

РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО МОДУЛЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛА НАНОРАЗМЕРНЫХ ОБРАЗЦОВ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ НА ОСНОВЕ ТЕХНОЛОГИИ CUDA.

Автор: Кавешникова Виктория Владимировна.

МГУ им. М.В. Ломоносова (Москва)

В последние годы в мире резко возрос интерес к наноструктурным материалам, обладающим уникальными свойствами, вследствие проявления фундаментальных размерных свойств вещества в промежуточном диапазоне между молекулами и твёрдым телом. Для изучения их термомеханических свойств активно используются методы молекулярной динамики. Это объясняется как экспериментальными трудностями в изучении таких объектов, так и новыми возможностями, которые появились сейчас благодаря развитию новых теоретических методов и вычислительной техники.

Целью данного проекта является увеличение возможностей для расчётов наноматериалов: более быстрые и более качественные расчёты. Для этого при разработке данного программного модуля используется технология NVIDIA CUDA, которая позволит производить расчёт как на обычном домашнем компьютере, так и с использованием одной или нескольких видеокарт, поддерживающих эту технологию.

Несмотря на то, что в данный момент метод молекулярной динамики (МД) является одним из доминирующих методов компьютерного моделирования физических процессов в мировой computer science. И как следствие, кажущееся разнообразие имеющегося в мире программного обеспечения, использующего методы молекулярной динамики, многие функции до сих пор недоступны. Разрабатываемый программный продукт будет содержать более полный набор потенциалов, термостатов, различных модулей обновления частиц и т.д. по сравнению с уже имеющимися пакетами. Данный программный модуль будет полностью реализован с использованием CUDA (что значительно ускорит расчёты), а не частично, как практически все пакеты, поддерживающие эту технологию. И несмотря на то, что некоторая часть имеющегося в мире ПО поддерживает CUDA, ни одно из них не позволяет считать системы большого объёма атомов, и, тем более, учитывать краевые условия. Данный программный продукт предоставит возможность рассчитывать абсолютно любые молекулярные модели, не зависимо от их размеров, границ и используемых потенциалов.

Можно с лёгкостью утверждать, что данный продукт будет востребован различными отраслями промышленности: самолетостроение, точное приборостроение,

космические технологии, медицина, биотехнологии, нефтегазовая, шинная промышленность, и т.д.

В планы на ближайший год по развитию проекта в первую очередь входит выпуск пилотной версии и использование её для расчёта молекулярно-динамических задач. Также, чтобы привлечь внимание к данному ПО будущих инвесторов и потребителей планируется демонстрация модуля и решённых с его помощью задач на научно-технических и отраслевых конференциях, а также публикация результатов в тематических журналах. Также, планируется регистрация интеллектуальной собственности на продукт. После того, как будет выпущена итоговая версия и на ней будут проведены расчёты, нужно будет реализовывать внедрение ПО в производство (модуль может быть использован как отдельное приложение, а может так же быть интегрирован в различные САЕ-системы).