

Отчет по гранту ФПМУ ИТЭС ОИВТ РАН

Лавриненко Ярослав Сергеевич

за 2014/2015 гг. по теме

«Пакет программ молекулярной динамики для систем с кулоновским взаимодействием»

При компьютерном моделировании методом молекулярной динамики систем с кулоновским взаимодействием, таких как неидеальная электронная и пылевая плазма, электролиты, ионные жидкости, возникает потребность в больших объемах вычислений.

Для моделирования неидеальной плазмы была разработана программа с использованием графических ускорителей (GPU). Для систем с малым количеством частиц был изменен алгоритм расчета сил, что позволило максимально использовать ресурсы GPU.

При моделировании пространственно однородных систем возникает необходимость корректной постановки граничных условий и их реализации в программном пакете. В качестве граничных условий были рассмотрены метод ближайшего метода, жесткие отражающие стенки и возвращающий потенциал на стенках.

Реализация жестких отражающих стенок при используемой разностной схеме приводит к возникновению нефизических эффектов, таких как нарушение сохранения полной энергии в замкнутой системе.

Реализованы граничные условия с гармоническим отражающим потенциалом на стенке, и изучено их влияние на термодинамические характеристики системы. Проведено исследование сходимости термодинамических величин при увеличении размеров моделируемой системы для различных граничных условий.

Доклады

1. Ya.S. Lavrinenko, I.V. Morozov, I. A. Valuev Boundary condition problem for atomistic simulations of classical and quantum strongly coupled systems of charged particles //XV International conference on the Physics of Non-Ideal Plasmas August 30 – September 4, 2015, Almaty, Kazakhstan