

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЧАСТИЦ В МИКРОСИСТЕМАХ ГАЗ — МЕТАЛЛ

Пузырьков Дмитрий Валерьевич

Аспирант

ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, Москва, Россия

E-mail: dpuzyrkov@gmail.com

Текущий этап развития компьютерных технологий и их вычислительный потенциал уже в настоящее время позволяет рассчитывать взаимодействие свойств сложных систем на молекулярном и даже атомарном уровнях.

Математические модели, описывающие такие процессы методами молекулярной динамики, могут содержать огромное количество частиц, до нескольких миллиардов, описываемых несколькими десятками свойств. Такие объемы данных могут исчисляться терабайтами, что делает затруднительным исследование свойств процесса. Это приводит нас к проблеме представления результата вычислений в виде удобном для анализа. Одним из таких методов представления данных является визуализация состояний и траекторий частиц по всей системе или по ее области.

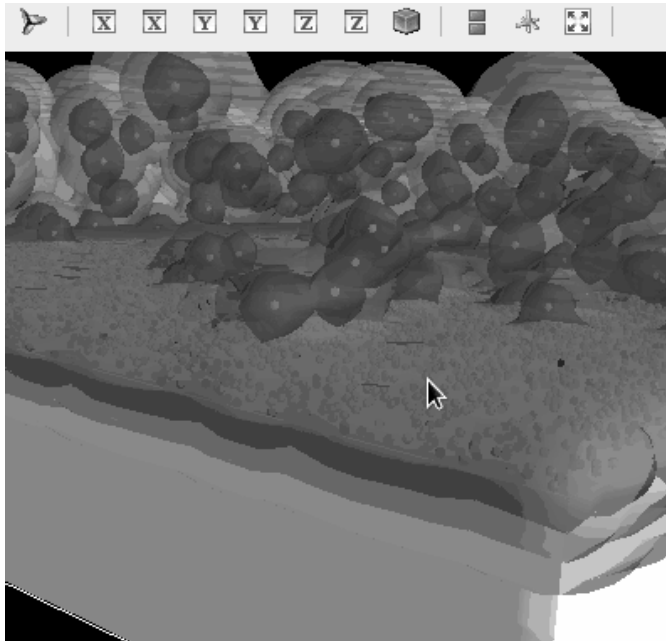
Данная работа посвящена визуализации в задачах взаимодействия газа с металлической пластиной, рассчитанного средствами молекулярной динамики [1]. Численный алгоритм расчета был полностью исследован и апробирован, а вот анализ результатов расчетов стал новой проблемой, особенно в случае большого размера симулируемой системы. В связи с этим необходимо уделить особое внимание проблеме пост-обработки и визуализации результатов симуляции. Так как самые интересные феномены случаются на границе газ-металл, то для визуализации было предложено отрисовывать частицы в соответствующих 3D координатах, а так же их векторов скоростей, траектории и объемную плотность в виде изоповерхностей или тумана с учетом слоистой структуры металла и газа, находящегося над ним. В виду большого размера системы отрисовка всех частиц не является показательной, поэтому потребовалось отрисовывать не всю область моделирования, а только интересующий нас регион данных. Так же был опробован способ пост-обработки и средство визуализации, основанные на языке Python с использованием дополнительных библиотек.

Для того чтобы достигнуть желаемого результата, кроме апробирования технологии, было разработано параллельное программное

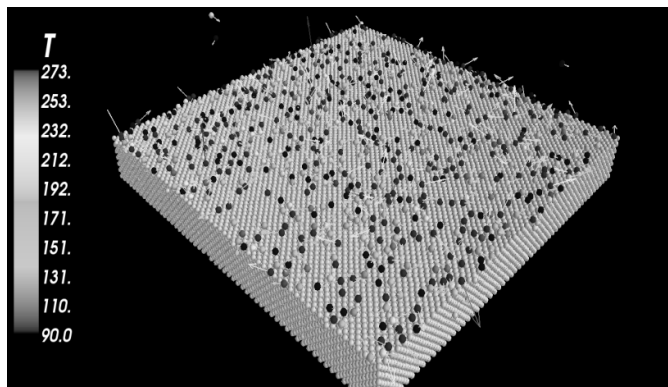
обеспечение, позволяющее обрабатывать большие объемы данных в интересующих нас участках системы на ходу, то есть параллельно с расчетами, и по их завершению собирать дискретные кадры в видео-файл. В качестве инструмента для решения задачи визуализации был использован программный пакет "enthought mayavi2"[2], а именно его подмножество MLAB, которое построено как расширение над VTK. MLAB позволяет иметь дело с большими объемами данных в памяти, не показывая на экране, а затем сохранять данные в файлы изображений. Для индивидуального использования этого пакета необходимо разработать собственные скрипты для загрузки, обработки, а так же анимации вращения и приближения сцены. В результате применения такого рода визуализации к исследованию взаимодействия газа с металлом появилась возможность детально наблюдать эффект адсорбции (Рис. 1 и 2).

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 15-07-06082).

Иллюстрации



Пример визуализации.



Эффект адсорбции.

Литература

1. Podryga V.O., Polyakov S.V. Molecular simulation of interaction of gas mixture with metal surface. Mesh methods for boundary-value problems and applications. Proceedings of 10th International Conference. Kazan: Otechestvo, 496-502, 2014.
2. Mayavi documentation: <http://docs.enthought.com/mayavi/mayavi/mlab.html>