



РФЯЦ-ВНИИЭФ
РОСАТОМ

Алгоритмы и особенности программной реализации в пакете УРС-ОФ полуэмпирической модели широкодиапазонных уравнений состояния РОСА-МФИ

XVI «Забабахинские научные чтения»

Численные методы, алгоритмы, программы и точные решения

Данилов Артем Сергеевич, Гордеев Д.Г., Шумилина О.Н., Арапов И.Н.

РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров

Полуэмпирическая модель широкодиапазонных уравнений состояния (УРС) РОСА-МФИ

представляет собой развитие ранее созданной модели УРС РОСА-МИ^[1,2] с описанием фазового перехода жидкость-пар. Модель дополнена алгоритмами, позволяющими описывать термодинамические свойства вещества при фазовом переходе твердое тело-жидкость (плавлении).

Цели работы

- Разработать алгоритмы вычисления термодинамических функций (ТДФ) по модели РОСА-МФИ для входных переменных p - T , p - E , p - P для фаз твердого тела, жидкости (пара) и двухфазной области твердое тело-жидкость
- Реализовать разработанные алгоритмы в пакете УРС-ОФ^[3,4] для расчета ТДФ на SIMD, MIMD и GPGPU-архитектурах

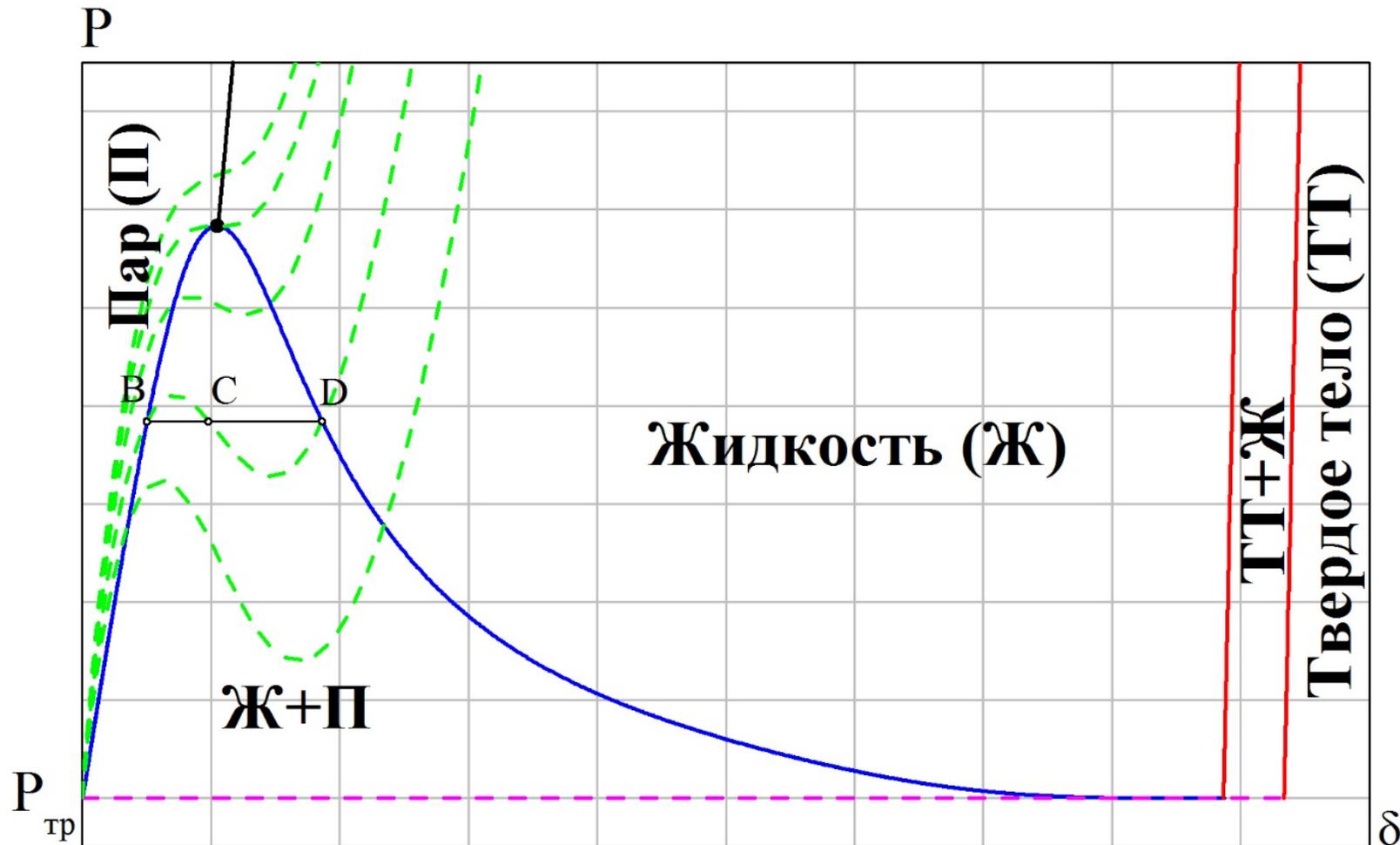
1. Гордеев Д. Г., Гударенко Л. Ф., Каякин А. А., Куделькин В. Г. Модель уравнения состояния металлов с эффективным учетом ионизации. Уравнения состояния Та, W, Al, Be // Физика горения и взрыва. – 2013. – № 1. – С. 106-120.

2. Каякин А. А., Гударенко Л. Ф., Гордеев Д. Г. Уравнение состояния соединений изотопов лития с изотопами водорода // Физика горения и взрыва. – 2014. – Т. 50, № 5. – С. 109-122.

3. Гордеев Д.Г., Голубкова Е.Ф., Гударенко Л.Ф., Куделькин В.Г., Сапронова О.В. Современное состояние пакета программ УРС-ОФ для расчета термодинамических и механических свойств веществ [Электронный ресурс] // Труды международной конференции «XI Забабахинские научные чтения». – 2012. – Режим доступа: <http://www.vniief.ru/images/zst/2012/s6/6-17.pdf>

4. Гордеев Д.Г., Голубкова Е.Ф., Гударенко Л.Ф., Куделькин В.Г., Сапронова О.В. Современное состояние пакета программ УРС-ОФ для расчета термодинамических и механических свойств веществ // XII Международная конференция «Супервычисления и математическое моделирование»: сб. науч. тр./под. ред. Р.М. Шагалиева – Саров: ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ». – 2010. – С. 115-118.

Фазовая диаграмма произвольного вещества в координатах относительное сжатие-давление



● критическая точка;

— граница фазового перехода (ФП) жидкость-пар, — границы ФП твердое тело-жидкость (ТТЖ),

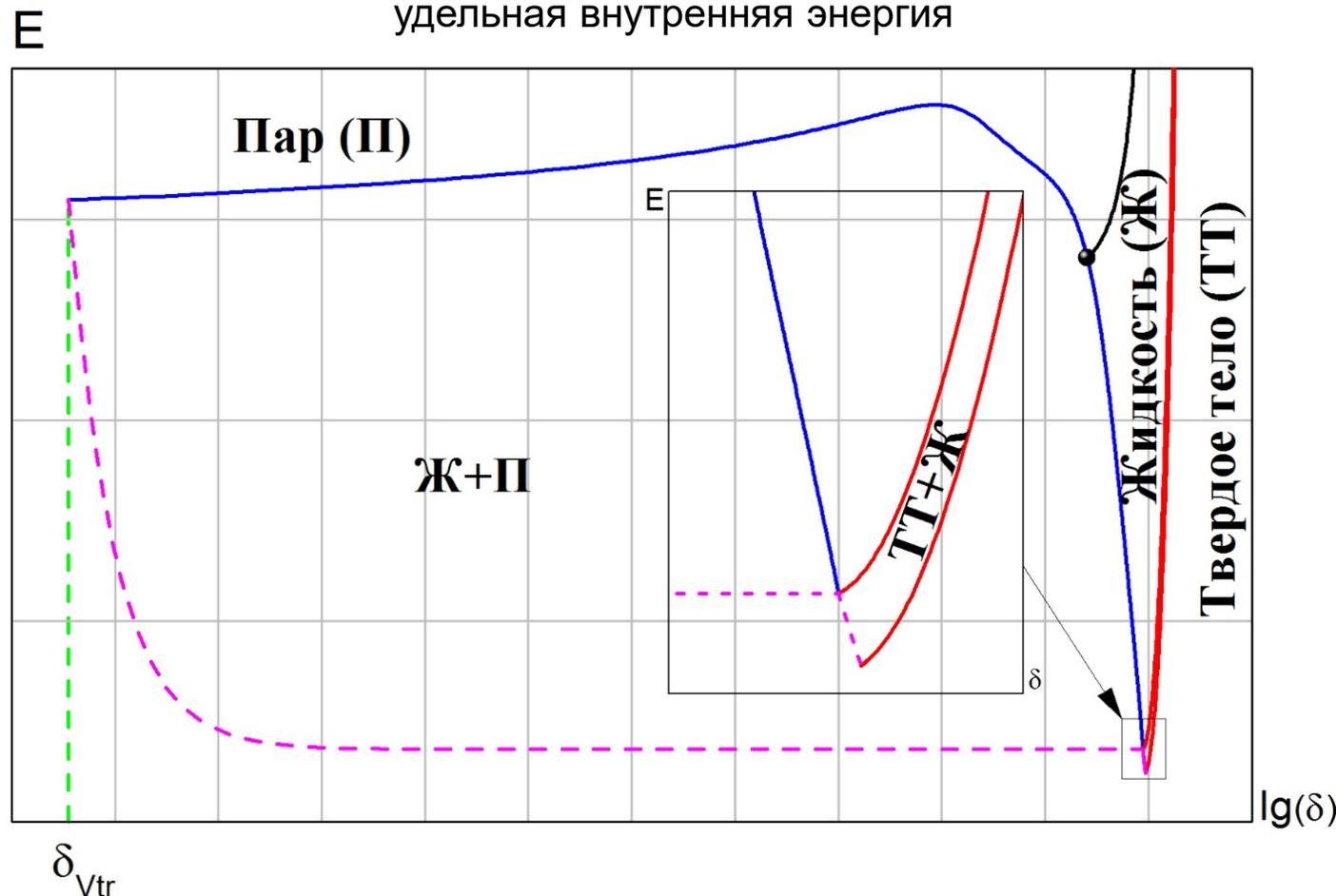
— критическая изэнтропа, - - - - - изобара, проходящая через тройную точку,

- - - - - изотермы (без учета двухфазного состояния)

B_{CD} – участок изотермы, реализующейся при равновесном фазовом переходе

Двухфазный модуль пакета УРС-ОФ

Фазовая диаграмма в координатах относительное сжатие-
удельная внутренняя энергия

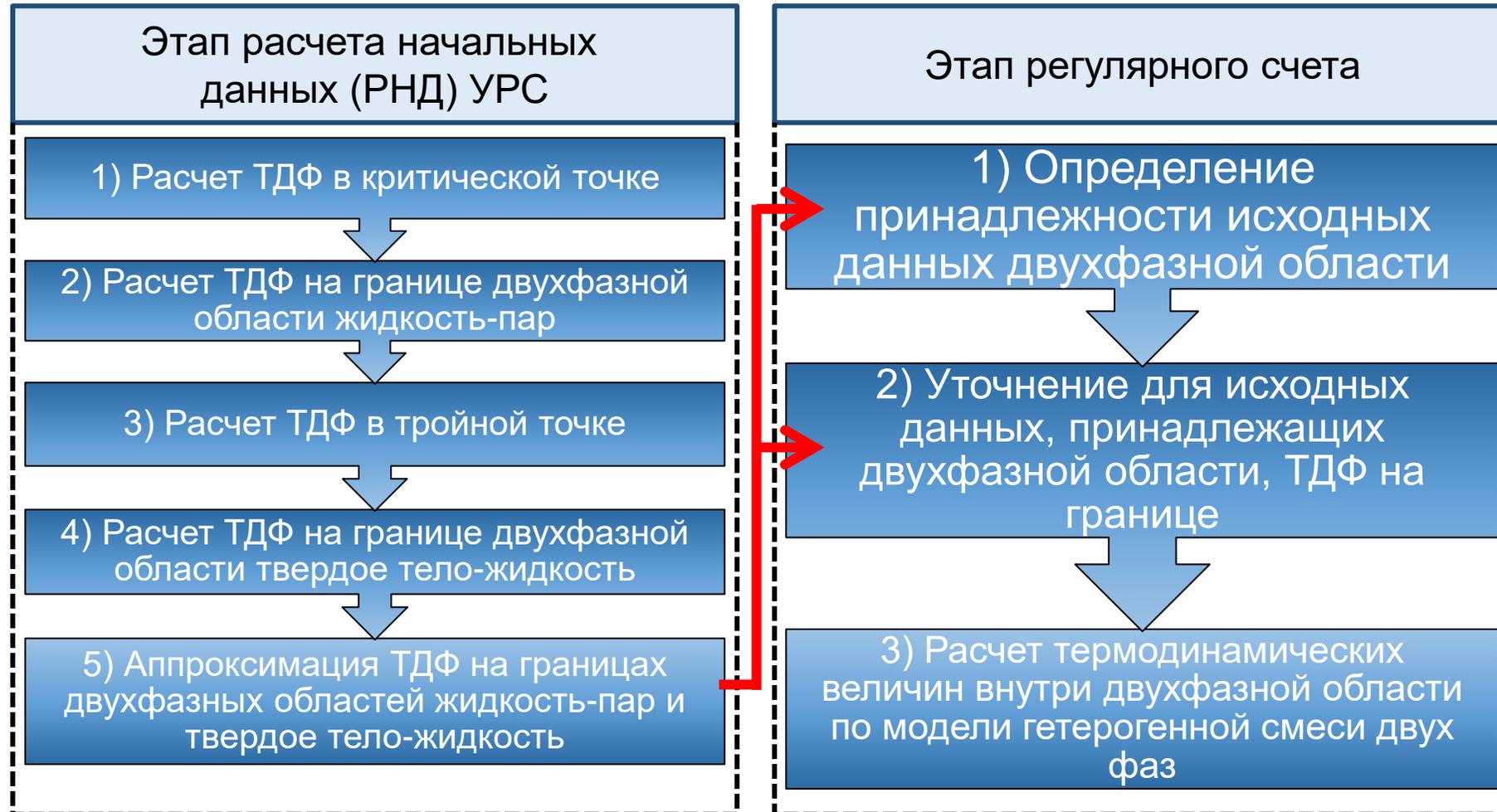


● критическая точка;

— граница фазового перехода (ФП) жидкость-пар, — границы ФП ТТЖ,
— критическая изэнтропа, - - - - - изобара, проходящая через тройную точку,
- - - - - изохора (δ_{vtr} – относительное сжатие в тройной точке со стороны пара)

Двухфазный модуль позволяет для заданного УРС вещества с использованием условий термического, механического и химического равновесия фаз вычислять термодинамические функции на границах и внутри двухфазных областей жидкость-пар и твердое тело-жидкость для входных переменных УРС плотность-температура ($\rho-T$), плотность-удельная внутренняя энергия ($\rho-E$), плотность-давление ($\rho-P$).

Схема работы двухфазного модуля с учетом испарения и плавления





Алгоритмы двухфазного модуля не зависят от формы модели УРС. При этом УРС должны удовлетворять следующим требованиям:

- должны быть термодинамически согласованными, что обеспечивает строгое выполнение первого и второго законов термодинамики;
- должны позволять рассчитывать зависимости от плотности и температуры: давления $P(\rho, T)$, удельной внутренней энергии $E(\rho, T)$, энтропии $S(\rho, T)$, $(\partial P / \partial \rho)_T, (\partial P / \partial T)_\rho$, $(\partial E / \partial \rho)_T, (\partial E / \partial T)_\rho$;
- для учета испарения рассчитанные по УРС изотермы должны иметь участки в виде петель Ван-дер-Ваальса при плотности меньше нормальной и температурах ниже критической;
- для учета плавления УРС должны иметь отдельные функциональные зависимости для описания жидкой и твердой фазы вещества.

Система уравнений для вычисления ТДФ на границе двухфазной области твердое тело-жидкость на этапе РНД



$$\begin{cases} P_l(\rho_l, T) = P_Z \\ P_s(\rho_s, T) = P_Z \\ \Phi_l(\rho_l, T) = \Phi_s(\rho_s, T) \end{cases},$$

где $P_l(\rho, T)$ – давление, вычисляемое по УРС жидкой фазы;

$P_s(\rho, T)$ – давление, вычисляемое по УРС твердой фазы;

$\Phi_l(\rho, T) = E_l(\rho, T) - T \times S_l(\rho, T) + \frac{P_l(\rho, T)}{\rho}$ – потенциал Гиббса, вычисляемый по УРС жидкой фазы;

$\Phi_s(\rho, T) = E_s(\rho, T) - T \times S_s(\rho, T) + \frac{P_s(\rho, T)}{\rho}$ – потенциал Гиббса, вычисляемый по УРС твердой фазы;

P_Z – задаваемый параметр системы.

Используемые аппроксимации зависимостей ТДФ на границах двухфазных областей



Тип входных переменных УРС	ρ - T	ρ - P	ρ - E
Используемые аппроксимации при фазовом переходе жидкость (l)–пар (v)	$\rho_l(T), \rho_v(T)$	$\rho_l(P), \rho_v(P), T(P)$	$E(\rho), E_{2ph}(\rho, T), \rho_l(T), \rho_v(T)$
Используемые аппроксимации при фазовом переходе твердое тело (s)–жидкость (l)	$\rho_l(T), \rho_s(T), T(\rho_s)$	$\rho_l(P), \rho_s(P), T(P), T(\rho_s)$	$E_l(\rho_l), E_s(\rho_s), E_{2ph}(\rho, T), \rho_l(T), \rho_s(T), T(\rho_s)$

Уточнение значений ТДФ на границе двухфазной области относительно аппроксимаций на примере ФП твердое тело-жидкость



Входные переменные УРС		
(ρ, T)	(ρ, P)	(ρ, E)
Система уравнений для уточнения ТДФ на границе ФП		
$\begin{cases} P_l(\rho_l, T) = P_s(\rho_s, T) \\ \Phi_l(\rho_l, T) = \Phi_s(\rho_s, T) \end{cases}$	$\begin{cases} P_l(\rho_l, T) = P \\ P_s(\rho_s, T) = P \\ \Phi_l(\rho_l, T) = \Phi_s(\rho_s, T) \end{cases}$	$\begin{cases} P_l(\rho_l, T) = P_s(\rho_s, T) \\ \Phi_l(\rho_l, T) = \Phi_s(\rho_s, T) \\ \alpha E_s(\rho_s, T) + (1 - \alpha) E_l(\rho_l, T) = E \end{cases}$ <p> $\alpha(\rho, \rho_l, \rho_s) = \left(\frac{\rho_l - \rho}{\rho_l - \rho_s} \right) \frac{\rho_s}{\rho}$ – массовая доля твердого тела в смеси </p>
Начальные приближения		
$\rho_l(T), \rho_s(T)$	$T(P), \rho_l(P), \rho_s(P)$	$E_{2ph}(\rho, T) = E$ <p style="text-align: center;"> Решение кубического уравнения итерационным методом $\rightarrow T,$ $\rho_l(T), \rho_s(T)$ </p>

Форма модели РОСА-МФИ

$$\text{РОСА-МИ} \\ F(\rho, T) = E_x(\rho) + F_p(\rho, T) + F_e(\rho, T) + F_f(\rho, T)$$

↓
РОСА-МФИ

← УРС жидкости (в том числе и пара)

УРС твердого тела →

$$F_l(\rho, T) = E_{xl}(\rho) + F_{pl}(\rho, T) + F_e(\rho, T) + F_f(\rho, T) - (\Delta S_V + \Delta S_N)T \quad F_s(\rho, T) = E_{xs}(\rho) + F_{ps}(\rho, T) + F_e(\rho, T) + F_f(\rho, T)$$

Где F – свободная энергия Гельмгольца;

$E_x(\rho)$ – потенциальные составляющие удельной внутренней энергии;

$F_p(\rho, T)$ – составляющие, учитывающие тепловое движение ядер (атомов);

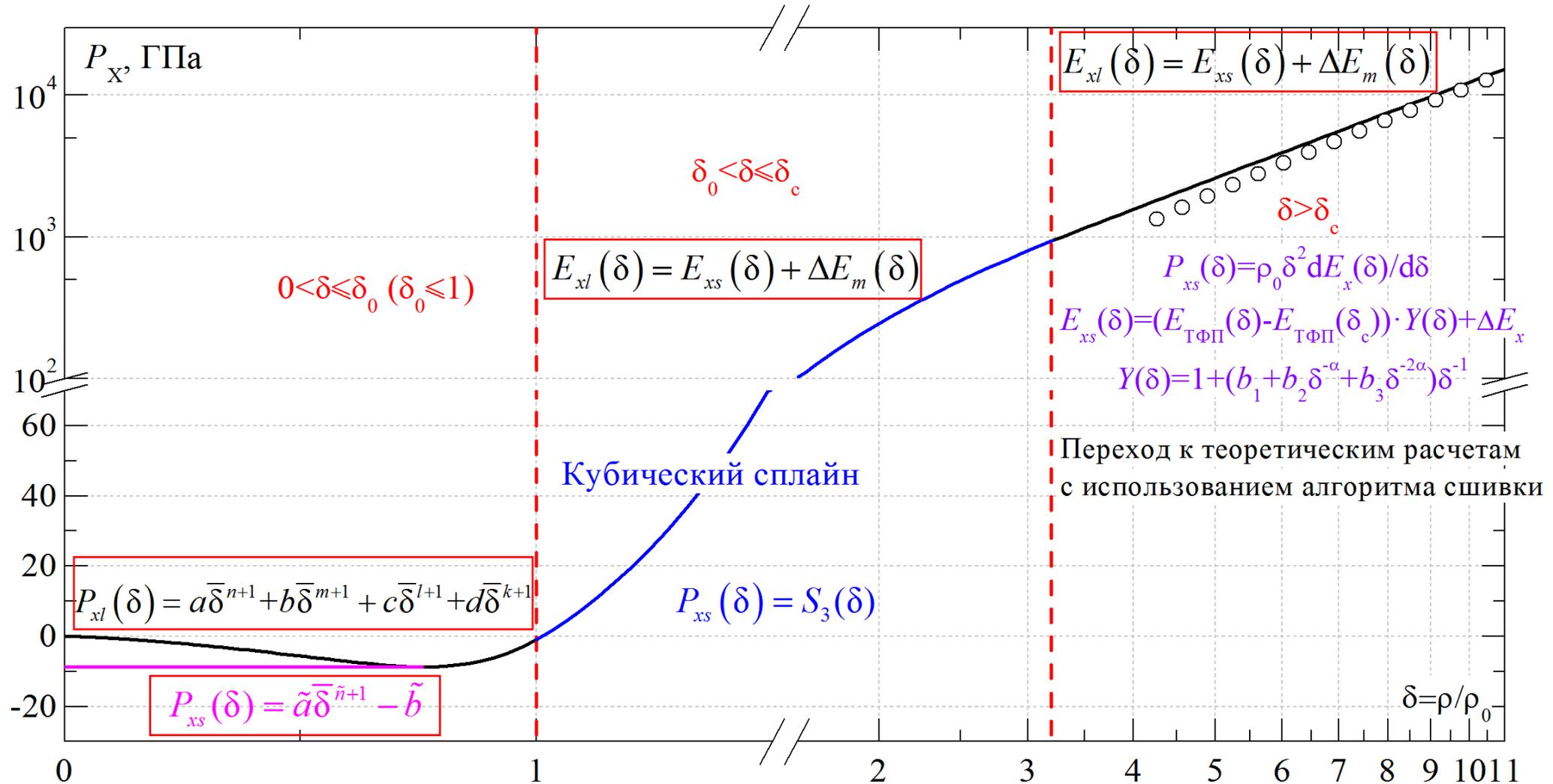
$F_e(\rho, T)$ – составляющие, учитывающие вклад термически возбужденных электронов;

$F_f(\rho, T)$ – составляющие, учитывающие вклад излучения;

ΔS_V – характеризует изменение энтропии при плавлении (конфигурационная энтропия);

ΔS_N – разница энтропий, обусловленная разными формами тепловых ионных составляющих твердого тела и жидкости.

Потенциальные составляющие РОСА-МФИ



ρ_0 – плотность при нормальных условиях,

$\Delta E_m(\delta)$ – характеризует разницу потенциальных энергий твердого тела и жидкости при плавлении (конфигурационная энергия)

Составляющие, учитывающие тепловое движение ядер РОСА-МФИ



Жидкость (пар) – соответствует модели УРС РОСА^[5] :

$$F_{pl}(\delta_T, T) = -\frac{C_{V0}T}{q} \left(-\gamma_\phi \ln \frac{\delta_T}{\delta_T^*} + q \ln \frac{T}{\psi_{pl}(\delta_T^*)} + (1-q) \ln \frac{(\psi_{pl}(\delta_T) + T)}{\psi_{pl}(\delta_T^*)} \right),$$

где $\psi_{pl}(\delta_T)$ – функция, характеризующая потенциальный барьер, который нужно преодолеть атому, чтобы уйти из узла решетки;

γ_ϕ – асимптотическое значение коэффициента Грюнайзена вещества при $T \rightarrow \infty$;

C_{V0} – параметр, имеющий смысл теплоемкости решетки одного грамма

вещества;

$\delta_T^* = 1$, $\psi_{pl}(\delta_T^*)$ – нормировочные значения удельного сжатия и температуры.

$$\frac{d\psi_{pl}(\delta_T)}{\psi_{pl}(\delta_T)} = \frac{1}{q-1} (q\Gamma_{pl0}(\delta_T) - \gamma_\phi) \frac{d\delta_T}{\delta_T}$$

$q = C_{V0} / \frac{3R}{2A}$ – множитель, обеспечивающий выполнение асимптотики идеального газа ионов

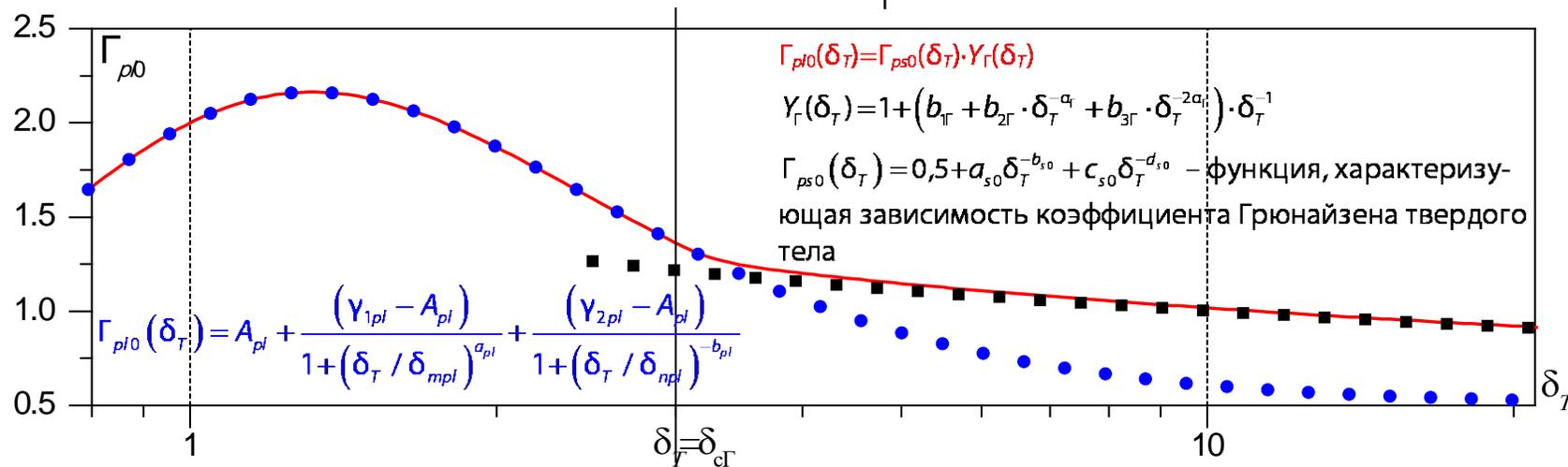
Твердое тело:

$$F_{ps}(\delta_T, T) = C_{V0}T \left[\alpha_D \left(\ln(1 - e^{-\theta_D z(\delta_T, T)}) - \frac{1}{3} D_3(\theta_D z(\delta_T, T)) \right) + (1 - \alpha_D) \ln(1 - e^{-\theta_E z(\delta_T, T)}) \right],$$

Параметр α_D – определяет Дебаевский вклад, а $(1 - \alpha_D)$ – Эйнштейновский вклад в термодинамические функции

$$D_3(z) = \frac{3}{z^3} \int_0^z \frac{t^3 dt}{e^t - 1} \quad \text{– функция Дебая, } z = \frac{\theta_{D0}(\delta_T)}{T},$$

$$\theta_{D0}(\delta_T) = \exp \left(\int_1^{\delta_T} \Gamma_{ps0}(T) \frac{dT}{T} \right),$$



Расчет ТДФ по входным переменным ρ - E , ρ - P

Начальное приближение для УРС жидкости (и пара): $T = \min(T_3, T_1)$.

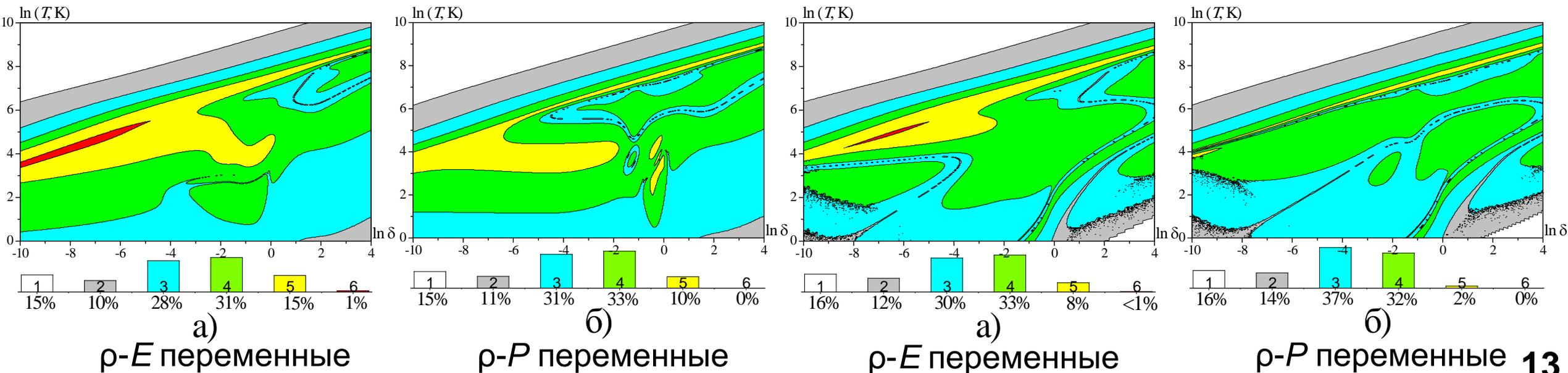
Начальное приближение для УРС твердого тела: $T = \min(\max(T_3, T_2), T_1)$.

- T_1 дает близкое к искомому значение при высоких температурах, когда вклад излучения в тепловую энергию (давление) преобладает;
- T_2 дает близкое к искомому значение при относительно низких температурах, когда тепловой вклад ионов учитывается только по теории Дебая, тепловой вклад электронов соответствует полностью вырожденному электронному газу;
- T_3 используется в промежуточной области температур, когда можно пренебречь приближением Дебая и вырождением электронов.

Карты итераций:

УРС жидкости (медь)

УРС твердого тела (медь)



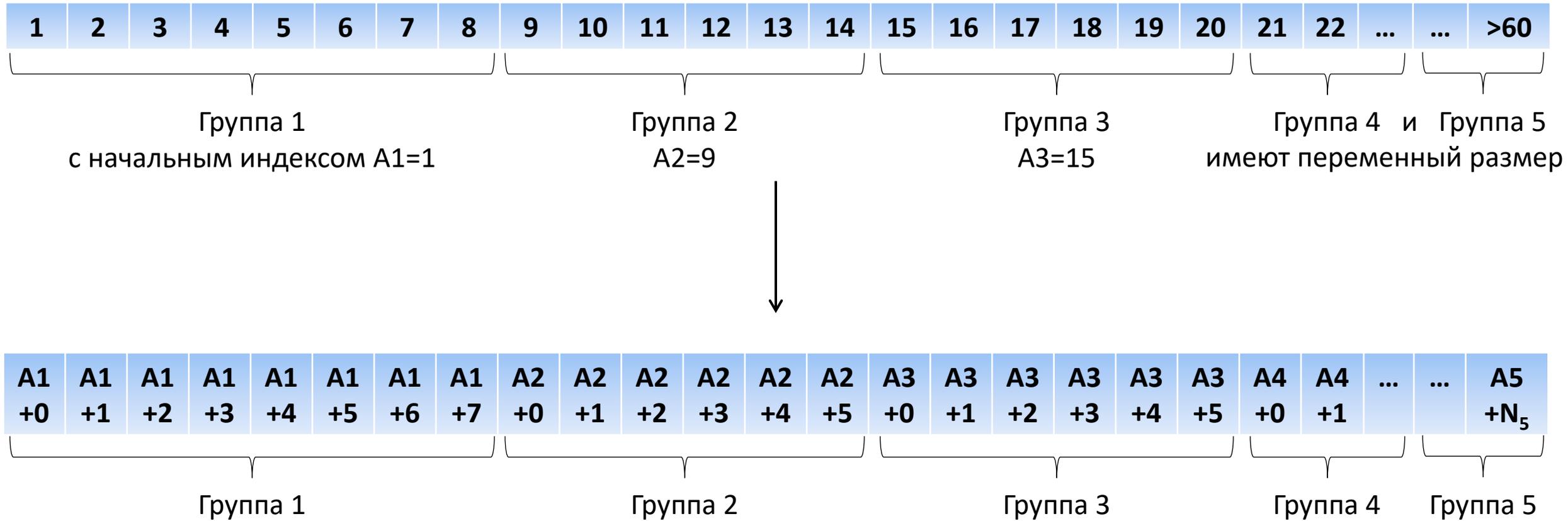
Программная реализация разработанных алгоритмов в пакете УРС-ОФ



Правила обеспечивают:

- единые интерфейсы взаимодействия прикладных программ с объектами пакета УРС-ОФ на стадиях расчета начальных данных (РНД) и решения задачи,
- использование расчетных модулей УРС на вычислителях MIMD, SIMD и GPGPU-архитектур,
- использование единых структур данных для обмена информацией с прикладными программами (в неекторизованном режиме вычислений (MIMD) - структура переменных, в векторизованном режиме (SIMD) - структура указателей на массивы исходных данных и результатов, хранящиеся в методике^[6]).

Структура массива параметров модели



Мультиархитектурный эталонный файл (МЭФ) модели РОСА-МФИ и двухфазного модуля



МЭФ – текстовый файл, содержащий фрагменты программного кода, объединённые управляющими конструкциями –тегами.

Список структурных разделов :

- РНД
- Блок комментариев
- Блок включений
- Блок объявления переменных
- Блок инициализации
- Наборы фрагментов
- Блоки завершающих вычислений

Список архитектурных тегов для перевода текста:

- Тег явного указания архитектуры
- Тег-признак векторизованного цикла

Специальные теги для записи данных в обменные структуры пакета УРС-ОФ

Теги пользовательских блоков, для вставки текста в любое место программы.

Некоторые элементы структуры МЭФ:



!<arch= SCAL GPU>

Архитектурный тег

```
real(8) :: init_Ti,init_Te,init_Pi,init_Pe,init_Pf,init_Ei,init_Ee,init_Ef,&  
init_DPiTi,init_DEiTi,init_DPeTe,init_DEeTe,init_DPfTf,init_DEfTf,init_DPiDR,init_DEiDR,&  
init_DPeDR,init_DEfDR,init_DPxDR,init_Ex,init_DPDT,init_DEDT,init_DEeDR
```

!</arch= SCAL GPU>

!<OF DECLARE>

Структурный блок: объявление переменных для векторизованных вычислений

```
integer(4), dimension(1:size) :: ursData_ko  
integer(4), dimension(1:4*size) :: ursData_ko_war  
  
logical, dimension(1:size) :: ursData_matter_break  
real(8), dimension(1:size) :: ursData_P,ursData_E,ursData_dpdt,ursData_dedt,ursData_dPdr,ursData_dedr  
real(8), dimension(1:size) :: ursData_dper, ursData_depr,ursData_Pt,ursData_Et,ursData_Px,ursData_Ex  
real(8), dimension(1:size) :: ursData_Ro, ursData_Zn , ursData_dPete, ursData_dPedr, ursData_dpdxr  
real(8), dimension(1:size) :: ursData_Te, ursData_Ti, ursData_T, ursData_Pe, ursData_Pi, ursData_Pf, ursData_Ee, ursData_Ei, ursData_Ef  
real(8), dimension(1:size) :: ursData_dPidr , ursData_deete, ursData_deidr  
real(8), dimension(1:size) :: ursData_s, ursData_tpl, ursData_alpha  
real(8), dimension(1:size) :: ursData dPiti,ursData deiti, ursData dEfd, ursData deedr, ursData dPftf, ursData dEftf
```

!</OF DECLARE>

Соглашения о единых названиях служебных структур и переменных ассоциированных с их полями

```
!-----  
! FRAG ursData_Pe  
! INPUT ursData_Px,dwEd,Fun00_3T,Fun00_3P,Fun00_3E  
! OUTPUT ursData_Pe
```

! ВЫЧИСЛЕНИЕ PE (ЭЛЕКТРОН. СОСТАВЛЯЮЩАЯ)

```
ursData_Zn ← (c2_3*Ye*Ae-dYed*Ce)  
Pe1 = B(IB5-1)*ursData_Te*ursData_Zn  
azPet = ursData_Ro*Pe1  
ursData_Pe ← ursData_PX+azPet-Px00
```

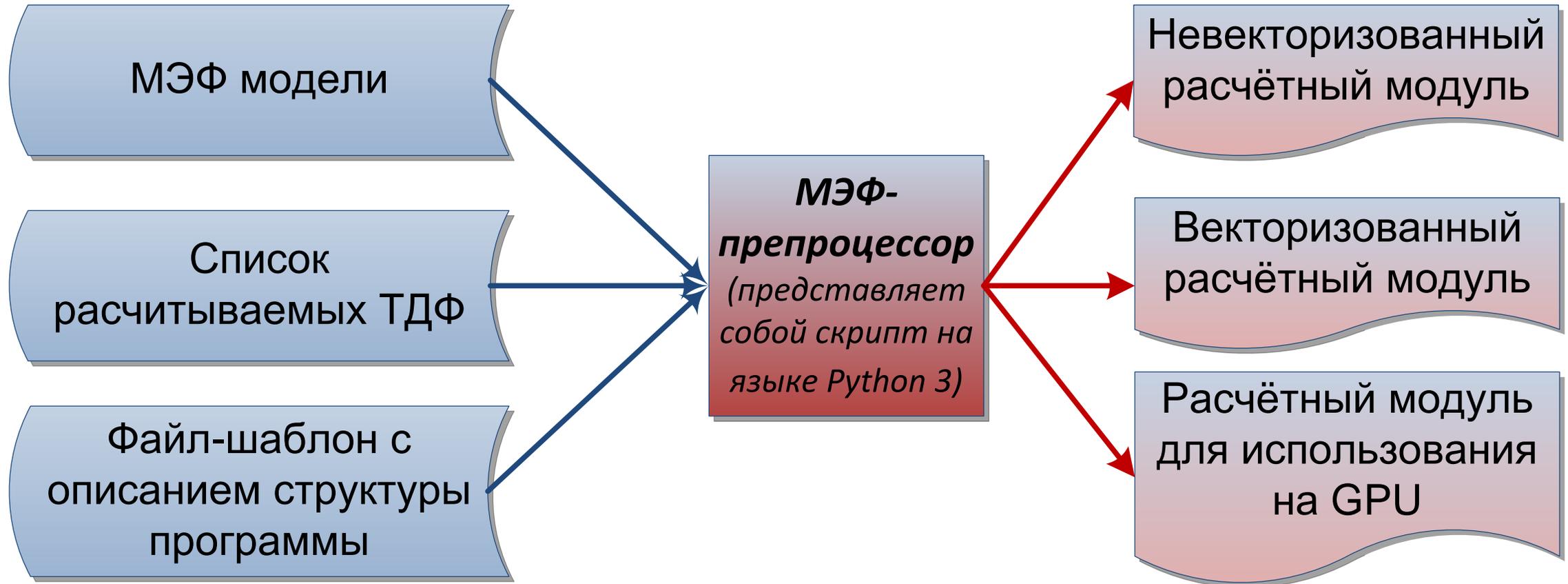
! EOF ursData_Pe

```
!-----  
! FRAG ZN  
! INPUT ursData_Pe  
! OUTPUT ursData_Zn
```

!WRITE_TO_STRUCT FROM: ursData_Zn()/c2_3 TO:ursData%Zn TYPE:REAL

! EOF ZN

Организации копирования значений локальных переменных



Пример работы МЭФ-препроцессора

МЭФ:

```
ursData_Zn = (c2_3*Ye*Ae-dYed*Ce)  
!WRITE_TO_STRUCT FROM: ursData_Zn()/c2_3 TO:ursData%Zn TYPE:REAL
```

МЭФ-
препроцессор

Невекторизованный
вариант:

```
ursData%Zn = (c2_3*Ye*Ae-dYed*Ce)  
ursData%Zn = ursData%Zn/c2_3
```

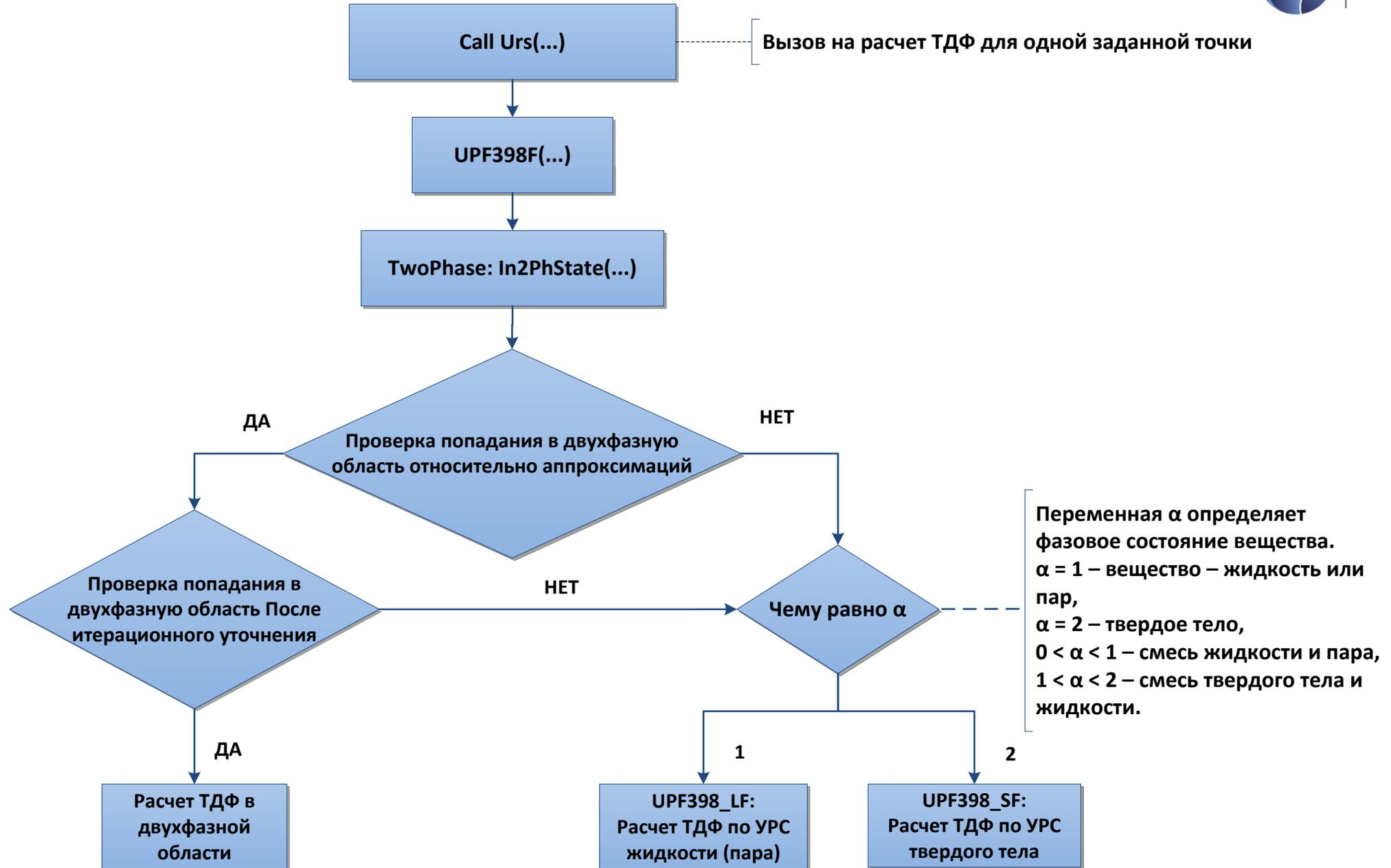
Векторизованный
вариант:

```
ursData_Zn = (c2_3*Ye*Ae-dYed*Ce)  
if (ursData%ZN/=0) then  
  prealVar = ursData%Zn  
  do indJ =0, nDm  
    realVar(indI+indJ) = ursData_Zn(indJ+1)/c2_3  
  enddo  
endif
```

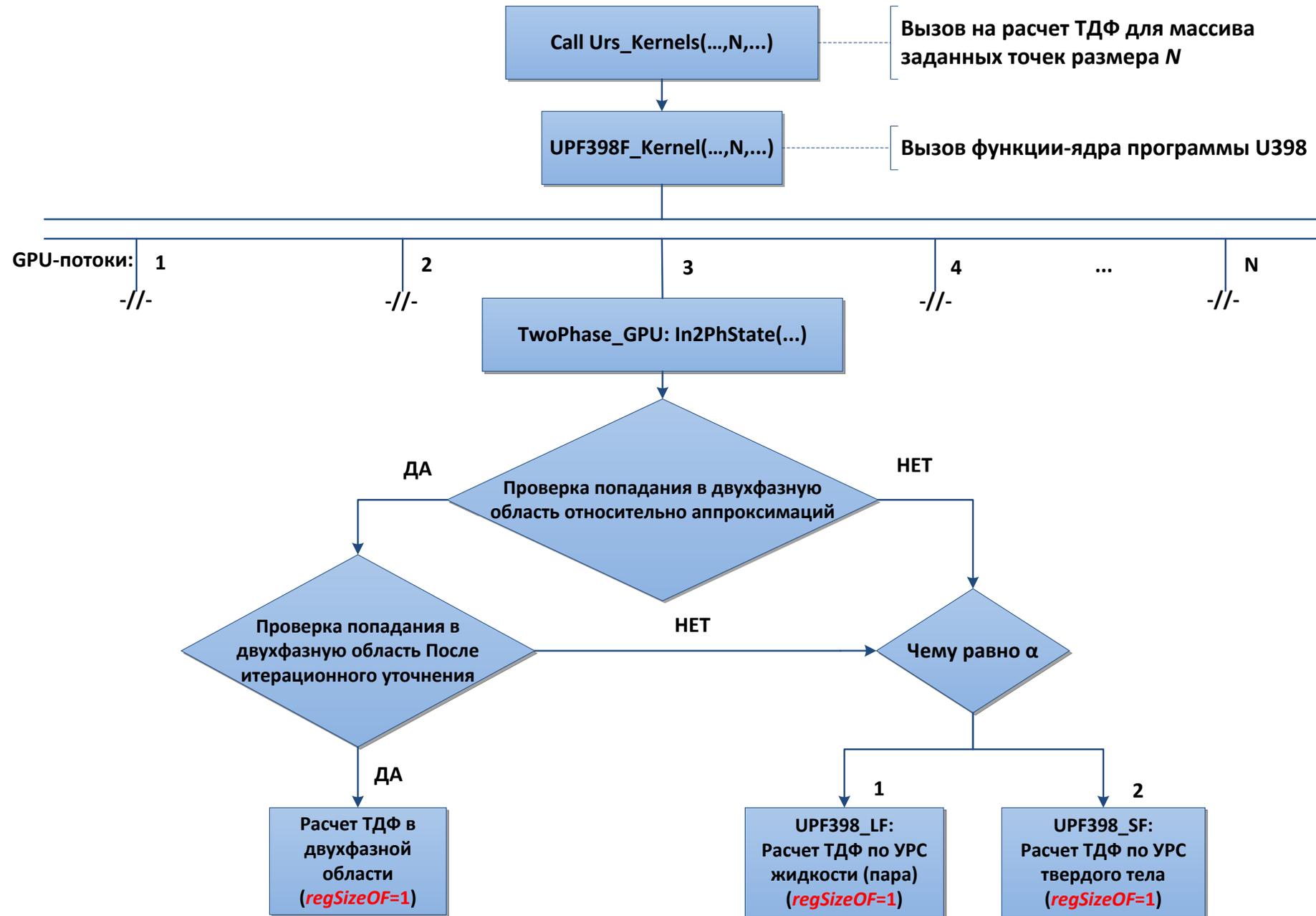
Вариант для GPU:

```
ursData_Zn = (c2_3*Ye*Ae-dYed*Ce)  
if (ursData%ZN/=0) then  
  prealVar = ursData%Zn  
  realVar(indI) = ursData_Zn(1)/c2_3  
endif
```

Порядок работы программы расчета ТДФ по модели РОСА-МФИ (U398) в неекторизованном режиме



Порядок работы программы U398 на графических ускорителях



Сравнительные оценки затрат времени от оптимизации с учетом архитектуры вычислителей

Расчеты проводились на сервере программно-аппаратного полигона НЦФМ.

CPU: Intel Xeon Gold 6132; **GPU:** NVIDIA Tesla V100 на порту NVLINK;

regSizeOF = 8; (256,1,1) – заданный размер трехмерного GPU-блока

Сетка: 10^6 точек.



U398F029 (медь)	$\rho-T$	$\rho-E$	$\rho-P$
t_{scal}/t_{vec1}	3.45	4.13	4.52
t_{vec28}/t_{GPU}	3	4	2.4
$t_{vec28}/(t_{GPU}+t_{mcpy})$	0.2	0.3	0.2

t_{scal} – время расчета на CPU в не векторизованном режиме;

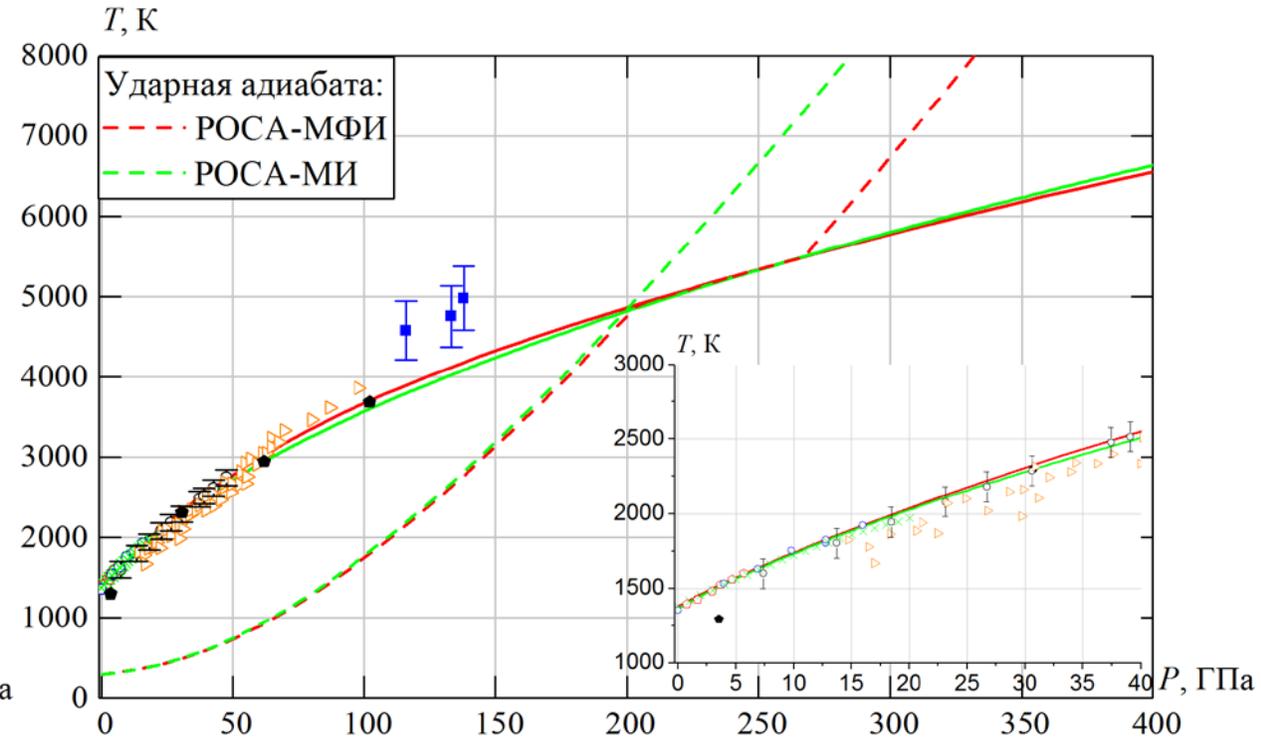
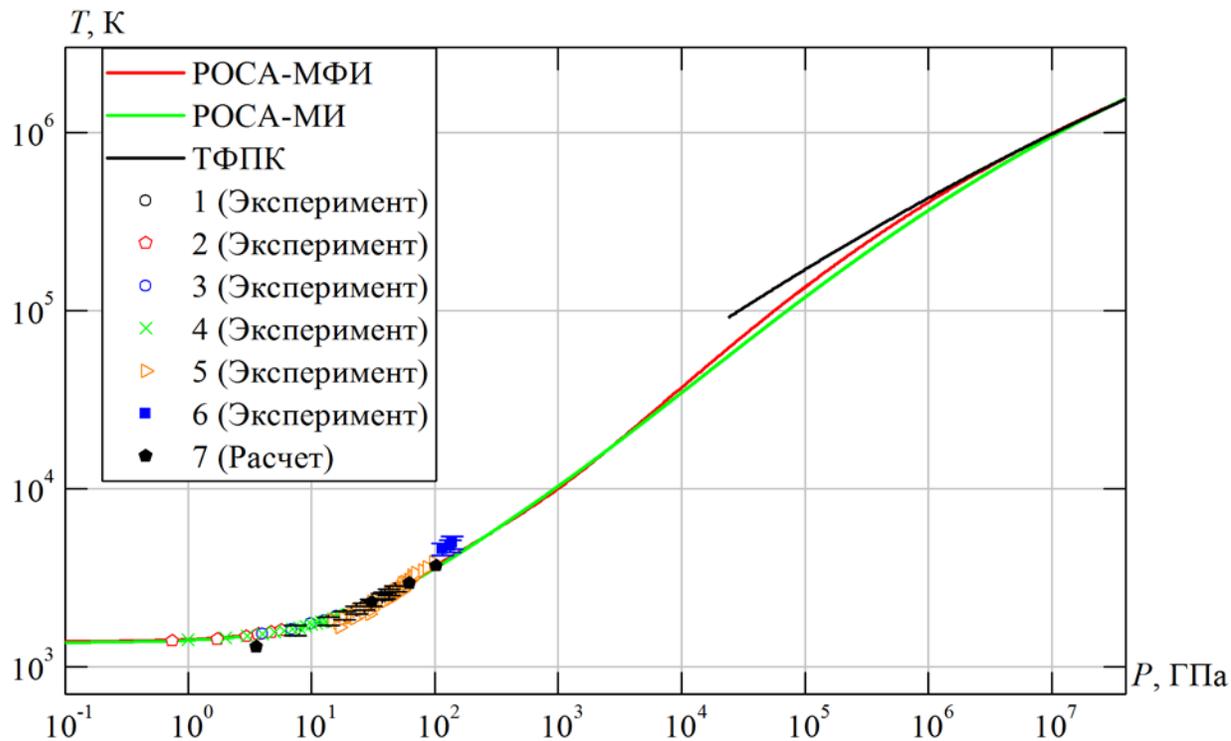
t_{vec1} – время расчета на CPU в векторизованном режиме, 1 openMP-нить;

t_{vec28} – время расчета на CPU в векторизованном режиме, 28 openMP-нитей;

t_{GPU} – время расчета на GPU;

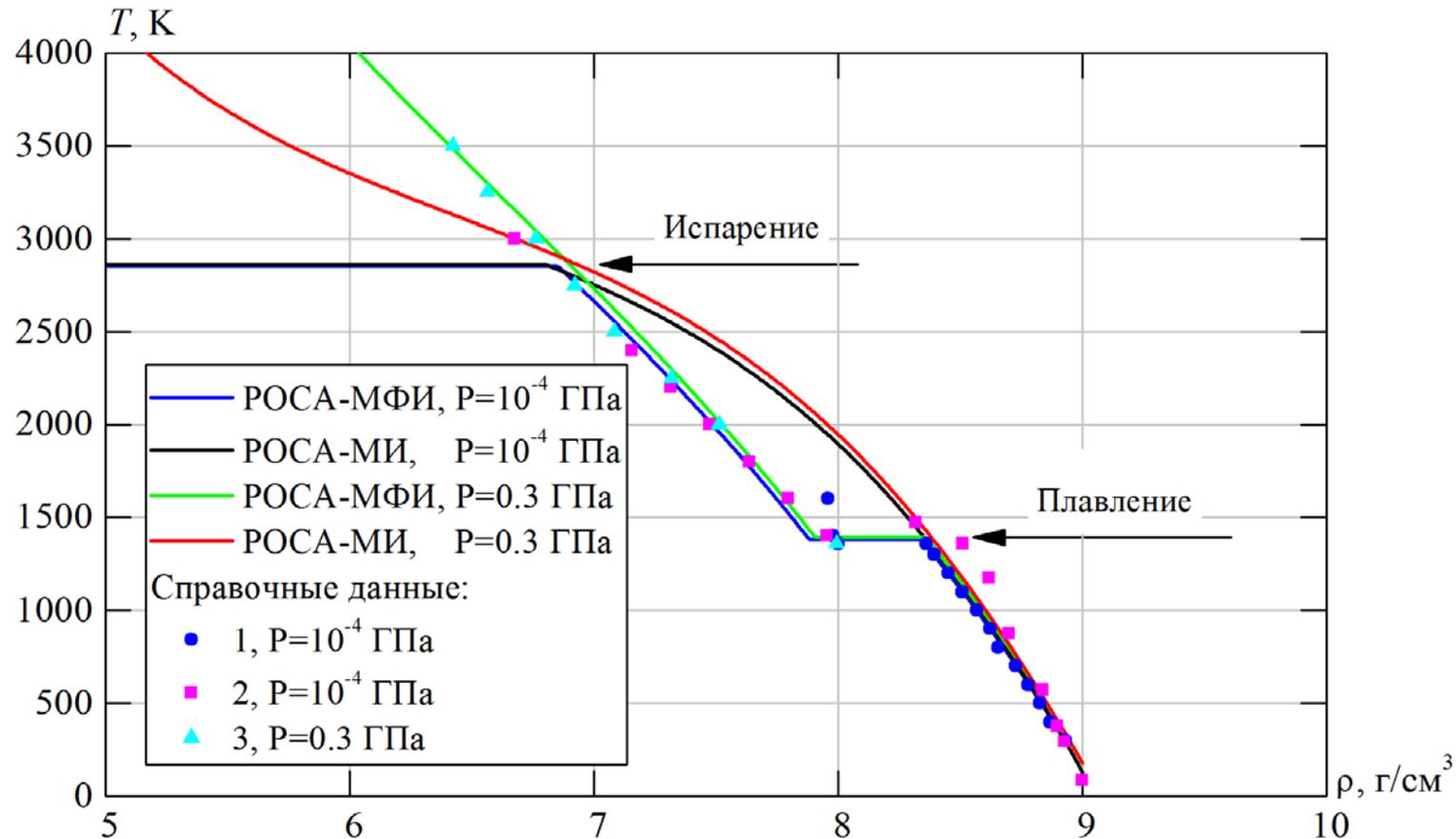
t_{mcpy} – время копирования данных с CPU на GPU и обратно;

Сравнение зависимостей температуры от давления на линии плавления и ударной адиабате меди, вычисленных по УРС РОСА-МИ и РОСА-МФИ



1. Errandonea D. // Phys. Rev. B. – 2013. – Vol. 87.
2. Errandonea D. // J. of Appl. Phys. – 2010. – Vol. 108.
3. Brand H. et. al. // High Pressure Research – 2006. – Vol. 26.
4. Akella J. et. al. // J. of Geophysical Research – 1971. – Vol. 76.
5. Japel S. et. al. // Phys. Rev. Lett. – 2005. – Vol. 95.
6. Tan H. et. al. // Appl. Phys. Lett. – 2005. – Vol. 87.
7. Vočadlo L. et. al. // J. Chem. Phys. – 2004. – Vol. 120.

Сравнение зависимостей температуры меди от плотности на изобарах $P=10^{-4}$ ГПа и $P=0.3$ ГПа, вычисленных по УРС РОСА-МИ и РОСА-МФИ



1. Зиновьев В.Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. – 1989. – 384 с.
2. Чиркин В.С. Теплофизические свойства материалов ядерной техники. – 1968. – 484 с.
3. Gathers G.R. // Int. J. of Thermophys. – 1983. – Vol. 4.



РФЯЦ-ВНИИЭФ
РОСАТОМ

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ

