



Российская Академия Наук

Отделение математических наук

В.О. Подрыга, С.В. Поляков

**Многомасштабный трехуровневый
подход к решению задач
нанотехнологий**

Москва 2017

УДК 510
ББК 22.17
П44

Аннотация: Работа посвящена многомасштабному трехуровневому подходу к решению задач нанотехнологии с помощью суперкомпьютерных вычислительных систем. В основе подхода лежит объединение моделей механики сплошной среды и динамики Ньютона для отдельных частиц. Подход охватывает три масштабных уровня: макроскопический, мезоскопический и микроскопический. Применительно к системам газ – металл в качестве модели на макроскопическом уровне используются квазигидродинамические уравнения в газовой и твердой фазах. В качестве моделей на мезо- и микроуровнях используются уравнения динамики Ньютона. Численная реализация подхода основана на методе расщепления по физическим процессам и опирается на четыре класса алгоритмов. Технология распараллеливания основана на принципах геометрического параллелизма и рационального разбиения расчетной области. Апробация подхода выполнена на примере задачи о течении струи азота из баллона с высоким давлением через микросопло в микроканал и далее в вакуумную камеру. Полученные результаты подтверждают высокую эффективность разработанной методологии.

Podryga V.O., Polyakov S.V. Multiscale three-level approach to solution of nanotechnology problems – Moscow, Russian Academy of Sciences, 2017.

Abstract: This work is devoted to multiscale multilevel approach for solution of nanotechnology problems by supercomputer systems. The approach is based on combining the continuum mechanics models and the Newton's dynamics for individual particles. This combination includes three scale levels such as macroscopic, mesoscopic and microscopic levels. For gas - metal technical systems the following models are used. The quasihydrodynamic equations are used as a mathematical model at the macrolevel for gas and solid states. The Newton's equations are used as a mathematical model at the meso- and microlevels. Numerical implementation of the approach is based on the method of splitting into physical processes and it utilizes four classes of algorithms. Parallelization technology is based on the principles of geometric parallelism and efficient partitioning the computational domain. Special dynamic algorithm is used for load balancing the solvers. The testing of developed approach was made by the example of the nitrogen outflow from balloon with high pressure to vacuum chamber through the micronozzle and microchannel. Obtained results confirm the high efficiency of the developed methodology.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты 16-07-00206-а, 16-37-00417-мол-а, 17-01-00973-а.

ISBN 978-5-906906-65-6

© Российская академия наук, 2017
© В.О. Подрыга, С.В. Поляков, 2017

Многомасштабный трехуровневый подход к решению задач нанотехнологий

В.О. Подрыга, С.В. Поляков

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 часто приводит к задачам динамики молекулярных систем большой размерности с большим набором неопределенных параметров и разнообразных условий, имитирующих физический эксперимент. С развитием нанотехнологий особый интерес представляют течения газовых смесей в микро- и наноканалах.

Современная вычислительная техника позволяет моделировать очень большие и сложные системы и процессы. Компьютерное моделирование стало одним из наиболее эффективных инструментов во многих отраслях науки и производства. Настоящая работа посвящена развитию и применению компьютерных методов в области исследования сложных газодинамических процессов в технических микро- и наносистемах. Особенностью математических задач в данной области является одновременное изучение процессов на многих масштабах, включая микро- и наноуровни. Одним из современных и активно развивающихся подходов решения таких задач является многомасштабный подход, сочетающий в себе методы механики сплошной среды (МСС) и методы частиц. Такое сочетание позволяет заменить дорогостоящий и трудно реализуемый физический эксперимент компьютерными вычислениями.

В представляемой работе рассматривается один из аспектов моделирования технических микросистем, связанный с расчетами параметров микротечений газов в условиях технического вакуума. Для правильного описания таких процессов необходимо знание свойств реальных газов и воспроизведение их в численном

эксперименте. Здесь следует отметить, что отдельные свойства газов хорошо изучены экспериментально в определенных диапазонах температур и давлений и описаны в литературе. Однако имеются свойства, которые можно предсказать лишь теоретически на основе кинетической теории газов [1]. При этом получаемые теоретические данные соответствуют весьма ограниченному диапазону температур и давлений и могут сильно отличаться от реальных свойств газа. Одним из способов получения недостающей информации о свойствах газовой среды в заданном диапазоне температур и давлений является молекулярно-динамическое моделирование [2, 3].

В работах [4-6] был представлен многомасштабный двухуровневый подход к расчетам течений реальных газов в микроканалах технических систем, применяющийся в широком диапазоне чисел Кнудсена. На молекулярном уровне он позволяет определить параметры уравнения состояния реального газа [7, 8], рассчитать кинетические свойства газа [9, 10], определить вид граничных условий на стенках микроканала [5, 6, 10]. Данный подход основан на объединении моделей МСС и динамики Ньютона для отдельных частиц и включает два уровня моделирования: макроскопический и микроскопический. В качестве модели на макроуровне в нем используется система квазигазодинамических (КГД) [11] уравнений, в качестве модели микроуровня – метод молекулярной динамики (МД) [2, 3]. Реализация подхода основана на расщеплении по физическим процессам. На макроуровне детализации происходит описание течений многокомпонентных газовых сред. На микроуровне рассчитываются взаимодействия: 1) молекул газа между собой (формирующие уравнение состояния смеси, определяющие транспортные коэффициенты и реализующие перемешивание компонент); 2) молекул газа и атомов твердых поверхностей (описывающие явления в погранслоях).

В данной работе представляется расширение подхода в виде многомасштабного трехуровневого подхода к решению задач нанотехнологии с помощью суперкомпьютерных вычислительных систем. Такое объединение охватывает три масштабных уровня: макроскопический, мезоскопический и микроскопический. Для его реализации на мезоскопическом уровне добавляется расчет движений крупных частиц в потоке газа, а на микроуровне рассчитываются взаимодействия молекул газа с поверхностью частиц. Введение в рассмотрение мезоскопического уровня позво-

ляет отследить детальное поведение отдельных крупных частиц, например, в процессе их напыления на подложку в целях создания заданной пространственной наноструктуры.

Математическая формулировка

Математическая модель включает три компоненты, соответствующие масштабным уровням.

На макроскопическом уровне используются КГД уравнения. В случае смеси газов система КГД уравнений записывается для каждого газа отдельно и имеет одинаковый вид [11]. Запишем эти уравнения в трехмерном случае для смеси газов в инвариантном относительно системы координат виде в размерных переменных вместе с уравнениями связей и состояния [12]:

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

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

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

$$E_l = \frac{1}{2} \rho_l |\mathbf{u}_l|^2 + \rho_l \varepsilon_l, \quad \varepsilon_l = c_{v,l} T_l, \quad H_l = \frac{E_l + p_l}{\rho_l}, \quad p_l = Z_l \rho_l \mathfrak{R}_l T_l, \quad (4)$$

$$\gamma_l = \frac{c_{p,l}}{c_{v,l}}, \quad \operatorname{Pr}_l = \frac{\mu_l c_{p,l}}{\chi_l}, \quad \operatorname{Sc}_l = \frac{\mu_l}{\rho_l D_l}, \quad \operatorname{Ma}_l = \frac{|\mathbf{u}_l|}{a_l}, \quad \operatorname{Re}_l = \frac{\rho_l |\mathbf{u}_l| \lambda_l}{\mu_l}.$$

Здесь все переменные с индексом l относятся к газу типа l , каждая компонента имеет свои числовую плотность (концентрацию) n_l , массовую плотность $\rho_l = m_l n_l$ (m_l – масса молекул газа l). Каждый газ характеризуется своей температурой T_l и макроскопической скоростью \mathbf{u}_l . Другие параметры компонент смеси: P_l – парциальные давления газов в смеси; E_l , H_l и ε_l – плотности полной энергии, энтальпии и внутренние энергии компонент смеси; $\mu_l = \mu_l(T_l)$, $D_l = D_l(T_l)$, $\chi_l = \chi_l(T_l)$ – кинетические коэффициенты компонент смеси, а именно: коэффициенты динамической вязкости, диффузии и теплопроводности. Переменные $Z_l = Z_l(T_l, \rho_l)$, $\gamma_l = \gamma_l(T_l, \rho_l)$, $\tilde{n}_{v,l} = \tilde{n}_{v,l}(T_l)$, $\tilde{n}_{p,l} = \tilde{n}_{p,l}(T_l)$ и

$\mathfrak{R}_l = k_B / m_l$ – коэффициенты сжимаемости, показатели адиабат, удельные теплоемкости и индивидуальные газовые постоянные компонент смеси (k_B – постоянная Больцмана), Pr_l , Sc_l , Ma_l и Re_l – числа Прандтля, Шмидта, Маха и Рейнольдса для компонент смеси; λ_l – средние длины свободного пробега; векторы $\mathbf{W}_l^{(\rho)}$, $\mathbf{W}_l^{(\rho u)}$, $\mathbf{W}_l^{(E)}$ с точностью до знака совпадают с потоками плотности, соответствующих компонент плотности импульса и плотности энергии, div – оператор дивергенции. Обменные члены $S_{l,k}^{(\rho u)}$ и $S_l^{(E)}$ учитывают перераспределения импульса и энергии между компонентами смеси.

Система уравнений (1)–(4) замыкается соответствующими начальными и граничными условиями. Начальные условия берутся в соответствии с равновесным состоянием газовой среды в отсутствие взаимодействия с внешними факторами. Граничные условия на твердых поверхностях задаются в виде потоков массовой плотности, плотности импульса и плотности энергии через границу, вычисленных по эмпирическим формулам либо рассчитанным с помощью методов молекулярной динамики [4–6]. На свободных поверхностях расчетной области задаются так называемые «мягкие» граничные условия [11].

На микроуровне эволюция исследуемой системы описывается уравнениями Ньютона для системы частиц. Система уравнений движения частиц сорта l , которые могут быть и газом, и металлом, имеет следующий вид:

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

где i – номер частицы, l – тип частиц, N_l – полное число атомов типа l . Частица типа l с номером i имеет свою массу $m_{l,i}$, радиус-вектор $\mathbf{r}_{l,i} = (r_{x,l,i}, r_{y,l,i}, r_{z,l,i})$, вектор скорости $\mathbf{v}_{l,i} = (v_{x,l,i}, v_{y,l,i}, v_{z,l,i})$ и суммарную силу $\mathbf{F}_{l,i} = (F_{x,l,i}, F_{y,l,i}, F_{z,l,i})$, действующую 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. Потенциальная энергия системы представляется в виде суммы парциальных энергий, вычисление которых происходит

по формуле выбранного потенциала взаимодействия.

$$\mathbf{F}_{l,i} = -\frac{\partial U(\mathbf{r}_{l,1}, \dots, \mathbf{r}_{l,N_l})}{\partial \mathbf{r}_{l,i}} + \mathbf{F}_{l,i}^{ext}, \quad U = \sum U_{ll'}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad (6)$$

где U – суммарная потенциальная энергия системы, $U_{ll'}$ – потенциал взаимодействия частиц типа l с частицами типа l' , $\mathbf{F}_{l,i}^{ext}$ – сила взаимодействия i -й частицы типа l с внешней средой. Выбор потенциала взаимодействия основывается на сравнении механических свойств компьютерной модели потенциала и реального материала.

Начальные условия на микроуровне определяются равновесным или квазиравновесным термодинамическим состоянием системы частиц при заданных температуре, давлении и среднем импульсе. Граничные условия на молекулярном уровне зависят от моделируемой ситуации.

На мезоскопическом уровне при наличии в газовой смеси мелкодисперсных твердых примесей одинакового химического состава используется диффузионное приближение, в котором главной неизвестной величиной является концентрация частиц \tilde{N} . Для нее обычно записывается следующее нелинейное уравнение конвекции – диффузии:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \text{div}(D_C \nabla C - \mu_C \mathbf{F}_C C) + (\mathbf{u}, \nabla C), \quad (7)$$

где $D_{\tilde{N}}$, $\mu_{\tilde{N}}$ – коэффициенты диффузии и подвижности частиц примеси, $\mathbf{F}_{\tilde{N}}$ – суммарная сила, действующая на частицы и рассчитываемая на молекулярном уровне, \mathbf{u} – средняя скорость течения газовой смеси. Начальные условия для уравнения (7) состоят в задании постоянной и, как правило, очень малой концентрации частиц во всем свободном пространстве. Граничные условия на твердых стенках определяются выбранной моделью взаимодействия (прилипание, отражение, скольжение и т.д.). Граничные условия на входе в среду состоят в задании потока частиц. На выходе используются «мягкие» граничные условия.

При необходимости отследить движения отдельных крупных частиц (существенно превышающих размеры молекул газовой среды) вместе с уравнениями (7) используются уравнения, аналогичные (5), (6).

Численный подход

Численная реализация подхода основана на методе расщепления по физическим процессам. При этом уравнения квазигидродинамики (1)–(4) и уравнения (7) решаются методом конечных объемов на сетках различного типа. Уравнения динамики Ньютона решаются по схеме Верле либо в каждой ячейке сетки независимо, либо в группах связанных ячеек.

Расчет макропараметров по КГД уравнениям (1)–(3) и уравнению (7) осуществляется при помощи явного по времени сеточного численного алгоритма, имеющего в своей основе метод конечных объемов [13–14] на сетках произвольного вида. Для удобства решения задачи в областях сложной геометрии можно использовать гибридные блочные сетки, состоящие из ячеек различной формы и размера. В двумерном случае предлагается использовать четырехугольники и треугольники, в трехмерном случае – многогранники с числом вершин от четырех до восьми. Все параметры компонент газа (плотности, давления, температуры, компоненты вектора скорости и т.д.) относятся к центрам масс ячеек. Поточковые переменные относятся к центрам граней ячеек. Пространственные аппроксимации основных членов КГД уравнений выполняются по стандартным методикам. Вычислительная схема по времени выбирается явной и двухэтапной (редиктор–корректор).

Система уравнений МД используется в дополнительных вычислениях самостоятельно, либо в качестве подсеточного алгоритма, применяющегося внутри каждого контрольного объема. На микроскопическом уровне на каждом шаге моделирования решается система обыкновенных дифференциальных уравнений, соответствующая второму закону Ньютона и описывающая движение частиц молекулярно-динамической системы. Для интегрирования уравнений движений используется схема Верле [15].

Для проведения корректного расчета КГД модель дополняется реальными уравнениями состояния газа, транспортными коэффициентами и другими сопутствующими параметрами (энтальпии, средние длины пробега и т.д.), а также реальными граничными условиями. В случае смеси газов необходимо добавить в уравнения для импульса и энергии каждой компоненты соответствующие обменные члены. Вычисление указанных зависимостей, коэффициентов и условий выполняется с помощью методов МД.

Алгоритмы и программная реализация

Моделирование задач на основе рассматриваемого многомасштабного подхода с тремя уровнями детализации выполняется с помощью специальных алгоритмов, которые в общем виде в зависимости от степени использования микроуровня делятся на четыре класса.

Алгоритмы класса 1 предполагают изучение методами МД свойств газовых сред и свойств твердых поверхностей, с которыми контактирует газовая среда в технических приложениях. В качестве численной реализации подхода в этом случае выступает конечно-разностная схема Верле в скоростной форме. С помощью алгоритмов класса 1 осуществляется накопление базы данных молекулярно-динамических расчетов (БДМР) свойств газов и твердых материалов, которая может использоваться в рамках других алгоритмов. Алгоритмы класса 1 использовались, например, в работах [8, 10, 16–19].

Алгоритмы класса 2 предполагают решение задач только на макро- и мезоуровнях на основе КГД уравнений (1)–(3) и уравнения конвекции–диффузии (7). При этом свойства компонент газовой смеси (уравнения состояния по давлению и энергии, кинетические коэффициенты – вязкость и теплопроводность, обменные члены в уравнениях для импульса и энергии, параметры граничных условий) и кинетические коэффициенты для уравнения (7) определяются из указанной выше БДМР, накопленной заранее для нужного диапазона температур и давлений. Такие расчеты проводились, например, в работах [12, 20].

Алгоритмы класса 3 предполагают одновременное использование в расчетах КГД уравнений (1)–(3), уравнения (7) и уравнений механики Ньютона (5), (6). Алгоритмы класса 3 реализуются в рамках метода расщепления по физическим процессам. При этом предполагается, что в газовой среде и на ее границах можно ограничиться локальным рассмотрением процессов взаимодействия газов смеси между собой, с поверхностями крупных частиц и с твердыми стенками. По алгоритмам класса 3 велись расчеты в работах [21, 22].

Алгоритмы класса 4 также предполагают одновременное использование в расчетах уравнений (1)–(3), (7) и (5), (6). Отличием данного случая от предыдущего является то, что в некоторых областях среды (обычно на твердых поверхностях и в зонах сильно-

го перепада параметров газа) молекулярно-динамические расчеты проводятся постоянно без перехода на макроуровень. В этих же областях не используется принцип локальности молекулярных взаимодействий, то есть в общем случае алгоритмы класса 4 являются нелокальными на молекулярном уровне. Алгоритмы класса 4 использовались в расчетах, например, в работе [23].

Технология параллелизации основана на принципах геометрического параллелизма и рационального разбиения расчетной области. Для балансировки загрузки вычислителей используется динамический алгоритм. Программная реализация выполнена в технологии MPI + OpenMP.

Результаты расчетов

Апробация подхода выполнена на примере задачи о течении струи азота из баллона с высоким давлением через микросопло в микроканал и далее в вакуумную камеру. Расчетная геометрия показана на Рис. 1. Цилиндрическое микросопло имеет прямоугольную форму в поперечнике, диаметр $D_0 \approx 6.2 \text{ мкм}$ и длину $L_0 = 6D_0 \approx 37.2 \text{ мкм}$. Размеры расчетной области в баллоне равны $D_1 = 6D_0$ и $L_1 = 10L_0 = 60D_0$. Диаметр и длина микроканала равны $D_2 = 6D_0$ и $L_2 = 50L_0 = 300D_0$. Сопло и микроканал соединяют баллон с азотом и открытое пространство вакуумной камеры. Мы предполагаем, что все твердые поверхности микросистемы покрыты слоем никеля. В качестве крупных частиц рассматривались кластеры меди правильной кубической формы с линейным размером 10.83 нм ($30 \times 30 \times 30$ элементарных ячеек с длиной ребра ГЦК решетки 0.361 нм).

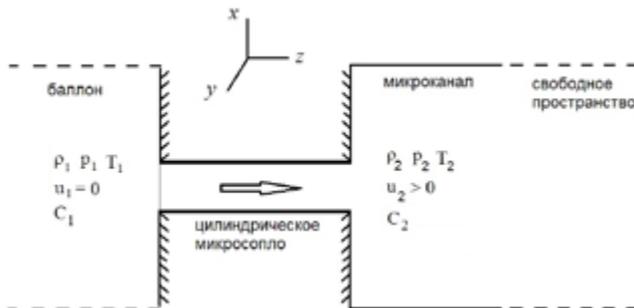


Рис. 1. Геометрия прикладной задачи.

В начальный момент газ покоится: $u_1 = u_2 = 0$. При этом в баллоне газ находится при стандартных нормальных условиях: $T_1 = 295.15 \text{ K}$, $p_1 = 101325 \text{ Па}$; в сопле, микроканале и вакуумной камере газ находится при той же температуре, но при более низком давлении: $T_2 = 295.15 \text{ K}$, $p_2 = 10^{-5} p_1$. Сопло слева перекрыто перегородкой, которая в начале расчета открывается мгновенно. Внутренняя поверхность сопла считается идеально гладкой и теплоизолированной.

Расчеты были выполнены по алгоритму класса 2 и были направлены на исследование параметров течения на начальном этапе разгона струи. Они показали, что внутренняя энергия газа в баллоне в течение определенного промежутка времени постепенно преобразуется в кинетическую энергию газа в сопле и в канале. При этом по газовой среде проходит тепловая ударная волна. Впоследствии температура газа возвращается к норме и профили всех макропараметров газа выравниваются.

В качестве иллюстрации сказанного на Рис. 2, 3 показаны распределения плотности, концентрации молекул, температуры и локального (местного) числа Маха в газе вдоль оси симметрии расчетной области для ряда моментов времени. Двумерные распределения концентрации молекул газа и модуля скорости показаны на Рис. 4. Они показывают общую картину течения вблизи сопла и входа в микроканал в момент времени $t = 13.26 \text{ мкс}$, когда разгон газа уже прекратился, и установилось регулярное течение.

На Рис. 5 показаны траектории кластеров меди, рассчитанные в случае запуска одиночных частиц. Кластеры помещались в середину расчетной области баллона с нулевой скоростью. Поток газа, увлекаемый через сопло в камеру, разгонял их до максимальной скорости, равной средней скорости течения. Рассчитанные траектории в целом соответствуют теоретическим оценкам. Однако при этом не учитывалась сила тяжести. Еще более точная картина в перспективе будет получена при учете этой силы, а также структуры поверхности кластеров и стенок сопла и микроканала.

В дополнение к приведенным выше результатам было проведено прямое молекулярное моделирование течения газа в микросопле. В проведенных расчетах изучались два вопроса: 1) возможности суперкомпьютерного моделирования больших молекулярных систем, 2) особенности микротечения в рамках МД модели.

В качестве суперкомпьютера использовался кластер К60 ИПМ им. М.В. Келдыша РАН (66 узлов, на каждом узле два 14-ядерных центральных процессора Intel Xeon E5-2690 v4 2.60GHz), имеющий большую оперативную память на узле (256 Гб). Результаты тестовых расчетов на различных конфигурациях К60 для микросистемы с общим числом частиц равным 165,25 млн. показаны на Рис. 6. Анализ приведенных данных показывает, что расчеты больших микросистем требуют большой оперативной памяти и занимают продолжительное время. Однако использование суперкомпьютерных систем позволяет преодолеть эту трудность.

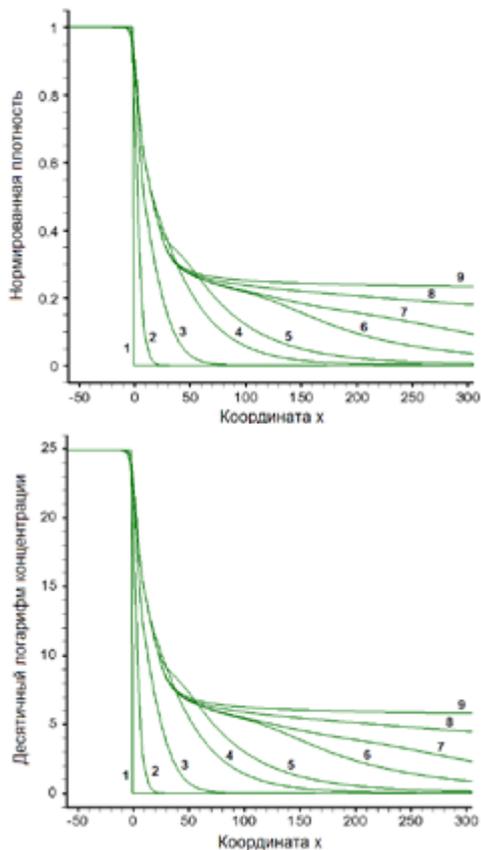


Рис. 2. Распределения плотности (сверху) и концентрации (снизу) вдоль оси симметрии (координата x) вычислительной области. Цифры 1–9 соответствуют моментам времени $t = 0, 0.0147, 0.1474, 0.7369, 1.474, 2.947, 4.421, 11.79, 73.69$ мкс.

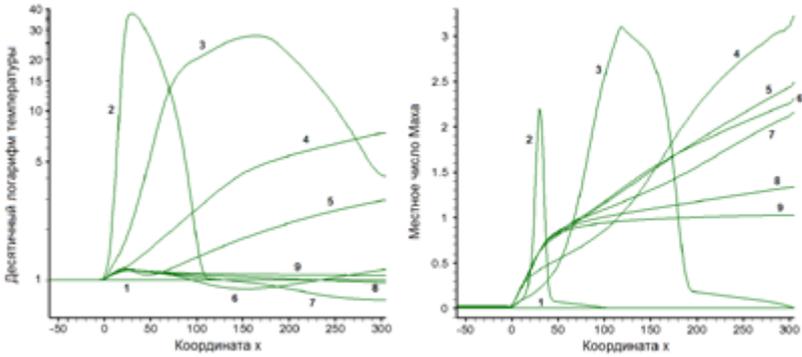


Рис. 3. Распределения температуры (слева) и местного числа Маха (справа) вдоль оси симметрии (координата x) вычислительной области. Цифры 1–9 соответствуют моментам времени $t = 0, 0.0147, 0.1474, 0.7369, 1.474, 2.947, 4.421, 11.79, 73.69$ мкс.

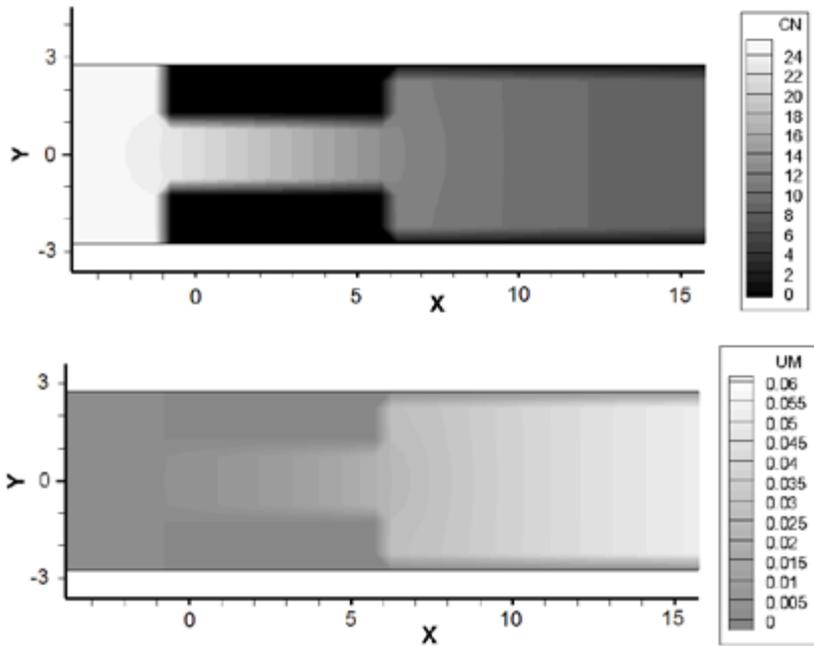


Рис. 4. Двумерные распределения концентрации (сверху) и модуля скорости (снизу) газа вблизи области сопла в момент времени $t = 13.26$ мкс.

Многомасштабный трехуровневый подход к решению задач нанотехнологий

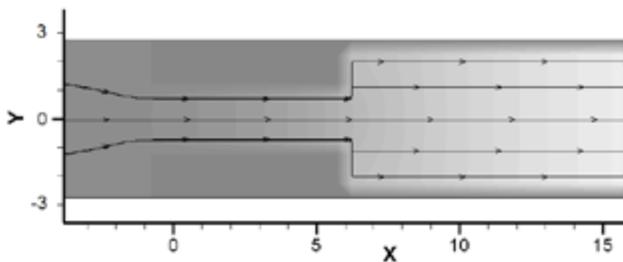


Рис. 5. Иллюстрация перемещения крупных частиц: линии тока частиц.

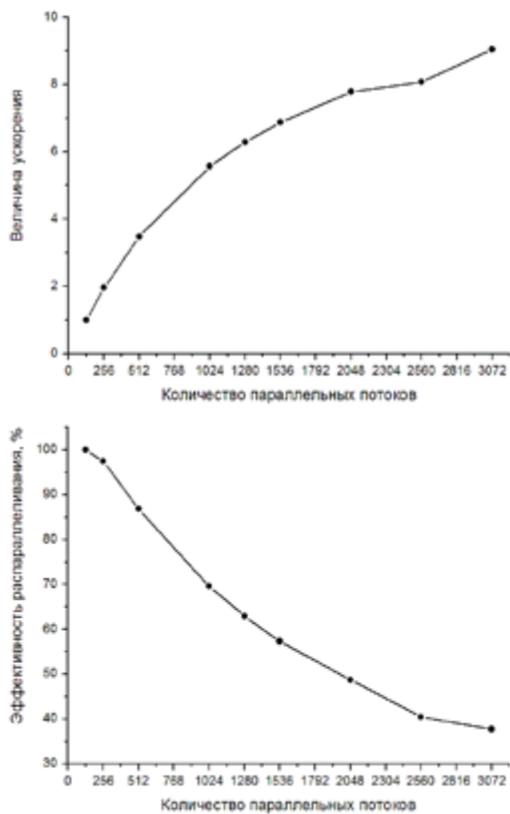


Рис. 6. Ускорение (сверху) и эффективность распараллеливания (снизу) в зависимости от числа использованных параллельных потоков относительно конфигурации 256 процессов.

Относительно результатов прямого МД-моделирования отметим следующее. В процессе эволюции средний поперечный профиль продольной компоненты скорости $\langle v_x \rangle = \frac{1}{L_x} \int v_x dx$ постепенно превращается в профиль Пуазейля. При этом наблюдаются небольшие биения этой величины вблизи стенок канала, связанные с нелинейным взаимодействием газа не столько с металлом, сколько с адсорбированной его частью.

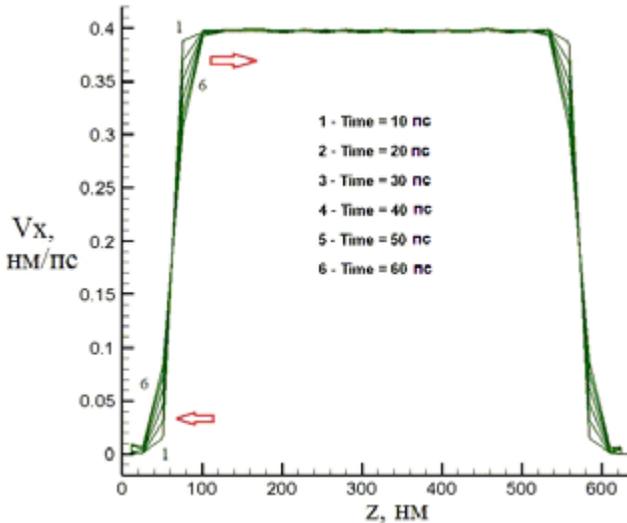


Рис. 7. Эволюция среднего поперечного профиля продольной компоненты скорости.

Заключение

В работе представлен многомасштабный трехуровневый подход к решению задач нанотехнологии с помощью суперкомпьютерных вычислительных систем. В основе подхода лежит объединение моделей механики сплошной среды и динамики Ньютона для отдельных частиц, которое охватывает три масштабных уровня: макроскопический, мезоскопический и микроскопический. Для технических систем газ – металл в качестве математических

Многомасштабный трехуровневый подход к решению задач нанотехнологий

моделей на макроскопическом уровне предлагается использовать квазигидродинамические уравнения в газовой и твердой фазах. В качестве математических моделей на мезо- и микроуровнях используется система уравнений Ньютона, записанная для наночастиц среды и крупных частиц, движущихся в среде. Численная реализация подхода основана на методе расщепления по физическим процессам, методе сеток на макроуровне и схеме Верле на мезо- и микроуровнях. В рамках общей методологии предложены четыре класса алгоритмов и их параллельная реализация, основанная на принципах геометрического параллелизма, рационального разбиения расчетной области, балансировке загрузки вычислителей. Апробация подхода выполнена на примере задачи о течении струи азота, содержащей кластеры меди, в вакуум. Полученные предварительные результаты соответствуют теоретическим оценкам и подтверждают высокую эффективность разработанной методологии.

Список литературы

1. *Hirschfelder J.O., Curtis C.F., Bird R.B.* Molecular Theory of Gases and Liquids. New York: Wiley, 1964.
2. *Haile J.M.* Molecular Dynamics Simulations. Elementary Methods. New-York: John Wiley & Sons, Inc., 1992.
3. *Rapaport D.C.* The Art of Molecular Dynamics Simulation. Cambridge University Press, 2004.
4. *Подрыга В.О.* Многомасштабный подход к трехмерному расчету течений газов и их смесей в микроканалах технических систем // ДАН. 2016. Т. 469, № 6. С. 656–658.
5. *Podryga V.O.* Computational technology of multiscale modeling the gas flows in microchannels // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 2016. V. 158. P. 012078 (6 p.).
6. *Podryga V.O., Karamzin Yu.N., Kudryashova T.A., Polyakov S.V.* Multiscale simulation of three-dimensional unsteady gas flows in microchannels of technical systems // Proceedings of the VII European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS Congress 2016), M. Papadrakakis, V. Papadopoulos, G. Stefanou, V. Plevris (eds.), Crete Island, Greece, 5–10 June 2016. V. 2. P. 2331–2345.
7. *Podryga V., Polyakov S.* Correction of the Gas Flow Parameters by Molecular Dynamics // Proceedings of the Fourth International Conference on Particle-Based Methods—Fundamentals and Applications (PARTICLES 2015), ed. by E. Onate and etc., 28–30 September 2015, Barcelona, Spain. Barcelona, Spain: International Center for Numerical Methods in Engineering (CIMNE), 2015. P. 779–788.
8. *Подрыга В.О.* Определение макропараметров реального газа методами молекулярной динамики // Математическое моделирование. 2015. Т. 27, № 7. С. 80–90.
9. *Podryga V.O.* Calculation of Kinetic Coefficients for Real Gases on Example of Nitrogen // In: Dimov I., Faragó I., Vulkov L. (eds) Numerical Analysis and Its Applications. NAA 2016. Lecture Notes in Computer Science. Cham: Springer, 2017. V. 10187. P. 542–549.
10. *Подрыга В.О., Поляков С.В.* Молекулярно-динамический расчет макропараметров газа в потоке и на границе // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2016. № 80.
11. *Елизарова Т.Г.* Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. М.: Научный мир, 2007.
12. *Подрыга В.О., Поляков С.В.* Многомасштабное моделирование истечения газовой струи в вакуум // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2016. № 81.
13. *Li R., Chen Zh., Wu W.* Generalized difference methods for differential equations. Numerical analysis of finite volume methods. New York: Marcel Dekker Inc., 2000.

14. *Eymard R., Gallouet T.R., Herbin R.* The finite volume method. / In: «Handbook of Numerical Analysis» (Editors: P.G. Ciarlet and J.L. Lions), 2000. V. VII. P. 713–1020.

15. *Verlet L.* Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // *Phys. Rev.* 1967. V. 159. P. 98–103.

16. *Подрыга В.О.* Моделирование процесса установления термодинамического равновесия методом молекулярной динамики // *Математическое моделирование.* 2010. Т. 22, № 11. С. 39–48.

17. *Подрыга В.О., Поляков С.В., Пузырьков Д.В.* Суперкомпьютерное молекулярное моделирование термодинамического равновесия в микросистемах газ-металл // *Вычислительные методы и программирование.* 2015. Т. 16, № 1. С. 123–138.

18. *Подрыга В.О., Поляков С.В.* Молекулярно-динамическое моделирование установления термодинамического равновесия в никеле // *Математическое моделирование.* 2015. Т. 27, № 3. С. 3–19.

19. *Подрыга В.О., Поляков С.В., Жаховский В.В.* Атомистический расчет перехода в термодинамическое равновесие азота над поверхностью никеля // *Математическое моделирование.* 2015. Т. 27, № 7. С. 91–96.

20. *Кудряшова Т.А., Подрыга В.О., Поляков С.В.* Моделирование течений газовых смесей в микроканалах // *Вестник РУДН, серия «Математика. Информатика. Физика».* 2014. №3. С.154–163.

21. *Карамзин Ю.Н., Кудряшова Т.А., Подрыга В.О., Поляков С.В.* Многомасштабное моделирование нелинейных процессов в технических микросистемах // *Математическое моделирование.* 2015. Т. 27, № 7. С. 65–74.

22. *Подрыга В.О., Поляков С.В.* Параллельная реализация многомасштабного подхода для расчета микротечений газа // *Вычислительные методы и программирование.* 2016. Т. 17, Вып. 2. С. 147–165.

23. *Podryga V., Polyakov S.* Calculation of nitrogen flow in nickel micronozzle based on numerical approaches of gas and molecular dynamics // *Proceedings of the V International Conference on Particle-Based Methods, Fundamentals and Applications (PARTICLES 2017)*, ed. by P. Wriggers and etc., 26–28 September 2017, Hannover, Germany. Barcelona, Spain: International Center for Numerical Methods in Engineering (CIMNE), 2017. P. 744–754.

Содержание

Математическая формулировка	5
Численный подход	8
Алгоритмы и программная реализация	9
Результаты расчетов	10
Заключение	15
Список литературы	17

Отделение математических наук

В.О. Подрыга, С.В. Поляков

**Многомасштабный трехуровневый
подход к решению задач
нанотехнологий**

Формат 60 x 84/16

Гарнитура Таймс

Усл. печ. л. 1,16. Усл. изд. л. 0,7

Тираж 20 экз.

Издатель – Российская академия наук

Подготовлено к печати

Управлением научно-издательской деятельности РАН

Отпечатано на оборудовании Управления делами РАН

Издано в авторской редакции

Издается в соответствии с распоряжением
президиума Российской академии наук
от 24 октября 2017 г. №10106-765,
распространяется бесплатно.