

А. Н. Харлан
(ГГУ имени Ф. Скорины, Гомель)
Науч. рук. **Е. А. Дей**, канд. физ.-мат. наук, доцент

РЕАЛИЗАЦИЯ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ В МЕТОДЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Разработана программа для моделирования свойств реальных одноатомных (инертных) газов методом молекулярной динамики [1] в двумерной геометрии с использованием потенциала Леннарда-Джонса. В качестве среды разработки использовалась платформа Qt с визуализацией, реализованной через OpenGL и библиотеку QCustomPlot для графиков и анализа результатов.

Основная цель проекта заключалась в создании гибкой и производительной программы, способной наглядно демонстрировать физические явления и поведение частиц при взаимодействии. Для реализации были использованы подходы и технологии:

- C++ и Qt Framework: Приложение реализовано на C++ с использованием Qt, обеспечивающего эффективную работу с графикой и интерфейсами;
- физическая модель: Основу расчетов составляет модель Леннарда-Джонса, предназначенная для описания взаимодействий между нейтральными атомами или молекулами. Применялся алгоритм Velocity-Verlet для численного интегрирования уравнений движения, обеспечивающий стабильность и точность вычислений. Для поддержания заданной температуры и моделирования различных термодинамических условий был реализован термостат Андерсена, позволяющий эффективно контролировать температуру системы путём случайных перезапусков скоростей частиц;
- реализация CUDA [2]: В приложении предусмотрена опция выполнения расчётов на графическом процессоре (GPU) с использованием технологии CUDA, что значительно ускоряет вычисления для большого количества частиц;
- графический интерфейс и визуализация: Визуализация частиц реализована с помощью OpenGL, графики изменения энергии и температуры системы представлены через библиотеку QCustomPlot;

Программа позволяет задать параметры системы (рисунки 1, 2), выполнить численное решение дифференциальных уравнений движения молекул с учетом граничных условий, вычислить термодинамические и кинетические параметры вещества, графически отобразить моделируемую конфигурацию молекул на экране компьютера. В ходе вычислительного эксперимента строятся графики изменения кинетической, потенциальной и полной энергии системы молекул с течением времени, распределения частиц по скоростям, и функции радиального распределения частиц (рисунок 3).

В процессе реализации было выполнено тестирование и отладка приложения с целью обеспечения корректности и стабильности работы алгоритмов и визуализации. Был проведён анализ поведения системы при различных начальных условиях и параметрах, таких как количество частиц, плотность и температура, а также изучено влияние выбора граничных условий и термостатов на динамику частиц. Особое внимание уделялось плавности движения частиц и корректности их взаимодействий.

```

133 void MDSys2D::integrate(double dt)
134 {
135     if (!canonical) {
136         // NVE (микроканонический): классический Velocity-Verlet
137         for (int i = 0; i < N; ++i) {
138             vx[i] += 0.5 * fx[i] * dt; // полушаг для скорости
139             vy[i] += 0.5 * fy[i] * dt;
140             x[i] += vx[i] * dt; // полный шаг для позиции
141             y[i] += vy[i] * dt;
142         }
143         applyBoundaryConditions(); // периодика
144         calculateForces(); // пересчёт сил
145         for (int i = 0; i < N; ++i) {
146             vx[i] += 0.5 * fx[i] * dt; // второй полушаг для скорости
147             vy[i] += 0.5 * fy[i] * dt;
148         }
149     } else {
150         // --- NVT с термостатом Андерсена ---
151         // 1) Полный Velocity-Verlet
152         for (int i = 0; i < N; ++i) {
153             vx[i] += 0.5 * fx[i] * dt;
154             vy[i] += 0.5 * fy[i] * dt;
155             x[i] += vx[i] * dt;
156             y[i] += vy[i] * dt;
157         }
158         applyBoundaryConditions();
159         calculateForces();
160
161         for (int i = 0; i < N; ++i) {
162             vx[i] += 0.5 * fx[i] * dt;
163             vy[i] += 0.5 * fy[i] * dt;
164         }
165
166         // 2) Andersen thermostat: с вероятностью p_coll заменяем скорость
167         static std::mt19937 gen{ std::random_device{}() };
168         std::uniform_real_distribution<double> uni(0.0, 1.0);
169         std::normal_distribution<double> gauss(0.0, std::sqrt(T));
170
171         const double nu = 1.0; // частота «столкновений»
172         const double p_coll = 1.0 - std::exp(-nu * dt); // вероятность перезаписи за шаг dt
173
174         for (int i = 0; i < N; ++i) {
175             if (uni(gen) < p_coll) {
176                 vx[i] = gauss(gen);
177                 vy[i] = gauss(gen);
178             }
179         }
180
181         // 3) Обновляем кинетическую энергию
182         updateKineticEnergy();
183     }
184 }

```

Рисунок 1 – Программная реализация вычислений для микро- и макроканонического ансамблей и термостата Андерсена

В процессе реализации были проведены эксперименты и анализ производительности приложения, подтвердившие эффективность использования CUDA для оптимизации вычислений. Был выявлен и подробно изучен эффект масштабирования скоростей частиц и влияние различных термостатов на устойчивость модели.

Выводы:

- реализованное программное обеспечение соответствует поставленным задачам по моделированию и визуализации молекулярной динамики;
- использование GPU-вычислений доказало существенное ускорение симуляции, особенно при росте числа частиц. Так использование вычислительных мощностей GPU позволяет реализовать обработку 10000 частиц (рисунок 3);
- приложение демонстрирует стабильную работу модели Леннарда-Джонса и алгоритма интегрирования Velocity-Verlet при различных условиях симуляции.

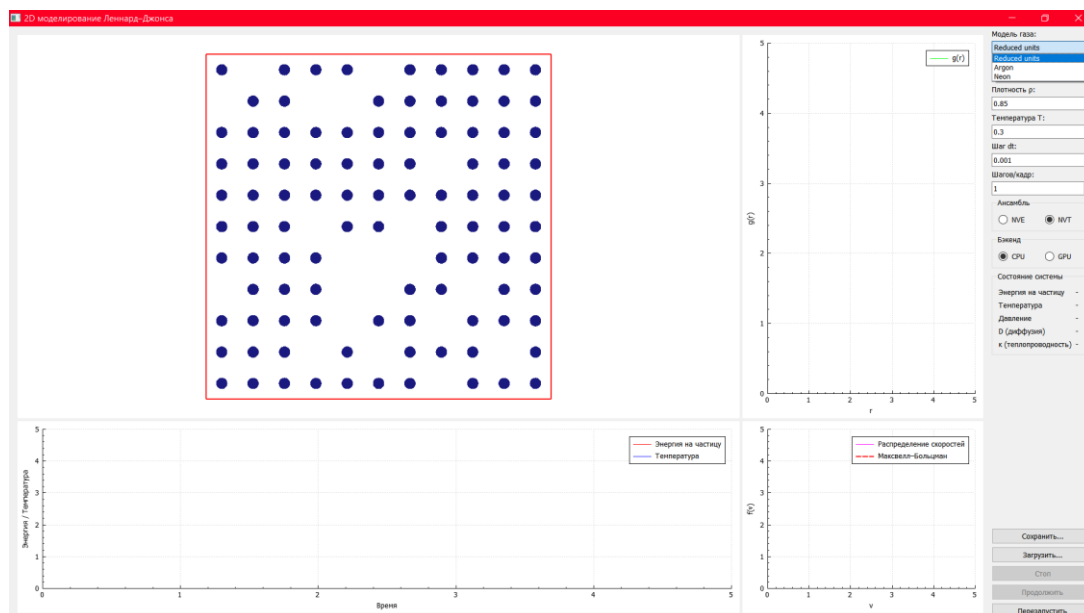


Рисунок 2 – Стартовое окно программы с открытым выбором модели газа

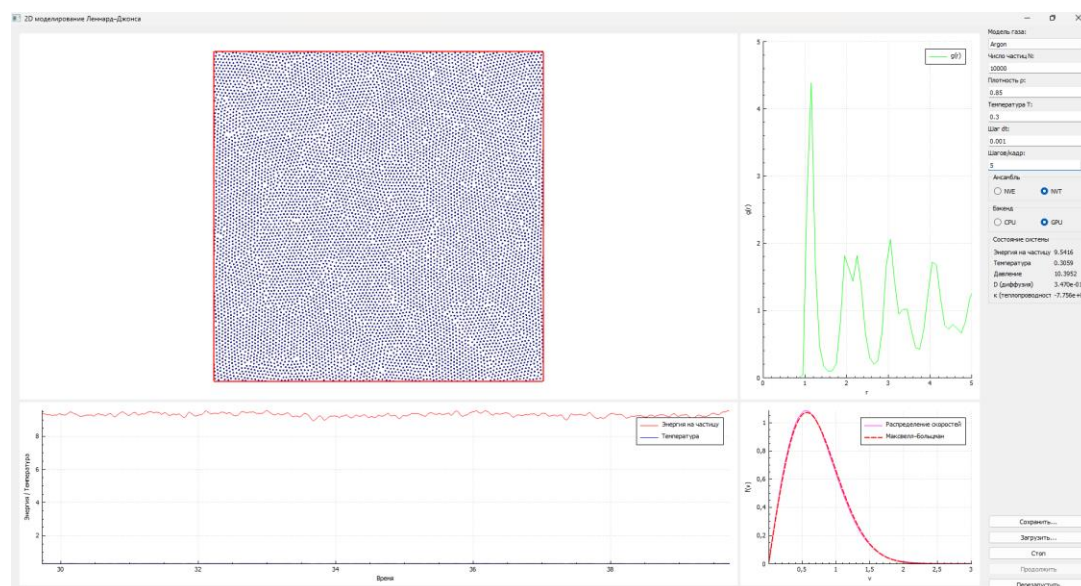


Рисунок 3 – Моделирование взаимодействия 10000 частиц газа аргона

Таким образом, разработанная программа позволяет методом вычислительного эксперимента исследовать свойства простых веществ и наблюдать движение моделируемых элементов на экране компьютера в двумерной геометрии, что может быть полезно для решения образовательных и исследовательских задач.

Литература

1. Ибрагимов, И. М. Основы компьютерного моделирования наносистем : учебное пособие / И. М. Ибрагимов, А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров. – СПб. : Издательство «Лань», 2022. – 384 с.
2. Сандерс, Дж. Технология CUDA в примерах: введение в программирование графических процессоров / Дж. Сандерс, Э. Кэндрот. – М. : ДМК Пресс, 2011. – 232 с.