

Тен Э. А.

РЕАЛИЗАЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ПРИ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ

Адрес статьи: www.gramota.net/materials/1/2008/12/57.html

Статья опубликована в авторской редакции и отражает точку зрения автора(ов) по данному вопросу.

Источник

Альманах современной науки и образования

Тамбов: Грамота, 2008. № 12 (19). С. 174-176. ISSN 1993-5552.

Адрес журнала: www.gramota.net/editions/1.html

Содержание данного номера журнала: www.gramota.net/materials/1/2008/12/

© Издательство "Грамота"

Информация о возможности публикации статей в журнале размещена на Интернет сайте издательства: www.gramota.net

Вопросы, связанные с публикациями научных материалов, редакция просит направлять на адрес: almanac@gramota.net

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Для сравнения представленного подхода установки точек врезки было проведено экспериментальное тестирование. Для сравнения были также реализованы другие описанные подходы: выбор какой-либо точки контура в качестве точки врезки (подход № 1); выбор точки врезки ближайшей к какой-либо определенной, заранее заданной точке (реализованный подход); выбор точки врезки ближайшей к предыдущей точке врезки, использование прогнозирования в построении пути и соответственно прогнозирования установки следующей точки врезки (подход № 2).

Путь режущего инструмента строится с помощью алгоритма кластеризации на графах [1].

Тестирование проводилось на следующих примерах: лист 1 (8 контуров), лист 2 (20 контуров), лист 3 (220 контуров).

Тестирование дало следующие результаты:

Карта	Подход	Длина пути РИ
Лист 1	Подход 1	460,2
	Подход 2	526,8
	Реализованный подход	450,1
Лист 2	Подход 1	977,4
	Подход 2	968,2
	Реализованный подход	943,2
Лист 3	Подход 1	13423,7
	Подход 2	12620,0
	Реализованный подход	12089,7

Результаты показывают, что установка точки врезки ближайшей к центральной точке кластера при построении пути режущего инструмента с помощью кластеризации на графах дает наилучшее решение.

РЕЗУЛЬТАТЫ

В данной статье рассмотрена задача оптимизации пути режущего инструмента, сформулирована постановка задачи. Рассмотрены подходы к установке точек врезки для контуров. Описан подход установки точки врезки ближайшей к средней точке для контуров. проведено экспериментальное тестирование, которое показало, что выбранный подход дает наилучшие результаты среди представленных при построении пути режущего инструмента с помощью кластеризации на графах.

Список использованной литературы

1. **Верхотуров М. А., Тарасенко А. Р.** Раскрой листовых материалов на фигурные заготовки: минимизация пути режущего инструмента с использованием алгоритмов кластерного анализа и «Муравьиная система». – Уфа: Уфимский государственный авиационный технический университет, 2008.

РЕАЛИЗАЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ПРИ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ

Тен Э. А.

Курганский государственный университет

Метод молекулярной динамики, заключающийся в расчете траекторий движения частиц модельной системы, является одним из перспективных методов математического моделирования с применением ЭВМ. Он во многих случаях оказывается единственно возможным, чем прямой эксперимент, особенно, когда условия опыта слишком тяжелы (высокие температура или давление), позволяет рассчитать любое свойство системы - как термодинамическое (энергию, давление), так и кинетическое (коэффициенты диффузии, вязкости).

В молекулярно-динамической модели задаются начальные условия (набор положений и скоростей) $\{\vec{r}_i, \vec{v}_i, i = \overline{1, N}\}$, которые определяют состояние системы в момент времени $t = 0$: N частиц помещаются в систему (модельный куб) с длиной ребра L различными способами (раскладка по узлам кристаллической решетки или раскладка случайным образом); начальные скорости частиц определяются в зависимости от начальной температуры, которая задается исследователем. Модельный куб окружается бесконечным числом его копий для исключения влияния граничных эффектов с помощью периодических граничных условий Борна-Кармана. Расчет траекторий движения частиц происходит на основании заданного потенциала взаимодействия и дифференциальных уравнений движения.

Моделирование больших физических систем (более 10^4 частиц в модельном кубе) с кулоновскими потенциалами и полями требует использования мощных процессоров, огромных объемов памяти и иных вычислительных ресурсов, так как расчет кулоновских равнодействующих сил между частицами и кулоновской энергии системы (1) следует проводить с учетом максимально возможного числа частиц («обрезание» кулоновского потенциала на малых расстояниях приводит к появлению фиктивных полей и дипольных моментов, искажающих реальную динамику системы).

$$U = \frac{1}{2} \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{n_1=-m}^m \sum_{n_2=-m}^m \sum_{n_3=-m}^m \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{q_i q_j}{r_{ij, \vec{n}}}, \quad (1)$$

где $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)$ - вектор решетки с целочисленными компонентами, $r_{ij, \vec{n}} = |\vec{r}_{ij} + L \cdot \vec{n}|$ - расстояние между одной частицей в модельном кубе с длиной ребра L и другой частицей, находящейся в отображении куба (Рис. 1).

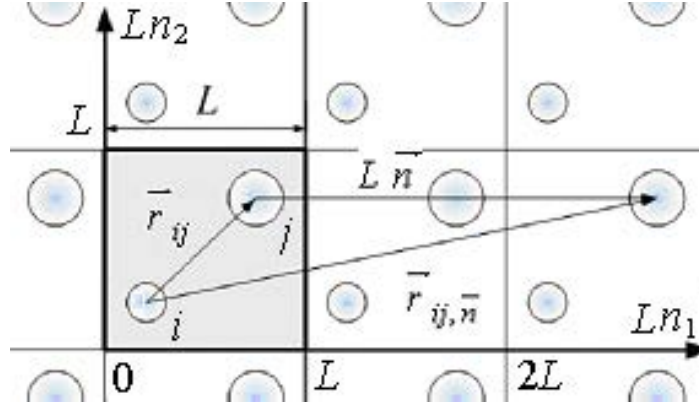


Рис. 1. Трансляции модельного куба

Суммирование ведется от исходной ячейки $\vec{n} = (0; 0; 0)$ по всем, окружающим ее, копиям до бесконечности (слагаемое при $i = j$ опускается, когда $\vec{n} = \vec{0}$).

Ряд (1) медленно сходится, поэтому на практике потенциальная энергия рассчитывается с использованием специальных методов, среди которых, одним из наиболее известных является метод Эвальда [Kittel 1956: 1]. Кулоновскую энергию, согласно этому методу, можно найти с помощью двух быстро сходящихся рядов: $U = U^{np} + U^{обp}$, где U^{np} - энергия, вычисляемая в «прямом» пространстве по формуле (2), $U^{обp}$ - в «обратном» пространстве по формуле (3).

$$U^{np} = \frac{1}{2} \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{n_1=-m}^m \sum_{n_2=-m}^m \sum_{n_3=-m}^m \sum_{i=1}^N q_i \sum_{j=1}^N q_j \frac{\text{erfc}(\alpha \cdot r_{ij, \vec{n}})}{r_{ij, \vec{n}}}, \quad (2)$$

$$\text{где } \text{erfc}(x) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-u^2} du,$$

$$U^{обp} = \frac{2\pi}{V} \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{h_1=-m}^m \sum_{h_2=-m}^m \sum_{h_3=-m}^m \frac{\exp\left(-\frac{\vec{k}^2}{4\alpha^2}\right)}{\vec{k}^2} \left[\left(\sum_{j=1}^N c_j \right)^2 + \left(\sum_{j=1}^N s_j \right)^2 \right] - \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^N q_i^2, \quad (3)$$

где $\vec{k} = \frac{2\pi}{L} \cdot \vec{h} \neq \vec{0}$, $\vec{h} = (h_1, h_2, h_3)$ - вектор с целочисленными компонентами, $c_j = q_j \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}_j)$, $s_j = q_j \sin(\vec{k} \cdot \vec{r}_j)$.

В методе Эвальда для снижения вычислительных затрат в больших системах (до 10^6 частиц), возникающих при нахождении равнодействующих сил из-за большого количества элементарных операций в расчете на одну частицу, можно использовать распределенные вычисления [Mowbray, Zahavi 1995: 2], основанные на разбиении области моделирования на непересекающиеся области и назначении отдельной вычислительной станции для моделирования в рамках каждой области.

Распределенные данные представляются в виде набора *вычислителей* - однотипных объектов выполняющих соответствующие методы (расчет потенциалов и сил взаимодействия) одновременно, независимо друг от друга. Все множество частиц и/или множество векторов моделируемой системы делится на непересекающиеся подмножества в соответствии с выбранной схемой их формирования. Весь набор входных данных (множество координат частиц моделируемой системы, их скорости) передаются на все объекты-

вычислители для нахождения равнодействующих сил. По ходу моделирования, каждый объект-вычислитель, размещенный на компьютере-«сервере» запрашивает сведения на компьютере-«клиенте» об очередном рассчитываемом интервале; при наличии необработанного интервала «забирает» его себе для расчетов. По завершении работы, объект - вычислитель осуществляет возврат результатов, вызывая парный метод "клиента" и передавая ему в качестве входных параметров результаты своей работы.

После успешной обработки последнего интервала, начинается рассылка интервалов, расчет которых по какой-либо причине не был завершен. Процесс продолжается до тех пор, пока не будут обработаны все интервалы из диапазона входных данных, определенного при постановке задачи.

Далее, на стороне "клиента" производится накопление обработанных интервалов и дальнейшая их обработка (Рис. 2).



Рис. 2. Модель распределенных вычислителей

Для расчета равнодействующих кулоновских сил между частицами и энергии системы в «прямом» пространстве, необходимо знать только координаты и заряды всех частиц, поэтому интервал частиц $[1; N]$ разбивается на непересекающиеся интервалы $([k; k+h])$, где $k = \overline{1, [N/h]}$, h задается ~ 100 частиц) для вычисления межчастичных взаимодействий в этих интервалах на отдельных станциях.

Для расчета кулоновских сил между частицами и энергии системы в «обратном» пространстве приходится вести суммирование по векторам $\vec{h} = (h_1, h_2, h_3)$, где $h_1 = \overline{-m; m}$, $h_2 = \overline{-m; m}$, $h_3 = \overline{-m; m}$, поэтому для распределения вычислений множество векторов разбивается на непересекающиеся подмножества следующим образом: интервал $h_1 \in [-m; m]$ разбивается на $2 \cdot m$ интервалов с шагом 1, каждый из которых задает множество векторов $\vec{i} = (i, h_2, h_3)$, где $i = \overline{-m; m}$.

Для обеспечения роста производительности распределенных вычислений параллельный расчет целесообразно проводить в локальной вычислительной сети, содержащей не менее 3 рабочих станций (вычислителей), поскольку между «вычислителями» не существует обмена сведениями о рассчитываемых интервалах.

Дополнительное увеличение производительности такой системы достигается с помощью синхронной рассылки, передавая координаты частиц и векторов не каждому компьютеру последовательно, а всем компьютерам одновременно.

Распределенные вычисления в методе молекулярной-динамики позволяют моделировать большие системы (до 10^6 частиц) и/или увеличивать число шагов моделирования для получения свойств систем при нужных температурах, нахождения коэффициентов диффузии вблизи или ниже температуры плавления.

Список использованной литературы

1. Kittel C. Introduction to Solid State Physics. - New York: John Wiley & Sons Inc., 1956.
2. Mowbray T. J. and Zahavi R. The Essential CORBA: Systems Integration Using Distributed Objects. - John Wiley & Sons, Inc., 1995.