

Российский химико-технологический университет им. Д.И.Менделеева  
Факультет информационных технологий и управления  
Кафедра информационных компьютерных технологий

# Алгоритм математического моделирования массопереноса в нанопористых структурах с применением методов молекулярной динамики

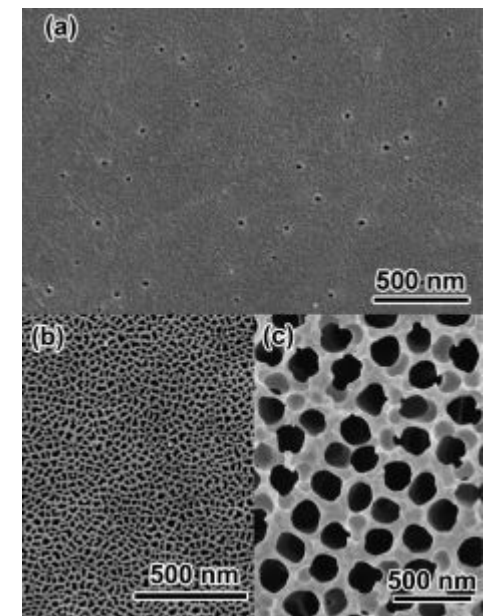
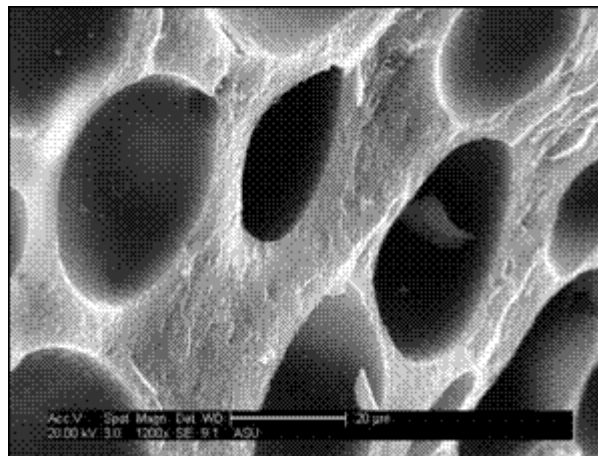
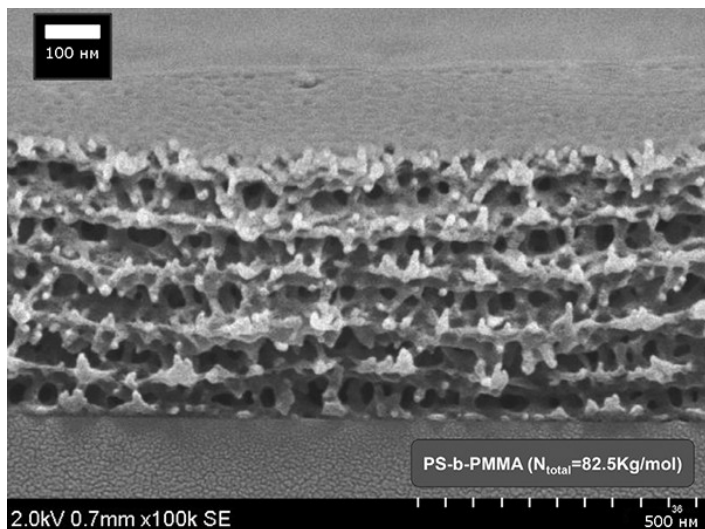
Аспирант: Поветкин А. Д.

# Основные направления моделирования методами молекулярной динамики

- Белковые молекулы
- Определение физических свойств материалов
- Исследование свойств растворов
- Мембранные технологии

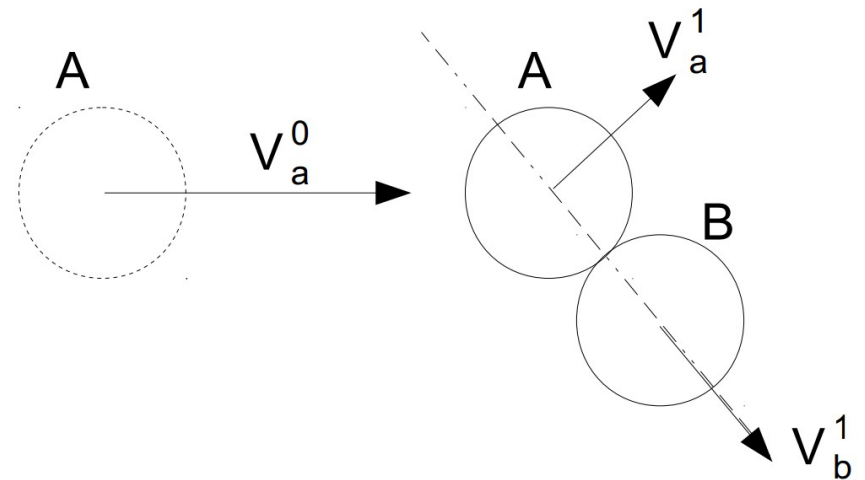
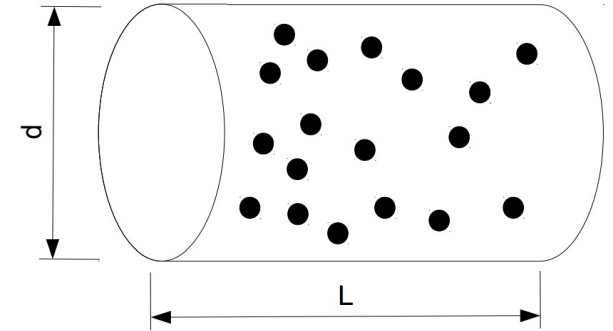
# Область применения алгоритма

- Мембрана с нанопористой структурой
- Длина - до 10 мкм
- Диаметр – до 1 мкм
- Вещество – газ или смесь газов
- Разреженность (вплоть до нормальных условий)
- Время моделирования порядка микросекунд



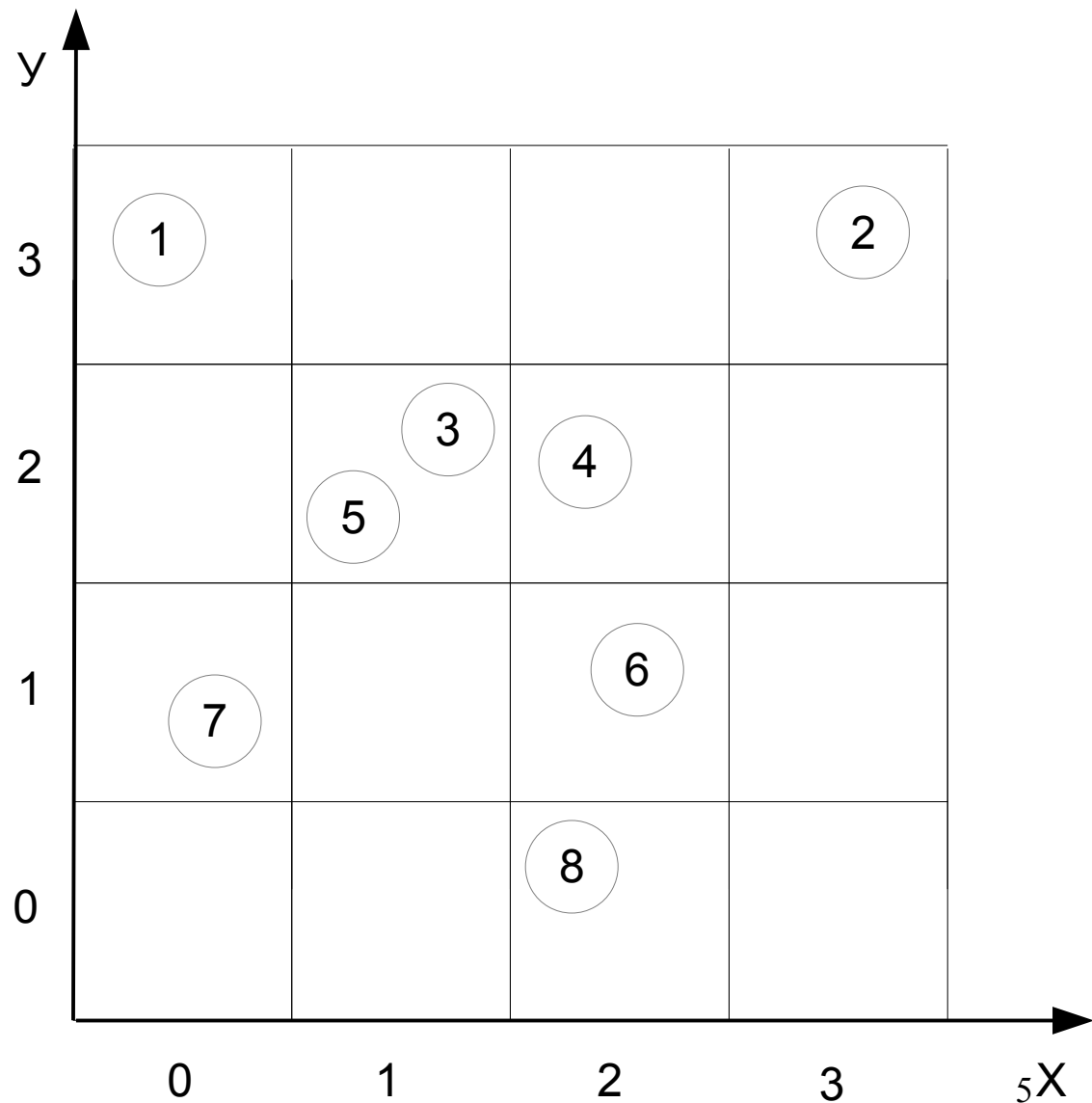
# Модель твердых сфер

- Вещество представлено в виде множества частиц
- Движение по законам классической механики
- Взаимодействие по принципу абсолютно упругого удара



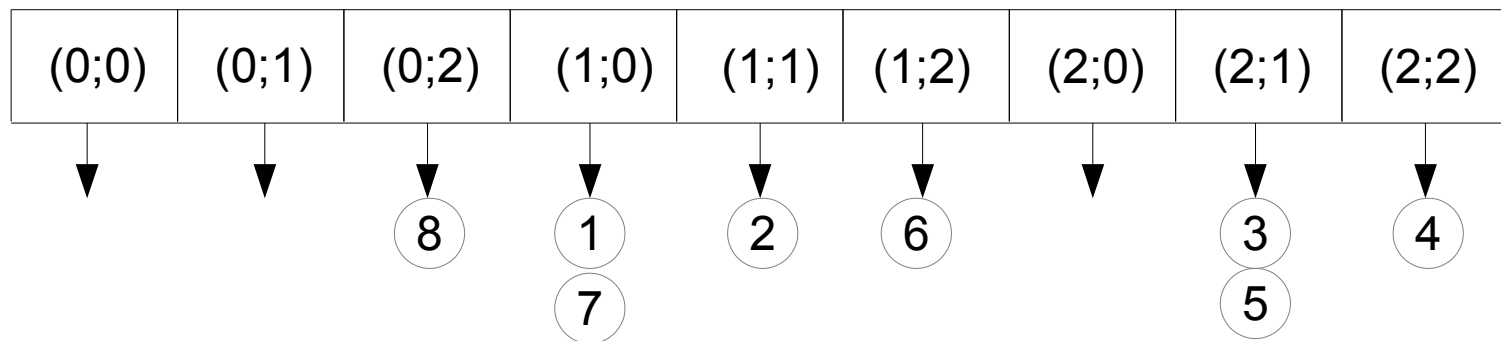
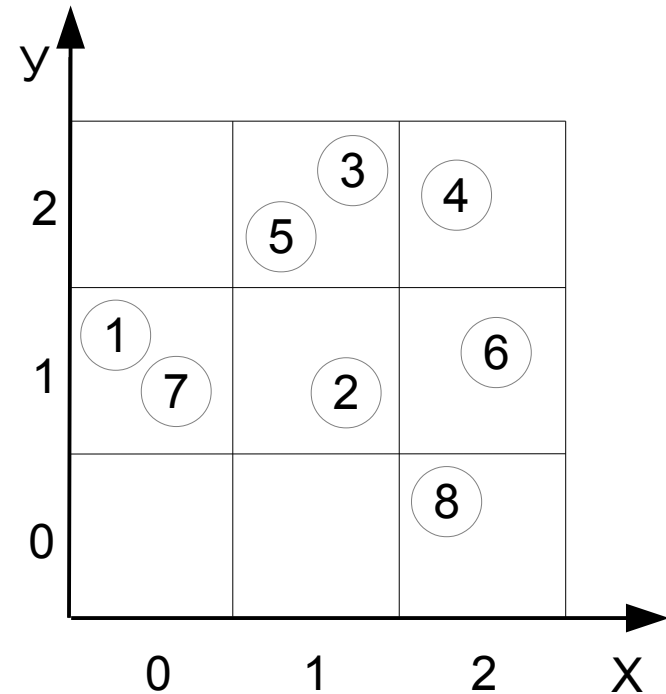
# Разбиение пространства на ячейки

- Моделируемое пространство разбито на кубические ячейки
- Каждой частице соответствует ячейка
- Частицы взаимодействуют в пределах одной ячейки



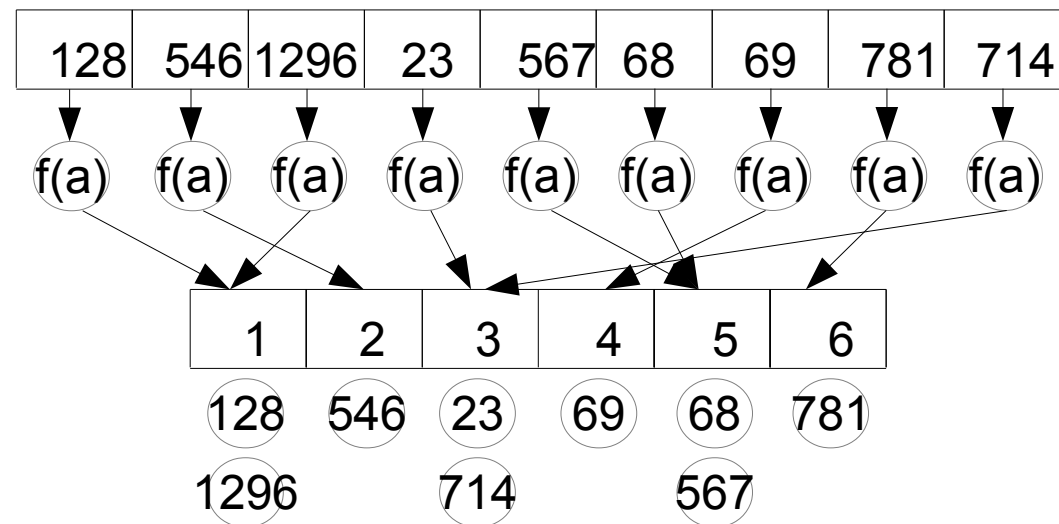
# Списки соседей

- По одному списку для каждой ячейки
- Для конкретно взятой частицы можно быстро определить соседей
- Недостаток: огромное количество ячеек, большая часть которых пустая



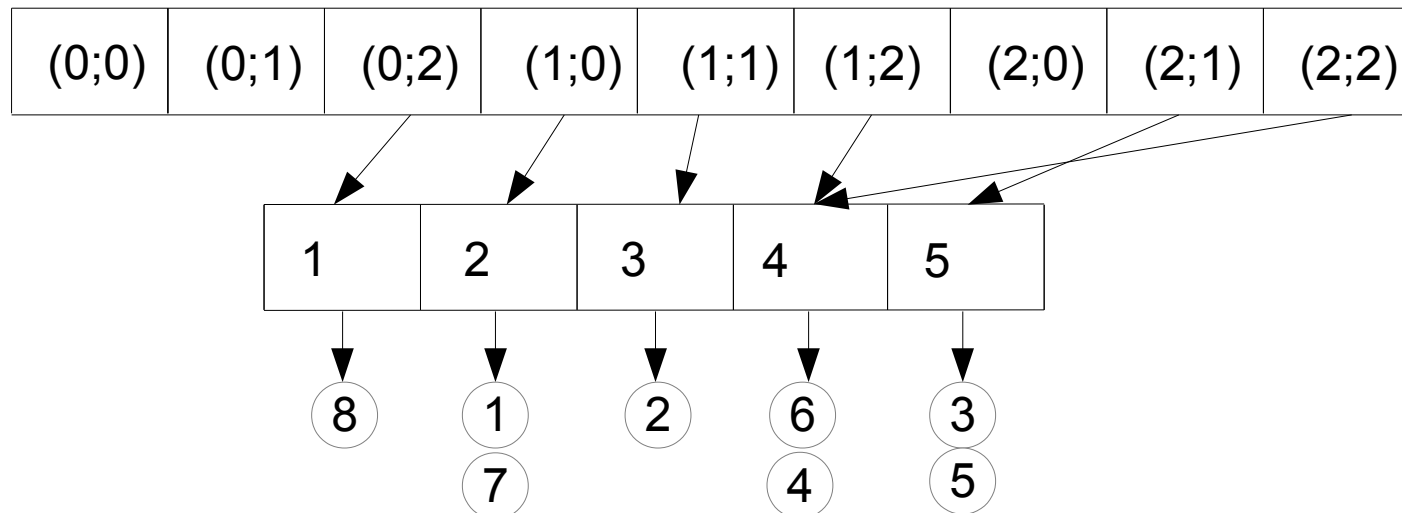
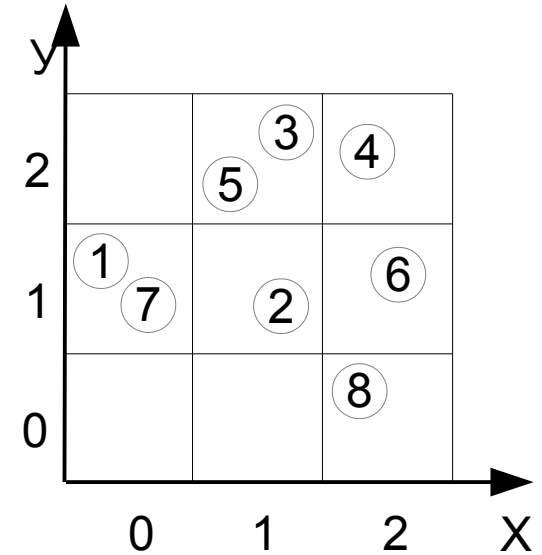
# Хэш-функция

- Быстро вычисляется
- Равномерно распределяет исходные данные
- Фиксированный размер хэша



# Использование хэш-функции для хранения списков соседей

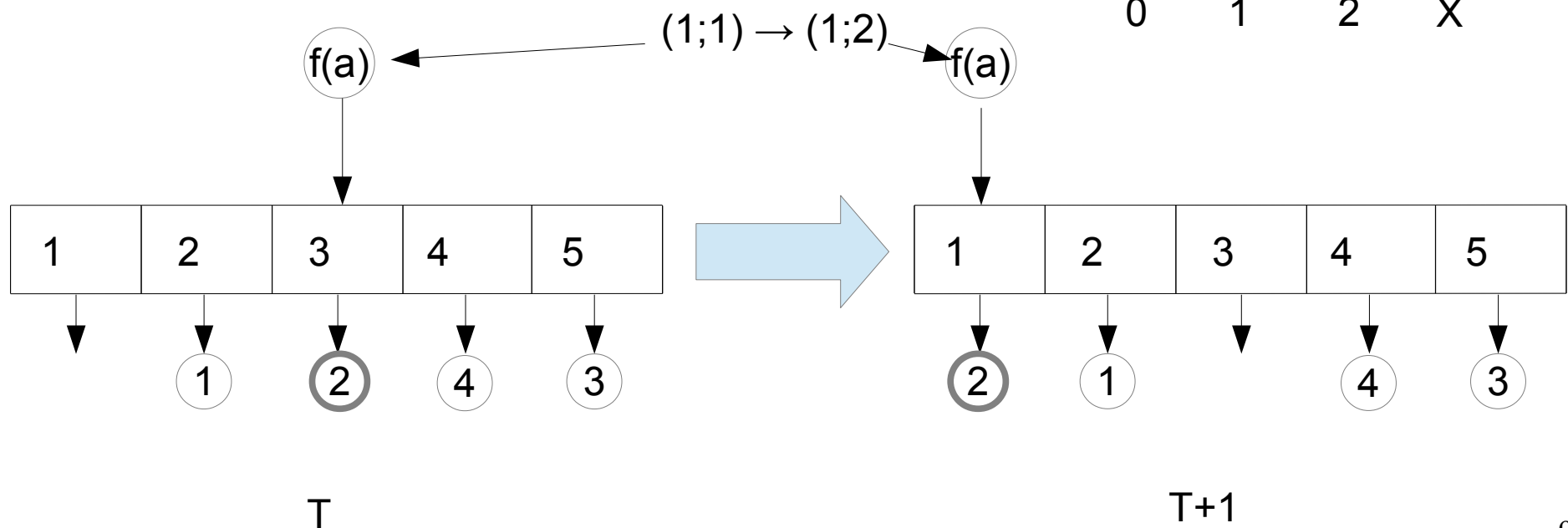
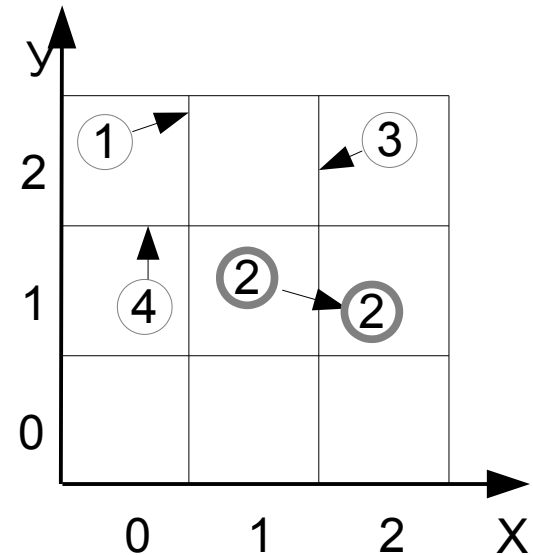
- Есть возможность менять объем используемой памяти, выгодный расход
- Не тратится память на пустые ячейки
- Минус: коллизии





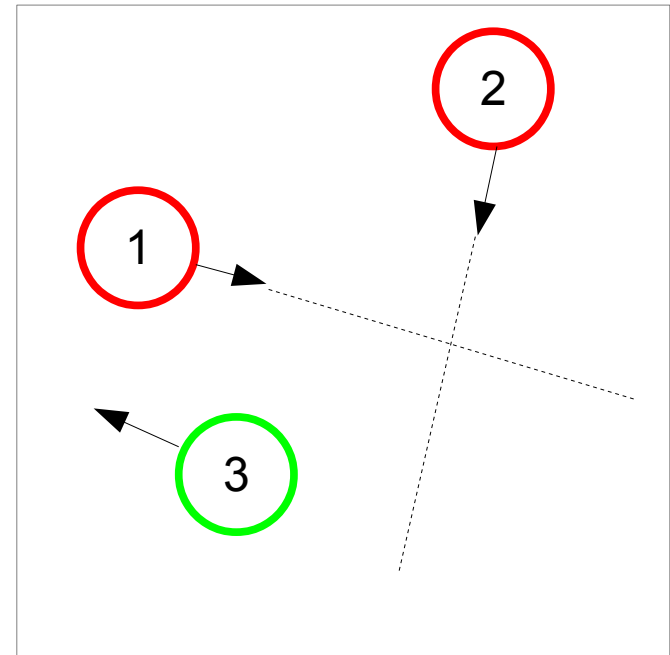
# Перемещение частиц между ячейками

- Хэши считаются на каждой итерации
- Поддерживает в актуальном состоянии списки соседей
- Обработывается малая часть частиц



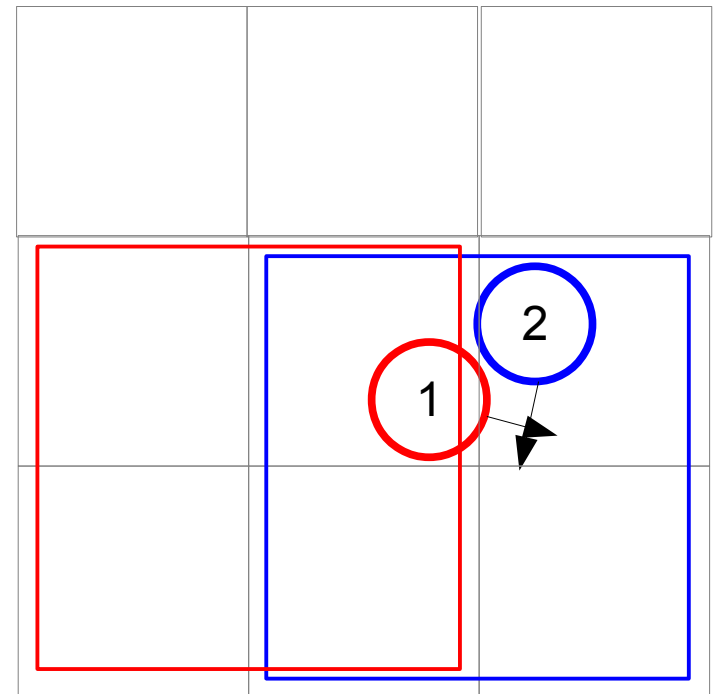
# Прогнозирование столкновений

- Рассчитывается в пределах ячейки
- Рассчитывается только при переходе между ячейками и столкновениях
- Позволяет на время исключить из расчета не взаимодействующие частицы

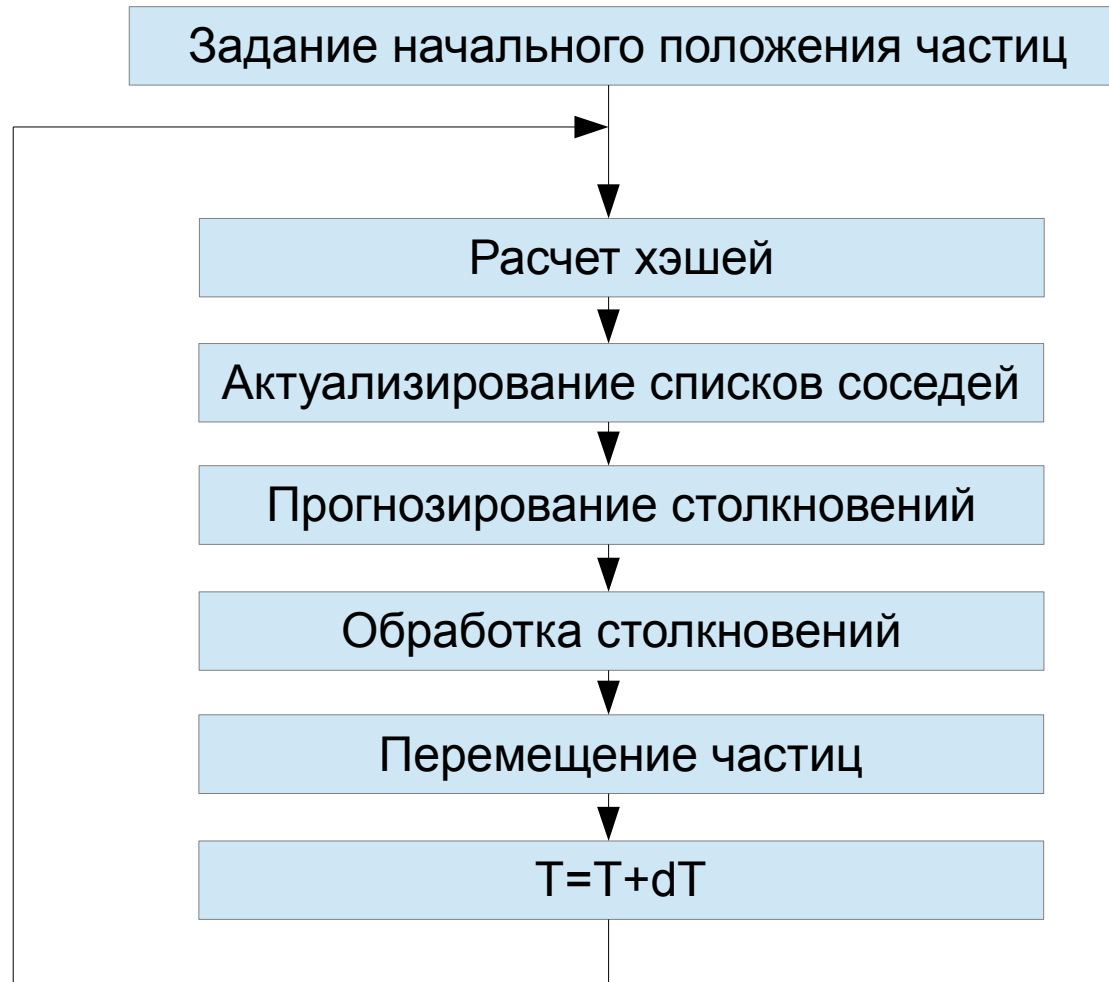


# Столкновение частиц в соседних ячейках

- Частица добавляется в списки соседей смежных ячеек
- При проверке на столкновения проверяются списки соседей смежных ячеек
- Для двух частиц в смежных ячейках имеется минимум один общий список соседей

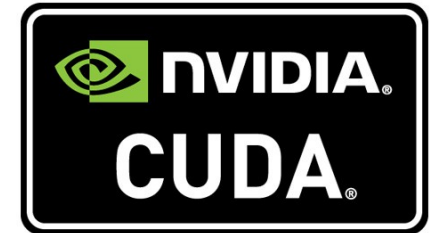


# Блок-схема



# Применение технологий параллельного программирования

- Расчет хэшей – Nvidia CUDA
  - Независимый расчет для каждой частицы
  - Тысячи параллельно выполняемых расчетов



- Работа со списками соседей – OpenMP
  - Распараллеливание на CPU
  - Скорость и простота использования
  - При отсутствии GPU ускоряет и расчет хэшей



# Возможные улучшения

- Расчет кинетики химических реакций
- Расчет взаимодействия с катализатором, размещенным на стенках пор
- Использование гексагональной сетки для ускорения расчета
- Использование потенциалов межмолекулярного взаимодействия для расчета влияния сил на движение частиц

# Выводы

- Разработан алгоритм для моделирования массопереноса в порах малого размера
- Работает в 1.5 – 4 раз быстрее предыдущей версии, разработанной в ходе выполнения дипломной работы
- Результаты моделирования совпадают с полученными ранее данными по количеству столкновений и коэффициенту диффузии
- Не требует CUDA, в отличие от предыдущей версии

**Спасибо за внимание!**