

АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ КОМПЛЕКС КОМПЬЮТЕРНЫХ ПРОГРАММ ПО МОДЕЛИРОВАНИЮ СВОЙСТВ ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ ПЛАЗМЫ

Описана разработанная информационная система «Моделирование свойств двухкомпонентной плазмы методом МД», включающая в себя диалоговый интерфейс для выбора алгоритмов вычисления координат и скорости, позволяющая на основе метода молекулярной динамики получать контрольную карту. Программная оболочка снабжена средствами визуального наблюдения за движением частиц в системе, позволяющими наблюдать и анализировать данные в ходе компьютерного эксперимента.

Введение

Благодаря развитию вычислительной техники и методов математического моделирования сформировалось новое название «Научная визуализация». Уже достаточно надежно установлено, что научная визуализация дает эффективный инструмент для исследования динамических систем. Такие системы обычно не имеют аналитических решений и их исследование возможно только с помощью средств численного моделирования. Полученные решения, как правило, представляются многомерными данными, которые должны быть адекватно визуализированы для большего понимания изучаемых физических процессов. Ее основная задача – обеспечение возможности визуального представления и анализа больших объемов данных. Модуль визуализации становится важной частью современного вычислительного комплекса, так как без нее невозможно правильно судить о моделируемых явлениях. Реализация модуля визуализации не уступает сложности реализации численного метода. Создание собственной полноценной системы визуализации требует значительных усилий. Поэтому при конструировании вычислительного комплекса имеет смысл проанализировать специфику существующих систем визуализации.

Визуализация является существенной частью процесса численного моделирования, обеспечивающей анализ и правильную интерпретацию результатов вычислений, а также дальнейшую работу с вычислительной моделью. Компьютерной визуализацией можно понимать методику перевода абстрактных представлений об объектах в геометрические образы, что дает возможность исследователю наблюдать результаты компьютерного моделирования явлений и процессов. В компьютерном эксперименте большую роль играет наглядность: в демонстрационных целях протекание физических процессов следует изображать на экране, что приводит к значительным затратам машинных ресурсов. Это не позволяет рассматривать системы, состоящие из большого числа частиц. Они не будут успевать перерисовываться на экране в новых положениях через малые промежутки времени, так как для расчёта сил взаимодействия друг с другом большого числа частиц требуется значительное время. Поэтому, при рассмотрении с визуализацией движение частиц, взаимодействующих друг с другом посредством потенциальной энергии, число частиц может быть только совсем небольшим.

В данной работе рассматривается метод молекулярной динамики, суть которого состоит в решении уравнений движения частиц, определенным образом взаимодействующих между собой, с заданными начальными координатами и скоростями. Приводятся различные алгоритмы решения системы уравнений движения N частиц. Далее описывается программная оболочка, позволяющая в гибком диалоговом режиме исследовать двухкомпонентную плазму на основе компьютерного метода молекулярной динамики, а также визуально отслеживать за движения частиц.

Метод МД построен на более простом принципе, чем метод Монте-Карло и заключается в решении уравнений движения Ньютона для системы многих тел:

$$\begin{aligned} \frac{d \vec{r}_i}{dt} &= \vec{v}_i \\ \frac{d \vec{g}_i}{dt} &= \frac{1}{m} \vec{F}_i \end{aligned} \quad (1)$$

где \vec{F}_i - сила, действующая на частицу i со стороны $N - 1$ частиц базовой ячейки:

$$\vec{F}_i = - \sum_{j \neq i} grad \Phi_{ij}, \quad (2)$$

где Φ_{ij} - парный потенциал взаимодействия.

Для исследования плотной неидеальной двухкомпонентной плазмы необходимо выбрать модель взаимодействия частиц плазмы.

При решении уравнений движения налагаются периодические граничные условия, реализуемые следующим образом. Все трехмерное пространство разбивается на равные ячейки объема V_i с N частицами в каждой. Одна из них считается основной (базовой). Причем конфигурация частиц повторяется во всех остальных ячейках. Таким образом, можно говорить о базовой ячейке и ее копиях (репликах).

1. Алгоритм программной реализации

Существует различные алгоритмы решения системы уравнений движения N частиц методом динамики частиц. Их программная реализация включена в программную оболочку с возможностью выбора метода интегрирования уравнений движения и с возможностью ознакомления с каждым из методов (рис. 1.1).

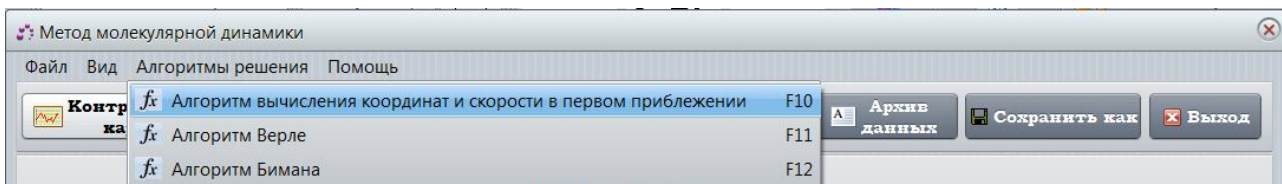



Рис.1. Окно выбора различных алгоритмов


Выбор алгоритма и шага по времени зависит от параметров моделируемой плазмы. Это в первую очередь диктуется корректностью моделирования плазмы (сохранением полной энергии в процессе моделирования) и минимизацией машинного времени. Для выбора представлены следующие алгоритмы вычисления: вычисление координат и скорости в первом приближении; вычисление координат и скорости методом Верле; вычисление координат и скорости методом Бимана.

Вычисление координат и скорости в первом приближении позволяет получить визуальное наблюдение движения частиц плазмы в разреженной среде с использованием экранированного потенциала взаимодействия, но не может дать корректное описание динамических и микроскопических свойств системы. Алгоритм Верле имеет ошибку интегрирования второго порядка малости по шагу. Этот метод дает корректное описание динамических и микроскопических свойств не идеальной плазмы. При длительном моделировании микроканонического ансамбля двухкомпонентной плазмы использование алгоритма Верле приводит к относительно большим флуктуациям полной энергии.

2. Программная оболочка

На основе описанного алгоритма была разработана программа в среде разработки Delphi7, для визуального наблюдения за движением частиц был использован растровый графический OpenGL.

На рис. 2 представлен интерфейс программы. Она предоставляет пользователю возможность задавать параметры задачи, вести наблюдение за ходом выполнения расчетов. Результаты выводятся на экран по ходу их вычисления, как в виде графика, так и в виде таблицы, это дает пользователю возможность прервать выполнение программы с помощью кнопки  при обнаружении каких-либо отклонений.

Кнопка  переводит программу в режим визуального наблюдения движения частиц, это наблюдение позволяет наблюдать движения частиц в ячейке (рис. 2).

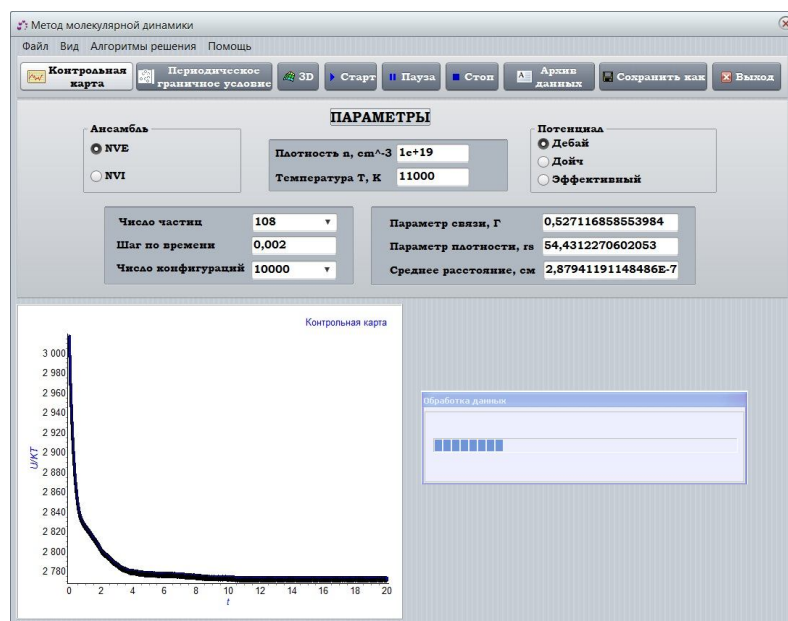


Рис. 2. Автоматизированная программа для исследования свойств двухкомпонентной плазмы

Здесь также можно выбирать ансамбль, который моделируется система с помощью уравнения движения. От выбора ансамблей зависит эволюция системы. Система эволюционирует либо вдоль кривой постоянной температуры (NVT-ансамбль), либо на поверхности постоянной энергии (NVE-ансамбль). К каноническому NVT ансамблю соответствуют фиксированные число частиц N и объем V , постоянная температура T . А в микроканоническом NVE ансамбле фиксированы число частиц N , объем V и полная энергия системы E .

3. Визуализация движения частиц в среде Delphi

Визуализация является существенной частью процесса численного моделирования, обеспечивающей анализ и правильную интерпретацию результатов вычислений, а также дальнейшую работу с вычислительной моделью. Компьютерной визуализацией можно понимать методику перевода абстрактных представлений об объектах в геометрические образы, что дает возможность исследователю наблюдать результаты компьютерного моделирования явлений и процессов.

В компьютерном эксперименте большую роль играет наглядность: в демонстрационных целях протекание физических процессов следует изображать на экране, что приводит к значительным затратам машинных ресурсов. Это не позволяет рассматривать системы, состоящие из большого числа частиц. Они не будут успевать перерисовываться на экране в новых положениях через малые промежутки времени, так как для расчёта сил взаимодействия друг с другом большого числа частиц требуется значительное время. Поэтому, при рассмотрении с визуализацией движение частиц, взаимодействующих друг с другом посредством потенциальной энергии, число частиц может быть только совсем небольшим.

С помощью инструментальных средств среды объектно-ориентированного программирования Delphi представлена визуальная демонстрация движения частиц в базовой ячейке. Рассматриваются периодическая решетка с кубической ячейкой, заполненная N частицами. Анимация визуально показывает, что если какая-либо частица выходит через грань куба со скоростью U_i , то другая частица входит через противоположащую грань с той же скоростью.

На рис. 3 для иллюстрации выполнения периодического граничного условия одну частицу выделили синим цветом. Пользователь в интерактивном режиме выбирает одну частицу и наблюдает движения ее в базовой ячейке, тем самым, получая возможность визуально оценить ее траекторию. При расчете сил, действующих на частицу, последняя окружается кубическим объемом V и учитывается взаимодействие только с частицами, находящимися в этом объеме. На рис. 3 приведена визуальная картина расположения частиц в равновесном состоянии, т.е. когда в контрольной карте потенциальная энергия выходит на стационарный участок.

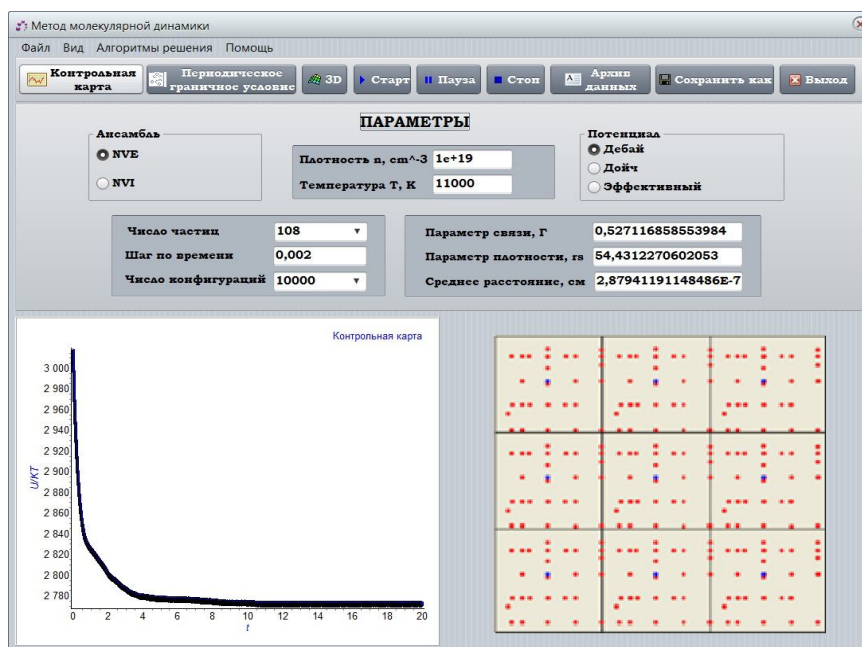


Рис. 3. Расположение частиц базовой ячейки в режиме устойчивости

В данной программе при визуализации движения частиц величина временного шага регулировалась введением пустых операторов, так как в режиме реального времени скорость движения частиц будет слишком большое и пользователь не сможет увидеть картину. Но, виртуальные частицы перерисовывается на каждом реальном временном шаге в положении, соответствующем вычисленным значениям координат.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе метода молекулярной динамики был разработан программный комплекс для моделирования двухкомпонентной плазмы, позволяющий определять основные физические свойства. Представлена схема разработанного программного комплекса для моделирования двухкомпонентной плазмы методом молекулярной динамики. В результате был разработан программный модуль, позволяющий в интерактивном режиме рассматривать движения частиц в ячейке. Применение средств визуализации и технологии виртуального окружения позволит провести методологический анализ разработанных новых технологий для научных исследований.

ЛИТЕРАТУРА

1. Anderson J. D. Computational Fluid Dynamics: the basics with applications.-New York, 1995.- 563p.
2. Peter Deuflhard, Jan Hermans, Benedict Leimkuhler, Alan E. Mark, Sebastian Reich, Robert, D. Skeel. Computational Molecular Dynamics: Challenges, Methods, Ideas.- Berlin,1997.-504p.
3. Хокни Е, Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц.- Москва: Мир,1987.- 638 p.
4. Ramazanov T.S., Moldabekov Zh.A., Dzhumagulova K.N. Pair Interaction Potential of Particles for Two-Component Plasma // Contrib. Plasma Phys. 52, –2012.-Vol. 52, № 3. –P. 207 – 210.
5. Ramazanov T.S., Moldabekov Zh.A. Effective interaction potentials in two component semiclassical plasma // Contrib. Plasma Phys. –2012.-Vol. 53, № 10
6. Moldabekov Zh.A., Ramazanov T.S. Effective interaction potentials in two component semiclassical plasma // Book of Abstracts, PNP-2012, Germany, Rostock, 2012.- P. 87.

Резюме

Бұл жұмыс аясында координата мен жылдамдықты есептеу алгоритмін таңдау үшін диалогтік интерфейске ие және молекулярлық динамика әдісі негізінде бақылау картасын алуға мүмкіндік беретін программдан тұратын “Екікомпонентті плазма қасиетін МД әдісі арқылы моделдеу” атты өңделген ақпараттық жүйе сипатталған. Бағдарламалық бет компьютерлік тәжірибе барысында алынған нәтижелерді бақылауға және анализдеуге мүмкіндік беретін жүйеде бөлшектің қозғалысын визуалды бақылау құралдарымен жабдықталған.

Summary

In this work the information system "Modeling two-component properties of the plasma dynamics method", which includes an interactive interface to select the algorithms to calculate the coordinates, speeds of particles by molecular dynamic is developed. Program shell is provided with means of visual observation of the motion of particles in the system and enables to monitor and analyze the data in the computer simulation.

*НИИЭТФ, Казахский национальный университет
им. Аль-Фараби, г.Алматы*

Поступила 10.11.12 г.