

ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

**ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ МНОГОМАСШТАБНОГО  
ПОДХОДА ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕЧЕНИЙ ГАЗА В  
МИКРОКАНАЛАХ ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

***В. О. Подрыга, С. В. Поляков***

ПаВТ 2016, Архангельск

# Цели и задачи

**Общая цель** – разработка вычислительных основ и комплекса программ для моделирования физических процессов в сложных технических микросистемах с помощью метода молекулярной динамики как независимо, так и в рамках многомасштабных моделей.

**Конкретные задачи** – трехмерное моделирование течения газовых смесей через металлический микроканал с помощью многомасштабного подхода и создание базы данных по потенциалам, свойствам материалов на микроуровне для последующих расчетов на макроуровне.

**Приложение** – сверхзвуковое холодное газодинамическое напыление наночастиц на подложку в установках нанопринтинга и нанолитографии.

# Математические модели и численные методы

**Основная идея - многомасштабный подход к моделированию газодинамических течений в технических микросистемах**

Макроуровень ТМС: размеры системы составляют десятки, сотни и тысячи длин свободного пробега молекул газов

Микроуровень ТМС: атомные и молекулярные размеры приповерхностных слоев каналов и наночастиц

Мультимасштабный подход основан на одновременном использовании как минимум двух моделей, описывающих физические процессы на макро- и микроуровнях.

В качестве макромоделей выбрана КГД система уравнений

В качестве микромоделей выбрана система уравнений Ньютона

# Алгоритмы решения задач

Алгоритмы класса 1 – расчеты свойств газовых смесей и твердых материалов методом МД и накопление базы данных

Алгоритмы класса 2 – расчеты течений газов в ТМС с использованием только БД

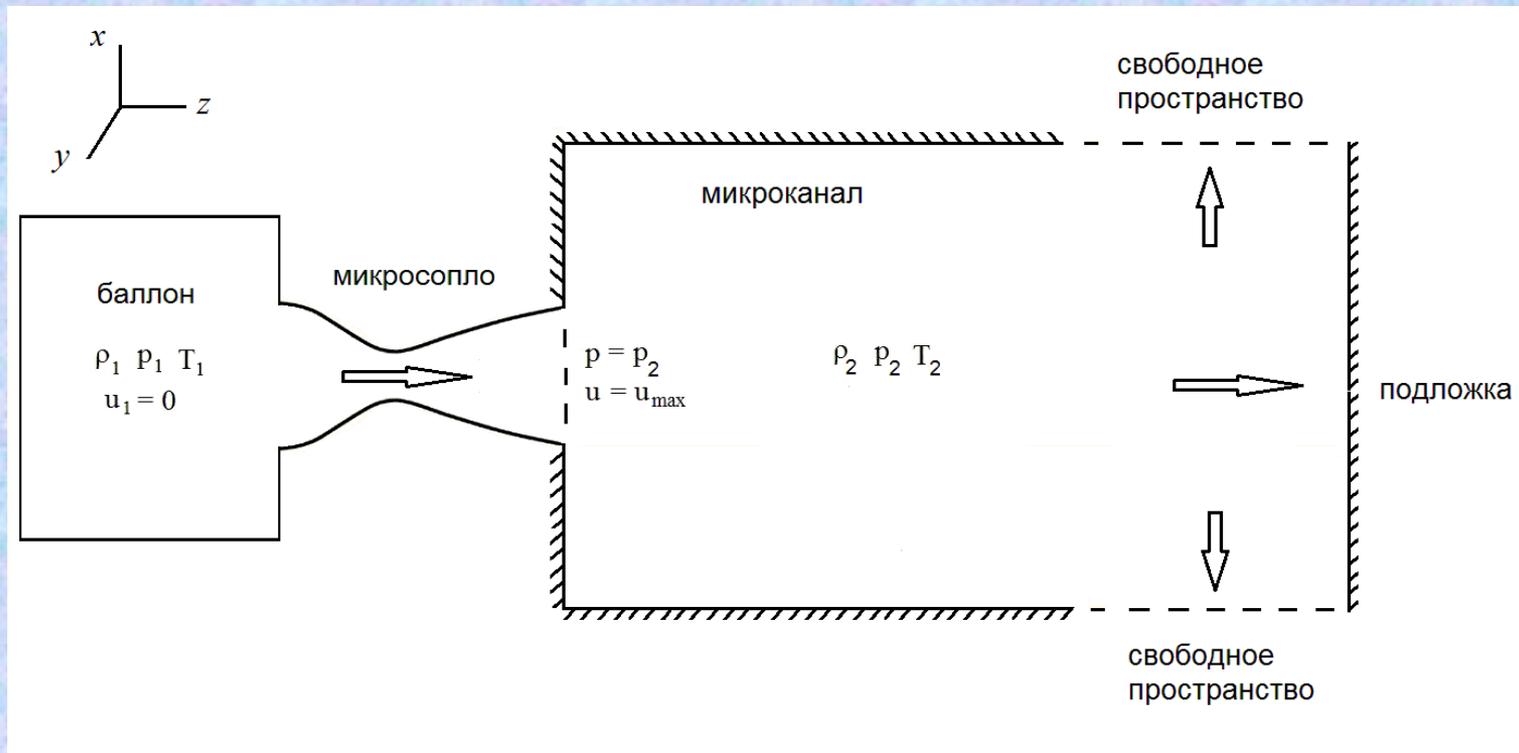
Алгоритмы класса 3 – расчеты течений газов в ТМС с использованием БД на границе и прямого расчета в потоке

Алгоритмы класса 4 – расчеты течений газов ТМС с использованием прямых МД вычислений на подсеточном уровне

Алгоритм класса 4 предполагает, что:

- старт с предварительно рассчитанного равновесного состояния
- в цикле по времени попеременно в центрах ячеек сетки вычисляются:
  - Предикторные макропараметры течения по КГД уравнениям
  - Корректирующие макропараметры течения по МД уравнениям и статистическим суммам внутри отдельных ячеек
  - Макропараметры газов и их смеси как целого по алгебраическим формулам
  - Материальные коэффициенты и граничные условия для каждой КГД системы по алгебраическим формулам и статистическим суммам

# Задача и методы решения



## Методы решения:

- КГД
- Молекулярная динамика

## Ограничения на данном этапе:

- Газ не проникает в металл
- Наночастиц нет

## Входные данные:

- Состав и свойства газа
- Состав и температура поверхности
- Макропараметры газа: температура, давление, скорость потока

# Макромодель.

## Квазигазодинамическая модель для смеси газов

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{W}_l^{(\rho)} = 0, \quad \mathbf{W}_l^{(\rho)} = \rho_l \mathbf{u}_l - \rho_l \mathbf{w}_l, \quad \mathbf{w}_l = \tau \left[ (\mathbf{u}_l, \nabla) \mathbf{u}_l + \frac{1}{\rho_l} \nabla p_l \right],$$

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

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

$$S_l^{(\rho u_k)} = \nu_{ll'} \rho_l (\bar{u}_{l',k} - u_{l,k}), \quad l = a, b, \quad l' = b, a, \quad k = 1, 2, 3,$$

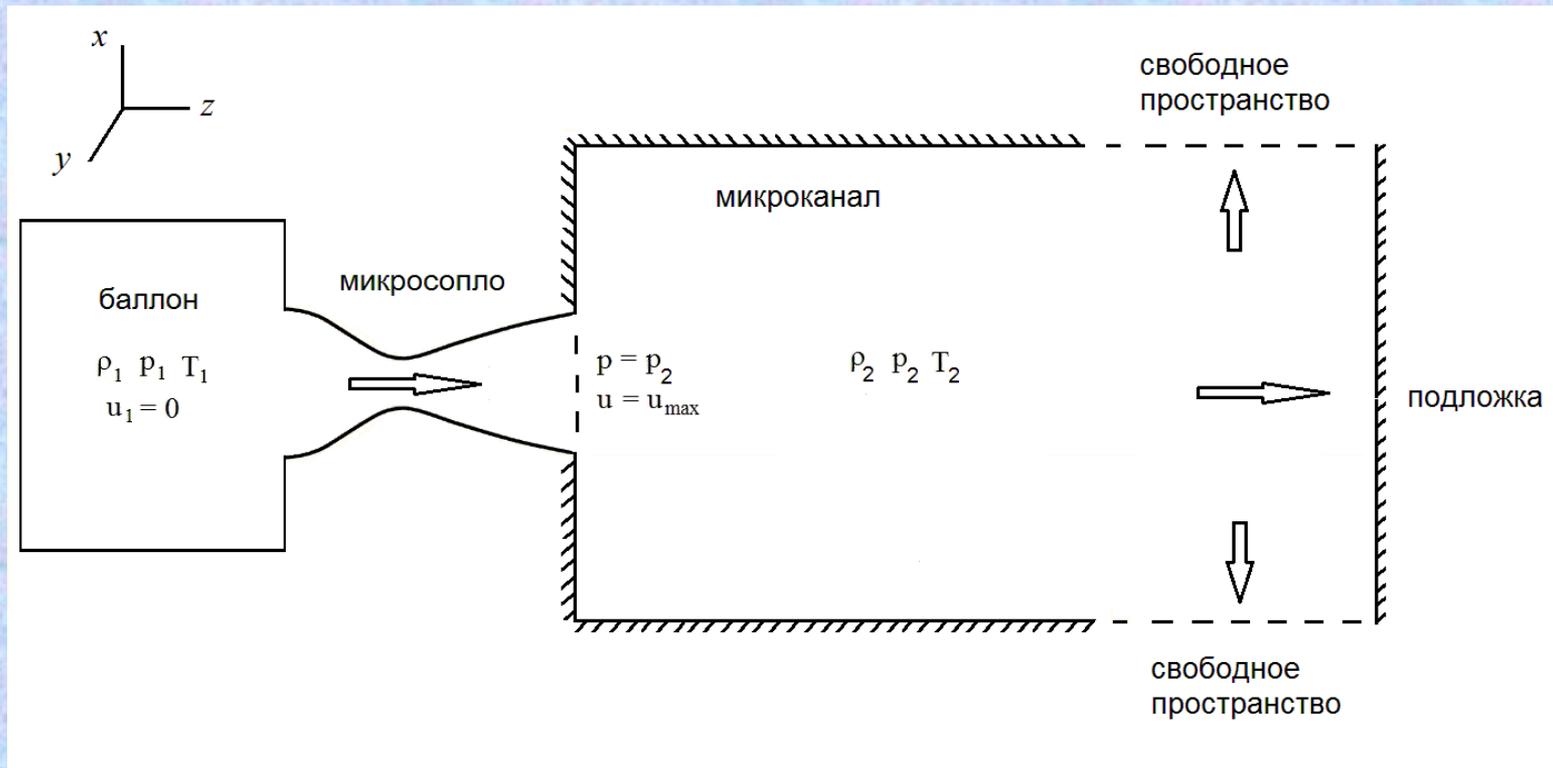
$$\frac{\partial}{\partial t} E_l + \operatorname{div} \mathbf{W}_l^{(E)} = S_l^{(E)},$$

$$\mathbf{W}_l^{(E)} = (\rho_l \mathbf{u}_l - \rho_l \mathbf{w}_l) H_l - \chi_l \nabla T_l + \left( \frac{2}{3} \mu \operatorname{div} \mathbf{u}_l \right) \mathbf{u}_l - \sum_{k=1,2,3} \mu \left( \nabla u_{l,k} + (\nabla, \mathbf{e}_k) \mathbf{u}_l \right) + (\rho_l \mathbf{w}_l, \mathbf{u}_l) \mathbf{u}_l,$$

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

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

# Для чего нужна молекулярная динамика?



- Корректировка течения: обменные члены
- Газ и поверхность микроканала: граничные условия
- Макропараметры газовой системы: УРС реального газа
- Кинетические коэффициенты и другие параметры течения

# Микромодель. Молекулярная динамика.

## Система уравнений Ньютона

$$\left\{ \begin{array}{l} m_l \frac{d\mathbf{c}_{l,i}}{dt} = \mathbf{F}_{l,i} \\ \frac{d\mathbf{r}_{l,i}}{dt} = \mathbf{c}_{l,i} \end{array} \right.$$

Схема Верле:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}^{n+1} &= \mathbf{r}^n + \mathbf{v}^n \Delta t + \frac{\mathbf{F}^n}{m} \frac{(\Delta t)^2}{2} \\ \mathbf{v}^{n+1} &= \mathbf{v}^n + \frac{\mathbf{F}^{n+1} + \mathbf{F}^n}{2m} \Delta t \end{aligned}$$

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

$$U = U_{aa} + U_{bb} + U_{ab} + U_{ac} + U_{bc} + U_{cc},$$

$U$  - потенциальная энергия,  $F^{ext}$  - внешняя сила,  
 $a$  - азот,  $b$  - водород,  $c$  - никель

# Контроль за изменением температуры:

Термостат Берендсена

Термостат Ланжевена

## Макропараметры

Температура

Давление

Коэффициент сжимаемости

Теплоёмкость при постоянном объёме

Энтальпия

Внутренняя энергия

## Граничные условия

пгу

Пластина

Зеркало

## Параметры обезразмеривания

Длина свободного пробега

Скорость звука

## Кинетические коэффициенты

Вязкость

Теплопроводность

# Подготовительные этапы МД моделирования

## Программные модули:

- Свойства исследуемых материалов: сбор информации о характеристиках, параметрах
- Начальные условия: определение структур веществ при выбранных начальных условиях моделирования
- Потенциалы взаимодействия для каждой компоненты

## Расчеты:

- Подбор минимального эффективного размера области расчета.
- Для твердых структур: подбор исходного ребра ячейки для ненапряженного состояния материала
- Подбор оптимальных параметров термостатирования
- Термодинамическое равновесие при выбранной температуре: выходные массивы координат и скоростей

# Общий численный алгоритм

- Расчёт стартует с равновесного состояния газовой системы
- На каждом шаге по времени по КГД уравнениям рассчитываются предикторные макропараметры течения (шаг по времени имеет порядок 0.1 микросекунды)
- Затем происходит переход к подсеточным МД вычислениям независимо в каждой ячейке сетки
- На микроуровне производится расчёт по времени до установления локального квазиравновесия (шаг по времени имеет порядок 1 фемтосекунды, интервал расчёта может составлять 1-200 пикосекунд)
- На основе квазиравновесных параметров микросистемы рассчитываются необходимые обменные члены для уравнений импульса и энергии
- На основе полученных данных производится пересчет макропараметров течения (коррекция в КГД)
- По скорректированным значениям производится МД расчет кинетических коэффициентов, УРС реального газа и условий на границе области
- Далее процесс расчёта повторяется вплоть до установления стационарного или регулярного периодического режима течения.

# Логика расчетов

Задача решается в четырех вариантах:

1. МД блок как независимая программа для расчета УРС и кинетических коэффициентов. Накопление базы данных (БД МД) для расчетов на макроуровне.
2. КГД блок как независимая программа для расчета течения. При этом используются УРС и кинетические коэффициенты, взятые из БД МД.
3. КГД блок + МД блок в объеме + упрощенный вариант МД блока на границе.
4. КГД блок + МД блок в объеме + полный вариант МД блока на границе и (если необходимо) в погранслое.

Замечания:

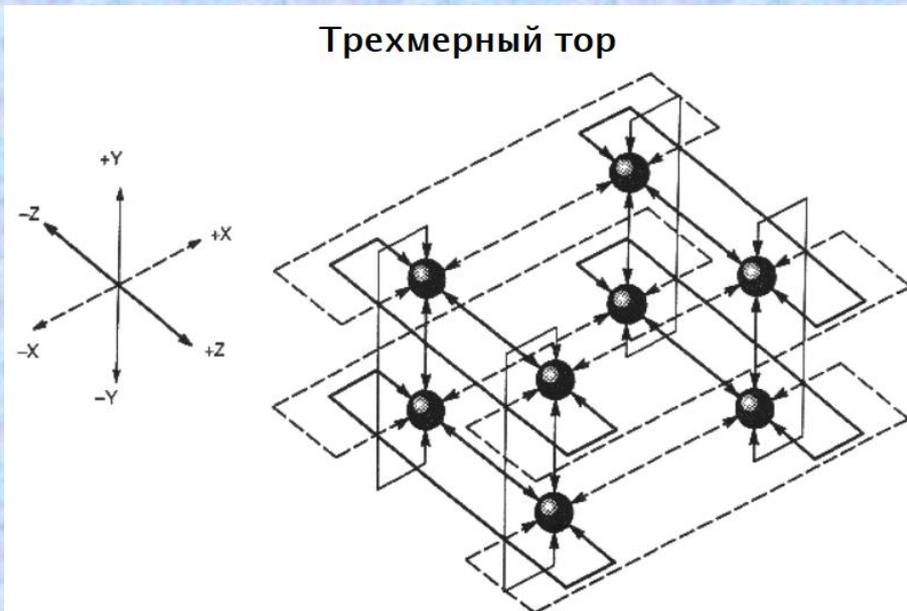
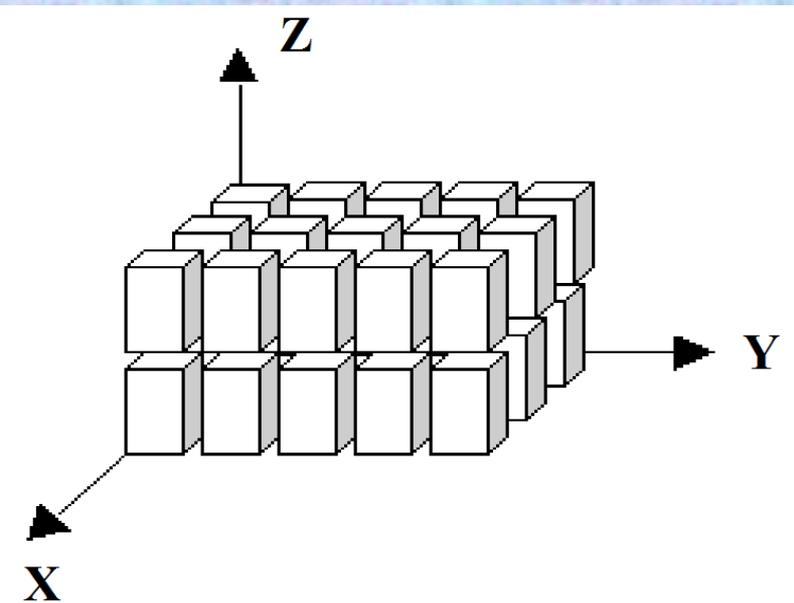
1. В реализации имеем пока 1-3, работаем над 4.
2. При реализации 3-4 используем спец. вычислитель (ВПУ или ГПУ) для МД вычислений. КГД блок вычисляется всегда на ЦПУ.

# Параллельные алгоритмы для МД

Независимые МД расчеты для уточнения параметров моделирования и накопления БД по свойствам веществ

- 1) MPI + OpenMP
- 2) MPI + CUDA

- Основной метод распараллеливания – разбиение на домены одинаковой мощности
- Каждый домен разбивается на «боксы взаимодействия»
- Топология разбиения на домены и боксы – трёхмерная решетка
- Топология обменов – трёхмерный тор
- Реализация – MPI + OpenMP || CUDA



# Специфика реализации МД блока

В МД расчетах существенно различаются две ситуации:

- в малом объеме находится большое количество взаимодействующих частиц
- в большом объеме находится малое количество редко взаимодействующих частиц.
- Пример ситуации 1 – твердое тело
- Пример ситуации 2 – газ.
- Соответственно существуют два алгоритма параллельного расчета:
- Распараллеливание по пространству и распараллеливание по частицам.
- В МД блоке реализованы оба подхода:
- распараллеливание по пространству на границе и в погранслое (в металле и вблизи его поверхности)
- распараллеливание по частицам вдали от границ (в потоке газа)
- В итоге две проблемы:
- согласование алгоритмов при переходе от границы к объему
- согласование шагов интегрирования по времени для разных систем частиц
- Решения:
- Разделение области на две зоны, в которых реализуются разные алгоритмы,
- и согласование потоков массы, импульса и энергии на границе зон.
- Адаптивный шаг по времени в разреженной среде, моменты синхронизации.

# Параллельные алгоритмы для КГД+МД

Чередующиеся КГД и МД расчеты

1) MPI + OpenMP:

MPI реализует распределение КГД и МД вычислений между узлами и ЦПУ и/или ВПУ внутри узлов

OpenMP реализует распределение КГД и МД вычислений внутри процессора по трэдам

2) MPI + OpenMP + CUDA:

MPI реализует распределение КГД и МД вычислений между узлами и ЦПУ, ВПУ и ГПУ внутри узлов

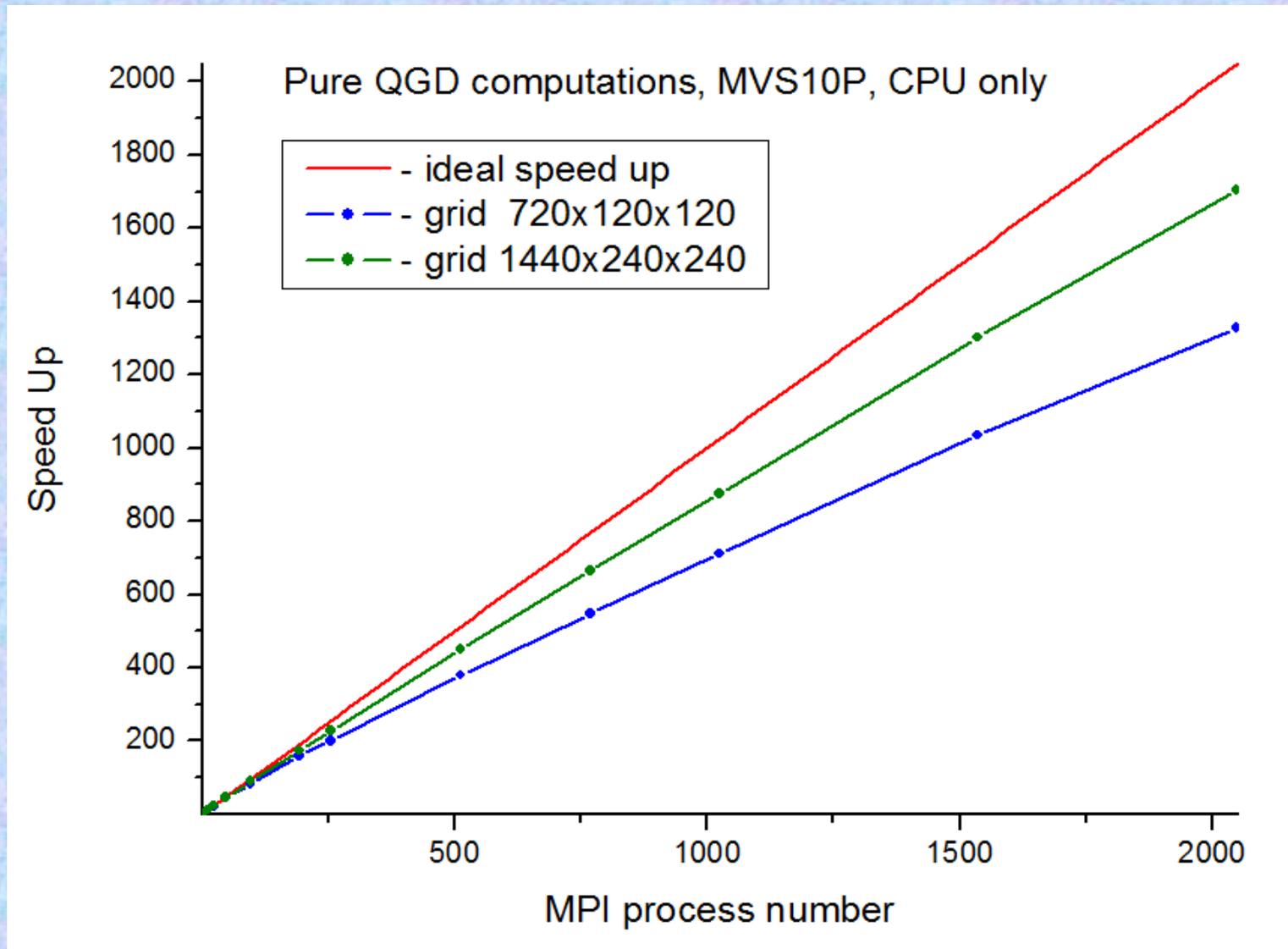
OpenMP реализует распределение КГД вычислений внутри ЦПУ и ВПУ по трэдам

CUDA реализует распределение МД вычислений внутри ГПУ по мультипроцессорам и блокам трэдов

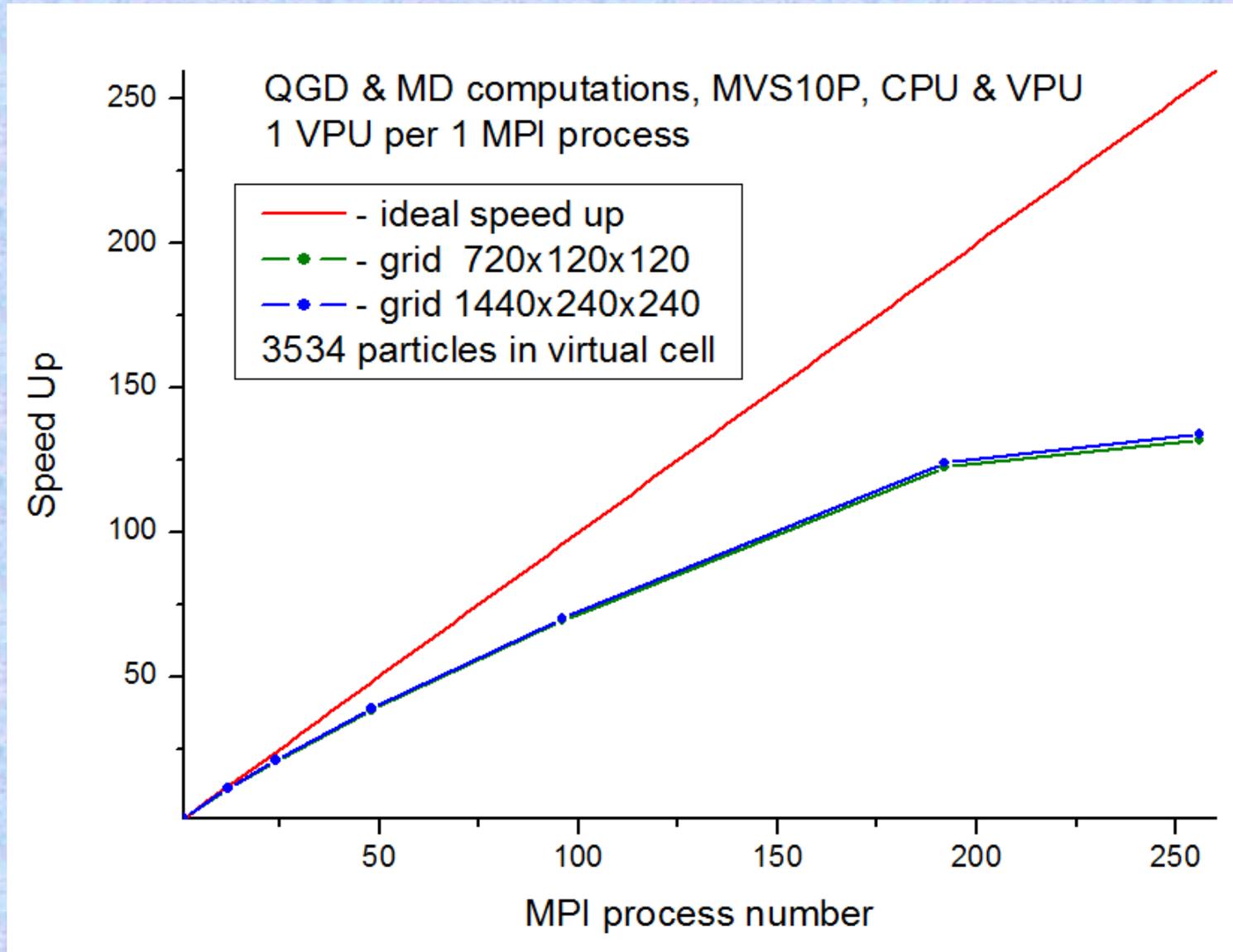
# Специфика реализации КГД блока

- Расчетная область состоит из разных частей и материалов.
- В ней может использоваться произвольная гибридная сетка, разбиение которой при распараллеливании непростая задача.
- Геометрия и размеры ячеек сетки могут отличаться от микрообъемов, где реализуются МД вычисления.
- КГД вычисления «буксуют» при расчетах сильно разреженных зон из-за нарушения сплошности среды.
  
- Решения:
- Конечно-объемная явная схема для переменных, заданных в центрах ячеек.
- Разбиение сетки ячеек либо геометрическим методом на основе виртуальной декартовой сетки, либо иерархическими алгоритмами.
- В центре ячейки, находящейся в потоке вводится виртуальный микрообъем, имеющий форму куба со стороной порядка длины свободного пробега молекул газа. Если его величина меньше, чем величина ячейки, то МД блок будет использовать этот микрообъем. Если наоборот, то для нескольких ячеек будет построен общий окаймляющий микрообъем, в котором работает МД блок.
- На границе и в погранслое в качестве микрообъема выступает сама ячейка.
- Сильно разреженные зоны до попадания в них достаточного количества газа полностью обрабатываются в МД блоке.

# Ускорение для регулярных сеток. КГД блок. Расчеты на ЦПУ.



# Ускорение для регулярных сеток. КГД и МД блок в объеме. Расчеты на ЦПУ и ВПУ.



# 1. Макропараметры газовой системы: УРС реального газа.

МД: 3D поток

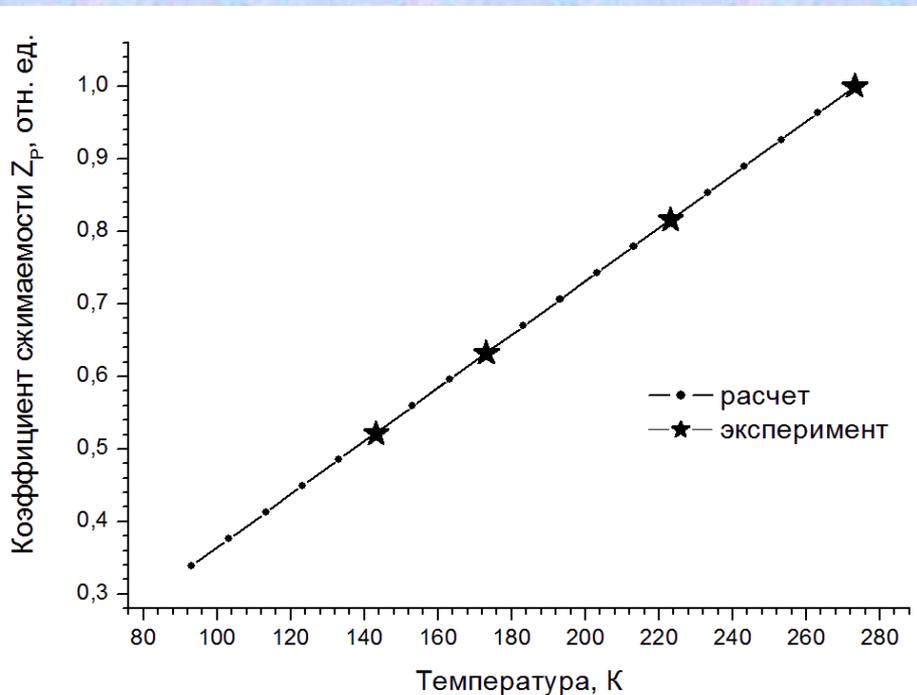
Цель – МД расчеты параметров уравнений состояния реальных газов (азот, водород и их смесь) в диапазоне интересующих температур и давлений, создание базы данных УРС.

Число частиц: 27000,

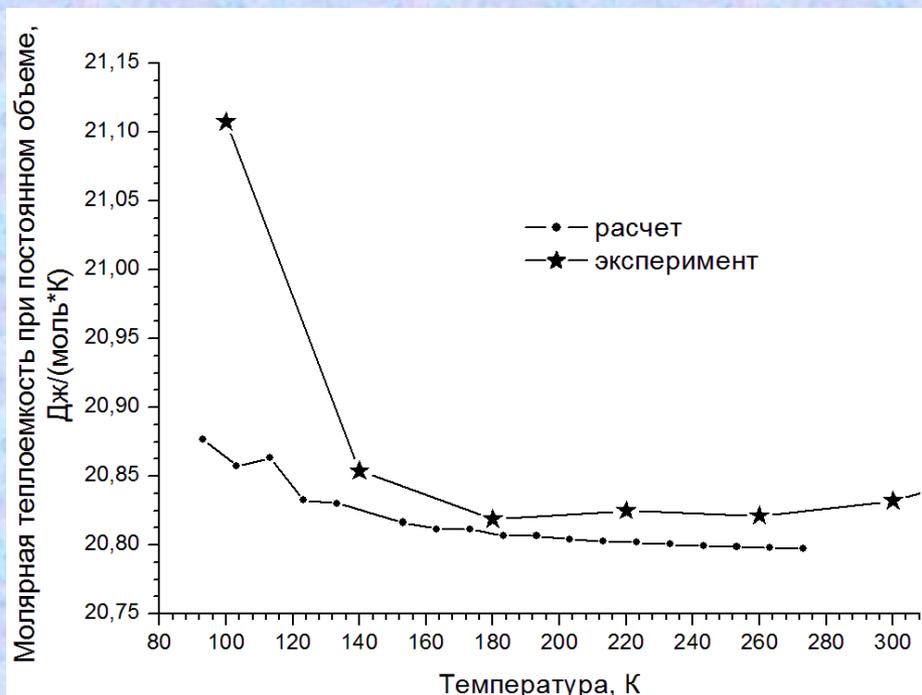
Диапазон температур: 93.15 К - 273.15 К,

Время счёта: 4нс + 4 нс + 2 нс, 1 шаг = 2 фс

## Термическое УРС (P, T, V)



## Калорическое УРС (E, P, T)



## 2. Газ и поверхность микроканала: граничные условия.

МД: газ+стенка

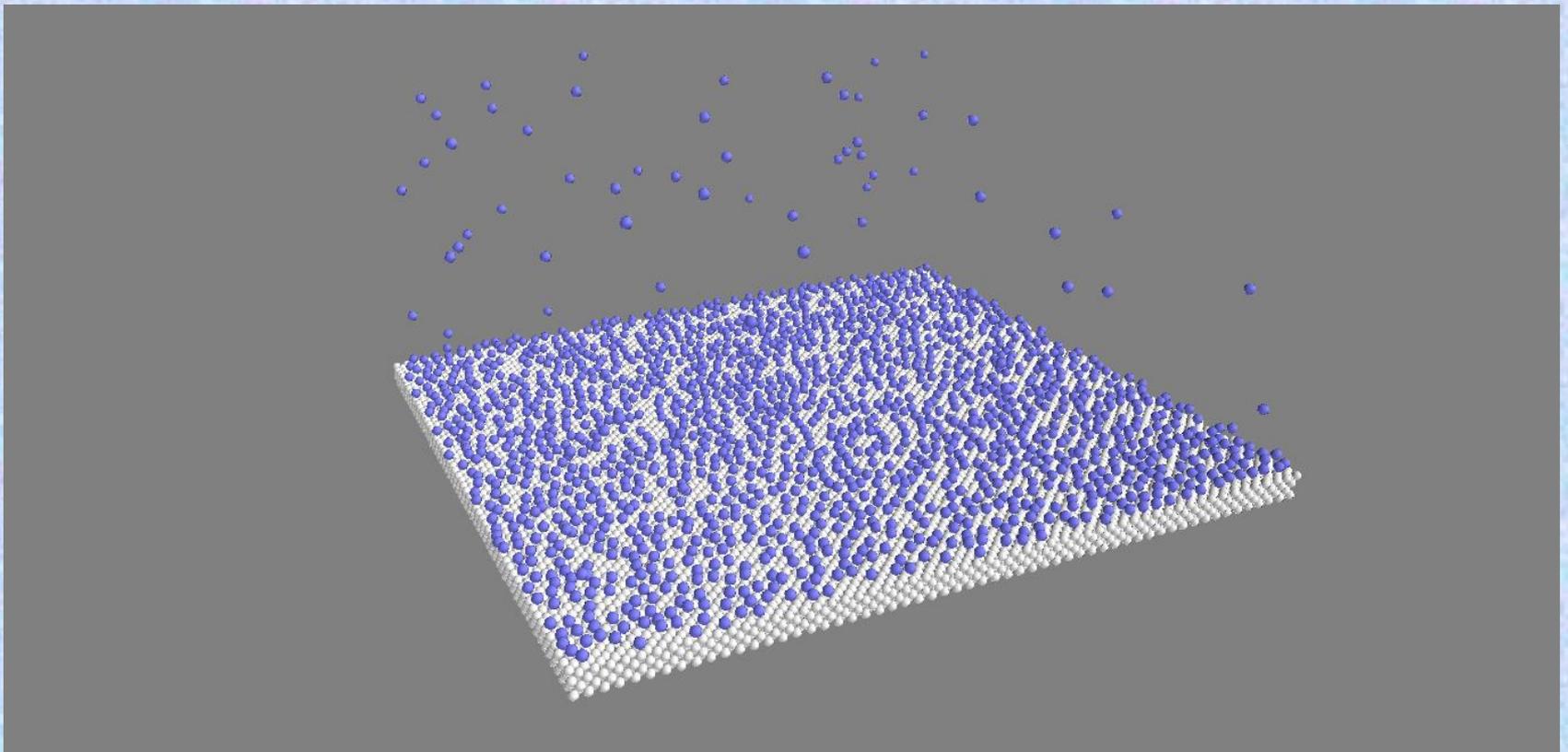
Расчет по взаимодействию азота со стенками никелевого микроканала

Число частиц:  $8\,128\,512 + 423\,840 = 8\,552\,352$ ,

Температура термостатов:  $T_{Ni} = 273.15\text{ K}$ ,  $T_{N_2} = 273.15\text{ K}$

Число шагов по времени: 1 150 000 шагов, 1 шаг = 2 фс

Размер системы:  $102 \times 102 \times 1534\text{ нм}^3$



Фрагмент распределения молекул азота (область  $20 \times 20\text{ нм}$ ) на поверхности никелевой пластины, в момент времени 2.3 нс

### 3. Коррекция течения. Обменные члены.

КГД+МД: 3D поток

$$S_a^E = \nu_{ab} (\bar{E}_a - E_a), \quad S_b^E = \nu_{ba} (\bar{E}_b - E_b),$$

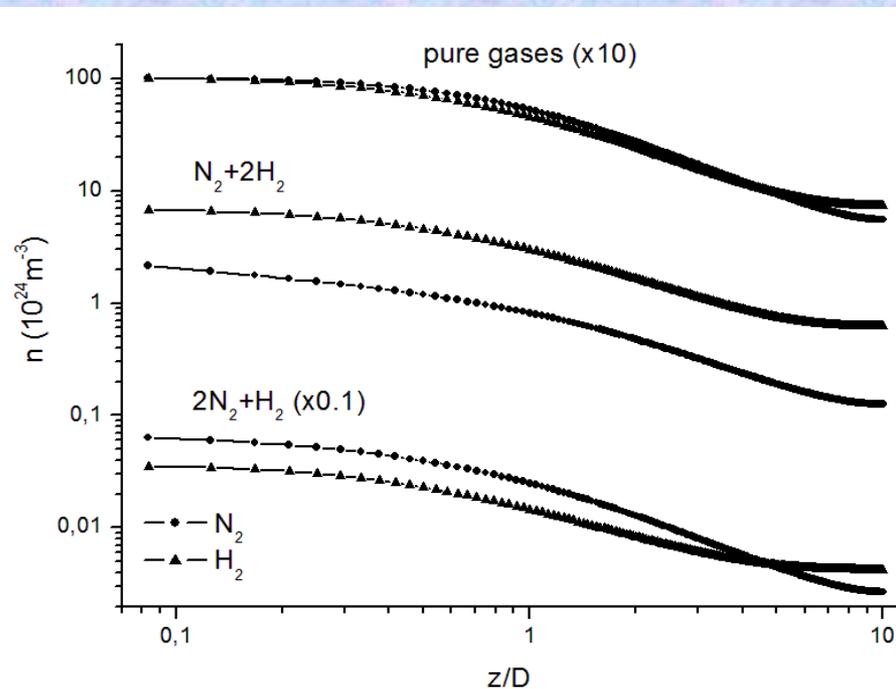
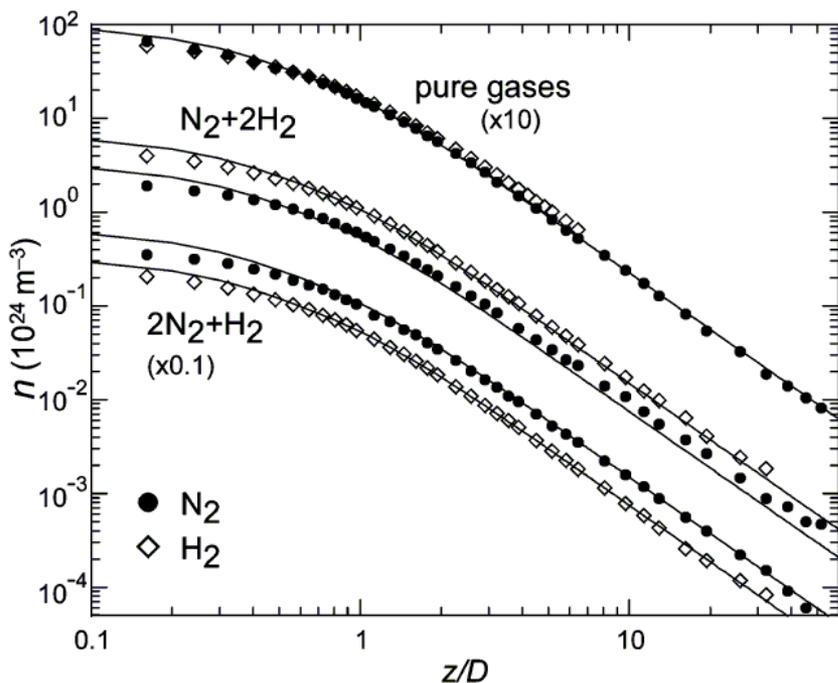
$$S_a^u = \nu_{ab} \rho_a (\bar{\mathbf{u}}_a - \mathbf{u}_a), \quad S_b^u = \nu_{ba} \rho_b (\bar{\mathbf{u}}_b - \mathbf{u}_b),$$

*Натурный эксперимент по определению параметров сверхзвукового течения смеси N<sub>2</sub>+H<sub>2</sub> в микроканалах:*

Ramos, G. Tejada, J.M. Fernandez, S. Montero.

*J. Phys. Chem. A* 2009, 113, P. 8506–8512

| sample       | $X_0(N_2)$ |
|--------------|------------|
| $N_2$        | 1          |
| $2N_2 + H_2$ | 0.66(1)    |
| $N_2 + 2H_2$ | 0.34(1)    |
| $H_2$        | 0          |



# Заключение

- 1) Разработан численный подход на основе КГД и МД для расчета течений газовых смесей в технических микросистемах
- 2) Разработаны параллельные алгоритмы и комплекс программ
- 3) Проведены модельные расчеты отдельных этапов
- 4) Проведена верификация разработанной методики путем сравнения с теоретическими и экспериментальными данными

**В процессе:**

**3D течение газа в металлическом микроканале**

**КГД+МД: общий расчет**

**Расчет по течению чистого азота через никелевый микроканал**

**Подрыга Виктория Олеговна, с.н.с. ИПМ им. М.В. Келдыша РАН**

**[RVICTORIA@LIST.RU](mailto:RVICTORIA@LIST.RU)**

**Поляков Сергей Владимирович, зав. сектором ИПМ им. М.В. Келдыша РАН**

**[POLYAKOV@IMAMOD.RU](mailto:POLYAKOV@IMAMOD.RU)**

**Спасибо за внимание!**

# Описание проблемы

## *Моделируемый технологический процесс*

*сверхзвуковое холодное газовое напыление (СХГН) нанопорошков на поверхность изделий в электронике*

## *Актуальность и перспективы*

*создание систем нанопринтинга новых электронных схем заданных наноразмеров и конфигурации, реализация чипов на квантовых эффектах (квантовые провода, массивы квантовых точек и др.)*

## *Технические проблемы, которые призвано решить моделирование*

- обеспечение заданной точности и скорости нанопринтинга,*
- обеспечение максимальной чистоты изделий,*
- обеспечение массовости выпуска изделий*

## *Математические проблемы*

*отсутствие адекватных математических моделей и средств моделирования*

## *Особенности выбранной постановки задачи*

- нейтральные условия без горения и химических реакций*
- диапазон температур 100-650 К (ниже точки плавления нанопорошка)*
- напыление с использованием смеси нейтральных газов (чистое)*
- во многих ТС используется смесь  $N_2+H_2$*
- микронные и субмикронные размеры каналов и сопел*
- матричная система подачи наночастиц*
- размеры наночастиц порошка ~ 5-10 нм*
- материалы наночастиц: Cu, Al, Ni, Ta*
- материалы подложки: поликремний,  $SiO_2$ , SiC*