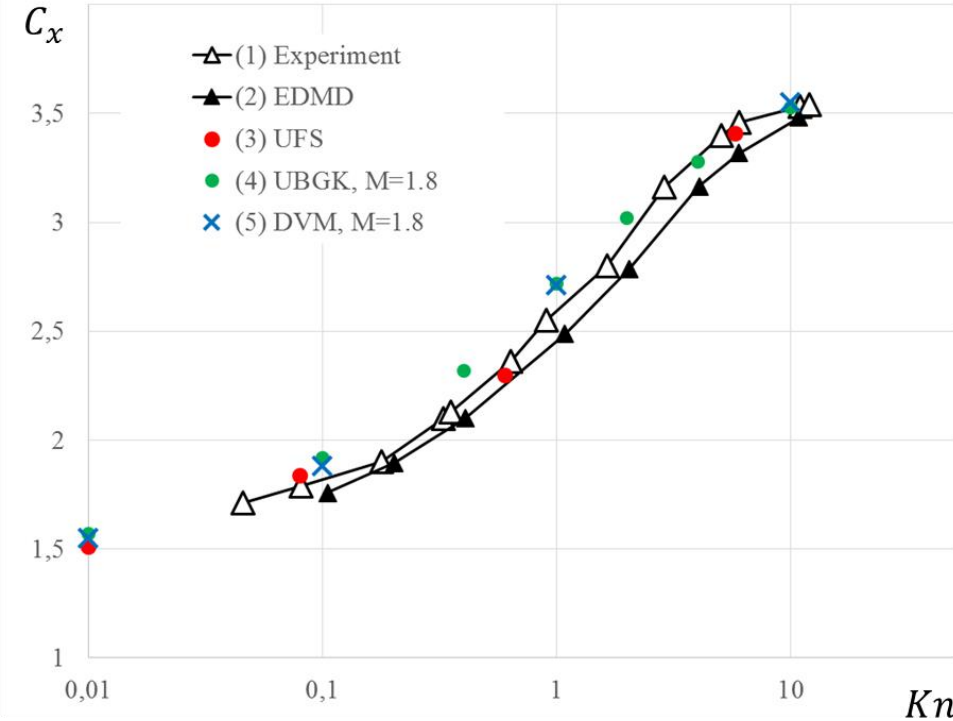
$$Re = \sqrt{\gamma \pi / 2} M_\infty / Kn$$



Тестовые расчеты № 2 – Сверхзвуковое обтекание цилиндра

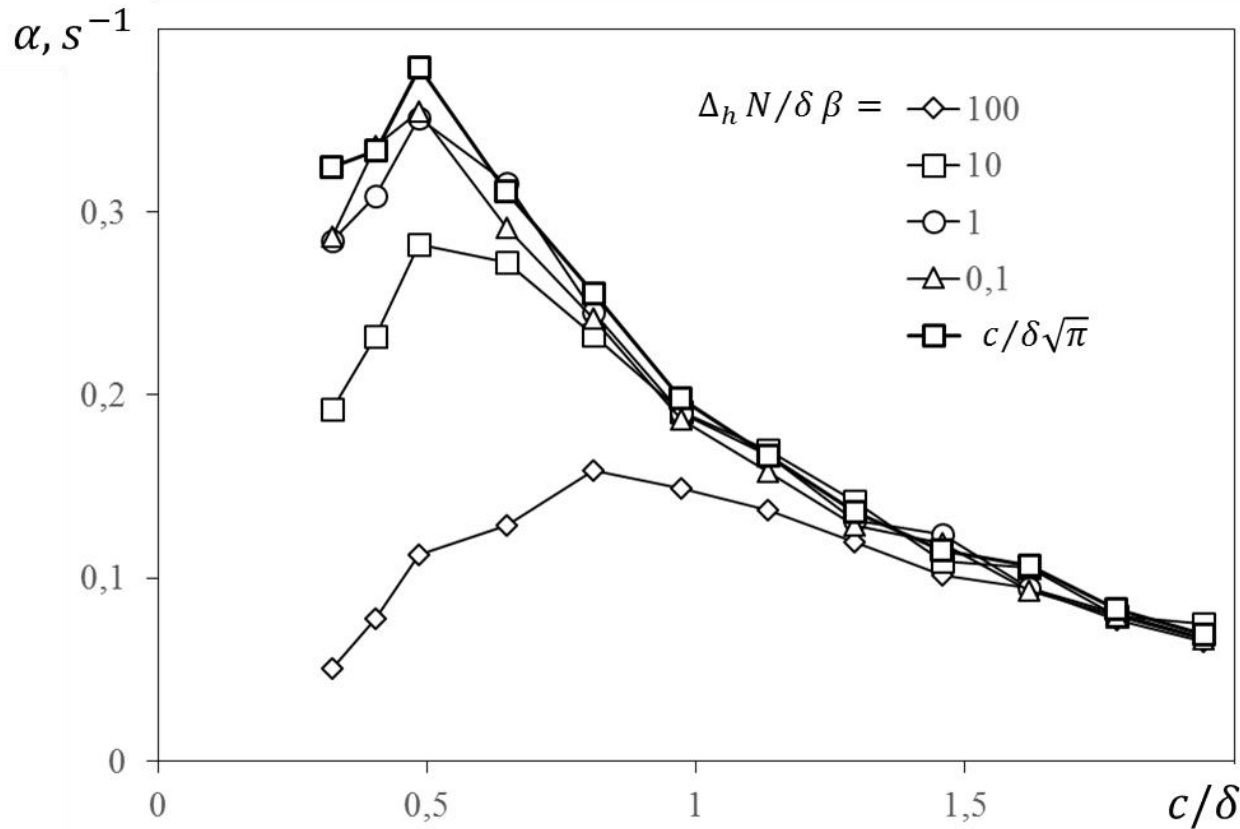
(a) $M=2$

(b) $M=4$



$\sim 10^6$ частиц на ядро
 СК Ломоносов (Intel Xeon X5570
 2.93GHz) 10 hours

У метода 2 параметра: размер ячейки и шаг хеш-таблицы
(результат расчета от них не зависит, но зависит его скорость)



$$\tau = t/\delta\beta,$$

$$t - \text{dimensional time, } \delta = n^{-1/3},$$

$$\alpha = \Delta\tau/\Delta t_c$$

Оптимальные значения

$$\Delta_h = c \beta / \sqrt{\pi} N$$

$$\frac{c}{\delta} = \frac{1}{2}$$

\Downarrow

Количество ячеек должно быть примерно **в 8 раз** больше количества частиц!

Скорость счета задачи на разных процессорах

(задача о течении в канале между двумя резервуарами)

По 1 задаче на каждое ядро

= 2 млн частиц на ядро, 1.3GB RAM на ядро

Intel Xeon X5570
2.93GHz

Intel Xeon E5-2697 v3
2.60GHz

$Kn = 0.1$

0.115

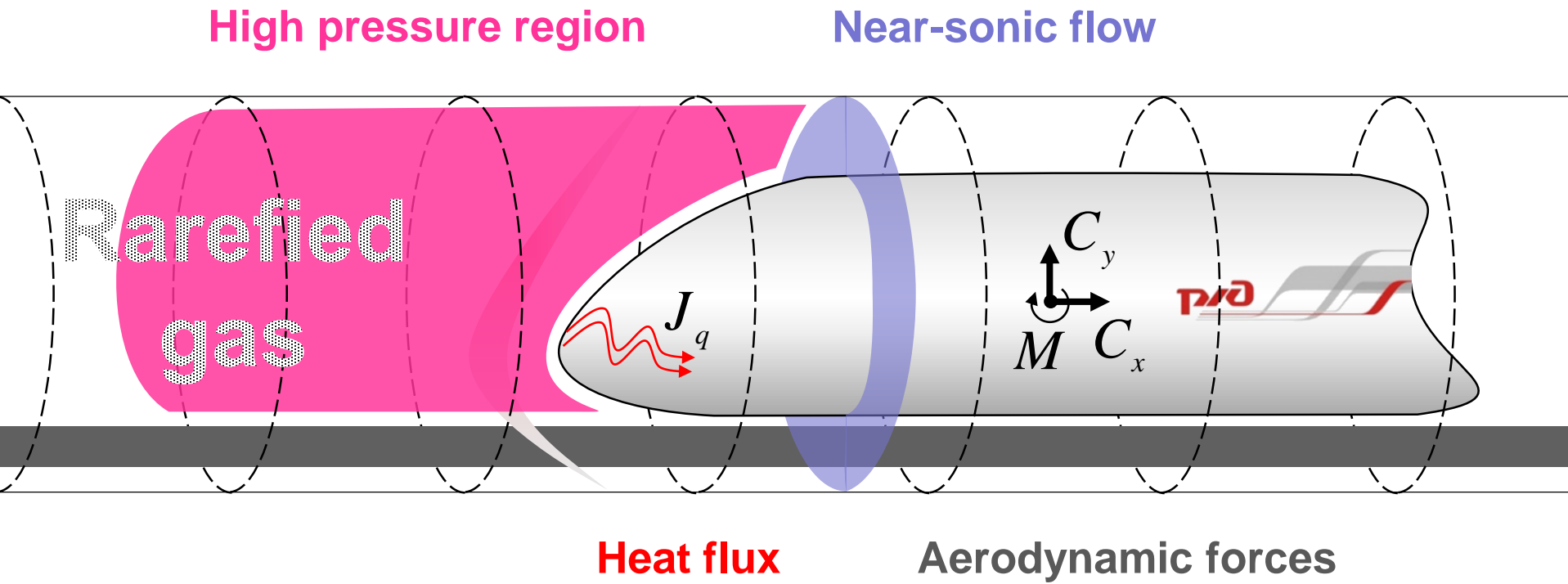
0.23

$Kn = 100$

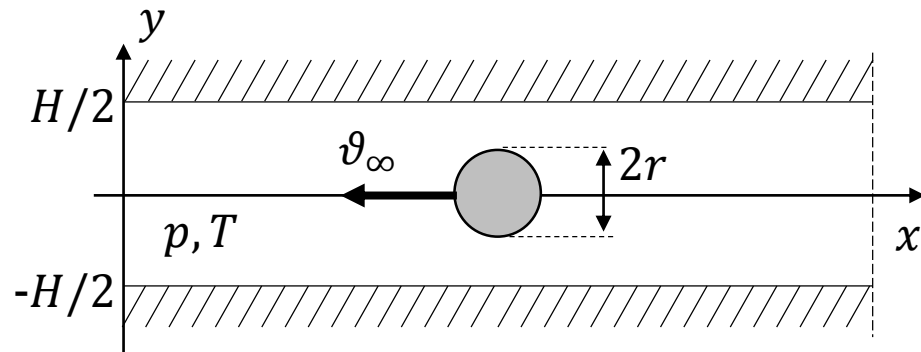
1.38

2.28

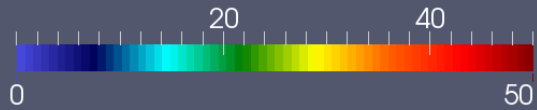
Приведена скорость счета задачи – **в пикосекундах физического времени за секунду машинного**



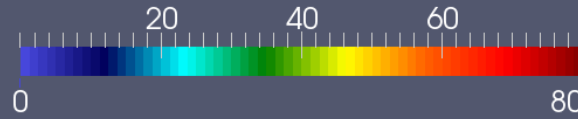
Сверхзвуковое движение тела в трубе



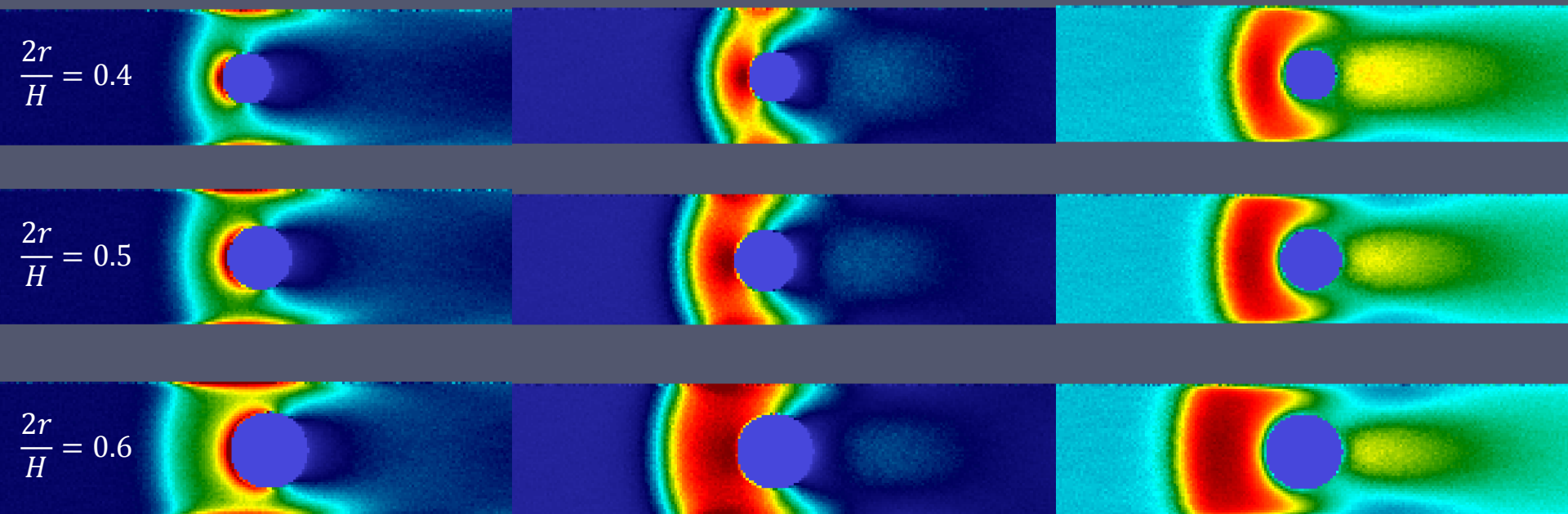
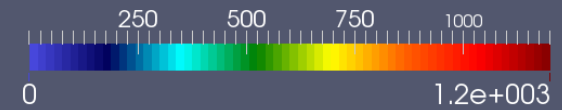
Density(kg/m³)



Pressure

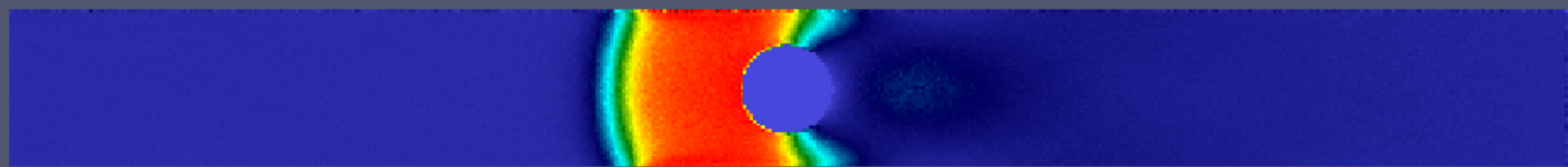
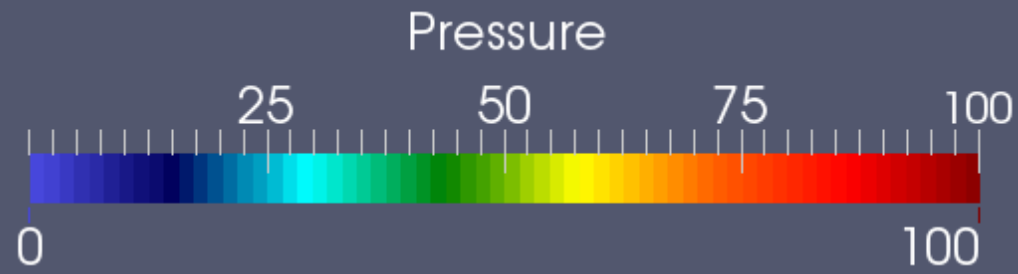
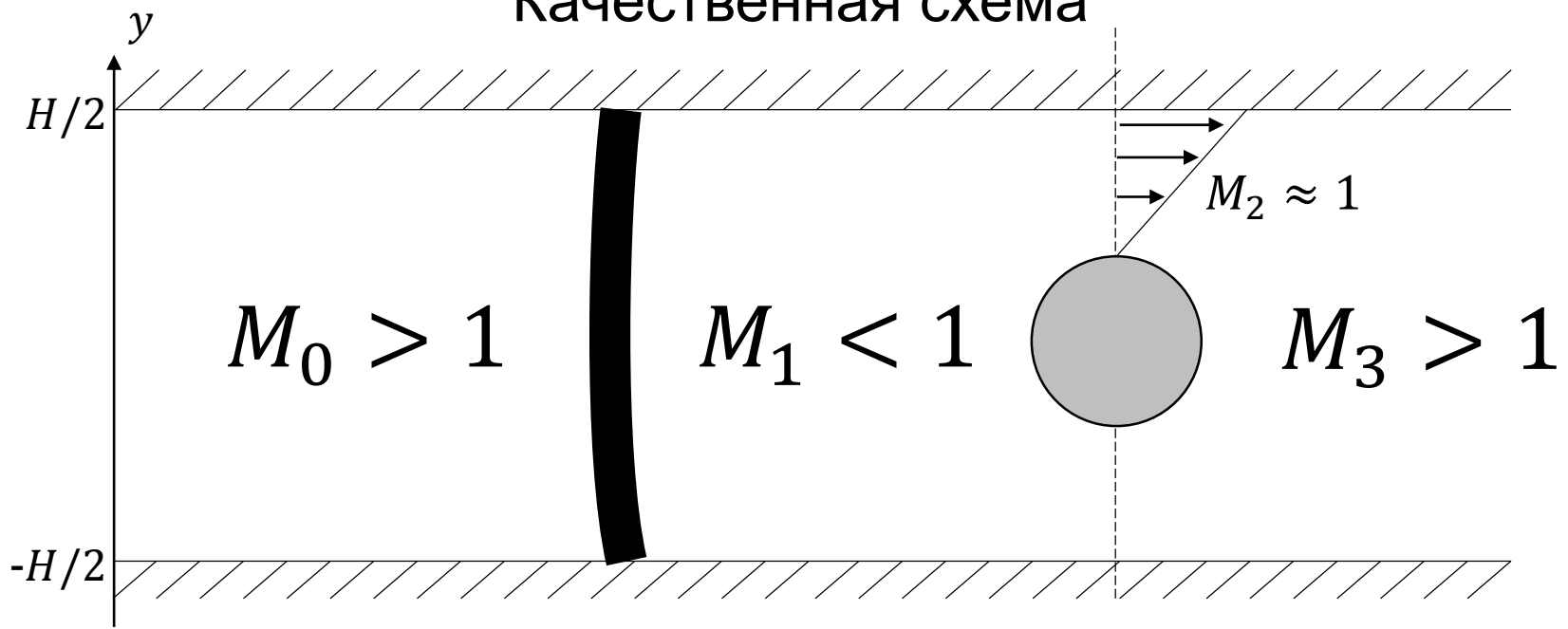


Temperature(K)

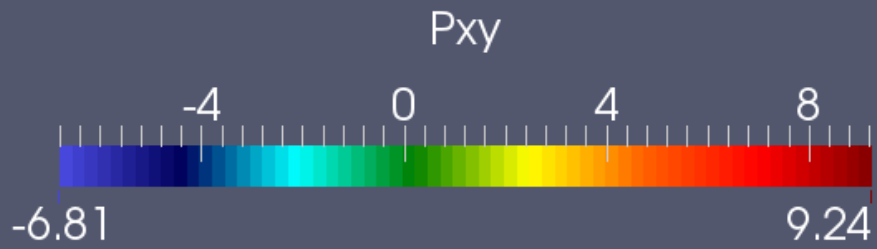


$$M = 3, Kn = 0.1, T_w = T_\infty$$

Качественная схема

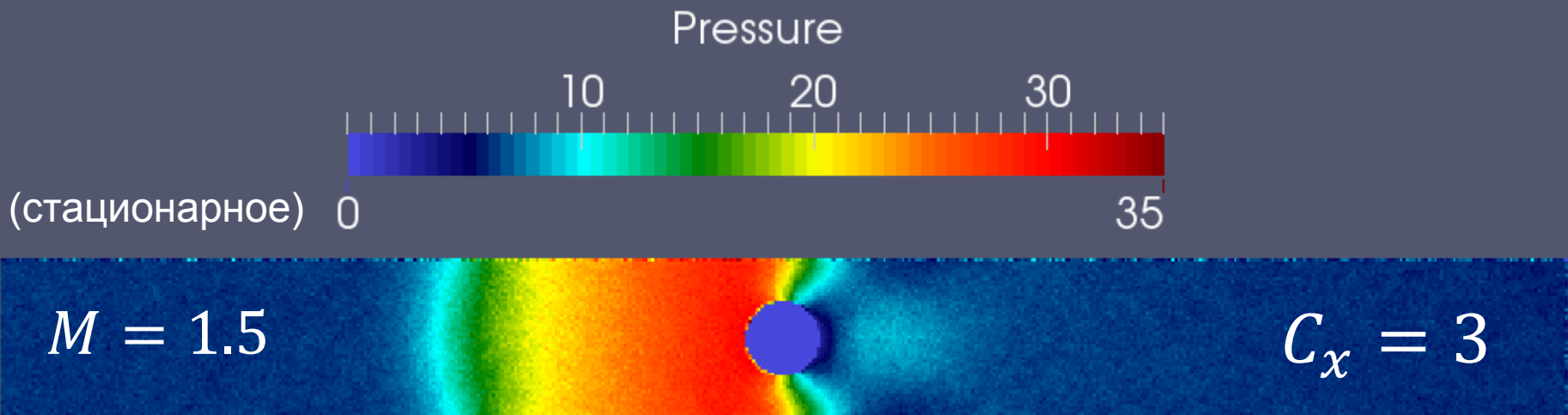
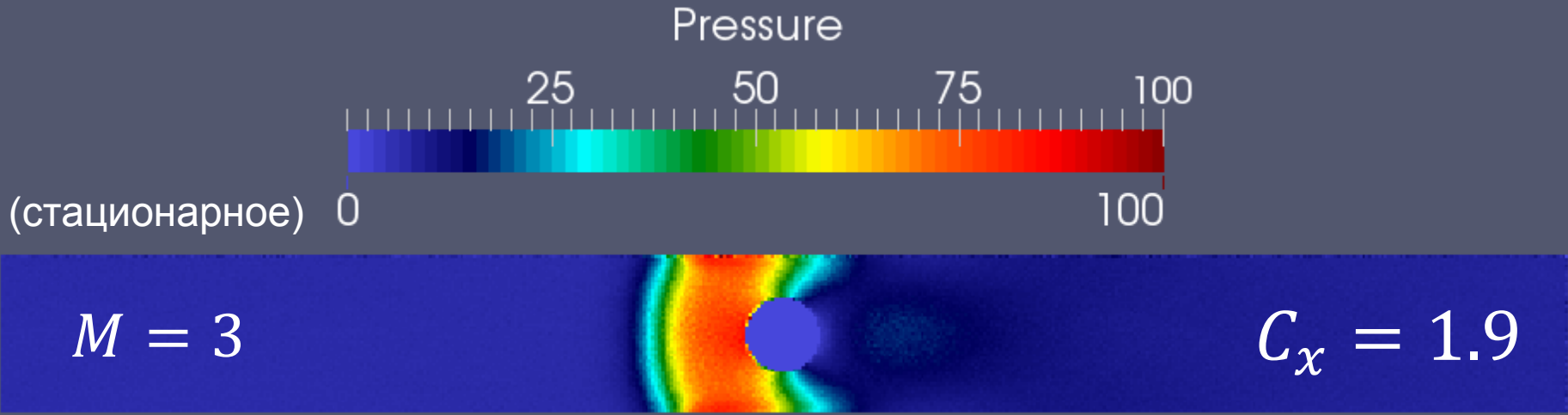


Результаты

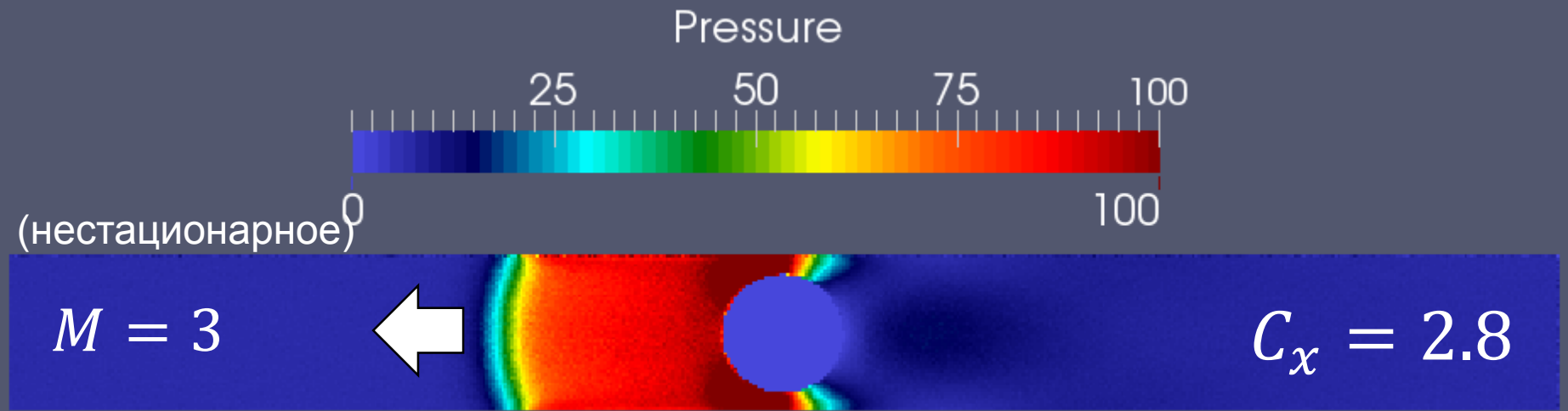
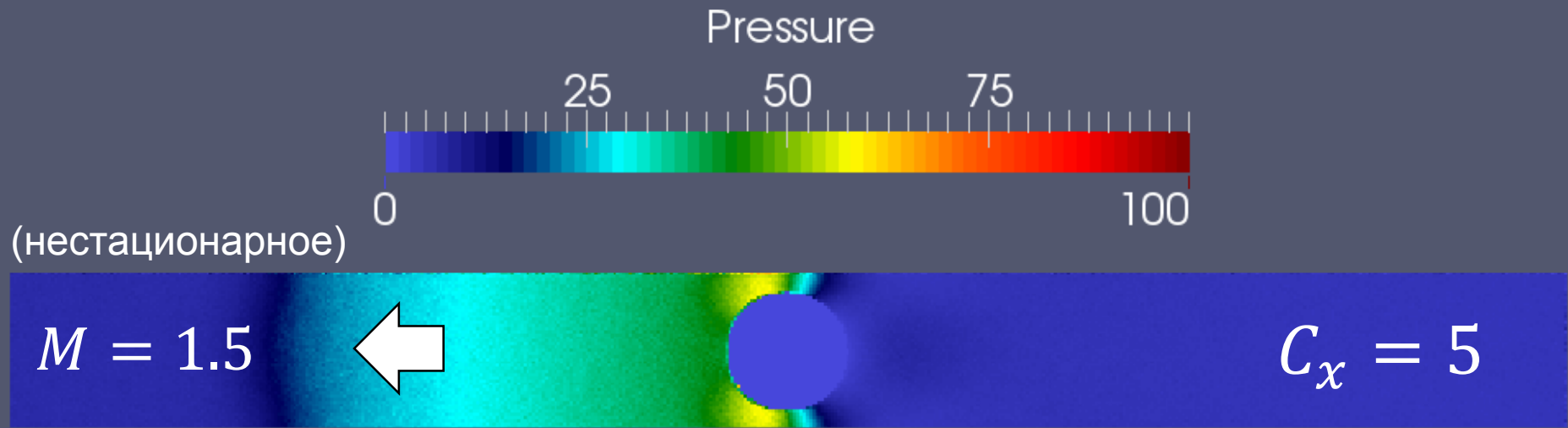


$$M = 1.5, Kn = 0.1, T_b = T_0, D = 0.5H$$

$$Kn = 0.1, T_b = T_0, D = 0.5H$$

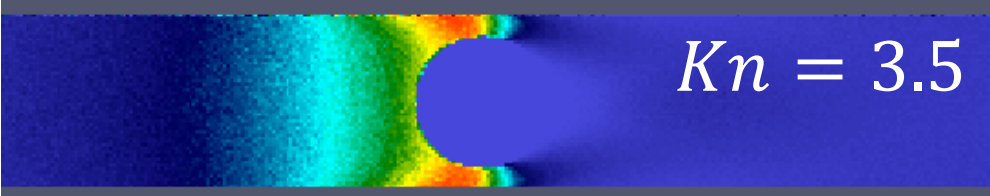
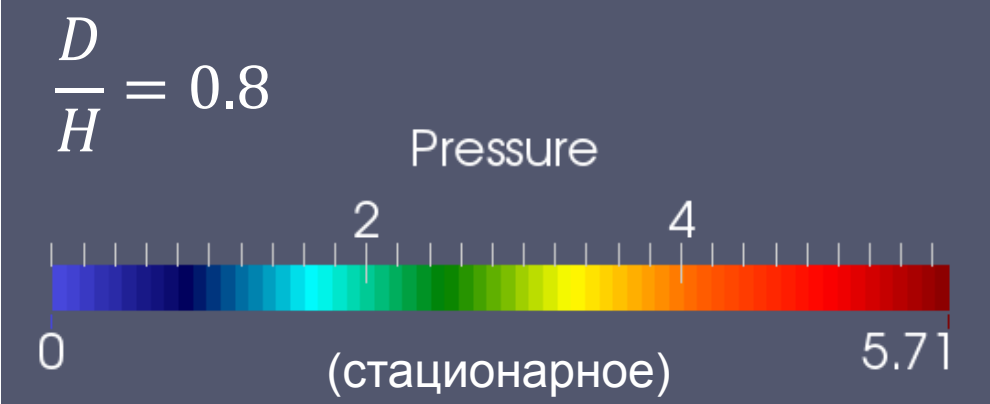
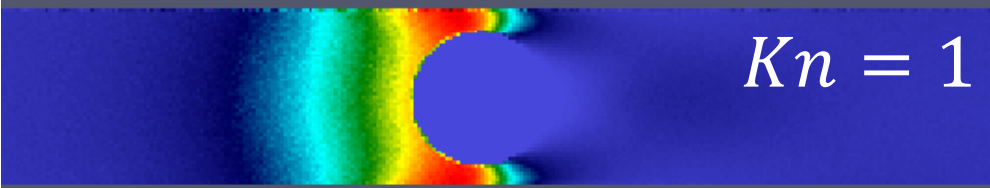
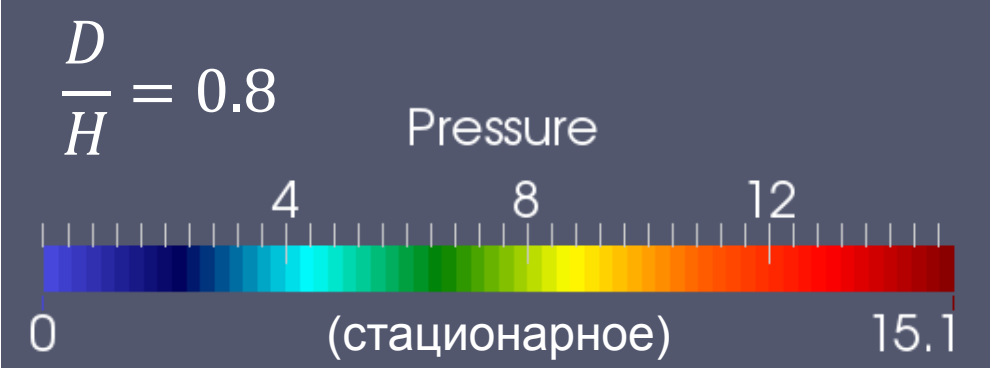
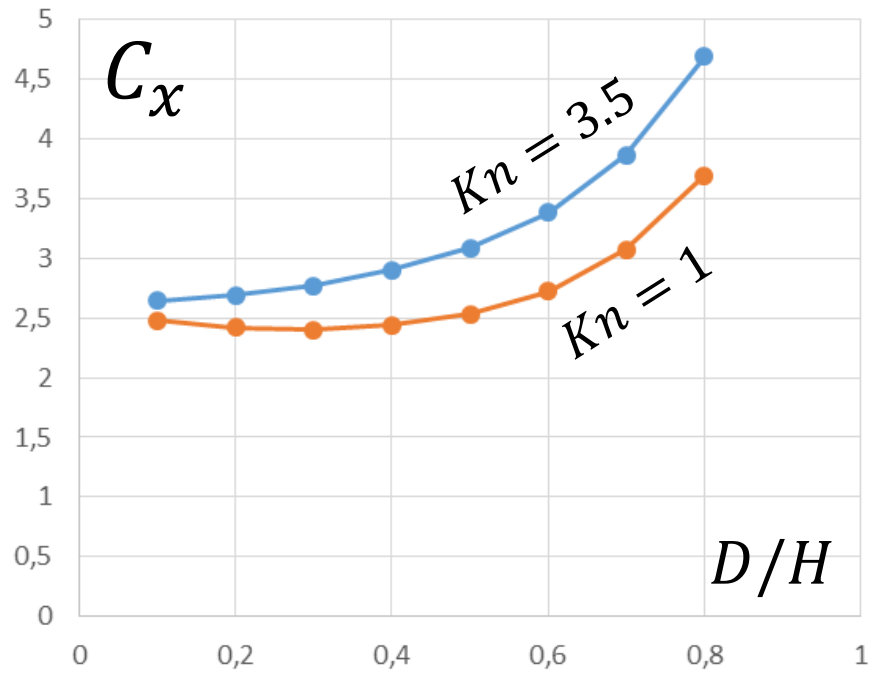


$$Kn = 0.1, T_b = T_0, D = 0.8H$$



$$Kn \geq 1$$

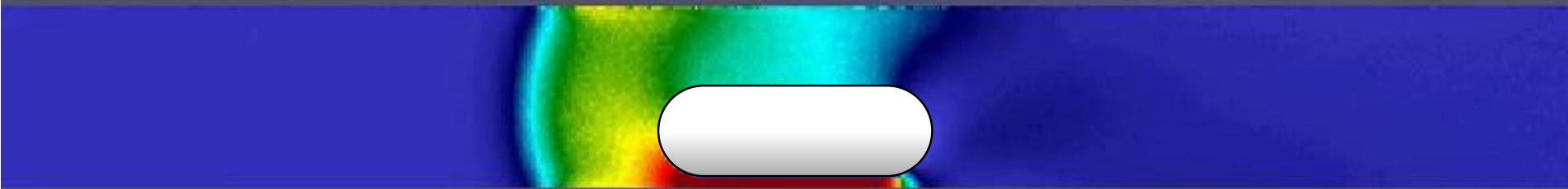
$$M = 3, T_b = T_\infty$$



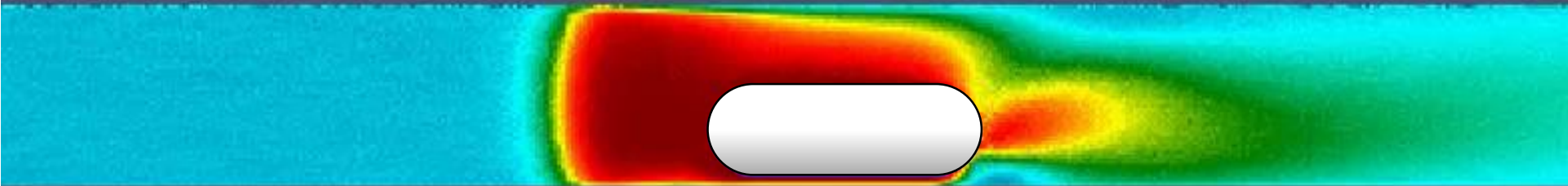
Supersonic capsule

$$M = 3, Kn = 0.1$$

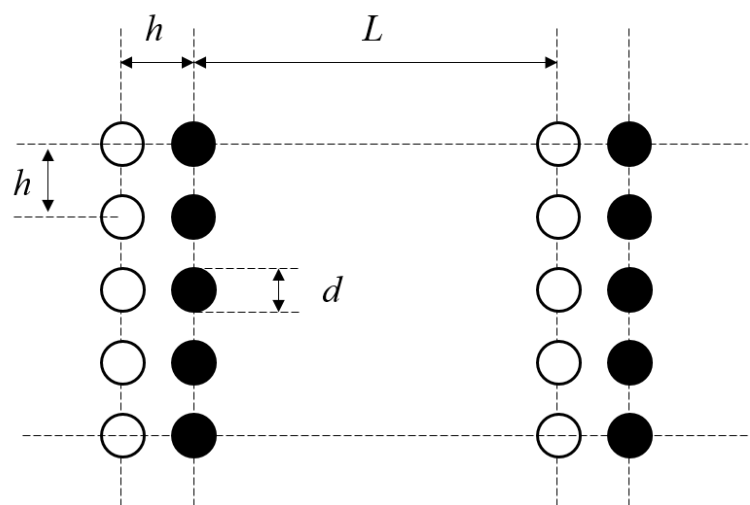
Pressure



Temperature



Задача о разделении газов в системе нитей



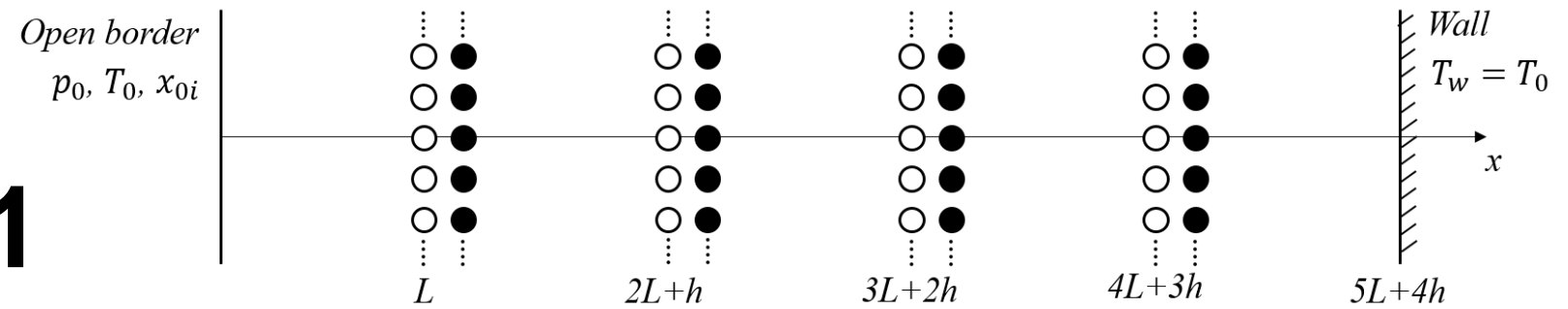
- холодная $T_w = T_0$
- нагретая $T_w = T_1 = 2T_0$

Нет градиента температуры в твердом теле!

Смесь пяти газов (He, Ne, Ar, Kr, Xe)

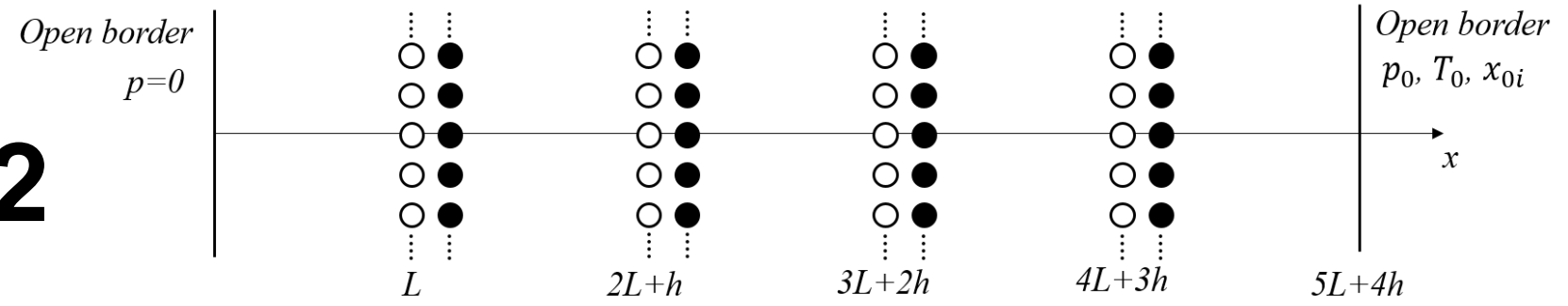
Постановки

1



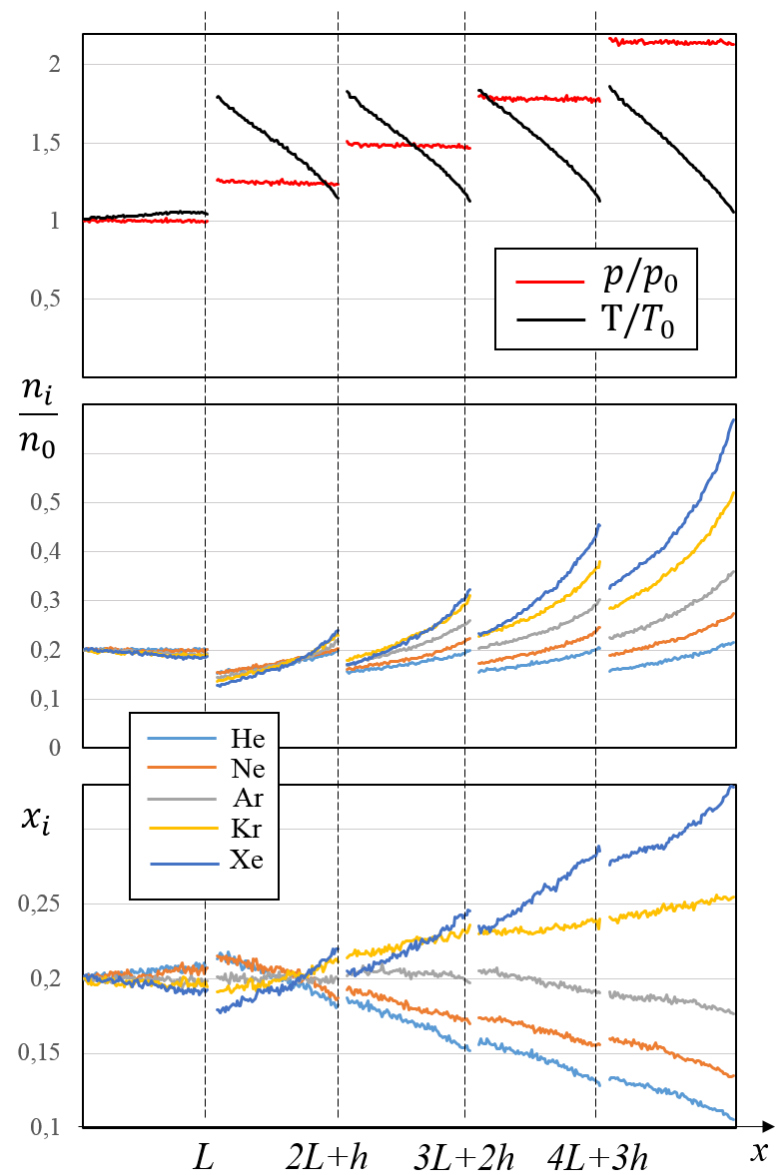
(a)

2

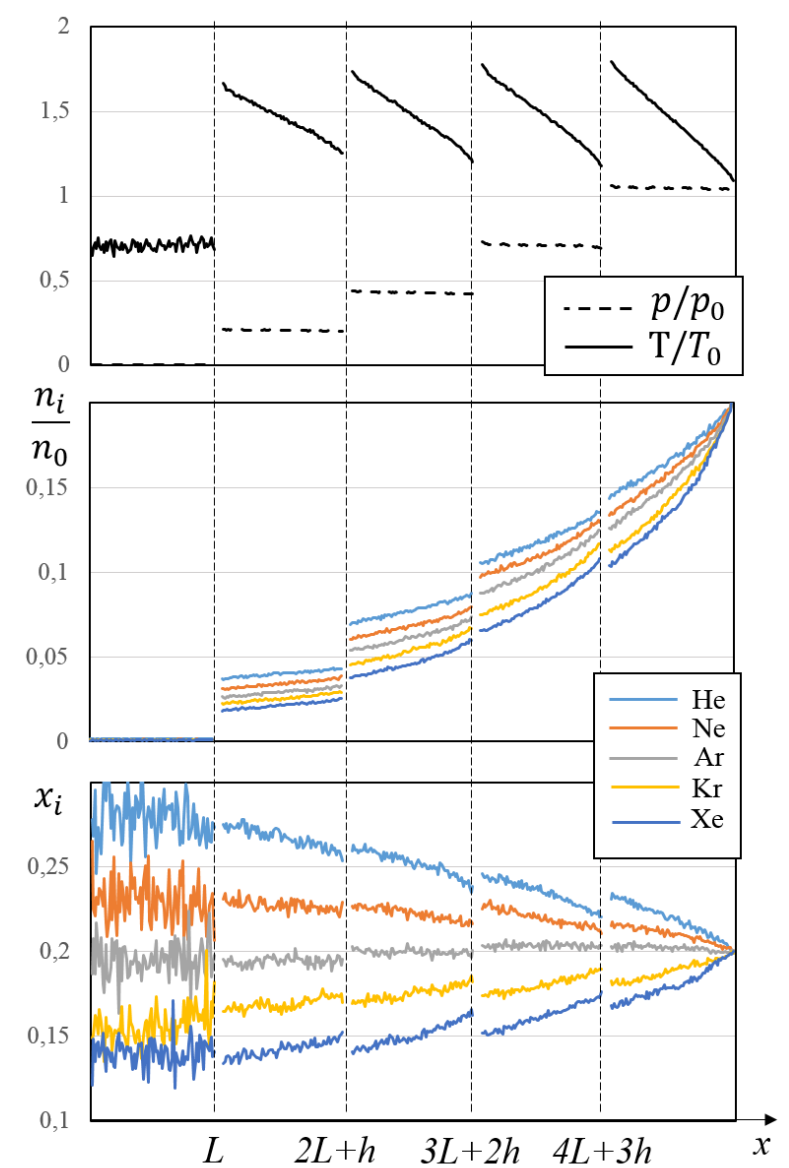


(b)

1



2



Разработан **бессеточный** метод событийного молекулярно-динамического моделирования (EDMD) для решения задач динамики разреженного газа.

Метод **успешно протестирован** на плоской задаче о переходном течении газа в канале и задаче о сверхзвуковом обтекании цилиндра.

В ходе тестовых расчетов определены значения параметров метода, при которых скорость вычислений достигает своего максимума.

Решены новые задачи (1) о сверхзвуковом движении тела в трубе с разреженным газом и (2) о разделении газовой смеси в системе, состоящей из нескольких рядов нитей разной температуры.

- Ближайшие цели:**
- **Более сложные модели межмолекулярного взаимодействия**
 - **Возможность решения задач с подвижными границами**
 - **Распараллеливание по областям**

Имитационное моделирование работы крупных территориально-распределенных информационно-вычислительных систем



Построенная модель позволяет

- оценить **загруженность серверов и каналов связи**
- получить **статистику обработки запросов** различных типов
- решать задачи с **нестационарными граничными условиями**

Данная методика применялась для имитационного моделирования работы Информационной системы обеспечения деятельности МВД России.

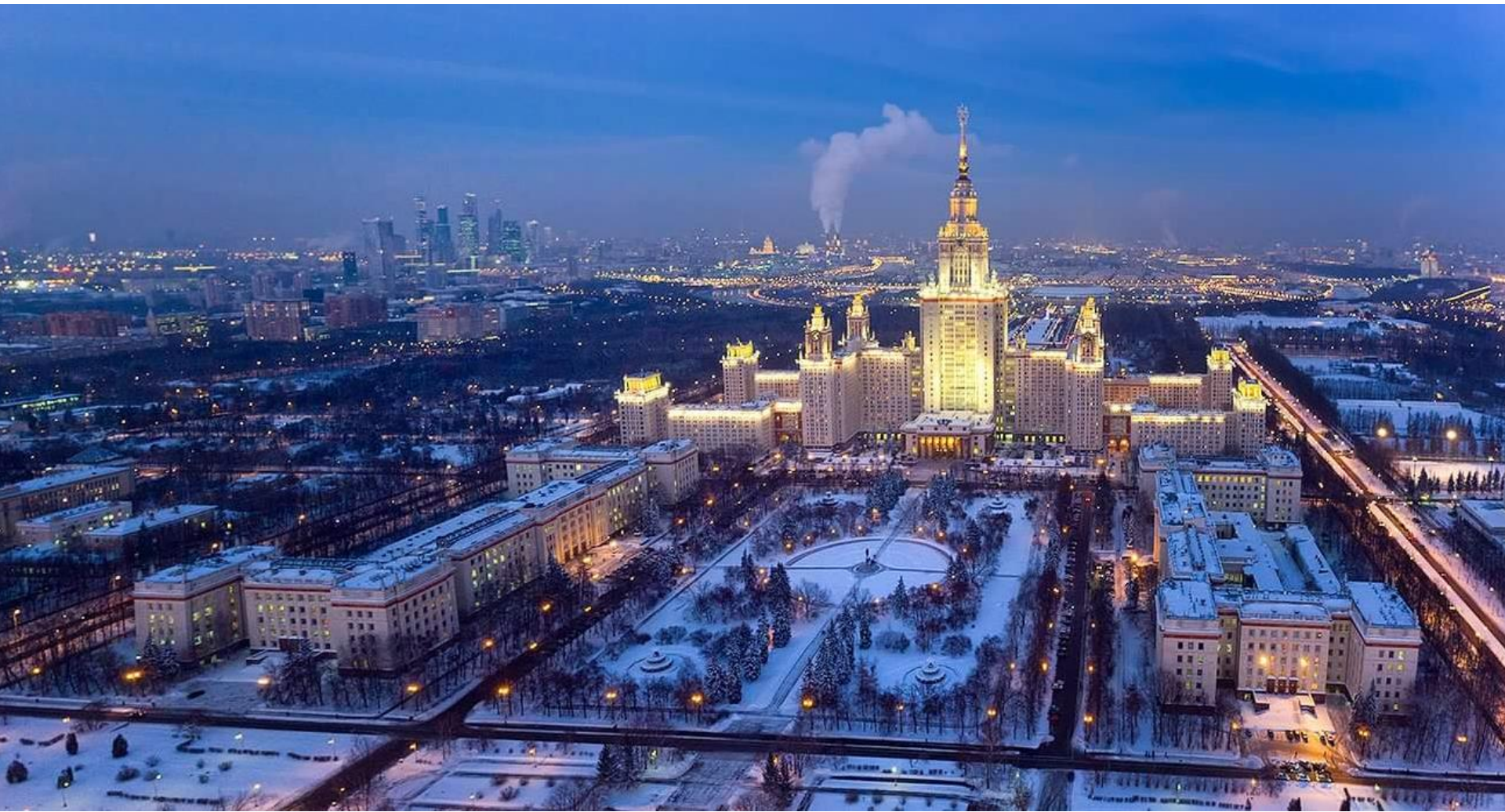
Моделирование людских и автотранспортных потоков в городской инфраструктуре и на крупных промышленных объектах



Актуальность

- **обеспечение безопасности** на массовых культурных, спортивных и других мероприятиях
- **планирование городской инфраструктуры**, внутренней архитектуры зданий, метрополитена, вокзалов и тп.
- **моделирование чрезвычайных ситуаций**, планирование своевременной и беспрепятственной **эвакуации**

Спасибо за внимание!



Lomonosov Moscow State University
Faculty of Mechanics and Mathematics,
Department of Engineering Mechanics and Applied Mathematics
www.multiscale.ru, www.enmech.ru