

УДК 519.63

doi 10.26089/NumMet.v17r214

ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ МНОГОМАСШТАБНОГО ПОДХОДА ДЛЯ РАСЧЕТА МИКРОТЕЧЕНИЙ ГАЗА

В. О. Подрыга¹, С. В. Поляков²

Статья посвящена параллельной реализации многомасштабного подхода для расчета течений газов в микроканалах сложных технических систем. Многомасштабный подход сочетает решения уравнений квазигазодинамики (КГД) и молекулярной динамики (МД). Представлена параллельная реализация подхода, основанная на методах расщепления по физическим процессам и разделению областей. Реализация ориентирована на использование вычислительных систем с центральной и гибридной архитектурами. Разработанные параллельные алгоритмы обладают хорошей масштабируемостью. Полученные результаты подтвердили эффективность разработанного подхода. С его помощью методами МД были получены основные коэффициенты зависимости для КГД-системы, произведен расчет трехмерного течения.

Ключевые слова: газовая динамика, молекулярная динамика, параллельные алгоритмы и программы, микроканалы, многомасштабные вычисления, суперкомпьютерное моделирование.

1. Введение. Настоящая статья посвящена описанию и параллельной программной реализации многомасштабного подхода, предназначенного для моделирования нелинейных процессов транспортировки газовой смеси через микроканал технической системы. Физика функционирования подобных систем описывается обычно сложной иерархией математических моделей, спускающейся вплоть до атомарного уровня. В результате такого объединения появляется возможность точного предсказания свойств моделируемых объектов и процессов. Однако при этом существенно повышается уровень вычислительной сложности конкретных задач, что становится преодолимым лишь при использовании мощных кластеров и суперкомпьютеров.

В качестве примера рассматривается проблема сверхзвукового холодного газодинамического напыления (СХГН) наночастиц на подложку [1, 2]. Данная проблема актуальна для многих направлений нанотехнологии, в том числе для производства новых материалов в электронике и медицине. Основной технологический процесс в установках СХГН называется наноимпринтингом и состоит в разгоне сверхзвуковым потоком наночастиц и доставке их к разогретой до нужной температуры подложке, где происходит приклеивание. При реализации наноимпринтинга [2] используется матрица микросопел, позволяющая получить на подложке “рисунок” нужной структуры. Среди различных аспектов проблемы выделим транспортную часть. Она связана с расчетами параметров течения газа во всех частях установки СХГН. Целью такого расчета является определение оптимального режима течения.

Особенности указанной выше транспортной задачи связаны с конструкцией установки напыления. В упрощенном виде установка СХГН состоит из дюаровского сосуда объемом до нескольких десятков литров, в нижней части которого установлен подвижный рабочий стол с набором сменных подложек. Над столом располагается подающая газ и наночастицы подсистема, которая прикреплена к верхней стенке резервуара. Свободное пространство в резервуаре заполнено либо техническим вакуумом, либо сильно разреженным газом. Подсистема подачи наночастиц состоит из баллонов с чистой газовой смесью и газовой смесью с наночастицами, трубопроводов от баллонов до резервуара, матрицы микросопел и микроканалов, по которым наночастицы подаются в ближнюю зону подложки. При этом чистая газовая смесь используется для управления процессом, а газовая смесь с включением наночастиц используется для придания последним стартового импульса.

С математической точки зрения транспортная задача состоит в расчете движения газа и наночастиц во всех частях установки. При этом необходимо учесть, что моделируемая среда вблизи твердых поверхностей не является сплошной, а уравнение состояния газовой смеси с включением наночастиц неизвестно. В итоге моделирование транспортной задачи в полном объеме с учетом реальной геометрии установки

¹ Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН (ИПМ РАН), Миусская пл., 4, 125047, Москва; ст. 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

СХГН и всех протекающих в ней разномасштабных по времени и пространству физических процессов требует пока слишком больших вычислительных затрат.

В рамках данной работы предлагается комбинированный подход, сочетающий расчеты течения газовой среды в конкретных микроканалах и расчеты взаимодействия струй с подложкой, а также перемещения наночастиц в потоке газа и взаимодействие их с подложкой при попадании к месту напыления. При этом моделирование проводится на двух масштабных уровнях — основном, имеющем характерные размеры от нескольких десятков микрон до десятков миллиметров и сантиметров, и дополнительном, имеющем характерные размеры порядка микрона и менее. На основном уровне (в макромасштабах) рассчитываются течения газа и наночастиц во всех частях установки, а также учитываются внешние факторы, связанные с управлением процессом напыления. На дополнительном уровне (в микромасштабах) рассчитываются следующие взаимодействия:

- 1) молекул газа между собой (формирующие уравнение состояния смеси и реализующие перемешивание компонент);
- 2) молекул газа и атомов твердых поверхностей (описывающие явления в погранслоях);
- 3) молекул газа и атомов наночастиц (описывающие образование погранслоев на поверхности наночастиц);
- 4) молекул газа и атомов подложки (учитывающие процессы теплообмена с подложкой);
- 5) атомов наночастиц с атомами подложки (процессы отталкивания, прилипания и внедрения наночастицы в подложку).

Безусловно, указанные выше физические процессы являются сложными, многостадийными и многофакторными, поэтому на данном этапе исследований используется упрощенное описание общей проблемы. Оно предполагает расщепление по физическим процессам. Фактически, основной цикл моделирования представляет собой чередование во времени расчетов на макро- и микроуровне. В представляемом варианте исследования рассматривается расчет течения азот-водородной смеси после выхода из сопла в полуоткрытый микроканал и далее в свободное пространство, где находится подложка (рис. 1).

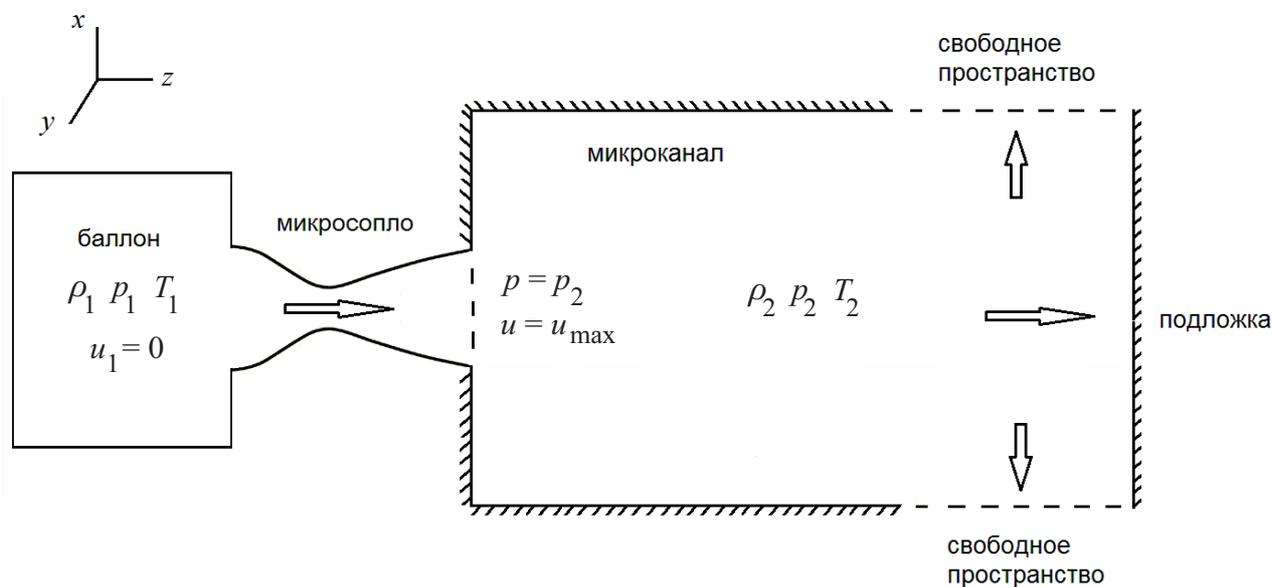


Рис. 1. Геометрия модельной задачи, для удобства представленная в виде двумерного среза. Из баллона (слева) через микросопло подается в микроканал газовая смесь, используемая для управления траекториями наночастиц, которые доставляются в нужные места подложки (справа)

Некоторая часть исследования была проделана в предыдущих работах [3–11]. В частности, в [3–8] развивались методы расчета термодинамического равновесия в системах металл–металл, газ–газ и газ–металл. В работах [9–12] предложено и частично апробировано объединение микро- и макромоделей газовой среды в единый объект исследования.

Основной задачей в данном исследовании была разработка полного трехмерного многомасштабного численного метода и параллельного алгоритма для его реализации, пригодного для расчета течения га-

звой смеси в микроканале и вблизи подложки с учетом граничных эффектов, разрешаемых методами молекулярной динамики [13–18]. Описание деталей модели и алгоритма дается в последующих разделах статьи.

2. Теоретическая часть.

2.1. Макроскопическая модель. Макроскопическая модель течения во всех частях установки основывается на квазигазодинамических (КГД) уравнениях [19]. Эти уравнения отличаются от системы уравнений Навье–Стокса дополнительными малыми добавками, позволяющими естественным образом регуляризовать последующие сеточные вычисления. Выбор КГД-уравнений связан с двумя факторами. Во-первых, КГД-уравнения хорошо зарекомендовали себя при расчетах сверхзвуковых течений сильно разреженных вязких и теплопроводных газов. Во-вторых, они хорошо подходят к расчетам течений в микросистемах, так как естественным параметром обезразмеривания в них является средняя длина свободного пробега, при нормальных условиях составляющая для азота порядка 100 нм. В-третьих, КГД-система уравнений применима в широком диапазоне чисел Кнудсена, что дает возможность моделировать сложную систему с микроканалами разных диаметров, используя одну и ту же математическую модель. В случае смеси газов система КГД-уравнений записывается для каждого газа отдельно и имеет одинаковый вид [19–21]. Запишем эти уравнения в случае бинарной смеси в инвариантном относительно системы координат виде вместе с уравнениями связей и состояния:

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{W}_l^{(\rho)} = 0, \quad (1)$$

$$\mathbf{W}_l^{(\rho)} = \rho_l \mathbf{u}_l - \rho_l \mathbf{w}_l, \quad \mathbf{w}_l = \tau \left[(\mathbf{u}_l, \nabla) \mathbf{u}_l + \frac{1}{\rho_l} \nabla p_l \right], \quad l = a, b;$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l u_{l,k} + \operatorname{div} \mathbf{W}_l^{(\rho u_k)} = S_l^{(\rho u_k)}, \quad (2)$$

$$\mathbf{W}_l^{(\rho u_k)} = \rho_l \mathbf{u}_l u_{l,k} + \mathbf{e}_k \left(p_l + \frac{2}{3} \mu_l \operatorname{div} \mathbf{u}_l \right) - \mu_l (\nabla u_{l,k} + (\nabla, \mathbf{e}_k) \mathbf{u}_l) - (\rho_l w_{l,k} \mathbf{u}_l + \rho_l \mathbf{w}_l u_{l,k}),$$

$$S_l^{(\rho u_k)} = \nu_{ll'} \rho_l (u_{l',k}^* - u_{l,k}), \quad l = a, b, \quad l' = b, a, \quad k = x, y, z;$$

$$\frac{\partial}{\partial t} E_l + \operatorname{div} \mathbf{W}_l^{(E)} = S_l^{(E)}, \quad (3)$$

$$\mathbf{W}_l^{(E)} = (\rho_l \mathbf{u}_l - \rho_l \mathbf{w}_l) H_l - \chi_l \nabla T_l + \left(\frac{2}{3} \mu_l \operatorname{div} \mathbf{u}_l \right) \mathbf{u}_l - \sum_{k=x,y,z} \mu_l (\nabla u_{l,k} + (\nabla, \mathbf{e}_k) \mathbf{u}_l) - (\rho_l \mathbf{w}_l, \mathbf{u}_l) \mathbf{u}_l,$$

$$S_l^{(E)} = \nu_{ll'} \rho_l (E_{l'}^* - E_l), \quad l = a, b, \quad l' = b, a,$$

$$E_l = \frac{1}{2} \rho_l |\mathbf{u}_l|^2 + \rho_l \varepsilon_l, \quad H_l = \frac{E_l + p_l}{\rho_l}, \quad p_l = Z_l \rho_l R_l T_l, \quad \varepsilon_l = c_{V,l} T_l, \quad l = a, b.$$

Здесь предполагается, что смесь состоит из газов a и b с числовыми плотностями (концентрациями) n_a и n_b и массовыми плотностями $\rho_a = m_a n_a$ и $\rho_b = m_b n_b$, где m_a и m_b — массы молекул газов a и b . Каждый газ характеризуется своей температурой T_l и макроскопической скоростью \mathbf{u}_l . Другие параметры компонентов смеси: p_l — парциальные давления, E_l — плотности полной энергии, ε_l — внутренние энергии, H_l — полные энтальпии, $\mu_l = \mu_l(T_l)$ и $\chi_l = \chi_l(T_l)$ — коэффициенты вязкости и теплопроводности, $Z_l = Z_l(T_l)$ — коэффициенты сжимаемости, $c_{V,l} = c_{V,l}(T_l)$ — удельные теплоемкости при постоянном объеме, $R_l = k_B/m_l$ — газовые постоянные (k_B — постоянная Больцмана). Векторы $\mathbf{W}_l^{(\rho)}$, $\mathbf{W}_l^{(\rho u_k)}$, $\mathbf{W}_l^{(E)}$ с точностью до знака совпадают соответственно с потоком плотности, потоком соответствующих компонент плотности импульса и потоком плотности энергии, $\rho_l \mathbf{w}_l$ — векторы КГД-поправки к потоку плотности, пропорциональные максвелловскому времени релаксации τ для смеси газов, \mathbf{e}_k — единичные орты.

Обменные члены $S_l^{(\rho u_k)}$ и $S_l^{(E)}$ учитывают перераспределения импульса и энергии между компонентами смеси. Они содержат компоненты скоростей \mathbf{u}_l^* и энергии E_l^* , вычисляемые на молекулярном уровне (см. раздел 2.2), а также $\nu_{ll'}$ — частоты взаимных столкновений между молекулами сорта l с молекулами сорта l' , которые вычисляются через ν_l — частоты взаимных столкновений между молекулами одного сорта:

$$\nu_{ab} = \nu_a \left(\frac{d_{ab}}{d_a} \right)^2 \sqrt{\frac{m_a + m_b}{2m_b}} \frac{n_b}{n_a}, \quad \nu_{ba} = \nu_{ab} \frac{n_a}{n_b} = \nu_b \left(\frac{d_{ab}}{d_b} \right)^2 \sqrt{\frac{m_a + m_b}{2m_a}} \frac{n_a}{n_b},$$

$$d_{ab} = \frac{d_a + d_b}{2}, \quad \nu_l = \frac{p_l}{\mu_l} \Omega_l, \quad l = a, b,$$

где d_l — диаметры молекул сорта l и Ω_l — безразмерные параметры, характеризующие процесс столкновения молекул сорта l [22].

Коэффициенты вязкости μ_l , теплопроводности χ_l и сжимаемости Z_l , а также удельные теплоемкости $c_{V,l}$ и средние длины свободного пробега λ_l для компонентов смеси определяются либо из базы данных молекулярных расчетов, либо с помощью прямых МД-вычислений (см. раздел 2.2). Локальные скорости звука для компонентов смеси рассчитываются по формулам

$$a_l = \sqrt{\gamma_l Z_l R_l T_l}, \quad \gamma_l = 1 + \frac{R_l}{c_{V,l}}, \quad l = a, b,$$

где $\gamma_l = \gamma_l(T_l)$ — показатели адиабат.

Параметры газовой смеси определяются следующим образом:

$$\rho = \rho_a + \rho_b, \quad \mathbf{u} = \frac{\rho_a \mathbf{u}_a + \rho_b \mathbf{u}_b}{\rho}, \quad p = p_a + p_b, \quad E = E_a + E_b, \quad n = n_a + n_b,$$

$$T = \frac{n_a Z_a T_a + n_b Z_b T_b}{nZ}, \quad m = \frac{m_a n_a + m_b n_b}{n}, \quad Z = Z_a + Z_b, \quad R = \frac{p}{\rho Z T} = \frac{k_B}{m}, \quad \tau = \frac{\mu}{p}.$$

Для определения вязкости смеси используем формулу Будденберга–Уилки [23, 24]:

$$\mu = \mu_a \left(1 + G_{ab} \frac{\rho_b}{\rho_a} \frac{M_a}{M_b}\right)^{-1} + \mu_b \left(1 + G_{ba} \frac{\rho_a}{\rho_b} \frac{M_b}{M_a}\right)^{-1}, \quad G_{ab} = \left(1 + \sqrt{\frac{\mu_a}{\mu_b} \sqrt{\frac{M_b}{M_a}}}\right)^2 \left(2\sqrt{2\left(1 + \frac{M_a}{M_b}\right)}\right)^{-1}.$$

Здесь M_a и M_b — молярные массы газов a и b . Величина G_{ba} вычисляется аналогично путем циклической замены индексов.

Средняя локальная скорость звука и длина свободного пробега, числа Маха и Рейнольдса для смеси:

$$a = \frac{m_a a_a + m_b a_b}{m_a + m_b}, \quad \lambda = \frac{m_a \lambda_a + m_b \lambda_b}{m_a + m_b}, \quad \text{Ma} = \frac{|\mathbf{u}|}{a}, \quad \text{Re} = \frac{\rho |\mathbf{u}| \lambda}{\mu}.$$

Система уравнений (1)–(3) замыкается начальными и граничными условиями. Начальные условия соответствуют равновесному состоянию газовой среды в отсутствие взаимодействия с внешними факторами. Для чистоты вычислительного эксперимента был рассмотрен случай покоящейся газовой среды во всех точках расчетной области:

$$\rho_l = \rho_{l,0}, \quad \mathbf{u}_l = 0, \quad p_l = p_{l,0}, \quad T_l = T_0, \quad l = a, b. \quad (4)$$

Здесь $\rho_{l,0}$, $p_{l,0}$ — начальные плотности и давления компонентов газа и T_0 — начальная температура.

Область сопла и баллон со смесью газов не входили в расчет. Полагалось, что в начальный момент времени открывается перегородка между соплом и областью микроканала и газ из области высокого давления начинает поступать в область низкого давления. Сопло считалось идеальным адиабатическим соплом Лавалья [25]. Параметры газовой среды на выходе из сопла (т.е. на входе в среду) рассчитывались в соответствии с известными формулами

$$(\mathbf{u}_l, \mathbf{n}) = u_{\text{in},l}, \quad \rho_l = \rho_{\text{in},l}, \quad T_l = T_{\text{in},l}, \quad l = a, b;$$

$$p_{\text{in},l} \left(\frac{m_l Z_l(T_{\text{in},l}) R_l T_{\text{in},l}}{p_{\text{in},l}}\right)^{\gamma_l(T_{\text{in},l})} = p_{\text{bal},l} \left(\frac{m_l Z_l(T_{\text{bal},l}) R_l T_{\text{bal},l}}{p_{\text{bal},l}}\right)^{\gamma_l(T_{\text{bal},l})},$$

$$u_{\text{in},l} = \sqrt{2(H_{\text{bal},l} - H_{\text{in},l})}, \quad \rho_{\text{in},l} = \frac{p_{\text{in},l}}{Z_l(T_{\text{in},l}) R_l T_{\text{in},l}},$$

$$H_{\text{bal},l} = (c_{\nu,l}(T_{\text{bal}}) + Z_l(T_{\text{bal}}) R_l) T_{\text{bal}}, \quad H_{\text{in},l} = (c_{\nu,l}(T_{\text{in}}) + Z_l(T_{\text{in}}) R_l) T_{\text{in}}.$$

Здесь параметры с индексом bal соответствуют значениям параметров в баллоне, параметры с индексом in — соответствуют параметрам на входе в среду.

На стенках микроканала и на подложке ставятся следующие граничные условия:

$$\left(\mathbf{W}_l^{(\rho)}, \mathbf{n}\right) = -\alpha_l \left(\rho_l - \rho_l^{(w)}\right), \quad \left(\mathbf{W}_l^{(\rho u_k)}, \mathbf{n}\right) = -\beta_{l,k} \left(\rho_l u_{l,k} - \rho_l^{(w)} u_{l,k}^{(w)}\right), \quad k = x, y, z,$$

$$\left(\mathbf{W}_l^{(E)}, \mathbf{n}\right) = -\eta_l \left(E_l - E_l^{(w)}\right), \quad l = a, b.$$

Здесь подразумевается, что в общем случае молекулы газа могут проникать в металлическую стенку либо отражаться от нее под некоторым углом. При этом взаимодействие со стенкой может быть упругим или неупругим, термическим или изотермическим. В итоге, удобно вблизи стенки ввести специальную микросистему, состоящую из молекул газа и атомов металла. В этой микросистеме газовые компоненты имеют плотности $\rho_l^{(w)}$, плотности импульсов $\rho_l^{(w)} \mathbf{u}_l^{(w)}$ и плотности полной энергии $E_l^{(w)}$. Тогда граничные условия на стенке можно записать в виде условий третьего рода, описывающих обмен массой, компонентами импульса и энергией между газовой смесью в потоке и вблизи стенок. При этом коэффициенты α_l , $\beta_{l,k}$ и η_l , связанные с известными в литературе коэффициентами аккомодации [26, 27], априори не известны, но могут быть определены либо из таблиц физических величин (что возможно лишь для ограниченного диапазона температур и давлений), либо рассчитаны методами молекулярной динамики. Второй подход представляется наиболее оправданным, поскольку он является универсальным и помогает согласовывать процессы взаимодействия на микро- и макроуровнях.

На свободных поверхностях расчетной области задаются так называемые “мягкие” граничные условия [19]:

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial(\rho_l \mathbf{u}_l)}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial p_l}{\partial n} = 0, \quad l = a, b.$$

2.2. Микроскопическая модель. Микроскопическая модель может использоваться с различными целями.

Во-первых, с ее помощью можно уточнять уравнение состояния (как по давлению, так и по энергии) и кинетические коэффициенты (вязкости, теплопроводности, диффузии и др.) в уравнениях квазигазодинамики.

Во-вторых, микроскопическая модель может использоваться для расчета обменных слагаемых в уравнениях для импульса и энергии.

В-третьих, микроскопическая модель особенно востребована при расчетах пристеночных взаимодействий молекул газов с атомами стенки. В данной работе рассматриваются все перечисленные выше ситуации.

В случае, когда на макроуровне рассчитывается течение бинарной газовой смеси, не содержащей наночастицы, на микроуровне тоже можно ограничиться рассмотрением молекул двух сортов a и b . Однако это справедливо лишь вдали от стенок микроканала. Вблизи стенок следует добавить в рассмотрение частицы сорта c (атомы или молекулы), составляющие материал стенок и потенциально способные отрываться от поверхности микроканала. При наличии в смеси наночастиц (как малых, так и больших) следует добавить в рассмотрение частицы сортов d , e и т.д. в зависимости от состава наночастиц.

В данной работе остановимся на случае чистой бинарной смеси и одного сорта металлических частиц. Тогда на микроуровне система газ–металл представляется совокупностью частиц, поведение которых описывается уравнениями Ньютона [13–18]

$$m_{l,i} \frac{d\mathbf{v}_{l,i}}{dt} = \mathbf{F}_{l,i}, \quad \mathbf{v}_{l,i} = \frac{d\mathbf{r}_{l,i}}{dt}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad l = a, b, c, \quad (5)$$

где i — номер частицы, $l = a, b, c$ — тип частиц (a — молекулы первого газа, b — молекулы второго газа, c — атомы металла), N_l — полное число частиц типа l , $m_{l,i}$ — масса частицы типа l с номером i , $\mathbf{r}_{l,i} = (r_{x,l,i}, r_{y,l,i}, r_{z,l,i})$ и $\mathbf{v}_{l,i} = (v_{x,l,i}, v_{y,l,i}, v_{z,l,i})$ — радиус-вектор и вектор скорости i -й частицы типа l , $\mathbf{F}_{l,i} = (F_{x,l,i}, F_{y,l,i}, F_{z,l,i})$ — суммарная сила, действующая на данную частицу.

Силы представляют собой сумму компоненты взаимодействия i -й частицы, зависящей от потенциальной энергии, с окружающими частицами и компоненты, отвечающей за внешнее воздействие:

$$\mathbf{F}_{l,i} = -\frac{\partial U(\mathbf{r}_{l,1}, \dots, \mathbf{r}_{l,N_l})}{\partial \mathbf{r}_{l,i}} + \mathbf{F}_{l,i}^{\text{ext}}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad l = a, b, c, \quad (6)$$

где U — суммарная потенциальная энергия и $\mathbf{F}_{l,i}^{\text{ext}}$ — 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 все вариан-

ты взаимодействия газ–газ, металл–металл и газ–металл:

$$\begin{aligned}
 U &= U_{aa} + U_{bb} + U_{cc} + U_{ab} + U_{ac} + U_{bc}, \\
 U_{aa} &= \sum_{i=1, j>i}^{N_a} \varphi_{aa}(|\mathbf{r}_{a,i} - \mathbf{r}_{a,j}|), \quad U_{bb} = \sum_{i=1, j>i}^{N_b} \varphi_{bb}(|\mathbf{r}_{b,i} - \mathbf{r}_{b,j}|), \\
 U_{cc} &= \sum_{i=1}^{N_c} \left[\varphi_{1,cc}(\mathbf{r}_{c,i}) + \sum_{j>i} \varphi_{2,cc}(|\mathbf{r}_{c,i} - \mathbf{r}_{c,j}|) \right], \quad U_{ab} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_a} \sum_{j=1}^{N_b} \varphi_{ab}(|\mathbf{r}_{a,i} - \mathbf{r}_{b,j}|), \\
 U_{ac} &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_a} \sum_{j=1}^{N_c} \varphi_{ac}(|\mathbf{r}_{a,i} - \mathbf{r}_{c,j}|), \quad U_{bc} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_b} \sum_{j=1}^{N_c} \varphi_{bc}(|\mathbf{r}_{b,i} - \mathbf{r}_{c,j}|).
 \end{aligned} \tag{7}$$

Тройные взаимодействия частиц в формулах (7) не учитываются ввиду малого вклада таких взаимодействий в потенциальную энергию системы. Каждый вид взаимодействия описывается с помощью соответствующего потенциала φ_{ll} . Для смеси водород–азот нами использовался потенциал Ми в форме “ $n - 6$ ” [28], адаптированный в работе [29] к расчетам смеси водорода и азота и зависящий от их соотношения в выделенном микрообъеме. Для взаимодействия атомов никеля между собой использовался потенциал ЕАМ (Embedded-Atom Method) [30, 31], который учитывает не только парные взаимодействия $\varphi_{2,cc}$, но и влияние окружения на определенную частицу $\varphi_{1,cc}$. Для учета взаимодействий газ–металл нами использовались два потенциала: стандартный потенциал Леннарда–Джонса [32] с параметрами, рассчитанными по формулам Лоренца–Бершелота [33, 34], и потенциал Морзе [35].

Вычисление коэффициентов сжимаемости и теплоемкости подробно описано в работе [6].

Для вычисления коэффициентов вязкости и теплопроводности компонентов смеси были использованы следующие формулы [36]:

$$\begin{aligned}
 \mu_l &= \frac{1}{k_B T_l V} \int_0^\infty \langle p_{\alpha\beta,l}(t_0 + t) \cdot p_{\alpha\beta,l}(t_0) \rangle dt, \quad \alpha\beta = xy, yz, zx, \quad l = a, b, \\
 p_{\alpha\beta,l} &= \sum_i m_{l,i} \cdot v_{\alpha,l,i} \cdot v_{\beta,l,i} + \sum_i \sum_{j>i} (r_{\alpha,l,i} - r_{\alpha,l,j}) \cdot (F_{\beta,l,i} - F_{\beta,l,j}), \quad i, j = 1, \dots, N_l, \\
 \chi_l &= \frac{1}{k_B T_l^2 V} \int_0^\infty \langle q_{\alpha,l}(t_0 + t) \cdot q_{\alpha,l}(t_0) \rangle dt, \quad \alpha = x, y, z, \\
 q_{\alpha,l} &= \frac{d\delta\varepsilon_{\alpha,l}}{dt}, \quad \delta\varepsilon_{\alpha,l} = \sum_i r_{\alpha,l,i} (\varepsilon_{l,i} - \langle \varepsilon_{l,i} \rangle), \quad \varepsilon_{l,i} = \frac{m_l v_{l,i}^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N \varphi_{ll}(|\mathbf{r}_{l,i} - \mathbf{r}_{l,j}|),
 \end{aligned} \tag{8}$$

где V — объем исследуемой системы, $\varepsilon_{l,i}$ — мгновенная полная энергия молекулы i типа l и t_0 — начальный момент времени при расчетах коэффициентов.

Средние длины свободного пробега вычисляются по формулам [37]

$$\lambda_a = \frac{1}{n_a \pi \sigma_a^2 \sqrt{2} + n_b \pi \sigma_{ab}^2 \sqrt{1 + m_a/m_b}}, \quad \lambda_b = \frac{1}{n_b \pi \sigma_b^2 \sqrt{2} + n_a \pi \sigma_{ab}^2 \sqrt{1 + m_b/m_a}},$$

где σ_l — эффективный радиус взаимодействия молекул сорта l [29].

Начальные условия на микроуровне определяются равновесным или квазиравновесным термодинамическим состоянием системы частиц.

Расчеты газовых сред обычно стартуют с нормальных условий или сначала приводятся к термодинамическому равновесию при заданных температуре и давлении. При этом распределение частиц по выбранному объему становится равномерным, распределение скоростей частиц по модулю приближается к максвелловскому, а направления скоростей соответствуют заданному среднему импульсу газовой среды.

Металлические части микросистемы на старте должны иметь решеточную структуру, характерную для данного металла при заданной температуре. При этом в них должны отсутствовать избыточные напряжения. Распределение модулей скоростей атомов в решетке металла должно быть близко к максвелловскому, а суммарный импульс должен равняться нулю (подробнее о расчетах термодинамических равновесий в микросистемах металл–металл, газ–газ и газ–металл см. в работах [3–8]).

Граничные условия на молекулярном уровне выбираются в зависимости от моделируемой ситуации. В частности, когда расчеты направлены на определение свойств среды (будь то чистый металл или газ, или их смесь), то рассматривается некоторый выделенный трехмерный ее объем, вне которого предполагается периодическое продолжение среды на неограниченные расстояния по всем трем пространственным координатам. В этом случае используются периодические граничные условия [13–18].

Если расчеты производятся для исследования микросистем реальной геометрии, то одно или несколько направлений имеют конечный размер. В этом случае в качестве граничных условий могут использоваться либо зеркальные граничные условия (когда частицы взаимодействуют со своим зеркальным отражением и не выходят вследствие этого за границу), либо условия исчезновения частицы на границе и появления ее в другом месте микросистемы (так, чтобы не нарушалось общее равновесие в системе). Кроме того, может осуществляться свободный выход частиц на одной стороне выделенного объема и вход потока частиц — на другой. Для металлических микросистем характерно также полное отсутствие граничных условий, которые соблюдаются ввиду сил взаимного притяжения атомов в решетке металла.

В данной работе использовались и периодические, и зеркальные граничные условия, а также вход потока частиц в среду и свободный выход частиц из нее. Дополнительно отдельные части микросистем термостатировались [38, 39] или поддерживались в определенном равновесном или квазиравновесном состоянии.

3. Алгоритмы расчета и их реализация.

3.1. Общий алгоритм решения. Реализация разработанного многомасштабного подхода опиралась на численный алгоритм, основанный на расщеплении по физическим процессам и использующий сеточные аппроксимации КГД-уравнений (1)–(3) и подсеточные вычисления по уравнениям ньютоновской динамики (5)–(7).

Алгоритм состоит в следующем. В начальный момент времени на выбранной сетке задается равновесное состояние макросистемы (4). При необходимости вблизи границ расчетной области задается также равновесное состояние газовой и металлической микросистем.

Далее на каждом шаге по времени производится сначала предикторный расчет макропараметров компонентов газа по сеточным аналогам КГД-уравнений (1)–(3) без учета обменных членов (КГД-блок программы). В результате расчета определяются новые макропараметры компонентов газа в каждом контрольном объеме пространственной сетки.

Затем производится подсеточный МД-расчет с целью вычисления обменных членов и кинетических коэффициентов (МД-блок программы). Этот расчет осуществляется независимо в каждом контрольном объеме (ячейке) сетки с помощью уравнений молекулярной динамики и производится с существенно более мелким шагом по времени, связанным с эволюцией молекулярной подсистемы. Критерием останова МД-расчета является либо достижение характерного времени эволюции молекулярной системы (которое связано с линейным размером ячейки l и средней скоростью молекул v : $t_f \approx l/v$), либо изменение (на 1–2%) одного или нескольких макропараметров молекулярной системы (средний импульс, средняя кинетическая или средняя потенциальная энергии). Фактически, если сильных изменений макропараметров не происходит, то расчет производится до достижения некоторого заданного момента времени t_f , пропорционального времени максвеллизации молекулярной системы.

Кроме того, в МД-блоке осуществляется возврат к макроскопическому уровню и проводится коррекция плотностей импульсов и плотностей полной энергии с помощью вычисленных обменных членов. Коррекция проводится в каждой точке сетки. Завершается процесс МД-вычислений расчетом кинетических коэффициентов и уравнений состояния.

Таким образом, связь макро- и микроуровней в сеточной пространственной и временной областях осуществляется посредством поочередного пересчета макропараметров по КГД- и МД-уравнениям.

В случае присутствия в потоке наночастиц используется третий блок вычислений (НЧ-блок программы), в котором решаются либо уравнения конвекции–диффузии для концентраций наночастиц каждого сорта (эта ситуация рассматривается для случая мелких наночастиц), либо уравнения Ньютона для баллистического переноса наночастиц (в случае крупных наночастиц). В данной работе эта часть вычислений не рассматривается.

Завершается описанная часть алгоритма проверкой критерия окончания расчетов и переходом к следующему шагу по времени в случае невыполнения критерия.

3.2. Конечно-объемная схема решения КГД-уравнений. Для расчета макропараметров по КГД-уравнениям разработан сеточный численный метод, имеющий в своей основе метод контрольных объемов [40–42]. Для этого в расчетной области D была введена пространственная сетка Ω_D с ячейками C_m ($m = 1, \dots, M$) и сетка по времени ω_t с переменным шагом Δt . Сетка Ω_D в общем случае является

гибридной, т.е. включает в себя несколько типов элементов: тетраэдры, пентаэдры, гексаэдры, гептаэдры и октаэдры.

Все параметры компонентов газа (плотности, давления, температуры, компоненты вектора скорости и т.д.) были отнесены к центрам масс элементов сетки, т.е. к центрам ячеек. Поточковые переменные были заданы в центрах граней ячеек. Пространственные аппроксимации основных членов были выполнены по методике, представленной в работе [43]. Вычислительная схема по времени была явной. Итоговые сеточные уравнения на этапе предиктора имеют вид

$$\begin{aligned}\widehat{\rho}_{l,m} &= \rho_{l,m} + \frac{\Delta t}{|V_m|} \sum_{p=1}^{M_m} W_{l,n,m,p}^{(\rho)} |S_{m,p}|, & W_{l,n,m,p}^{(\rho)} &= \left(\mathbf{W}_{l,m,p}^{(\rho)}, \mathbf{n}_{m,p} \right), \\ \widehat{\rho}_{l,m} \widehat{u}_{l,k,m} &= \rho_{l,m} u_{l,k,m} + \frac{\Delta t}{|V_m|} \sum_{p=1}^{M_m} W_{l,n,m,p,k}^{(\rho u)} |S_{m,p}|, & W_{l,n,m,p,k}^{(\rho u)} &= \left(\mathbf{W}_{l,m,p}^{(\rho u_k)}, \mathbf{n}_{m,p} \right), \quad k = x, y, z, \\ \widehat{E}_{l,m} &= E_{l,m} + \frac{\Delta t}{|V_m|} \sum_{p=1}^{M_m} W_{l,n,m,p}^{(E)} |S_{m,p}|, & W_{l,n,m,p}^{(E)} &= \left(\mathbf{W}_{l,m,p}^{(E)}, \mathbf{n}_{m,p} \right), \quad m = 1, \dots, M, \quad l = a, b.\end{aligned}$$

Здесь использованы следующие общепринятые обозначения: f_m, \widehat{f}_m — значения соответствующих функций на нижнем и верхнем слоях по времени в центре контрольного объема V_m (совпадающего в силу выбранной аппроксимации с ячейкой сетки C_m), $|V_m|$ — величины контрольных объемов V_m , $|S_{m,p}|$ — площади граней $S_{m,p}$ контрольного объема V_m , M_m — количество граней контрольного объема V_m , $W_{n,m,p}^{(\alpha)}$ — скалярные произведения потока $\mathbf{W}_{m,p}^{(\alpha)}$ через грань $S_{m,p}$ на внешнюю нормаль $\mathbf{n}_{m,p}$ к этой грани ($\alpha = \rho, \rho u_x, \rho u_y, \rho u_z, E$).

В предлагаемой явной конечно-объемной схеме основная вычислительная нагрузка связана с расчетами потоков $\mathbf{W}_{m,p}^{(\alpha)}$ массы, импульса и энергии через грани контрольных объемов. Рассмотрим подробнее случай полностью тетраэдральной сетки. В этой ситуации в качестве контрольных объемов используются тетраэдры. Для аппроксимации потоков через грани тетраэдров используется интегро-интерполяционный метод и аппроксимации, аналогичные предложенным в [43]. Однако в отличие от работы [43] здесь не используется искусственная вязкость.

В результате расчетов и суммирования потоков получаются предикторные значения плотности, импульса и энергии $\widehat{\rho}_l, \widehat{\rho}_l \widehat{\mathbf{u}}_l$ и \widehat{E}_l . Их значения в совокупности передаются в блок молекулярной динамики. В результате выполнения вычислений в МД-блоке определяются модифицированные параметры $\widehat{\rho}_l \widehat{\mathbf{u}}_l^*$ и \widehat{E}_l^* , по которым находят окончательные значения плотностей импульсов $\widehat{\rho}_l \widehat{\mathbf{u}}_l^{**}$ и энергии \widehat{E}_l^{**} :

$$\begin{aligned}\widehat{\rho}_{l,m} \widehat{u}_{l,k,m}^{**} &= \widehat{\rho}_{l,m} \widehat{u}_{l,k,m}^* + \Delta t \nu_{l,m} \widehat{\rho}_{l,m} \left(\widehat{u}_{l,k,m} - \widehat{u}_{l,k,m}^* \right), \quad k = x, y, z, \\ \widehat{E}_{l,m}^{**} &= \widehat{E}_{l,m}^* + \Delta t \nu_{l,m} \widehat{\rho}_{l,m} \left(\widehat{E}_{l,m} - \widehat{E}_{l,m}^* \right), \quad m = 1, \dots, M, \quad l = a, b, \quad l' = b, a.\end{aligned}$$

Кроме того, по полученным макропараметрам в МД-блоке вычисляются все кинетические коэффициенты μ_l и χ_l , параметры в уравнениях состояния Z_l и $c_{V,l}$, а также сопутствующие переменные, например длины свободного пробега молекул λ_l , скорости звука a_l и числа Маха и Рейнольдса.

3.3. Алгоритм решения уравнений Ньютона. Система уравнений (6)–(8) решается с помощью схемы Верле [44] в скоростной форме:

- 0) $\mathbf{F}_{l,i}^0 = \mathbf{F}(\mathbf{r}_{a,1}^0, \dots, \mathbf{r}_{a,N_a}^0; \mathbf{r}_{b,1}^0, \dots, \mathbf{r}_{b,N_b}^0; \mathbf{r}_{c,1}^0, \dots, \mathbf{r}_{c,N_c}^0)$, $i = 1, \dots, N_l$, $l = a, b, c$; $\forall n = 0, 1, 2, \dots$;
- 1) $\mathbf{r}_{l,i}^{n+1} = \mathbf{r}_{l,i}^n + \mathbf{v}_{l,i}^n \Delta t + \frac{\mathbf{F}_{l,i}^n}{m_l} \frac{(\Delta t)^2}{2}$, $i = 1, \dots, N_l$, $l = a, b, c$;
- 2) $\mathbf{F}_{l,i}^{n+1} = \mathbf{F}(\mathbf{r}_{a,1}^{n+1}, \dots, \mathbf{r}_{a,N_a}^{n+1}; \mathbf{r}_{b,1}^{n+1}, \dots, \mathbf{r}_{b,N_b}^{n+1}; \mathbf{r}_{c,1}^{n+1}, \dots, \mathbf{r}_{c,N_c}^{n+1})$, $i = 1, \dots, N_l$, $l = a, b, c$;
- 3) $\mathbf{v}_{l,i}^{n+1} = \mathbf{v}_{l,i}^n + \frac{\mathbf{F}_{l,i}^{n+1} + \mathbf{F}_{l,i}^n}{2m_l} \Delta t$, $i = 1, \dots, N_l$, $l = a, b, c$.

Здесь Δt — шаг интегрирования, n — номер шага, $\mathbf{F}_{l,i}^n$ — значение силы на шаге n , \mathbf{F} — процедура вычисления сил на основе формул (6), (7).

Для достижения желаемых температур газа и металла в состоянии термодинамического равновесия используется термостат Берендсена [38]. Для достижения желаемой температуры газа и импульса в состоянии термодинамического равновесия используется термостат Ланжевена [39].

3.4. Параллельная реализация. Параллельная реализация алгоритма предполагает использование кластера (или суперкомпьютера) с центральной или гибридной архитектурой, имеющего на каждом узле несколько многоядерных центральных процессоров (ЦПУ), а также несколько векторных или графических процессоров (ВПУ или ГПУ). Распараллеливание алгоритма производится на принципах геометрического параллелизма и разделения областей. Основной газодинамический расчет производится по дискретным КГД-уравнениям на сетке, распределенной между узлами кластера с помощью техники “domain decomposition” [45]. Внутри узла КГД-вычисления распределяются между потоками ЦПУ. Подсеточные МД-вычисления возлагаются на ВПУ или ГПУ при их наличии. Распараллеливание КГД-вычислений между потоками ЦПУ тоже производится геометрическим способом. Распараллеливание МД-вычислений производится путем разбиения всего множества частиц, относящихся к одной ячейке сетки, на группы одинаковой мощности (подробно эти расчеты представлялись в [7]). В итоге каждый блок тредов ВПУ или ГПУ обрабатывает одну или несколько молекулярных групп, относящихся к одному или нескольким узлам сетки. Программная реализация алгоритма выполнена по гибридной технологии [46], использующей MPI [47], OpenMP [48] и CUDA [49].

Основные проблемы параллельной реализации общего алгоритма связаны с оптимальным разбиением расчетной области по узлам кластера и с оптимальным же распределением вычислительной нагрузки между КГД- и МД- блоками.

Первая проблема может быть решена с помощью алгоритмов разбиения области, реализованных, например, в пакетах METIS [50], ParMETIS [51], способных строить разбиения сетки ячеек в соответствии с заданными критериями. В нашем случае в качестве критерия используется примерное равенство вычислительной нагрузки на каждый из узлов кластера при минимальном количестве связей узлов между ними. В итоге, она сводится к априорной оценке вычислительной нагрузки, приходящейся на одну ячейку сетки. Эта оценка не всегда может быть получена точно и, в сущности, зависит от решения второй проблемы.

Проблема распределения вычислений между КГД- и МД-блоками состоит в следующем. В отличие от задач газовой динамики в макромасштабах, в данном случае расчетная сетка тесно связана с характерными размерами течения на микроуровне (т.е. со средней длиной свободного пробега молекул газа в потоке) и размерами пограничных слоев вблизи твердых поверхностей. В частности, если рассматриваются технические системы, применяющиеся в нанотехнологиях, то их поперечные и продольные размеры изменяются в пределах от десятых долей микрона до нескольких тысяч микрон. При этом длины свободного пробега газа в потоке при различных давлениях и температурах составляют от сотых долей микрона до нескольких микрон. В итоге, применяющаяся в расчетах таких задач сетка выбирается из нескольких соображений. Во-первых, она должна быть достаточно мелкой, чтобы обеспечить сходимость с нужной точностью численных алгоритмов на макроуровне. Во-вторых, ее характерный размер не должен быть меньше характерной длины свободного пробега в газовой фазе и длины диффузии в твердой фазе стенки. В-третьих, локальный ансамбль частиц, который определяет свойства вещества в отдельно взятой ячейке сетки, должен быть представительным. В-четвертых, времена решения задачи на этапах КГД- и МД-вычислений должны быть сравнимы.

Приведем пример решения второй проблемы для истечения струи азота в вакуум через никелевый канал при использовании декартовой сетки. Предположим, что размеры микросистемы составляют $10 \times 10 \times 100$ мкм³, толщина никелевого покрытия внутренних стенок канала составляет 12 кристаллов. Будем считать, что в указанной расчетной области построена равномерная декартова сетка, состоящая из кубических ячеек. Стартовая сетка $\Omega^{(0)}$ имела $M_V^{(0)} = 10 \times 10 \times 100 = 10\,000$ ячеек с линейным размером $a^{(0)} = 1$ мкм. Последующие сетки получаются измельчением ячеек предыдущей сетки на 8 частей (в 2 раза по каждому направлению). В итоге, сетка $\Omega^{(k)}$ имела $M_V^{(k)} = M_V^{(0)} 8^k$ ячеек. Объем каждой ячейки в такой сетке равен $|V_m^{(k)}| = (a^{(k)})^3$ мкм³. Количество ячеек, примыкающих к боковой поверхности расчетной области, для сетки $\Omega^{(k)}$ составляет $M_S^{(k)} = 4000 \times 4^k$. Величины $M_V^{(k)}$ и $M_S^{(k)}$ определяют вычислительную емкость итогового алгоритма. Чем они больше, тем больше суммарная вычислительная емкость КГД-блока и тем меньше вычислительная емкость МД-блока. Покажем это.

Если металлическая поверхность канала описывается единым отталкивающим потенциалом без учета реальной атомной структуры, то можно ограничиться такими рассуждениями. В каждой ячейке $C_m^{(0)}$ стартовой сетки $\Omega^{(0)}$ (имеющей объем $|V_m^{(0)}| = 1$ мкм³) при нормальных условиях ($p = 101\,325$ Па,

$T = 273.15$ K) содержится число молекул азота, равное $N_{\text{gas}}^{(V,0)} = N_A |V_m^{(0)}| V_\mu^{-1} \approx 2.6867811 \times 10^7$ (здесь $N_A \approx 6.022140857 \times 10^{23}$ моль $^{-1}$ — число Авогадро, $V_\mu \approx 22.413962 \times 10^{15}$ мкм 3 моль $^{-1}$ — объем моля газа при нормальных условиях). Этого количества более чем достаточно, чтобы получить представительную статистику при МД-вычислениях, однако слишком много для реальных вычислений. Поэтому в длительных расчетах лучше использовать более подробные сетки, содержащие большее число ячеек, но имеющие меньший объем одной ячейки и содержащие меньшее число частиц в ней (см. табл. 1).

Таблица 1

Параметры сеток и количество молекул азота в каждой ячейке при нормальных условиях

k	$M_V^{(k)}$	$a^{(k)}$, мкм	$ V_m^{(k)} $, мкм 3	$N_{\text{gas}}^{(V,k)}$ в ячейке	$ V_\lambda $, мкм 3	$N_{\text{gas}}^{(V,k)}$ в объеме V_λ
0	10000	1	1	26867811	0.0001315	3534
1	80000	0.5	0.125	3358476	0.0001315	3534
2	640000	0.25	0.015625	419810	0.0001315	3534
3	5120000	0.125	0.001953125	52476	0.0001315	3534
4	40960000	0.0625	0.000244140625	6560	0.0001315	3534

Как показывает анализ, разумное соотношение количества ячеек сетки и частиц в одной ячейке сетки получается для сеток $\Omega^{(3)}$ и $\Omega^{(4)}$. При этом если полностью исключить МД-блок из расчетов (например, для определения параметров состояния и кинетических коэффициентов газов в объеме использовать в этом случае базу данных по свойствам веществ, рассчитанную заранее с помощью МД-вычислений), то предпочтительной будет сетка $\Omega^{(3)}$. Если же необходимы прямые МД-вычисления, то следует использовать сетку $\Omega^{(4)}$, содержащую существенно меньшее число частиц газа в одной ячейке. При этом следует подчеркнуть, что сетки с большими номерами (5, 6 и более) использовать не следует, поскольку для них линейный размер ячейки $a^{(k)}$ будет меньше средней длины свободного пробега молекул в газовой фазе.

При расчете сильно разреженной газовой среды начальное давление в канале может составлять 0.001 атм и менее. Тогда стартовое количество молекул газа в ячейках может упасть практически до нуля. Например, для сетки $\Omega^{(3)}$ при давлении 0.001 атм число частиц падает до 52, а для сетки $\Omega^{(4)}$ — до 6. Этого количества явно недостаточно для корректного использования локальных МД-вычислений в рамках одной ячейки. Поэтому в зонах низкой концентрации частиц (совпадающих обычно с зонами низкого давления и/или температуры) необходимо увеличивать линейный размер ячейки за счет соседних ячеек. Количество частиц в данной ситуации можно рассчитать на основе значений плотности в рассматриваемой и в соседних с ней ячейках:

$$\bar{N}_{l,i,j,k} = \sum_{i',j',k'=-m,\dots,+m} \frac{\rho_{l,i+i',j+j',k+k'}}{m_l} |V_{i+i',j+j',k+k'}|,$$

$$|\bar{V}_{i,j,k}| = \sum_{i',j',k'=-m,\dots,+m} |V_{i+i',j+j',k+k'}|, \quad l = a, b,$$

где $m = 0, 1, 2, \dots$ — число соседних ячеек по каждому положительному направлению, которое следует учитывать в МД-вычислениях.

Для сокращения вычислительной нагрузки МД-блока можно искусственно занизить количество частиц газа в ячейке. Для этого вокруг центра ячейки можно сформировать специальный кубический микрообъем V_λ с линейным размером a_λ порядка средней длины свободного пробега λ (но не менее 0.5λ). Если объем ячейки $|V_m^{(k)}| > |V_\lambda|$, то будем использовать его для определения числа частиц и последующих МД-расчетов. Для примера в табл. 1 был выбран предельно допустимый объем V_λ со стороной $a_\lambda = \lambda/2 \approx 50.85216$ нм ($\lambda \approx 101.70432$ нм — средняя длина свободного пробега молекул азота при нормальных условиях). В результате число частиц в ячейке сокращается до 3534.

Предложенный прием можно использовать вдали от стенок канала (в потоке) и распространить вплоть до начала пограничного слоя. Это позволяет использовать в расчетах любую из сеток $\Omega^{(k)}$, $k = 0, 1, 2, 3, 4$. В граничных ячейках и ячейках, составляющих пограничный слой, необходимо использовать истинное число частиц, чтобы учесть реальное взаимодействие газа с металлической стенкой.

Отметим далее, что если металлическая поверхность рассматривается на атомном уровне, то в вычислениях МД-блока появляется необходимость учета структуры кристаллической решетки металла. В этой ситуации необходимо задать глубину проникновения возмущений в металл: h_{metal} . Дело в том, что

в зависимости от интенсивности и способов воздействия газа на металл тепловые и механические возмущения в металле могут достигать различной глубины и приводить к различным физическим эффектам (нагрев, смещения решетки, появление пор и трещин, проникновение молекул газа в металл и др.). Если необходимо проанализировать подобные явления в металле, то следует оценить и использовать в расчетах некоторую глубину, характерную для рассматриваемых процессов.

В нашем случае наиболее существенным процессом является нагрев поверхности металла. Глубина тепловых возмущений зависит от температуры металла в его толще и от температуры газа. Нами предполагается, что подповерхностный слой металла (находящийся ниже тех 12 кристаллов никеля, которые составляют покрытие канала) находится при температуре 273.15 К и термостатируется. Кроме того, предполагается, что температура газового потока лежит в пределах от 200 К до 346.3 К и не сильно влияет на температуру металла. В этой ситуации по нашим оценкам глубина проникновения тепловых возмущений может быть меньше толщины покрытия или совпадать с ней.

В итоге, если известна величина h_{metal} , а также равновесное значение длины ребра кристаллической решетки металла a_{metal} , то можно вычислить объем прилегающего к граничной ячейке металлического слоя $|V_{\text{metal}}^{(k)}| = a^{(k)} \times a^{(k)} \times h_{\text{metal}}$ и определить количество атомов металла $N_{\text{metal}}^{(S,k)}$, взаимодействующих непосредственно или опосредованно с молекулами газа. Кроме того, следует учесть, что вследствие эффекта адсорбции молекул газа вблизи поверхности металла концентрация газа может там сильно возрасти (см. [8]). Поэтому в граничных ячейках можно ввести свою величину $N_{\text{gas}}^{(S,k)}$, которая будет существенно больше, чем $N_{\text{gas}}^{(V,k)}$.

Дополним приведенный выше пример взаимодействия азота с никелем следующими данными. В работе [5] было показано, что при нормальных условиях ребро кристалла никеля составляет примерно $a_{\text{metal}} \approx 0.35314$ нм. Глубину проникновения возмущений, вызванных механическим и тепловым воздействием газа на металл, выберем равной толщине покрытия канала (12 кристаллов). Тогда при нормальных условиях эта величина равна $h_{\text{metal}} \approx 4.23768$ нм. Количество кристаллов никеля в 1 мкм² покрытия выбранной толщины составляет примерно $2832 \times 2832 \times 12$, т.е. 96 242 688. Количество атомов никеля в этом объеме составляет более 401 млн. (см. табл. 2). Количество молекул азота $N_{\text{gas}}^{(S,k)}$ в граничной ячейке будем считать превышающим соответствующее количество в объеме в 6 раз (примерно такая величина была получена в [8] для нормальных условий). Исходя из этих данных, можно определить количества частиц в граничных ячейках для сеток $\Omega^{(k)}$ (см. табл. 2). Анализ приведенных данных показывает, что в этом случае наиболее приемлемой по вычислительной емкости оказывается сетка $\Omega^{(4)}$.

Таблица 2
 Параметры сеток, количество молекул азота и количество атомов никеля в объеме, примыкающем к граничным ячейкам сетки

k	$M_S^{(k)}$	$ V_{\text{metal}}^{(k)} $, мкм ³	$N_{\text{gas}}^{(S,k)}$ в граничной ячейке	$N_{\text{metal}}^{(S,k)}$ в граничной ячейке
0	4000	4.23768	161206866	401011200
1	16000	1.05942	20150856	100252800
2	64000	0.264855	2518860	25063200
3	256000	0.06621375	314856	6265800
4	1024000	0.0165534375	39360	1566450

Приведем далее некоторые оценки необходимых вычислительных ресурсов при расчетах на вычислительной системе с распределенной памятью. Для определенности рассмотрим лишь центральную архитектуру и предположим, что рассматриваем конфигурацию, состоящую из N_p MPI-процессов, каждый из которых может породить N_t потоков (тредов). Оценим сначала необходимую для расчетов оперативную память.

Во-первых, оценим оперативную память, использующуюся в КГД-блоке. Для этого учтем, что в случае бинарной смеси газов используется 36 основных и вспомогательных массивов: 24 массива относятся к макропараметрам течения (плотность, температура, давление, полная энергия, трехмерный вектор скорости, вязкость) для двух компонентов и смеси в целом на текущем шаге по времени, 10 массивов относятся к основным макропараметрам течения (плотность, полная энергия, трехмерный вектор скорости) для двух компонентов смеси на новом шаге по времени, а также 2 буферных массива той же размерности. В итоге, для оценки оперативной памяти ЦПУ, необходимой одному MPI-процессу для реализации вычислений

КГД-блока, может использоваться формула

$$S_{QGD}^{(k)} = \frac{36 \cdot M_V^{(k)}}{N_p} \cdot \frac{8}{1024^2} \quad (\text{Мб}).$$

Если уравнение состояния, кинетические коэффициенты и обменные члены вычисляются методом молекулярной динамики (а не берутся из базы данных), то в каждой ячейке, занятой газом, производится независимый МД-расчет, для реализации которого необходима дополнительная память в размере

$$S_{MD}^{(V,k)} = N_{\text{gas}}^{(V,k)} \cdot N_f \cdot N_c^{(V,k)} \cdot \frac{8}{1024^2} \quad (\text{Мб}), \quad (9)$$

где $N_c^{(V,k)}$ — количество ячеек, обрабатываемых одновременно потоками данного MPI-процесса, $N_f = 27$ — число параметров частицы, реализующих алгоритм Верле (3 компоненты радиус-вектора, 3 компоненты скорости и 3 компоненты силы на двух соседних слоях по времени) и вычисления макропараметров (вириальные коэффициенты и др.).

Величина $N_c^{(V,k)}$ лежит в пределах от 1 до $\frac{M_V^{(k)} - M_S^{(k)}}{N_p}$, однако на практике она связана с количеством тредов, доступных каждому MPI-процессу, т.е. $N_c^{(V,k)} = N_t n$, $n = 1, 2, \dots, \frac{M_V^{(k)} - M_S^{(k)}}{N_p N_t}$. Заметим, что если на границе с металлом не предполагается учитывать атомную структуру поверхности, то формула (9) справедлива и для граничных ячеек с $N_c^{(V,k)} = N_t n$ и $n = 1, 2, \dots, \frac{M_V^{(k)}}{N_p N_t}$.

Если в граничных ячейках производится расчет взаимодействия газа с металлом с учетом атомной структуры металлической поверхности, то необходимая память увеличится. При этом дополнительная память организуется в соответствии со структурой металлической решетки. Вся граничная ячейка разбивается на специальные кубические боксы, размер каждого бокса составляет 3 длины ребра решетки металла (подробно данная методика обсуждается в [5, 7]). В каждом боксе находится определенное число частиц металла и/или газа. Необходимая для реализации данного расчета память может быть оценена по формуле

$$S_{MD}^{(S,k)} = \left[\left(N_{\text{gas}}^{(S,k)} \cdot (N_f + 1) + N_{\text{metal}}^{(S,k)} \cdot (N_f + 3) \right) \cdot 8 + N_b \cdot 80 \right] \cdot N_c^{(S,k)} \cdot \frac{1}{1024^2} \quad (\text{Мб}),$$

где $N_{\text{gas}}^{(S,k)}$ — количество частиц газа в граничной ячейке, $N_{\text{metal}}^{(S,k)}$ — количество атомов металла в приповерхностном слое, примыкающем к граничной ячейке, $(N_f + 1)$ — количество параметров газовой частицы с добавлением ее типа и глобального номера, $(N_f + 3)$ — количество параметров металлической частицы (кроме указанных параметров для газа здесь добавляются значения электронной плотности на внешней оболочке атома и ее дифференциала), $N_b = \frac{(a^{(k)})^3 + (a^{(k)})^2 h_{\text{metal}}}{(3a_{\text{metal}})^3}$ — количество боксов, на которые разбита граничная ячейка и примыкающий к ней металлический слой, 80 — длина в байтах структуры бокса, $N_c^{(S,k)}$ — количество граничных ячеек, обрабатываемых одновременно потоками данного MPI-процесса, которое оценивается величиной $N_t n$, где $n = 1, 2, \dots, \frac{M_S^{(k)}}{\sqrt[3]{N_p^2} N_t}$.

В табл. 3 приведены результаты оценки минимально необходимой оперативной памяти, обеспечивающей расчеты на конфигурации в 512 MPI-процессов с учетом атомной структуры металлической поверхности канала. Эти результаты подтверждают также, что использование сетки $\Omega^{(4)}$ является наиболее приемлемым вариантом. При этом видно, что основную оперативную память формируют массивы МД-блока, предназначенные для расчетов взаимодействия газа с металлом в пограничном слое. При использовании распараллеливания по потокам эта память увеличивается как минимум в N_t раз. Наши тесты показали, что оптимальными по скорости вычислений количествами потоков N_t для ЦПУ Intel Xeon являются величины 2 или 4 (для ВПУ Intel Xeon Phi — 8 или 16). Соответственно, необходимая для расчетов в пограничном слое оперативная память ЦПУ в этих случаях увеличится в 2 или в 4 раза (для ВПУ — в 8 или в 16 раз).

При расчетах МД-блока на ГПУ различных серий оптимальное по скорости вычислений число потоков составляет обычно от 256 до 1024. Однако имеющаяся в ГПУ оперативная память не позволяет

Таблица 3

Минимальная оперативная память, требующаяся одному MPI-процессу для расчетов задачи с учетом атомного строения поверхности канала, при $N_p = 512$, $N_t = 1$ и $N_c^{(V,k)} = 1$, $N_c^{(S,k)} = 1$

k	$M_V^{(k)}/N_p$	$(M_V^{(k)} - M_S^{(k)})/N_p$	$M_S^{(k)}/\sqrt[3]{N_p^2}$	N_b	$S_{QGD}^{(k)}$, Мб	Минимальное значение $S_{MD}^{(V,k)}$, Мб	Минимальное значение $S_{MD}^{(S,k)}$, Мб
0	20	12	63	844562920	0.006	5534.599	190656.719
1	156	125	250	106015850	0.043	691.825	35339.100
2	1250	1125	1000	13363352	0.343	86.478	7294.141
3	10000	9500	500	1698262	2.747	10.810	1630.955
4	80000	78000	2000	219244	21.973	1.351	383.667

использовать такое количество потоков. Выходом из ситуации является использование другого алгоритма (не использующего структуру боксов), однако он оказывается более медленным по сравнению с предложенным в [8].

Еще одним ресурсом является дисковая память. Очевидно, что ее количество связано с общим объемом оперативной памяти, используемой в расчете, и с количеством слоев по времени, которое необходимо будет использовать при постобработке результатов. Если не хранить данные МД-блока (в целях ускорения расчетов), то дисковая память потребуется лишь для хранения сеточных данных КГД-блока. При этом будут сохраняться минимально необходимые данные (24 массива с макропараметрами) на сетках $\Omega^{(3)}$ или $\Omega^{(4)}$. В первом варианте потребуется 937.5 Мб на один слой по времени, во втором — 7.5 Гб. Применение алгоритмов сжатия к бинарным данным позволит сократить эти объемы в 3–5 раз в зависимости от структуры течения. Если понадобится хранить данные МД-блока, то сохранение одного слоя по времени потребует в 15–20 раз большей дисковой памяти.

4. Вычислительные эксперименты и результаты. Для апробации разработанного подхода было проведено следующее предварительное тестирование. В качестве расчетной области был выбран цилиндрический канал прямоугольного сечения длиной 90 мкм с боковой стороной 15 мкм и квадратным отверстием со стороной 3 мкм для диффузора сопла. Канал заканчивался выходом в свободное пространство, однако в нем течение уже не рассчитывалось. В качестве газа рассматривался чистый азот. В качестве материала стенок рассматривался никель.

В указанной расчетной области была построена последовательность равномерных декартовых сеток $\Omega^{(k)}$ со стороны кубических ячеек $a^{(k)} = a^{(0)}/2^k$, количеством ячеек $M_V^{(k)} = M_V^{(0)}8^k$, количеством поверхностных ячеек $M_S^{(k)} = M_S^{(0)}4^k$, количеством поверхностных ячеек, контактирующих со стенками $M_C^{(k)} = M_C^{(0)}4^k$ ($k = 0, 1, 2, 3, 4$). Стартовая сетка $\Omega^{(0)}$ имела линейный размер ячейки $a^{(0)} = 1.0$ мкм, $M_V^{(0)} = 20\,250$ ячеек, $M_S^{(0)} = 5850$, $M_C^{(0)} = 5616$.

В соответствии с указанными в разделе 3.4 рекомендациями без учета структуры стенок и при использовании объемов V_λ наиболее приемлемой по точности и вычислительной емкости оказывается сетка $\Omega^{(3)}$, содержащая 10 368 000 ячеек. При учете атомной структуры поверхности канала следует использовать сетку $\Omega^{(4)}$, содержащую 82 944 000 ячеек. В каждой граничной ячейке в этом случае используется 39 360 атомов азота и $1\,566\,450 \times N_f$ атомов никеля, где $N_f = 1, 2, 3$ — число граней ячейки, соприкасающихся с металлической поверхностью.

Тестирование разработанного подхода по отдельным блокам проводилось на суперкомпьютерах К-100 (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН), МВС-10П (МСЦ РАН), кластере Ангара-К1 (ОАО “НИЦЭВТ”) и кластере IBM Power8 (ЛИТ ОИЯИ). Расчеты проводились на центральных (ЦПУ — Intel Xeon X5670, Intel Xeon E5-2690, Intel Xeon E5-2630 и IBM Power E870), векторных (ВПУ — Intel Xeon Phi 7110X) и графических (ГПУ — Nvidia Tesla K40m) процессорах. Количество ядер ЦПУ на разных системах варьировалось от 16 до 2048. Количество ядер ВПУ варьировалось от 60 до 7680. Количество видеоядер ГПУ варьировалось от 2880 до 11520. Количество MPI-процессов варьировалось от 64 до 512.

Проведенные тестовые расчеты показали следующее.

Во-первых, общий численный алгоритм устойчив к использованию корректирующих течение данных, полученных в результате МД-вычислений. С его помощью методами МД можно получать основные коэффициентные зависимости для КГД-системы. Переход от МД к КГД и обратно производится кор-

ректно. И, в итоге, разработанный алгоритм расчета трехмерных течений в микроканалах пригоден к использованию, но требует применения высокопроизводительной многопроцессорной техники.

Во-вторых, общее время расчета трехмерной задачи существенно образом зависит от выбранной стратегии вычислений и от соотношения времен расчетов с помощью КГД- и МД-блоков. Если сетка крупная, то основная вычислительная емкость сосредоточена в МД-блоке, и расчеты в этом случае существенно замедляются, если не использовать объемы V_λ . Если сетка достаточно подробная, то емкости КГД- и МД-блоков могут быть сравнимы по порядку при выборе достаточного количества узлов кластера или суперкомпьютера N_p . Однако при этом следует обращать внимание на количество молекул газа во внутренних и граничных ячейках, чтобы, с одной стороны, иметь представительную статистику для получения макропараметров газа, а с другой, иметь минимальную вычислительную емкость всей задачи.

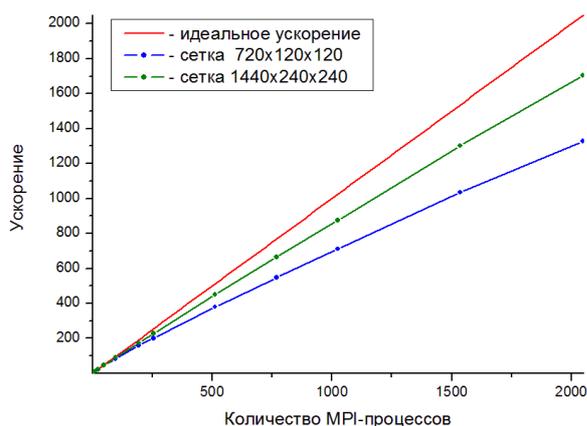


Рис. 2. Ускорения параллельных вычислений для сеток $\Omega^{(3)}$ и $\Omega^{(4)}$, полученные при использовании в расчетах только КГД-блока и готовых данных, получаемых из базы данных молекулярных расчетов

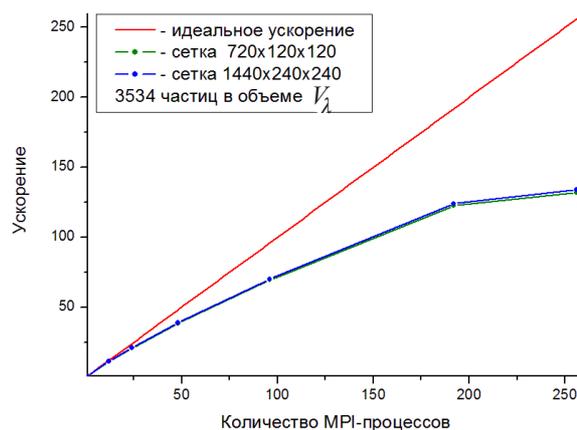


Рис. 3. Ускорения параллельных вычислений для сеток $\Omega^{(3)}$ и $\Omega^{(4)}$, полученные при использовании в расчетах КГД- и МД-блоков без учета граничных взаимодействий. Вычисления проведены на МВС-10П на ЦПУ и ВПУ. На каждый MPI-процесс приходится одно ЦПУ для расчетов КГД-блока и одно ВПУ для расчетов МД-блока

В-третьих, при расчетах на суперкомпьютере МВС-10П, имеющем на узлах как центральные, так и векторные процессоры, эффективность распараллеливания при использовании только ЦПУ оказалась в 1.5 раза выше, чем при использовании только ВПУ. Поэтому при выборе окончательной конфигурации было принято, что КГД-блок будет всегда вычисляться на ЦПУ, а МД-блок — только на ВПУ. В качестве примера, на рис. 2 показаны кривые ускорения, полученные при расчетах КГД-блока на ЦПУ на сетках $\Omega^{(3)}$ и $\Omega^{(4)}$ с количеством MPI-процессов (ядер ЦПУ) от 1 до 2048. Они показывают, что эффективность распараллеливания вычислений в КГД-блоке достаточно высока: на максимальной конфигурации (2048 ядер ЦПУ) она составляет 64.8% для сетки $\Omega^{(3)}$ и 83.2% для сетки $\Omega^{(4)}$.

Если анализировать эффективность параллельных расчетов задачи в целом, когда используются КГД- и МД-блоки попеременно, то можно отметить следующее. Пока вычислительная емкость МД-блока превышает емкость КГД-блока, эффективность распараллеливания определяется МД-расчетами. Это хорошо видно на рис. 3. Там показаны кривые ускорения, полученные на МВС-10П при расчетах на ЦПУ и ВПУ на сетках $\Omega^{(3)}$ и $\Omega^{(4)}$. Они подтверждают, что эффективность распараллеливания определяется в данном случае именно МД-блоком, поскольку кривые для разных сеток почти совпадают. Ситуация, когда вычислительная емкость КГД- и МД-блоков может быть сравнимой, реализуется, на наш взгляд, в том случае, если число MPI-процессов будет достаточно велико (так что каждый из них получит для обработки на ЦПУ небольшое количество ячеек расчетной сетки), а МД-вычисления будет выполнять один очень мощный спецвычислитель, например ГПУ последних серий.

В-четвертых, при расчетах на ЦПУ и ГПУ скорость расчетов МД-блока повышается почти в 10 раз. Например, такой результат был получен на ГПУ NVidia Tesla K40m. Однако если расчеты проводятся в параллельном режиме (КГД-блок на нескольких ЦПУ, МД-блок на нескольких ГПУ), то общая эффективность распараллеливания снижается. В наших тестовых расчетах использовался кластер, состоящий из двух узлов, на каждом из которых было по 2 ЦПУ и 2 ГПУ. Эффективность расчетов на максимальной конфигурации (4 ЦПУ и 4 ГПУ) составила для сетки $\Omega^{(3)}$ 86.4%, что на 5.8% ниже, чем при расчете на

МВС-10П на 4 ЦПУ и 4 ВПУ. Однако само время решения задачи с помощью ЦПУ и ГПУ сократилось примерно в 7.3 раза. Причина падения эффективности при использовании в качестве спецвычислителей ГПУ состоит в необходимости перекачки данных из памяти ЦПУ в ГПУ и обратно. Безусловно, существуют способы оптимизации таких обменов, и в дальнейшем нами планируется развить такие оптимизации в целях проведения расчетов на гибридных ВС с большим числом ГПУ.

5. Заключение. Настоящая работа посвящена решению проблемы моделирования течений газов в микроканалах технических систем в условиях многих масштабов расчетной области. В качестве примера рассмотрена задача о течении азота в никелевом микроканале. Различия в масштабах расчетной области (длина канала, поперечное сечение канала, длина свободного пробега молекул, толщина пограничного слоя) и приповерхностное взаимодействие газа с металлом приводят к необходимости учитывать рельеф и свойства микроканала на молекулярном уровне и требуют использования многомасштабных моделей и, вследствие этого, высокопроизводительных вычислителей.

Рассмотрен многомасштабный подход, сочетающий уравнения квазигазодинамики (КГД) и метод молекулярной динамики (МД). Общий алгоритм представляет собой расщепление по физическим процессам. КГД-система уравнений решается методом конечных объемов. Система уравнений МД используется в качестве подсеточного алгоритма, применяющегося внутри каждого контрольного объема, и решается с помощью схемы Верле. В МД-вычислениях взаимодействие частиц описывается с помощью потенциалов, определяющих основные свойства компонентов системы.

Параллельная реализация подхода тоже основана на методах расщепления по физическим процессам и разделению областей. Реализация ориентирована на использование вычислительных систем с центральной и гибридной архитектурами. Были использованы такие технологии параллельного программирования, как MPI, OpenMP и CUDA.

Предварительные расчеты показали, что общий численный алгоритм устойчив к использованию корректирующих течений данных, полученных в результате МД-вычислений. С его помощью методами МД были получены основные коэффициентные зависимости для КГД-системы, проверен переход от МД к КГД и обратно, произведен расчет трехмерного течения. Тесты на эффективность распараллеливания показали хорошие результаты. Однако некоторые проблемы реализации еще остаются, например высокие требования к объему используемой оперативной памяти.

Оценивая результаты работы в целом, можно отметить, что разработанная методика требует дальнейшего развития и оптимизации, поскольку в настоящий момент с ее помощью можно моделировать трехмерные микросистемы реальной геометрии весьма ограниченной длины (не более 100 мкм). Одним из способов предполагаемой нами оптимизации вычислений является накопление базы данных по свойствам металлов и газов (рассчитываемой тоже с помощью МД-моделирования). Это позволит существенно сократить МД-вычисления в ячейках сетки, далеко отстоящих от границ области, за счет старта этих расчетов с состояний, близких к точкам равновесия. Другим способом ускорения и оптимизации расчетов является выделение пограничного слоя в отдельную часть расчетной области, обрабатываемую на спецвычислителях (ВПУ, ГПУ, ПЛИС и др.). Здесь возможна реализация непрерывного цикла обработки на существенно большем количестве вычислителей по сравнению с количеством вычислителей, занятых в расчетах основной объемной части. Выигрышем от такого подхода будет более точный общий баланс загрузки вычислителей, а также возможность более точного расчета процессов в пограничном слое.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты 15-07-06082-а и 15-29-07090-офи_м).

Статья рекомендована к публикации Программным комитетом Международной научной конференции «Параллельные вычислительные технологии» (ПаВТ-2016; <http://agora.guru.ru/pavt2016>).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Алхимов А.П., Кличков С.В., Косарев В.Ф., Фомин В.М. Холодное газодинамическое напыление. Теория и практика. М.: Физматлит, 2010.
2. Resnick D. Nanoimprint lithography // Nanolithography. The Art of Fabricating Nanoelectronic and Nanophotonic Devices and Systems. Cambridge: Woodhead Publishing, 2014. 315–347.
3. Подрыга В.О. Моделирование процесса установления термодинамического равновесия методом молекулярной динамики // Математическое моделирование. 2010. **22**, № 11. 39–48.
4. Подрыга В.О., Поляков С.В. Молекулярно-динамическое моделирование процесса установления термодинамического равновесия нагретого никеля. Препринт № 41. М.: ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 2014.
5. Подрыга В.О., Поляков С.В. Молекулярно-динамическое моделирование установления термодинамического равновесия в никеле // Математическое моделирование. 2015. **27**, № 3. 3–19.
6. Подрыга В.О. Определение макропараметров реального газа методами молекулярной динамики // Математическое моделирование. 2015. **27**, № 7. 80–90.

7. Подрыга В.О., Поляков С.В., Пузырьков Д.В. Суперкомпьютерное молекулярное моделирование термодинамического равновесия в микросистемах газ-металл // Вычислительные методы и программирование. 2015. **16**. 123–138.
8. Подрыга В.О., Поляков С.В., Жаховский В.В. Атомистический расчет перехода в термодинамическое равновесие азота над поверхностью никеля // Математическое моделирование. 2015. **27**, № 7. 91–96.
9. Кудряшова Т.А., Поляков С.В. Модель сверхзвукового течения бинарного газа // Mathematica Montisnigri. 2012. **24**. 120–127.
10. Кудряшова Т.А., Подрыга В.О., Поляков С.В. Моделирование течений газовых смесей в микроканалах // Вестник РУДН. Серия: Математика. Информатика. Физика. 2014. № 3. 154–163.
11. Карамзин Ю.Н., Кудряшова Т.А., Поляков С.В. Суперкомпьютерное моделирование нелинейных процессов в технических микросистемах // Тр. XX Международной конференции “Сеточные методы для краевых задач и приложений”. Казань: Казанский федеральный университет, 2014. 367–374.
12. Карамзин Ю.Н., Кудряшова Т.А., Подрыга В.О., Поляков С.В. Многомасштабное моделирование нелинейных процессов в технических микросистемах // Математическое моделирование. 2015. **27**, № 7. 65–74.
13. Molecular-dynamics simulation of statistical-mechanical systems / Edited by G. Ciccotti and W. G. Hoover. Amsterdam: Elsevier, 1986.
14. Haile J.M. Molecular dynamics simulations: elementary methods. New York: Wiley, 1992.
15. Frenkel D., Smit B. Understanding molecular simulation: from algorithm to applications. San Diego: Academic Press, 2002.
16. 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.
17. 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.
18. Норман Г.Э., Стегайлов В.В. Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // Математическое моделирование. 2012. **24**, № 6. 3–44.
19. Elizarova T.G. Quasi-gas dynamic equations. Heidelberg: Springer, 2009.
20. Garzó V., Santos A., Brey J.J. A kinetic model for a multicomponent gas // J. Phys. Fluids A. 1989. Vol. 1, N 2. 380–383.
21. Елизарова Т.Г., Злотник А.А., Четверушкин Б.Н. О квазигазо- и гидродинамических уравнениях бинарных смесей газов // Доклады Академии наук. 2014. **459**, № 4. 395–399.
22. Bird G.A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. Oxford: Clarendon Press, 1994.
23. Buddenberg J.W., Wilke C.R. Calculation of gas mixture viscosities // Ind. Eng. Chem. 1949. **41**, N 7. 1345–1347.
24. Wilke C.R. A viscosity equation for gas mixtures // J. Chem. Phys. 1950. **18**, N 4. 517–519.
25. Дорофеев А.А. Основы теории тепловых ракетных двигателей. Теория, расчет и проектирование. М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2014.
26. Брунауэр С. Адсорбция газов и паров. Том 1. Физическая адсорбция. М.: ГИИЛ, 1948.
27. Абрамович Г.Н. Прикладная газовая динамика. Ч. 1. М.: Наука, 1991.
28. Mie G. Zur kinetischen Theorie der Einatomigen Körper // Ann. Phys. 1903. **11**, N 8. 657–697.
29. 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.
30. 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.
31. 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.
32. Lennard-Jones J.E. Cohesion // Proceedings of the Physical Society. 1931. **43**, N 5. 461–482.
33. Lorentz H.A. Über die Anwendung des Satzes vom Virial in der Kinetischen Theorie der Gase // Ann. Phys. 1881. **248**. 127–136.
34. Berthelot D. Sur le Mélange des Gaz // Comptes Rendus de L’Academie des Sciences. 1889. **126**. 1703–1706.
35. Morse P.M. Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels // Phys. Rev. 1929. **34**. 57–64.
36. Maruyama S. Molecular dynamics method for microscale heat transfer // Advances in Numerical Heat Transfer. Vol. 2. New York: Taylor and Francis, 2000. 189–226.
37. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Т. 2. Термодинамика и молекулярная физика. М.: Наука, 1975.
38. 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**. 3684–3690.
39. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в компьютерной физике. М.: Наука, 1990.
40. Фрязинов И.В. Метод баланса и вариационно-разностные схемы // Дифференциальные уравнения. 1980. **16**, № 7. 1332–1343.
41. Самарский А.А., Колдоба А.В., Повещенко Ю.А., Тишкин В.Ф., Фаворский А.П. Разностные схемы на нерегулярных сетках. Минск: Критерий, 1996.
42. Eymard R., Gallouet T.R., Herbin R. The finite volume method // Handbook of Numerical Analysis. Vol. 7.

- Amsterdam: North Holland, 2000. 713–1020.
43. Попов И.В., Фрязинов И.В. Метод адаптивной искусственной вязкости для уравнений газовой динамики на треугольных и тетраэдральных сетках // Математическое моделирование. 2012. **24**, № 6. 109–127.
 44. Verlet L. Computer “experiments” on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard–Jones molecules // Phys. Rev. 1967. **159**. 98–103.
 45. Toselli A., Widlund O. Domain decomposition methods — algorithms and theory. Berlin: Springer, 2005.
 46. 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.
 47. Официальная документация и учебные пособия по MPI. <http://www.mcs.anl.gov/research/projects/mpi/>.
 48. Официальная документация и учебные пособия по OpenMP. <http://www.llnl.gov/computing/tutorials/openMP>.
 49. CUDA Toolkit Documentation. <http://docs.nvidia.com/cuda/index.html>.
 50. Karypis G., Kumar V. METIS: a software package for partitioning unstructured graphs, partitioning meshes, and computing fill-reducing orderings of sparse matrices. <https://pdfs.semanticscholar.org/cdd7/c53628f8e5aac90bb2f3f6d3539b9ed1a20e.pdf>.
 51. Karypis G., Schloegel K. ParMETIS: parallel graph partitioning and sparse matrix ordering library. <https://www.researchgate.net/publication/238705993>.

Поступила в редакцию
12.04.2016

Parallel Implementation of Multiscale Approach to the Numerical Study of Gas Microflows

V. O. Podryga¹ and S. V. Polyakov²

¹ *Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences; Miusskaya ploshchad' 4, Moscow, 125047, Russia; Ph.D., Senior 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*

Received April 12, 2016

Abstract: This paper is devoted to a parallel implementation of multiscale approach to the numerical study of gas flows in microchannels of complex technical systems. The multiscale approach combines the solutions of quasigasdynamic (QGD) equations and molecular dynamics (MD) equations. The proposed parallel implementation of this approach is based on the method of splitting into physical processes and the domain decomposition method. The implementation is oriented for using computer systems with central and hybrid architectures. The developed parallel algorithms show a good scalability. The obtained results confirm the efficiency of the approach under consideration. This approach was used to find the basic coefficient dependences for the QGD system by MD methods and to study a three-dimensional gas flow numerically.

Keywords: gas dynamics, molecular dynamics, parallel algorithms and programs, microchannels, multiscale computations, supercomputing simulation,

References

1. 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).
2. D. Resnick, “Nanoimprint Lithography,” in *Nanolithography. The Art of Fabricating Nanoelectronic and Nanophotonic Devices and Systems* (Woodhead Publ., Cambridge, 2014), pp. 315–347.
3. V. O. Podryga, “Molecular Dynamics Method for Simulation of Thermodynamic Equilibrium,” *Mat. Model.* **22** (11), 39–48 (2010) [*Math. Models Comput. Simul.* **3** (3), 382–388 (2011)].
4. 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).
5. V. O. Podryga and S. V. Polyakov, “Molecular Dynamic Simulation of Thermodynamic Equilibrium Establishment in Nickel,” *Mat. Model.* **27** (3), 3–19 (2015) [*Math. Models Comput. Simul.* **7** (5), 456–466 (2015)].

6. V. O. Podryga, "Determination of Real Gas Macroparameters by Molecular Dynamics," *Mat. Model.* **27** (7), 80–90 (2015).
7. V. O. Podryga, S. V. Polyakov, and D. V. Puzyrkov, "Supercomputer Molecular Modeling of Thermodynamic Equilibrium in Gas–Metal Microsystems," *Vychisl. Metody Programm.* **16**, 123–138 (2015).
8. V. O. Podryga, S. V. Polyakov, and V. V. Zhakhovskii, "Atomistic Calculation of the Nitrogen Transitions in Thermodynamic Equilibrium over the Nickel Surface," *Mat. Model.* **27** (7), 91–96 (2015).
9. T. A. Kudryashova and S. V. Polyakov, "A Model of Supersonic Binary Gas Flow," *Mathematica Montisnigri* **24**, 120–127 (2012).
10. T. A. Kudryashova, V. O. Podryga, and S. V. Polyakov, "Simulation of Gas Mixture Flows in Microchannels," *Vestn. Peoples' Friendship Univ. Ser. Mat. Inf. Phys.*, No. 3, 154–163 (2014).
11. Yu. N. Karamzin, T. A. Kudryashova, and S. V. Polyakov, "Supercomputer Simulation of Nonlinear Processes in Technical Microsystems," in *Proc. 10th Int. Conf. on Mesh Methods for Boundary-Value Problems and Applications, Kazan, Russia, September 24–29, 2014* (Kazan Federal Univ., Kazan, 2014), pp. 367–374.
12. Yu. N. Karamzin, T. A. Kudryashova, V. O. Podryga, and S. V. Polyakov, "Multiscale Simulation of Nonlinear Processes in Technical Microsystems," *Mat. Model.* **27** (7), 65–74 (2015).
13. G. Ciccotti and W. G. Hoover (Eds.), *Molecular-Dynamics Simulation of Statistical-Mechanical Systems* (Elsevier, Amsterdam, 1986).
14. J. M. Haile, *Molecular Dynamics Simulations: Elementary Methods* (Wiley, New York, 1992).
15. D. Frenkel and B. Smit, *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications* (Academic, San Diego, 2002).
16. 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.
17. 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.
18. 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)].
19. T. G. Elizarova, *Quasi-Gas Dynamic Equations* (Springer, Heidelberg, 2009).
20. V. Garzó, A. Santos, and J. J. Brey, "A Kinetic Model for a Multicomponent Gas," *Phys. Fluids A* **1** (2), 380–383 (1989).
21. T. G. Elizarova, A. A. Zlotnik, and B. N. Chetverushkin, "On Quasi-Gasdynamic and Quasi-Hydrodynamic Equations for Binary Gas Mixtures," *Dokl. Akad. Nauk* **459** (4), 395–399 (2014) [*Dokl. Math.* **90** (3), 719–723 (2014)].
22. G. A. Bird, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows* (Clarendon, Oxford, 1994).
23. J. W. Buddenberg and C. R. Wilke, "Calculation of Gas Mixture Viscosities," *Ind. Eng. Chem.* **41** (7), 1345–1347 (1949).
24. C. R. Wilke, "A Viscosity Equation for Gas Mixtures," *J. Chem. Phys.* **18** (4), 517–519 (1950).
25. A. A. Dorofeev, *Fundamentals of Theory of Heat Rocket Engines: Theory, Calculation, and Design* (Bauman Tech. Univ., Moscow, 2014) [in Russian].
26. S. Brunauer, *Adsorption of Gases and Vapors* (Princeton Univ. Press, Princeton, 1945; Inostrannaya Literatura, Moscow, 1948).
27. G. N. Abramovich, *Applied Gas Dynamics* (Nauka, Moscow, 1991), Part 1 [in Russian].
28. G. Mie, "Zur Kinetischen Theorie der Einatomigen Körper," *Ann. Phys.* **11** (8), 657–697 (1903).
29. 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)].
30. 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).
31. 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).
32. J. E. Lennard-Jones, "Cohesion," *Proc. Phys. Soc.* **43** (5), 461–482 (1931).
33. H. A. Lorentz, "Über die Anwendung des Satzes vom Virial in der Kinetischen Theorie der Gase," *Ann. Phys.* **248**, 127–136 (1881).
34. D. Berthelot, "Sur le Mélange des Gaz," *C. R. Acad. Sci.* **126**, 1703–1706 (1889).
35. P. M. Morse, "Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels," *Phys.*

Rev. **34**, 57–64 (1929).

36. S. Maruyama, “Molecular Dynamics Method for Microscale Heat Transfer,” in *Advances in Numerical Heat Transfer* (Taylor and Francis, New York, 2000), Vol. 2, pp. 189–226.

37. D. V. Sivukhin, *The General Course of Physics*, Vol. 2: *Thermodynamics and Molecular Physics* (Nauka, Moscow, 1975) [in Russian].

38. 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**, 3684–3690 (1984).

39. D. W. Heermann, *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics* (Springer, Berlin, 1986; Nauka, Moscow, 1990).

40. I. V. Fryazinov, “The Balance Method and Variational-Difference Schemes,” *Differ. Uravn.* **16** (7), 1332–1343 (1980).

41. A. A. Samarskii, A. V. Koldoba, Yu. A. Poveshchenko, V. F. Tishkin, and A. P. Favorskii, *Difference Schemes on Irregular Grids* (Kriterii, Minsk, 1996) [in Russian].

42. R. Eymard, T. R. Gallouet, and R. Herbin, “The Finite Volume Method,” in *Handbook of Numerical Analysis* (North Holland, Amsterdam, 2000), Vol. 7, pp. 713–1020.

43. I. V. Popov and I. V. Fryazinov, “Method of Adaptive Artificial Viscosity for the Equations of Gas Dynamics on Triangular and Tetrahedral Grids,” *Mat. Model.* **24** (6), 109–127 (2012) [Math. Models Comput. Simul. **5** (1), 50–62 (2013)].

44. L. Verlet, “Computer ‘Experiments’ on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard–Jones Molecules,” *Phys. Rev.* **159**, 98–103 (1967).

45. A. Toselli and O. B. Widlund, *Domain Decomposition Methods — Algorithms and Theory* (Springer, Berlin, 2005).

46. 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., Ser. Tekh. Nauki*, No. 6, 105–115 (2012).

47. The Message Passing Interface (MPI) Standard. <http://www.mcs.anl.gov/research/projects/mpi>. Cited April 15, 2016.

48. The OpenMP API Specification for Parallel Programming. Tutorials. <http://www.llnl.gov/computing/tutorials/openMP>. Cited April 15, 2016.

49. CUDA Toolkit Documentation. <http://docs.nvidia.com/cuda/index.html>. Cited April 15, 2016.

50. G. Karypis and V. Kumar, *METIS: A Software Package for Partitioning Unstructured Graphs, Partitioning Meshes, and Computing Fill-Reducing Orderings of Sparse Matrices*. <https://pdfs.semanticscholar.org/cdd7/c53628f8e5aac90bb2f3f6d3539b9ed1a20e.pdf>. Cited April 15, 2016.

51. G. Karypis and K. Schloegel, *ParMETIS: Parallel Graph Partitioning and Sparse Matrix Ordering Library*. <https://www.researchgate.net/publication/238705993>. Cited April 15, 2016.