

Суперкомпьютерное моделирование термодинамического равновесия в микросистемах*

В.О. Подрыга¹, С.В. Поляков¹

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук¹

Данная работа посвящена моделированию термодинамического равновесия в микросистемах с использованием высокопроизводительных вычислений. Для решения данной проблемы используется молекулярно-динамический подход, выбран численный метод, имеющий в основе конечно-разностную схему Верле. Для ускорения вычислений предложен параллельный алгоритм и выполнена его реализация в рамках технологий MPI и OpenMP. С помощью разработанной программы выполнены исследования процесса установления термодинамического равновесия в системе атомов никеля в геометрии пластины, а также в газовой системе в объёмной геометрии, состоящей из молекул азота. В численных экспериментах определены оптимальные параметры методики расчета и физические параметры моделируемого процесса.

1. Введение

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

Одним из наиболее эффективных подходов, имеющих важное фундаментальное и прикладное значение, является метод молекулярной динамики (МД) [1-10]. В основе метода МД лежит модельное представление о многоатомной молекулярной системе, в которой все атомы представляют собой материальные точки, временная эволюция системы взаимодействующих частиц отслеживается путем интегрирования их уравнений движения. Атомы или молекулы движутся по законам классической механики Ньютона.

Важными областями по применению молекулярно-динамического моделирования являются проектирование, изготовление и эксплуатация различных технических систем, основа которых состоит из металлических элементов, а рабочие области содержат вакуум или смеси легких газов. Примером могут быть современные вакуумные микроприборы, используемые в электронике и фармацевтике. В этой сфере большое распространение получили системы напыления и нанопринтинга частиц на поверхности создаваемых материалов и лекарственных препаратов. Для реализации систем напыления используются различные технические решения, в том числе, установки сверхзвукового холодного газодинамического напыления (СХГН), антикоррозионные свойства которых обеспечиваются применением железо-никелевых покрытий. В качестве рабочих газов применяются азот-водородные смеси.

В данной работе рассматривается проблема создания вычислительных основ и комплекса параллельных программ для проведения детального молекулярно-динамического моделирования процессов релаксации газовой азотной системы в объёмной геометрии и металлической системы в форме пластины, составленной из атомов никеля. Эти две системы составляют основу установок СХГН, подающих наночастицы. Назначение представляемой работы в практическом плане связано с реализацией МД подхода на базе современных вычислительных техноло-

* Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 13-01-12073-офи_м.

гий в виде программного комплекса для моделирования процессов СХГН наночастиц на поверхности различных материалов [11, 12], использующихся в электронике и медицине.

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

2. Теоретическая часть

Исследуемая в работе микросистема представляется совокупностью взаимодействующих частиц, поведение которых описывается уравнениями Ньютона:

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

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

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

где U – потенциальная энергия, $\vec{F}_{l,i}^{ext}$ – 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 взаимодействия газа с газом, металла с металлом (а впоследствии и газа с металлом):

$$U_{aa} = \sum_{i=1}^{N_a} \varphi(\vec{r}_{a,i}), \quad U_{bb} = \sum_{i=1}^{N_b} \gamma(\vec{r}_{b,i}). \quad (3)$$

Для взаимодействия частиц газа друг с другом использовался потенциал Леннарда-Джонса [15, 16] в форме “n-m” (4), где $m = 6$, параметры для молекул азота определены в работе [16].

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

где $r_{ij} = |\vec{r}_{a,i} - \vec{r}_{a,j}|$ – расстояние между i -ой и j -ой частицами, ε – энергия молекулярного взаимодействия, σ – эффективный радиус взаимодействия.

В рамках рассматриваемой задачи для учета взаимодействия частиц металла друг с другом выбрана модель взаимодействия (5), использующая потенциал погруженного атома (ППА) [17]:

$$\begin{aligned} \gamma(\vec{r}_{b,i}) &= \varpi(\rho_i) + \sum_{j>i} \mu(r_{ij}), \quad i=1, \dots, N_b, \\ \rho_i &= \sum_{k \neq i} f(r_{ik}), \quad k=1, \dots, N_i, \end{aligned} \quad (5)$$

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

В качестве функции парного взаимодействия $\mu(r_{ij})$ и функции плотности $f(r_{ik})$ были выбраны формы (6), предложенные в работе [18]:

$$\begin{aligned} f(r) &= \frac{f_e \exp(-\beta[r/r_e - 1])}{1 + (r/r_e - \lambda)^n}, \\ \mu(r) &= \frac{A \exp(-\alpha[r/r_e - 1])}{1 + (r/r_e - \kappa)^m} - \frac{B \exp(-\beta[r/r_e - 1])}{1 + (r/r_e - \lambda)^n}, \end{aligned} \quad (6)$$

где r_e – межатомное расстояние равновесия, f_e – параметр, зависящий от энергии когезии, A , B , α и β – настраиваемые параметры, κ и λ – два дополнительных параметра, отвечающие за обрезание действия потенциала.

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

$$\begin{aligned} \varpi(\rho) &= \sum_{i=0}^3 \varpi_{n_i} \left(\frac{\rho}{\rho_n} - 1 \right)^i, \quad \rho < \rho_n, \\ \varpi(\rho) &= \sum_{i=0}^3 \varpi_n \left(\frac{\rho}{\rho_e} - 1 \right)^i, \quad \rho_n \leq \rho < \rho_0, \\ \varpi(\rho_i) &= \varpi_e \left[1 - \ln \left(\frac{\rho}{\rho_s} \right)^\eta \right] \left(\frac{\rho}{\rho_s} \right)^\eta, \quad \rho_0 \leq \rho, \end{aligned} \quad (7)$$

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

При большом удалении частиц друг от друга значение энергии взаимодействия таких частиц становится мало. С целью оптимизации расчетов общепринято рассматривать потенциальную энергию (3) в заданных формах (4), (5) при условии:

$$U_{||}(r \geq r_c) \equiv 0, \quad (8)$$

где r_c – расстояние дальнего действия потенциала (радиус обрезания). В рамках данной задачи для никеля радиус был взят $r_c = 0.9$ нм, для азота $r_c = 0.91$ нм.

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

$$r^{n+1} = r^n + v^n \Delta t + \frac{F^n (\Delta t)^2}{m}, \quad v^{n+1} = v^n + \frac{F^{n+1} + F^n}{2m} \Delta t, \quad (9)$$

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

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

$$E_K = \sum_i ke_{l,i}, \quad E_T = \sum_i wke_{l,i}, \quad (10)$$

$$ke_{l,i} = \frac{m_{l,i} |\vec{v}_{l,i}|^2}{2}, \quad wke_{l,i} = \frac{m_{l,i} |\vec{v}_{l,i} - \vec{v}_m|^2}{2},$$

$$\vec{v}_{l,m} = \frac{1}{N_l} \sum_i \vec{v}_{l,i}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad l = a, b, \quad (11)$$

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

Полная энергия системы E частиц одного типа представляет собой сумму кинетической энергии и потенциальной энергии системы частиц этого типа:

$$E = E_K + U \quad (12)$$

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

$$T = \frac{2 \langle E_T \rangle}{3 k_b}, \quad \langle E_T \rangle = \frac{1}{N_l} \sum_i \frac{m_{l,i} |\vec{v}_{l,i} - \vec{v}_m|^2}{2}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad (13)$$

где k_b – постоянная Больцмана.

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

$$\lambda = \sqrt{1 + \frac{2 \Delta t}{\tau_t} \left(\frac{T_t}{T(t - \Delta t)} - 1 \right)}, \quad (14)$$

где λ – коэффициент пересчета скоростей.

В результате рассмотрения разных значений параметра τ_i определяется оптимальное время взаимодействия с резервуаром в условиях поставленной задачи, благодаря которому система достигнет равновесного состояния в более короткие периоды времени по сравнению с другими значениями данного параметра.

В расчётах металлической и газовой систем важную роль играют диагональные компоненты тензора давления, которые определяются соотношением (15). Индекс типа частиц из формулы удален для наглядности выражения:

$$P_{\alpha\alpha} = \frac{1}{V} \sum_i m_i (v_{i,\alpha} - v_{m,\alpha})^2 + \frac{1}{V} \sum_i \sum_{j>i} r_{ij,\alpha} \cdot F_{ij,\alpha}, \quad i = 1, \dots, N_l. \quad (15)$$

Здесь V – объем рассматриваемой системы, $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$, \vec{F}_{ij} – сила взаимодействия между i -ой и j -ой частицами, α – координата x , y или z соответственно

Давление в системе в трехмерной постановке задачи определяется формулой

$$P = \frac{1}{3} (P_{xx} + P_{yy} + P_{zz}). \quad (16)$$

Алгоритм решения задачи состоит в следующем. В начальный момент времени задаются координаты и скорости всех частиц. Далее в цикле по времени решаются уравнения движения (1). Для этого на каждом шаге вычисляются силы взаимодействия (2), новые координаты и скорости частиц (9) с учетом граничных условий и внешнего воздействия на систему (14). Расчёты заканчиваются при достижении системой термодинамического равновесия.

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

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

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

В работе рассматривается динамика микросистем, конечных по оси z , и бесконечных по двум другим направлениям. Поэтому вдоль осей x, y используются периодические граничные условия (ПГУ) с периодами Lx, Ly соответственно:

$$r_x \in [r_x^{\min}, r_x^{\min} + Lx), \quad r_y \in [r_y^{\min}, r_y^{\min} + Ly). \quad (17)$$

Здесь r_x^{\min}, r_y^{\min} – начала отсчета координат по направлениям осей x, y .

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

3. Реализационная часть

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

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

Основной алгоритм расчета выглядит следующим образом.

1-ый этап – чтение исходных данных MPI-приложением и инициализация структур данных на каждом вычислителе.

2-ой этап – основные вычисления в цикле по времени.

3-ий этап – выполнение результирующих вычислений и деинициализация.

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

В рамках цикла по времени реализована следующая последовательность действий.

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

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

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

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

Код программы был создан на языке ANSI C и адаптирован к вычислениям на кластерах с центральными многоядерными и векторными процессорами. Достоинства разработанного подхода частично обсуждались в [19]. Здесь же хотелось бы отметить, что в отличие от предыду-

шей работы в обсуждаемых ниже вычислительных экспериментах фигурируют атомные и молекулярные системы с количеством частиц порядка 10 млн. и более. В проведенных расчётах таких больших систем эффективность распараллеливания сохранялась на уровне 95% на конфигурациях 1024 и более MPI-процессов. При этом количество трэдов внутри узлов варьировалось от 1 до 16 на центральных процессорах (ЦПУ) Xeon и от 30 до 240 на процессорах Xeon Phi (которые являются векторными процессорами – ВПУ). Здесь важно отметить, что использование большого числа трэдов на ЦПУ в целом неэффективно, поскольку трэды сильно конкурируют между собой при осуществлении доступа к оперативной памяти. Поэтому во многих случаях распараллеливание по MPI-процессам оказывается более эффективным, чем по трэдам. При расчётах на ВПУ справедлива другая стратегия: использование максимального числа трэдов и векторизации. Однако в проводимых нами молекулярно-динамических вычислениях векторизация не дает того эффекта, который присущ линейным алгебраическим преобразованиям. Это объясняется тем, что основной вычислительной сложностью в нашем алгоритме обладает функция расчета нелинейных и неоднородных по структуре потенциалов взаимодействия частиц (и градиентов от них). В итоге, в расчетах на ВПУ мы подбирали такое число трэдов, которое обеспечивает минимальное время решения задачи. В частности, неплохой результат был получен, когда одно ЦПУ с 16 трэдами агрегировалось по MPI с 7 ВПУ с количеством трэдов 32 на каждом. Естественно, что такая конфигурация была виртуальной и реализовывалась одним узлом МВС-10П (МСЦ РАН), содержащим 2 ЦПУ и 2 ВПУ. Распараллеливание по MPI, таким образом, производилось на 16 процессоров.

4. Экспериментальная часть

Для выполнения вычислительного эксперимента по взаимодействию газовых потоков с металлическими поверхностями установок СХГН используемые металлические и газовые системы должны быть специальным образом подготовлены, а именно должны быть собраны в необходимой геометрии, находиться при выбранной температуре и желаемом давлении с минимальными осцилляциями, т.е. находиться в термодинамическом равновесии. Для реализации этого подготовительного этапа были проведены расчёты, результаты которых приведены в данном разделе. Целью подготовительных расчетов было определение равновесных макропараметров (средние температура, давление) и определение оптимальных параметров численного алгоритма для задачи релаксации газовой и металлической систем. В итоге, эту часть работы можно разделить на 2 подпункта: моделирование термодинамического равновесия в металлической микросистеме в форме пластины, состоящей из атомов никеля, и моделирование термодинамического равновесия в системе объёмной геометрии, состоящей из молекул азота.

4.1 Равновесие в системе атомов никеля

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

Расчет проводился для размера никелевой системы $24 \times 24 \times 24$, измеряемого в длинах элементарных ячеек (кристаллов). Данный размер системы соответствует количеству атомов никеля $N_b = 55296$. В расчётах было определено наиболее оптимальное время взаимодействия

атомов с тепловым резервуаром $\tau_t = 1$ пс, которое приводило к наиболее быстрому достижению релаксации системы при малых осцилляциях макропараметров. Термостат применялся по всей области моделирования. Были рассмотрены 4 разных значения температуры и определены соответствующие ребра элементарных ячеек, значения которых представлены в таблице 1.

Таблица 1. Значения ребер элементарных ячеек, соответствующие условию ненапряженности пластины при выбранных температурах

T, K	126.85	200.00	273.15	346.30
r_{cr}, nm	0.352470	0.352795	0.353140	0.353510

После того, как значения ребер ячеек были определены, был сформирован образец в форме пластины, конечной по оси z . Образец формировался методом тиражирования по координатам x и y . Размеры системы варьировались от $24 \times 24 \times 24$ до $288 \times 288 \times 24$. Термостат и время взаимодействия с тепловым резервуаром задавались аналогично подготовительному этапу. Размер минимальной системы $24 \times 24 \times 24$ для образца в форме пластины соответствует количеству частиц $N_b = 56448$, размер максимальной системы $288 \times 288 \times 24$ соответствует $N_b = 8128512$. Начальные распределения скоростей растиражированных частиц совпадали с распределениями в исходном объёмном образце.

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

Приведем ниже результаты расчета при желаемой температуре системы $T = 273.15 K$, ребре элементарной ячейки $r_{cr} = 0.353140 nm$ соответственно. На рисунке 1 представлены распределения диагональной компоненты тензора давления P_{zz} и концентрации частиц в пластине по слоям относительно оси z , толщина одного слоя соответствует 1 нм. Распределения получены усреднением значений по времени после достижения равновесия.

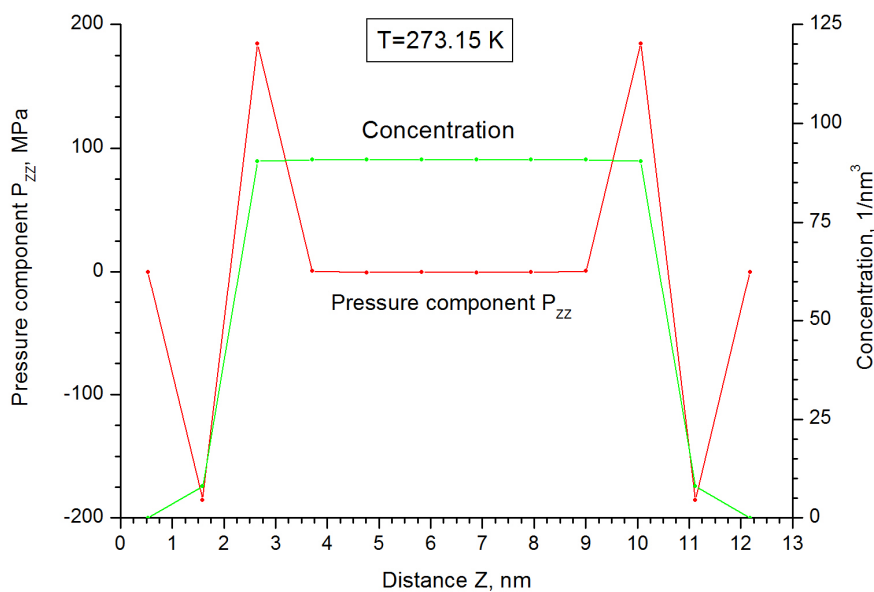


Рис. 1. Распределения диагональной компоненты тензора давления и концентрации частиц в пластине по слоям относительно оси z

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

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

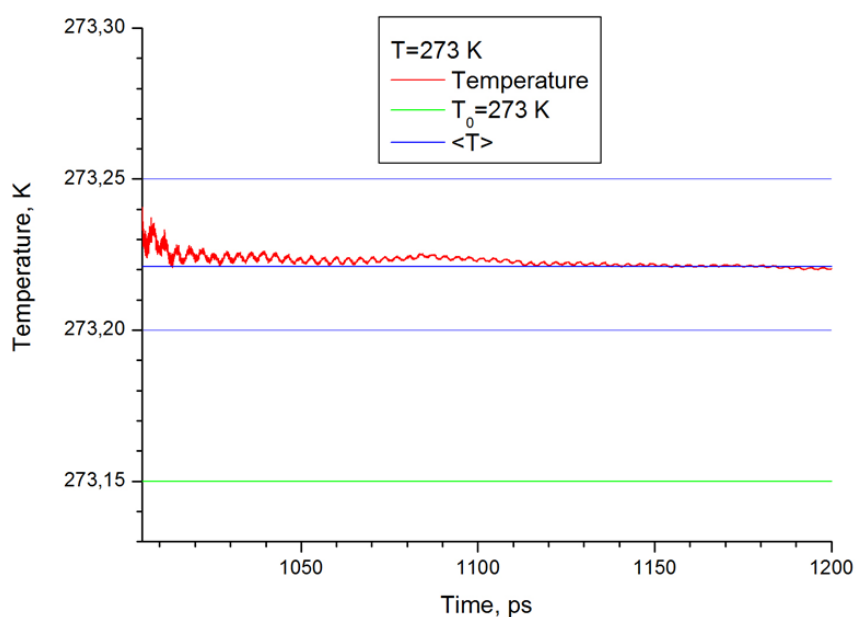


Рис. 2. Профиль усредненной по пространству и времени равновесной температуры в пластине из атомов никеля

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

4.2 Равновесие в системе молекул азота

Второй этап подготовки заключается в исследовании области, заполненной молекулами азота. Рассматриваемая нами область имеет форму куба, по трём осям которого наложены периодические граничные условия, размер области соответствует $\lambda \times \lambda \times \lambda$, где λ – длина свободного пробега молекулы азота.

Величина длины свободного пробега зависит от давления и температуры. В проведенных ниже экспериментах газ рассматривался при давлении $P = 101325 \text{ Па}$. Длины пробегов и значения плотностей азота для соответствующих температур при данном давлении представлены в таблице 2. С целью оптимизации вычислений размер области для разных температур был выбран постоянным и соответствовал значению области для $T = 273.15 \text{ К}$, где $\lambda = 88.976 \text{ нм}$, т.е. все расчеты проводились для постоянного объёма газа.

Таблица 2. Параметры моделируемой системы

T, K	$\rho, \text{кг} / \text{м}^3$	$\lambda, \text{нм}$	N_g
126.85	2.69123	41.320	60504
200.00	1.70692	65.148	38480
273.15	1.24980	88.976	28256
346.30	0.98580	112.803	22356

На данном этапе расчётов термостат был включен во всей области. Поток частиц газа считался нулевым. Заданное давление соответствовало разреженному состоянию газа. Релаксация системы разреженного газа требует большого времени. Поэтому расчёты проводились в течение 2 нс до установления режима, соответствующего выходу средних величин на стационар. После этого термостат отключался, и динамика системы рассчитывалась без дополнительных возмущений в течение ещё 2 нс.

На рисунках 3 и 4 представлены профили усредненных с момента равновесия по пространству и времени давления и температуры системы. Из рисунков видно, что температура и давление системы сохраняются после отключения термостата и соответствуют желаемым значениям с минимальными отклонениями. Таким образом, равновесие в системе молекул азота достигнуто, значения основных макропараметров вышли на необходимый уровень, что означает окончание второго этапа и готовность системы газа к вычислению взаимодействий с металлом.

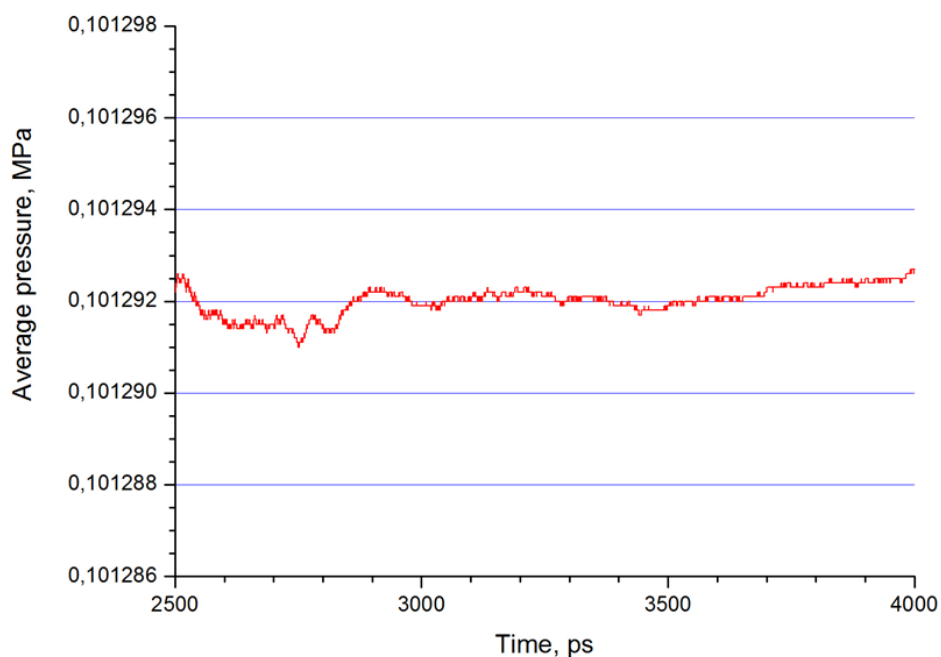


Рис. 3. Профиль усредненного по пространству и времени равновесного давления в системе молекул азота

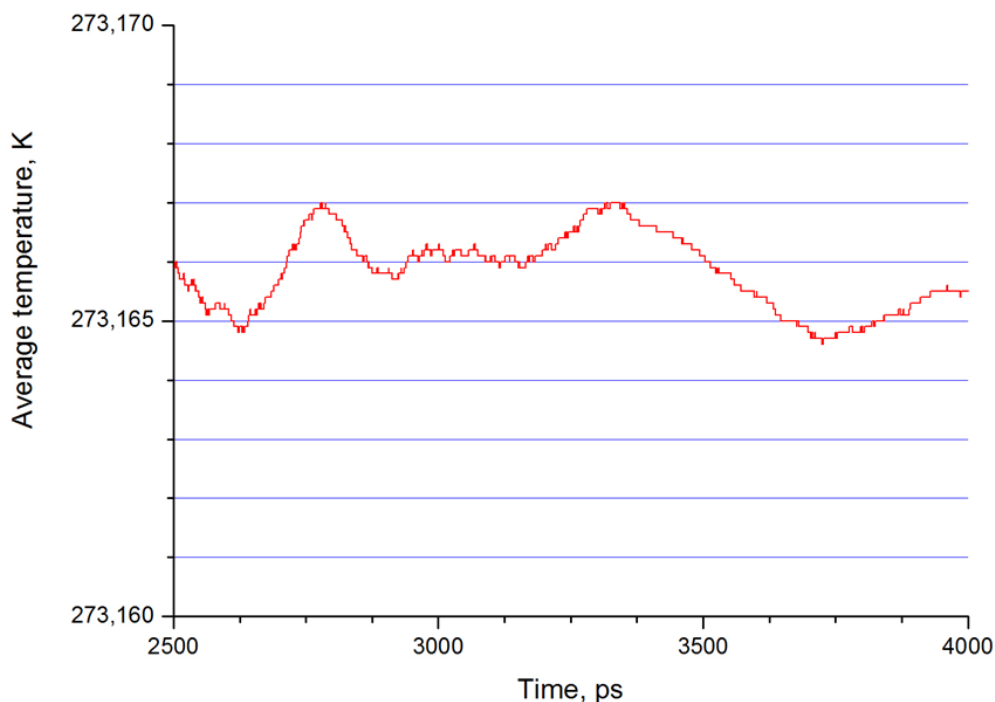


Рис. 4. Профиль усредненной по пространству и времени равновесной температуры в системе молекул азота

5. Заключение

В работе рассмотрена проблема создания вычислительных основ и комплекса параллельных программ для проведения детального молекулярно-динамического моделирования процессов релаксации газовой и металлической подсистем, составляющих ядро установок сверхзвукового холодного газодинамического напыления наночастиц на подложки в целях создания новых перспективных наноматериалов для электроники и медицины. Для решения модельной задачи расчёта термодинамических равновесий газовой азотной среды и никелевой пластины выбрана молекулярно-динамическая модель и методы ее численного анализа, создана расчетная параллельная программа. С помощью разработанной программы проведен цикл вычислительных экспериментов, посвященных анализу установления термодинамического равновесия в микросистемах молекул азота и атомов никеля при заданных температурах и давлении. Полученные в расчетах результаты продемонстрировали адекватность предложенного численного подхода современным теоретическим представлениям о моделируемом физическом процессе. Также эти результаты будут использоваться при моделировании процессов установления равновесия в системах газ - металл.

Дальнейшее развитие работы будет связано с численной реконструкцией реальных технологических элементов установок СХГН и расчётов устойчивых состояний этих микросистем.

Литература

1. Капкан И.Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. М.: Наука, 1982. 312 с.
2. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987. 640 с.
3. Haile J.M. Molecular Dynamics Simulations. Elementary Methods. New-York: John Wiley & Sons, Inc., 1992. 489 p.
4. Frenkel D., Smit B. Understanding Molecular Simulation. From Algorithm to Applications. New-York: Academic Press, 2002. 638 p.

5. Allen M.P. Introduction to Molecular Dynamics Simulation // Computational Soft Matter: From Synthetic Polymers to Proteins. John von Neumann Institute for Computing, Julich, NIC Series, 2004. Vol. 23. P. 1-28.
6. Sutmann G. Classical molecular dynamics // In: Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms (eds. J. Grotendorst, et al). Julich: NIC, 2002. Vol. 10. P. 211-254.
7. Рапапорт Д.К. Искусство молекулярной динамики. М.-Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", Ижевский институт компьютерных исследований, 2012. 632 с.
8. Норман Г.Э., Стегайлов В.В. Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // Математическое моделирование. 2012. Т. 24, No. 6. С. 3-44.
9. Winkler R.G., Morawitz H., Yoon D.Y. Novel Molecular Dynamics Simulations at Constant Pressure // Mol. Phys. 1992. Vol. 75. P. 669-688.
10. Molecular-Dynamics Simulation of Statistical-Mechanical Systems / Proc. of the International School of Physics "Enrico Fermi", Varenna, Italy, 1985 (eds. Ciccotti G., Hoover W.G.). Amsterdam: North-Holland Physics Publishing, 1986. 622 p.
11. Алхимов А.П., Клинков С.В., Косарев В.Ф., Фомин В.М. Холодное газодинамическое напыление. Теория и практика. М.: Физматлит, 2010. 536 с.
12. Resnick D. Nanoimprint lithography / In "Nanolithography. The art of fabricating nanoelectronic and nanophotonic devices and systems" (Edited by Martin Feldman). Woodhead Publishing Limited, 2014. 600 p.
13. Подрыга В.О. Моделирование процесса установления термодинамического равновесия нагретого металла // Математическое моделирование. 2011. Т. 23, No. 9. С. 3-17.
14. Verlet L. Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // Phys. Rev. 1967. Vol. 159. P. 98-103.
15. Lennard-Jones J.E. Cohesion // Proceedings of the Physical Society. 1931. Vol. 43, No. 5. P. 461-482.
16. Фокин Л.Р., Калашников А.Н. Транспортные свойства смеси разреженных газов N₂-H₂ в базе данных ЭПИДИФ // Теплофизика высоких температур. 2009. Т. 47, No. 5. С. 675-687.
17. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // Physical Review B. 1984. Vol. 29, No. 12. P. 6443-6453.
18. Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers // Phys. Rev. B. 69. 2004. P. 144113.
19. Подрыга В.О., Поляков С.В. Молекулярно-динамическое моделирование процесса установления термодинамического равновесия нагретого никеля. Москва: Институт прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН, 2014. Препринт No. 41. 20 с.
20. Лагарьков А.Н., Сергеев В.М. Метод молекулярной динамики в статистической физике // Успехи физических наук. 1978. Т. 125, Вып. 3. С. 409-448.
21. Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., W.F. van Gunsteren et al. Molecular dynamics with coupling to an external bath // J. Chem. Phys. 1984. Vol. 81. P. 3684-3690.
22. Китайгородский А.И. Молекулярные кристаллы. М.: Наука, 1971. 424 с.
23. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 791 с.
24. Поляков С.В., Карамзин Ю.Н., Косолапов О.А., Кудряшова Т.А., Суков С.А. Гибридная суперкомпьютерная платформа и разработка приложений для решения задач механики сплошной среды сеточными методами // Известия ЮФУ. Технические науки. 2012. No. 6 (131). С. 105-115.

25. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. СПб: БХВ-Петербург, 2004. 608 с.
26. Официальная документация и учебные пособия по MPI: <http://www.mcs.anl.gov/research/projects/mpi/>
27. Официальная документация и учебные пособия по OpenMP: <http://www.openmp.org>, <http://www.llnl.gov/computing/tutorials/openMP>
28. CUDA Toolkit Documentation v6.0. Santa Clara (CA, USA): NVIDIA Corporation, February 2014: <http://docs.nvidia.com/cuda#axzz33MvzgFZE>.