

УДК 519.63

doi 10.26089/NumMet.v16r113

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОЕ МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО РАВНОВЕСИЯ В МИКРОСИСТЕМАХ ГАЗ–МЕТАЛЛ

В. О. Подрыга¹, С. В. Поляков², Д. В. Пузырьков³

Статья посвящена суперкомпьютерному моделированию термодинамического равновесия в микросистемах, содержащих разные вещества, находящиеся в различных агрегатных состояниях. В качестве примера нами рассмотрена система газ–металл, в которой в качестве газа используется азот, в качестве металла — никель. Такой выбор обусловлен тем, что рассматриваемая микросистема является основой многих технических приложений. В том числе, она используется в установках сверхзвукового холодного газодинамического напыления наночастиц на поверхности перспективных углеродсодержащих материалов. На первом этапе исследований представляет интерес равновесное состояние микросистемы азот–никель. Для моделирования процесса установления термодинамического равновесия в такой системе применен молекулярно-динамический подход. Выбранный численный алгоритм его реализации базируется на конечно-разностной схеме Верле. Для ускорения вычислений предложен параллельный алгоритм и выполнена его реализация в рамках технологий MPI и OpenMP. С помощью разработанной программы исследован процесс установления термодинамического равновесия как в чистых компонентах (азоте и никеле) при нескольких значениях температуры, включая комнатную, так и в системе азот–никель. В численных экспериментах определены как оптимальные параметры методики расчета, в том числе эффективность распараллеливания при использовании процессоров с различной архитектурой, так и физические параметры моделируемого процесса.

Ключевые слова: молекулярная динамика, параллельные вычисления, суперкомпьютерное моделирование, взаимодействие азота с никелевой поверхностью, термодинамическое равновесие.

1. Введение. Необходимость моделирования сложных технических систем и процессов возникает во многих отраслях знания, в том числе в рамках внедрения нанотехнологий в промышленности. Изучение микро- и нанопроцессов приводит к задачам динамики молекулярных систем большой размерности с большим набором неопределенных параметров и разнообразных условий, имитирующих физический эксперимент. В связи с этим в последние десятилетия активно развиваются новые подходы к компьютерному моделированию больших систем на молекулярном уровне.

Одним из наиболее эффективных подходов, имеющих важное фундаментальное и прикладное значение, является метод молекулярной динамики (МД) [1–10]. В основе метода МД лежит модельное представление о многоатомной молекулярной системе, в которой все атомы представляют собой материальные точки. Временная эволюция системы взаимодействующих частиц отслеживается путем интегрирования их уравнений движения. Движение атомов или молекул описывается в соответствии с законами классической механики Ньютона.

Важными областями по применению молекулярно-динамического моделирования являются проектирование, изготовление и эксплуатация различных технических систем, основа которых состоит из металлических элементов, а рабочие области содержат вакуум или смеси легких газов. Примером может служить современные вакуумные микроприборы, используемые в электронике и фармацевтике. В этой сфере большое распространение получили системы напыления и нанопринтинга частиц на поверхности создаваемых материалов и лекарственных препаратов. Для реализации систем напыления используются

¹ Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН (ИПМ РАН), Миусская пл., 4, 125047, Москва; науч. сотр., e-mail: pvictoria@list.ru

² Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН (ИПМ РАН), Миусская пл., 4, 125047, Москва; зав. сектором, e-mail: polyakov@imamod.ru

³ Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН (ИПМ РАН), Миусская пл., 4, 125047, Москва; аспирант, e-mail: dpuzyrkov@gmail.com

различные технические решения, в том числе установки сверхзвукового холодного газодинамического напыления (СХГН), антикоррозионные свойства которых обеспечиваются применением железо-никелевых покрытий. В качестве рабочих газов применяются азот-водородные смеси.

В настоящей статье рассматривается проблема создания вычислительных основ и комплекса параллельных программ для проведения детального молекулярно-динамического моделирования процессов релаксации газовой азотной системы в объемной геометрии и металлической системы в форме пластины, составленной из атомов никеля. Эти две системы составляют основу установок СХГН, подающих наночастицы. Назначение представляемой работы в практическом плане связано с реализацией МД-подхода на базе современных вычислительных технологий в виде программного комплекса для моделирования процессов СХГН наночастиц на поверхности различных материалов [11, 12], использующихся в электронике и медицине.

Для решения задачи расчета термодинамических равновесий газовой азотной среды и никелевой пластины выбрана молекулярно-динамическая модель, в основе которой лежат алгоритмы, описанные в работе [13]. Разработаны методы ее численного анализа на основе схемы Верле [14], а также создана расчетная параллельная программа. С помощью разработанной программы проведен цикл вычислительных экспериментов, целью которого было исследование процесса установления термодинамического равновесия в системе молекул азота и системе атомов никеля, а также определение необходимых параметров этого равновесия в зависимости от желаемых температуры и давления. Полученные в расчетах результаты продемонстрировали адекватность предложенного численного подхода современным теоретическим представлениям о моделируемом физическом процессе.

2. Теоретическая часть. Исследуемая микросистема представляется совокупностью взаимодействующих частиц, поведение которых описывается уравнениями Ньютона

$$m_{li} \frac{d^2 \mathbf{r}_{li}}{dt^2} = \mathbf{F}_{li}, \quad l = a, b, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad (1)$$

где i — номер частицы; $l = a, b$ — тип частиц (a — молекула азота, b — атом никеля); N_l — полное число атомов типа l ; m_{li} — масса частицы типа l с номером i ; $\mathbf{r}_{li}(r_x, r_y, r_z)$ — радиус-вектор i -й частицы типа l ; $\mathbf{F}_{li}(F_x, F_y, F_z)$ — суммарная сила, действующая на эту частицу. Силы представляют собой сумму компоненты взаимодействия i -й частицы с окружающими частицами, зависящей от потенциальной энергии, и компоненты, отвечающей за внешнее воздействие:

$$\mathbf{F}_{li} = - \frac{\partial U(\mathbf{r}_{l,1}, \dots, \mathbf{r}_{l,N})}{\partial \mathbf{r}_{li}} + \mathbf{F}_{li}^{\text{ext}}, \quad l = a, b, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad (2)$$

где U — потенциальная энергия, $\mathbf{F}_{li}^{\text{ext}}$ — сила взаимодействия с внешней средой.

Потенциальная энергия системы представляется в виде функции, зависящей от координат рассматриваемых частиц и описывающей взаимодействие между частицами системы. Выбор определенного вида потенциала взаимодействия основывается на сравнении механических свойств компьютерной модели потенциала и реального материала. Для решения поставленной задачи необходимо рассмотреть взаимодействие газа с газом, металла с металлом и газа с металлом:

$$U_{aa} = \sum_{i=1}^{N_a} \varphi(\mathbf{r}_{ai}), \quad U_{bb} = \sum_{i=1}^{N_b} \gamma(\mathbf{r}_{b,i}), \quad U_{ab} = \sum_{i=1}^{N_{ab}} \psi(\mathbf{r}_{li}), \quad (3)$$

где N_{ab} — число частиц газа и металла, взаимодействующих друг с другом.

Для взаимодействия частиц газа друг с другом использовался потенциал Леннарда-Джонса [15, 16] в форме “ $n - m$ ”, где $m = 6$:

$$\varphi(\mathbf{r}_{ai}) = \sum_{j>i} \varepsilon \frac{n}{n-6} \left(\frac{n}{6}\right)^{6/(n-6)} \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^n - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^6 \right], \quad i = 1, \dots, N_a. \quad (4)$$

Здесь $r_{ij} = |\mathbf{r}_{ai} - \mathbf{r}_{aj}|$ — расстояние между i -й и j -й частицами, ε — энергия молекулярного взаимодействия и σ — эффективный радиус взаимодействия. Параметры для молекул азота определены в работе [16].

В рамках рассматриваемой задачи для учета взаимодействия частиц металла друг с другом выбрана следующая модель взаимодействия, использующая потенциал погруженного атома (ППА) [17]:

$$\gamma(\mathbf{r}_{bi}) = \varpi(\rho_i) + \sum_{j>i} \mu(r_{ij}), \quad i = 1, \dots, N_b, \quad \rho_i = \sum_{k \neq i} f(r_{ik}), \quad k = 1, \dots, N_i. \quad (5)$$

Здесь $\mu(r_{ij})$ — потенциал парного взаимодействия между i -й и j -й частицами; $\varpi(\rho_i)$ — энергия i -го атома стенки за счет воздействия соседних k атомов; ρ_i — суммарная электронная плотность, создаваемая атомами системы, окружающими i -ю частицу; $f(r_{ik})$ — электронная плотность, создаваемая k -м атомом в месте расположения i -го атома; N_i — число атомов, находящихся в соседстве с i -м атомом.

Функция парного взаимодействия $\mu(r_{ij})$ и функция плотности $f(r_{ik})$ были выбраны в следующем виде, предложенном в работе [18]:

$$f(r) = \frac{f_e e^{-\beta(r/r_e-1)}}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - \lambda\right)^n}, \quad \mu(r) = \frac{Ae^{-\alpha(r/r_e-1)}}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - k\right)^m} - \frac{Be^{-\beta(r/r_e-1)}}{1 + \left(\frac{r}{r_e} - \lambda\right)^n}. \quad (6)$$

Здесь r_e — межатомное расстояние равновесия; f_e — параметр, зависящий от энергии когезии; A, B, α и β — настраиваемые параметры; k и λ — дополнительные параметры, отвечающие за обрезание действия потенциала.

Для описания функции погружения атома i -го атома $\varpi(\rho_i)$ используются три уравнения в зависимости от величины электронной плотности:

$$\varpi(\rho) = \begin{cases} \sum_{i=0}^3 \varpi_{n_i} \left(\frac{\rho}{\rho_n} - 1\right)^i, & \rho < \rho_n, \\ \sum_{i=0}^3 \varpi_i \left(\frac{\rho}{\rho_e} - 1\right)^i, & \rho_n \leq \rho < \rho_0, \\ \varpi_e \left[1 - \ln\left(\frac{\rho}{\rho_s}\right)\right] \left(\frac{\rho}{\rho_s}\right)^\eta, & \rho_0 \leq \rho. \end{cases}$$

Константы для никеля представлены в работах [18, 19].

Расчет взаимодействия между частицами металла и частицами газа осуществляется с помощью потенциала Леннарда-Джонса в форме “12 – 6” [15]:

$$\psi(\mathbf{r}_{li}) = \sum_{j>i} 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^6 \right], \quad i = 1, \dots, N_{ab}. \quad (7)$$

При большом удалении частиц друг от друга значение энергии взаимодействия таких частиц становится мало. С целью оптимизации расчетов общепринято рассматривать потенциальную энергию (3) в заданных формах (4) и (5) при условии $U_{ll}(r \geq r_c) \equiv 0$, где r_c — расстояние дальнего действия потенциала (радиус обрезания). В рамках данной задачи для никеля радиус был взят $r_c = 0.9$ нм, для азота $r_c = 0.91$ нм.

Решение уравнений (1) проводится с помощью разностной схемы Верле в скоростной форме [14]:

$$r^{n+1} = r^n + v^n \Delta t + \frac{F^n}{m} \frac{(\Delta t)^2}{2}, \quad v^{n+1} = v^n + \frac{F^{n+1} + F^n}{2m} \Delta t. \quad (8)$$

Здесь Δt — шаг интегрирования (по времени), n — номер шага, F^{n+1} — значение силы на данном шаге.

Кинетическая энергия системы E_K и кинетическая энергия теплового движения E_T вычисляются отдельно для частиц каждого типа $l = a, b$ как суммы энергий каждой частицы этого типа:

$$\begin{aligned} E_K &= \sum_i ke_{li}, & E_T &= \sum_i wke_{li}, \\ ke_{li} &= \frac{m_{li} |\mathbf{v}_{li}|^2}{2}, & wke_{li} &= \frac{m_{li} |\mathbf{v}_{li} - \mathbf{v}_{lm}|^2}{2}, \\ \mathbf{v}_{l,m} &= \frac{1}{N_l} \sum_i \mathbf{v}_{li}, & l &= a, b, \quad i = 1, \dots, N_l, \end{aligned}$$

где ke_i — кинетическая энергия частицы с номером i , wke_i — тепловая кинетическая энергия частицы с номером i , $|\mathbf{v}_{li}|$ — длина вектора скорости i -й частицы типа l , $\mathbf{v}_{l,m}$ — скорость центра масс системы частиц типа $l = a, b$.

Полная энергия системы E частиц одного типа представляет собой сумму кинетической энергии и потенциальной энергии системы частиц этого типа: $E = E_K + U$.

Температура T системы частиц газа или металла определяется следующим образом [20]:

$$T = \frac{2}{3} \frac{\langle E_T \rangle}{k_b}, \quad \langle E_T \rangle = \frac{1}{N_l} \sum_i \frac{m_{li} |\mathbf{v}_{li} - \mathbf{v}_{lm}|^2}{2}, \quad i = 1, \dots, N_l,$$

где k_b — постоянная Больцмана.

Для достижения и поддержания температуры системы вблизи заданного значения, а также для релаксации системы используют специальные алгоритмические приемы — термостаты. В данной работе для достижения желаемой температуры системы был рассмотрен термостат Берендсена [21]. Изменение кинетической энергии в этом случае моделируется путем перемасштабирования скоростей атомов системы на каждом шаге:

$$\lambda = \sqrt{1 + \frac{2\Delta t}{\tau_t} \left(\frac{T_t}{T(t - \Delta t)} - 1 \right)}, \quad (9)$$

где λ — коэффициент пересчета скоростей.

В результате рассмотрения разных значений параметра τ_t определяется оптимальное время взаимодействия с резервуаром в условиях поставленной задачи, благодаря которому система достигнет равновесного состояния в более короткие периоды времени по сравнению с другими значениями данного параметра. В расчетах металлической и газовой систем важную роль играют диагональные компоненты тензора давления, которые определяются соотношением

$$P_{\alpha\alpha} = \frac{1}{V} \sum_i m_i (v_{i\alpha} - v_{m\alpha})^2 + \frac{1}{V} \sum_i \sum_{j>i} r_{ij,\alpha} F_{ij,\alpha}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad (10)$$

где V — объем рассматриваемой системы, $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, \mathbf{F}_{ij} — сила взаимодействия между i -й и j -й частицами, α — координата x , y или z соответственно. Индекс типа частиц удален из этого соотношения для наглядности выражения.

Давление в системе в трехмерной постановке задачи определяется формулой

$$P = \frac{1}{3} (P_{xx} + P_{yy} + P_{zz}).$$

Алгоритм решения задачи состоит в следующем. В начальный момент времени задаются координаты и скорости всех частиц. Далее в цикле по времени решаются уравнения движения (1). Для этого на каждом шаге вычисляются силы взаимодействия (2), новые координаты и скорости частиц (8) с учетом граничных условий и внешнего воздействия (9) на систему. Расчеты заканчиваются при достижении системой термодинамического равновесия.

Начальные условия включают в себя распределение координат частиц (структура которого зависит от агрегатного состояния образца) и распределение скоростей (задаваемое согласно выбранной температуре моделирования).

Поскольку газ не имеет четкой структуры, его распределение определяется плотностью, соответствующей выбранным значениям температуры и давления. Таким образом, имеется некоторый объем, заполненный частицами газа согласно распределению Максвелла, на границах которого наложены периодические граничные условия.

Структура твердых тел определяется кристаллической решеткой [22, 23]. Рассматриваемый в работе никель имеет кубическую гранецентрированную кристаллическую решетку (ГЦК). Параметр решетки rcr (ребро элементарной ячейки) определяется равновесными начальными значениями температуры и давления с учетом используемой функции взаимодействия. Описание решетки базируется на базовом векторе $\mathbf{L}(Lx, Ly, Lz) = \mathbf{k} \cdot rcr$, содержащем фактически размеры пластины по осям x, y, z соответственно. Здесь $\mathbf{k}(k_x, k_y, k_z)$ — количество элементарных ячеек. Таким образом, в дальнейшем рассмотрении никелевая система представляет собой параллелепипед, содержащий $k_x \times k_y \times k_z$ кристаллов.

В работе рассматривается динамика микросистем, конечных по оси z и бесконечных по двум другим направлениям. Поэтому вдоль осей x, y используются периодические граничные условия (ПГУ) с периодами Lx, Ly соответственно: $r_x \in [r_x^{\min}, r_x^{\min} + Lx)$, $r_y \in [r_y^{\min}, r_y^{\min} + Ly)$; здесь r_x^{\min}, r_y^{\min} — начала отсчета координат по направлениям осей x, y .

Значения начальных векторов скоростей и для частиц газа, и для частиц металла генерируются из распределения Максвелла, соответствующего необходимому значению температуры.

3. Реализационная часть. Для реализации разработанного численного подхода использовалась концепция параллельного программирования, разработанная в [24]. Ее основу составляют принципы геометрического и функционального параллелизма [25]. В нашем случае расчетная область в целом разбивается на локальные домены одинаковой мощности. Мощность домена измеряется в количестве элементарных боксов, в каждом из которых молекулы обязательно взаимодействуют друг с другом. Разбиение на домены производится в рамках топологии “трехмерная решетка”, поскольку расчетная область является трехмерным параллелепипедом. Каждый расчетный домен попадает на свой вычислитель, в качестве которого используется узел кластера или суперкомпьютера. Распределение доменов по вычислителям реализовано с помощью библиотеки MPI [26].

Внутри узла (расчетного домена) оказывается некоторое количество элементарных боксов, сгруппированных в трехмерную подрешетку. Такая структура используется для дальнейшего распределения вычислений по ядрам центральных процессоров (ЦПУ), поскольку вычисления внутри боксов имеют более высокую интенсивность, чем между боксами. В итоге, межмолекулярные взаимодействия в боксах реализуются в параллельном режиме за счет использования технологии OpenMP [27]. В дальнейшем планируется эти вычисления погрузить на графические ускорители, для чего будет использована технология CUDA [28].

Основной алгоритм расчета выглядит следующим образом.

Этап 1. Чтение исходных данных MPI-приложением и инициализация структур данных на каждом вычислителе.

Этап 2. Основные вычисления в цикле по времени.

Этап 3. Выполнение результирующих вычислений и деинициализация.

В рамках первого этапа производится, в частности, определение числа молекул в расчетной области, генерация их размещения, а также генерация равномерного по углам и максвелловского по модулю распределения их импульсов, расчет стартовых сил.

В рамках цикла по времени реализована следующая последовательность действий.

Сначала вычисляются новые значения координат. Далее производится их коррекция с помощью периодических граничных условий. После этого производится обмен частицами между конкретными боксами, который осуществляется как внутри расчетных доменов, так и между расчетными доменами с помощью функций MPI.

Далее производится расчет сил, на основании которых производится коррекция скоростей частиц и вычисляются все необходимые интегральные характеристики. При достижении контрольных моментов времени необходимые данные сохраняются в файлах.

Отличием описанного подхода от других является использование структур данных, опирающихся на элементарные боксы, размеры которых связаны с радиусом обрезания потенциалов взаимодействия и параметрами кристаллической решетки металла. Такой подход является достаточно затратным по объему необходимой оперативной памяти, однако значительно экономит время при вычислениях. Дело в том, что обработка малого числа частиц в нескольких смежных боксах, расположенных практически в одной или нескольких смежных страницах оперативной памяти, выполняется максимально быстро и хорошо кэшируется. Фактически, мы использовали прием локализации памяти, при котором процессору при интенсивных вычислениях не требуется переключаться между далеко отстоящими друг от друга страницами оперативной памяти.

Кроме того, мы избежали дорогостоящей процедуры определения принадлежности различных частиц к конкретным боксам, проводящейся в других кодах на каждом шаге по времени. Еще один плюс от использования боксовой структуры заключается в том, что пересылка частиц между узлами многопроцессорной вычислительной системы (МВС), связанная с движением последних по расчетной области, интегрируется как с реализацией периодических граничных условий, так и с обменами информацией между смежными по кубической решетке MPI-процессами. Последнее достигается использованием теневых (виртуальных) боксов с фиктивными частицами, взаимодействие с которыми основных частиц должно учитываться в потенциальной энергии системы.

Код программы был создан на языке ANSI C и адаптирован к вычислениям на кластерах с центральными многоядерными и векторными процессорами. Достоинства разработанного подхода частично отмечались в [19]. Здесь хотелось бы отметить, что в отличие от этой работы в обсуждаемых ниже вычислительных экспериментах фигурируют атомные и молекулярные системы с количеством частиц порядка 10 миллионов.

Приведем данные результатов расчетов, которые проводились на системе МВС-10П (Межведомственный суперкомпьютерный центр РАН). Этот суперкомпьютер имеет гибридную архитектуру, которая ха-

рактически характеризуется тем, что на каждом ее узле имеются два центральных процессора (ЦПУ) и два векторных процессора (ВПУ). В качестве ЦПУ используется 8-ядерный Intel Xeon E5-2690 с частотой 2.90 ГГц. В качестве ВПУ используется 61-ядерный Intel Xeon Phi 5110p с частотой 1.095 ГГц.

Расчеты на эффективность распараллеливания проводились для трех вариантов систем: чистый никель (тестовая микросистема содержала пластинку никеля с размерами $288 \times 288 \times 24$ ребер; число атомов никеля составляет 8 128 512; решетка из боксов имеет размеры $96 \times 96 \times 8$), чистый азот (тестовая микросистема содержала куб с размерами $288 \times 288 \times 288$ ребер никеля, что в длинах свободного пробега молекул составляет $(1.143\lambda)^3$, если взять температуру 273.15 К (см. ниже); число молекул азота составляет 28 256; решетка из боксов имеет размеры $96 \times 96 \times 96$), азот–никель (тестовая микросистема содержала предыдущие две; общее число молекул составляет 8 131 368; решетка из боксов имеет размеры $96 \times 96 \times 104$).

При анализе эффективности распараллеливания учитывалось, что первые две микросистемы являются однородными, а третья — неоднородная. При этом первая и третья микросистемы являются существенно вычислительно емкими, а вторая при данной конфигурации практически не требует распараллеливания. В итоге, при расчетах первой и третьей микросистем использовалось распараллеливание по узлам (MPI) и по тредам (OpenMP), при расчетах второй — только по узлам (MPI). В первом случае (первая и третья микросистемы) число MPI-процессов было достаточно велико (вплоть до 1024 и более). Однако оптимальным в итоге оказалось число 256. Количество тредов варьировалось на ЦПУ от 1 до 32, на ВПУ — от 15 до 240. Для второй микросистемы распараллеливание использовалось лишь для того, чтобы уменьшить общий объем структур расчетных данных, при этом число MPI-процессов было малым (от 1 до 16).

Проведенные тесты показали, что для первой микросистемы вследствие ее однородности и большого объема ускорение в случае использования ЦПУ и ВПУ долгое время ведет себя линейно. Для этого из всех трехмерных MPI-решеток следует выбирать такие, которые подобны решетке боксов $96 \times 96 \times 8$. При этом мы использовали в основном двумерные MPI-решетки $1 \times 1 \times 1$, $2 \times 2 \times 1$, $4 \times 4 \times 1$, $8 \times 8 \times 1$, $16 \times 16 \times 1$, $32 \times 32 \times 2$, поскольку решетка боксов по третьему направлению невелика. Эффективность распараллеливания при такой стратегии сохранялась для ЦПУ на уровне 95 процентов на конфигурациях вплоть до 1024 MPI-процессов, но затем резко падала (ввиду естественного ограничения: число боксов, обрабатываемых по каждому координатному направлению, должно быть не менее 3). Для расчетов на ВПУ ситуация была хуже вследствие того, что каждый поток (тред) ВПУ почти в 15 раз менее производительный, чем поток ЦПУ (см. ниже).

Для второй микросистемы (несмотря на ее вычислительную однородность) ускорение и эффективность распараллеливания деградируют очень быстро ввиду малого объема вычислений. Фактически обмены по сети здесь занимают большую часть времени расчета.

Для третьей микросистемы была принята двухмерная декомпозиция области (по первым двум координатам) с целью обеспечения однородности расчета столба газ–металл каждым MPI-процессом. При этом каждый MPI-процесс при распараллеливании по тредам производил балансировку загрузки с учетом мощности (количества частиц) в непустых боксах. Результаты расчетов приведем в табл. 1. В таблице приняты следующие обозначения: NP_x — число MPI-процессов по направлению x ; NP_y — число MPI-процессов по направлению y ; $NCPU$ — количество используемых ЦПУ; $NP CPU$ — количество MPI-процессов, исполняемых на одном ЦПУ; $NT CPU$ — число тредов ЦПУ, приходящихся на один MPI-процесс; $NVPU$ — количество используемых ВПУ; $NP VPU$ — количество MPI-процессов, исполняемых на одном ВПУ; $NT VPU$ — число тредов ВПУ, приходящихся на один MPI-процесс; $Time$ — время расчета в секундах; Acc — ускорение; Eff — эффективность в процентах. Общее число MPI-процессов NP определяется выражением $NCPU \times NP CPU + NVPU \times NP VPU$ и совпадает с величиной $NP_x \times NP_y$. Общее число расчетных потоков (тредов) для каждого типа устройств выбиралось максимально возможным: 16 на ЦПУ и 240 на ВПУ, чтобы задействовать все доступное оборудование. В качестве эталонного выбран расчет на одном ЦПУ, время которого минимально (7-я строка таблицы). Ускорение и эффективность определяются по эталонному расчету с учетом задействованного оборудования.

Обсудим результаты, приведенные в табл. 1. Во-первых, расчеты на одном ЦПУ и на одном ВПУ при максимальной загрузке оборудования показывают, что вместо распараллеливания по тредам лучше использовать разбиение по MPI-процессам. Этот прием позволяет уменьшить используемую MPI-процессом локальную память и соответственно увеличить скорость доступа к ней. Именно поэтому эталонный расчет на 16-и MPI-процессах выигрывает у всех остальных. Кроме того, можно отметить, что этот же прием работает на ВПУ, но само ВПУ проигрывает ЦПУ. Последнее объясняется тем, что в молекулярно-динамических вычислениях векторизация не дает того эффекта, который присущ линейным алгебраическим преобразованиям. Причина замедления вычислений на ВПУ кроется в том, что основной вы-

числительной сложностью в МД-алгоритме обладает функция расчета нелинейных и неоднородных по структуре потенциалов взаимодействия частиц (и градиентов от них). В итоге, в расчетах на ВПУ мы подбирали такое число тредов, которое обеспечивает минимальное время решения задачи. В результате оказалось, что при данных размерах решетки боксов оптимальным является конфигурация, использующая 15 тредов ВПУ.

Таблица 1
Данные расчетов одного тестового шага по времени для третьей смешанной микросистемы

| NPx | NPy | NCPU | NPCPU | NTCPU | NVPU | NPVPU | NTVPU | Time | Acc | Eff |
|---------------------------|-----|------|-------|-------|------|-------|-------|---------|--------|--------|
| 1 ЦПУ/ВПУ | | | | | | | | | | |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 16 | 0 | 0 | 0 | 172.305 | — | — |
| 2 | 1 | 1 | 2 | 8 | 0 | 0 | 0 | 48.113 | — | — |
| 2 | 2 | 1 | 4 | 4 | 0 | 0 | 0 | 41.981 | — | — |
| 4 | 2 | 1 | 8 | 2 | 0 | 0 | 0 | 39.071 | — | — |
| 4 | 4 | 1 | 16 | 1 | 0 | 0 | 0 | 38.691 | 1.000 | 100.00 |
| 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 240 | 302.120 | — | — |
| 2 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 2 | 120 | 216.673 | — | — |
| 2 | 2 | 0 | 0 | 0 | 1 | 4 | 60 | 134.189 | — | — |
| 4 | 2 | 0 | 0 | 0 | 1 | 8 | 30 | 73.520 | — | — |
| 4 | 4 | 0 | 0 | 0 | 1 | 16 | 15 | 63.532 | — | — |
| 1 узел (2 ЦПУ, 2 ВПУ) | | | | | | | | | | |
| 8 | 4 | 2 | 16 | 1 | 0 | 0 | 0 | 30.469 | 1.270 | 63.492 |
| 8 | 4 | 0 | 0 | 0 | 2 | 16 | 15 | 32.828 | 1.176 | 58.930 |
| 8 | 8 | 2 | 16 | 1 | 2 | 16 | 15 | 16.689 | 2.318 | 37.958 |
| 2 узла (4 ЦПУ, 4 ВПУ) | | | | | | | | | | |
| 8 | 8 | 4 | 16 | 1 | 0 | 0 | 0 | 15.311 | 2.522 | 63.052 |
| 8 | 8 | 0 | 0 | 0 | 4 | 16 | 15 | 16.514 | 2.343 | 58.573 |
| 16 | 8 | 4 | 16 | 1 | 4 | 16 | 15 | 8.822 | 4.386 | 54.822 |
| 4 узла (8 ЦПУ, 8 ВПУ) | | | | | | | | | | |
| 8 | 8 | 8 | 8 | 2 | 0 | 0 | 0 | 7.642 | 5.063 | 63.287 |
| 16 | 8 | 0 | 0 | 0 | 8 | 16 | 15 | 8.696 | 4.449 | 55.616 |
| 16 | 16 | 8 | 16 | 1 | 8 | 16 | 15 | 4.521 | 8.558 | 53.488 |
| 8 узлов (16 ЦПУ, 16 ВПУ) | | | | | | | | | | |
| 16 | 8 | 16 | 8 | 2 | 0 | 0 | 0 | 3.841 | 10.073 | 62.957 |
| 16 | 16 | 0 | 0 | 0 | 16 | 16 | 15 | 4.768 | 8.115 | 50.717 |
| 32 | 16 | 16 | 16 | 1 | 16 | 16 | 15 | 2.770 | 13.968 | 43.650 |
| 16 узлов (32 ЦПУ, 32 ВПУ) | | | | | | | | | | |
| 16 | 16 | 32 | 8 | 2 | 0 | 0 | 0 | 1.936 | 19.985 | 62.453 |
| 32 | 16 | 0 | 0 | 0 | 32 | 16 | 15 | 2.903 | 13.328 | 41.650 |
| 32 | 32 | 32 | 16 | 1 | 32 | 16 | 15 | 2.255 | 17.158 | 26.809 |

Во-вторых, расчеты на всем оборудовании одного узла, в том числе по гибридной схеме ЦПУ+ВПУ, показали, что в целом расчеты на ЦПУ эффективнее, чем расчеты на ВПУ, однако гибридная схема позволяет ускорить вычисления почти в 2 раза. Общая эффективность распараллеливания при этом состав-

ляет 58 процентов. По этому поводу можно отметить, что используемый алгоритм расчетов безусловно неидеален и имеет последовательные участки кода, связанные с балансировкой загрузки и вычислением макрохарактеристик моделируемого процесса и подготовкой ввода-вывода данных (заметим, что сам ввод-вывод не учитывается в приведенных временах расчета). Распараллеливание этих фрагментов кода может не только не дать дополнительного ускорения, но и ухудшить ситуацию.

В-третьих, расчеты на большом количестве узлов показывают, что и в этом случае расчеты на ЦПУ эффективнее, чем расчеты на ВПУ, при этом эффективность расчетов на ЦПУ практически не падает. Эффективность же расчетов на ВПУ или по гибридной схеме уменьшается. Причиной этому служит то обстоятельство, что ВПУ обслуживают обмены по сети одним тредом, т.е. в существенно более медленном темпе, чем это осуществляется одним тредом ЦПУ. Однако и в данной ситуации расчеты по гибридной схеме ЦПУ+ВПУ позволяют обеспечить минимальное время решения задачи, к тому же гибридная схема позволяет использовать в 2 раза меньше узлов МВС, что существенно при проведении длительных и массовых расчетов на использованном суперкомпьютере.

4. Экспериментальная часть. Для выполнения вычислительного эксперимента по взаимодействию газовых потоков с металлическими поверхностями установок СХГН используемые металлические и газовые микросистемы должны быть специальным образом подготовлены, а именно должны быть собраны в необходимой геометрии, находиться при выбранной температуре и желаемом давлении с минимальными осцилляциями, т.е. находиться в термодинамическом равновесии. Для реализации этого подготовительного этапа были проведены расчеты, результаты которых приведены в данном разделе. Целью подготовительных расчетов было определение равновесных макропараметров (средние температура, давление и др.) и определение оптимальных параметров численного алгоритма для задачи релаксации металлической, газовой и смешанной микросистем. В последующих трех подпунктах излагаются результаты моделирования термодинамического равновесия в металлической микросистеме в форме пластины, состоящей из атомов никеля, в объемной микросистеме, состоящей из молекул азота, и в смешанной микросистеме, содержащей пластину никеля и вертикальный слой азота.

4.1. Равновесие в системе атомов никеля. Рассмотрению никелевого образца в форме пластины предшествовало моделирование равновесия в объемном образце [19]. Для этого использовались ПГУ по трем координатным осям, сравнительно небольшие размеры моделируемой системы и некоторое общепринятое значение ребра ГЦК решетки никеля. Для расчета термодинамического равновесия в пластине пришлось учесть, что в реальном эксперименте пластина должна быть ненапряженной. Это означает равенство нулю диагональных компонент тензора давления. Однако такая ситуация реализуется путем изменения ребра решетки, т.е. реальная металлическая микросистема подстраивает свои размеры так, чтобы минимизировать функционал энергии и тензор давления. Такое поведение микросистемы в численных экспериментах можно реализовать двумя способами. Первый (дорогостоящий) состоит в использовании подходов квантовой молекулярной динамики совместно с вариационными методами. Второй (менее трудоемкий) состоит в подборе ребра кристаллов никеля, обеспечивающего равенство нулю давления в объемном образце при заданной температуре. Именно этот второй подход и использовался в представляемых расчетах.

Расчет объемной никелевой микросистемы проводился для размера $24 \times 24 \times 24$, измеряемого в длинах элементарных ячеек (ребер кристаллов). Данный размер системы соответствует количеству атомов никеля $N_b = 55\,296$. В расчетах было определено наиболее оптимальное время взаимодействия атомов с тепловым резервуаром $\tau_t = 1$ пс, которое приводило к наиболее быстрому достижению релаксации системы при малых осцилляциях макропараметров. Термостат применялся по всей области моделирования. Были рассмотрены 4 разных значения температуры и определены соответствующие ребра элементарных ячеек, значения которых представлены в табл. 2.

После того как значения ребер ячеек были определены, был сформирован образец в форме пластины, конечной по оси z . Образец формировался методом тиражирования по координатам x и y . Размеры системы варьировались от $24 \times 24 \times 24$ до $288 \times 288 \times 24$. Термостат и время взаимодействия с тепловым резервуаром задавались аналогично подготовительному этапу. Размер минимальной системы $24 \times 24 \times 24$ для образца в форме пластины соответствует количеству частиц $N_b = 56\,448$, размер максимальной системы $288 \times 288 \times 24$ соответствует $N_b = 8\,128\,512$. Начальные распределения скоростей растиражированных частиц совпадали с распределениями в исходном объемном образце.

Таблица 2
Значения ребер элементарных ячеек, соответствующие условию ненапряженности пластины при выбранных температурах

| | | | | |
|---------------|----------|----------|----------|----------|
| T , К | 126.85 | 200.00 | 273.15 | 346.30 |
| r_{cr} , нм | 0.352470 | 0.352795 | 0.353140 | 0.353510 |

Расчеты образцов в форме пластины производились довольно продолжительное время. Этим достигалась полная термализация системы (выход диагональной zz -компоненты тензора давления на нулевой уровень). В качестве иллюстрации можно привести такие данные. Термализация пластин происходила в течение 1 нс, окончательная релаксация в режиме отсутствия термостатирования заняла еще 200 пс. Такая длительность расчетов связана с сильными колебаниями на границах пластины.

Приведем ниже результаты расчета при желаемой температуре системы и ребре элементарной ячейки $rcr = 0.353140$ нм соответственно. На рис. 1 представлены распределения диагональной компоненты тензора давления P_{zz} и концентрации частиц в пластине по слоям относительно оси z , толщина одного слоя соответствует 1 нм. Распределения получены усреднением значений по времени после достижения равновесия.

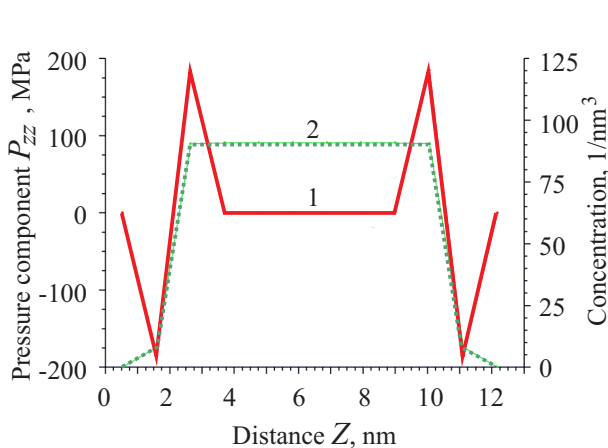


Рис. 1. Распределения диагональной компоненты тензора давления (1) и концентрации частиц (2) в пластине по слоям относительно оси z ($T = 273.15$ K)

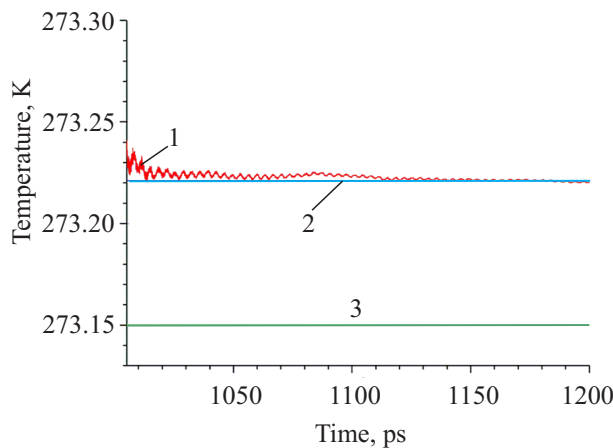


Рис. 2. Профиль усредненной по пространству и времени равновесной температуры в пластине из атомов никеля ($T = 273$ K): 1) температура, 2) $\langle T \rangle$, 3) $T_0 = 273$ K

Из распределения концентрации видно, что поверхностные слои пластины перестроились, такие изменения структуры образца являются важными при исследовании поверхностных явлений. Давление в поверхностных слоях тоже имеет несколько другое значение, т.е. отклонено от нуля, но это на самом деле вызвано упрощенной схемой вычислений при визуализации. Для локализации давления в пространстве некоторые компоненты разделяются между двумя атомами, хотя на самом деле значения принадлежат не двум атомам, а некоторой области между ними. В результате такого разделения получаем некомпенсированные вириальные части давления и приходим к подобным отклонениям при построении распределений. Если же сложить значения граничных слоев с отклонением, то видно, что они компенсируют друг друга и в сумме дадут ноль.

На рис. 2 представлен профиль температуры системы. Температура рассматривается на временном промежутке после установления термодинамического равновесия, значения получены усреднением по пространству и времени. Температура системы сохраняется после отключения термостата и соответствует желаемому значению с отклонением в 0.07 K, что является хорошим показателем точности вычислений.

Таким образом, равновесие в пластине установилось, необходимая температура достигнута, пластина находится в ненапряженном состоянии, т.е. никелевая пластина подготовлена к расчету взаимодействия с газом.

4.2. Равновесие в системе молекул азота. Второй этап подготовки расчетов смешанной микросистемы заключается в исследовании области, заполненной молекулами азота. Рассматриваемая нами область имеет форму куба, по трем осям которого наложены периодические граничные условия. Минимальный представительный размер области расчета соответствует $\lambda \times \lambda \times \lambda$, где λ — длина свободного пробега молекулы азота.

Величина длины свободного пробега зависит от давления и температуры. В проведенных ниже экспериментах газ рассматривался при давлении $P = 101\,325$ Па. Длины пробегов и значения плотностей азота для соответствующих температур при этом давлении представлены в табл. 3.

Таблица 3
Параметры моделируемой системы

| T , K | ρ , кг/м ³ | λ , нм | N_g |
|---------|----------------------------|----------------|-------|
| 126.85 | 2.69123 | 41.320 | 60504 |
| 200.00 | 1.70692 | 65.148 | 38480 |
| 273.15 | 1.24980 | 88.976 | 28256 |
| 346.30 | 0.98580 | 112.803 | 22356 |

С целью оптимизации вычислений размер области для разных температур был выбран постоянным и соответствовал значению области для $T = 273.15$ К, где $\lambda = 88.976$ нм, т.е. все расчеты проводились для постоянного объема газа. Однако для последующей состыковки металлической и газовой микросистем нам было удобнее взять за базу объем $(1.143\lambda)^3$. Если измерять объем в единицах длины ребра элементарной ячейки никеля, находящегося при нормальных условиях (при температуре 273.15 К), то мы получим систему с размерами $288 \times 288 \times 288$, которую еще и удобно дробить по всем трем направлениям при распараллеливании расчетов.

При выполнении расчетов в объеме газа термостат был включен во всей области. Поток частиц газа считался нулевым. Заданное давление соответствовало разреженному состоянию газа. Релаксация системы разреженного газа требует большого времени. Поэтому расчеты проводились в течение 2 нс до установления режима, соответствующего выходу средних величин на стационар. После этого термостат отключался, а динамика системы рассчитывалась без дополнительных возмущений в течение еще 2 нс.

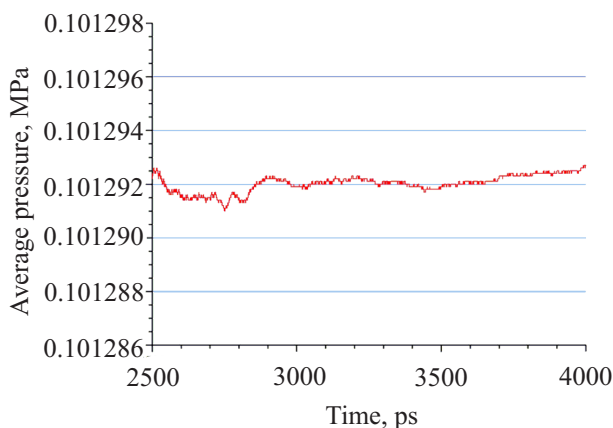


Рис. 3. Профиль усредненного по пространству и времени равновесного давления в системе молекул азота

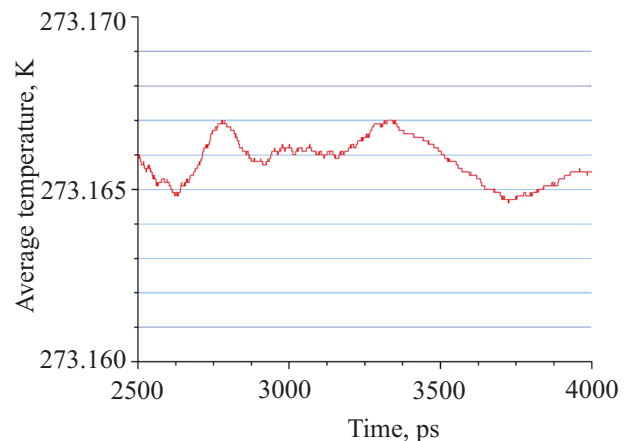


Рис. 4. Профиль усредненной по пространству и времени равновесной температуры в системе молекул азота

На рис. 3 и 4 представлены профили усредненных с момента равновесия по пространству и времени давления и температуры системы. Из рисунков видно, что температура и давление системы сохраняются после отключения термостата и соответствуют желаемым значениям с минимальными отклонениями.

Таким образом, равновесие в системе молекул азота достигнуто, значения основных макропараметров вышли на необходимый уровень, что означает окончание второго этапа и готовность системы газа к вычислению взаимодействий с металлом.

4.3. Равновесие в системе никель–азот. В данном пункте приводятся результаты расчетов термодинамического равновесия в смешанной микросистеме газ–металл. Геометрические параметры микросистемы в начальный момент времени были следующие.

Микросистема состоит из шести основных слоев: слой вакуума, слой никеля с термостатом, слой никеля без термостата, слой вакуума, слой азота без термостата, слой азота с термостатом (рис. 5). Размеры микросистемы: $288 \times 288 \times 4356$. Поперечные размеры микросистемы составляют 288 элементарных ячеек, или 101.70432 нм по каждому направлению. Общая высота микросистемы составляет 4356 элементарных ячеек, или 1538.27784 нм. Первый и второй вакуумный слой одинаковы по высоте, которая составляет 6 элементарных ячеек, или 2.11884 нм. Первый и второй металлические слои одинаковы по высоте и в сумме составляют 24 элементарных ячеек, или 8.47536 нм. Первый слой газа имеет высоту 2880 элементарных ячеек, или 1017.0432 нм. Второй слой газа

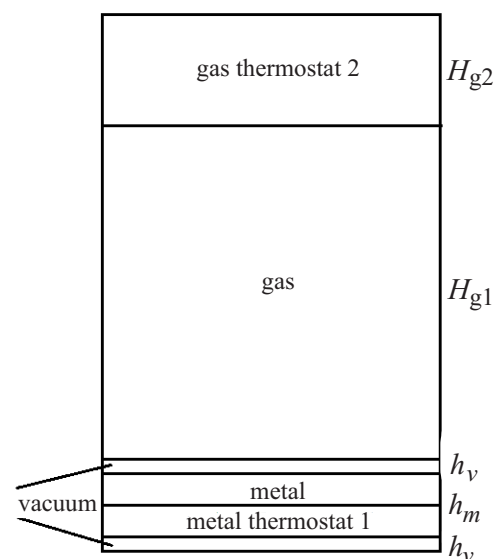


Рис. 5. Начальное состояние смешанной микросистемы

Второй слой газа

в 2 раза меньше и имеет высоту 1440 элементарных ячеек, или 508.5216 нм.

В начальный момент времени микросистемы металла и газа независимы. В них содержится соответственно 8 128 512 атомов никеля и 423 840 молекул азота. Со временем они начинают взаимодействовать друг с другом. При этом суммарная высота и ширина (и соответственно объем) и количество частиц в смешанной микросистеме в расчетах не изменяются. Это достигается тем, что с боков объема используются периодические граничные условия, снизу добавлен вакуумный слой, а сверху используются граничные условия типа зеркала.

Поскольку смешанная микросистема (СМС) изготовлена путем тиражирования соответствующих микросистем меньшего размера, находящихся в термодинамическом равновесии, то стартовое состояние СМС характеризуется средней температурой 273 К, средним давлением в 1 атмосферу в газовой части и средним вертикальным давлением -0.511 МПа в металле (что для металла практически равно нулю).

Для удобства последующего анализа смешанная микросистема была разделена на специальные слои по вертикали. Слои с номерами от 0 до 11 включительно имеют одинаковую высоту, равную 3 элементарным ячейкам, и захватывают в начальный момент подсистему вакуум–металл–вакуум. Слои с номерами от 12 до 71 включительно имеют одинаковую высоту, равную 72 элементарным ячейкам, и захватывают в начальный момент весь объем с газом.

Нами были проведены три варианта расчета. Первый вариант характеризовался тем, что обе температуры термостатов совпадали и были равны 273.15 К. Во втором варианте температура верхнего термостата равна 200 К. В третьем варианте температура верхнего термостата равна 346.3 К. Температура верхнего термостата устанавливалась мгновенно, т.е. уже на первом шаге расчета. Вычисления проводились достаточно долгое время вплоть до начала процесса адсорбции молекул азота на поверхности никеля.

Рассмотрим сначала первый вариант расчета. Поскольку температуры термостатов в этом случае совпадают, то основным процессом в данном случае является именно адсорбция. Она состоит из нескольких стадий, начальную из которых мы рассчитали достаточно подробно. Эта стадия имеет несколько характерных моментов. Первый из них связан с тем, что газ заполняет два вакуумных слоя и начинает взаимодействовать с поверхностью никеля. Длительность этого процесса составляет несколько пикосекунд. Далее начинается процесс адсорбции молекул азота и небольшое вертикальное сжатие металлического слоя. В итоге этот процесс должен привести к существенному разрежению газа в свободном пространстве и накоплению большей части газа вблизи поверхности металла. Время стабилизации процесса может быть очень велико (десятки и сотни наносекунд). Поэтому ниже мы приведем данные только для моментов времени 0 и 0.6 нс.

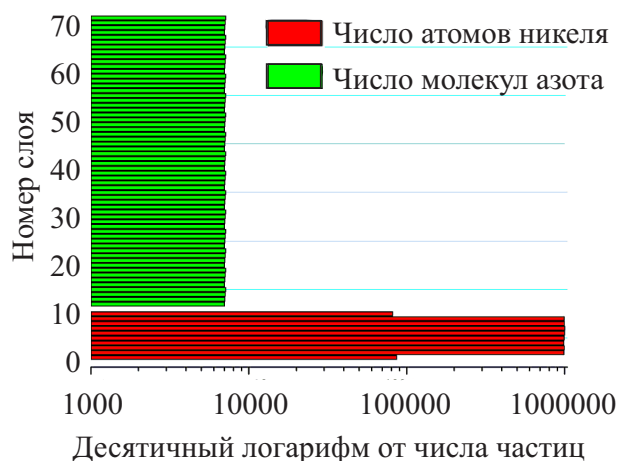


Рис. 6. Распределение частиц по слоям смешанной микросистемы в начальный момент для варианта 1

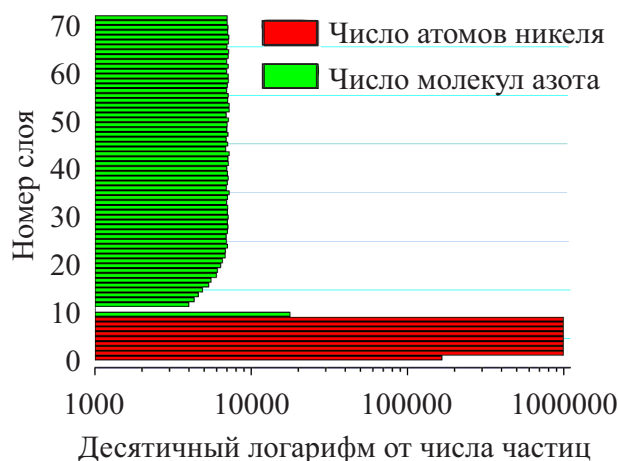


Рис. 7. Распределение частиц по слоям смешанной микросистемы в момент времени 0.6 нс для варианта 1

На рис. 6 и 7 приведены данные о заполнении слоев СМС в указанные выше моменты времени. Их сравнение подтверждает, что в начальный момент металлическая и газовая микросистемы были разделены вакуумным слоем, а в момент времени 0.6 нс они уже смешались. При этом никель сжался (теперь он занимает 7 слоев, а не 9) и произошло существенное накопление молекул азота вблизи поверхности никеля. Над адсорбированной частью газа образуется тонкий пограничный слой, который содержит малое число молекул и определяет условия прилипания–скольжения газа к стенке при возникновении бокового

течения. В случае сверхзвукового течения ожидается полный отрыв газа от стенки.

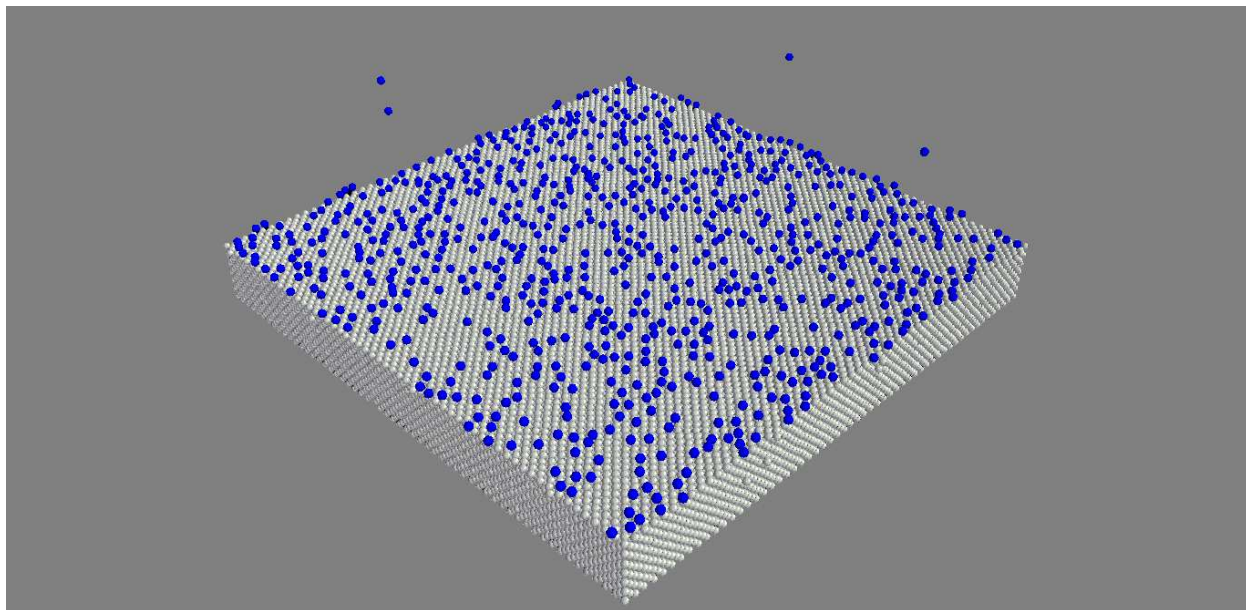


Рис. 8. Фрагмент распределения молекул азота (область 20×20 нм), адсорбированных на поверхности никелевой пластины, в момент времени 0.6 нс для варианта 1

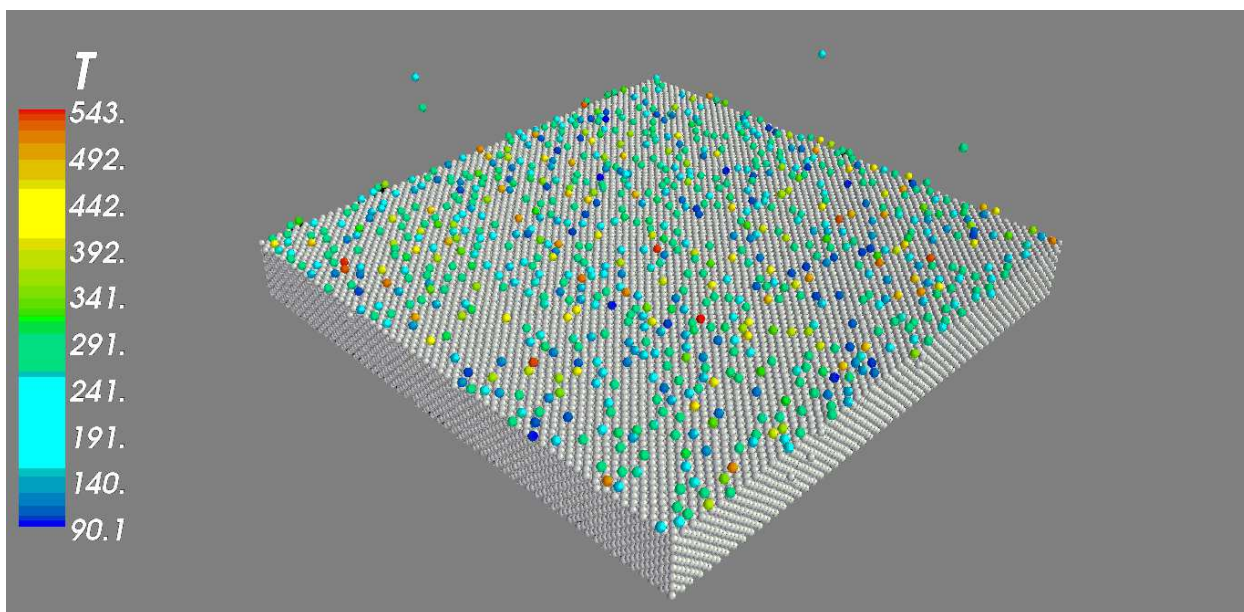


Рис. 9. Распределение температур молекул азота, адсорбированных на поверхности никелевой пластины, в момент времени 0.6 нс для варианта 1

Качественная картина адсорбции изображена на рис. 8 и 9. На рис. 8 показан фрагмент распределения молекул азота вблизи поверхности никеля. На рис. 9 показано это же распределение с учетом температуры отдельных молекул.

Рассмотрим теперь результаты расчетов в вариантах 2 и 3 в сравнении с вариантом 1. Здесь следует подчеркнуть, что в вариантах 2 и 3 адсорбция сопровождается соответственно остыванием и нагревом газа в объеме до температуры термостата и изменениями давления. В результате возникают характерные профили температуры и давления газа вдоль вертикальной оси. На рис. 10 и 11 показаны профили температуры и давления в газе для всех трех вариантов в момент времени 0.6 нс. На рисунках хорошо виден результат развития процесса адсорбции в нижней зоне газового столба — понижение температуры и давления газа во всех трех вариантах вследствие сильного разрежения. В верхней зоне газового столба

виден результат адаптации системы к температуре термостата. В средней части имеется небольшая квазиравновесная зона, связанная с начальным состоянием СМС. При больших временах она практически исчезает.

Дальнейшее установление термодинамического равновесия в рассматриваемой микросистеме связано с процессом образования стационарного профиля концентрации газа и множественным отражением волн температуры и давления от нижней и верхней границ расчетной области. В итоге должны сформироваться более гладкие распределения этих макропараметров вдоль вертикальной оси. Указанные процессы протекают достаточно медленно, и полный их расчет возможен при использовании более мощной суперкомпьютерной техники. Тем не менее, полученные нами данные уже позволяют перейти к расчетам состояний смешанных микросистем в условиях развитых течений газа и более сложной пространственной геометрии.

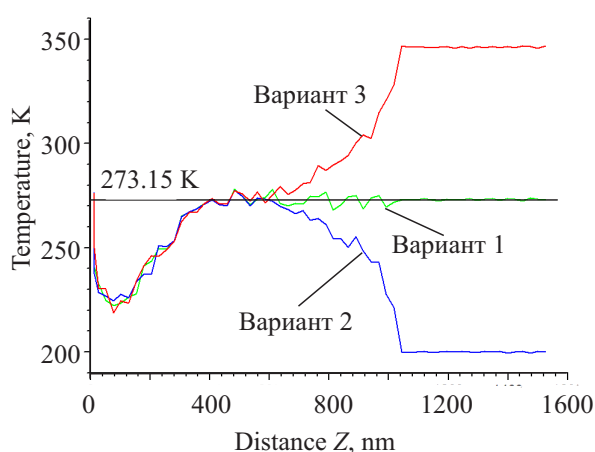


Рис. 10. Мгновенные профили температуры азота вдоль вертикальной оси СМС в момент времени 0.6 нс для вариантов 1–3

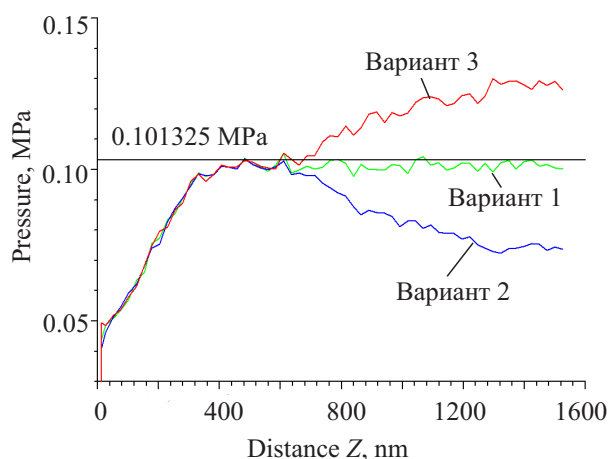


Рис. 11. Мгновенные профили давления азота вдоль вертикальной оси СМС в момент времени 0.6 нс для вариантов 1–3

5. Заключение. В работе рассмотрена проблема создания вычислительных основ и комплекса параллельных программ для проведения детального моделирования процессов релаксации газометаллических микро- и наносистем, составляющих главные элементы установок сверхзвукового холодного газодинамического напыления наночастиц на подложки. Для решения задач данного класса выбрана молекулярно-динамическая математическая модель, разработаны методы и алгоритмы ее численного анализа, создана расчетная параллельная программа. С помощью разработанной программы проведен цикл вычислительных экспериментов, посвященных анализу установления термодинамического равновесия в микросистемах, содержащих молекулы азота и атомы никеля при заданных температурах и давлении. Полученные в расчетах результаты продемонстрировали адекватность предложенного численного подхода современным теоретическим представлениям о моделируемом физическом процессе. Кроме того, эти результаты будут использоваться при моделировании процессов установления равновесия в системах газ–металл в условиях развитого бокового течения газа. Дальнейшее развитие результатов работы будет связано с численной реконструкцией реальных технологических элементов установок СХГН и расчетов устойчивых режимов напыления.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 13–01–12073 и 15–07–06082).

Статья рекомендована к публикации Программным комитетом Международной научной конференции “Параллельные вычислительные технологии 2015” (<http://agora.guru.ru/pavt2015/>).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Каплан И.Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. М.: Наука, 1982.
2. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987.
3. Haile J.M. Molecular dynamics simulations. Elementary methods. New-York: Wiley, 1992.
4. Frenkel D., Smit B. Understanding molecular simulation: from algorithm to applications. San Diego: Academic Press, 2002.
5. Allen M.P. Introduction to molecular dynamics simulation // Computational Soft Matter: From Synthetic Polymers to Proteins. Lecture Notes, NIC Series. Vol. 23. Jülich: John von Neumann Institute for Computing, 2004. 1–28.

6. *Sutmann G.* Classical molecular dynamics // *Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms. Lecture Notes, NIC Series. Vol. 10.* Jülich: John von Neumann Institute for Computing, 2002. 211–254.
7. *Ранапорт Д.К.* Искусство молекулярной динамики. М.-Ижевск: НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, Ижевский институт компьютерных исследований, 2012.
8. *Норман Г.Э., Стегайлов В.В.* Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // *Математическое моделирование.* 2012. **24**, № 6. 3–44.
9. *Winkler R.G., Morawitz H., Yoon D.Y.* Novel molecular dynamics simulations at constant pressure // *Mol. Phys.* 1992. **75**, N 3. 669–688.
10. *Schlacken H.* Molecular-dynamics simulation of statistical-mechanical systems. *Acta Polym.* 1988. **39**, N 3. 151–152.
11. *Алхимов А.П., Клишков С.В., Косарев В.Ф., Фомин В.М.* Холодное газодинамическое напыление. Теория и практика. М.: Физматлит, 2010.
12. *Resnick D.* Nanoimprint lithography // *Nanolithography. The Art of Fabricating Nanoelectronic and Nanophotonic Devices and Systems.* Cambridge: Woodhead Publishing Limited, 2014.
13. *Подрыга В.О.* Моделирование процесса установления термодинамического равновесия нагретого металла // *Математическое моделирование.* 2011. **23**, № 9. 105–119.
14. *Verlet L.* Computer “experiments” on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // *Phys. Rev.* 1967. **159**, N 5. 98–103.
15. *Lennard-Jones J.E.* Cohesion // *Proceedings of the Physical Society.* 1931. **43**, N 5. 461–482.
16. *Фокин Л.Р., Калашников А.Н.* Транспортные свойства смеси разреженных газов N₂-H₂ в базе данных ЭПИ-ДИФ // *Теплофизика высоких температур.* 2009. **47**, № 5. 675–687.
17. *Daw M.S., Baskes M.I.* Embedded-atom method: derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // *Physical Review B.* 1984. **29**, N 12. 6443–6453.
18. *Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G.* Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers // *Phys. Rev. B.* 2004. **69**, N 14. 144113-1–144113-10.
19. *Подрыга В.О., Поляков С.В.* Молекулярно-динамическое моделирование процесса установления термодинамического равновесия нагретого никеля. Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша. № 41. М., 2014.
20. *Лагарьков А.Н., Сергеев В.М.* Метод молекулярной динамики в статистической физике // *Успехи физических наук.* 1978. **125**, вып. 3. 409–448.
21. *Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., van Gunsteren W.F., et al.* Molecular dynamics with coupling to an external bath // *J. Chem. Phys.* 1984. **81**, N 8. 3684–3690.
22. *Китайгородский А.И.* Молекулярные кристаллы. М.: Наука, 1971.
23. *Киттель Ч.* Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978.
24. *Поляков С.В., Карамзин Ю.Н., Косолапов О.А., Кудряшова Т.А., Суков С.А.* Гибридная суперкомпьютерная платформа и разработка приложений для решения задач механики сплошной среды сеточными методами // *Известия ЮФУ. Технические науки.* 2012. **6**. 105–115.
25. *Воеводин В.В., Воеводин Вл.В.* Параллельные вычисления. СПб: БХВ-Петербург, 2004.
26. Официальная документация и учебные пособия по MPI (<http://www.mcs.anl.gov/research/projects/mpi/>).
27. Официальная документация и учебные пособия по OpenMP (<http://www.openmp.org>, <http://www.llnl.gov/computing/tutorials/openMP>).
28. CUDA Toolkit Documentation (<http://docs.nvidia.com/cuda/index.html>).

Поступила в редакцию
09.02.2015

Supercomputer Molecular Modeling of Thermodynamic Equilibrium in Gas–Metal Microsystems

V. O. Podryga¹, S. V. Polyakov², and D. V. Puzyrkov³

¹ *Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences; Miusskaya ploshchad' 4, Moscow, 125047, Russia; Ph.D., Scientist, e-mail: pvictoria@list.ru*

² *Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences; Miusskaya ploshchad' 4, Moscow, 125047, Russia; Dr. Sci., Senior Scientist, Head of Sector, e-mail: polyakov@imamod.ru*

³ *Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences; Miusskaya ploshchad' 4, Moscow, 125047, Russia; Graduate Student, e-mail: dpuzyrkov@gmail.com*

Received February 9, 2015

Abstract: This paper is devoted to the supercomputer modeling of thermodynamic equilibrium in microsystems containing different substances in various aggregate states. As an example, a nitrogen–nickel system is

considered. This choice is due to the fact that such a microsystem is the basis of many technical applications, including the devices of supersonic cold gas-dynamic sputtering using nanoparticles on the surfaces of perspective carbonaceous materials. At the first stage of studies, the equilibrium state of a nitrogen–nickel microsystems is of interest. The molecular dynamic approach is used to model the thermodynamic equilibrium in this microsystem. The chosen numerical algorithm of its implementation is based on the Verlet finite-difference scheme. In order to increase the computational speedup, a parallel algorithm is proposed; its implementation is performed using the MPI and OpenMP technologies. The developed parallel solver is employed to study the establishment of thermodynamic equilibrium in the pure components (nitrogen and nickel) at several temperatures, including room temperature, and in the nitrogen–nickel microsystem. In the numerical experiments, the optimum parameters of the calculation procedure (including the efficiency of parallelization using processors of different architecture) and the physical parameters of the modeled process are found.

Keywords: molecular dynamics, parallel computing, supercomputing simulation, nitrogen and nickel surface interaction, thermodynamic equilibrium.

References

1. I. G. Kaplan, *Theory of Molecular Interactions* (Nauka, Moscow, 1982; Amsterdam, Elsevier, 1986).
2. R. W. Hockney and J. W. Eastwood, *Computer Simulation Using Particles* (McGraw-Hill, New York, 1981; Mir, Moscow, 1987).
3. J. M. Haile, *Molecular Dynamics Simulations. Elementary Methods* (Wiley, New-York, 1992).
4. D. Frenkel and B. Smit, *Understanding Molecular Simulation: From Algorithm to Applications* (Academic, San Diego, 2002).
5. M. P. Allen, “Introduction to Molecular Dynamics Simulation,” in *Computational Soft Matter: From Synthetic Polymers to Proteins, Lecture Notes, NIC Series* (John von Neumann Inst. for Computing, Jülich, 2004), Vol. 23, pp. 1–28.
6. G. Sutmann, “Classical Molecular Dynamics,” in *Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms, Lecture Notes, NIC Series* (John von Neumann Inst. for Computing, Jülich, 2002), Vol. 10, pp. 211–254.
7. D. C. Rapaport, *The Art of Molecular Dynamics Simulation* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2004; Inst. Komp’yut. Issled., Izhevsk, 2012).
8. G. E. Norman and V. V. Stegailov, “Stochastic Theory of the Classical Molecular Dynamics Method,” *Mat. Model.* **24** (6), 3–44 (2012) [*Math. Models Comput. Simul.* **5** (4), 305–333 (2013)].
9. R. G. Winkler, H. Morawitz, and D. Y. Yoon, “Novel Molecular Dynamics Simulations at Constant Pressure,” *Mol. Phys.* **75** (3), 669–688 (1992).
10. H. Schlacken, “Molecular-Dynamics Simulation of Statistical-Mechanical Systems,” *Acta Polym.* **39** (3), 151–152 (1988).
11. A. P. Alkhimov, S. V. Klinkov, V. F. Kosarev, and V. M. Fomin, *Cold Gas Dynamic Spraying: Theory and Practice* (Fizmatlit, Moscow, 2010; Cambridge Int. Sci. Pub., Cambridge, 2011).
12. D. Resnick, “Nanoimprint Lithography,” in *Nanolithography. The Art of Fabricating Nanoelectronic and Nanophotonic Devices and Systems* (Woodhead Publ., Cambridge, 2014), pp. 315–347.
13. V. O. Podryga, “Molecular Dynamics Method for Heated Metal’s Simulation of Thermodynamic Equilibrium,” *Mat. Model.* **23** (9), 105–119 (2011).
14. L. Verlet, “Computer “Experiments” on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules,” *Phys. Rev.* **159** (5), 98–103 (1967).
15. J. E. Lennard-Jones, “Cohesion,” *Proc. Phys. Soc.* **43** (5), 461–482 (1931).
16. L. R. Fokin and A. N. Kalashnikov, “The Transport Properties of an N₂-H₂ Mixture of Rarefied Gases in the EPIDIF Database,” *Teplofiz. Vys. Temp.* **47** (5), 675–687 (2009) [*High Temp.* **47** (5), 643–655 (2009)].
17. M. S. Daw and M. I. Baskes, “Embedded-Atom Method: Derivation and Application to Impurities, Surfaces, and Other Defects in Metals,” *Phys. Rev. B* **29** (12), 6443–6453 (1984).
18. X. W. Zhou, R. A. Johnson, and H. N. G. Wadley, “Misfit-Energy-Increasing Dislocations in Vapor-Deposited CoFe/NiFe Multilayers,” *Phys. Rev. B* **69** (14), 144113-1–144113-10 (2004).
19. V. O. Podryga and S. V. Polyakov, *Molecular Dynamic Simulation of Thermodynamic Equilibrium Problem for Heated Nickel*, Preprint No. 41 (Keldysh Inst. Appl. Math., Moscow, 2014).
20. A. N. Lagarkov and V. M. Sergeev, “Molecular Dynamics Method in Statistical Physics,” *Usp. Fiz. Nauk* **125** (3), 409–448 (1978) [*Sov. Phys. Usp.* **21** (7), 566–588 (1978)].
21. H. J. C. Berendsen, J. P. M. Postma, W. F. van Gunsteren, et al., “Molecular Dynamics with Coupling to an External Bath,” *J. Chem. Phys.* **81** (8), 3684–3690 (1984).

22. A. I. Kitaigorodsky, *Molecular Crystals and Molecules* (Nauka, Moscow, 1971; Academic, New York, 1973).
23. C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (Wiley, New York, 1976; Nauka, Moscow, 1978).
24. S. V. Polyakov, Yu. N. Karamzin, O. A. Kosolapov, et al., “Hybrid Supercomputer Platform and Application Programming for the Solution of Continuous Mechanics Problems by Grid Methods,” *Izv. Southern Federal Univ., Tekh. Nauki*, No. 6, 105–115 (2012).
25. V. V. Voevodin and Vl. V. Voevodin, *Parallel Computing* (BHV-Petersburg, St. Petersburg, 2002) [in Russian].
26. The Message Passing Interface (MPI) standard. <http://www.mcs.anl.gov/research/projects/mpi>. Cited February 5, 2015.
27. The OpenMP API specification for parallel programming. Tutorials. <http://www.openmp.org>, <http://www.llnl.gov/computing/tutorials/openMP>. Cited February 5, 2015.
28. CUDA Toolkit Documentation. <http://docs.nvidia.com/cuda/index.html>. Cited February 5, 2015.