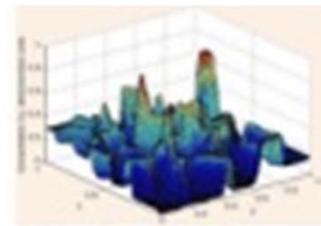


Комп'ютерне моделювання задач прикладної математики

Вступ.

Основні поняття та методи

Лекція 1



Моделювання

Моделювання – один із способів пізнання навколошнього світу й може бути як створенням зменшених або збільшених копій реальних об'єктів, так й описом явищ за допомогою математичних формул чи алгоритмів.

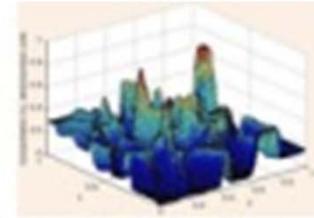
Цілі моделювання

Пізнання сутності досліджуваного об'єкта, будови й механізму взаємодії його складових

Прогнозування поведінки системи при різних зовнішніх впливах

Пояснення вже відомих результатів досліджень

Оптимізація та пошук правильного способу керування об'єктом



Моделі. Види моделей

Модель – об'єкт, який замінює досліджуvalьну систему, зберігаючи суттєві властивості оригіналу.



Моделі



Матеріальні

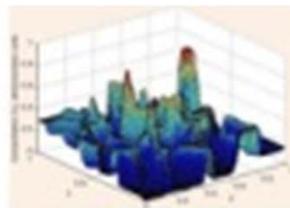
*подано за допомогою спрощеного
матеріального об'єкта*

Інформаційні

*подано за допомогою описів,
формул, схем тощо*



Інформаційні моделі



Математичні

- знакові моделі що описують певні числові послідовності

Графічні

- візуальне подання об'єктів, які наскільки складні, що їх опис іншими способами не дає людині ясного розуміння

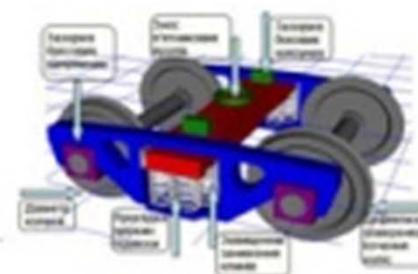
Імітаційні

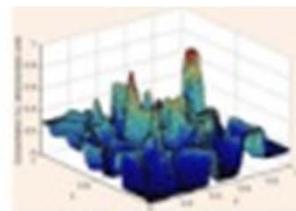
- дають можливість спостерігати зміну поведінки елементів системи-моделі, проводити експерименти, змінюючи значення параметрів моделі

Математична модель задачі

$$\begin{aligned} \frac{dy_1}{dt} &= R_1 \left(\frac{y_1}{R_1} + \frac{y_2}{R_2} \right) - k_1 y_1 (y_1 - y_0) - u_1 \\ \frac{dy_2}{dt} &= R_2 \left(\frac{y_1}{R_1} + \frac{y_2}{R_2} \right) - k_2 y_2 (y_2 - y_0) - u_2 \\ \text{Найбільш} & \quad y_1^* = \frac{R_1(R_1 + R_2)}{k_1(k_1 + k_2)} \quad y_2^* = \frac{R_2(R_1 + R_2)}{k_2(k_1 + k_2)} \quad y = \frac{1}{2} \cdot \frac{R_1 + R_2}{k_1 + k_2} \\ \text{дальніш} & \quad u_1^* = y_0 - y_1^* \quad u_2^* = y_0 - y_2^* \\ \text{Лагун} & \quad y_1(t) = u_1 \quad y_2(t) = \frac{(y_0 - y_1^*) e^{(k_1+k_2)t} + y_1^*}{e^{(k_1+k_2)t} + 1} \\ \text{Ініціальні умови} & \quad y_1(0) = y_0 \quad y_2(0) = 0 \\ \text{Функція стиснення} & \quad f(x) = \frac{x}{10} - 40 \quad g(x) = \frac{x}{10} - 80 \end{aligned}$$

Графічна модель





Комп'ютерне моделювання

Комп'ютерне моделювання - це процес відтворення поведінки системи за допомогою комп'ютерної програми, що реалізує подання об'єкта, системи або поняття у формі, відмінній від реальної, за допомогою алгоритмічного опису, що включає залежності між величинами й набір даних, які характеризують властивості системи та динаміку їх зміни у часі.

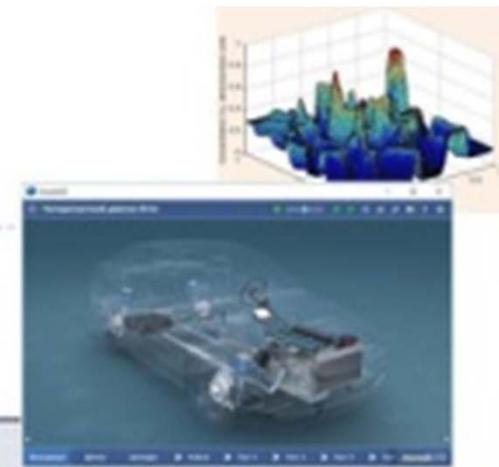
Результат комп'ютерного моделювання передбачає отримання **кількісних** (прогноз деяких майбутніх або пояснення минулих значень змінних) і **якісних** (структурна, динаміка розвитку, стійкість, цілісність) висновків.



Види комп'ютерних моделей



Фізичні



Імітаційні



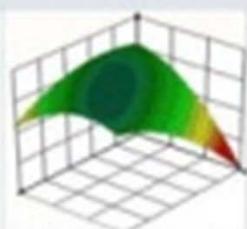
Обчислювальні



Статистичні

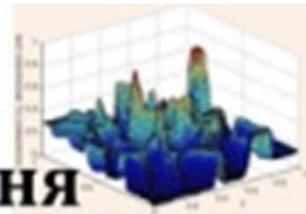


Графічні



Моделі знань





Можливості комп'ютерного моделювання

Вивчати явища і об'єкти, які не відтворюються або не існують в реальному житті

Візуалізувати об'єкти будь-якої природи, в тому числі і абстрактні

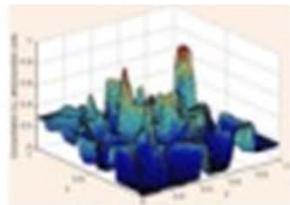
Досліджувати явища і процеси в динаміці

Керувати часом

Отримувати різні характеристики об'єкта в числовому або графічному вигляді

Знаходити оптимальну конструкцію об'єкта, не виготовляючи його пробних екземплярів

Проводити експерименти без ризику негативних наслідків для людини або навколишнього середовища



Комп'ютерний експеримент

Комп'ютерний експеримент – вплив на комп'ютерну модель інструментами програмного середовища з метою визначення, як змінюються параметри моделі.

Обмеження комп'ютерного експерименту:

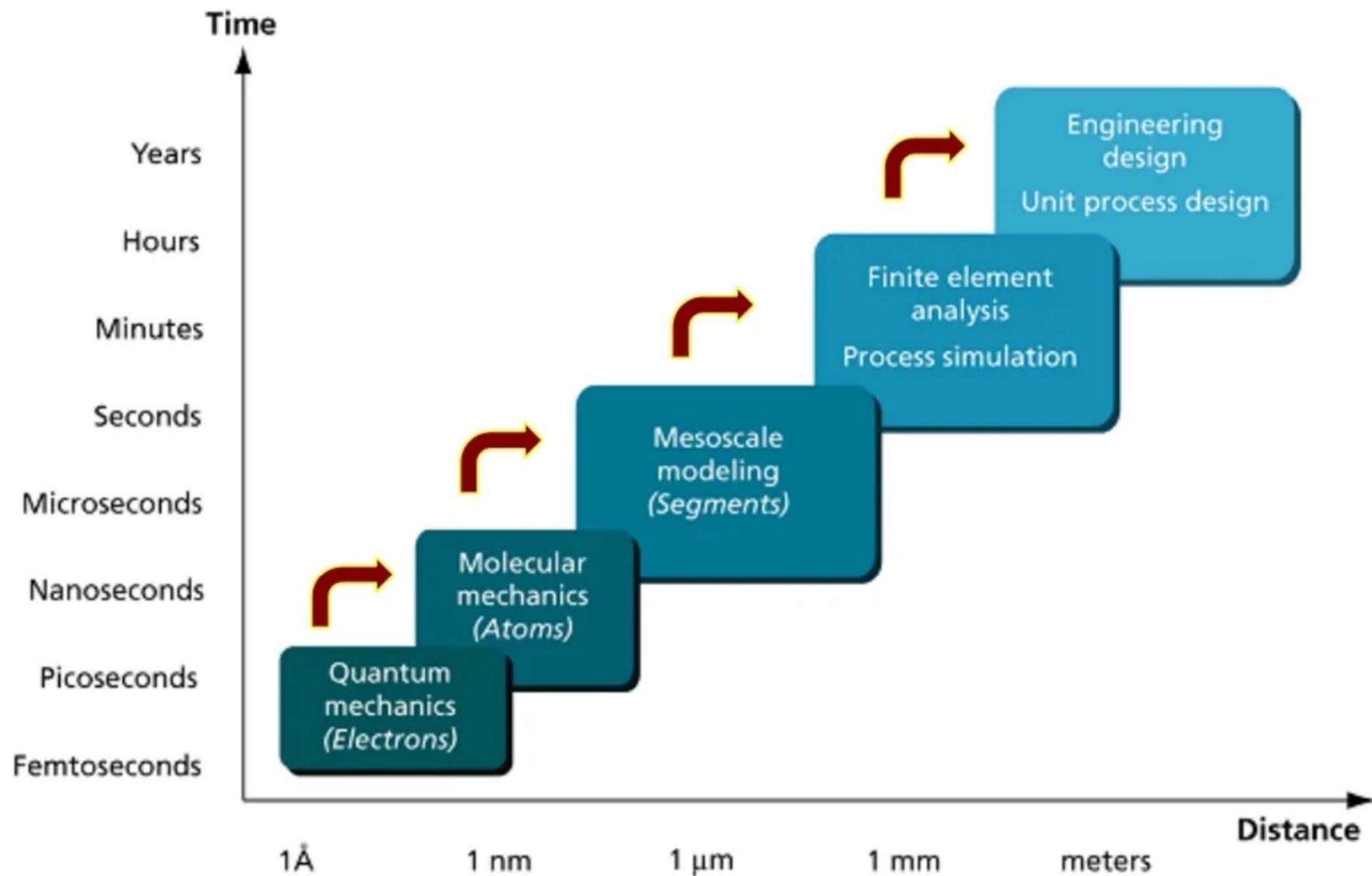
Розв'язок носить частковий характер

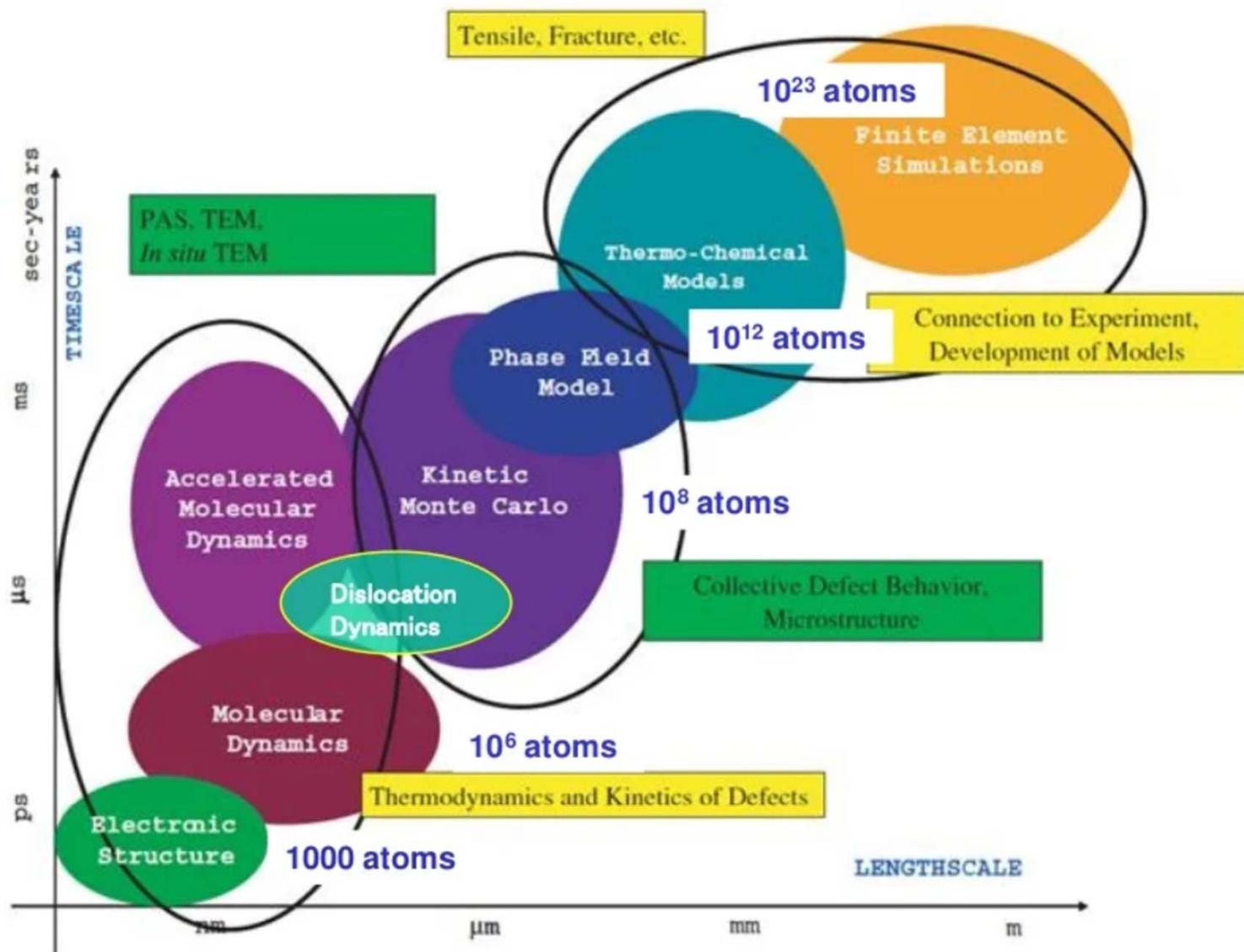
Робота моделі залежить як від її правильності, так і від коректності вхідних даних

Робота моделі залежить від математичних залежностей і числових параметрів, які закладено в моделі

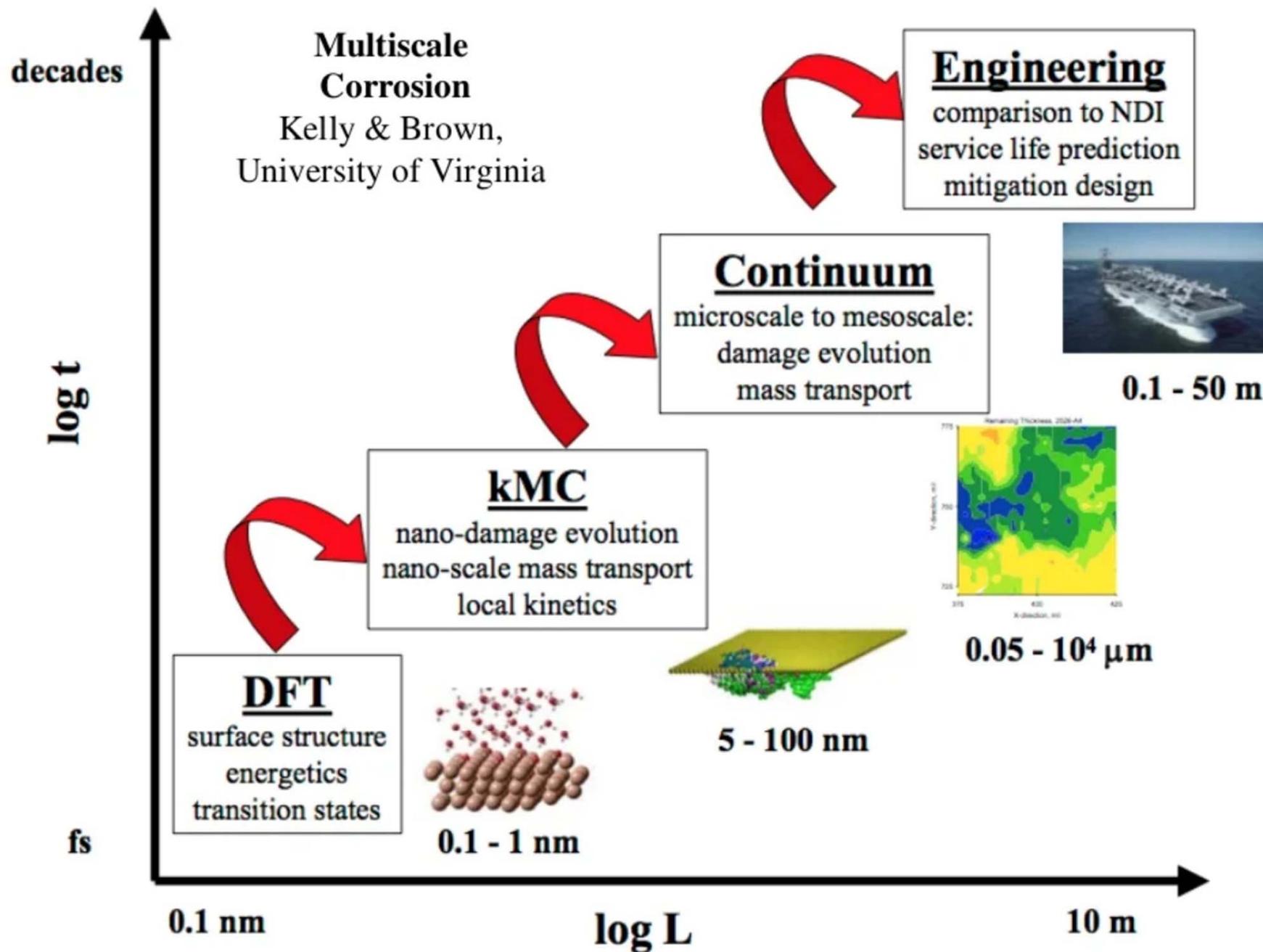


Multiscale modeling scheme

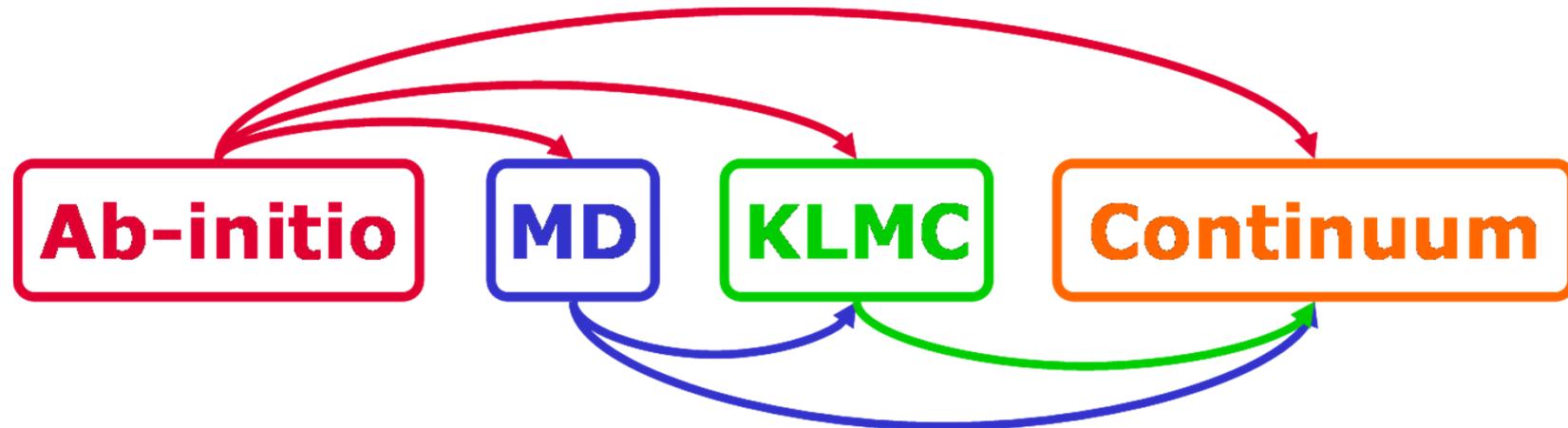




Source: <https://courses.physics.illinois.edu/phys466/sp2013/projects/2010/Oaks/html/node3.html>



Modeling Hierarchy



Parameter Interaction	DFT Quantum mechanics	MD Empirical potentials	KLMC Migration barriers	Continuum Reaction kinetics
Number of atoms	100	10^4	10^6	10^8
Length scale	1 nm	10 nm	25 nm	100 nm
Time scale*	\approx psec	\approx nsec	\approx msec	\approx sec

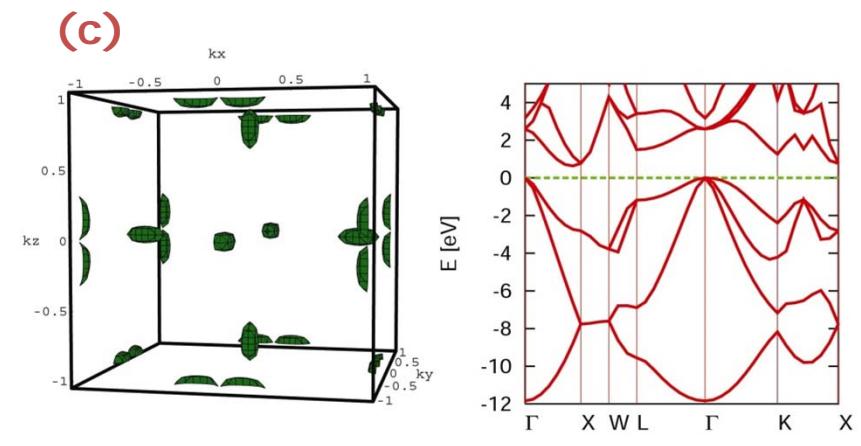
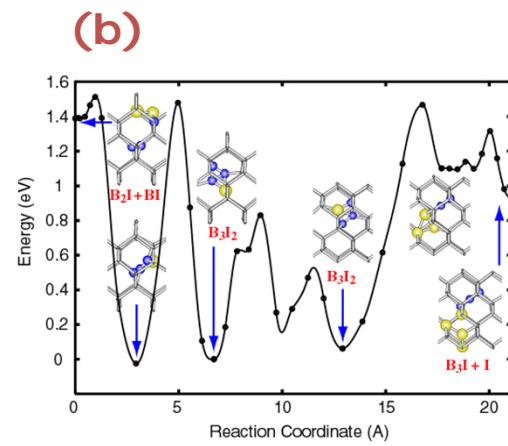
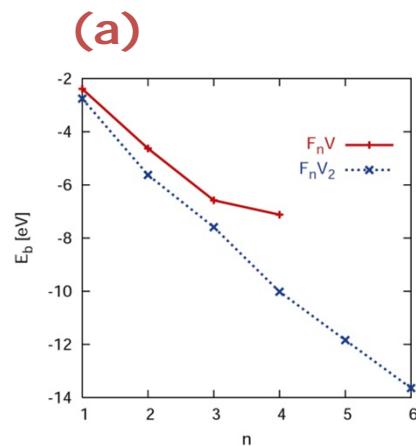
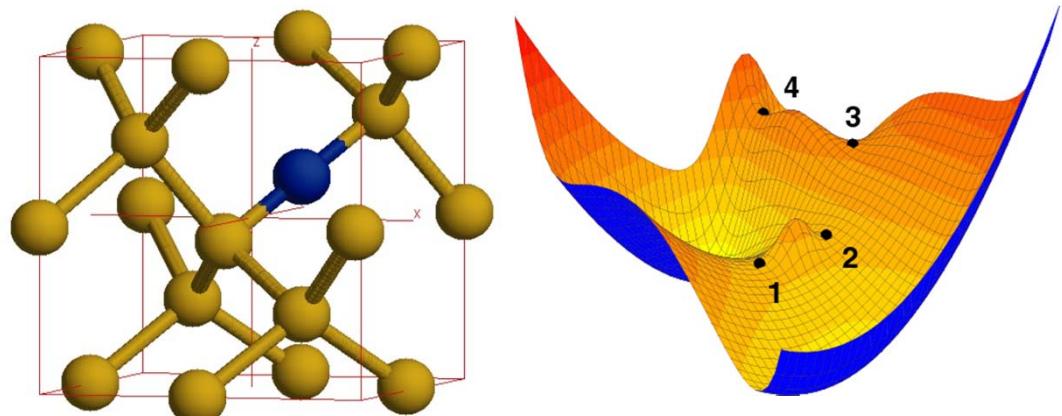
* accessible time scale within one day of calculation

Sample Applications of DFT

Idea: Minimize energy of given atomic structure

Applications:

- Formation energies (a)
- Transitions (b)
- Band structure (c)
- Elastic properties (talk)
- ...



- First Principles

Time-independent Schrödinger Equation for a system of electrons and nuclei

$$H \Psi(\vec{r}_i, \vec{R}_I) = E \Psi(\vec{r}_i, \vec{R}_I)$$

Total Hamiltonian of the system

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m_e} \sum_i \vec{\nabla}_i^2 - \frac{1}{M_I} \sum_I \vec{\nabla}_I^2 \right] - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \frac{1}{2} \sum_{I \neq J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|} \right]$$

→ Hartree-Fock approximation

→ Density Functional Theory (DFT) : Hohenberg-Kohn and Kohn-Sham
Replace the original N-body problem by an independent particle problem

$$E_{Ground\ State} = T_{Ind\ Kinetic}[n] + E_{Nuclei}[I] + E_{xc}[n] + \frac{1}{2} \int \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r d^3r' + \int V_{ext}(\vec{r})n(\vec{r})d^3r$$

- First Principles

→ Many methods have been developed :

- Local Density Approximation (LDA) : $[n]$
- Generalized Gradient Approximation (GGA) : $[n, \nabla n]$: BLYP, OPTX, OLYP, PW86, PW91, ...
- Meta- GGA : $[n, \nabla n, \nabla^2 n]$: BP, B95, VSXC, PKZB, TPSS, ...
- Hyper-GGA: $[n, \nabla n, \nabla^2 n, HFxc]$: ACM, H+H, B3LYP, B3PW91, TPSSh, ...
- GRPA : $[n, \nabla n, \nabla^2 n, HFxc, Virtual Orbitals]$: OEP2, ...
-

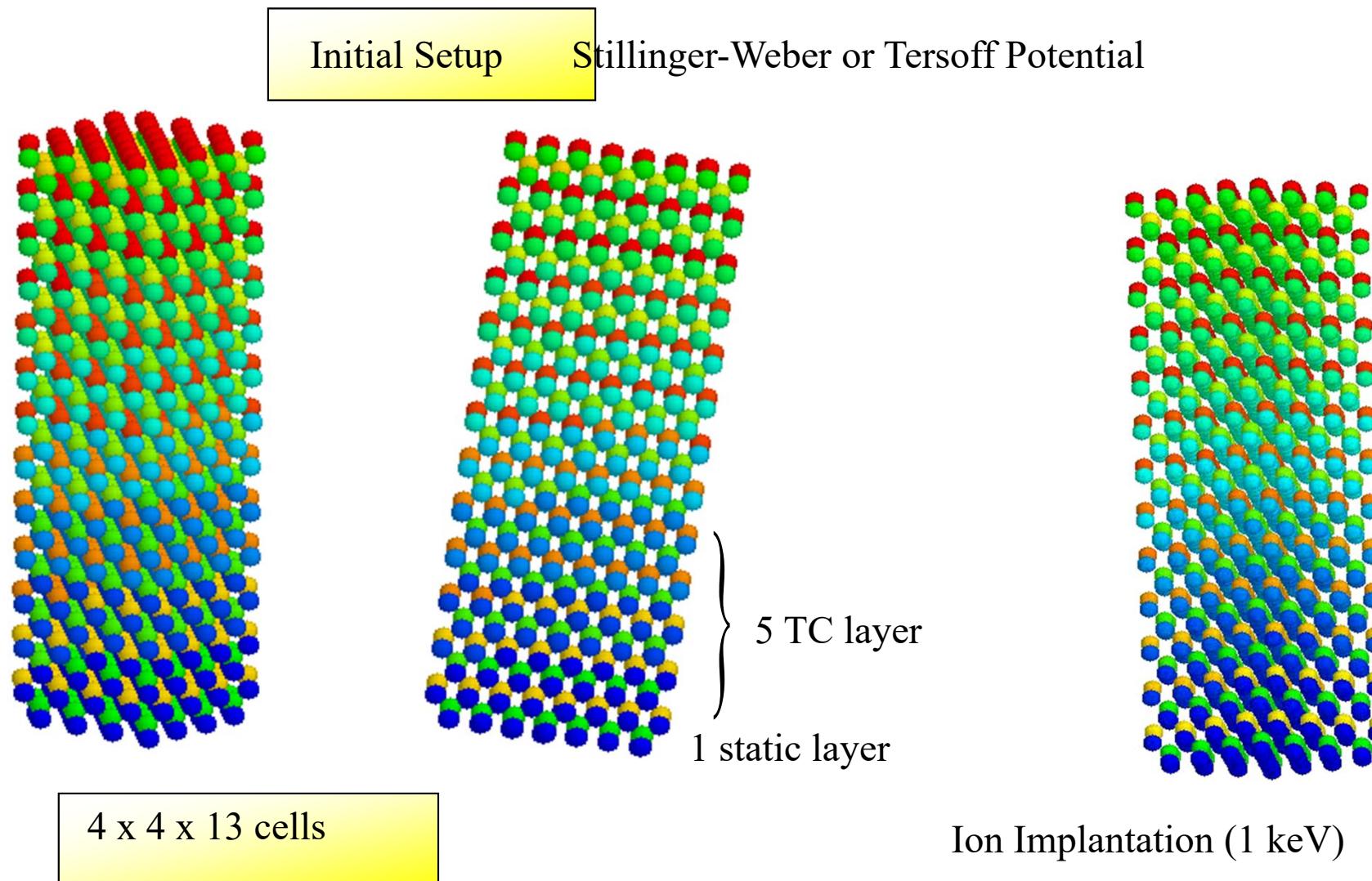
→ Hartree-Fock approximation

Full-electron HF, Perdew and Wang Functionals

→ Properties : Electronic states (energy - density), elastic matrix, bulk moduli,

Defects, clusters, transition state theory, phonons, thermodynamic properties,

MD Simulation



• Molecular Dynamics

- ➔ Atomic and molecular interactions are represented by analytical potentials and their mobility is governed by Newton's equation of motion $\vec{F}_i = m_i \ddot{\vec{r}}_i$
- ➔ Principal Algorithms:
 - Verlet
 - Leap-Frog
 - Velocity Verlet
 - Beeman
- ➔ Interatomic potentials : ionic, covalent, iono-covalent, metallic, ...
The precision of the obtained results strongly depends on the quality of the potentials used
Interatomic potentials are empirical but can be optimized by First Principles calculations
- ➔ Properties : Complex systems with various defects and impurities, Elastic matrix, bulk moduli, Defects, clusters, Transition state theory, Mobility, Diffusion, Dislocations, Phonons, thermodynamic properties, Radiation effects, Displacement cascades,

- Molecular Dynamics

→ Some Interatomic Potentials

- Ionic : Buckingham

$$E_{ij} = \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{ij}} + A_{ij} e^{-r_{ij}/\rho_{ij}} - \frac{c_{ij}}{r_{ij}^6}$$

- Covalent : Morse

$$E_{ij} = D_{ij} \left[1 - e^{-\alpha_{ij}(r_{ij} - r_0)} \right]^2$$

- Covalent Si-Si, C-Si : Tersoff

$$E_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i,j(j \neq i)} f_c(r_{ij}) \left[\sqrt{A_i A_j} e^{-(\lambda_i + \lambda_j)r_{ij}/2} - b_{ij} \sqrt{B_i B_j} e^{-(\mu_i + \mu_j)r_{ij}/2} \right]$$

- Ionic-covalent : Stillinger-Weber

$$E_{ij} = A_{ij} e^{d_{ij}/(r_{ij} - r_{\max})} \left[B_{ij} r_{ij}^{-4} - 1 \right]$$

- Metallic (EAM)

$$E(EAM) = \sum_i F_i(n_{host}, i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j(j \neq i)} \Phi_{ij}(r_{ij})$$

- Metallic : Finnis-Sinclair

$$E_{FS} = \varepsilon \left[\frac{1}{2} \sum_{i,j(j \neq i)} \left(\frac{\alpha}{r_{ij}} \right)^n - \gamma \sum_i \sqrt{\sum_{j \neq i} \left(\frac{\alpha}{r_{ij}} \right)^m} \right]$$

- Metallic : Sutton-Chen

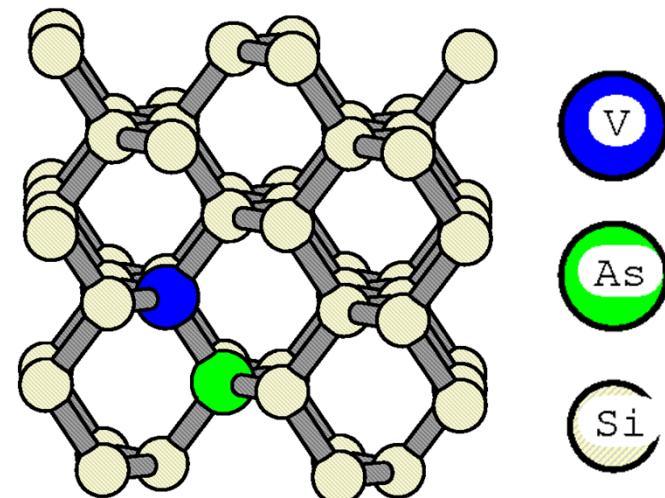
Kinetic Lattice Monte Carlo (KLMC)

Some problems are too complex to connect DFT directly to continuum.

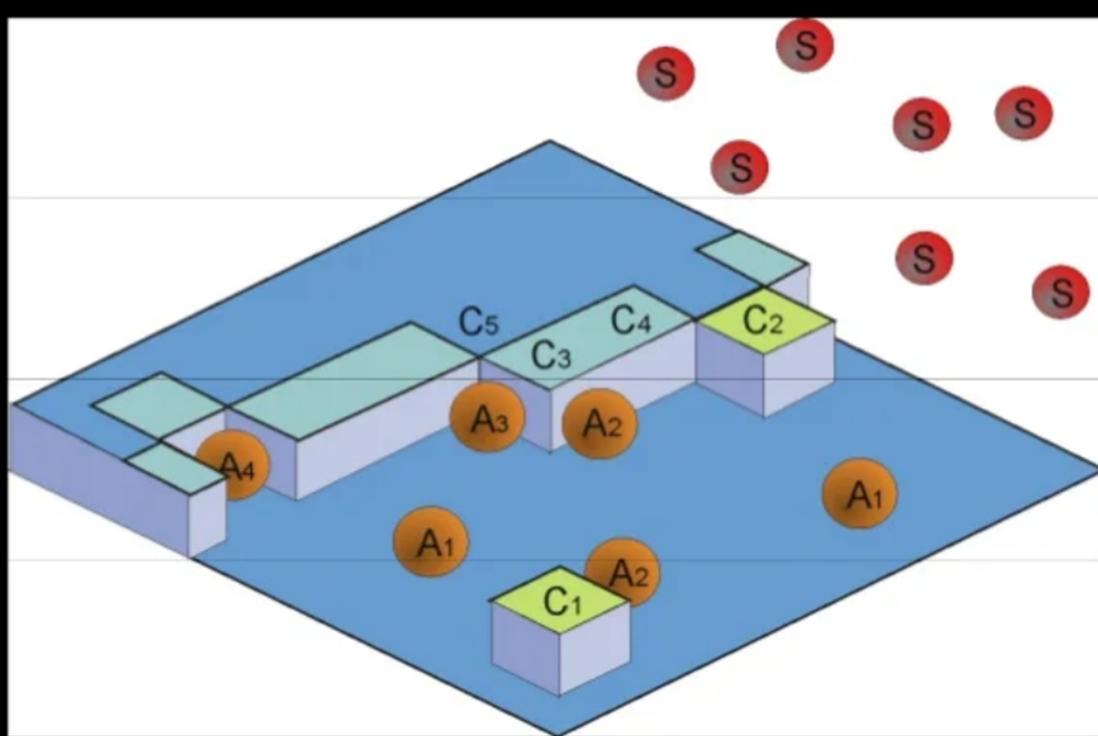
- Need a scalable atomistic approach.

Possible solution is KLMC.

- Energies/hop rates from DFT
- Much faster than MD because:
 - Only consider defects
 - Only consider transitions

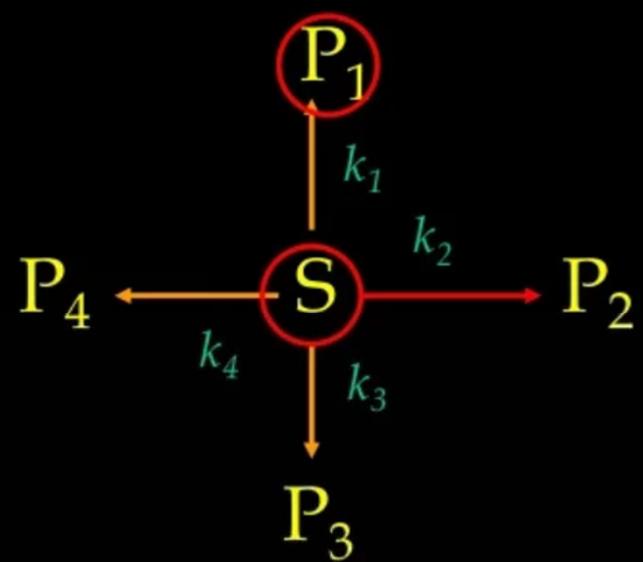


$$\nu = \nu_0 \exp\left(\frac{E_i - E_f}{2k_B T}\right)$$



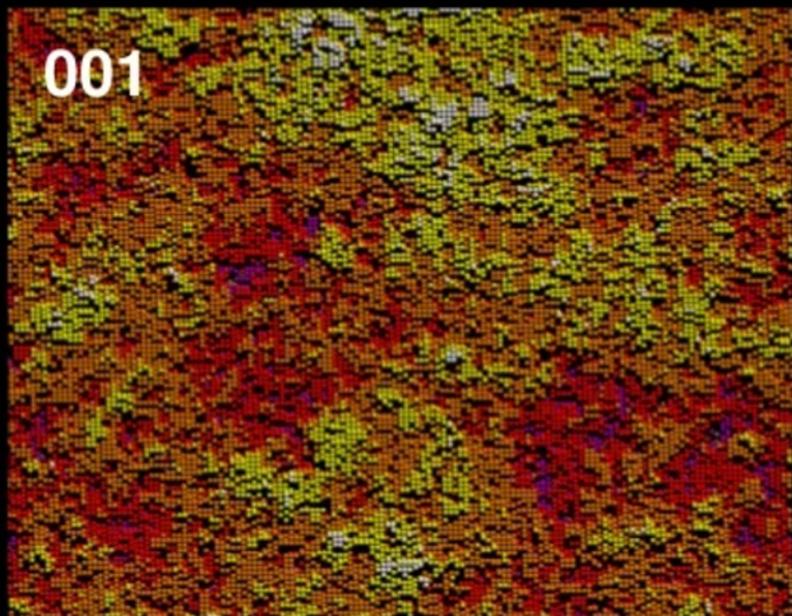
Kinetic Monte Carlo

Evolution of the system toward final states following Poisson statistics.
The physical parameters of the transition rates are known.

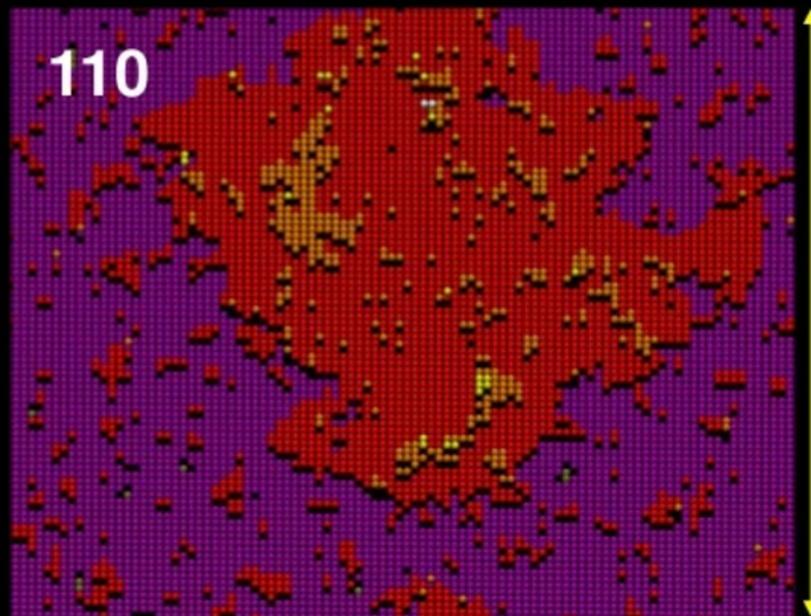


$$p_{S \rightarrow P_1} = \frac{k_1}{k_1 + k_2 + k_3 + k_4}$$

Kinetic Monte Carlo simulation of surface growth

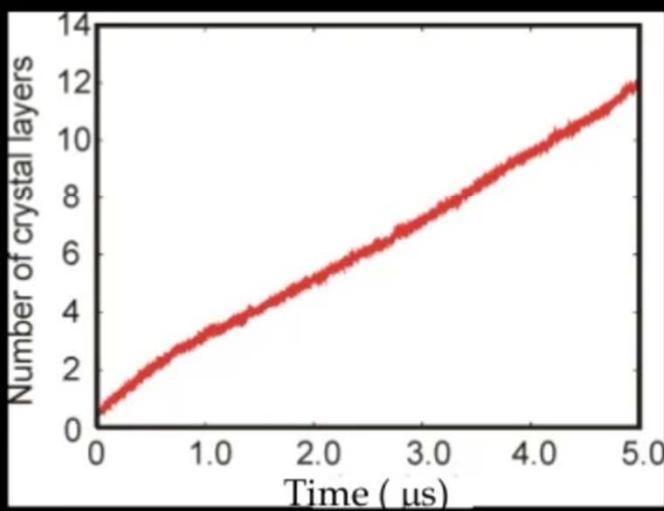


001



110

0.1 fm

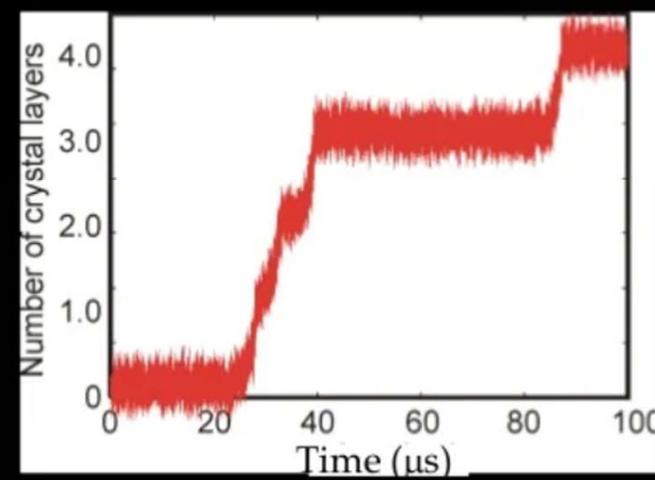


Number of crystal layers

14
12
10
8
6
4
2
0

0 1.0 2.0 3.0 4.0 5.0

Time (μs)



Number of crystal layers

4.0
3.0
2.0
1.0
0

0 20 40 60 80 100

Time (μs)

- Phase Field Simulations



Free Energy Functional,

eg. polycrystalline solidification, nucleation and growth of anisotropic particles with different crystallographic orientation in three dimensions

$$F = \int \left[\frac{1}{2} \varepsilon_\phi^2 |\vec{\nabla} \phi|^2 + f(\phi, c, T) + f_{Orientation} \right] d^3 r$$

Where ϕ characterizes the local state phase of matter at temperature T, and c the solute concentration

$f(\phi, c, T)$ The local phase free energy

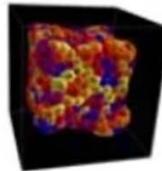
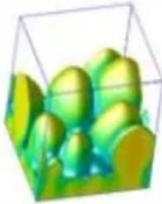
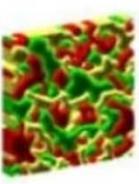
$f_{Orientation}$ The particles orientation free energy

Calculated by DFT, extrapolated by Thermodynamic Calphad methods

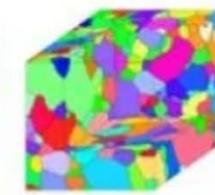
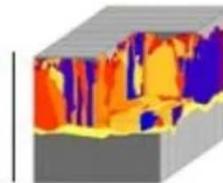
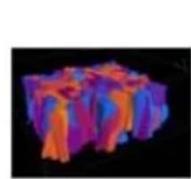


Leads to the microstructure

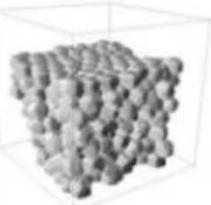
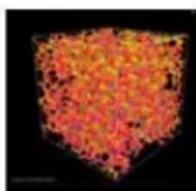
Microstructures in casting and sintering



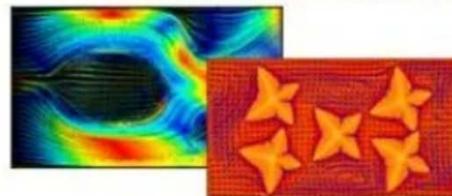
Polycrystalline grain structures



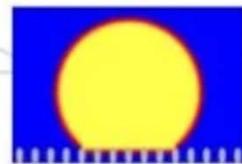
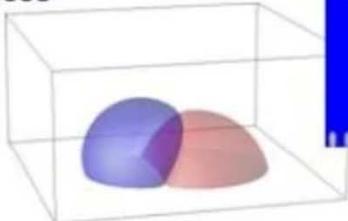
Heat transport in metallic foams



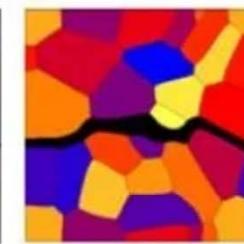
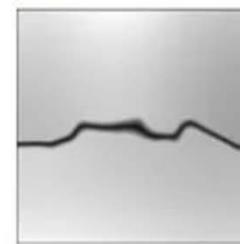
Microstructure simulations



Lotus effect at structured surfaces



Crack formation in grain structures

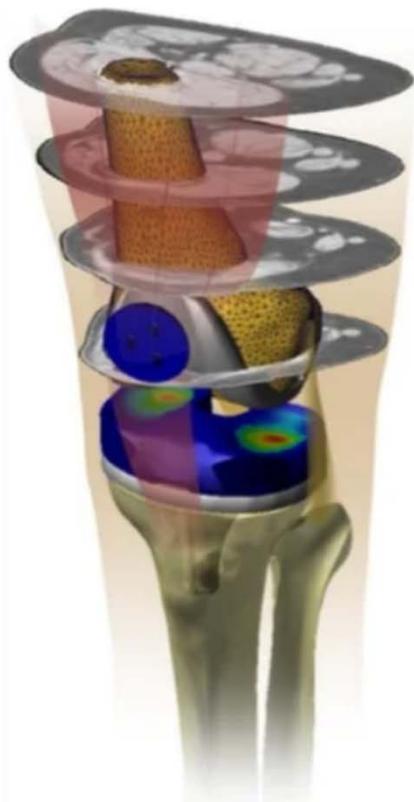


Source: https://www.iam.kit.edu/cms/Mitarbeiter_nestler.php

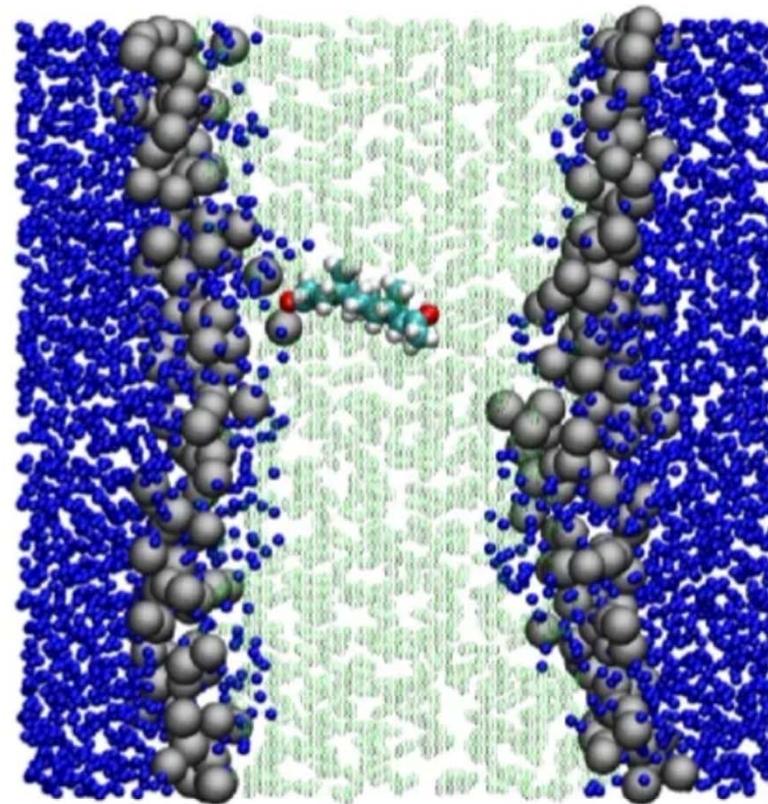
Applications of Multiscale Modelling

- Engineering design
- Biomedical research
- Geoscience
- Climate modelling
- Nuclear waste
- Materials science
 - Dislocations
 - Cracks
 - Corrosion

Applications of Multiscale Modelling



Medical prosthesis

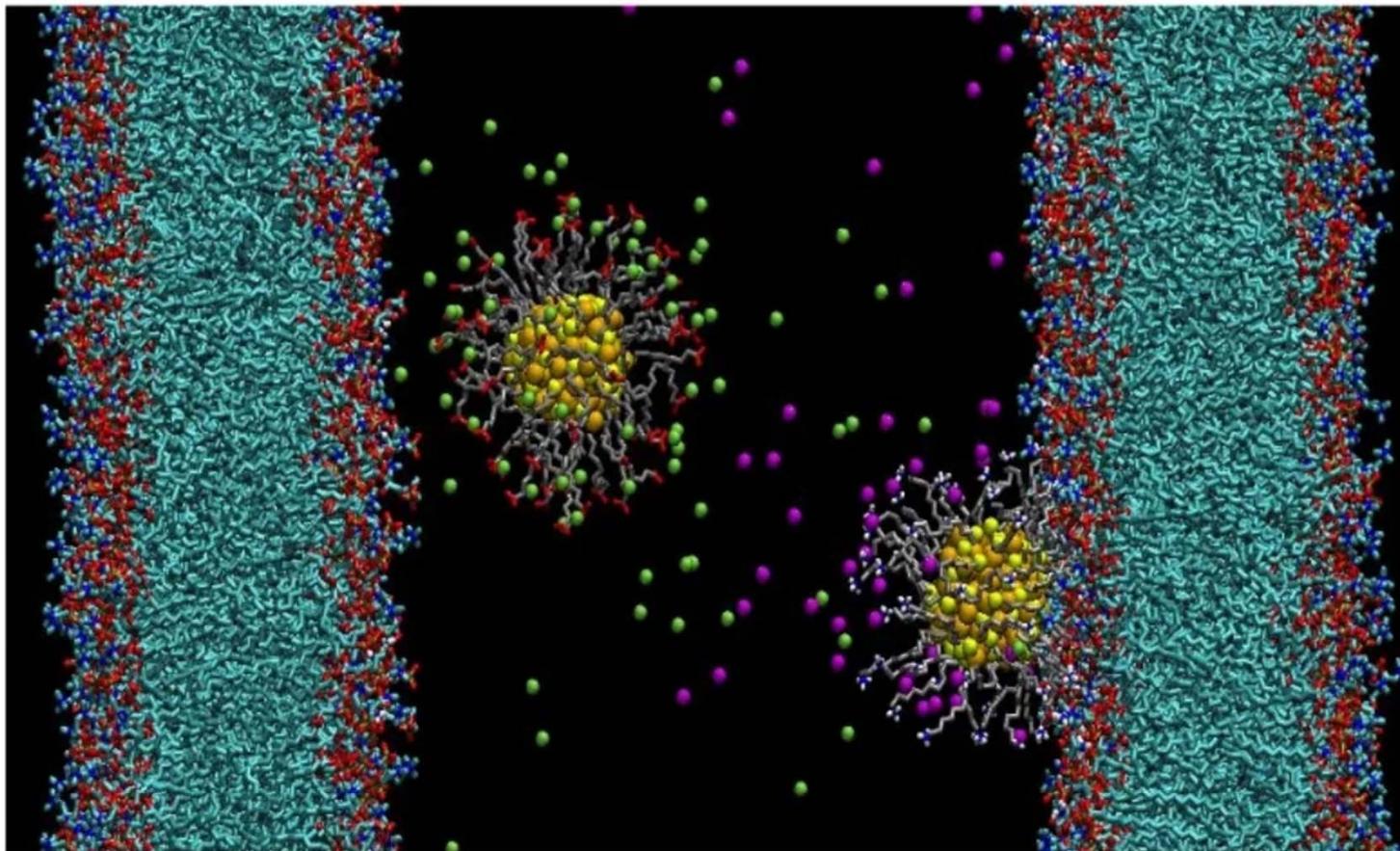


Snapshot from a dual-resolution simulation of the steroid hormone progesterone in a lipid bilayer

Source: Jonathon Essex, Southampton

<http://cmg.soton.ac.uk/research/categories/algorithms-and-computational-methods/multi-scale/>

Applications of Multiscale Modelling



Nanostructures interacting with cell walls

Source: <http://xqwang.enr.uga.edu/>
Dr. X.Wang Georgia University

Суперкомп'ютери

Паралельна архітектура суперкомп'ютерів та мінімальний час обміну даними між вузлами роблять їх на кілька порядків потужнішими за персональні комп'ютери

Рекордна кількість процесорів
більше 130 тисяч (!!!) в
машині IBM BlueGene

Cray



IBM Power4



Суперком'ютер – обчислювальна машина, яка значно перевищує за своїми технічними параметрами більшість існуючих комп'ютерів.

Кластер – група незалежних гетерогенних обчислювальних машин із типовими апаратними та програмними рішеннями, об'єднаних в локальну обчислювальну мережу, що



Суперком'ютер **Titan**,
Oak Ridge National Laboratory,
(США)



Кластер Хемніцького
технологічного університету
(Німеччина)



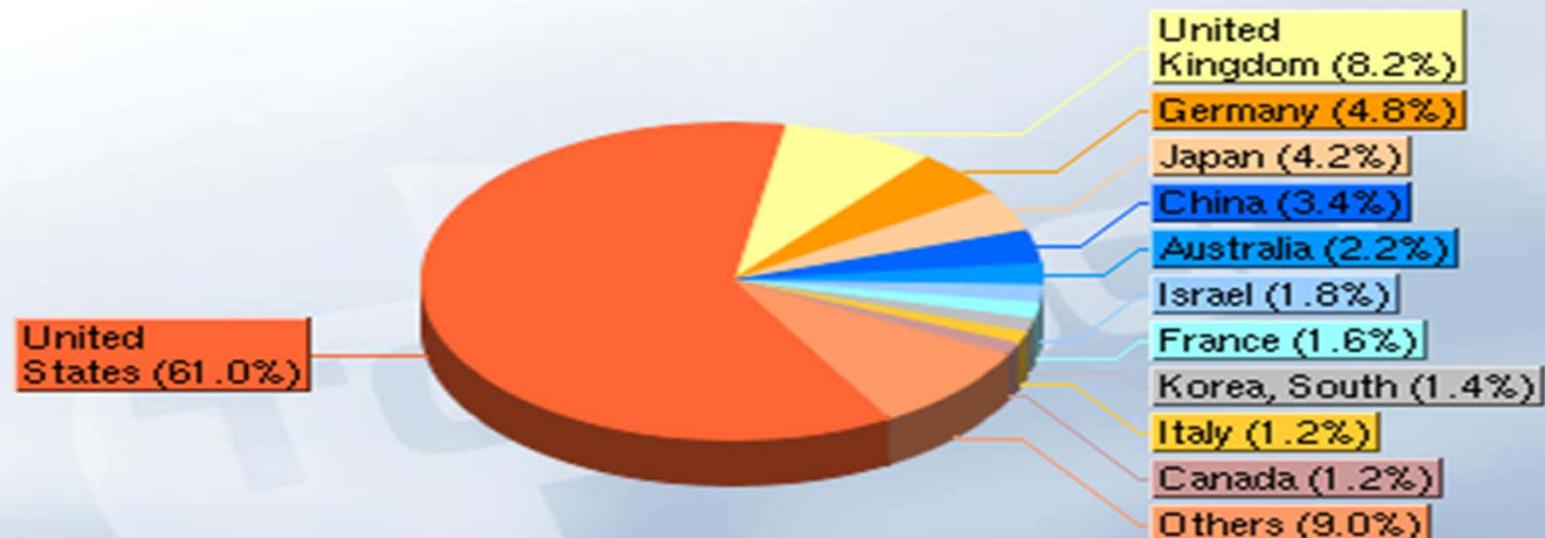
Кластер Головної
астрономічної
обсерваторії НАН

Суперкомп'ютери

Розподіл кількості
суперкомп'ютерів по країнах



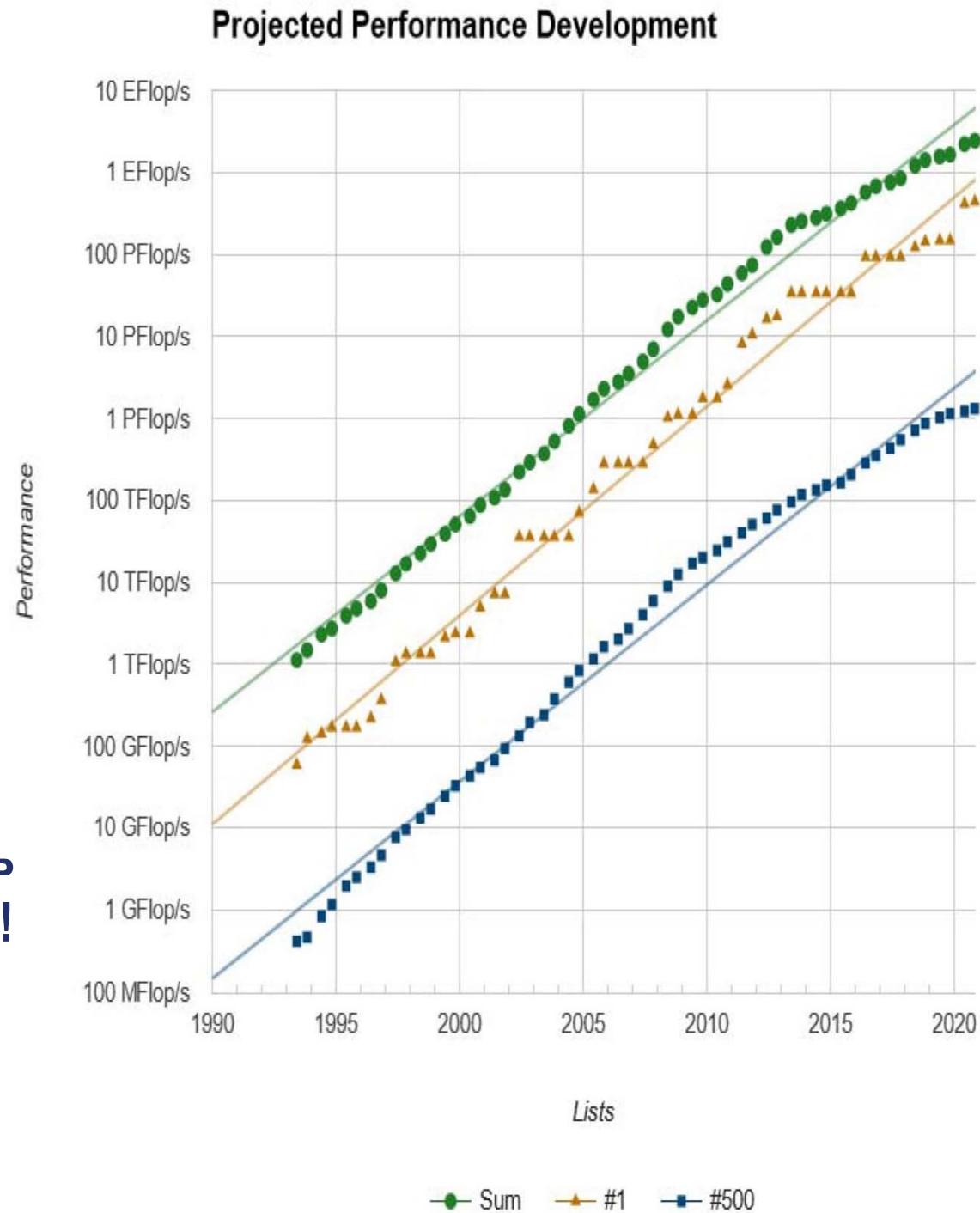
Countries / Systems
November 2005



Динаміка приросту обчислювальної продуктивності

<https://www.top500.org>

За 25 років продуктивність збільшилася у 10^{10} разів !!!



Дякую за увагу