

Организация параллельных вычислений для расчёта процесса образования структур в стёклах

Г.Ю. Аверчук, С.А. Науменко, Э.Р. Абашева, Э.М. Кольцова

Российский химико-технологический университет им. Д.И.Менделеева, Москва, Россия

1. Введение

Методология математического моделирования позволяет исследовать различные естественные и технологические процессы. После построения математической модели и проверки её адекватности, численный эксперимент с математической моделью позволяет заменить множество дорогостоящих натуральных экспериментов.

Целью работы являлась реализация клеточно-автоматной модели процессов получения стёкол и образования кристаллических структур в них в виде программного комплекса для параллельных вычислительных систем. Заложенный в клеточном автомате принцип параллелизма позволяет эффективно провести вычислительный эксперимент на вычислительных системах с большим количеством вычислительных узлов.

2. Методика эксперимента

Объектом исследования и моделирования в данной работе выбраны стёкла состава трёх оксидов $A \cdot B \cdot C$, а именно $Li_2O: SrO: P_2O_5$.

Процесс получения стекла осуществляется путём варки исходного расплава оксидов, в печи при высокой температуре – примерно 1200 °С. После – расплав выливают на металлическую плиту и прессуют сверху металлической плитой. Происходит постепенное охлаждение расплава, и при достижении определённых условий – необходимая концентрация оксидов в точке пространства, необходимая ориентация молекул оксидов, достижение температуры кристаллизации – в какой-либо части охлаждаемого расплава образуются кристаллические структуры.

В зависимости от исходного соотношения оксидов в расплаве, получаются стёкла различного качественного состава: от абсолютно прозрачных, до состоящих полностью из кристаллических масс.

3. Математическое моделирование процесса получения структур

Математическое моделирование в представленной работе основано на теории клеточных автоматов. Для многих физико-химических систем нет иного способа понять, что в них происходит, как проследить последовательно шаг за шагом эволюцию системы с помощью вычислительного эксперимента на основе клеточного автомата [1]. Каждая клетка определяет элементарную ячейку пространства. Элементарной ячейке на каждом шаге по времени соответствует ряд расчетных значений. При построении модели выбрана сеть в виде гексагональной решетки на двумерном поле.

Клеткам сети приписывается зависимое от их координат и от времени многофазное поле $\Phi_{ij}^{(n)}$. Наряду с многофазным полем каждой клетке приписывается температурное поле $T_{ij}^{(n)}$ и три поля концентраций соответствующих оксидов $C_{Aij}^{(n)}$, $C_{Bij}^{(n)}$, $C_{Cij}^{(n)}$.

Соотношения в данном разделе записываются для произвольного элемента пространства, который характеризуется в данный момент времени вполне определенными значениями параметров.

3.1. Исходные соотношения для математической модели

Неравномерное распределение концентраций по объему приводит к появлению диффузии вещества в расплаве. На основании закона Фика процесс диффузии для некоторой ячейки пространства можно описать соотношением:

$$C_{ij}^{(n+1)} \rightarrow C_{ij}^{(n)} + \frac{1}{m} \left(\langle D_{kl}^{(n)} C_{kl}^{(n)} \rangle - D_{ij}^{(n)} C_{ij}^{(n)} \right), \quad (1)$$

где D – коэффициент диффузии;

m – параметр, характеризующий дискретизацию пространства и времени, величина которого может быть определена соотношением $m = \frac{x^2}{\Delta t}$, где x – линейный размер элементарной ячейки, Δt – шаг по времени;

$(k, l) \in O(i, j)$ – клетки ближайшего окружения;

$\langle D_{kl}^{(n)} C_{kl}^{(n)} \rangle$ – среднее произведение коэффициента диффузии на концентрацию в клетках ближайшего окружения;

$$\langle D_{kl}^{(n)} C_{kl}^{(n)} \rangle = \frac{1}{6} \sum_{k,l} D_{kl}^{(n)} C_{kl}^{(n)}, \quad (2)$$

Зависимость коэффициента диффузии от температуры имеет вид:

$$D(T) = D_0 \cdot e^{-\frac{E}{RT}}, \quad (3)$$

где D_0 – характеристическое значение коэффициента диффузии;

E – энергия активации;

R – универсальная газовая постоянная.

Неравномерное распределение поля температур приводит к теплообмену между элементами пространства, который на основании закона Фурье можно записать следующим образом:

$$T_{ij}^{(n+1)} \rightarrow T_{ij}^{(n)} + \frac{1}{p} \left(\langle a_{kl}^{(n)} T_{kl}^{(n)} \rangle - a_{ij}^{(n)} T_{ij}^{(n)} \right), \quad (4)$$

где a – коэффициент температуропроводности;

p – параметр, характеризующий выбор единицы времени.

$\langle a_{kl}^{(n)} T_{kl}^{(n)} \rangle$ – среднее произведение коэффициента температуропроводности на температуру в клетках ближайшего окружения;

$$\langle a_{kl}^{(n)} T_{kl}^{(n)} \rangle = \frac{1}{6} \sum_{k,l} a_{kl}^{(n)} T_{kl}^{(n)}, \quad (5)$$

Процесс кристаллизации элемента пространства сопровождается выделением в нем определенного количества тепла. При этом повышается температура этого элемента на некую величину dT .

Процесс выделения тепла описывается соотношением

$$T^{(n+1)} \rightarrow T^{(n)} + dT, \quad (6)$$

3.2. Механизмы образования структур

Изначально в жидком расплаве находятся свободные молекулы оксидов. Расплав охлаждается и до момента достижения температуры кристаллизации возможны только два фазовых состояния $\Phi_{ij}^{(n)} \in \{\text{аморфное}; \text{комплекс}\}$, в жидком расплаве молекулы оксидов группируются в комплексы или распадаются $\Phi_{ij}^{(n)} = \text{аморфное} \leftrightarrow \text{комплекс}$. При достижении температуры кристаллизации находясь в состоянии комплекса ячейка затвердевает образуя кристаллический кластер $\Phi_{ij}^{(n)} = \text{комплекс} \rightarrow \text{кристалл}$, при дальнейшем понижении температуры фазовый переход в состояние кристаллического кластера $\Phi_{ij}^{(n)} = \text{кристалл}$ проходит минуя $\Phi_{ij}^{(n)} = \text{комплекс}$, т.е. комплекс образуясь сразу

кристаллизуется $\Phi_{ij}^{(n)} = \text{аморфное} \rightarrow \text{комплекс}$. Так при температуре ниже температуры кристаллизации ячейка может находиться в двух состояниях $\Phi_{ij}^{(n)} \in \{\text{аморфное}; \text{кристалл}\}$. При достижении температуры затвердевания расплав затвердевает.

Условия фазового перехода:

- образование комплекса $\Phi_{ij}^{(n)} = \text{аморфное} \rightarrow \text{комплекс}$ происходит при условии, что соотношение и положение оксидов в клетке является близким к стехиометрии и структуре кристалла, возможен обратный переход $\Phi_{ij}^{(n)} = \text{комплекс} \rightarrow \text{аморфное}$;
- образование кристаллического кластера может происходить из комплекса $\Phi_{ij}^{(n)} = \text{комплекс} \rightarrow \text{кристалл}$ при достижении температуры кристаллизации и из аморфного расплава $\Phi_{ij}^{(n)} = \text{аморфное} \rightarrow \text{кристалл}$ при температурах ниже температуры кристаллизации минуя состояние комплекса, то есть комплекс образуясь сразу кристаллизуется.

Образование комплекса может происходить по нескольким механизмам в зависимости от влияния состояния клеток ближайшего окружения. Механизмы образования комплекса:

- механизм равновероятного образования;
- механизм с учетом локальной кривизны поверхности;
- механизм приоритета направления.

4. Организация параллельных вычислений

При организации параллельных вычислений необходимо было позаботиться о корректном сохранении, а затем просмотре рассчитанной информации. Для того чтобы информация сохранялась в определённом порядке, невзирая на то, что процессы работают параллельно, и какой отработает раньше, какой позже – сказать нельзя, нужно определённым образом синхронизировать расчётные процессы. В подобных случаях, наиболее предпочтительно выделить отдельный процесс (управляющий), который будет ответственен за сбор информации с расчётных процессов и сохранение этой информации в нужной последовательности, для её дальнейшей визуализации. Также, управляющий процесс следит за стадией завершённости всего процесса расчёта, и при необходимости, подаёт сигнал о завершении расчётным процессам.

Для увеличения скорости обмена информацией между процессами, в большинстве случаев был использован асинхронный режим передачи данных.

Распаралеливая расчёт клеточного автомата, следует воспользоваться принципами самого клеточного автомата. Расчётная сетка, разбивается на области – каждая область – отдельный расчётный процесс. Таким образом, сетка процессов сама образует клеточный автомат, где соседние на сетке процессы, обмениваются друг с другом информацией (рис. 1).

Обмен информацией между соседними процессами, производится в виде обмена граничащими клетками клеточного автомата, каждого из процессов, через определённый промежуток времени.

В параллельной программе сначала все процессы работают одинаково: считывают конфигурационный файл, определяют свой ID. Происходит выделение управляющего процесса, которому остальные процессы передают информацию о том, какая часть отображаемого (сохраняемого) поля содержится у них. Расчётное поле, при этом, оптимально распределяется между процессами. За время цикла, процессы рассчитывают

изменение поля, и каждый определённый шаг по времени отсылают информацию управляющему процессу, который в свою очередь сохраняет её на ПЗУ (рис. 2).

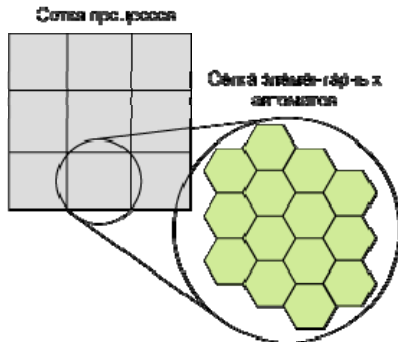


Рисунок 1. Представление сетки процессов в виде клеточного автомата. Каждый процесс, в свою очередь, тоже является клеточным автоматом.

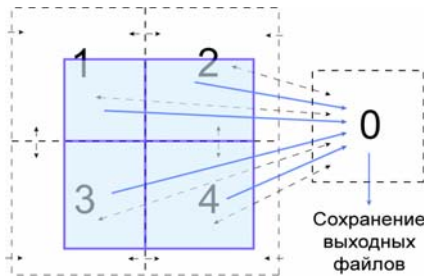


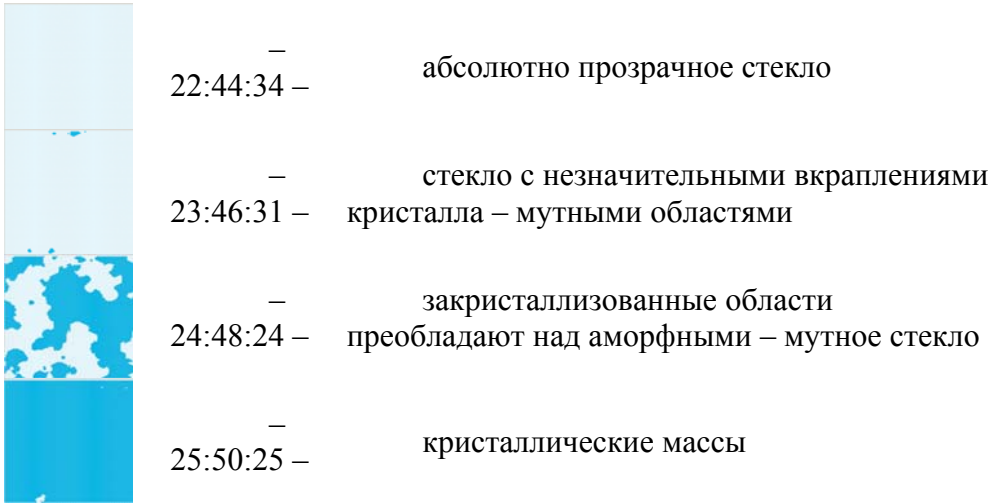
Рисунок 2. Схема взаимодействия процессов.

Для организации параллельных вычислений использовалась библиотека MPI.

5. Результаты расчётов

Для визуализации результатов расчётов был разработан отдельный визуализирующий модуль, работающий в ОС Linux с использованием библиотек графической среды Gnome™. Визуализирующий модуль позволяет просматривать состояния ячеек поля, в сохраняемые промежутки времени.

В результате расчётов были получены изображения стёкол, соответствующие различным начальным концентрациям исходных оксидов. Полученные изображения соответствуют экспериментально получаемым стёклам. Так, в случае мольного соотношения оксидов $\text{Li}_2\text{O}:\text{SrO}:\text{P}_2\text{O}_5$:



Представленные расчетные картины позволяют качественно утверждать, что разработанная нами математическая модель является адекватной эксперименту.

6. Выводы

1. Изучены физико-химические явления процесса кристаллических структур в стёклах;
2. Разработана математическая модель процесса образования структур в виде клеточного автомата. Разработан алгоритм модели для проведения расчётов кластерных вычислительных системах. Составлена расчётная программа на языке программирования C++ с использованием библиотеки MPI, и визуализирующая программа, также на языке C++, использующая библиотеки графической среды Gnome™;
3. Проведены серии расчетов картин процесса образования структур в стёклах, благодаря которым получены картины соответствующие получаемым на практике стёклам;
4. На основе расчетных данных определены оптимальные параметры процесса для получения стекла с заданными свойствами.

Данная математическая модель в виде клеточного автомата носит более общий характер и может быть использована также при исследовании других систем. Разработанная модель может быть применена для представления эволюционных картин образования наноструктур в стёклах различного состава.

Работа выполнена в рамках государственного контракта с Роснаукой (контракт 02.524.11.4006/7934-П), и при поддержке гранта Федерального агентства по образованию по программе «Развитие научного потенциала высшей школы», регистрационный номер 2.1.1/2104.

Литература

1. Кольцова Э.М., Третьяков Ю.Д., Гордеев Л.С., Вертегел А.А. Нелинейная динамика и термодинамика необратимых процессов в химии и химической технологии. М.: Химия, 2001. – 408 с., ил.