

Непрерывно-атомистическое моделирование процессов взаимодействия тяжелых ионов с металлами на высокопроизводительных вычислительных системах

**С.Н. Димова², И.В. Пузынин¹, Т.П. Пузынина¹, З.К. Тухлиев¹,
И.Г. Христов^{1,2}, Р.Д. Христова^{1,2}, Т.П. Черногорова², З.А. Шарипов^{1, а}**

¹Объединенный институт ядерных исследований,
Россия, 141980, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри 6

²Софийский университет “Св. Климент Охридски”,
Болгария, г. София, ул. Джеймс Баучер 5

^а E-mail: zarif@jinr.ru

В работе используется непрерывно-атомистический подход для моделирования взаимодействия тяжелых ионов высоких энергий с конденсированными средами. Непрерывно-атомистическая модель (НАМ) описывается двумя разными классами уравнений, а именно, непрерывными уравнениями теплопроводности модели термического пика и уравнениями движения материальных точек метода молекулярной динамики. Использование высокопроизводительных систем для непрерывно-атомистического моделирования требует разработки новых вычислительных схем и параллельных алгоритмов. В работе для исследования НАМ разработаны вычислительная схема и алгоритмы с возможностью использования их в многопроцессорных системах. Исследована эффективность вычислительной схемы и параллельных алгоритмов.

Ключевые слова: непрерывно-атомистическая модель, модель термического пика, метод молекулярной динамики, высокопроизводительные системы, параллельные алгоритмы

© 2016 Стефка Николаева Димова, Игорь Викторович Пузынин, Таисия Петровна Пузынина, Зафар Камаридинович Тухлиев, Иван Георгиев Христов, Радослава Данаилова Христова, Татьяна Параскевова Черногорова, Зариф Алимжонович Шарипов

Введение

Исследования процессов в области облучения материалов тяжелыми ионами высоких энергий (ТИВЭ) проводятся на протяжении нескольких десятилетий. Проведение экспериментальных исследований в этой области трудоемко и дорого, поэтому актуальным становится математическое моделирование, которое требует развития существующих и разработки новых моделей на основе имеющихся экспериментальных данных. В настоящее время применяются две модели для изучения указанных процессов. Модель термического пика (ТП) описывается системой уравнений теплопроводности для электронного газа и кристаллической решетки [Каганов М.И., Лифшиц И.М., Танатаров Л.В., 1956]. Другая модель для описания взаимодействий тяжелых ионов (с энергией до нескольких кэВ) с конденсированными средами основана на методе молекулярной динамики (МД) [Холмуродов Х.Т., Алтайский М.В., Пузынин И.В., 2003]. Метод МД позволяет получить значительно больше информации об исследуемой системе (температура, давление, изменение структуры) по сравнению с моделью ТП. Объединение этих двух моделей (непрерывно-атомистическая модель (НАМ)) даст возможность более подробно исследовать процессы облучения материалов ТИВЭ. Целью работы является создание программного комплекса для решения уравнений НАМ и его тестирование на высокопроизводительных системах с общей памятью.

Постановка задачи и полученные результаты

За основу выбрана НАМ [3], описывающая процессы в металлической пленке при облучении ее высокочастотным лазером. Предлагаемая нами модель представлена непрерывным уравнением теплопроводности электронной подсистемы модели ТП и уравнениями движения атомов в рамках метода МД:

$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \text{div}(\lambda_e \text{grad}(T_e)) - G(T_e)(T_e - T_{i*}) + A(\mathbf{r}, t) \quad , \quad (1)$$

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i + \xi m_i \mathbf{v}_i^T \quad , \quad (2)$$

$$\text{где} \quad \xi = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n G V_n (T_e^k - T_i) / \sum_i m_i (\mathbf{v}_i^T)^2 \quad , \quad i = 1, \dots, n.$$

В системе (1)-(2) в отличие от [Ivanov D. and Zhigilei L., 2003], специальным образом построена функция источника для ТИВЭ. Описание физических параметров уравнений (1)-(2) приведено в работе [Амирханов И.В., Дидык А.Ю., Пузынин И.В., 2006].

Для численного решения уравнений (1)-(2) в отдельности существуют известные методы: конечно-разностный метод [Самарский А.А., Гулин А.В., 1989] для уравнения (1) и метод Верле [Verlet L., 1967] для системы (2). Для составления вычислительных схем решения уравнений (1)-(2) вводится равномерная сетка в расчетной области для уравнения (1). Для решения системы (2) используется метод ближайших клеток (Linked-List Cell MD Algorithm) [Rapaport, Dennis C., 2004, *Linked-List Cell Molecular Dynamics*]. При вычислении температуры в уравнении (2) расчетная область разбивается на наложенные друг на друга ячейки (так, чтобы в каждой ячейке количество частиц было 100-1000) [Ivanov D. and Zhigilei L., 2003].

В вычислительных схемах для уравнений (1)-(2) важным является согласованность шагов по времени и температурная связь в узловых точках конечно-разностного метода и в ячейках расчетной области метода МД.

В таблице 1 приведены результаты тестирования программного комплекса в рамках параллельной реализации OpenMP. Моделирование проводилось на 100 шагах по времени с 10^6 частицами в одном узле на кластере HybriLIT [Cluster HybriLit]. На рис.1. приведен график масштабируемости производительности на одном вычислительном узле кластера HybriLIT. Из полученных результатов тестирования видно, что ускорение на одном узле кластера достигло почти 20. На рис.2. в качестве примера приведена температурная зависимость (в разрезе по центру облучения) в разные моменты времени на поверхности никелевой мишени при облучении ионами урана с энергией 700 МэВ для НАМ (а) и для модели ТП (б). Полученные результаты для НАМ и модели ТП совпадают по величине температуры, но различаются по виду профилей. Из-за флуктуаций температур в ячейках в методе МД профили температуры имеют волнистый вид.

Таблица 1. Результаты тестирования программного комплекса в рамках параллельной реализации OpenMP.

количество процессов	время, сек	ускорение	эффективность, %
1 (serial)	243.56	1.00	100
1 (parallel)	256.86	0.948	94.8
6	47.64	5.11	85.2
12	26.33	9.25	77.1
18	18.29	13.32	74.0
24	14.28	17.06	71.1
30	13.76	17.70	59.0
36	13.32	18.29	50.8
42	12.85	18.95	45.1
48	12.41	19.63	40.9

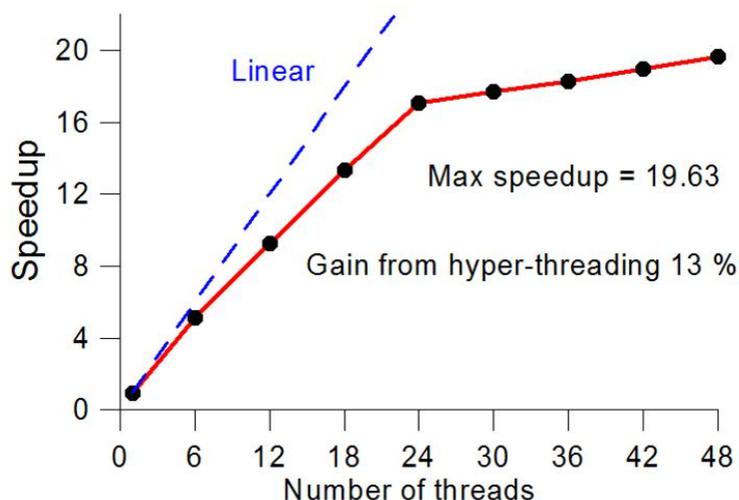


Рис.1. Масштабируемость производительности на одном вычислительном узле кластера HybriLIT.

Заключение

Разработан программный комплекс для решения уравнений НАМ и проведено тестирование программного комплекса на гетерогенном кластере HybriLIT. Получены результаты моделирования процессов взаимодействия ионов урана с энергией 700 МэВ с никелевой мишенью. По результатам исследований можно сделать выводы:

1. В рамках параллельной реализации OpenMP ускорение на одном узле кластера HybridIT достигло почти 20. Это показывает, что возможно улучшение результатов при использовании нескольких узлов в рамках параллельной реализации OpenMP+MPI.

2. Реализованная НАМ позволяет исследовать более детальную картину процесса взаимодействия ТИВЭ с металлическими мишенями.

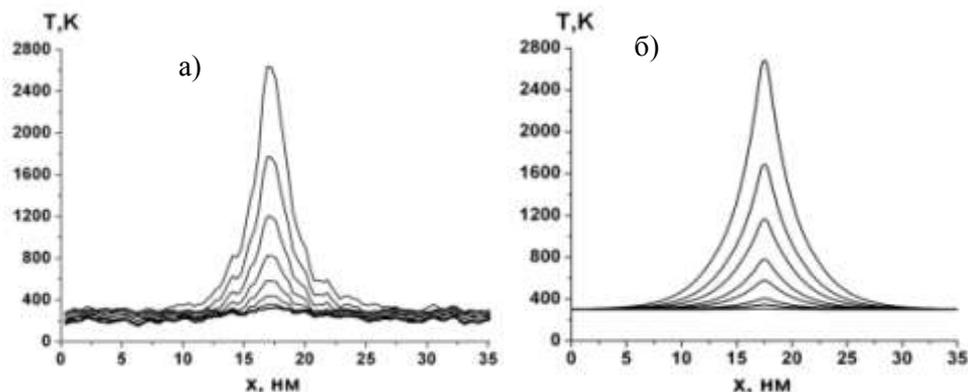


Рис.2. Зависимость температуры в разные моменты времени на поверхности никелевой мишени при облучении ионами урана с энергией 700 МэВ для НАМ (а) и в рамках модели ТП (б).

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта Полномочного представителя Республики Болгария в ОИЯИ. Авторы С.Н. Димова, И.Г. Христов, Т.П. Черногорова благодарят также Фонд научных исследований Софийского университета и грант 30/2016 Софийского университета за поддержку.

Список литературы

- Каганов М.И., Лифшиц И.М., Танатаров Л.В. Релаксация между электронами и решеткой // Журнал экспериментальной и теоретической физики (ЖЭТФ). — 1956. — Vol. 31, — No. 2(8). С. 232–237.
Kaganov M.I., Lifshits I.M., Tanatarov L.V. Relaksaciya mejdu elektronami I reshetoj // Journal of Experimental and Theoretical Physics — 1956. — Vol. 31, — No. 2(8). С. 232–237 (in Russian).
- Холмуродов Х.Т., Алтайский М.В., Пузынин И.В. и др. Методы молекулярной динамики для моделирования физических и биологических процессов // Физика элементарных частиц и атомного ядра (ЭЧАЯ). . — 2003. — Т. 34, № 2. — С. 472–515.
Holmurodov H.T., Altajskiy M.V., Puzynin I.V. I dr. Metody molekulyarnoy dinamiki dlya modelirovaniya fizicheskix I biologicheskix procesov // The journal Physics of Particles and Nuclei Letters. — 2003. — Vol. 34, No. 2. — P. 472–515 (in Russian).
- Ivanov D. and Zhigilei L. Combined atomistic-continuum modeling of short-pulse laser melting and disintegration of metal films // Phys. Rev— B68. 064114. — 2003.
- Амирханов И.В., Дидык А.Ю., Пузынин И.В. и др. Распыление твердых тел под действием тяжелых ионов и температурные эффекты в электронной и решеточной подсистемах // Физика элементарных частиц и атомного ядра (ЭЧАЯ). — 2006. — Т.37. №.6. — С. 1592–1644.
Amirkhanov I.V., Didyk A. Yu., Puzynin I.V. I dr. Raspredeleniye tverdyh tel pod deystviem tyajelyh ionov I temperaturnyye efekty v elektronnoj I reshetochnoj podsystemah. // The journal Physics of Particles and Nuclei Letters. — 2006. — Vol. 37, No. 6. — P. 1592–1644 (in Russian).
- Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. — М.: Наука, 1989, 432с.
(Russ. ed.: Samarskiy A.A., Gulin A.V. Chislennyye metody. — M.: Nauka, 1989, 432p.).

Verlet L. Computer experiments on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // *Phys. Rev.* —1967. —Vol.159 No. 1 — P. 98-103.

Rapaport, Dennis C. The art of molecular dynamics simulation. Cambridge university press, 2004.

Linked-List Cell Molecular Dynamics [Electronic resource]: Lecture of Aiichiro Nakano from University of Southern California on "Linked-list cell MD algorithm"
<http://cacs.usc.edu/education/cs596/01-1LinkedListCell.pdf>

Cluster HybriLit [Electronic resource]: <http://hybrilit.jinr.ru/>

Continuum-atomistic modeling interaction processes of heavy ions with metals using of high performance computer systems

**S.N. Dimova², I.V. Puzynin¹, T.P. Puzynina¹, Z.K. Tukhliev¹, I.G. Hristov^{1,2},
R.D. Hristova^{1,2}, T.P. Chernogorova², Z.A. Sharipov^{1,a}**

¹ Joint Institute for Nuclear Research,
Joliot-Curie 6, Dubna, 141980, Moscow region, Russia

² Sofia University " St. Kliment Ohridski",
James Bourchier 5, Sofia, Bulgaria

^a E-mail: zarif@jinr.ru

A continuous-atomistic simulation approach is used to investigate the interaction of high-energy heavy ion with condensed matter. The continuously-atomistic model (CAM) consists of two different classes of equations, namely, a continuous thermal conductivity equation of the thermal spike model and equations of motion of material points of the method of molecular dynamics. The using of high-performance systems for continuous-atomistic simulations requires the development of new computational paradigm and parallel algorithms. The computational paradigm and algorithms for discretization of the CAM are worked out here so to be implemented on multiprocessor systems. The efficiency of the computational paradigm and of the parallel algorithms is investigated.

Keywords: continuum-atomistic model, model of thermal speak, method of molecular dynamics, high-performance systems, parallel algorithms

© 2016 Stefka N. Dimova, Igor V. Puzynin, Taisiya P. Puzynina, Zafar K. Tukhliev, Ivan G. Hristov, Radoslava D. Hristova, Tatiana P. Chernogorova, Zarif A. Sharipov.