

# ПРИМЕНЕНИЕ ГРАФИЧЕСКИХ УСКОРИТЕЛЕЙ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЗАВИСИМОСТИ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ И РАВНОВЕСНОГО МЕЖАТОМНОГО РАССТОЯНИЯ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ В ГЦК-МЕТАЛЛАХ

*В.И. Кочуров, И.Ю. Зубко*

*Пермский национальный исследовательский политехнический университет*

Одним из способов теоретического исследования термомеханических свойств конденсированных сред является дискретный подход, основанный на прямом моделировании движения частиц, вызванного их взаимодействием и внешними воздействиями. Наиболее распространенным является метод молекулярной динамики (МД), когда для каждой частицы (атома или молекулы) решаются уравнения движения, содержащие силы и моменты взаимодействия выбранной частицы со всеми частицами тела или некоторой ее окрестности. Силы взаимодействия частиц определяются по потенциалу их взаимодействия, который представляет собой приближенный способ описания взаимодействия атомов, качественно отражающий их свойства отталкиваться на малых и притягиваться на больших расстояниях. Получаемые результаты зависят от числовых значений параметров потенциалов. Ограничения на размеры тел и период времени налагаются возможностями вычислительной техники и алгоритмов. Одной из проблем является идентификация параметров потенциала: свойства наночастиц, для которых МД работает хорошо, в реальных экспериментах исследованы мало, и для их определения часто используются расчеты, основанные на применении тех или иных потенциалов межатомного взаимодействия. До описания движения макроскопических тел, свойства которых изучены достаточно полно, метод МД «не дошел» – такие тела содержат более  $10^{24}$  атомов, и в настоящее время провести прямые расчеты по решению системы соответствующего числа уравнений не представляется возможным.

В работах [1, 2] предложена модификация метода частиц, позволяющая провести идентификацию параметров потенциала межатомного взаимодействия для металлических монокристаллов с ГЦК- и ОЦК-решетками по их макроскопическим параметрам – равновесному межатомному расстоянию и упругому модулю сдвига. В основе лежит рассмотрение статики взаимодействующих атомов при явном задании структуры решетки кристалла. Возможности подхода демонстрировались на примере потенциала Леннарда–Джонса, применимость которого обоснована тем, что при исследовании механических свойств нет необходимости рассматривать процессы, идущие при сверхнизких температурах или при скоростном деформировании, когда важную роль в поведении атомов могут играть квантовые эффекты. Использование статической постановки позволяет получить точные выражения для упругих модулей и равновесного межатомного расстояния в различных кристаллических решетках в зависимости от размера образца с числом  $N$  атомов на ребре от 3 до 20. Для перехода на макроуровень по этим точным решениям сделан предельный переход при  $N \rightarrow \infty$ . В [1, 2] не обсуждался вопрос об учете температуры при определении механических свойств. В представляемой работе ставится задача о способе задания температуры в статическом подходе. При моделировании поведения механических свойств различных тел методом МД температура вводится через кинетическую энергию движения атомов относительно среднего движения. При стабилизации системы энергия крупномасштабного движения атомов переходит

дит в мелкомасштабные колебания с меньшей амплитудой. Эти мелкомасштабные колебания относительно не меняющихся со временем центров отождествляются с тепловым движением, и температура тела  $T$  определяется с помощью выражения  $E = kT$ , где  $E$  – средняя амплитуда пульсаций кинетической энергии,  $k$  – постоянная Больцмана. В статическом подходе нет возможности вводить температуру таким образом. Здесь тепловые колебания атомов с некоторой заданной амплитудой  $A$  имитируются наложением на систему атомов случайных смещений с этой амплитудой при равномерном распределении направления смещений в пространстве. Частота этих смещений (колебаний) в таком подходе рассматривается как независимый параметр, требующий идентификации.

Для определения зависимости  $a^*$  (равновесного межатомного расстояния монокристалла в форме куба) для каждого заданного  $A$  при произвольных  $a$  (параметр решетки),  $\alpha$  и  $\beta$  (параметры потенциала  $\varphi(r) = \beta((\alpha/r)^{12} - 2(\alpha/r)^6)$  Леннарда-Джонса) вычислялись силы на гранях куба и находился минимум суммы их квадратов. Минимум такой суммы не всегда равен нулю, поскольку для каждого отдельного распределения атомов не всегда выполнялось условие равновесия, справедливое для сил, полученное осреднением по набору реализаций возмущенной конфигурации атомов. Сила на грани образца равна  $\beta(C_1^{(i)}(n, A)\alpha^6 - C_2^{(i)}(n, A)a^6) / a^{13}$ , где индекс  $i = \overline{1, 6}$  задает номер грани,  $n$  – число атомов на ребре куба. Сумма квадратов сил имеет минимум при  $a^* = \sqrt[6]{\sum_{i=1}^6 C_1^{(i)} C_2^{(i)} / \sum_{i=1}^6 C_2^{(i)2}} \alpha$ .

Для каждого значения амплитуды  $A$  строились 1000 реализаций случайных конфигураций решетки и по ним определялось среднее значение межатомного расстояния. Также для каждой реализации при расстоянии  $a = a^*$  определялась величина и потенциальной энергии всей системы атомов, отнесенной к числу атомов. Зависимость безразмерных величин  $u/\beta$  и  $A/\alpha$  приведена на рис. 1, а.

Для решения задачи использовалась рабочая станция с процессором AMD Phenom X6 1055T и графическим ускорителем Nvidia GeForce GTS460. В качестве языков программирования были выбраны Intel Fortran Composer XE и PGI Accelerator Fortran v.12. Расчеты показали более чем двукратное преимущество вычислений на графическом ускорителе (с использованием технологии PGI Accelerator) по сравнению с наиболее эффективными реализациями OpenMP-распараллеливания как для переменных одинарной, так и для переменных двойной точности (рис. 1, б).

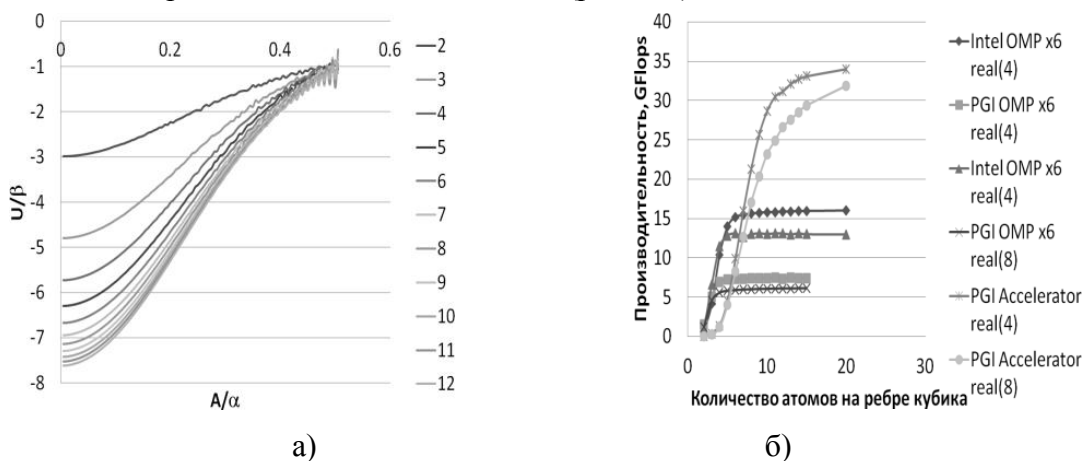


Рис. 1. Результаты: а) зависимость  $u/\beta$  от  $A/\alpha$  при разных  $N$ , б) сравнение производительности расчетов (различные технологии)

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №10-08-00156-а, грант №11-01-96033-р-Урал-а).

### **Литература**

1. Зубко И.Ю., Трусов П.В. Определение упругих постоянных ГЦК-монокристаллов с помощью потенциала межатомного взаимодействия // Вестник ПГТУ. Механика. Пермь, 2011. Т.1. С.147–169.
2. Зубко И.Ю., Мелентьева О.В., Морозова В.П., Кочуров В.И. Вывод упругого закона монокристаллов металлов из потенциала межатомного взаимодействия // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. Н. Новгород: Изд-во ННГУ им. Н.И. Лобачевского, 2011. №4. Ч.5. С. 2181–2183.