

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Факультет вычислительной математики и кибернетики

На правах рукописи

Подрыга Виктория Олеговна

**МНОГОМАСШТАБНОЕ ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ТЕЧЕНИЙ ГАЗА В КАНАЛАХ ТЕХНИЧЕСКИХ МИКРОСИСТЕМ**

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

Диссертация на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Научный консультант
академик РАН, д.ф.-м.н.,
профессор Четверушкин Б.Н.

Москва 2017

Содержание

Введение.....	6
Глава 1. Вычислительные основы и методы моделирования потока газовых смесей в микроканалах технических систем.....	20
1.1 Многомасштабное моделирование течений газов в микроканалах.....	20
1.2 Квазигазодинамическая система уравнений движения газовых смесей.....	22
1.2.1 Уравнения для многокомпонентной смеси газов.....	22
1.2.2 Определение материальных коэффициентов и параметров смеси.....	32
1.2.3 Модельная задача.....	35
1.2.4 Конечно-объемная схема решения КГД уравнений.....	37
1.3 Молекулярно-динамические вычисления.....	41
1.3.1 Уравнения.....	41
1.3.2 Граничные условия.....	43
1.3.3 Начальные условия.....	45
1.3.4 Методы контроля температуры.....	50
1.3.5 Потенциалы взаимодействия.....	51
1.3.6 Схема Верле.....	56
1.4 Комбинированный численный подход на основе КГД и МД.....	58
1.5 Выводы по главе.....	62
Глава 2. Вычислительные алгоритмы, параллельная реализация и комплексы программ	63
2.1 Вычислительные алгоритмы многомасштабного подхода на основе уравнений квазигазодинамики и молекулярно-динамических вычислений.....	63
2.1.1 Классификация алгоритмов по использованию двухуровневого подхода...	64
2.1.2 Алгоритмы класса 1.....	65
2.1.3 Алгоритмы класса 2.....	66
2.1.4 Алгоритмы класса 3.....	67
2.1.5 Алгоритмы класса 4.....	68
2.1.6 Реализация алгоритмов класса 1.....	69

2.1.7 Реализация алгоритмов классов 2–4.....	70
2.2 Параллельная реализация.....	77
2.2.1 Необходимые вычислительные системы и технологии параллельных реализаций.....	77
2.2.2 Параллельная реализация алгоритмов класса 1 на высокопроизводительных вычислителях с центральными многоядерными и векторными процессорами.....	79
2.2.3 Разбиение вычислительной области и распределение вычислений между КГД и МД блоками для алгоритмов классов 2-4.....	82
2.2.4 Оценка необходимых вычислительных ресурсов.....	87
2.3 Тестирование.....	90
2.3.1 Тестирование параллельных реализаций на основе алгоритма класса 1.....	91
2.3.2 Тестирование параллельных реализаций на основе смешанных алгоритмов.....	95
2.4 Выводы по главе.....	99
Глава 3. Молекулярно-динамические расчеты равновесных состояний отдельных компонент микросистемы.....	100
3.1 Термодинамическое равновесие системы и расчет его состояний на примере системы атомов аргона.....	101
3.2 Термодинамическое равновесие системы при желаемой температуре.....	105
3.2.1 Расчет равновесного состояния газа при заданном значении температуры на примере системы молекул азота.....	105
3.2.2 Расчет равновесного состояния металлического образца при заданном значении температуры на примере системы атомов никеля.....	108
3.3 Термодинамическое равновесие металлической системы в геометрии пластины при желаемой температуре.....	115
3.3.1 Расчет равновесного состояния металлического образца при заданном значении температуры на примере системы атомов алюминия.....	116
3.3.2 Расчет равновесного состояния металлического образца при заданном значении температуры и необходимом давлении на примере системы атомов никеля.....	121
3.4 Выводы по главе.....	125

Глава 4. Молекулярно-динамические расчеты параметров уравнений состояния, кинетических коэффициентов и обменных членов реальных газов.....	126
4.1 Моделирование уравнений состояния реального газа методами молекулярной динамики.....	126
4.1.1 Постановка задачи.....	127
4.1.2 Результаты моделирования.....	130
4.2 Молекулярно-динамическое моделирование кинетических коэффициентов газовых систем.....	135
4.2.1 Постановка задачи.....	135
4.2.2 Моделирование кинетических коэффициентов по соотношению Эйнштейна на основе среднеквадратичных отклонений.....	137
4.2.3 Моделирование кинетических коэффициентов по формулам Грина-Кубо на основе интегрирования автокорреляционных функций.....	138
4.2.4 Моделирование кинетических коэффициентов с помощью смешанного подхода.....	139
4.2.5 Результаты моделирования.....	140
4.3 Выводы по главе.....	145
Глава 5. Молекулярно-динамические расчеты в пограничном слое.....	146
5.1 Математическая постановка в задачах молекулярно-динамического моделирования систем газ-металл.....	147
5.2 Молекулярно-динамическое моделирование термодинамического равновесия в системах газ-металл.....	154
5.3 Молекулярно-динамическое моделирование граничных условий и их параметров при взаимодействии газового потока с металлической пластиной.....	163
5.4 Выводы по главе.....	173
Глава 6. Моделирование течений газов в микроканалах.....	174
6.1 Математическая постановка течения бинарной газовой смеси в микроканале технической системы.....	174
6.1.1 Макроскопическое описание.....	175
6.1.2 Микроскопическое описание.....	180
6.2 Результаты моделирования истечения сверхзвуковой струи азотно-водородной смеси в вакуум.....	184

6.2.1 Анализ и верификация алгоритмов класса 1.....	185
6.2.2 Анализ и верификация алгоритмов класса 2.....	190
6.2.3 Анализ и верификация алгоритмов смешанного типа.....	194
6.3 Выводы по главе.....	200
Заключение.....	201
Список литературы.....	203

Введение

Актуальность работы

Современная вычислительная техника позволяет моделировать очень большие системы и сложные процессы на уровне детализации, который ранее не был доступен. В компьютерных моделях прошлых лет недостаток детализации зачастую восполнялся за счет ввода в модель поправочных коэффициентов, отражавших полученные опытным путем данные. Такой подход применяется и в настоящее время, однако с развитием массивно-параллельных вычислительных систем появляется возможность избавиться от многих ограничений, свойственных упрощенным моделям, и выполнять прямое предсказательное моделирование большой совокупности взаимодействующих нелинейных и разномасштабных процессов. Сказанное имеет прямое отношение к исследованию сложных газодинамических процессов в технических микро- и наносистемах [132, 326, 327], разрабатываемых с целью внедрения нанотехнологий в промышленности. В качестве примера можно указать установки для синтеза новых наноматериалов из газовой фазы, различные задачи нанолитографии и др. Наиболее эффективной методической основой решения этих практических задач является вычислительный эксперимент с моделями различного уровня сложности. При этом очень важным оказывается модельный ряд вычислительного эксперимента, опирающийся на макро- и микроскопические подходы к описанию конкретных физических процессов и численные методы их реализации на современных вычислительных системах. Например, при рассмотрении течений газовых смесей в микро- и наноканалах вблизи твердых поверхностей происходит частичное или полное нарушение гипотезы сплошности среды. Это приводит к невозможности использования уравнений газовой динамики в классическом виде и к необходимости учета межмолекулярных взаимодействий на границе твердой и газовой сред.

Изучение процессов на микро- и наномасштабах 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 молекулярному моделированию больших систем. Это дает возможность проведения расчетов многих технологических процессов в микросистемах на качественно новом уровне. Однако поскольку микросистемы реальной геометрии, сопряженные с окружающей их макросредой, могут содержать слишком большие количества частиц, то их непосредственное моделирование не всегда возможно и оправдано.

Поэтому наиболее актуальным и эффективным решением на сегодняшний день является разработка многомасштабных подходов [189, 201, 219, 300], сочетающих методы механики сплошных сред и методы молекулярной динамики.

Настоящая диссертационная работа направлена на создание многомасштабного математического подхода, позволяющего численно исследовать течения смеси газов в микроканалах технических систем с помощью современных компьютерных и суперкомпьютерных вычислительных систем с гибридной архитектурой. Решение этой актуальной проблемы приводит к разработкам новых математических моделей, численных методов, параллельных алгоритмов и комплексов программ. В работе развивается многомасштабный двухуровневый подход, сочетающий макроскопическое описание течений многокомпонентных газовых сред на основе квазигазодинамических (КГД) [46, 180, 186] уравнений с микроскопическими описаниями на основе метода молекулярной динамики (МД) [92, 141, 190, 192, 222, 229, 240, 289]. При решении КГД уравнений сеточными методами МД выступает как средство подсеточной численной коррекции макропараметров течения. Такая коррекция необходима в кнудсеновском слое вблизи стенок каналов, в областях образования сильных разрывов, в зонах генерации ударных волн. Также МД используется для уточнения уравнений состояния газовых сред, как средство расчета кинетических коэффициентов газов и обменных процессов между компонентами газовых смесей.

В целях верификации подхода в работе рассматривается два основных класса задач:

- численный анализ течений газовых смесей в каналах технических микросистем,
- определение свойств реальных газов и наноматериалов, необходимых для конструирования или использования технических микро- и наносистем.

Рассматриваемые задачи моделирования течений газов и их смесей заключаются в определении оптимального режима течения с учетом свойств газа, свойств материалов и геометрии установки. При этом следует учесть, что современные технические системы могут содержать множество микро- и наноканалов разной геометрии. Диаметр такого канала может варьироваться от нанометров до миллиметров, что приводит к задаче с широким диапазоном чисел Кнудсена (от 0.001 до 1 и более). Разработка эффективной расчетной методики в этом случае является весьма актуальной.

Задачи определения свойств реальных газов и реальных наноматериалов широко исследуются во всем мире различными методами, в том числе с помощью молекулярно-динамического моделирования. Однако в последнее время остро встал вопрос о совместном

изучении макро- и микросистем в связи с созданием сложных технических объектов в миллиметровом, субмиллиметровом и микронном диапазонах, отдельные элементы которых имеют субмикронные и наноразмеры. Поэтому актуальной является разработка многомасштабного математического подхода, позволяющего решать задачи указанных классов с заранее заданной степенью детализации, лимитируемой лишь доступными вычислительными ресурсами. Помимо адекватно учитываемых множественных физических факторов и масштабов разрабатываемый подход должен легко адаптироваться к архитектуре современных вычислительных систем.

Выбор многомасштабной методики в рамках представляемого диссертационного исследования обусловлен тем, что при микронных и субмикронных размерах моделируемой системы математическая модель течения газа не может быть полностью сформулирована в рамках макроскопического подхода. Обычно в такой ситуации для описания течения используют либо уравнения Навье-Стокса со специальными граничными условиями на стенках, либо переходят к решению уравнения Больцмана в том или ином приближении. Оба способа имеют свои преимущества и недостатки. Решение на основе уравнений Навье-Стокса позволяет существенно сократить вычислительные затраты, однако число Кнудсена в рамках такого подхода не может быть больше 0.1. Решение на основе уравнения Больцмана получается более затратным, однако диапазон чисел Кнудсена сверху не ограничен. Снизу этот диапазон ограничен величинами порядка 0.01 и менее, при которых вычислительная процедура на базе уравнения Больцмана становится неприемлемой с точки зрения временных затрат. В связи со сказанным в данной работе в диапазоне чисел Кнудсена меньше 1 используется система КГД уравнений, которая более устойчива к численным возмущениям по сравнению с системой Навье-Стокса и имеет ряд других преимуществ при моделировании систем микронных и субмикронных размеров [179].

Система КГД уравнений является дифференциальным аналогом кинетически согласованных разностных схем (КСРС) [179, 180]. КСРС и КГД развивались практически параллельно с восьмидесятих годов 20-го столетия в Институте прикладной математики АН СССР им. М.В. Келдыша группой сотрудников под руководством Б.Н. Четверушкина и Т.Г. Елизаровой. КСРС и КГД подходы существенно расширяют возможности модели Навье-Стокса. Главным отличием КСРС и КГД подходов от классической теории Навье-Стокса является использование новой процедуры пространственно-временного осреднения для определения основных газодинамических величин (плотность, импульс, энергия).

Также отличием КГД уравнений является присутствие в них дополнительных слагаемых, имеющих вид вторых пространственных производных и реализующих дополнительное сглаживание по пространству и времени. Влияние этих слагаемых незначительно для стационарных и квазистационарных газодинамических течений при малых числах Кнудсена, однако, для сильно нестационарных течений (в том числе транс- и сверхзвуковых), а также при числах Кнудсена, близких к единице, их вклад становится существенным. При численном моделировании дополнительные слагаемые проявляют себя как регуляторы, эффективность которых в подавлении нефизичных (сеточной природы) явлений становится особенно заметной при использовании расчетных сеток большой размерности.

В расчетах вязких течений КСРС и КГД дают практически такие же результаты, как и уравнения Навье-Стокса, однако, КСРС и КГД гарантируют сглаживание решения на расстояниях порядка длины свободного пробега. Явные варианты КСРС и дискретизированной КГД системы уравнений позволяют использовать неструктурированные сетки и строить эффективные параллельные алгоритмы, легко адаптирующиеся к различным архитектурам современных высокопроизводительных систем.

КСРС и КГД уравнения успешно использовались для расчетов различных газодинамических задач на макромасштабах (задачи обтекания летательных аппаратов и спуска космических аппаратов в атмосферах Земли [80] и Марса, расчеты струйных и внутренних течений в технических системах и т.д.).

Выбор КГД уравнений в качестве макромоделей был определен тремя 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. 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.

Если газодинамическая задача решается в небольшой пространственной области на малых временах, то имеется возможность применения прямого молекулярно-динамического моделирования. Как известно, МД является одним из наиболее мощных вычислительных подходов, эффективно применяемых для моделирования физических, химических и биологических процессов в микро- и наносистемах. Метод МД обладает высоким пространственно-временным разрешением и позволяет получить информацию о процессах,

происходящих в атомно-молекулярных масштабах и на временах порядка нескольких наносекунд. Использование метода МД в полном объеме уже возможно, однако для реальных размеров области и конечных промежутков времени оно представляется пока преждевременным, даже при наличии очень мощных суперкомпьютеров. Таким образом, молекулярно-динамическое моделирование в рамках многомасштабного подхода может существенно помочь в зонах, где число Кнудсена больше 1.

В итоге, комбинация КГД уравнений и МД подходов покрывает весь диапазон чисел Кнудсена и позволяет рассчитать газодинамические процессы в системах с реальной микрогеометрией с нужной степенью детализации. Однако такой подход не был известен ранее и требовал своего развития. К тому же, вычислительная сложность конкретных задач существенно повышается при увеличении пространственно-временного разрешения. Эта проблема становится преодолимой лишь при совершенствовании методов и алгоритмов компьютерного моделирования и использовании высокопроизводительных вычислительных систем.

К настоящему времени накоплен обширный фонд вычислительных алгоритмов, предназначенных для численного моделирования течений жидкости и газа и реализованных в виде универсальных CFD-пакетов (Computational Fluid Dynamics в переводе означает «вычислительная газо- и гидродинамика»). Среди зарубежных программных продуктов можно выделить STAR-CD и STAR-CCM+ фирмы CD-adapco Group [333], PHOENICS компании CHAM [301], FLUENT и CFX корпорации ANSYS [194], программные модули Multiphysics и Molecular Flow компании COMSOL [212], OpenFOAM [298] и многие другие. Среди отечественных разработок можно выделить такие программные продукты как FlowVision компании Тесис [227], пакет SigmaFlow от разработчиков из Института теплофизики СО РАН, Сибирского федерального университета и фирмы ООО «ТОРИНС» [330], пакет ЛОГОС Института теоретической и математической физики Российского федерального ядерного центра [69], пакет NOISETTE Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН [1] и другие. Указанные пакеты являются универсальными с точки зрения поддержки всей цепочки вычислительного эксперимента. Однако по тематике такой универсальности пока нет, большинство пакетов направлено на решение задач в конкретной области. В частности, такой развитый пакет как ANSYS поддерживает хотя и большое, но все же ограниченное множество прикладных областей. Кроме того, даже в рамках одной предметной области указанные пакеты имеют ограничения по методикам решения (которые к тому же не всегда являются открытой

информацией) и диапазонам параметров задач. Например, если иметь в виду задачи моделирования газодинамических течений в микросистемах, то оказывается, что большинство пакетов не поддерживают расчеты для реальных газов (тем более их смесей) и ограничены по диапазону чисел Кнудсена. Также ни один из известных пакетов по газовой динамике не включает в себя возможность расчета задач по КГД уравнениям и не поддерживает многомасштабное многоуровневое моделирование. Еще одним существенным ограничением является невысокая эффективность параллельных версий, а также их высокая стоимость в случае коммерческих пакетов. Имеются также большие проблемы с технической поддержкой, когда ответы даже на простые вопросы по использованию пакета иногда приходится ждать несколько месяцев.

В случае малых размеров системы, когда есть возможность решать задачу целиком методами МД, одними из основных инструментов моделирования являются зарубежные пакеты программирования, такие как LAMMPS от разработчиков из Sandia National Laboratories [257], HOOMD от группы Глоцер из Университета Мичигана [245], GROMACS от команды из университета Гронингена [197, 237], NAMD от разработчиков Иллинойского университета в Урбана-Шампейне [293]. Почти все описанные выше проблемы присутствуют и для этой группы пакетов, хотя некоторые из них предоставляют возможность рассмотреть применяемые математические модели и алгоритмы. В частности, имеются большие ограничения по набору используемых в пакетах потенциалов межмолекулярного взаимодействия, что заставляет дополнительно разрабатывать новые формы этих потенциалов и алгоритмы их реализации. Также проблемой является применение в рамках пакета гибридных высокопроизводительных вычислительных систем, например, имеющих графические ускорители, поскольку не все алгоритмы и функции адаптированы к таким вычислениям.

В виду описанных выше причин актуальным является развитие собственных программных комплексов, позволяющих решать сложные многомасштабные задачи в широком диапазоне физических параметров и с высокой контролируемой степенью детализации.

Последнему вопросу в диссертации также уделено большое внимание.

Цели и задачи диссертационной работы

Основными целями диссертации были создание математических подходов, численных алгоритмов, их параллельных реализаций и комплексов программ для моделирования сложных физических процессов, происходящих при течении газовых смесей по каналам технических

микросистем, и также для исследования свойств материалов технических микро- и наносистем на молекулярном уровне. На основе разработанной методики планировалось выполнить провести вычислительные эксперименты для ряда актуальных прикладных задач, в том числе, определить параметры уравнения состояния реальных газовых смесей, их транспортные коэффициенты (вязкости, теплопроводности) и коэффициенты обмена импульсом и энергией между компонентами смеси, а также параметры условий на твердой границе с учетом взаимодействия газов с поверхностью канала.

Для достижения поставленных целей в диссертационной работе были поставлены следующие задачи:

- Создать новый многомасштабный подход к математическому моделированию газодинамических течений в микро- и наноканалах технических систем, легко адаптируемый к современной вычислительной технике и охватывающий все стадии моделирования, включая формулировку математических моделей, создание численных алгоритмов, разработку параллельных алгоритмов разных классов и соответствующих компьютерных программ, проведение тестовых и верификационных расчетов.
- Разработать устойчивые численные алгоритмы для реализации различных вариантов многомасштабного подхода.
- Разработать параллельные алгоритмы и программы, реализующие созданные численные подходы и ориентированные на использование современных компьютеров и суперкомпьютеров с гибридной архитектурой.
- Разработать комплекс параллельных программ для моделирования течения газовых смесей в сложных технических микросистемах с помощью метода молекулярной динамики, в том числе в рамках многомасштабных моделей.
- Разработать комплекс параллельных программ для моделирования свойств материалов технических нано- и микросистем с помощью метода молекулярной динамики.
- Выполнить ряд тестовых и верификационных расчетов по моделированию отдельных компонент микросистемы (свойств газов и материалов стенок в условиях термодинамического равновесия), а также общего течения в канале, получить репрезентативный набор данных для валидации полученных численных результатов.
- Выполнить исследование процессов взаимодействия газа с металлической стенкой с учетом атомной структуры поверхности.

Научная новизна результатов, изложенных в диссертации

Ранее для моделирования течений газа в микроканалах использовалось несколько математических моделей в зависимости от рассматриваемого диапазона чисел Кнудсена (в том числе, система уравнений Навье-Стокса, стохастическая модель на основе кинетического уравнения Больцмана и др.). В диссертации разработан новый многомасштабный подход к моделированию течений газов и их смесей в технических микросистемах, основанный на методах механики сплошной среды (а именно, путем использования системы квазигазодинамических уравнений) и молекулярной динамики и применяемый в условиях широкого диапазона чисел Кнудсена. До настоящего времени определение вида и параметров уравнений состояния, кинетических коэффициентов газовой среды было отдельной задачей. При этом значения параметров были весьма приблизительными и не всегда согласовывались между собой. В данной работе эти недостатки устранены с помощью использования метода молекулярной динамики, в рамках которого все макропараметры газа и кинетические коэффициенты в конкретной точке среды определяются для одного и того же ансамбля частиц, и тем самым, являются самосогласованными. Также отметим, что условия на границах газ - твердое тело во многих случаях вычисляются весьма приближенно без согласования свойств газа и твердой стенки. Разработанная методика позволяет определять их путем прямых молекулярных расчетов с учетом взаимодействия молекул газа с атомами решетки твердого материала. Для реализации предложенного многомасштабного подхода разработан ряд оригинальных численных алгоритмов и их параллельных реализаций, а также комплексы параллельных программ. Получено численное решение ряда важных методических и практических задач, для которых проведение натурного эксперимента затруднено.

Методология и методы исследования

В диссертационной работе основным методом исследования течения газов в микроканалах технических систем является вычислительный эксперимент. Для моделирования транспортировки газов и их смесей через микроканал используется многомасштабный подход, сочетающий расчеты на двух уровнях: макроскопическом и микроскопическом. На макроскопическом уровне используется квазигазодинамическая система уравнений, на микроскопическом – метод молекулярной динамики.

Для численного исследования применяются:

- метод расщепления по физическим процессам (позволяющий чередовать расчеты на макро- и микроуровнях),
- метод конечных объемов для дискретизации КГД уравнений на сетках различного типа,
- схема Верле в скоростной форме для реализации уравнений ньютоновской динамики поверхностных атомов стенки микроканала и молекул протекающих через канал газов.

Параллельные алгоритмы и соответствующие программные комплексы, реализующие численные методы, основываются на методах деления областей на компактные домены и алгоритмы балансировки загрузки вычислителей. При программной реализации использовались языки программирования C/C++ и средства распараллеливания MPI, OpenMP и CUDA Toolkit.

Теоретическая ценность

Предложен и численно исследован многомасштабный двухуровневый подход к моделированию свойств и течений смесей реальных газов в микроканалах технических систем с учетом молекулярного взаимодействия их компонент между собой и материалами стенок каналов. Подход в целом сочетает такие свойства как консервативность, однородность, устойчивость, сходимость. В рамках реализации подхода исследованы различные численные алгоритмы определения параметров уравнений состояния реальных газов и кинетических коэффициентов (вязкости, теплопроводности и диффузии), из которых выбраны наиболее адекватные физической реальности и наименее затратные при вычислениях. Предложены численные алгоритмы определения условий на границе газ-металл, а также алгоритмы численной коррекции макропараметров смеси газов в потоке. Исследованы различные технологии параллельной программной реализации многомасштабного подхода, включая модели с общей, распределенной и гибридной памятью. Среди них выбраны максимально эффективные и робастные. Проведено тестирование выбранных методик на различных классах алгоритмов многомасштабных вычислений. Численно исследован ряд модельных задач, связанных с расчетами течений газов через микроканал. Полученные расчетные данные вносят определенный вклад в изучение таких сложных физических явлений, как перенос тепла и взаимодействие газа с поверхностями, при уменьшении линейных размеров системы до микронного и субмикронного уровня.

Практическая значимость

Разработан вычислительный аппарат для моделирования макропараметров состояния газовых и металлических сред как независимых, так и взаимодействующих между собой. Разработано и программно реализовано четыре класса алгоритмов для многомасштабных вычислений нелинейных процессов транспортировки газовых смесей через микроканалы технических систем. Созданы комплексы параллельных программ для расчета многомасштабных процессов протекания реальных газов в микроканалах технических систем. Реализованные программные средства позволяют использовать многопроцессорные системы с различной, в том числе, с гибридной архитектурой. Полученные результаты моделирования представляют практическую ценность для исследования газодинамических процессов в широком диапазоне параметров. Самостоятельную ценность для практических приложений имеют исследования характеристик течений газа в микро- и наноканалах, а также исследования свойств твердых материалов технических микросистем, выполненные на молекулярном уровне.

Положения и результаты, выносимые на защиту

- Разработан многомасштабный двухуровневый подход на основе квазигазодинамических уравнений и уравнений молекулярной динамики для моделирования течений газовых смесей в микроканалах технических систем.

- Предложены новые параллельные численные алгоритмы, реализующие разработанный многомасштабный подход и ориентированные на использование современных компьютеров и суперкомпьютеров с гибридной архитектурой.

- Созданы два комплекса параллельных программ:

- 1) комплекс программ для расчета свойств материалов технических микро- и наносистем на основе метода молекулярной динамики;

- 2) комплекс программ для суперкомпьютерных расчетов течений газовых смесей в микроканалах технических систем на основе разработанного многомасштабного подхода.

- Выполнен ряд тестовых и верификационных расчетов по моделированию отдельных компонент микросистемы газ - металл (свойств газов и материалов стенок в условиях термодинамического равновесия), а также общего течения в канале, получен репрезентативный набор данных для валидации полученных численных результатов.

- Выполнено исследование процессов взаимодействия газа с металлической стенкой с учетом атомной структуры поверхности. В результате исследования разработана

методика определения методами молекулярной динамики параметров граничных условий для решения практических газодинамических задач на макроскопическом уровне.

Достоверность результатов

Предложенный математический аппарат включает комбинации традиционных методов, с успехом применявшихся ранее в других приложениях, к новому классу задач. Используемые при конструировании многомасштабного подхода численные модели и алгоритмы обоснованы по отдельности многими авторами. Совокупный подход, базирующийся на известном методе расщепления по физическим процессам, верифицирован и валидирован по известным из литературы данным. Разработанные параллельные алгоритмы и программные решения верифицированы на широком круге модельных задач. Для отдельных программных компонент были произведены сравнения с известными аналитическими решениями модельных задач, а также с экспериментальными и численными результатами других авторов. Эффективность параллельных вычислений по каждому из четырех предложенных классов алгоритмов подтверждена серией тестов, выполненных на высокопроизводительных системах различных архитектур с использованием до 8000 ядер центральных процессоров, до 172 векторных процессоров, до 192 графических процессоров.

Личный вклад

В диссертацию включены положения и результаты, полученные либо лично автором, либо при его определяющем участии. Личный вклад автора состоит в создании многомасштабной двухуровневой модели, построении и реализации объединенных численных подходов для макро- и микроуровневой модели, разработке и программной реализации основных параллельных алгоритмов решения задач, разработке комплексов программ для суперкомпьютеров, анализе и интерпретации полученных результатов математического моделирования.

Вклад автора по публикациям, написанным в соавторстве:

Формулировка физической части задачи и физическая интерпретация результатов в работе [127] выполнялась совместно с В.В. Жаховским.

В работах [58, 77, 79, 112, 122, 247, 303] автору принадлежат создание многомасштабной двухуровневой модели, построение и реализация объединенных численных подходов для макро- и микроуровневой модели, разработка основных алгоритмов решения задач и их

параллельная реализация, разработка комплексов программ для суперкомпьютеров, анализ и интерпретация полученных результатов. В работах [111, 112, 115, 119, 126, 127, 129, 140, 302, 317, 319, 320,] автору принадлежат исследование и формулировка микроскопической модели, разработка численных алгоритмов и их программная реализация, разработка комплексов программ для суперкомпьютеров, анализ и интерпретация полученных результатов. В [78] автору принадлежат построение трехмерной многокомпонентной макромодеи для течения реальных газов и их смесей, построение и реализация численных подходов.

Д.В. Пузырьков в работах [129, 140, 317, 319, 320] занимался визуализацией результатов расчетов.

Реализация и внедрение результатов работы

Работа выполнялась в рамках научных планов кафедры вычислительных методов факультета ВМК МГУ имени М.В. Ломоносова, а также государственных заданий ИПМ им. М.В. Келдыша РАН за 2014-2016 г.г. Также работа поддерживалась грантами Российского фонда фундаментальных исследований:

13-01-12073-офи_м «Разработка математических основ, параллельных вычислительных алгоритмов и программных средств для решения мультимасштабных задач механики сплошной среды на гетерогенных системах сверхвысокой производительности»;

15-07-06082-а «Разработка физико-математических основ и компьютерных программ для решения актуальных задач нанoeлектроники и нанoeлектромеханики»;

15-01-04620-а «Разработка и обоснование численных методов, создание параллельных алгоритмов и программ для решения начально-краевых задач для эволюционных уравнений на нерегулярных сетках»;

16-07-00206-а «Разработка математических моделей, численных методов, параллельных алгоритмов и комплекса программ для моделирования процессов сверхзвукового напыления наночастиц на подложку»;

16-37-00417-мол_а «Разработка вычислительных основ и комплекса программ для молекулярно-динамического моделирования течений газа в микроканалах».

Апробация работы

Результаты, входящие в данную диссертационную работу, докладывались и обсуждались на семинарах ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, семинарах кафедры вычислительных методов

факультета ВМК МГУ имени М.В. Ломоносова, а также были представлены в более чем 30 докладах на международных и всероссийских конференциях: XII, XIII, XIV и XV Международных междисциплинарных научных семинарах «Математические модели и моделирование в лазерно-плазменных процессах и передовых научных технологиях» (Москва, Россия; Будва и Петровац, Черногория), X и XI Международных конференциях по Неравновесным процессам в соплах и струях (Алушта, Россия), VI и VII Международных конференциях «Распределенные вычисления и Грид-технологии в науке и образовании» (Дубна, Россия), Международной конференции «Современные проблемы прикладной математики и информатики» (Дубна, Россия), IX международной конференции «Прикладные вычислительные технологии» (Неаполь, Италия), X международной конференции «Сеточные методы для краевых задач и приложения» (Казань, Россия), Японско-Русском семинаре по суперкомпьютерному моделированию неустойчивости и турбулентности гидродинамики (Москва, Россия), XX и XXI Всероссийских конференциях «Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов решения задач математической физики» (Дюрсо, Россия), VII и VIII Всероссийских конференциях «Актуальные проблемы прикладной математики и механики», посвященной памяти А.Ф. Сидорова (Абрау-Дюрсо, Россия), Международных научных конференциях «Параллельные вычислительные технологии» 2015 и 2016 (Екатеринбург и Архангельск, Россия), XIX Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (Алушта, Россия), V Всероссийской конференции «Фундаментальные основы МЭМС- и нанотехнологий» (Новосибирск, Россия), III Международной научной конференции «Моделирование нелинейных процессов и систем» (Москва, Россия), Международных конференциях «Математические модели и вычислительная физика» 2013 и 2015 (Дубна, Россия; Татры, Словакия), IV Международной конференции по Методам частиц (Барселона, Испания), VI Московском суперкомпьютерном форуме (Москва, Россия), VII Европейском конгрессе по Вычислительным методам в Прикладных Науках и Технологиях (Крит, Греция), VI Международной конференции по Численному Анализу и Приложениям (Лозенец, Болгария), XX Международной конференции по Схемам, Системам, Коммуникациям и Компьютерам (Корфу, Греция), Международной конференции «Суперкомпьютерное моделирование в науке и производстве» (Москва, Россия).

Публикации по теме диссертации

По материалам диссертации опубликовано 18 работ в журналах, входящих в Перечень рецензируемых научных изданий, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией для опубликования основных научных результатов диссертаций, или входящих в одну из международных баз данных и систем цитирования Scopus, Web of Science. Также по результатам диссертации оформлено 4 свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ. Список публикаций по материалам диссертации соответствует следующим номерам из списка литературы: [58, 77–79, 104, 107, 108, 111, 112, 115, 119, 122, 126, 127, 129, 140, 247, 302, 303, 317, 319, 320]. Прочие публикации автора по теме исследования: [59–61, 109, 110, 113, 114, 116–118, 120–121, 123–125, 128, 131, 139, 248, 256, 303, 304, 306–316, 318].

Благодарности

Автор выражает глубокую признательность своему научному консультанту академику РАН Б.Н. Четверушкину за полезные советы и поддержку. Автор благодарен С.В. Полякову (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН) и В.В. Жаховскому (ВНИИА им. Н.Л. Духова) за методические рекомендации и обсуждения результатов во время подготовки диссертационной работы. Автор выражает признательность коллегам по научной работе за сотрудничество, полезные замечания и комментарии. Среди них А.С. Болдарев, В.А. Гасилов, Т.Г. Елизарова, Н.В. Змитренко, Ю.Н. Карамзин, А.В. Колесниченко, Т.А. Кудряшова, В.И. Мажукин, В.П. Осипов, Ю.А. Повещенко, Ю.Г. Рыков, В.Ф. Тишкин, Г.В. Шпатаковская (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН), Г.Г. Еленин, С.И. Мухин, Н.П. Савенкова, А.Н. Якунчиков (МГУ имени М.В. Ломоносова), Г.Э. Норман, В.В. Стегайлов (ОИВТ РАН).

В работе использовались суперкомпьютеры Ломоносов – НИВЦ МГУ, МВС-100К и МВС-10П – МСЦ РАН, К-100 – ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, кластер Ангара-К1 – ОАО "НИЦЭВТ", кластер IBM Power8 – ЛИТ ОИЯИ. Автор выражает благодарность этим организациям за предоставленные ресурсы.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения и списка литературы. Полный объем диссертации 229 страниц текста с 73 иллюстрациями и 14 таблицами. Список литературы содержит 360 наименований.

ГЛАВА 1

Вычислительные основы моделирования потока газовых смесей в микроканалах технических систем

В данной главе представляются вычислительные основы моделирования течения газов и газовых смесей в микроканалах технических систем. В начале главы дается общее описание многомасштабного двухуровневого подхода, предложенного в рамках диссертации для численного моделирования газодинамических процессов в микроканалах. В основе подхода лежит комбинирование вычислений на макроскопическом и микроскопическом уровнях. Для реализации подхода на макроскопическом уровне в качестве основной математической модели выбрана система квазигазодинамических (КГД) уравнений, записанная для случая многокомпонентной смеси реальных газов. На микроскопическом уровне используется молекулярная динамика (МД). С ее помощью рассчитываются материальные коэффициенты КГД уравнений (коэффициенты вязкости, теплопроводности, диффузии), параметры уравнений состояния компонент и смеси в целом, обменные члены, параметры граничных условий. Представленный подход в целом позволяет решать практические задачи газовой динамики характерные для современной нанотехнологии в условиях повышенных требований к качеству вычислительного эксперимента.

1.1 Многомасштабное моделирование течений газов в микроканалах

Технические системы малого размера характеризуются наличием нескольких масштабов и нелинейностью процессов, происходящих при течении в них газов [147]. Физика функционирования подобных систем описывается целой иерархией математических моделей, спускающейся вплоть до атомарного уровня. В результате объединения вычислений на нескольких масштабных уровнях появляется возможность точного предсказания свойств моделируемых объектов и процессов. Вычислительная сложность конкретных задач

существенно повышается, что становится преодолимым лишь при совершенствовании методов моделирования и использовании высокопроизводительных систем.

Проблема моделирования течений газов и их смесей заключается в определении оптимального режима течения с учетом свойств газа, свойств материалов и геометрии установки. Современные технические системы могут содержать множество микро- и наноканалов разной геометрии. Диаметр такого канала может варьироваться от десятков нанометров до десятков миллиметров, что приводит к задаче с широким диапазоном чисел Кнудсена (от 0.001 до 1 и более).

Предлагается многомасштабный подход для моделирования нелинейных процессов, возникающих при транспортировке газовой смеси через микроканал технической системы. Основная проблема транспортировки газов через микроканалы связана с расчетами параметров течения газа во всех частях технической системы, что тесно связывает моделирование течения газа с особенностями конструкций технических установок. Представленный комбинированный подход позволяет решать задачи с описанной выше проблемой, используя одну и ту же математическую модель. Данный подход сочетает расчеты течения газовой среды в конкретных микроканалах и расчеты взаимодействия потока газа со стенками этих каналов. Моделирование проводится на двух масштабных уровнях – основном (макромасштаб), имеющем характерные размеры от нескольких десятков микрон до десятков миллиметров, и дополнительном (микромасштаб), имеющем характерные размеры порядка микрона и менее. На основном уровне рассчитываются течения газа во всех частях установки, а также учитываются внешние факторы, связанные с управлением процессом течений. На дополнительном уровне 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).

Реализация подхода основана на расщеплении по физическим процессам [90, 275, 276]. На макромасштабе рассматриваются квазигазодинамические (КГД) уравнения [46, 180, 185, 186], на микромасштабе используется метод молекулярной динамики (МД) [18, 42, 57, 74–76, 85, 92, 98, 99, 137, 141, 170, 190, 192, 222, 229, 240, 289]. Использовать представленный подход можно в любом диапазоне чисел Кнудсена.

1.2 Квазигазодинамическая система уравнений движения газовых смесей

Макроскопическая модель течения во всех частях технической установки основывается на КГД уравнениях [46]. Основой для построения КГД системы уравнений являются дифференциальные аналоги кинетически согласованных разностных схем решения задач газовой динамики [179]. Вопросы теории КГД систем, детали построения разностных методов и разнообразные приложения подробно представлены в монографиях [46, 180, 185, 186].

Главным отличием КГД подхода от теории Навье-Стокса является использование процедуры пространственно-временного осреднения для определения основных газодинамических величин (плотность, импульс, энергия). Также КГД уравнения отличаются от системы уравнений Навье-Стокса дополнительными малыми добавками, позволяющими естественным образом регуляризовать последующие сеточные вычисления. Влияние этих добавочных членов незначительно для стационарных и квазистационарных газодинамических течений при малых числах Кнудсена, однако, для сильно нестационарных течений, а также при числах Кнудсена, близких к единице, их вклад становится существенным. КГД система уравнений дает корректные решения в широком диапазоне чисел Кнудсена (вплоть до 1), но для ее корректной работы необходимы замыкания в виде уравнений состояния, кинетических коэффициентов, учета перераспределения импульса и энергии в добавочных членах, граничных условий.

1.2.1 Уравнения для многокомпонентной смеси газов

Общий вид и построение КГД уравнений в случае бинарной смеси политропных газов представлен в работе [46]. Вид КГД уравнений в случае сжимаемого вязкого теплопроводного газа с реальными уравнениями состояния можно увидеть в работах [23, 36, 51-54].

Далее будет сделан вывод КГД уравнений в случае многокомпонентной смеси реальных газов. Для этого нужно сначала рассмотреть интегро-дифференциальное уравнение Больцмана [11, 12, 20, 38, 62, 68]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}}) f + (\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{v}}) f = I(f, f), \quad (1.1)$$

где $f = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ – одночастичная функция распределения, $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)^T \equiv (x, y, z)^T$ – радиус-вектор отдельной частицы с массой m , $\mathbf{v} = (v_1, v_2, v_3)^T \equiv (v_x, v_y, v_z)^T$ – скорость этой частицы, \mathbf{F} – действующая на частицы объемная внешняя сила, отнесенная к единице массы, ∇ – оператор Гамильтона, $I(f, f)$ – интеграл столкновений Больцмана, представляющий собой нелинейный функционал, определяющий изменение функции распределения в результате парных столкновений.

Функция распределения $f = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ нормирована и определяется выражением: $\int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{r}d\mathbf{v} = m dN$, которое полагает вероятное число частиц dN в элементе объема $d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ около точки (\mathbf{r}, \mathbf{v}) фазового пространства координат и скоростей в фиксированный момент времени t .

Конкретный вид интеграла столкновений можно посмотреть в литературе [4, 8, 68, 86, 176, 200]. Важным свойством интеграла является его ортогональность сумматорным (столкновительным) инвариантам $h(\mathbf{v}) = 1; \mathbf{v}; \mathbf{v}^2/2$, что означает:

$$\int h(\mathbf{v}) I(f, f) d\mathbf{v} = 0. \quad (1.2)$$

Соотношение (1.2) выражает законы сохранения массы, импульса и энергии частиц при их парном столкновении.

Одна из основных трудностей, возникающая при решении уравнения Больцмана, обусловлена сложностью стоящего в правой части уравнения (1.1) интеграла столкновений. Поэтому развивался новый подход к решению уравнения Больцмана, заключающийся в замене интеграла столкновений в уравнении Больцмана на более простое выражение. Упрощенные выражения называются моделями интеграла столкновений. Уравнение Больцмана с модельным интегралом столкновений называется модельным уравнением Больцмана или кинетической моделью [86, 166, 175–178, 207–211, 226].

Далее рассматривается наиболее популярная модель уравнения Больцмана, которую независимо друг от друга предложили в своих работах П.Л. Бхатнагар, Е.М. Гросс, М. Крук [199] и П. Веландер [345]. Они учли, что интеграл столкновений в уравнении Больцмана представляет собой скорость, с которой функция распределения стремится к равновесной максвелловской функции, и его можно заменить отношением разности действительной и равновесной функций распределения к среднему времени между двумя последовательными столкновениями частиц.

Модельное уравнение имеет следующий вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}}) f + (\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{v}}) f = Q(f, f), \quad Q(f, f) = \frac{f^{(0)} - f}{\tau}, \quad (1.3)$$

где $\tau = \tau(\rho, T)$ – характерное время релаксации функции f к локально-максвелловской равновесной функции $f^{(0)}$; ρ – плотность, T – температура.

Локально-максвелловская функция распределения определяется формулой:

$$f^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \frac{\rho}{(2\pi\mathfrak{R}T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{u} - \mathbf{v})^2}{2\mathfrak{R}T}\right), \quad (1.4)$$

где $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)^T \equiv (u_x, u_y, u_z)^T$ – макроскопическая средняя скорость среды, $\mathfrak{R} = k_b / m$ – газовая постоянная, k_b – постоянная Больцмана.

Уравнение (1.3) называется модельным кинетическим уравнением Бхатнагара-Гросса-Крука (БГК) или моделью БГК [199, 238, 253]. Модель БГК создана для моделирования молекулярных столкновений одного газа. Результатом молекулярных столкновений в этой модели является экспоненциальная релаксация по направлению к локальному термодинамическому равновесию. Модель интеграла столкновений сохраняет все его свойства, в том числе для $Q(f, f)$ выполняется важное свойство (1.2).

В 1962 году Сирович [332] дал обобщение модели БГК на случай газовой смеси. В 1964 году Морзе [292] представил необходимые свободные параметры, которые были рассчитаны на основе законов сохранения. В 1971 году Ву и Ли [354] исследовали одномерный бинарный поток газовой смеси в ударной трубе, с использованием кинетической модели для смеси двух газов. Многими авторами было исследовано течение бинарной газовой смеси [268, 274, 279, 355, 358]. Подробные построение модели, описание и расчеты с помощью уравнений КГД течения смеси двух политропных газов представлены в работах [46, 47].

Для моделирования многокомпонентных газовых течений рассматривается кинетическая модель для N газов, которую предложили в 1989 году Гарзо, Сантос, Брей [230] без учета внешних сил. Уравнение для каждого вида газа имеет одинаковый вид, потому можно записать уравнение для газа одного типа:

$$\frac{\partial f_l}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) f_l = \sum_{l'=1}^N Q_{ll'}, \quad l = 1, \dots, N, \quad (1.5)$$

где l – тип газа, $Q_{ll'}$ – соответствующая модель интеграла столкновений, описывающая взаимодействия газов с номерами l и l' .

В [230] модель интеграла столкновений рассматривается в релаксационной форме и для смеси нескольких газов имеет вид:

$$Q_{ll'} = \frac{f_{ll'}^{(0)} - f_l}{\tau_{ll'}} = \nu_{ll'} (f_{ll'}^{(0)} - f_l), \quad \nu_{ll'} = \frac{1}{\tau_{ll'}}, \quad (1.6)$$

где $\nu_{ll'}$ и $\tau_{ll'}$ – частота столкновений и среднее время между столкновениями частицы типа l с частицами типа l' , $f_{ll'}^{(0)}$ – локально-максвелловская функция распределения, определяемая аналогично (1.4):

$$f_{ll'}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \frac{\rho_l}{(2\pi\mathfrak{R}_l T_{ll'})^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{u}_{ll'} - \mathbf{v})^2}{2\mathfrak{R}_l T_{ll'}}\right), \quad (1.7)$$

$$\mathbf{u}_{ll'} = \frac{m_l \mathbf{u}_l + m_{l'} \mathbf{u}_{l'}}{m_l + m_{l'}}, \quad T_{ll'} = T_l + \frac{2m_l m_{l'}}{(m_l + m_{l'})^2} \left[T_{l'} - T_l + \frac{m_{l'}}{6k_b} (\mathbf{u}_l - \mathbf{u}_{l'})^2 \right]. \quad (1.8)$$

где $\mathbf{u}_{ll'}$, $T_{ll'}$ – скорость и температура, получающиеся в равновесии в смеси компонент сорта l и l' , $\mathfrak{R}_l = k_b / m_l$ – индивидуальная газовая постоянная. Можно использовать и более сложное представление локально-максвелловской функции распределения [230].

Как и для одного газа, для смеси газов модельная функция интеграла столкновений обладает свойством ортогональности сумматорным (столкновительным) инвариантам $h(\mathbf{v}) = 1$; \mathbf{v} ; $\mathbf{v}^2/2$, что выражается в выполнении равенств:

$$\begin{aligned} \int Q_{ll'} d\mathbf{v} &= 0; \\ \int \mathbf{v} Q_{ll'} d\mathbf{v} + \int \mathbf{v} Q_{l'l} d\mathbf{v} &= 0; \\ \int \mathbf{v}^2 Q_{ll'} d\mathbf{v} + \int \mathbf{v}^2 Q_{l'l} d\mathbf{v} &= 0. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Полное число столкновений должно быть сбалансировано, потому должно выполняться соотношение:

$$n_l \nu_{ll'} = n_{l'} \nu_{l'l}, \quad l, l' = 1, \dots, N, \quad (1.10)$$

где n_l – числовая плотность (концентрация) газа типа l .

Подставив (1.6) в (1.5) получим:

$$\frac{\partial f_l}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) f_l = \sum_{l'=1}^N v_{ll'} (f_{l'}^{(0)} - f_l), \quad l = 1, \dots, N, \quad (1.11)$$

Для удобства дальнейших выкладок введем $Q_l = \sum_{l'=1}^N Q_{ll'}$, тогда уравнение (1.9) примет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_l}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) f_l &= Q_l, \quad l = 1, \dots, N, \\ Q_l &= \sum_{l'=1}^N v_{ll'} (f_{l'}^{(0)} - f_l). \end{aligned} \quad (1.12)$$

Введем дополнительные обозначения для упрощения дальнейшего изложения: $F_l^* = f_{l'}^{(0)}$ для $l \neq l'$ и $F_l = f_l^{(0)}$ для $l = l'$. При этом получается, что функции с верхним индексом F_l^* зависят от параметров после столкновения молекул газов разных типов.

Для построения КГД уравнений в случае течения многокомпонентной смеси газов, аналогично [46], необходимо ввести в уравнение (1.12) функции распределения f_l близкие к локально-максвелловским функциям. Тогда они приближенно могут быть представлены в виде разложений по малому параметру в окрестности своих равновесных значений:

$$f_l = F_l - \tau (\mathbf{v} \cdot \nabla) F_l, \quad (1.13)$$

$$\tau = \mu / p, \quad (1.14)$$

где τ – максвелловское время релаксации смеси газов, μ и p – вязкость и давление смеси.

В [46, 180] выведено модельное кинетическое уравнение, на основе которого получается КГД система уравнений. В [46] показано, что данное модельное кинетическое уравнение формально может быть также получено из (1.10), если в уравнении (1.10) заменить функцию распределения в конвективном слагаемом на ее приближенное значение вида (1.11). Совершив данную замену, получаем:

$$\frac{\partial f_l}{\partial t} + \nabla_i v_i F_l - \nabla_i \tau \nabla_j v_i v_j F_l = Q_l, \quad l = 1, \dots, N. \quad (1.15)$$

Здесь индексы i и j соответствуют компонентам пространственных координат.

Макроскопические уравнения КГД получаются посредством моментного усреднения уравнения (1.15) в пространстве скоростей v_i . Для чего необходимо проинтегрировать (1.15) с весами $1; \mathbf{v}; \mathbf{v}^2/2$. Левая часть уравнений (1.15) идентична уравнениям в [46, 54, 180] для бинарной смеси газов, правая часть отличается. Запишем соответствующие уравнения, оставив в правой части неизвестные интегральные члены:

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_l \mathbf{u}_l - \tau [[\operatorname{div}(\rho_l \mathbf{u}_l)] \mathbf{u}_l + (\rho_l \mathbf{u}_l \nabla) \mathbf{u}_l + \nabla p_l]) = \int Q_l d\mathbf{v}, \quad l=1, \dots, N, \quad (1.16)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_l u_{l,k}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_l \mathbf{u}_l - \tau [[\operatorname{div}(\rho_l \mathbf{u}_l)] \mathbf{u}_l + (\rho_l \mathbf{u}_l \nabla) \mathbf{u}_l + \nabla p_l]) u_{l,k} + \mathbf{e}_k p_l - \Pi_{l,k}) &= \int \mathbf{v} Q_l d\mathbf{v}, \\ \Pi_{l,k} &= (\Pi_{l,j,k}), \quad \Pi_{l,j,k} = \Pi_{l,j,k}^{NS} + \Pi_{l,j,k}^{QGD}, \\ \Pi_{l,j,k}^{NS} &= \mu \left(\frac{\partial u_{l,j}}{\partial x_k} + \frac{\partial u_{l,k}}{\partial x_j} + \delta_{j,k} \left(\zeta - \frac{2}{3} \right) \operatorname{div}(\mathbf{u}_l) \right), \end{aligned} \quad (1.17)$$

$$\Pi_{l,j,k}^{QGD} = \rho_l u_{l,j} \tau \left[(\mathbf{u}_l \nabla) u_{l,k} + \frac{1}{\rho_l} \frac{\partial p_l}{\partial x_k} \right] + \delta_{j,k} \tau ((\mathbf{u}_l \nabla) p_l),$$

$$\delta_{j,k} = \begin{cases} 1, & j = k, \\ 0, & j \neq k, \end{cases} \quad \mathbf{e}_k = (\delta_{1,k}, \delta_{2,k}, \delta_{3,k})^T;$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_l}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_l \mathbf{u}_l - \tau [[\operatorname{div}(\rho_l \mathbf{u}_l)] \mathbf{u}_l + (\rho_l \mathbf{u}_l \nabla) \mathbf{u}_l + \nabla p_l]) H_l + \mathbf{q}_l - \Pi_l \mathbf{u}_l) &= \int \frac{\mathbf{v}^2}{2} Q_l d\mathbf{v}, \\ \mathbf{q}_l &= \mathbf{q}_l^{NS} + \mathbf{q}_l^{QGD}, \quad \mathbf{q}_l^{NS} = -\chi \nabla T_l, \quad \mathbf{q}_l^{QGD} = -\tau \left[(\mathbf{u}_l \nabla) \varepsilon_l + p_l (\mathbf{u}_l \nabla) \left(\frac{1}{\rho_l} \right) \right] \rho_l \mathbf{u}_l, \end{aligned} \quad (1.18)$$

где все переменные с индексом l относятся к газу типа l , j, k – индексы пространственных координат. Переменные соответственно означают: $\rho_l = m_l n_l$ – массовые плотности, где m_l – масса молекул газа l , \mathbf{u}_l – векторы макроскопических скоростей, p_l – парциальные давления, \mathbf{e}_k – единичные орты, Π_l – тензоры вязких напряжений компонент смеси, $\Pi_{l,j,k}^{NS}$ – компоненты тензора вязких напряжений для уравнений Навье-Стокса, $\Pi_{l,j,k}^{QGD}$ – КГД поправка к компонентам тензора вязких напряжений, $\delta_{j,k}$ – символ Кронекера, E_l – плотности полной энергии, H_l – полные энтальпии, \mathbf{q}_l – векторы тепловых потоков компонент смеси, \mathbf{q}_l^{NS} – вектор теплового потока для уравнений Навье-Стокса, \mathbf{q}_l^{QGD} – КГД поправка к вектору теплового потока, T_l – температуры, ε_l – внутренние энергии. Также присутствуют параметры смеси: μ и $\zeta = \mu_b / \mu$ –

коэффициенты динамической и относительной объемной вязкостей (μ_b – коэффициент объемной вязкости), χ – коэффициент теплопроводности, τ – время релаксации смеси газов к квазиравновесному состоянию. Параметры смеси зависят от индивидуальных коэффициентов компонент смеси: $\mu_l = \mu_l(T_l)$, $\zeta_l = \zeta_l(T_l)$, $\chi_l = \chi_l(T_l)$ и $\tau_l = \tau_l(T_l, \rho_l)$.

Следует отметить, что коэффициентом объемной вязкости часто пренебрегают в случае рассмотрения идеального газа. Однако при расчетах реальных газодинамических процессов такое упрощение не является корректным [26, 49, 175, 281]. В частности, в зависимости от типа рассматриваемого газа (двухатомного, трехатомного и т.д.) и конкретных условий эксперимента значение коэффициента объемной вязкости может быть в несколько раз больше значения коэффициента сдвиговой вязкости. Не следует пренебрегать объемной вязкостью в смесях двухатомных газов, например, в смеси, содержащей азот и водород, которая рассматривается в рамках модельной задачи в Главе 6. Также расчет коэффициента объемной вязкости является особенно важным в случаях моделирования ударных волн, затуханий звуковых волн, сильного расширения или сжатия газовой среды.

Для интегрирования правой части уравнения (1.15), т.е. определения значений правых частей уравнений (1.16)-(1.18), далее приведены свойства функций из [46]:

$$\begin{aligned}
 \int f_l d\mathbf{v} &= \int F_l d\mathbf{v} = \int F_l^* d\mathbf{v} = \rho_l; \\
 \int \mathbf{v} f_l d\mathbf{v} &= \int \mathbf{v} F_l d\mathbf{v} = \rho_l \mathbf{u}_l; \\
 \int \mathbf{v} F_l^* d\mathbf{v} &= \rho_l \mathbf{u}_l^*; \\
 \int \mathbf{c} f_l d\mathbf{v} &= \int \mathbf{c} F_l d\mathbf{v} = \int \mathbf{c} F_l^* d\mathbf{v} = 0; \\
 \int \frac{\mathbf{v}^2}{2} f_l d\mathbf{v} &= \int \frac{\mathbf{v}^2}{2} F_l d\mathbf{v} = E_l; \\
 \int \frac{\mathbf{v}^2}{2} F_l^* d\mathbf{v} &= E_l^*,
 \end{aligned} \tag{1.19}$$

где $\mathbf{c} = \mathbf{v} - \mathbf{u}$ – тепловая скорость; \mathbf{u}_l^* , E_l^* – скорости и энергии молекул газа после столкновения.

Вычислим моменты модельного интеграла столкновения в (1.15) путем осреднения интеграла по скоростям. Для этого запишем модель интеграла столкновений в виде суммы, разделив компоненты столкновений газов разных типов и газа одного типа:

$$\mathcal{Q}_l = \sum_{l'=1}^N \mathcal{Q}_{ll'} = \mathcal{Q}_{ll} + \sum_{l'=1, l' \neq l}^N \mathcal{Q}_{ll'}. \tag{1.20}$$

Принимая во внимание введенные ранее обозначения, получаем:

$$Q_l = v_{ll}(F_l - f_l) + \sum_{l'=1, l' \neq l}^N v_{ll'}(F_{l'}^* - f_{l'}). \quad (1.21)$$

В релаксационной модели частоты столкновений от скоростей молекул не зависят. Тогда для уравнения плотности (1.16) имеем:

$$\begin{aligned} \int v_{ll}(F_l - f_l) d\mathbf{v} &= v_{ll} \left(\int F_l d\mathbf{v} - \int f_l d\mathbf{v} \right) = v_{ll} (\rho_l - \rho_l) = 0, \\ \int \sum_{l'=1, l' \neq l}^N v_{ll'}(F_{l'}^* - f_{l'}) d\mathbf{v} &= \sum_{l'=1, l' \neq l}^N \int v_{ll'}(F_{l'}^* - f_{l'}) d\mathbf{v} = \sum_{l'=1, l' \neq l}^N v_{ll'} \int (F_{l'}^* - f_{l'}) d\mathbf{v} = \\ &= \sum_{l'=1, l' \neq l}^N v_{ll'} \left(\int F_{l'}^* d\mathbf{v} - \int f_{l'} d\mathbf{v} \right) = \sum_{l'=1, l' \neq l}^N v_{ll'} (\rho_{l'} - \rho_{l'}) = 0 \end{aligned}$$

Следовательно, правая часть в (1.16) соответствует:

$$\int Q_l d\mathbf{v} = 0, \quad l = 1, \dots, N. \quad (1.22)$$

Для уравнения (1.17) имеем:

$$\begin{aligned} \int v_{ll}(F_l - f_l) \mathbf{v} d\mathbf{v} &= v_{ll} \left(\int F_l \mathbf{v} d\mathbf{v} - \int f_l \mathbf{v} d\mathbf{v} \right) = v_{ll} (\rho_l \mathbf{u}_l - \rho_l \mathbf{u}_l) = 0, \\ \int \sum_{l'=1, l' \neq l}^N v_{ll'}(F_{l'}^* - f_{l'}) \mathbf{v} d\mathbf{v} &= \sum_{l'=1, l' \neq l}^N \int v_{ll'}(F_{l'}^* - f_{l'}) \mathbf{v} d\mathbf{v} = \sum_{l'=1, l' \neq l}^N v_{ll'} \int (F_{l'}^* - f_{l'}) \mathbf{v} d\mathbf{v} = \\ &= \sum_{l'=1, l' \neq l}^N v_{ll'} \left(\int F_{l'}^* \mathbf{v} d\mathbf{v} - \int f_{l'} \mathbf{v} d\mathbf{v} \right) = \sum_{l'=1, l' \neq l}^N v_{ll'} (\rho_{l'} \mathbf{u}_{l'}^* - \rho_{l'} \mathbf{u}_{l'}). \end{aligned}$$

Следовательно, правая часть в (1.17) соответствует:

$$\int \mathbf{v} Q_l d\mathbf{v} = \sum_{l'=1, l' \neq l}^N v_{ll'} (\rho_{l'} \mathbf{u}_{l'}^* - \rho_{l'} \mathbf{u}_{l'}), \quad l = 1, \dots, N. \quad (1.23)$$

Для интеграла столкновений в уравнении (1.15) величина \mathbf{v} не является сумматорным инвариантом, поскольку возможен обмен импульсом между компонентами газовой смеси. Полученный в (1.23) момент интеграла называется обменным членом и обозначается $\mathbf{S}_l^{(\rho u)}$:

$$\mathbf{S}_l^{(\rho u)} = \sum_{l'=1, l' \neq l}^N v_{ll'} (\rho_{l'} \mathbf{u}_{l'}^* - \rho_{l'} \mathbf{u}_{l'}), \quad l = 1, \dots, N. \quad (1.24)$$

Для уравнения (1.18) имеем:

$$\int v_{ll} (F_l - f_l) \frac{\mathbf{v}^2}{2} d\mathbf{v} = v_{ll} \left(\int F_l \frac{\mathbf{v}^2}{2} d\mathbf{v} - \int f_l \frac{\mathbf{v}^2}{2} d\mathbf{v} \right) = v_{ll} (E_l - E_l) = 0,$$

$$\int \sum_{l'=1, l' \neq l}^N v_{ll'} (F_{l'}^* - f_{l'}) \frac{\mathbf{v}^2}{2} d\mathbf{v} = \sum_{l'=1, l' \neq l}^N \int v_{ll'} (F_{l'}^* - f_{l'}) \frac{\mathbf{v}^2}{2} d\mathbf{v} = \sum_{l'=1, l' \neq l}^N v_{ll'} \int (F_{l'}^* - f_{l'}) \frac{\mathbf{v}^2}{2} d\mathbf{v} =$$

$$= \sum_{l'=1, l' \neq l}^N v_{ll'} \left(\int F_{l'}^* \frac{\mathbf{v}^2}{2} d\mathbf{v} - \int f_{l'} \frac{\mathbf{v}^2}{2} d\mathbf{v} \right) = \sum_{l'=1, l' \neq l}^N v_{ll'} (E_{l'}^* - E_{l'}).$$

Следовательно, правая часть в (1.18) соответствует:

$$\int \frac{\mathbf{v}^2}{2} Q_l d\mathbf{v} = \sum_{l'=1, l' \neq l}^N v_{ll'} (E_{l'}^* - E_{l'}), \quad l = 1, \dots, N. \quad (1.25)$$

Для интеграла столкновений в уравнении (1.15) величина $\mathbf{v}^2 / 2$ не является сумматорным инвариантом, поскольку возможен обмен энергией между компонентами газовой смеси. Полученный в (1.25) момент интеграла называется обменным членом и обозначается $S_l^{(E)}$:

$$S_l^{(E)} = \sum_{l'=1, l' \neq l}^N v_{ll'} (E_{l'}^* - E_{l'}), \quad l = 1, \dots, N. \quad (1.26)$$

Таким образом, объединив уравнения (1.16)-(1.18) с полученными в (1.22)-(1.26) результатами, получаем систему КГД уравнений для многокомпонентной смеси газов:

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \operatorname{div} \left(\rho_l \mathbf{u}_l - \tau \left[\left[\operatorname{div}(\rho_l \mathbf{u}_l) \right] \mathbf{u}_l + (\rho_l \mathbf{u}_l \nabla) \mathbf{u}_l + \nabla p_l \right] \right) = 0, \quad (1.27)$$

$$\frac{\partial \rho_l \mathbf{u}_l}{\partial t} + \operatorname{div} \left(\left\{ \rho_l \mathbf{u}_l - \tau \left[\left[\operatorname{div}(\rho_l \mathbf{u}_l) \right] \mathbf{u}_l + (\rho_l \mathbf{u}_l \nabla) \mathbf{u}_l + \nabla p_l \right] \right\} \mathbf{u}_l + \mathbf{I} p_l - \mathbf{\Pi}_l \right) = \mathbf{S}_l^{(\rho u)}, \quad (1.28)$$

$$\frac{\partial E_l}{\partial t} + \operatorname{div} \left(\left\{ \rho_l \mathbf{u}_l - \tau \left[\left[\operatorname{div}(\rho_l \mathbf{u}_l) \right] \mathbf{u}_l + (\rho_l \mathbf{u}_l \nabla) \mathbf{u}_l + \nabla p_l \right] \right\} H_l + \mathbf{q}_l - \mathbf{\Pi}_l \mathbf{u}_l \right) = S_l^{(E)}. \quad (1.29)$$

Здесь $l = 1, \dots, N$, \mathbf{I} – единичная матрица. Обменные члены $S_l^{(\rho u)}$ и $S_l^{(E)}$ учитывают перераспределения импульса и энергии между компонентами смеси. Обменные члены содержат в качестве параметров компоненты скоростей \mathbf{u}_l^* и плотности энергии E_l^* . Эти параметры соответствуют равновесному состоянию смеси, но не реализуются при переходном процессе. Фактически они служат ориентиром для динамических переменных.

Далее приводится итоговая полная система макроскопических уравнений в инвариантном относительно системы координат и более компактном виде вместе с уравнениями связей и состояния [46, 54, 180]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{W}_l^{(\rho)} &= 0, \\ \mathbf{W}_l^{(\rho)} &= \rho_l \mathbf{u}_l - \rho_l \mathbf{w}_l, \\ \mathbf{w}_l &= \frac{\tau}{\rho_l} \left[\operatorname{div}(\rho_l \mathbf{u}_l) \right] \mathbf{u}_l + \mathbf{w}_l^*, \quad \mathbf{w}_l^* = \frac{\tau}{\rho_l} \left[(\rho_l \mathbf{u}_l \nabla) \mathbf{u}_l + \nabla p_l \right], \quad l = 1, \dots, N; \end{aligned} \quad (1.30)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\rho_l u_{l,k})}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{W}_l^{(\rho u_k)} &= S_{l,k}^{(\rho u)}, \\ \mathbf{W}_l^{(\rho u_k)} &= \mathbf{W}_l^{(\rho)} u_{l,k} + \mathbf{e}_k p_l - \mathbf{\Pi}_{l,k}, \\ \mathbf{\Pi}_{l,k} &= (\Pi_{l,j,k}), \quad \Pi_{l,j,k} = \Pi_{l,j,k}^{NS} + \Pi_{l,j,k}^{QGD}, \\ \Pi_{l,j,k}^{NS} &= \mu \left(\frac{\partial u_{l,j}}{\partial x_k} + \frac{\partial u_{l,k}}{\partial x_j} + \delta_{j,k} \left(\zeta - \frac{2}{3} \right) \operatorname{div}(\mathbf{u}_l) \right), \\ \Pi_{l,j,k}^{QGD} &= \rho_l u_{l,j} w_{l,k}^* + \delta_{j,k} \tau \left((\mathbf{u}_l \nabla) p_l \right), \\ S_l^{(\rho u)} &= \sum_{l'=1, l' \neq l}^N v_{ll'} \rho_l (\mathbf{u}_l^* - \mathbf{u}_l), \quad l = 1, \dots, N, \quad j, k = 1, 2, 3; \end{aligned} \quad (1.31)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_l}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{W}_l^{(E)} &= S_l^{(E)}, \\ \mathbf{W}_l^{(E)} &= \mathbf{W}_l^{(\rho)} H_l + \mathbf{q}_l - \mathbf{\Pi}_l \mathbf{u}_l, \quad \mathbf{q}_l = \mathbf{q}_l^{NS} + \mathbf{q}_l^{QGD}, \\ \mathbf{q}_l^{NS} &= -\chi \nabla T_l, \quad \mathbf{q}_l^{QGD} = -\tau \left[(\mathbf{u}_l \nabla) \varepsilon_l + p_l (\mathbf{u}_l \nabla) \left(\frac{1}{\rho_l} \right) \right] \rho_l \mathbf{u}_l, \end{aligned} \quad (1.32)$$

$$\begin{aligned} S_l^{(E)} &= \sum_{l'=1, l' \neq l}^N v_{ll'} (E_l^* - E_l), \quad l = 1, \dots, N; \\ E_l &= \rho_l \left(\frac{1}{2} |\mathbf{u}_l|^2 + \varepsilon_l \right), \quad H_l = \frac{E_l + p_l}{\rho_l}, \quad p_l = Z_l \rho_l \mathfrak{R}_l T_l, \quad \varepsilon_l = c_{v,l} T_l, \quad l = 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (1.33)$$

Здесь $Z_l = Z_l(T_l, \rho_l)$ – коэффициенты сжимаемости, $c_{v,l} = c_{v,l}(T_l)$ – удельные теплоемкости при постоянном объеме. Векторы $\mathbf{W}_l^{(\rho)}$, $\mathbf{W}_l^{(\rho u_k)}$, $\mathbf{W}_l^{(E)}$ с точностью до знака совпадают с потоками плотности, соответствующих компонент плотности импульса и плотности энергии, $\rho_l \mathbf{w}_l$ – векторы КГД поправок к потокам плотности компонент смеси $\rho_l \mathbf{u}_l$, пропорциональные времени релаксации τ для смеси газов.

1.2.2 Определение материальных коэффициентов и параметров смеси

Все материальные коэффициенты и параметры в КГД уравнениях (1.30)-(1.33) предлагается определять двумя способами. Первый из них подразумевает вычисление всех параметров по известным из литературы формулам или аппроксимациям табличных данных. Такие данные можно получить из работ и справочников [6, 19, 30, 49, 72, 82–84, 95, 142, 159, 160, 181, 261]. Однако обеспечить полноту таких вычислений в широком диапазоне параметров не всегда возможно. Также существует проблема согласования параметров и зависимостей, взятых из различных источников. Поэтому второй способ является более оправданным.

Второй способ состоит в вычислении материальных коэффициентов и параметров методами молекулярной динамики и позволяет получить всю информацию самосогласованным образом. Для реализации этого второго способа были выделены следующие базовые материальные коэффициенты компонент смеси:

$$\begin{aligned} Z_l &= Z_l(T_l, \rho_l), \quad c_{v,l} = c_{v,l}(T_l), \quad c_{p,l} = c_{p,l}(T_l), \\ \mu_l &= \mu_l(T_l), \quad \zeta_l = \zeta_l(T_l), \quad \chi_l = \chi_l(T_l), \quad D_l = D_l(T_l), \end{aligned} \quad (1.34)$$

где $c_{p,l}$ – удельная теплоемкость при постоянном давлении, D_l – коэффициенты диффузии.

Выбор именно этих коэффициентов обусловлен тем, что они достаточно точно и просто определяются как методами МД, так и в натурных экспериментах. Остальные коэффициенты связаны с базовыми следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} \gamma_l &= \frac{c_{p,l}}{c_{v,l}}, \quad a_l^2 = \left(\frac{\partial p_l}{\partial \rho_l} \right)_S \approx \gamma_l \frac{p_l}{\rho_l}, \quad \tau_l = \frac{\mu_l}{p_l \text{Sc}_l}, \quad \text{Pr}_l = \frac{\mu_l c_{p,l}}{\chi_l}, \quad \text{Sc}_l = \frac{\mu_l}{\rho_l D_l}, \\ \text{Kn}_l &= \frac{L}{\lambda_l}, \quad \text{Ma}_l = \frac{|\mathbf{u}_l|}{a_l}, \quad \text{Re}_l = \frac{\rho_l |\mathbf{u}_l| \lambda_l}{\mu_l}, \quad l = 1, \dots, N, \end{aligned} \quad (1.35)$$

где $\gamma_l = \gamma_l(T_l)$ – показатели адиабат, зависящие от температуры T_l газа сорта l , a_l – локальные скорости звука, Sc_l – числа Шмидта, Pr_l – числа Прандтля, Kn_l – числа Кнудсена, L – характерный размер задачи, λ_l – средние длины свободного пробега, Ma_l – числа Маха, Re_l – числа Рейнольдса. Заметим, что τ_l – индивидуальные времена релаксации, на которые выходит общее τ в зонах, где смесь вырождается в какую-либо чистую компоненту.

Средние длины свободного пробега отдельных компонент газовой смеси и связанные с ними частоты столкновений газа можно определять либо с помощью МД вычислений, либо с

помощью различных приближений. Например, для вычисления длин свободного пробега λ_l и частот столкновений ν_l газа сорта l , входящего в состав газовой смеси, в случае приближения с помощью модели упругих сфер используются следующие формулы [153, 200]:

$$\lambda_l = \left[\sum_{l'=1}^N \left(\pi \sigma_{ll'}^2 n_{l'} \sqrt{1 + \frac{m_l}{m_{l'}}} \right) \right]^{-1}, \quad \sigma_{ll'} = \frac{\sigma_l + \sigma_{l'}}{2}, \quad l = 1, \dots, N_l, \quad (1.36)$$

$$\nu_l = \sum_{l'=1}^N \nu_{ll'}, \quad \nu_{ll'} = 2\sqrt{\pi} \sigma_{ll'}^2 n_{l'} \sqrt{2k_b T \frac{m_l + m_{l'}}{m_l m_{l'}}},$$

где T - температура смеси, σ_l - эффективный радиус взаимодействия молекул сорта l .

Для вычисления длин свободного пробега и частот столкновений чистого газа в случае модели твердых сфер можно производить расчет по следующим формулам [2, 8, 46, 153, 155]:

$$\lambda_l = A \frac{\mu_l}{p_l} \sqrt{8\mathfrak{R}_l T_l / \pi}, \quad \nu_l = \frac{\sqrt{8\mathfrak{R}_l T_l / \pi}}{\lambda_l}, \quad l = 1, \dots, N, \quad (1.37)$$

где A - параметр, который можно определить как постоянное значение [2] $A = \sqrt{\pi/2}$ или взять значение [8] $A = (\Omega_l)^{-1} \sqrt{8/\pi}$, где Ω_l - безразмерные параметры, характеризующие процесс столкновения молекул сорта l [8], для твердых сфер можно взять $\Omega_l = \Omega = 5/4$.

В работе [354] описаны формулы вычисления длин свободного пробега и частот столкновений молекул в случае приближения моделью твердых сфер по аналогии с (1.37), но для бинарной газовой смеси

$$\lambda_l = (\Omega_l)^{-1} \frac{\mu_l}{p_l} \sqrt{8\mathfrak{R}_l T_l / \pi}, \quad l = a, b,$$

$$\nu_{ab} = \nu_a \left(\frac{\sigma_{ab}}{\sigma_a} \right)^2 \sqrt{\frac{m_a + m_b}{2m_b} \frac{n_b}{n_a}}, \quad \nu_{ba} = \nu_b \frac{n_a}{n_b} = \nu_b \left(\frac{\sigma_{ab}}{\sigma_b} \right)^2 \sqrt{\frac{m_a + m_b}{2m_a} \frac{n_a}{n_b}}, \quad (1.38)$$

$$\nu_l = \frac{p_l}{\mu_l} \Omega_l, \quad l = a, b.$$

Динамическую и относительную объемную вязкости смеси можно вычислять следующим образом [204, 335, 346]:

$$\mu = \sum_{l=1}^N \mu_l \left(1 + \sum_{l'=1, l' \neq l}^N G_{ll'} \frac{X_{l'}}{X_l} \right)^{-1}, \quad \zeta = \frac{1}{\mu} \sum_{l=1}^N \mu_l \zeta_l \left(1 + \sum_{l'=1, l' \neq l}^N G_{ll'} \frac{X_{l'}}{X_l} \right)^{-1}, \quad (1.39)$$

$$G_{ll'} = \left(1 + \sqrt{\frac{\mu_l}{\mu_{l'}}} \sqrt{\frac{M_{l'}}{M_l}} \right)^2 \left(2 \sqrt{2 \left(1 + \frac{M_l}{M_{l'}} \right)} \right)^{-1}. \quad (1.40)$$

Здесь $X_l = \frac{\rho_l V}{M_l}$ – мольная доля газа сорта l , V – объем, M_l – молярная масса газа сорта l .

Величина $G_{ll'}$ вычисляется аналогично путем циклической замены индексов.

Для определения теплопроводности смеси используется формула [278, 344]:

$$\chi = \sum_{l=1}^N \chi_l \left(1 + \sum_{l'=1, l' \neq l}^N Y_{ll'} \frac{X_{l'}}{X_l} \right)^{-1}. \quad (1.41)$$

Здесь функция $Y_{ll'}$ может быть определена в зависимости от моделируемых газов. В случае неполярных газов можно взять ее в виде (1.41), т.е. $Y_{ll'} = G_{ll'}$ [143, 278]. В случае полярных газов можно воспользоваться, например, формулой Линдсей-Бромли [269].

Коэффициент диффузии смеси D определяется для каждого газа отдельно и представляет собой коэффициент диффузии одного типа газа l в многокомпонентной смеси из N газов. Коэффициент вычисляется следующим образом [215, 225, 251, 252, 296, 297, 347]:

$$D_{lN} = (1 - X_l) \left(\sum_{l'=1, l' \neq l}^N \frac{X_{l'}}{D_{ll'}} \right)^{-1}, \quad D_{ll'} = \frac{X_l}{X_l + X_{l'}} D_l + \frac{X_{l'}}{X_l + X_{l'}} D_{l'}, \quad l, l' = 1, \dots, N, \quad (1.42)$$

где $D_{ll'}$ – диффузия бинарной смеси газов l и l' в многокомпонентной газовой смеси, которая зависит от самодиффузии газов D_l [215, 251, 252, 272, 348].

Параметры газовой смеси определяются следующим образом [8, 46, 94, 149, 206]:

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_{l=1}^N \rho_l, \quad \mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \sum_{l=1}^N \rho_l \mathbf{u}_l, \quad p = \sum_{l=1}^N p_l, \quad E = \sum_{l=1}^N E_l, \quad n = \sum_{l=1}^N n_l, \\ T &= \frac{1}{n} \sum_{l=1}^N n_l T_l, \quad m = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^N m_l n_l, \quad \Re = \sum_{l=1}^N m_l n_l \Re_l / \sum_{l=1}^N m_l n_l = \frac{k_B}{m}, \\ \varepsilon &= \frac{E}{\rho} - \frac{1}{2} |\mathbf{u}|^2, \quad c_v = \frac{\varepsilon}{T} = \frac{1}{\rho} \sum_{l=1}^N \rho_l c_{v,l}, \quad c_p = \frac{1}{\rho} \sum_{l=1}^N \rho_l c_{p,l}, \quad \gamma = \frac{c_p}{c_v}, \\ Z &= \frac{p}{\rho \Re T}, \quad a^2 = \gamma \frac{p}{\rho}, \quad \lambda = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^N n_l \lambda_l, \quad \tau = \frac{\mu}{p \text{Sc}}, \quad \nu = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^N n_l \nu_l, \\ Ma &= \frac{|\mathbf{u}|}{a}, \quad \text{Re} = \frac{\rho |\mathbf{u}| \lambda}{\mu}, \quad \text{Kn} = \frac{L}{\lambda}, \quad \text{Sc} = \frac{\mu}{\rho D}, \quad \text{Pr} = \frac{\mu c_p}{\chi}. \end{aligned} \quad (1.43)$$

Система уравнений (1.30)-(1.33) замыкается начальными и граничными условиями.

1.2.3 Модельная задача

Для апробации предлагаемого многомасштабного подхода рассматривается задача расчета течения газовой смеси в микроканале технической системы. В качестве технических микросистем могут быть рассмотрены любые устройства, содержащие микроканалы, по которым течет газ, например, установки холодного газодинамического напыления, газоанализаторы, медицинские установки по газоочистке лекарств от вредных примесей и т.д. В качестве примера рассмотрим отдельный узел подобной установки, содержащий баллон с газовой смесью, микросопло и вакуумную камеру. Геометрия такой упрощенной системы представлена на рисунке 1.1.

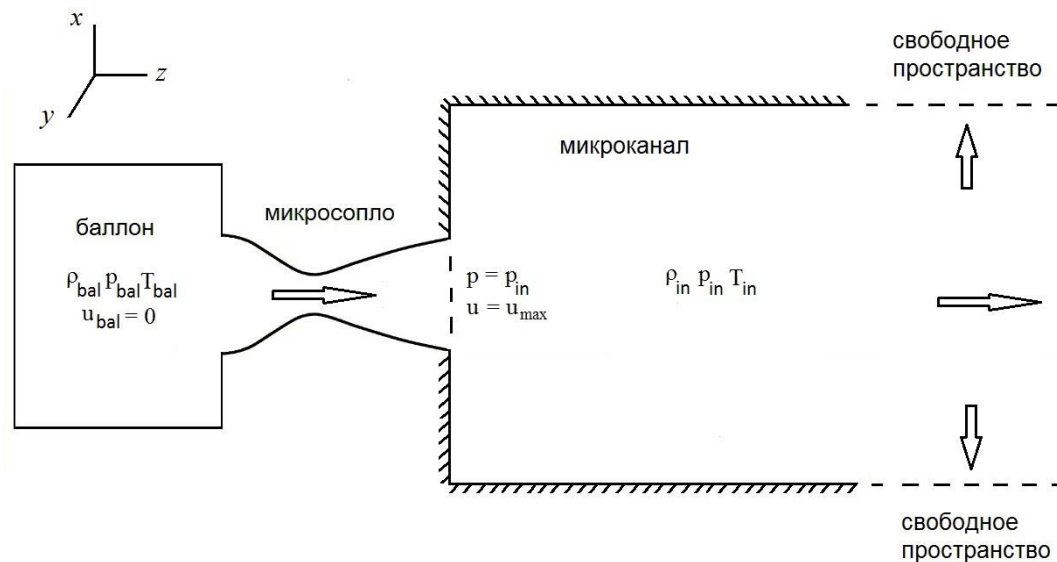


Рисунок 1.1 – Геометрия модельной задачи, представленная в виде двумерного среза

Предполагается, что газовая смесь подается из баллона в вакуумную камеру через микросопло. В начальный момент времени открывается невесомая гладкая перегородка между соплом и областью микроканала, и газ из области высокого давления начинает поступать в область низкого давления. В общем случае пространство баллона и микросопла не входят в расчетную область. Также в нее не входит большая часть вакуумной камеры. В такой ситуации будем считать, что сопло является идеальным адиабатическим соплом Лавалю [44], а расчетная часть вакуумной камеры представляет собой микроканал, ограниченный металлическими

стенками и область свободного пространства.

Начальные условия берутся в соответствии с равновесным состоянием газовой среды в отсутствие взаимодействия с внешними факторами. В частности, для обеспечения чистоты вычислительного эксперимента, будем рассматривать изначально покоящуюся во всех точках расчетной области газовую смесь того же состава, что и в баллоне, но находящуюся при существенно более низком давлении, но той же температуре:

$$\rho_l = \rho_{l,0}, \quad \mathbf{u}_l = 0, \quad p_l = p_{l,0}, \quad T_l = T_0, \quad l = 1, \dots, N. \quad (1.44)$$

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

Параметры газовой среды на выходе из сопла (то есть на входе в вакуумную камеру) зависят от конкретной постановки задачи и определяются следующим образом:

$$(\mathbf{u}_l, \mathbf{n}) = u_{in,l}, \quad \rho_l = \rho_{in,l}, \quad T_l = T_{in,l}, \quad l = 1, \dots, N. \quad (1.45)$$

Здесь индекс in соответствуют значениям параметров на входе в камеру. В случае сопла Лаваля эти параметры определяются формулами [44]:

$$p_{in,l} = p_{area,l}, \quad u_{in,l} = \sqrt{2(c_p(T_{bal,l})T_{bal,l} - c_p(T_{in,l})T_{in,l})}, \quad \rho_{in,l} = \frac{p_{in,l}}{Z_l(T_{in,l})\Re_l T_{in,l}},$$

$$p_{bal,l}(V_{m,bal,l})^{\bar{\gamma}} = p_{in,l}(V_{m,in,l})^{\bar{\gamma}}, \quad \bar{\gamma} \approx \frac{1}{2}[\gamma(T_{bal,l}) + \gamma(T_{in,l})].$$

Здесь параметры с индексом bal соответствуют значениям параметров в баллоне, $p_{area,l}$ – давление в вакуумной камере вблизи сопла, $V_{m,bal,l} = V_{m,bal,l}(T_{bal,l})$ – молярный объем компоненты газа в баллоне, $V_{m,in,l} = V_{m,in,l}(T_{in,l})$ – молярный объем компоненты газа на выходе из сопла. Уравнение для адиабаты является главным для определения температуры $T_{in,l}$. Учитывая малую длину микросопел, приближение для $\bar{\gamma}$ имеет малую погрешность.

Граничные условия для КГД уравнений на стенках микроканала можно задать двумя способами. Первый традиционный способ состоит в задании потоков массовой плотности, плотности импульса и плотности энергии через границу с помощью условий Ньютона:

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

$$(\mathbf{W}_l^{(E)}, \mathbf{n}) = -\eta_l(E_l - E_l^{(w)}), \quad l = 1, \dots, N. \quad (1.46)$$

Подразумевается, что стенка может быть проницаемой или не проницаемой, а взаимодействие газа со стенкой может быть упругим или неупругим, термическим или изотермическим.

Параметры граничных условий α_l , $\beta_{l,k}$, η_l (которые в литературе часто называют коэффициентами аккомодации [2], но фактически являются функциями от этих коэффициентов), а также величины плотности, скорости и плотности энергии $\rho_l^{(w)}$, $u_{l,k}^{(w)}$ и $E_l^{(w)}$ компонент смеси вблизи стенки находятся либо из таблиц экспериментальных данных (что возможно лишь для ограниченного диапазона температур и давлений), либо рассчитываются по различным эмпирическим формулам. В данной работе предлагается рассчитывать их методом МД. Для этого 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 $E_l^{(w)}$. МД вычисления позволяют определить квазиравновесные значения величин $\rho_l^{(w)}$, $\rho_l^{(w)}\mathbf{u}_l^{(w)}$, $E_l^{(w)}$ и коэффициентов α_l , $\beta_{l,k}$, η_l . Далее эти значения можно подставить в условия (1.46) в соответствующих точках границы и найти потоки. Такой подход представляется наиболее оправданным, поскольку он является универсальным и помогает согласовывать процессы взаимодействия газа со стенкой на микро- и макроуровнях.

Второй способ состоит в непосредственном вычислении методом молекулярной динамики нормальных компонент потоков массовой плотности, плотности импульса и плотности энергии вблизи стенок. О прямых расчетах этих величин будет более подробно рассказано в Главе 5.

На свободных поверхностях расчетной области задаются так называемые "мягкие" граничные условия [46]:

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial (\rho_l \mathbf{u}_l)}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial p_l}{\partial n} = 0, \quad l = 1, \dots, N. \quad (1.47)$$

1.2.4 Конечно-объемная схема решения КГД уравнений

Для расчета макропараметров по КГД уравнениям был использован явный по времени сеточный численный алгоритм, имеющий в своей основе метод контрольных объемов на сетках произвольного вида [25, 27, 55, 163, 168, 188, 224, 264, 267, 353]. В его рамках для удобства

решения задачи в областях сложной геометрии предложено использовать гибридные блочные сетки, состоящие из ячеек различной формы и размера. В частности, в двумерном случае предложено использовать четырехугольные и треугольные ячейки, первые из которых имеют прямоугольную или близкую к ней форму, а вторые максимально близки к прямоугольным или правильным треугольникам. В трехмерном случае в качестве ячеек предложено использовать многогранники с числом вершин от четырех до восьми. При этом также желательно, чтобы большая часть ячеек была кубами или параллелепипедами. В простых случаях предложено использовать декартовы сетки.

Рассмотрим теперь более подробно предлагаемую численную схему, не конкретизируя размерность пространства, которую обозначим K . Для этого в расчетной области Ω вводится гибридная пространственная сетка Ω_h с ячейками C_m ($m = 1, \dots, M$) и сетку по времени ω_t с шагом Δt , который может быть как постоянным, так и переменным.

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 (см., например, [133–135, 231]). Вычислительная схема по времени выбирается явной и двухэтапной (предиктор-корректор).

На первом (предикторном) этапе сеточные уравнения принимают следующий вид:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{l,m} &= \rho_{l,m} + \frac{\Delta t}{|V_m|} \sum_{p=1}^{M_m} W_{l,n,m,p}^{(\rho)} |S_{m,p}|, \quad W_{l,n,m,p}^{(\rho)} = (\mathbf{W}_{l,m,p}^{(\rho)}, \mathbf{n}_{m,p}), \\ \hat{\rho}_{l,m} \hat{u}_{l,k,m} &= \rho_{l,m} u_{l,k,m} + \frac{\Delta t}{|V_m|} \sum_{p=1}^{M_m} W_{l,n,m,p,k}^{(\rho u)} |S_{m,p}|, \quad W_{l,n,m,p,k}^{(\rho u)} = (\mathbf{W}_{l,m,p}^{(\rho u_k)}, \mathbf{n}_{m,p}), \quad k = 1, \dots, K, \\ \hat{E}_{l,m} &= E_{l,m} + \frac{\Delta t}{|V_m|} \sum_{p=1}^{M_m} W_{l,n,m,p}^{(E)} |S_{m,p}|, \quad W_{l,n,m,p}^{(E)} = (\mathbf{W}_{l,m,p}^{(E)}, \mathbf{n}_{m,p}), \quad m = 1, \dots, M, \quad l = 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (1.48)$$

Здесь использованы следующие общепринятые обозначения: f_m, \hat{f}_m – значения соответствующих функций на нижнем (t) и верхнем ($t + \Delta t$) 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 ($\alpha = \rho, \rho u_k, E$).

Использованные обозначения удобно прокомментировать на примере двумерного случая ($K = 2$). В этой ситуации ячейки имеют либо прямоугольную, либо треугольную форму, представленные на рисунке 1.2.

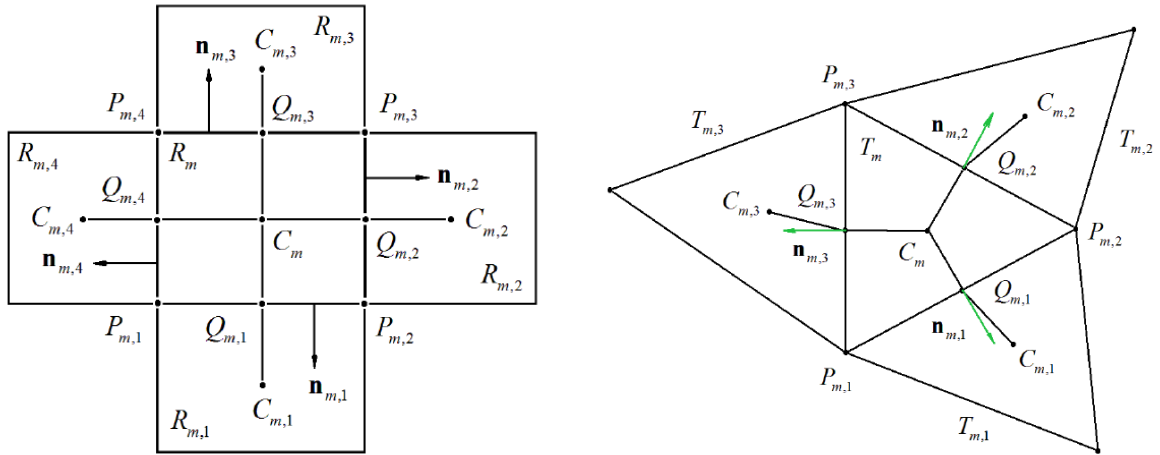


Рисунок 1.2 – Четырехугольная R_m (слева) и треугольная T_m (справа) ячейки сетки, изображенные с учетом их окружения, а также элементы контрольных объемов, включая их опорные точки $P_{m,k}$, центры масс C_m , середины граней $Q_{m,k}$ и векторы внешних нормалей $\mathbf{n}_{m,k}$ к граням

В предлагаемой схеме основная вычислительная нагрузка связана с расчетами потоков $\mathbf{W}_{m,p}^{(\alpha)}$ массовой плотности, плотности импульса и плотности энергии через грани контрольных объемов (ячеек) сетки. Для аппроксимации этих потоков используется известный интегро-интерполяционный метод [152]. Если в качестве ячеек выступают прямоугольники или параллелепипеды, получаем аппроксимации, превращающие сеточные уравнения (1.48) в обычные однородные консервативные схемы [150, 151]. Если в качестве ячеек используются треугольные, тетраэдральные или гибридные, то аппроксимации потоков $\mathbf{W}_{m,p}^{(\alpha)}$, будут аналогичны предложенным в [133, 134], но с добавлением искусственной вязкости другим способом (более подробно см. Главу 2).

В результате расчетов и суммирования потоков $\mathbf{W}_{m,p}^{(\alpha)}$ получаются значения массовой плотности, плотности импульса и плотности энергии $\hat{\rho}_l$, $\hat{\rho}_l \hat{\mathbf{u}}_l$, \hat{E}_l . Этим и завершается этап предиктора.

На втором (корректорном) этапе решаются две задачи.

Первая задача связана с расчетом обменных членов. Как будет показано в Главе 2, здесь могут применяться две стратегии. Первая стратегия состоит в определении обменных членов на основе предварительных молекулярно-динамических расчетов, результаты которых занесены в специальную базу данных. В рамках этой стратегии обменные члены полностью формируются на основе значений из базы данных с помощью логарифмических аппроксимаций в пространстве температур и давлений.

Вторая стратегия состоит в проведении прямых расчетов обменных членов методами молекулярной динамики. Для этого все рассчитанные предикторные переменные передаются в блок молекулярной динамики, численная процедура которого описывается ниже.

Выбор той или иной стратегии определяется классом используемого численного алгоритма (более подробно описано в Главе 2).

В результате решения первой задачи получают корректирующие параметры $\hat{\rho}_l \hat{\mathbf{u}}_l^*$ и \hat{E}_l^* . Однако их использование в качестве окончательного ответа часто приводит к неустойчивости. Поэтому эти значения используются в рамках релаксационного приближения как параметры обменных членов.

Вторая задача состоит в определении окончательных значений плотностей импульсов $\hat{\rho}_l \hat{\mathbf{u}}_l^{**}$ и плотностей энергии \hat{E}_l^{**} . Она реализуется с помощью следующих вычислений

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{l,m} \hat{u}_{l,k,m}^{**} &= \hat{\rho}_{l,m} \hat{u}_{l,k,m}^* + \Delta t v_{ll',m} \hat{\rho}_{l,m} (\hat{u}_{l,k,m} - \hat{u}_{l,k,m}^*), \quad k=1, \dots, K, \\ \hat{E}_{l,m}^{**} &= \hat{E}_{l,m}^* + \Delta t v_{ll',m} (\hat{E}_{l,m} - \hat{E}_{l,m}^*), \quad m=1, \dots, M, \quad l, l'=1, \dots, N. \end{aligned} \quad (1.49)$$

Таким образом, массовые плотности компонент смеси определяются на шаге предиктора, а плотности импульсов и плотности энергии определяются на шаге корректора. Параметры смеси как целого, рассчитываемые по формулам (1.43), завершают численную процедуру расчета на новом слое по времени.

В заключение параграфа отметим, что суммарная погрешность локальной аппроксимации предложенной численной схемы (1.48), (1.49) имеет порядок $O(\Delta t + \hbar^p)$, где \hbar – средняя длина ребра сеточных элементов, $p=2$ для случая использования равномерных декартовых сеток и $p=1$ для случая произвольных неструктурированных, в том числе гибридных сеток. Порядок сходимости схемы (1.48), (1.49) соответствует порядку погрешности суммарной аппроксимации

в норме сеточного пространства $L_2(\Omega_h) \times C(\omega_t)$. Доказательство этого факта строго не проводилось, но было проверено в численных экспериментах на последовательностях вложенных сеток.

1.3 Молекулярно-динамические вычисления

Метод МД является одним из наиболее мощных вычислительных методов, эффективно применяемых для моделирования физических, химических и биологических систем [17, 65, 66, 70, 71, 81, 87–89, 96, 103, 148, 162, 169, 174, 187, 193, 205, 277, 295, 331, 236]. МД обладает высоким пространственно-временным разрешением и позволяет получать информацию о процессах, происходящих в атомно-молекулярных масштабах и на временах порядка нескольких наносекунд. Современная вычислительная техника дает возможность моделировать динамику молекулярных систем, состоящих из огромного числа частиц, с большим набором параметров и разнообразных условий, имитирующих физический эксперимент. Благодаря развитию и применению компьютерных технологий и графических методов анализа эффективность применяемых методов МД моделирования неуклонно возрастает.

1.3.1 Уравнения

Основой метода МД является модель, в которой молекулярная система имеет многоатомную структуру, а все атомы (молекулы) рассматриваются как материальные точки. Эволюция системы взаимодействующих частиц с течением времени отслеживается путем интегрирования их уравнений движения.

В случае, когда на макроуровне рассчитывается течение газовой смеси из N_g компонент, на микроуровне также можно ограничиться рассмотрением молекул газа N_g сортов. Однако это справедливо лишь вдали от стенок микроканала. Вблизи стенок следует добавить в рассмотрение частицы сорта (атомы или молекулы), составляющие материал стенок и потенциально способные отрываться от поверхности микроканала. Например, частицы одного сорта какого-то металла в случае, когда имеем дело с металлическим микроканалом из материала одного вида.

В классической молекулярной динамике исследуемая система представляется совокупностью взаимодействующих частиц, движущихся по законам классической механики:

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \mathbf{F}, \quad (1.50)$$

где m – масса частицы, \mathbf{r} – радиус-вектор частицы, \mathbf{F} – сила, действующая на эту частицу.

Приведем систему уравнений (1.50) к системе уравнений первого порядка и запишем ее в виде системы уравнений движения частиц сорта l , которые могут быть и газом, и металлом:

$$m_{l,i} \frac{d\mathbf{v}_{l,i}}{dt} = \mathbf{F}_{l,i}, \quad \mathbf{v}_{l,i} = \frac{d\mathbf{r}_{l,i}}{dt}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad (1.51)$$

где i – номер частицы, l – тип частиц (молекулы какого-то газа или 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 -ой 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 -ой частицы с окружающими частицами, зависящей от потенциальной энергии, и компоненты, отвечающей за внешнее воздействие:

$$\mathbf{F}_{l,i} = - \frac{\partial U(\mathbf{r}_{l,1}, \dots, \mathbf{r}_{l,N_l})}{\partial \mathbf{r}_{l,i}} + \mathbf{F}_{l,i}^{ext}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad (1.52)$$

где U – суммарная потенциальная энергия, $\mathbf{F}_{l,i}^{ext}$ – сила взаимодействия с внешней средой.

Потенциальная энергия системы представляется в виде суммы парциальных энергий, вычисление которых происходит по формуле выбранного потенциала взаимодействия.

Целью моделирования является получение средних значений макропараметров газа. Основными макропараметрами являются кинетические, потенциальная, тепловая, внутренняя и полная энергии, а также температура и давление.

Кинетическая энергия системы E_K и кинетическая энергия теплового движения E_T вычисляются как суммы энергий каждой частицы следующим образом:

$$E_{Kl} = \sum_{i=1}^{N_l} \frac{m_l |\mathbf{v}_{l,i}|^2}{2}, \quad E_{Tl} = \sum_{i=1}^{N_l} \frac{m_{l,i} |\mathbf{v}_{l,i} - \mathbf{v}_{m_l}|^2}{2}, \quad \mathbf{v}_{m_l} = \frac{1}{N_l} \sum_{i=1}^{N_l} \mathbf{v}_{l,i}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad (1.53)$$

где $|\mathbf{v}_{l,i}|$ – длина вектора скорости i -ой частицы типа l , \mathbf{v}_{m_l} – скорость центра масс системы

частиц типа l .

Внутренняя энергия E_l и полная энергия E представляют следующие суммы:

$$E_l = E_T + U, \quad E = E_K + U, \quad (1.54)$$

Температура системы определяется через тепловую энергию системы [321, 325]:

$$T_l = \frac{2}{d \cdot N_l \cdot k_b} \langle E_{Tl} \rangle, \quad (1.55)$$

где $\langle \rangle$ – усредненное значение по состояниям системы, k_b – постоянная Больцмана, d – число степеней свободы. Если не указано иное, то используется число степеней свободы $d = 3$, соответствующее трем поступательным степеням свободы.

Важную роль в расчетах играют диагональные компоненты тензора давления, которые определяются по теореме вириала [91, 173, 242, 325, 336]. Индекс типа частиц из формулы удален для наглядности выражения:

$$p_{\alpha\alpha} = \frac{1}{V} \sum_i m_i (v_{i,\alpha} - v_{m,\alpha})^2 + \frac{1}{V} \left\langle \sum_i \sum_{j>i} r_{ij,\alpha} \cdot F_{ij,\alpha} \right\rangle, \quad i = 1, \dots, N_l. \quad (1.56)$$

Здесь V – объем рассматриваемой системы, $\mathbf{r}_{ij,l} = \mathbf{r}_{i,l} - \mathbf{r}_{j,l}$, $\mathbf{F}_{ij,l}$ – 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:

$$p = \frac{1}{3} (p_{xx} + p_{yy} + p_{zz}). \quad (1.57)$$

1.3.2 Граничные условия

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 (ПГУ).

Суть метода заключается в том, что пространство разбивается на одинаковые области кубической формы, причем предполагается, что содержимое этих областей одинаково и границы

соприкасаются. При пересечении частицей границы одной области, она попадает в другую, но это значит, что в первую с противоположной стороны попадает такая же частица. При этом моделируется динамика лишь одной такой области (см. рисунок 1.3, слева), и при расчете сил, действующих на частицы, учитывается влияние частиц из окружающих симметричных областей. Данный подход позволяет рассматривать большие объемы при малых фактических вычислениях, так как моделируется динамика лишь одной такой ячейки.

Для моделирования ПГУ вдоль координатных осей x, y, z используются периоды Lx, Ly, Lz соответственно:

$$r_x \in [r_x^{\min}, r_x^{\min} + Lx), \quad r_y \in [r_y^{\min}, r_y^{\min} + Ly), \quad r_z \in [r_z^{\min}, r_z^{\min} + Lz), \quad (1.58)$$

где $(r_x^{\min}, r_y^{\min}, r_z^{\min})$ – начала отсчета координат по направлениям осей x, y, z соответственно.

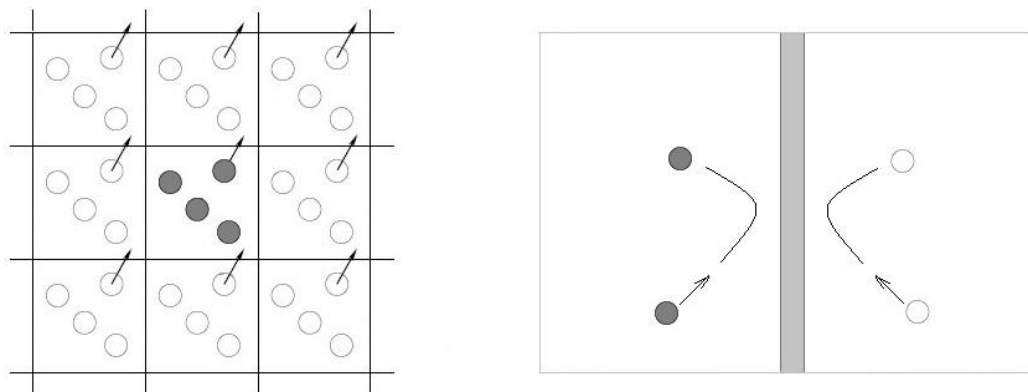


Рисунок 1.3 – Графическая реализация периодических граничных условий (слева) и зеркальных граничных условий (справа). Закрашенные в темный цвет кружки – частицы из рассматриваемой области. Незакрашенные кружки – частицы из соседних областей в случае ПГУ и отражение частицы из рассматриваемой области в случае зеркальных условий

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, в этом случае частицы взаимодействуют со своим зеркальным отражением и не выходят вследствие этого за границу (см. рисунок 1.3, справа), либо условия исчезновения частицы на границе и появления ее в другом месте микросистемы (так чтобы не нарушалось общее равновесие в системе). Также

может осуществляться как 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.

1.3.3 Начальные условия

Целью компьютерного моделирования является получение оценок поведения различных молекулярных систем, состоящих из большого числа частиц. При модельных расчетах ограничиваются рассмотрением характеристик области заданного объема при заданной плотности, для чего вводят молекулярно-динамическую ячейку, состоящую из множества элементарных ячеек. Распределение частиц по молекулярно-динамической ячейке зависит от агрегатного состояния исследуемого вещества, размеры зависят от размера элементарной ячейки, на который влияют условия задачи.

Для системы частиц газов и жидкостей стартовое распределение не имеет особого значения, и для простоты вычислений в подобных системах выбирается кубическая форма ячейки. Для систем в кристаллическом состоянии форма ячейки зависит от формы исследуемого образца.

Начальные условия задачи включают в себя стартовые распределения координат $\mathbf{r}_{l,i}(t_0) = \mathbf{r}_{l,i}^0 = (r_{x,l,i}^0, r_{y,l,i}^0, r_{z,l,i}^0)$ и скоростей $\mathbf{v}_{l,i}(t_0) = \mathbf{v}_{l,i}^0 = (v_{x,l,i}^0, v_{y,l,i}^0, v_{z,l,i}^0)$ частиц каждого типа, где t_0 – время начала расчета.

Стартовое распределение координат частиц газа по области берется равномерным и согласуется с плотностью, соответствующей выбранным значениям стартовых температуры T_0 и давления p_0 . Стартовое распределение координат частиц металла задается согласно кристаллической решетке исследуемого вещества.

В случае равномерного распределения частиц можно задать пространственную сетку по всей области расчетов и для простоты расположить частицы в узлах этой сетки, учитывая условия на границах.

Рассмотрим область, имеющую форму параллелепипеда с ребрами L_x , L_y , L_z по осям x , y и z соответственно, в случае ПГУ по всем направлениям. $\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z) = \mathbf{k} \cdot rcr$ – размеры

рассматриваемой области, где $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ – количество элементарных ячеек по осям, r_{cr} –

$$\text{ребро элементарной ячейки: } r_{cr} = \frac{Lx}{k_x} = \frac{Ly}{k_y} = \frac{Lz}{k_z}.$$

Приведем пример стартового распределения координат. Для простоты описания опустим индексы типа частиц. В случае равномерного распределения частицы располагаются в вершинах элементарных ячеек, и тогда вектор координат частицы $\mathbf{r}^0 = (r_x^0, r_y^0, r_z^0)$ при условии периодичности на границах будет определяться следующим образом:

$$r_x^0 = r_{x0} + (l-1) \cdot r_{cr}, \quad l = 1..k_x, \quad r_y^0 = r_{y0} + (j-1) \cdot r_{cr}, \quad j = 1..k_y,$$

$$r_z^0 = r_{z0} + (k-1) \cdot r_{cr}, \quad k = 1..k_z,$$

где $\mathbf{r}_0 = (r_{x0}, r_{y0}, r_{z0})$ – координата начальной точки.

Если рассматриваемая материя имеет кристаллическую структуру, то частицы располагаются по определенным законам, соответствующим моделируемому веществу. Для описания правильной структуры кристаллов удобно использовать понятие кристаллической решетки [10, 63]. Кристаллическая решетка учитывает не только пространственную структуру (решетку), но и тип взаимодействия между частицами решетки. Частицы располагаются так, чтобы энергия взаимодействия между ними была минимальной. Абсолютная величина разности между энергией изолированных частиц и энергией частиц в кристаллической решетке называется энергией связи, которая определяется работой, необходимой для удаления частицы из кристалла.

Федоров Е.С. показал [164], что существует всего семь классов кристаллических решеток, которые могут образовать 230 пространственных решеток с различными типами симметрии. Кристаллические решетки по свойству симметрии разделяются на кубические, тетрагональные, ромбические, гексагональные, тригональные, моноклинные и триклинные системы. Не все типы расположения дополнительных узлов возможны для ячейки определенной симметрии. Правильное размещение частиц в кристалле можно описать с помощью операции параллельного перемещения или трансляции. Решетка, построенная путем трансляции какого-либо узла по трем направлениям, называется трансляционной или решеткой Браве [5, 10, 64, 144, 157].

Существует 14 типов решеток Браве, которые отличаются друг от друга кристаллографической симметрией и расположением дополнительных частиц. Данные

структуры являются основными, но не исключают иных типов пространственных решеток, которые могут встречаться в кристаллах.

По классификации Браве кубические решетки могут иметь примитивную, гранецентрированную и объемно-центрированную структуры; тетрагональные - примитивную, объемно-центрированную структуры; ромбические – примитивную, базоцентрированную, гранецентрированную и объемно-центрированную структуры; моноклинные – примитивную, базоцентрированную структуры; гексагональные, тригональные и триклинные – только примитивные структуры.

Рассмотрим кубическую кристаллическую решетку (рисунок 1.4). В примитивной (простой) кубической решетке атомы занимают позиции по вершинам куба, как было показано для случая газа с равномерным распределением частиц по объему. В кристалле частицы вещества могут располагаться не только в узлах элементарной ячейки, но и в центре всех граней, тогда решетку называют кубической гранецентрированной (ГЦК). Если частицы вещества располагаются в серединах диагональных плоскостей, проходящих через вершины, т.е. дополнительный атом находится в центре ячейки, то решетку называют кубической объемно-центрированной (ОЦК).

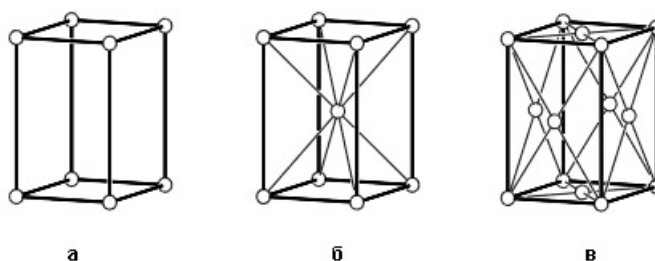


Рисунок 1.4 – Три кубические решетки Браве [157]: а – примитивная, б – объемно-центрированная, в – гранецентрированная

Количество частиц для каждой решетки определяется исходя из выбора граничных условий. Пусть рассматривается система с кубической решеткой и заданы периодические условия на границах. Тогда общее количество частиц N_{tot} считается следующим образом:

1) для примитивной структуры (частицы только в узлах решетки):

$$N_{tot} = k_x k_y k_z;$$

2) для объемно-центрированной структуры:

$$N_{tot} = N_1 + N_2, N_1 = k_x k_y k_z, N_2 = k_x k_y k_z \Rightarrow N_{tot} = 2 k_x k_y k_z,$$

здесь N_1 – число частиц в вершинах решетки, а N_2 учитывает частицы в центре ячеек;

3) для гранецентрированной структуры:

$$N_{tot} = N_1 + N_2, N_1 = k_x k_y k_z, N_2 = 3 k_x k_y k_z \Rightarrow N_{tot} = 4 k_x k_y k_z,$$

здесь второе слагаемое получено путем суммирования частиц в центрах граней с учетом периодических условий.

Если рассматривать реальную геометрию твердых тел, то наиболее используемой является геометрия пластины. В таком случае объем является бесконечным по двум осям, на которые накладываются ПГУ, и конечным по одной из осей, на которую могут не накладываться никакие дополнительные условия. Пусть образец будет конечным по оси z . Тогда общее число частиц N_{tot} считается следующим образом:

1) для примитивной структуры (частицы только в узлах решетки):

$$N_{tot} = k_x k_y (k_z + 1);$$

2) для объемно-центрированной структуры:

$$N_{tot} = N_1 + N_2, N_1 = k_x k_y (k_z + 1), N_2 = k_x k_y k_z \Rightarrow N_{tot} = k_x k_y (2 k_z + 1);$$

3) для гранецентрированной структуры:

$$N_{tot} = N_1 + N_2, N_1 = k_x k_y (k_z + 1), N_2 = k_x k_y (k_z + 1) + 2 k_x k_y k_z \Rightarrow N_{tot} = 2 k_x k_y (2 k_z + 1).$$

Далее будем рассматривать произвольную систему микрочастиц, которая может состоять из молекул (атомов) любых веществ. Количество частиц также обозначим величиной N_{tot} . В случае термодинамического равновесия начальные положения частиц могут составлять ту или иную описанную выше структуру. Стартовое распределение скоростей частиц по модулю задается согласно выбранной температуре и реализует распределение Максвелла. Распределение скоростей частиц по телесному углу является равномерным и таким, что суммарный импульс системы равен нулю. В этих условиях компоненты вектора скорости $\mathbf{v}^0 = (v_x^0, v_y^0, v_z^0)$ конкретной частицы задаются случайным образом с помощью преобразования Бокса-Мюллера [202]:

$$v_x^0 = \sqrt{-2\sigma^2 \ln \xi_1} \cos(2\pi\xi_2), \quad v_y^0 = \sqrt{-2\sigma^2 \ln \xi_1} \sin(2\pi\xi_2), \quad (1.59)$$

$$v_z^0 = \sqrt{-2\sigma^2 \ln \xi_3} \cos(2\pi\xi_4),$$

где переменные $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4$ – случайные независимые переменные, равномерно распределенные в интервале $(0, 1]$, $\sigma^2 = k_b T / m$ – параметр распределения.

Полученные значения проекций скоростей будут величинами независимыми и распределенными согласно распределению Максвелла с нулевым математическим ожиданием и стандартным отклонением, соответствующим значению параметра распределения σ .

Следующим шагом после вычисления скоростей частиц, соответствующих распределению случайных величин Максвелла, является расчет полного импульса системы:

$$P = P_x + P_y + P_z, \quad P_x = \sum_{i=1}^{N_{tot}} m v_{x,i}, \quad P_y = \sum_{i=1}^{N_{tot}} m v_{y,i}, \quad P_z = \sum_{i=1}^{N_{tot}} m v_{z,i}. \quad (1.60)$$

Суммарный импульс микросистемы (1.60) в начальный момент времени должен обращаться в ноль. Если значение суммарного импульса системы отличается от нулевого, то вычисляются новые значения для скоростей:

$$v_{x,i}' = v_{x,i} - \frac{P_x}{m N_{tot}}, \quad v_{y,i}' = v_{y,i} - \frac{P_y}{m N_{tot}}, \quad v_{z,i}' = v_{z,i} - \frac{P_z}{m N_{tot}}, \quad i = 1..N,$$

$$T^{dop} = \frac{m \sum_{i=1}^N [(v_{x,i}')^2 + (v_{y,i}')^2 + (v_{z,i}')^2]}{d k_b N_{tot}}, \quad T^{coef} = \sqrt{\frac{T^0}{T^{dop}}},$$

$$v_{x,i}^{new} = T^{coef} v_{x,i}', \quad v_{y,i}^{new} = T^{coef} v_{y,i}', \quad v_{z,i}^{new} = T^{coef} v_{z,i}'. \quad (1.61)$$

Если по условиям постановки задачи необходимо, чтоб газовая система обладала скоростью некоторого потока, что означает отличие импульса от нуля, то далее к полученным скоростям в (1.51) к необходимой пространственной координате прибавляется значение скорости потока. Также можно использовать полученные в (1.51) скорости в качестве начальных, а скорость потока придавать газу за счет специальных алгоритмов далее.

В случае, когда не заданы условия на ненулевую скорость потока, в качестве начальных скоростей используются значения, полученные в (1.51).

1.3.4 Методы контроля температуры

Для поддержания температуры системы вблизи заданного значения используют специальные алгоритмы – термостаты [162, 173, 182]. Также термостаты используются для достижения необходимого значения температуры системы и для релаксации системы с целью обеспечения непрерывности МД расчетов на начальном этапе. При релаксации системы в случае установившегося термодинамического равновесия температура термостата и средняя температура молекулярной системы должны совпадать.

Наиболее популярным является термостат Берендсена [182, 196], его можно использовать для достижения желаемых температур газа и металла в состоянии термодинамического равновесия.

Термостат Берендсена основан на введении в расчет знакопеременного трения. При моделировании взаимодействие с тепловым резервуаром не учитывается явным образом, а задается силой трения.

Отклонения температуры T от ее желаемого значения T_t корректируются согласно уравнению Ландау-Теллера [258]:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{2(T_t - T)}{\tau_t}, \quad (1.62)$$

где T – текущее значение температуры (в момент времени t), T_t – температура термостата, τ_t – характерное время взаимодействия с резервуаром.

Отклонения температуры от желаемого значения экспоненциально убывают. Изменение кинетической энергии моделируется путем перемасштабирования скоростей атомов системы на каждом шаге [196]:

$$\lambda = \sqrt{1 + \frac{2\Delta t}{\tau_t} \left(\frac{T_t}{T(t-\Delta t)} - 1 \right)}, \quad (1.63)$$

где λ – коэффициент пересчета скоростей, Δt – шаг по времени.

Для достижения желаемой температуры газа и определенного импульса системы в состоянии термодинамического равновесия используется термостат Ланжевена [173].

Термостат Ланжевена [24] основан на использовании уравнений движения броуновской динамики. Взаимодействие системы с тепловым резервуаром осуществляется через введение двух дополнительных компонент силы, включающих случайную силу \mathbf{F}_r , вызывающую нагрев

частиц, и силы трения \mathbf{F}_f для компенсации температур и избежания перегрева частиц:

$$\mathbf{F}_r \sim N(0; \sigma_l^2), \quad \sigma_l^2 = \frac{2k_b T_l m}{\tau_l \Delta t}, \quad \mathbf{F}_f = -\frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{v}_f)}{\tau_l}, \quad (1.64)$$

где \mathbf{F}_r должна иметь гауссово распределение с дисперсией σ_l^2 , \mathbf{v}_f – вектор скорости потока частиц.

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

1.3.5 Потенциалы взаимодействия

Одним из основных этапов моделирования задач молекулярной динамики является точная постановка, а именно – выбор модели взаимодействия частиц системы, которая позволит получать в поставленных условиях реалистичные данные, наиболее схожие с результатами эксперимента. В настоящее время известно множество различных потенциалов взаимодействия [223, 228, 263, 286–288, 291, 328, 334, 337, 338, 349, 360]. Выбор потенциала взаимодействия является важным этапом работы, так как полученные характеристики веществ могут качественно различаться для разных потенциалов в зависимости от условий моделирования и агрегатного состояния исследуемого материала.

Потенциальная энергия системы представляется в виде функции, зависящей от координат рассматриваемых частиц и описывающей взаимодействие между частицами системы. Для моделирования течения чистого газа вдали от стенок микроканала достаточно рассмотреть один вид взаимодействия газ-газ, для двух газов – три вида взаимодействия для газов первого типа между собой, газа второго типа между собой и разных типов газов друг с другом. Для моделирования течения чистого газа через металлический канал необходимо рассмотреть все варианты взаимодействия газ-газ, металл-металл и газ-металл. Для случая течения бинарного газа через металлический канал число функций взаимодействий увеличивается, необходимо рассмотреть взаимодействия газа первого типа между собой, газа второго между собой, разных типов газа друг с другом, металлических частиц друг с другом и обоих газов с металлической

системой. Потенциальная энергия системы представляет сумму по всем типам взаимодействий всех компонент этой системы:

$$U = \sum U_{ll'}, \quad (1.65)$$

где $U_{ll'}$ - потенциал взаимодействия частиц типа l с частицами типа l' .

Оптимальным вариантом для моделирования таких задач является найти такие функции, чтоб они удовлетворяли сразу нескольким типам взаимодействий, и таким образом уменьшить их количество. Это не простая задача, но стоит того, так как потенциальные функции являются весьма затратными с точки зрения числа операций.

Для расчета взаимодействия частиц газа одного сорта или разных сортов между собой или частиц газа с металлическими поверхностями можно обойтись функциями парных взаимодействий:

$$U_{ll} = \sum_{i=1, j>i}^{N_l} \varphi_{ll}(|\mathbf{r}_{l,i} - \mathbf{r}_{l,j}|), \quad U_{ll'} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_l} \sum_{j=1}^{N_{l'}} \varphi_{ll'}(|\mathbf{r}_{l,i} - \mathbf{r}_{l',j}|). \quad (1.66)$$

Каждый вид взаимодействия описывается с помощью соответствующего парного потенциала $\varphi_{ll'}$.

Для описания свойств металлов парные взаимодействия не обеспечивают качественных результатов, так как при расчете сил, действующих в системе, необходимо учитывать вклад коллективизации электронов проводимости. Не смотря на существование большого количества различных видов многочастичных потенциалов, ограничения в подборе параметров и их неспособности воспроизвести полный набор физических характеристик порождают существенные сложности в выборе подходящего потенциала при моделировании процессов в узконаправленных задачах. По этой причине для металлических систем потенциал надо выбирать так, чтоб он качественно подходил к условиям задачи, был наиболее простым по форме и с широкопредставленными вариантами подбора или поиска параметров. Взаимодействия частиц в металлических системах хорошо описывает потенциал погруженного атома (ППА, Embedded Atom Model, EAM) [216–218], который учитывает не только парные взаимодействия $\varphi_{2,ll}$, но и влияние окружения на определенную частицу $\varphi_{1,ll}$:

$$U_{ll} = \sum_{i=1}^{N_l} \left[\varphi_{1,ll}(\rho_i) + \sum_{j>i} \varphi_{2,ll}(|\mathbf{r}_{l,i} - \mathbf{r}_{l,j}|) \right], \quad \rho_i = \sum_{k \neq i} f(r_{ik}), \quad k = 1, \dots, N_i, \quad (1.67)$$

где $\varphi_{1,i}$ – 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.

Наиболее популярным является потенциал Леннарда-Джонса в форме “12-6” [262], позволяющий с минимальными вычислительными затратами получать достаточно точные результаты для систем, характеризующихся парным взаимодействием, в частности, для инертных газов:

$$\varphi(r_{ij}) = \varepsilon \left[\left(\frac{\alpha}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{\alpha}{r_{ij}} \right)^6 \right] = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (1.68)$$

где ε – энергия связи молекул (глубина потенциальной ямы в точке минимума потенциальной энергии); $\alpha = \sqrt[6]{2} \sigma$ – «длина связи» (положение равновесия): $|\varphi(\alpha)| = \varepsilon$, $\varphi'(\alpha) = 0$; σ – эффективный радиус взаимодействия.

Параметры потенциала Леннарда-Джонса для частиц одного типа широко представлены в литературе, для взаимодействия частиц разного типа параметры можно определить, используя формулы Лоренца-Бершелота [198, 273].

При большом удалении частиц друг от друга значение энергии взаимодействия таких частиц становится мало и для сокращения вычислений исследуется потенциальная функция (1.70) в зависимости от удаления частиц друг от друга:

$$\varphi(r_{ij}) = \begin{cases} 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] - \varphi_{cut}, & r_{ij} \leq r_c, \\ 0, & r_{ij} > r_c \end{cases}, \quad (1.69)$$

$$\varphi_{cut} = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_c} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_c} \right)^6 \right],$$

где $r_c = 2,5\sigma$ – радиус «обрезания» потенциала, φ_{cut} способствует сглаживанию функции, то есть помогает избежать разрывность функции при $r_{ij} = r_c$.

Более обобщенной формой потенциала (1.68) является потенциал Ми в форме "n-6" [285], который является трехпараметрическим и поэтому подходит для более точного моделирования сложных газодинамических процессов:

$$\varphi(r_{ij}) = \varepsilon \frac{n}{n-6} \left(\frac{n}{6}\right)^{\frac{6}{n-6}} \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^n - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^6 \right], \quad (1.70)$$

где n – дополнительный параметр, улучшающий точность воспроизведения результатов.

Влияние взаимодействия частиц для потенциала Ми (1.70) рассматривается на расстоянии радиуса «обрезания» и с дополнительным сглаживанием аналогично форме (1.69).

Исследуя металлические системы и используя для этого ППА, необходимо подобрать 3 функции: парную часть и 2 функции коллективной части взаимодействия.

Если исследуются алюминиевые конструкции, то в качестве потенциала можно рассмотреть потенциал ППА в аналитической форме, предложенной в работах [356]. Данная форма потенциала хорошо зарекомендовала себя в задачах изучения процесса абляции, разрушения структуры алюминия под действием фемтосекундного лазера. Предложенная функция была разработана с целью возможности учитывать поведение атомов алюминия также в случае воздействия сильных волн сжатия или разрежения. При моделировании потенциал воспроизводит свойства алюминия с высокой точностью:

$$\varphi_1(\rho) = \frac{b_1 \rho (b_2 + (b_3 + \rho)^2)}{1 + b_4 \rho}, \quad (1.71)$$

$$f(r_{ik}) = f(r) = \frac{c_1 (r^2 - r_c^2)^2}{1 + (c_2 r^2)^3}, \quad (1.72)$$

$$\varphi_2(r_{ij}) = \varphi_2(r) = \left(\frac{1}{a_1 r^2} - a_2 \right) (a_1 r^2 - a_1 r_c^2)^{10} \left((a_1 r^2 - a_1 r_c^2)^6 + a_3 a_1^6 r^{12} \right). \quad (1.73)$$

Константы $a_1, a_2, a_3, b_1, b_2, b_3, b_4, c_1, c_2$ определяются с учетом экспериментальных свойств вещества и принимают значения:

$$\begin{aligned} a_1 &= 2.9275228176598036; a_2 = 5.1028014804162156; a_3 = 111.37742236893590; \\ b_1 &= 8.1106000931637006; b_2 = -334.57493744623503; b_3 = 14.868297626731845; \\ b_4 &= 1.608095393177309; c_1 = 0.58002942432410864; c_2 = 8.2981185422063639. \end{aligned}$$

При исследовании технических микросистем исследуются системы из разных металлов и их сплавов. Потому надо искать такие формы потенциала взаимодействия ППА, чтоб они хорошо описывали разные физические процессы и при этом имели большую базу элементов.

Хорошо зарекомендовал себя в широком спектре задач потенциал ППА в специальной форме, предложенной в работах [359]:

$$f(r_{ik}) = f(r) = \frac{f_e \exp(-\beta[r/r_e - 1])}{1 + (r/r_e - \lambda)^n}, \quad (1.74)$$

$$\varphi_2(r_{ij}) = \varphi_2(r) = \frac{A \exp(-\alpha[r/r_e - 1])}{1 + (r/r_e - \kappa)^m} - \frac{B \exp(-\beta[r/r_e - 1])}{1 + (r/r_e - \lambda)^n}, \quad (1.75)$$

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 $\varphi_1(\rho_i)$ используются три уравнения в зависимости от величины электронной плотности:

$$\begin{aligned} \varphi_1(\rho) &= \sum_{i=0}^3 \varpi_{n_i} \left(\frac{\rho}{\rho_n} - 1 \right)^i, \quad \rho < \rho_n, \\ \varphi_1(\rho) &= \sum_{i=0}^3 \varpi_i \left(\frac{\rho}{\rho_e} - 1 \right)^i, \quad \rho_n \leq \rho < \rho_0, \\ \varphi_1(\rho) &= \varpi_e \left[1 - \ln \left(\frac{\rho}{\rho_s} \right)^\eta \right] \left(\frac{\rho}{\rho_s} \right)^\eta, \quad \rho_0 \leq \rho, \end{aligned} \quad (1.76)$$

Константы $\varpi_{n_i}, \varpi_i, \varpi_e, \rho_n, \rho_e, \rho_0, \rho_s, \eta$ представлены в работе [359].

С целью оптимальности расчетов принято рассматривать потенциал (1.67) в заданных формах (1.71)-(1.73) и (1.74)-(1.76) при условиях:

$$\varphi_2(r \geq r_c) \equiv 0, \quad \rho(r \geq r_c) \equiv 0,$$

так как далее расстояния, соответствующего радиусу r_c , значения φ_2 и ρ становятся настолько малы, что ими пренебрегают.

1.3.6 Схема Верле

На каждом шаге моделирования решается система обыкновенных дифференциальных уравнений, соответствующая второму закону Ньютона и описывающая движение частиц молекулярно-динамической системы. Выбор схемы [45, 192, 195, 241, 341] обуславливается требованиями устойчивости и минимальности затрат машинного времени при расчете точек фазовой траектории. Для ряда разностных схем таких, как метод Рунге-Кутты, обладающих высоким порядком точности, необходимо проводить неоднократные вычисления правой части уравнений движения на каждом временном шаге, что является затратным по машинному времени. Чем выше порядок точности разностной схемы, тем она сложнее. Это требует, в свою очередь, большой оперативной памяти и одновременно приводит к увеличению числа операций, которые необходимы для перехода к следующему временному шагу, что снижает эффективность.

В задачах молекулярной динамики приходится идти на компромисс между точностью и эффективностью, поэтому была выбрана сравнительно простая в реализации и экономичная схема Верле [341, 342], которая позволяет статистически правильно воспроизводить поведение элементов в течение большого промежутка времени. Данный метод называется в зависимости от области применения либо методом Стермера [241] в астрономии, либо методом Верле в молекулярной динамике, либо методом «leap-frog» (пер. с англ. «чехарда») в уравнениях частных производных [165, 241]. Верле предложил использовать этот метод для расчетов в молекулярной динамике, и именно в данной области метод получил наиболее широкое распространение. Если необходима более высокая точность вычислений, то можно использовать асимптотические методы, например, метод, предложенный в работе [45]. Однако в этом случае проблематично использование алгоритмов термо- и баростатирования, которые могут нарушить условия устойчивости и сходимости асимптотических методов.

Схема Верле имеет следующий вид:

$$\mathbf{r}^{n+1} = 2\mathbf{r}^n - \mathbf{r}^{n-1} + \mathbf{a}^n (\Delta t)^2, \quad \mathbf{a}^n = \frac{\mathbf{F}^n}{m}, \quad (1.77)$$

здесь Δt – шаг интегрирования, n – номер шага, \mathbf{F}^n – значение силы на шаге n .

Форма (1.77) не требует вычисления скоростей, для нахождения координаты в следующий момент времени необходимо вычислить значение ускорения частицы, подставив рассчитанные значения координат в уравнение (1.50). Алгоритм не является самостартующим, для его запуска необходимо знать значения координат на двух предыдущих шагах.

Схема (1.77) может быть переформулирована в форме скоростного метода Верле:

$$\mathbf{r}^{n+1} = \mathbf{r}^n + \mathbf{v}^n \Delta t + \frac{\mathbf{F}^n (\Delta t)^2}{m} \frac{1}{2}, \quad \mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^n + \frac{\mathbf{F}^{n+1} + \mathbf{F}^n}{2m} \Delta t \quad (1.78)$$

В молекулярной динамике рассматривается вычисление статистических либо термодинамических величин, таких как температура, так как именно она представляет интерес при подобных вычислениях. Успех метода Верле в данной области заключается в наблюдении, что данный метод в состоянии статистически правильно воспроизвести поведение элементов в течение длительного промежутка времени [241].

В случае l сортов частиц, где виды частиц $1, \dots, lN$ и каждого сорта частиц всего по N_l , получаем следующий численный алгоритм на основе схемы Верле в скоростной форме:

$$\begin{aligned} 0) \quad & \mathbf{F}_{l,i}^0 = \mathbf{F}(\mathbf{r}_{1,1}^0, \dots, \mathbf{r}_{1,N_{l1}}^0; \mathbf{r}_{2,1}^0, \dots, \mathbf{r}_{2,N_{l2}}^0; \dots; \mathbf{r}_{lN,1}^0, \dots, \mathbf{r}_{lN,N_{lN}}^0), \quad i = 1, \dots, N_l; \\ & \forall n = 0, 1, 2, \dots; \\ 1) \quad & \mathbf{r}_{l,i}^{n+1} = \mathbf{r}_{l,i}^n + \mathbf{v}_{l,i}^n \Delta t + \frac{\mathbf{F}_{l,i}^n (\Delta t)^2}{m_l} \frac{1}{2}, \quad i = 1, \dots, N_l; \\ 2) \quad & \mathbf{F}_{l,i}^{n+1} = \mathbf{F}(\mathbf{r}_{1,1}^{n+1}, \dots, \mathbf{r}_{1,N_{l1}}^{n+1}; \mathbf{r}_{2,1}^{n+1}, \dots, \mathbf{r}_{2,N_{l2}}^{n+1}; \dots; \mathbf{r}_{lN,1}^{n+1}, \dots, \mathbf{r}_{lN,N_{lN}}^{n+1}), \quad i = 1, \dots, N_l; \\ 3) \quad & \mathbf{v}_{l,i}^{n+1} = \mathbf{v}_{l,i}^n + \frac{\mathbf{F}_{l,i}^{n+1} + \mathbf{F}_{l,i}^n}{2m_l} \Delta t, \quad i = 1, \dots, N_l. \end{aligned} \quad (1.79)$$

Здесь \mathbf{F} – процедура вычисления сил на основе формул (1.52), (1.65), (1.66).

При использовании процедуры термостатирования алгоритм меняется. В случае термостата Берендсена появляется четвертый шаг в виде перемасштабирования скоростей на основе коэффициента (1.63):

$$4) \quad \mathbf{v}_{l,i}^{n+1} = \lambda_{l,i}^{n+1} \cdot \mathbf{v}_{l,i}^{n+1}, \quad i = 1, \dots, N_l. \quad (1.80)$$

В случае действия термостата Ланжевена можно использовать два варианта.

Первый вариант заключается в изменении только второго параграфа, в котором, кроме вычисления сил взаимодействия между частицами, необходимо вычислять дополнительные силы по формулам (1.64):

$$2) \quad \mathbf{F}_{l,i}^{n+1} = \mathbf{F}(\mathbf{r}_{l,i}^{n+1}) + \mathbf{F}_{ext,l,i}^{n+1}, \quad \mathbf{F}_{ext,l,i}^{n+1} = \mathbf{F}_{rl,i}^{n+1} + \mathbf{F}_{fl,i}^{n+1}(\mathbf{v}_{l,i}^n), \quad i = 1, \dots, N_l. \quad (1.81)$$

Второй вариант более сложен, так как схема разбивается на полушаги изменения во всех этапах с первого, но данный вариант обладает более высокой точностью:

$$\begin{aligned}
 1) \quad \mathbf{v}_{l,i}^{n+1/2} &= \mathbf{v}_{l,i}^n + \frac{\mathbf{F}_{l,i}^n}{2m_l} \Delta t, \quad i = 1, \dots, N_l; \\
 2) \quad \mathbf{r}_{l,i}^{n+1} &= \mathbf{r}_{l,i}^n + \mathbf{v}_{l,i}^{n+1/2} \Delta t, \quad i = 1, \dots, N_l; \\
 3) \quad \mathbf{F}(\mathbf{r}_{l,i}^{n+1}) + \mathbf{F}_{ext,l,i}^{n+1}, \quad \mathbf{F}_{ext,l,i}^{n+1} &= \mathbf{F}_{rl,i}^{n+1} + \mathbf{F}_{fl,i}^{n+1}(\mathbf{v}_{l,i}^{n+1/2}), \quad i = 1, \dots, N_l; \\
 4) \quad \mathbf{v}_{l,i}^{n+1} &= \mathbf{v}_{l,i}^{n+1/2} + \frac{\mathbf{F}_{l,i}^{n+1}}{2m_l} \Delta t, \quad i = 1, \dots, N_l.
 \end{aligned} \tag{1.82}$$

1.4 Комбинированный подход на основе КГД и МД

В данном разделе описывается комбинированный многомасштабный численный подход, основанный на совместном решении КГД уравнений для макросреды и уравнений Ньютона для систем частиц.

Необходимо отметить в начале, что небольшие по размеру микросистемы с известными потенциалами взаимодействия можно моделировать, используя только методы МД. Однако размеры таких систем ограничиваются вычислительными возможностями современных компьютеров и суперкомпьютеров. К настоящему моменту предельный размер микросистемы достигает порядка $10^{15} \div 10^{18}$ частиц. Для объемных металлических микросистем эта величина трансформируется в кубический микрон. Для объемных газовых микросистем эта величина трансформируется в кубический миллиметр. Для моделирования микросистем с большими размерами нужны очень мощные суперкомпьютеры, которые уже существуют, однако доступ к ним весьма ограничен. Поэтому востребованным еще долгое время будет многомасштабный численный подход, сочетающий то или иное описание сплошной среды с многочастичными моделями процессов на микроуровне.

В диссертационной работе предлагается многомасштабный подход, который основан на использовании двух моделей: КГД системы уравнений для расчетов на макроуровне и уравнений механики Ньютона для системы частиц на микроуровне. Мотивацией выбранной комбинации моделей является необходимость моделирования сложных течений реальных газов в технических микросистемах сложной геометрии в широком диапазоне чисел Кнудсена. Возможность такого моделирования с помощью объединения КГД и МД описаний

обеспечивается свойствами КГД уравнений, хорошо отражающих кинетику нелинейных газодинамических процессов в целом, и свойствами моделей молекулярной динамики, позволяющими наблюдать взаимодействия на уровне отдельных атомов и молекул. В дополнение к сказанному можно добавить, что использование МД вычислений позволяет корректно определять материальные коэффициенты среды, параметры уравнений состояния и граничные условия, к которым очень чувствительны современные технические микросистемы.

Далее представлены некоторые детали предлагаемого многомасштабного подхода.

Во-первых, интегрирование КГД уравнений осуществляется сеточными методами. При этом пространственная сетка строится не только с целью максимально точного описания геометрии расчетной области, но и с целью заданного разрешения процессов, происходящих на микроуровне. Последнее означает, что измельчение сетки подчиняется физике моделируемого процесса. Поэтому, в частности, использование ячеек пространственной сетки с размерами много меньше средней длины свободного пробега молекул газа $\langle \lambda \rangle$ или длины диффузии λ_D в твердом теле является физически некорректным.

Во-вторых, дискретизация по времени связана с наличием двух временных масштабов. Первый масштаб времени $\tau^{(1)}$ связан с относительно медленными процессами, протекающими на макроуровне. Второй масштаб времени $\tau^{(2)}$ связан с характерными временами взаимодействия молекул газа между собой и с атомами материала, составляющего основу стенок микросистемы. Характерным временем изменения параметров газовой среды в технической микросистеме можно считать величину пропорциональную отношению линейного размера системы L к скорости звука a : $\tau^{(1)} \sim \frac{L}{a}$. Характерным временем взаимодействия молекул газа между собой можно считать величину отношения эффективного радиуса взаимодействия молекул σ_E к средней скорости их движения $\langle v \rangle$: $\tau^{(2)} \sim \frac{\sigma_E}{\langle v \rangle}$. При рассмотрении умеренных сверхзвуковых, а также транзвуковых течений (что часто используется в технических микросистемах) можно считать, что $\langle v \rangle \sim a$. Тогда отношение временных масштабов $\tau^{(1)} / \tau^{(2)} \sim L / \sigma_E$ и может составлять от двух до 4 десятичных порядков.

Для примера, при расчетах течения воздушной смеси при нормальных условиях в канале микросистемы с длиной порядка 1 микрон время $\tau^{(1)}$ составляет порядка нескольких наносекунд, а время $\tau^{(2)}$ будет составлять несколько пикосекунд.

В-третьих, переход от макросистемы к микросистеме осуществляется с соблюдением следующих правил:

- 1) в каждом микрообъеме вдали от стенок сохраняются суммарные плотность, импульс и энергия смеси;
- 2) взаимодействия всех типов частиц осуществляется по специально подобранному для условий моделирования потенциалу взаимодействия;
- 3) энергия газа может поглощаться стенкой или наоборот стенка может нагревать газ;
- 4) распределение молекул по ячейке считается равномерным и таким, чтобы суммарная потенциальная энергия молекул совпадала с внутренней энергией микрообъема;
- 5) стартовое распределение модуля скорости молекул каждого сорта считается локально максвелловским, так что суммарная кинетическая энергия молекул совпадает с кинетической энергией микрообъема;
- б) стартовое распределение направлений векторов тепловых скоростей молекул считается равномерным и таким, чтобы суммарный импульс молекул совпадал со средним импульсом микрообъема.

В-четвертых, шаг интегрирования КГД уравнений Δt пропорционален $\tau^{(1)}$, общее время интегрирования КГД уравнений в зависимости от существа моделируемого физического процесса на макроуровне может составлять $(10^3 \div 10^6) \Delta t$; шаг интегрирования уравнений Ньютона $\Delta t'$ составляет порядка $(10^{-3} \div 10^{-5}) \tau^{(2)}$ (что зависит от параметров нелинейности потенциалов взаимодействия частиц), общее время интегрирования уравнений Ньютона в зависимости от существа моделируемого физического процесса на микроуровне составляет $(10^{-2} \div 10^2) \tau^{(1)}$ и может в некоторых случаях превосходить Δt . Однако в этом случае МД вычисления будут прекращаться. Такой подход оправдывается тем, что большие времена установления на молекулярном уровне означают существенную неравновесность всего процесса. В этой ситуации не имеет смысла рассчитывать полное установление в рамках молекулярной динамики. Выходов из такой ситуации два: либо обрывать МД расчет при достижении времени Δt , либо переходить в данной ячейке сетки к нелокальному алгоритму (см. Главу 2).

В зависимости от класса общего численного алгоритма (описаны подробно в Главе 2) микроскопическая модель может использоваться для различных целей.

Во-первых, с ее помощью можно уточнять уравнения состояния (как по давлению, так и

по энергии) путем определения коэффициентов сжимаемости Z_l и удельных теплоемкостей при постоянном объеме $c_{v,l}$. Более подробно о методах определения коэффициентов написано в Главе 4, параграфе 4.1.

Во-вторых, с помощью методов МД можно получать кинетические коэффициенты компонент газовой смеси (вязкости, теплопроводности, диффузии), необходимые для уравнений квазигазодинамики. Более подробно о методах получения транспортных коэффициентов написано в Главе 4, параграфе 4.2.

В-третьих, микроскопическая модель может использоваться для расчета обменных слагаемых в уравнениях (1.31)-(1.32) для импульса и энергии. При этом компоненты скоростей \mathbf{u}_l^* и энергии E_l^* вычисляются с помощью следующих формул:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_l^* &= \frac{1}{N_l} \sum_{i=1}^{N_l} \mathbf{v}_{l,i}^*, & \mathbf{u}^* &= \sum_{l=1}^N m_l N_l \mathbf{u}_l^* / \sum_{l=1}^N m_l N_l; \\ \mathbf{u}_{l,T}^* &= \mathbf{u}_l^* - \mathbf{u}^*, & T_l^* &= \frac{|\mathbf{u}_{l,T}^*|^2}{\mathfrak{R}_l}, & T^* &= \sum_{l=1}^N n_l T_l^* / \sum_{l=1}^N n_l; \\ p_l^* &= \rho_l Z_l^* \mathfrak{R}_l T_l^*, & p^* &= \rho Z^* \mathfrak{R} T^*; \\ E_l^* &= \rho_l \left(\frac{|\mathbf{u}_l^*|^2}{2} + c_{v,l}^* T_l^* \right), & E^* &= \sum_{l=1}^N E_l^*. \end{aligned} \tag{1.83}$$

Здесь с помощью метода МД вычисляются скорости частиц $\mathbf{v}_{l,i}^*$, факторы сжимаемости для газовых компонент Z_l^* и для смеси Z^* , удельная теплоемкость при постоянном объеме $c_{v,l}^*$.

В-четвертых, микроскопическая модель особенно востребована при расчетах пристеночных взаимодействий молекул газов с атомами стенки, определяющих характер условий на границе области. Более подробно о процессах, проходящих в пограничных слоях, и получении граничных условий для КГД уравнений написано в Главе 5.

В-пятых, сопутствующие макропеременные, например, длины свободного пробега молекул, частоты столкновений, скорости звука, числа Маха, Рейнольдса, Шмидта, Прандтля, Кнудсена для компонент смеси также могут определяться либо из базы данных молекулярных расчетов, либо с помощью прямых МД вычислений.

Конкретная реализация указанных выше идей и принципов рассматривается в Главе 2.

1.5 Выводы по главе

1. Предложен многомасштабный подход для моделирования течений реальных газов и их смесей в микроканалах технических систем. Подход позволяет производить расчеты течений реальных газов и их смесей в микроканалах технических систем со сложной геометрией в широком диапазоне значений чисел Кнудсена.
2. Разработан общий численный алгоритм для моделирования течения многокомпонентной смеси реальных газов в микроканалах.
3. Разработана методика расчетов материальных коэффициентов и макропараметров смеси реальных газов. Методика позволяет рассчитать: уравнения состояния как отдельных компонент, так и смеси в целом; кинетические коэффициенты КГД уравнений (вязкость, теплопроводность, диффузия), обменные члены, параметры граничных условий, сопутствующие макропараметры.

ГЛАВА 2

Вычислительные алгоритмы, параллельная реализация и комплексы программ

В данной главе представлены вычислительные алгоритмы и параллельные технологии для их реализации, составляющие основу многомасштабного двухуровневого подхода, предложенного в Главе 1 и используемого при решении выбранных прикладных задач. Параллельная реализация предполагает использование кластера (или суперкомпьютера) с центральной или гибридной архитектурой, с возможностью на внешнем уровне иметь распределенную модель вычислений, а на внутреннем – параллельные вычисления на общей памяти. Распараллеливание алгоритма производится на принципах геометрического параллелизма и разделения областей. В главе приведены примеры расчетов по разбиению исследуемой области на вычислительные домены, по необходимому объему памяти в зависимости от разбиений и используемых алгоритмов. Завершается глава приведением результатов тестирования алгоритмов на конкретных задачах.

2.1 Вычислительные алгоритмы многомасштабного подхода на основе уравнений квазигазодинамики и молекулярно-динамических вычислений

Предложенный в Главе 1 многомасштабный двухуровневый подход сочетает КГД уравнения и молекулярно-динамические вычисления. Общий алгоритм представляет собой расщепление по физическим процессам. КГД система уравнений решается методом конечных объемов. Система уравнений МД используется в дополнительных вычислениях самостоятельно, либо 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 компонент системы.

2.1.1 Классификация алгоритмов по использованию двухуровневого подхода

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 предложено выполнить методами МД.

Моделирование задач со многими масштабами и уровнями должно происходить согласно определенным правилам. При этом молекулярно-динамические вычисления можно проводить как прямым образом, сочетая в одной реализации КГД и МД, так и косвенным образом, накопив базу данных молекулярных расчетов (БДМР), рассчитанных заранее. Также возможно частичное использование БДМР и прямое МД вычисление дополнительных параметров. Таким образом, представляемая вычислительная технология представляет собой 4 класса алгоритмов.

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 [341]. В результате таких исследований предполагается накопление базы данных по свойствам газов и твердых материалов (в основном металлических или композитных), которая будет использоваться в рамках других алгоритмов расчета. В рамках данной работы такая база данных создана для чистого азота и чистого никеля в диапазоне температур 100 - 400 К и давлений порядка 1 атм. (см. Главы 3–6), также в базу включены данные в ограниченном числе фазовых точек для алюминия и аргона (см. [105, 106]). Алгоритмы класса 1 можно также использовать для полноценных прямых расчетов газодинамических задач в областях с характерными размерами порядка 1 мкм.

Алгоритмы класса 2 предполагают решение задачи только на макроуровне на основе КГД системы уравнений. При этом свойства компонент газовой смеси (уравнения состояния по давлению и энергии, кинетические коэффициенты – вязкость, диффузия и теплопроводность, обменные члены в уравнениях для импульса и энергии, параметры граничных условий) определяются из указанной выше базы данных молекулярно-динамических расчетов, накопленной заранее для нужного диапазона температур и давлений.

Алгоритмы класса 3 предполагают одновременное использование в расчетах КГД уравнений и уравнений механики Ньютона для молекул газовой среды. Реализация такой комбинации уравнений основывается на методах расщепления по физическим процессам.

Также в рамках алгоритмов класса 3 вводится предположение, что в газовой среде и на ее границах можно ограничиться локальным рассмотрением процессов взаимодействия газов смеси между собой и газов с твердой стенкой.

Алгоритмы класса 4 также предполагают одновременное использование в расчетах КГД уравнений и уравнений механики Ньютона для молекул газовой среды и атомов поверхностного слоя стенки. Отличием данного случая от предыдущего является то, что в некоторых областях среды (обычно на границе и в зонах сильного 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 алгоритм является нелокальным на молекулярном уровне.

Надо отметить, что прямой МД расчет в рамках алгоритмов класса 3 и 4 представляется наиболее оправданным, поскольку позволяет согласовывать процессы взаимодействия на микро- и макроуровнях. Также прямой МД расчет производится для конкретного набора физических условий, которые могут отсутствовать в БДМР, и попадут в нее в результате данного расчета.

2.1.2 Алгоритмы класса 1

Алгоритмы класса 1 включают, прежде всего, расчеты свойств материалов методом молекулярной динамики и накопление базы данных молекулярных расчетов, описывающей эти свойства. Также данный класс алгоритмов можно использовать для полноценных расчетов газодинамических и связанных с ними других прикладных задач с характерными размерами порядка нескольких микрон (по сути, это ограничение зависит лишь от вычислительной мощности используемой компьютерной техники).

Расчеты в рамках данного класса алгоритмов состоят в задании начального состояния газовой микросистемы и проведении цикла вычислений по схеме Верле (1.78). Начальные данные расчета предполагают задание: области расчета и ее объема, стартового количества частиц и их расположения в объеме, распределений скоростей частиц по модулю и направлению, параметров потенциалов взаимодействия, параметров итогового равновесного (квазиравновесного) состояния (например, температуры и среднего импульса), параметров граничных условий (подробнее о задании каждого параметра описано в Главах 1, 3 и 5).

При расчетах свойств газовых смесей были определены так называемые базовые макропараметры чистых компонент газа: Z_l , $c_{v,l}$, $c_{p,l}$, μ_l , ζ_l , χ_l , D_l . Мотивация выбора именно этих макропараметров определяется двумя факторами. Первый фактор состоит в том,

что при заданных температуре T_i , давлении p_i и векторе скорости \mathbf{u}_i базовые макропараметры позволяют определить по формулам (1.33), (1.35) все остальные макропараметры чистых компонент, а именно: ρ_i , ε_i , E_i , H_i , γ_i , Pr_i , Sc_i , τ_i , a_i , Ma_i , Re_i , Kn_i и др. Вторым фактором связан с тем, что именно выбранные макропараметры непосредственно измеряются в натуральных экспериментах, а следовательно, легко верифицируются на основе накопленной обширной информации по свойствам чистых газов.

Следует также отметить, что по известным равновесным макропараметрам для чистых компонент газовой среды можно с высокой степенью точности определить равновесные макропараметры газовой смеси. Для этого необходимо задать дополнительно мольные доли компонент смеси X_i , а также молярные массы M_i и провести вычисления по формулам (1.39)-(1.43). Также можно использовать формулы (1.39)-(1.43) во время МД вычислений, чтобы сравнивать истинную динамику молекулярной системы с квазиравновесным приближением.

2.1.3 Алгоритмы класса 2

Алгоритмы класса 2 реализуют расчеты течений газовых смесей с помощью численного решения КГД уравнений (детали численной процедуры на основе метода сеток приводятся ниже). При этом все материальные коэффициенты этих уравнений, а также материальные параметры уравнений состояния и граничных условий рассчитываются по приближенным формулам. Однако здесь различаются два принципиальных подхода.

Первый подход предполагает, что используемые в расчетах приближенные формулы материальных коэффициентов и параметров получены либо экспериментальным, либо теоретическим путем и подтверждены многочисленными исследованиями. Преимуществом такого подхода является высокая скорость вычислений и отсутствие необходимости в подтверждении правильности используемых материальных зависимостей. Недостатком такого подхода является то, что не всегда различные материальные коэффициенты и параметры согласованы между собой. В результате такого рассогласования, даже если оно не очень большое, численная процедура в целом оказывается либо неустойчивой, либо дает решение с большой ошибкой.

Для преодоления указанной проблемы рассогласования материальных зависимостей используется второй подход. Он предполагает использование БДМР, которая подготовлена заранее с помощью молекулярно-динамических расчетов, выполненных для необходимого диапазона температур и давлений. При использовании БДМР для получения необходимого

значения того или иного материального коэффициента или параметра применяется дробно-рациональная или логарифмическая интерполяция. Это позволяет, во-первых, повысить точность и гарантировать устойчивость вычислений, а, во-вторых, уменьшить объем оперативной памяти для хранения БДМР в широком диапазоне температур и давлений. В целом использование БДМР и высокоточных алгоритмов интерполяции существенно уменьшает общее время вычислений и решает проблему рассогласования, поскольку в этом случае все материальные зависимости получаются из расчетов эволюции одного и того же ансамбля частиц.

2.1.4 Алгоритмы класса 3

Алгоритмы класса 3 реализуют расчеты течений газовых смесей на двух уровнях: макроскопическом и микроскопическом. На макроскопическом уровне численно решаются КГД уравнения. На микроскопическом уровне решаются уравнения Ньютона. Общий алгоритм решения состоит в чередовании макроскопических и микроскопических расчетов на каждом шаге интегрирования. Он реализуется в рамках метода расщепления по физическим процессам [90].

Мотивацией использования алгоритмов данного класса являются два фактора: 1) отсутствие необходимых данных о материальных коэффициентах и параметрах задачи в нужном диапазоне температур и давлений; 2) нарушение гипотезы сплошности среды в отдельных зонах расчетной области.

Первый фактор связан с тем, что условия течения газа или смеси газов в реальных технических системах могут быть весьма вариативны. Поэтому для использования алгоритмов класса 2 необходимо иметь в рамках текущего расчета быстрый доступ к большим распределенным объемам памяти. Последнее не всегда достижимо. К тому же в БДМР может просто не оказаться нужных данных для покрытия конкретного диапазона значений. В итоге, алгоритм класса 2 оказывается слишком затратен с точки зрения времени и хранения информации. Поэтому его лучше заменить на алгоритм класса 3, который одновременно и накапливает БДМР, и реализует все необходимые вычисления.

Второй фактор связан с тем, что в отдельных случаях невозможно ограничиться расчетами только по макроскопическим уравнениям. В качестве примера можно привести проблемы расчета взаимодействия в сверхзвуковом потоке молекул нескольких газов, существенно различающихся по атомной массе, а также расчеты различных нелинейных пристеночных явлений в случае уменьшения поперечных размеров технической системы до

микронного и субмикронного масштабного уровня. В обоих указанных случаях приходится рассматривать нелинейные взаимодействия на микроуровне. В данной работе это реализуется с помощью методов молекулярной динамики.

Предлагаемые алгоритмы класса 3 подразумевают расчеты течений смесей газов с помощью численного решения методом сеток КГД уравнений и прямых МД вычислений на границе газовой среды и в потоке газа. При этом предполагается, что в газовой среде и на ее границах можно ограничиться локальным рассмотрением процессов взаимодействия молекул газов смеси между собой и молекул газов с атомами твердых стенок. Принцип локальности позволяет рассматривать молекулярные взаимодействия в каждой ячейки сетки независимо от процессов, протекающих в других ячейках. В такой ситуации МД вычисления выступают в качестве локального подсеточного алгоритма.

Детали алгоритмов класса 3 излагаются ниже. Здесь же подчеркнем, что алгоритмы класса 3 в целом являются затратными по памяти и времени расчетов, но позволяют обойти ограничения алгоритмов класса 2. В итоге, алгоритмы класса 3 самостоятельно обеспечивают всеми необходимыми данными полный цикл вычислений и позволяют согласовывать процессы на микро- и макроуровнях, а также производить расчеты для определенного конкретного набора условий и одновременно накапливать базу данных на случай повторных вычислительных экспериментов.

2.1.5 Алгоритмы класса 4

Алгоритмы класса 4 также подразумевают проведение прямых макроскопических (КГД) и микроскопических (МД) расчетов, которые осуществляются с помощью метода расщепления по физическим процессам. Отличием данного случая от предыдущего является то, что в некоторых областях среды (обычно на границе и в зонах сильного 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 алгоритм является нелокальным на молекулярном уровне. Преимуществом алгоритмов класса 4 по сравнению с алгоритмами классов 2 и 3 является возможность расчета течений газовых смесей в технических микросистемах с произвольными геометрией и структурой границ, в произвольном диапазоне температур и давлений с учетом локальных и нелокальных процессов взаимодействия газов с окружающей средой. Недостатком алгоритмов класса 4 является их высокая вычислительная емкость.

2.1.6 Реализация алгоритмов класса 1

Реализация алгоритмов класса 1 связана с решением системы уравнений (1.51). Решение этой системы проводится в безразмерных переменных с помощью разностной схемы Верле в скоростной форме (1.78).

Общий алгоритм расчета методами МД представляет собой следующую последовательность действий.

В начальный момент времени определяются распределения координат и скоростей всех частиц, которые могут быть либо заданы согласно определенным условиям и генерируются по методам, описанным в пункте 1.3.3 Главы 1, либо берутся из раздела БДМР, в котором хранятся заранее рассчитанные специальным образом начальные состояния микросистем. После определения начальных условий решаются уравнения движения (1.51). На каждом шаге по времени вычисляются силы взаимодействия (1.52), новые координаты и скорости частиц (1.78) с учетом поставленных граничных условий и внешнего воздействия на систему в зонах расчета, где оно присутствует. Также на каждом шаге по времени или через определенный период времени происходит расчет основных макропараметров среды (энергия, давление, температура и др.).

Для достижения желаемых температур газа в состоянии термодинамического равновесия используется термостат Берендсена [196]. Для достижения желаемых температуры и импульса газа в состоянии термодинамического равновесия используется термостат Ланжевена [173].

Все вычисления выполняются в рамках некоторого временного цикла. В общем случае на каждом шаге по времени этого цикла производятся:

- 1) Расчет новых координат частиц для текущего момента времени.
- 2) Проверка граничных условий для расчетного объема, с учетом расположения частиц.
- 3) Вычисление потенциальной энергии и сил, действующих на каждую частицу.
- 4) Расчет новых скоростей частиц.
- 5) Вычисление кинетической, внутренней и полной энергий системы.
- 6) Вычисление необходимых макропараметров моделируемой системы.

Если присутствует внешнее воздействие на систему со стороны термостата, общий алгоритм необходимо дополнить соответствующими пунктами. Влияние термостата можно считать на каждом шаге по времени, либо с некоторой периодичностью.

В случае использования термостата Берендсена после пункта 4) появляется пункт:

- 4*) Расчет нового коэффициента λ^{n+1} по (1.63) и перемасштабирование скоростей.

В случае использования термостата Ланжевена после пункта 3) появляется новый пункт:

3*) Вычисление дополнительных случайных компонент силы \mathbf{F}_r^{n+1} и \mathbf{F}_f^{n+1} по (1.64), действующих на каждую частицу, и прибавление этих значений к значениям, посчитанным в пункте 3).

Результатом вычислений являются равновесные значения макропараметров системы – температуры, давления, плотности, импульса, средней кинетической энергии, а также данные для расчета материальных коэффициентов и других материальных параметров.

2.1.7 Реализация алгоритмов классов 2-4

Реализация алгоритмов классов 2-4 на макроскопическом уровне опирается на численное решение КГД уравнений (1.30)-(1.32). Для расчета макропараметров газа по КГД уравнениям используется сеточный численный метод, имеющий в своей основе метод контрольных объемов [27, 55, 168, 188, 224, 267]. Предварительно система (1.30)-(1.33) с соответствующими материальными уравнениями и начальными и граничными условиями обезразмеривается.

Далее, как было описано в параграфе 1.2.4 Главы 1, в расчетной области Ω вводится пространственная сетка Ω_h с ячейками C_m ($m = 1, \dots, M$), а также сетка по времени ω_t с шагом Δt , который может быть как постоянным, так и переменным. Сетка Ω_h в общем случае является гибридной и включает в себя элементы разных типов. В одномерном случае речь идет об отрезках разной длины (неравномерная сетка); в двумерном случае подразумевается использование треугольников и четырехугольников; в трехмерном случае могут использоваться выпуклые многогранники с числом вершин от четырех до восьми (тетраэдры, пентаэдры, гексаэдры, гептаэдры и октаэдры). В частных случаях, сетка Ω_h была декартовой равномерной сеткой с шагом h (см. Главу 6).

Все параметры компонент газа (плотности, давления, температуры, компоненты вектора скорости и т.д.) относятся к центрам масс элементов сетки, то есть к центрам ячеек. Поточные переменные задаются в центрах граней ячеек. Пространственные аппроксимации основных членов на гибридных сетках выполнены по методике, представленной в работе [134]. В случае декартовых сеток используются аппроксимации, аналогичные предложенным в [46]. Вычислительная схема по времени является явной.

Итоговые сеточные уравнения на этапе предиктора не содержат обменных членов и имеют вид (1.48). В рамках алгоритмов классов 2 и 3 уравнения (1.48) решаются на всей сетке, а в рамках алгоритмов класса 4 – лишь на ее подмножестве (см. ниже). Также следует заметить,

что локальная погрешность аппроксимации схемы (1.48) зависит от конкретных аппроксимаций потоковых членов. В данной работе использовались такие аппроксимации, которые дают общий порядок схемы $O(t + \hbar)$ на произвольной гибридной сетке (здесь \hbar – средняя длина ребра сеточных элементов). В случае использования регулярных равномерных или квазиравномерных сеток этот порядок повышается до величины $O(t + \hbar^2)$.

Как известно из обширной литературы расчет сверхзвуковых потоков сильно разреженного газа сопровождается в расчетах различного рода неустойчивостями. Для преодоления этой трудности используются численные схемы с искусственной вязкостью. В данной работе, следуя подходу [134], в целях обеспечения устойчивости вычислений в уравнения (1.48) вводится адаптивная искусственную вязкость. Однако в отличие от [134], искусственная вязкость вводится более простым способом.

На дифференциальном уровне введение искусственной вязкости можно описать следующим образом. Если каждое из уравнений (1.20)-(1.32) представить в виде:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \operatorname{div} W = Q, \quad (2.1)$$

то уравнение с искусственной вязкостью будет иметь вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \operatorname{div} W + \nu \cdot \Delta f = Q, \quad (2.2)$$

где Δ – оператор Лапласа, $\nu = \nu_1 + \nu_2 \equiv c_1 h + c_2 h^4$ – малый параметр, имеющий смысл искусственной вязкости и одинаковый для всех уравнений (1.30)-(1.32), c_1 и c_2 – положительные константы, не зависящие от шага сетки [134].

Величина ν_1 описывает первую адаптивную искусственную вязкость, отвечающую за сглаживание решения в зонах высоких перепадов плотности и температуры. Она отлична от нуля только в указанных зонах и обращается в ноль во всей пространственной области по мере установления стационарного режима течения. Критерием введения адаптивной искусственной вязкости является скачок массовой плотности и/или плотности энергии в ячейке на величину порядка 3% по сравнению с ее окружением. Если критерий выполнен, то искусственная вязкость вводится на всем шаблоне, содержащем данную ячейку. Со временем критерий перестает выполняться, и искусственная вязкость ν_1 больше не используется.

Величина ν_2 описывает вторую искусственную вязкость, которая вводится во всей области и отвечает за сглаживание решения при установлении стационарного профиля. Данная часть вязкости присутствует на всем протяжении вычислений.

Очевидно, что введение искусственной вязкости указанным способом не изменяет общий порядок аппроксимации схемы (1.48) и не влияет на ее консервативность (интеграл от членов с искусственной вязкостью равняется 0, поскольку в граничных узлах вязкость не вводится).

Этап корректора включает использование МД вычислений и состоит из двух процедур.

Первая процедура касается вычисления параметров обменных слагаемых (1.24) и (1.26). В алгоритмах класса 2 она базируется на формулах (1.83) для вычисления параметров \mathbf{u}_i^* и E_i^* . Все недостающие для реализации этих формул данные берутся либо непосредственно из БДМР, либо интерполируются по полученным предикторным значениям $\hat{\rho}_{l,m}$, $\hat{\mathbf{u}}_{l,m}$, $\hat{E}_{l,m}$ во всех ячейках сетки.

В алгоритмах класса 3, 4 производятся прямые молекулярные расчеты с шагом $\Delta t_{MD} \ll \Delta t_{KGD}$ (Δt_{MD} – шаг интегрирования уравнений молекулярной динамики, $\Delta t_{KGD} \equiv \Delta t$ – шаг интегрирования КГД уравнений). При этом осуществляется анализ ситуации в реальном времени, то есть учитываются соотношения размерных времен: $t_n \Delta t_{MD}$ и $t_n \Delta t_{KGD}$, где $t_n = x_n / u_n$ – нормирующий множитель времени, использующийся на макроскопическом уровне и определяющийся нормировкой x_n пространственной координаты и нормировкой u_n векторов скорости.

Адекватное описание газодинамического процесса в микросистемах в нестационарном случае при наличии перехода в сверхзвуковую область приводит к нормировочным величинам t_n порядка 1 нс и менее. Например, для чистого азота при нормальных условиях скорость звука составляет около 350 мкм/мкс. Тогда при значении x_n порядка 1 мкм получим время t_n порядка 2.8 нс. Для увеличения устойчивости вычислений величину нормировки скорости обычно повышают в 5-10 раз, что приводит к величинам t_n порядка 0.6-0.3 нс. Шаг интегрирования КГД уравнений в таком случае в размерных переменных составляет сотые или тысячные доли нормировочного времени, то есть может достигать 0.6-0.3 пс. Размерный шаг интегрирования уравнений Ньютона $t_n \Delta t_{MD}$ в таких расчетах зависит от формы потенциалов взаимодействия частиц газа и обычно выбирается в порядка 1 фс или менее.

На практике, конкретное время МД вычислений $t_{MD, макс}$ (или число подсеточных временных шагов) зависит от качества стартового состояния микросистемы в ячейке (для

алгоритмов класса 3) или в домене связанных ячеек (для алгоритмов класса 4). В предлагаемом подходе считается, что при отсутствии данных в БДМР на старте МД процедуры в каждой ячейке реализуется квазиравномерное пространственное распределение частиц по ячейке, соответствующее минимальной внутренней энергии их взаимодействия. При этом распределение модуля скорости газовых частиц соответствует локально-максвелловской функции распределения для трехмерного случая, а распределение направлений вектора скорости обеспечивает заданный суммарный импульс. Тогда общее время МД расчета в размерных переменных $t_n t_{МД, макс}$ пропорционально времени максвеллизации рассматриваемой газовой микросреды. Это время может быть достаточно большим и превышать допустимую алгоритмом величину $t_n t_{МД, доп}$ в несколько раз (в рамках реализованных алгоритмов классов 3 и 4 время МД вычислений ограничивается величиной одного газодинамического шага, то есть $t_n t_{МД, доп} = t_n \Delta t_{КГД}$). Для устранения этой проблемы предлагается использовать заранее рассчитанные и помещенные в БДМР равновесные состояния микросистем, которые находятся ближе к рассчитываемому состоянию.

В алгоритмах класса 3 переход к МД уровню осуществляется следующим образом. Сначала для каждой ячейки сетки C_m определяется микрообъем $V_{m, МД}$ (в общем случае не совпадает с контрольным объемом V_m), в котором следует произвести МД вычисления. Микрообъем $V_{m, МД}$ должен быть достаточно малым, чтобы вмещать разумное с вычислительной точки зрения число частиц, и достаточно большим, чтобы реализуемая в МД расчетах статистика была представительной (см. ниже). При этом размеры $V_{m, МД}$ для газовой среды должны быть связаны со средней длиной свободного пробега молекул газа λ_m , вычисленной для данной ячейки сетки. Будем считать, что вокруг центра ячейки C_m описан виртуальный куб (или шар) с длиной ребра (диаметром) не менее $0.5\lambda_m$. Фактически этот куб (шар) является предельным разрешением используемой пространственной сетки Ω_h . При достижении этого разрешения ячейка C_m и микрообъем $V_{m, МД}$ должны совпадать. Для более грубой сетки $V_{m, МД}$ будет существенно меньше ячейки C_m .

После определения микрообъема $V_{m, МД}$ производится расчет количества частиц каждого сорта $\bar{N}_{l, m}$, находящихся в нем, а также определяется суммарный импульс \bar{P}_m и полная энергия \bar{E}_m , заключенные в данном объеме:

$$\begin{aligned} \bar{N}_{l,m} &= \frac{\hat{\rho}_{l,m} V_{m,\text{мол}}}{m_l}, \quad \bar{\mathbf{P}}_{l,m} = \hat{\rho}_{l,m} V_{m,\text{мол}} \hat{\mathbf{u}}_l, \quad \bar{E}_{l,m} = \hat{E}_{l,m} V_{m,\text{мол}}, \quad l=1,\dots,N; \\ \bar{N}_m &= \sum_l \bar{N}_{l,m}, \quad \bar{\mathbf{P}}_m = \sum_l \bar{\mathbf{P}}_{l,m}, \quad \bar{E}_m = \sum_l \bar{E}_{l,m}, \quad m=1,\dots,M. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Здесь $\hat{E}_{l,m}$ – плотности энергии, вычисленные при решении КГД уравнений. На основе формул (2.3) формируется микросистема газовых частиц по правилам, описанным выше. Фактически в последующих МД расчетах "замораживаются" величины $V_{m,\text{МД}}$, $\bar{N}_{l,m}$, $\bar{\mathbf{P}}_m$ и \bar{E}_m . Сами МД расчеты проводятся так же, как в алгоритмах класса 1. Результатом МД вычислений являются параметры обменных членов \mathbf{u}_l^* и E_l^* .

В алгоритмах класса 4 часть ячеек постоянно закреплена за молекулярными расчетами, производящимися параллельно с КГД вычислениями на каждом шаге по времени по формулам (1.78), и не рассматривается на макроскопическом уровне. Как правило, это граничные ячейки сетки Ω_h . В некоторых случаях к ним добавляются внутренние ячейки Ω_h , где происходят сильно неравновесные процессы, характеризующиеся большими градиентами газодинамических параметров. Обозначим множество всех таких ячеек Ω_B (КГД уравнения в ячейках множества Ω_B не используются). Остальные ячейки сетки обозначим Ω_V (в ячейках этого множества реализуются и КГД, и МД вычисления). В итоге сетка Ω_h представляется в виде объединения двух непересекающихся между собой множеств: $\Omega_h = \Omega_V \cup \Omega_B$.

Переход к МД вычислениям в ячейках множества Ω_B осуществляется один раз в начале общего расчета по формулам, аналогичным (2.3). При этом сначала ячейки из множества Ω_B объединяются в связные домены $\Omega_B^{(k)}$ ($k=1,\dots,K_B$). Число доменов $\Omega_B^{(k)}$ обычно невелико и совпадает с количеством несвязанных друг с другом внешних и внутренних границ расчетной области Ω .

Формирование каждого домена $\Omega_B^{(k)}$ начинается с какой-либо конкретной ячейки и происходит до тех пор, пока не найдутся все ее соседи 1-го круга, 2-го и т.д., принадлежащие множеству Ω_B . В каждом построенном домене $\Omega_B^{(k)}$ система микрочастиц является единой. В этом случае конкретный микрообъем $V_{m,\text{МД}}$ входит в какой-либо домен $\Omega_B^{(k)}$ и отдельно не рассматривается.

В ячейках из множества Ω_V переход к МД вычислениям осуществляется на каждом шаге по времени и аналогичен соответствующему переходу в алгоритмах класса 3.

Вторая процедура связана с получением корректирующих значений основных газодинамических параметров. Она осуществляется на основе уравнений (1.49):

$$\hat{\rho}_{l,m} \hat{u}_{l,k,m}^{**} = \hat{\rho}_{l,m} \hat{u}_{l,k,m}^* + \Delta t v_{l',m} \hat{\rho}_{l,m} (\hat{u}_{l,k,m} - \hat{u}_{l,k,m}^*), \quad k = 1, \dots, K,$$

$$\hat{E}_{l,m}^{**} = \hat{E}_{l,m}^* + \Delta t v_{l',m} (\hat{E}_{l,m} - \hat{E}_{l,m}^*), \quad m = 1, \dots, M, \quad l, l' = 1, \dots, N.$$

В алгоритмах класса 2 и 3 формулы (1.49) используются во всех ячейках сетки, в алгоритмах класса 4 – только в ячейках множества Ω_V .

Также в рамках второй процедуры определяются все параметры смеси. В алгоритмах класса 2 такие вычисления используют либо формулы (1.33)-(1.43), либо соответствующие значения из БДМР. В алгоритмах класса 3 и 4 большая часть этих формул заменяется результатами МД вычислений. Фактически в этом случае формулы (1.49) реализуются внутри МД блока.

Описанные выше алгоритмы классов 2-4 можно теперь компактно сформулировать в терминах алгоритма класса 4. Иллюстрация этого объединенного алгоритма показана на рисунке 2.1.

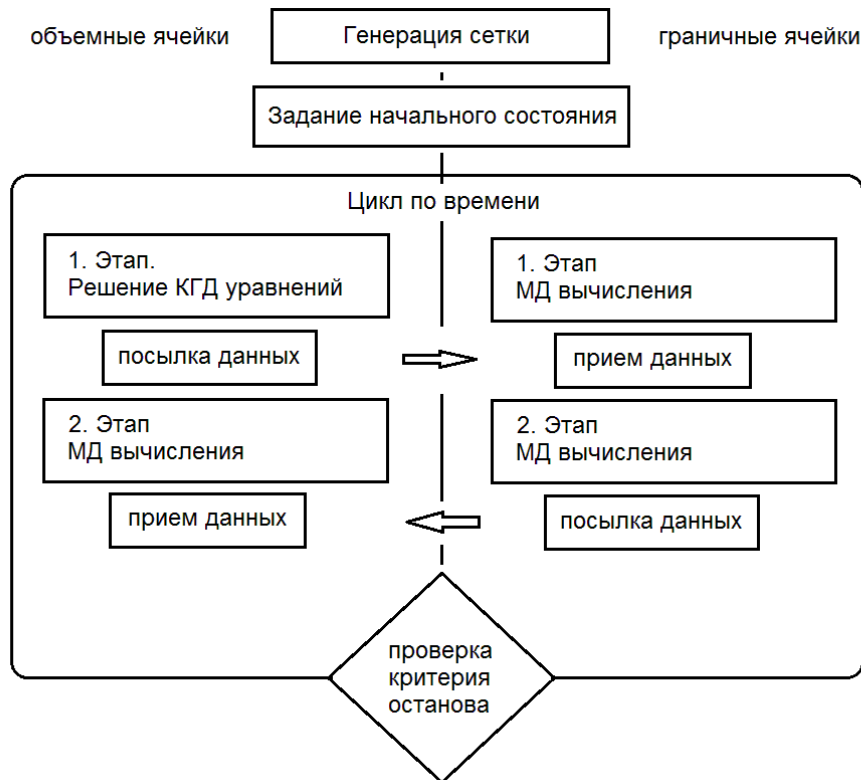


Рисунок 2.1 – Иллюстрация общего алгоритма классов 2-4

Перед началом вычислений строится сетка Ω_h , разбивающаяся на множества объемных ячеек Ω_V и граничных ячеек Ω_B .

Затем на построенной сетке Ω_h в ячейках множества Ω_V задается равновесное состояние макросистемы (1.44); в ячейках множества Ω_B задается равновесное состояние микросистемы, соответствующее по макропараметрам условиям (1.44).

Далее на каждом шаге по времени осуществляется следующая общая двухэтапная процедура. В ячейках множества Ω_V проводится двухуровневый расчет, предполагающий сначала решение КГД уравнений, а затем коррекцию полученных газодинамических характеристик с помощью МД вычислений. В ячейках множества Ω_B осуществляется одноуровневый двухэтапный расчет на основе уравнений молекулярной динамики.

На первом этапе в ячейках множества Ω_V по КГД уравнениям рассчитываются газодинамические переменные, которые передаются в блок МД для расчета обменных членов и пересчета параметров граничных условий на границах множеств Ω_V и Ω_B . В ячейках множества Ω_B производятся расчеты эволюции граничных микросистем, данные которых будут затем формировать параметры условий на границах множеств Ω_B и Ω_V .

На втором этапе в ячейках множеств Ω_V и Ω_B производятся либо аппроксимационные вычисления по данным из БДМР, либо прямые МД расчеты, которые позволяют получить все газодинамические переменные на макроуровне с учетом всех физических процессов, в том числе газодинамические параметры компонент смеси и смеси в целом.

Завершается шаг вычислений проверкой критерия останова, который состоит в определении относительных временных производных от массовой плотности и плотности энергии компонент смеси:

$$\frac{1}{\Delta t} \max_{l=1, \dots, N} \left(\left\| \frac{\hat{\rho}_l^* - \rho_l}{\rho_l} \right\|_{C(\Omega_h)}, \left\| \frac{\hat{E}_l^* - E_l}{E_l} \right\|_{C(\Omega_h)} \right) \leq \varepsilon_l. \quad (2.4)$$

Здесь ε_l – заданная точность из диапазона значений $5 \cdot 10^{-3} \div 10^{-6}$, $\|\cdot\|_{C(\Omega_h)}$ – равномерная сеточная норма.

2.2 Параллельная реализация

В данном пункте приводятся детали параллельной реализации описанных алгоритмов, представлены варианты вычислительных систем и замечания по использованию технологий параллельного программирования в рамках поставленных задач. Описаны проблемы разбиения вычислительной области и распределения вычислений между микро- и макроуровнями задачи для алгоритмов разных классов. Также проведена оценка необходимых для вычисления ресурсов и приведены примеры тестирования алгоритмов и их параллельных реализаций для разного типа задач.

2.2.1 Необходимые вычислительные системы и технологии параллельных реализаций

Параллельная реализация алгоритмов указанных классов 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) [93, 102, 156]. Распараллеливание алгоритмов производится на принципах геометрического параллелизма и деления областей и использует алгоритмы динамической балансировки загрузки вычислителей [22, 35, 220].

Основной газодинамический расчет производится по дискретным КГД уравнениям на сетке, распределенной между узлами кластера с помощью техники "domain decomposition" [340]. Внутри узла КГД вычисления распределяются между потоками ЦПУ. Подсеточные МД вычисления возлагаются на ВПУ или ГПУ при их наличии, в противном случае они также реализуются на ЦПУ. Распараллеливание КГД вычислений между потоками ЦПУ также производится геометрическим способом.

Распараллеливание МД вычислений производится путем разбиения всего множества частиц, относящихся к одной ячейке сетки, на группы одинаковой мощности (подробно эти вопросы обсуждаются в п. 2.2.2). В итоге каждый блок трэдов ВПУ или ГПУ обрабатывает одну или несколько молекулярных групп, относящихся к одному или нескольким узлам сетки. В случае отсутствия ВПУ и ГПУ все вычисления возлагаются на ЦПУ. Программная реализация алгоритмов класса 1 выполнена по гибридной технологии [130], использующей MPI [100], OpenMP [101] и CUDA [13, 214].

В зависимости от имеющихся аппаратных средств при реализации алгоритмов указанных выше классов предлагается использовать разные типы параллельных технологий.

В независимых МД расчетах по алгоритмам класса 1 для уточнения макропараметров среды и накопления базы данных по свойствам веществ предлагается использовать:

1) стандарты MPI и OpenMP (далее – MPI + OpenMP):

MPI позволяет реализовать распределение МД вычислений между узлами МВС, а также между отдельными ЦПУ и/или ВПУ внутри узлов;

OpenMP позволяет реализовать распределение МД вычислений внутри одного ЦПУ (ВПУ) между ядрами и потоками (трэдами).

2) стандарты MPI и CUDA (далее – MPI + CUDA):

MPI позволяет реализовать распределение МД вычислений между ЦПУ и ГПУ всех узлов таким образом, чтобы на один MPI процесс приходилось несколько ядер (трэдов) ЦПУ и одно ГПУ, находящиеся физически на одном узле МВС;

CUDA реализует распределение МД вычислений внутри ГПУ по мультипроцессорам и блокам трэдов (варпам).

В независимых КГД расчетах в рамках алгоритмов класса 2 при фиксированных материальных уравнениях предлагается использовать:

1) MPI + OpenMP:

MPI позволяет реализовать распределение КГД вычислений между узлами МВС, а также между отдельными ЦПУ и/или ВПУ внутри узлов;

OpenMP позволяет реализовать распределение КГД вычислений внутри одного ЦПУ (ВПУ) между ядрами и потоками (трэдами).

2) стандарты MPI, OpenMP и CUDA (далее – MPI + OpenMP + CUDA):

MPI позволяет реализовать распределение КГД вычислений между ЦПУ, ВПУ и ГПУ всех узлов таким образом, чтобы на один MPI процесс приходилось несколько ядер (трэдов) ЦПУ, одно ВПУ и/или одно ГПУ, находящиеся физически на одном узле МВС;

OpenMP позволяет реализовать распределение КГД вычислений внутри ЦПУ/ВПУ по трэдам;

CUDA позволяет реализовать распределение КГД вычислений внутри ГПУ по мультипроцессорам и блокам трэдов (варпам).

В чередующихся КГД и МД расчетах по алгоритмам класса 3 и 4 предлагается использовать:

1) MPI + OpenMP:

MPI позволяет реализовать распределение КГД и МД вычислений между узлами МВС, а также между отдельными ЦПУ и/или ВПУ внутри узлов;

OpenMP реализует распределение КГД и МД вычислений внутри одного ЦПУ (ВПУ) между ядрами и потоками (трэдами).

2) MPI + OpenMP + CUDA:

MPI позволяет реализовать распределение КГД и МД вычислений между ЦПУ, ВПУ и ГПУ всех узлов таким образом, чтобы на один MPI процесс приходилось несколько ядер (трэдов) ЦПУ, одно ВПУ и/или одно ГПУ, находящиеся физически на одном узле МВС;

OpenMP позволяет реализовать распределение КГД и МД вычислений внутри ЦПУ/ВПУ по трэдам;

CUDA позволяет реализовать распределение МД вычислений внутри ГПУ по мультипроцессорам и блокам трэдов (варпам).

Как видим, в последнем случае ГПУ отводится роль чисто молекулярного симулятора. ЦПУ и ВПУ могут выполнять и КГД, и МД вычисления.

2.2.2 Параллельная реализация алгоритмов класса 1 на высокопроизводительных вычислителях с центральными многоядерными и векторными процессорами

Для параллельной реализации разработанного численного подхода использовались принципы геометрического и функционального параллелизма. По принципам геометрического параллелизма расчетная область в целом разбивается на локальные домены примерно одинаковой вычислительной 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 (см. рисунок 2.2), поскольку расчетная область является трехмерным параллелепипедом. Каждый расчетный домен попадает на свой вычислитель, в качестве которого может выступать: 1) узел кластера или суперкомпьютера, 2) ЦПУ или ВПУ узла, 3) трэд ЦПУ или ВПУ, 4) ГПУ узла.

Распределение доменов по вычислителям реализовано с помощью библиотеки MPI и простых формул отображения:

$$p = p_x p_y p_z; \quad m \rightarrow (m_x, m_y, m_z), \quad m_\alpha = 0, \dots, p_\alpha, \quad \alpha = x, y, z;$$

$$m = p_x p_y m_z + p_x m_y + m_x; \quad m_z = \left[\frac{m}{p_x p_y} \right], \quad m_y = \left[\frac{m - p_x p_y m_z}{p_x} \right], \quad m_x = m \bmod p_x.$$

Здесь p – общее число вычислителей, представляющее собой произведение чисел p_x , p_y , и p_z ; m – номер вычислителя, (m_x, m_y, m_z) – координаты m -го в трехмерной решетке. Величины

p_x , p_y , и p_z подбираются кратными размерам параллелепипеда N_x , N_y , и N_z , выраженным в элементарных боксах.

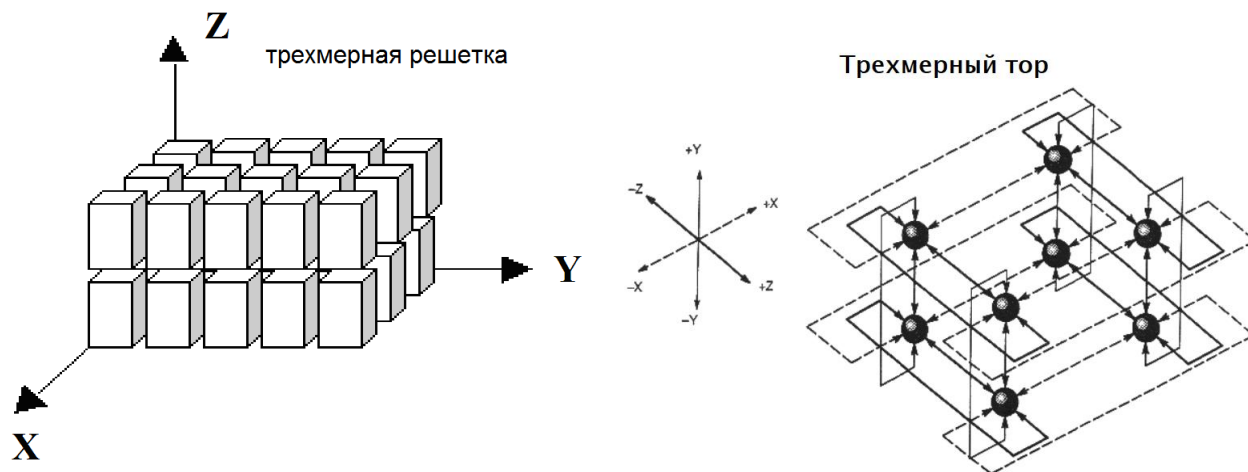


Рисунок 2.2 – Топология разбиения расчетной области (слева) и топология обменов (справа)

Внутри расчетного домена оказывается некоторое количество элементарных боксов, сгруппированных в трехмерную подрешетку с размерами $N_x^{(m)} = N_x p_x^{-1}$, $N_y^{(m)} = N_y p_y^{-1}$, и $N_z^{(m)} = N_z p_z^{-1}$. Такая структура используется для дальнейшего распределения вычислений по трэдам центральных или векторных процессоров (ЦПУ и ВПУ), 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.

При перемещении частиц из одного бокса вычислителя m в другой бокс вычислителя m' в зависимости от типа граничных условий используется либо топология трехмерная решетка, либо топология трехмерный тор (см. рисунок 2.2). Первый случай соответствует, например, условиям отражения на внешних границах параллелепипеда. Второй случай соответствует использованию периодических граничных условий.

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, а также расчет стартовых сил.

В рамках цикла по времени реализована следующая последовательность действий.

Сначала вычисляются новые значения координат. Далее производится их коррекция с помощью 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 объему 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 используется прием локализации памяти, при котором процессору при интенсивных вычислениях не требуется переключаться между далеко отстоящими друг от друга страницами оперативной памяти.

Также в предлагаемом алгоритме удалось избежать использования дорогостоящей процедуры определения принадлежности различных частиц к конкретным боксам, проводящейся в других кодах на каждом шаге по времени. Еще один плюс от использования боксовой структуры заключается в том, что пересылка частиц между узлами многопроцессорной вычислительной системы, связанная с движением последних по расчетной области, интегрируется как с реализацией ПГУ, так и с обменами информацией между смежными по кубической решетке MPI-процессами. Последнее достигается использованием теневого (виртуального) боксов с фиктивными частицами, взаимодействие с которыми основных частиц должно учитываться в потенциальной энергии системы.

2.2.3 Разбиение вычислительной области и распределение вычислений между КГД и МД блоками для алгоритмов классов 2-4

Основные проблемы параллельной реализации алгоритмов классов 2-4 связаны с оптимальным разбиением расчетной области по узлам кластера (суперкомпьютера). Для алгоритмов классов 3 и 4 также необходимо использовать оптимальное распределение вычислительной нагрузки между КГД и МД блоками.

В случае использования декартовой сетки при распараллеливании используется решетка вычислителей размерности, соответствующей пространственной размерности задачи. В случае использования нерегулярной гибридной сетки проблема оптимального разбиения ее графа [270, 329] может быть решена с помощью алгоритмов разбиения области, реализованных, например, в пакетах METIS [249], ParMETIS [250] или [28, 29], способных строить разбиения сетки ячеек в соответствии с заданными критериями. В каждом случае в качестве критерия используется примерное равенство вычислительной нагрузки на каждом из узлов кластера при минимальном количестве связей узлов между ними. В итоге, решение задачи об оптимальном разбиении расчетной области сводится к априорной оценке вычислительной нагрузки, приходящейся на одну ячейку сетки. Эта оценка не всегда может быть получена точно. Например, в случае реализации алгоритмов класса 2, она определяется исходной геометрией задачи. В случае реализации алгоритмов классов 3 и 4 эта оценка зависит еще от соотношения между вычислительными нагрузками в КГД и МД блоках.

Проблема распределения вычислений между КГД и МД блоками состоит в следующем. В отличие от задач газовой динамики в макромасштабах, в изучаемой ситуации расчетная сетка тесно связана с характерными размерами течения на микроуровне (то есть 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.

Рассмотрим пример решения проблемы баланса между КГД и МД вычислениями для задачи 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 (элементарных ячеек). Будем считать, что в указанной расчетной области построена равномерная декартова сетка, состоящая из кубических ячеек. Стартовая сетка $\Omega^{(0)}$ имела $M_V^{(0)} = 10 \times 10 \times 100 = 10000$ 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 $\Omega^{(k)}$ имеет $M_V^{(k)} = M_V^{(0)} 8^k$ ячеек с линейными размерами $a^{(k)} = a^{(0)} / 2^k$. 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 следующими рассуждениями. В каждой ячейке $C_m^{(0)}$ стартовой сетки $\Omega^{(0)}$ (имеющей объем $|V_m^{(0)}| = 1$ мкм³) при нормальных условиях ($p = 101325$ Па, $T = 273.15$ К) содержится число молекул азота равное $N_{gas}^{(V,0)} = N_A |V_m^{(0)}| V_\mu^{-1} \approx 2.6867811 \times 10^7$ (здесь $N_A \approx 6.022140857 \times 10^{23}$ моль⁻¹ – число Авогадро, $V_\mu \approx 22.413962 \times 10^{15}$ мкм³ 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. таблицу 2.1).

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, рассматривать алгоритмы класса 2, где для определения параметров состояния и кинетических коэффициентов газов в объеме можно использовать базу данных по

свойствам веществ, рассчитанную заранее с помощью МД вычислений), то предпочтительной будет сетка $\Omega^{(3)}$. Если же необходимы прямые МД вычисления (алгоритмы класса 3), 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:

$$\bar{N}_{l,i,j,k} = \sum_{i',j',k'=-m,\dots,+m} \frac{\rho_{l,i+i',j+j',k+k'}}{m_l} |V_{i+i',j+j',k+k'}|, \quad |\bar{V}_{i,j,k}| = \sum_{i',j',k'=-m,\dots,+m} |V_{i+i',j+j',k+k'}|, \quad l = a, b, \quad (2.5)$$

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

Таблица 2.1 – Параметры сеток и количество молекул азота в каждой ячейке при нормальных условиях

k	$M_V^{(k)}$	$a^{(k)}$, мкм	$ V_m^{(k)} $, мкм ³	$N_{gas}^{(V,k)}$ в ячейке	$ V_\lambda $, мкм ³	$N_{gas}^{(V_\lambda,k)}$ в объеме V_λ
0	10 000	1	1	26 867 811	0.0001315	3534
1	80 000	0.5	0.125	3 358 476	0.0001315	3534
2	640 000	0.25	0.015625	419 810	0.0001315	3534
3	5 120 000	0.125	0.001953125	52 476	0.0001315	3534
4	40 960 000	0.0625	0.000244140625	6 560	0.0001315	3534

Для сокращения вычислительной нагрузки МД блока можно искусственно понизить 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 он используется для определения числа частиц и последующих МД расчетов. Для примера в таблице 2.1 был выбран предельно допустимый объем V_λ со стороной $a_\lambda = \frac{\lambda}{2} \approx 50.85216 \text{ нм}$ (при $\lambda \approx 101.70432 \text{ нм}$ – средняя длина свободного пробега молекул). 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.

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 т.д.). Если необходимо проанализировать подобные явления в металле, следует оценить и использовать в расчетах некоторую глубину, характерную для рассматриваемых процессов.

В рассматриваемом случае наиболее существенным процессом является нагрев поверхности металла. Глубина тепловых возмущений зависит от температуры металла в его толще и от температуры газа. Предполагается, что подповерхностный слой металла (находящийся ниже тех 12 кристаллов никеля, которые составляют покрытие канала) находится при температуре 273.15 К и термостатируется. Также 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 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 $|V_{metal}^{(k)}| = a^{(k)} \times a^{(k)} \times h_{metal}$ и определить количество атомов металла $N_{metal}^{(S,k)}$, взаимодействующих непосредственно или опосредованно с молекулами газа. Также следует учесть, что вследствие эффекта адсорбции молекул газа вблизи поверхности металла, концентрация газа может там сильно возрасти (см. Главу 5). Поэтому в граничных ячейках можно ввести свою величину $N_{gas}^{(S,k)}$, которая будет существенно больше, чем $N_{gas}^{(V,k)}$.

Приведенный выше пример взаимодействия азота с никелем можно дополнить следующими данными. В параграфе 3.3.2 Главы 3 показано, что при нормальных условиях ребро кристалла никеля составляет примерно $a_{metal} \approx 0.35314$ нм. Глубину проникновения возмущений, вызванных механическим и тепловым воздействием газа на металл, выберем равной толщине покрытия канала (12 кристаллов). Тогда при н.у. эта величина равна $h_{metal} \approx 4.23768$ нм. Количество кристаллов никеля в 1 мкм^2 покрытия выбранной толщины составляет примерно $2832 \times 2832 \times 12$, то есть 96242688. Количество атомов никеля в этом объеме составляет более 401 млн. (см. таблицу 2.2). Количество молекул азота $N_{gas}^{(S,k)}$ в граничной ячейке будем считать превышающим соответствующее количество в объеме в 6 раз (примерно такая величина была получена для н.у. при расчетах, описанных в Главе 5). Исходя из этих данных, можно определить количества частиц в граничных ячейках для сеток $\Omega^{(k)}$ (см. таблицу 2.2). Анализ приведенных данных показывает, что в этом случае наиболее приемлемой по вычислительной емкости оказывается сетка $\Omega^{(4)}$.

Таблица 2.2 – Параметры сеток, количество молекул азота и количество атомов никеля в объеме, примыкающем к граничным ячейкам сетки

k	$M_S^{(k)}$	$ V_{metal}^{(k)} $, мкм^3	$N_{gas}^{(S,k)}$ в граничной ячейке	$N_{metal}^{(S,k)}$ в граничной ячейке
0	4 000	4.23768	161 206 866	401 011 200
1	16 000	1.05942	20 150 856	100 252 800
2	64 000	0.264855	2 518 860	25 063 200
3	256 000	0.06621375	314 856	6 265 800
4	1 024 000	0.0165534375	39 360	1 566 450

2.2.4 Оценка необходимых вычислительных ресурсов

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

Во-первых, оценим оперативную память, использующуюся в КГД блоке. Для этого учтем, что в случае, например, 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 компонент и смеси в целом на текущем шаге по времени, 10 массивов относятся к основным макропараметрам течения (плотность, полная энергия, трехмерный вектор скорости) для двух компонент 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:

$$S_{QGD}^{(k)} = \frac{36 \cdot M_V^{(k)}}{N_p} \cdot \frac{8}{1024^2} \text{ (Мб)}. \quad (2.6)$$

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:

$$S_{MD}^{(V,k)} = N_{gas}^{(V,k)} \cdot N_f \cdot N_c^{(V,k)} \cdot \frac{8}{1024^2} \text{ (Мб)}, \quad (2.7)$$

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 трэдов, доступных

каждому MPI-процессу, то есть $N_c^{(V,k)} = N_t n$ ($n = 1, 2, \dots, \frac{M_V^{(k)} - M_S^{(k)}}{N_p N_t}$). Заметим, что если на

границе с металлом не предполагается учитывать атомную структуру поверхности, то формула (2.7) 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. В каждом боксе находится определенное число частиц металла и/или газа. Необходимая для реализации данного расчета память может быть оценена по формуле:

$$S_{MD}^{(S,k)} = \left[\left(N_{gas}^{(S,k)} \cdot (N_f + 1) + N_{metal}^{(S,k)} \cdot (N_f + 3) \right) \cdot 8 + N_b \cdot 80 \right] \cdot N_c^{(S,k)} \cdot \frac{1}{1024^2} \quad (\text{Мб}), \quad (2.8)$$

где $N_{gas}^{(S,k)}$ – количество частиц газа в граничной ячейке, $N_{metal}^{(S,k)}$ – 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),

$N_b = \frac{(a^{(k)})^3 + (a^{(k)})^2 h_{metal}}{(3a_{metal})^3}$ – 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 таблице 2.3 приведены результаты оценки минимально необходимой оперативной памяти, обеспечивающей расчеты на конфигурации в 512 MPI-процессов с учетом атомной структуры металлической поверхности канала. Они также подтверждают, 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. Тесты показали, что оптимальными

по скорости вычислений количествами потоков N_i 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).

Таблица 2.3 – Минимальная оперативная память, требующаяся одному MPI-процессу для расчетов задачи с учетом атомного строения поверхности канала, при $N_p = 512$, $N_i = 1$ и

$$N_c^{(V,k)} = 1, N_c^{(S,k)} = 1$$

k	$\frac{M_V^{(k)}}{N_p}$	$\frac{M_V^{(k)} - M_S^{(k)}}{N_p}$	$\frac{M_S^{(k)}}{\sqrt[3]{N_p^2}}$	N_b	$S_{QGD}^{(k)}$, Мб	Минимальное значение $S_{MD}^{(V,k)}$, Мб	Минимальное значение $S_{MD}^{(S,k)}$, Мб
0	20	12	63	844 562 920	0.006	5534.599	190656.719
1	156	125	250	106 015 850	0.043	691.825	35339.100
2	1 250	1 125	1 000	133 63 352	0.343	86.478	7294.141
3	10 000	9 500	500	1 698 262	2.747	10.810	1630.955
4	80 000	78 000	2 000	219 244	21.973	1.351	383.667

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 использовать такое количество потоков. Выходом из ситуации является использование другого алгоритма (не использующего структуру боксов), однако он оказывается более медленным.

Еще одним ресурсом является дисковая память. Очевидно, что ее количество связано с общим объемом оперативной памяти, используемой в расчете, и 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.

2.3 Тестирование

В данном параграфе представлены результаты тестирования разработанных параллельных программ, реализующих алгоритмы указанных классов. Для расчетов были использованы вычислительные системы, указанные в таблице 2.4. В ней приняты следующие обозначения. Типы систем: "К" и "СК" – кластер и суперкомпьютер; сетевые интерфейсы: "GE", "IB" и "А" – соответственно Gygabit Ethernet, FDR InfiniBand, Ангара (отечественный аналог FDR InfiniBand). Для ЦПУ и ВПУ в скобках указано число ядер на процессор и число тредов на ядро. Для ГПУ в скобках указано число ядер CUDA.

Таблица 2.4 – Использованные вычислительные системы

№	Наименование	Тип, сеть	Принадлежность	Число узлов	Число и тип ЦПУ на узле	Число и тип ВПУ на узле	Число и тип ГПУ на узле
1	ИММ6	К, GE	ИПМ РАН	12	2 x Intel Xeon X5650 v0 2.67GHz (6x2)	-	-
2	IBM P8	К, GE	ЛИТ ОИЯИ	3	2 x Power E870 3.69GHz (10x8)	-	2 x nVidia Tesla K40m (2880)
3	HP G8	К, GE	ФУПМ МФТИ	2	2 x Intel Xeon E5-2695 v2 2.40GHz (12x2)	-	8 x nVidia Tesla K40m (2880)
4	К1	К, А	ОАО "НИЦЭВТ"	36	2 x Intel Xeon E5-2630 0 2.30GHz (6x2)	-	-
5	К-100	СК, IB	ИПМ РАН	64	2 x Intel Xeon X5670 2.93GHz	-	3 x nVidia Tesla C2050 (448)
6	МВС-10П	СК, IB	МСЦ РАН	207	2 x Intel Xeon E5-2690 v0 2.90GHz (8x2)	2 x Intel Xeon Phi 7110X 1.1GHz (61x4)	-

2.3.1 Тестирование параллельных реализаций на основе алгоритма класса 1

В данном параграфе приведены данные результатов расчетов, которые проводились на системе МВС-10П. Этот суперкомпьютер имеет гибридную архитектуру, которая характеризуется тем, что на каждом ее узле имеется два центральных процессора (ЦПУ) и два векторных процессора (ВПУ). Параметры этих вычислителей даны в таблице 2.4.

Расчеты на эффективность распараллеливания проводились для трех вариантов систем: чистый никель (тестовая микросистема содержала пластинку никеля с размерами 288x288x24 ребер; число атомов никеля составляет 8128512; решетка из боксов имеет размеры 96x96x8), чистый азот (тестовая микросистема содержала куб с размерами 288x288x288 ребер никеля, что в длинах свободного пробега молекул составляет $(1.143\lambda)^3$, если взять температуру 273.15 К (см. ниже); число молекул азота составляет 28256; решетка из боксов имеет размеры 96x96x96), азот-никель (тестовая микросистема содержала предыдущие две; общее число молекул составляет 8131368; решетка из боксов имеет размеры 96x96x104).

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

Проведенные тесты показали, что для первой микросистемы вследствие ее однородности и большого объема ускорение в случае использования ЦПУ и ВПУ долгое время ведет себя линейно. Для этого из всех трехмерных MPI-решеток следует выбирать такие, которые подобны решетке боксов 96x96x8. При этом мы использовали в основном двумерные MPI-решетки 1x1x1, 2x2x1, 4x4x1, 8x8x1, 16x16x1, 32x32x2, поскольку решетка боксов по третьему направлению невелика. Эффективность распараллеливания при такой стратегии сохранялась для ЦПУ на уровне 95% на конфигурациях вплоть до 1024 MPI-процессов, но затем резко падала (ввиду естественного ограничения: число боксов, обрабатываемых по каждому координатному направлению должно быть не менее 3). Для расчетов на ВПУ ситуация была

хуже вследствие того, что каждый поток (трэд) ВПУ почти в 15 раз менее производительный, чем поток ЦПУ (см. ниже).

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

Для третьей микросистемы была принята двухмерная декомпозиция области (по первым двум координатам) с целью обеспечения однородности расчета столба газ-металл каждым MPI-процессом. При этом каждый MPI-процесс при распараллеливании по трэдам производил балансировку загрузки с учетом мощности (количества частиц) в непустых боксах.

Результаты расчетов приведены в таблице 2.5. В таблице приняты следующие обозначения. NP_x – число MPI-процессов по направлению x , NP_y – число MPI-процессов по направлению y ; $NCPU$ – количество использующихся ЦПУ, NP_{CPU} – количество MPI-процессов, исполняемых на одном ЦПУ, NT_{CPU} – число трэдов ЦПУ, приходящееся на один MPI-процесс; $NVPU$ – количество использующихся ВПУ, NP_{VPU} – количество MPI-процессов, исполняемых на одном ВПУ, NT_{VPU} – число трэдов ВПУ, приходящееся на один MPI-процесс; $Time$ – время расчета в секундах; Acc – ускорение; Eff – эффективность в процентах. Общее число MPI-процессов NP определяется выражением $NCPU * NP_{CPU} + NVPU * NP_{VPU}$ и совпадает с величиной $NP_x * NP_y$. Общее число расчетных потоков (трэдов) для каждого типа устройств выбиралось максимально возможным: 16 на ЦПУ, 240 на ВПУ, – чтобы задействовать все доступное оборудование. В качестве эталонного выбран расчет на одном ЦПУ, время которого минимально (7-ая строка таблицы). Ускорение и эффективность определяются по эталонному расчету с учетом задействованного оборудования.

Обсудим результаты, приведенные в таблице 2.5. Во-первых, расчеты на одном ЦПУ и на одном ВПУ при максимальной загрузке оборудования показывают, что вместо распараллеливания по трэдам, лучше использовать разбиение по MPI-процессам. Этот прием позволяет уменьшить используемую MPI-процессом локальную память и соответственно увеличить скорость доступа к ней. Именно поэтому эталонный расчет на 16-ти MPI-процессах выигрывает у всех остальных. Также можно отметить, что этот же прием работает на ВПУ, но само ВПУ проигрывает ЦПУ. Последнее объясняется тем, что в молекулярно-динамических вычислениях векторизация не дает того эффекта, который присущ линейным алгебраическим преобразованиям. Причина замедления вычислений на ВПУ кроется в том, что основной вычислительной сложностью в МД-алгоритме обладает функция расчета нелинейных и неоднородных по структуре потенциалов взаимодействия частиц (и градиентов от них). В итоге, в расчетах на ВПУ мы подбирали такое число трэдов, которое обеспечивает

минимальное время решения задачи. В результате оказалось, что при данных размерах решетки боксов оптимальным является конфигурация, использующая 15 трэдов ВПУ.

Таблица 2.5 – Данные расчетов одного тестового шага по времени для третьей микросистемы

NPx	NPy	NCPU	NPCPU	NTCPU	NVPU	NPVPU	NTVPU	Time, s	Acc	Eff
1 ЦПУ/ВПУ										
1	1	1	1	16	0	0	0	172.305	-	-
2	1	1	2	8	0	0	0	48.113	-	-
2	2	1	4	4	0	0	0	41.981	-	-
4	2	1	8	2	0	0	0	39.071	-	-
4	4	1	16	1	0	0	0	38.691	1.000	100.00
1	1	0	0	0	1	1	240	302.120	-	-
2	1	0	0	0	1	2	120	216.673	-	-
2	2	0	0	0	1	4	60	134.189	-	-
4	2	0	0	0	1	8	30	73.520	-	-
4	4	0	0	0	1	16	15	63.532	-	-
1 узел (2 ЦПУ, 2 ВПУ)										
8	4	2	16	1	0	0	0	30.469	1.270	63.492
8	4	0	0	0	2	16	15	32.828	1.176	58.930
8	8	2	16	1	2	16	15	16.689	2.318	57.959
2 узла (4 ЦПУ, 4 ВПУ)										
8	8	4	16	1	0	0	0	15.311	2.522	63.052
8	8	0	0	0	4	16	15	16.514	2.343	58.573
16	8	4	16	1	4	16	15	8.822	4.386	54.822
4 узла (8 ЦПУ, 8 ВПУ)										
8	8	8	8	2	0	0	0	7.642	5.063	63.287
16	8	0	0	0	8	16	15	8.696	4.449	55.616
16	16	8	16	1	8	16	15	4.521	8.558	53.488
8 узлов (16 ЦПУ, 16 ВПУ)										
16	8	16	8	2	0	0	0	3.841	10.073	62.957
16	16	0	0	0	16	16	15	4.768	8.115	50.717
32	16	16	16	1	16	16	15	2.770	13.968	43.650
16 узлов (32 ЦПУ, 32 ВПУ)										
16	16	32	8	2	0	0	0	1.936	19.985	62.453
32	16	0	0	0	32	16	15	2.903	13.328	41.650
32	32	32	16	1	32	16	15	2.255	17.158	26.809

Во-вторых, расчеты на всем оборудовании одного узла, в том числе, по гибридной схеме ЦПУ+ВПУ, показали, что в целом, расчеты на ЦПУ эффективнее, чем расчеты на ВПУ, однако гибридная схема позволяет ускорить вычисления почти в 2 раза. Общая эффективность распараллеливания при этом составляет 58%. По этому поводу можно отметить, что используемый алгоритм расчетов безусловно неидеален и имеет последовательные участки кода, связанные с балансировкой загрузки и вычислением макропараметров моделируемого

процесса и подготовкой ввода-вывода данных (заметим, что сам ввод-вывод не учитывается в приведенных временах расчета). Распараллеливание этих фрагментов кода может не только не дать дополнительного ускорения, но и ухудшить ситуацию.

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

В дополнение к сказанному в таблице 2.6 дано сравнение полученных результатов с вычислениями на ГПУ, проведенными на суперкомпьютере К-100. В таблице использованы обозначения: ND – число устройств ВПУ или ГПУ, NPD и NTD – число процессов и потоков на этих устройствах. Как видно из таблицы, в рамках одного узла относительно старая модель ГПУ Tesla C2050 обгоняет более новые ЦПУ и ВПУ. Однако на большем числе узлов это преимущество постепенно нивелируется. Причиной тому является передача данных с одного ГПУ на другое через память ЦПУ и далее через сеть.

Таблица 2.6 – Данные расчетов одного тестового шага по времени для третьей микросистемы

NPx	NPy	NCPU	NPCPU	NTCPU	ND	NPD	NTD	Time, s	Speed-up
1 CPU									
4	4	1	16	1	0	0	0	38.691	1.000
1 VPU									
4	4	0	0	0	1	16	15	63.532	-
1 GPU									
1	1	0	0	0	1	1	488	7.944	4.870
2	1	0	0	0	1	2	244	6.382	6.063
2	2	0	0	0	1	4	122	7.541	5.131
4	2	0	0	0	1	8	61	7.817	4.950
1 узел (2 CPU, 2 VPU, 2 CPU + 2 VPU)									
8	4	2	16	1	0	0	0	30.469	1.270
8	4	0	0	0	2	16	15	32.828	1.176
8	8	2	16	1	2	16	15	16.689	2.318
1 узел (2 CPU или 2 GPU)									
8	4	2	16	1	0	0	0	30.469	1.270
4	1	0	0	0	2	2	244	3.925	9.858

2.3.2 Тестирование параллельных реализаций на основе смешанных алгоритмов

Для апробации разработанного подхода в целом было проведено несколько тестов. Один из них был проведен для относительно небольшой микросистемы. Для этого в качестве расчетной области был выбран цилиндрический микроканал прямоугольного сечения с размерами $15 \times 15 \times 90$ мкм³ и квадратным отверстием со стороной 3 мкм для диффузора сопла. Расчетная область представлена на рисунке 2.4. Канал заканчивается выходом в свободное пространство, однако в нем течение уже не рассчитывается. В качестве газа рассматривался чистый азот. В качестве материала стенок рассматривался никель.

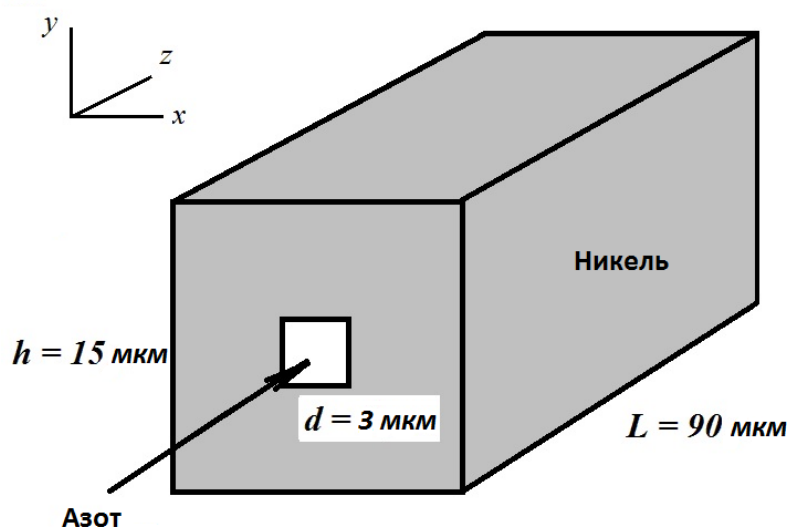


Рисунок 2.3 – Модельная расчетная область

В указанной расчетной области была построена последовательность равномерных декартовых сеток $\Omega^{(k)}$ со стороной 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, $M_V^{(0)} = 20250$ ячеек, $M_S^{(0)} = 5850$, $M_C^{(0)} = 5616$.

В указанной расчетной области была построена равномерная декартова сетка, состоящая из кубических ячеек. Стартовая сетка $\Omega^{(0)}$ имела $M_V^{(0)} = 15 \times 15 \times 90 = 20250$ ячеек с линейным размером $a^{(0)} = 1 \mu m$. Последующие сетки получались 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 $|V_m^{(k)}| = (a^{(k)})^3 \mu m^3$. Количество ячеек, примыкающих

к боковой поверхности расчетной области, без учета входного и выходного отверстий для сетки $\Omega^{(k)}$ составляет $M_S^{(k)} = 5400 \times 4^k + 216 \times 2^k$. Параметры сеток для $k = 0, 1, 2, 3, 4$ и количество частиц азота в ячейках приведены в таблице 2.7.

Таблица 2.7 – Параметры сеток и количество частиц азота в каждой ячейке

k	$M_V^{(k)}$	$M_S^{(k)}$	$a^{(k)}, \mu m$	$ V_m^{(k)} , \mu m^3$	$N_{part}^{(k)}$
0	20 250	5 616	1	1	26 867 811
1	162 000	22 032	0.5	0.125	3 358 476
2	1 296 000	87 264	0.25	0.015625	419 810
3	10 368 000	347 328	0.125	0.001953125	52 476
4	82 944 000	1 385 856	0.0625	0.000244140625	6 560

В соответствии с указанными в пункте 2.2.3 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 азота и $1566450 \cdot N_F$ 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, МВС-10П, кластерах К1 и IBM P8 (см. таблицу 2.4). 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 корректно. 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 существенным 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.

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 рисунке 2.4 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 $\Omega^{(4)}$.

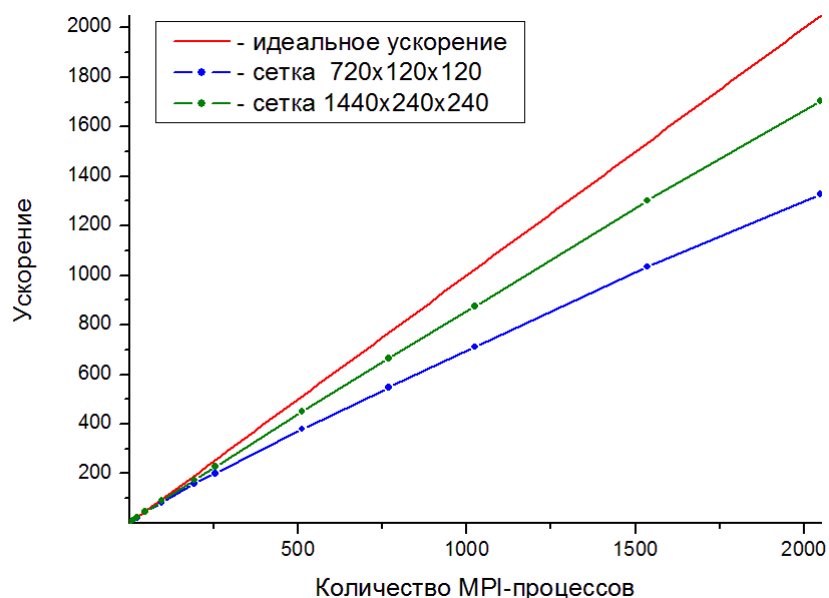


Рисунок 2.4 – Ускорения параллельных вычислений для сеток $\Omega^{(3)}$ и $\Omega^{(4)}$, полученные при использовании в расчетах только КГД блока и готовых данных, получаемых из базы данных молекулярных расчетов

Если анализировать эффективность параллельных расчетов задачи в целом, когда используются КГД и МД блоки попеременно, то можно отметить следующее. Вычислительная емкость МД блока превышает емкость КГД блока, эффективность распараллеливания определяется МД расчетами. Это хорошо видно на рисунке 2.5. 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.

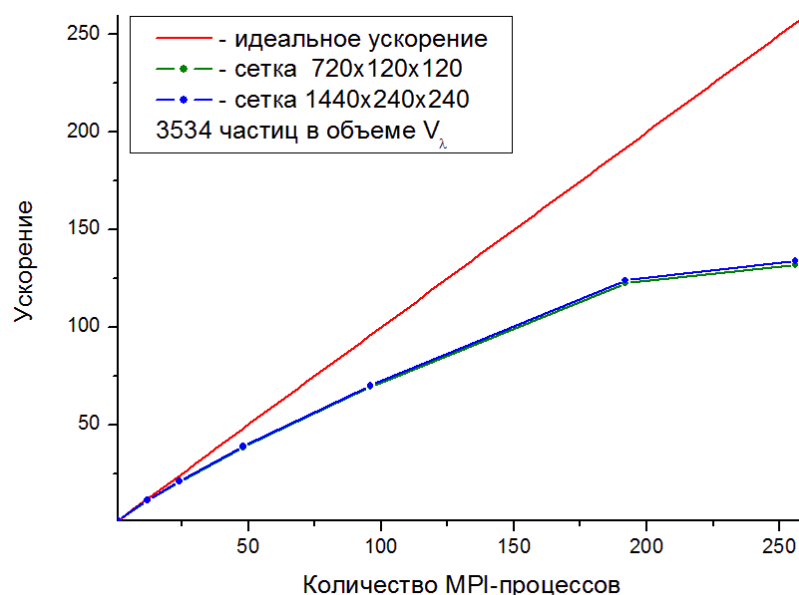


Рисунок 2.5 – Ускорения параллельных вычислений для сеток $\Omega^{(3)}$ и $\Omega^{(4)}$, полученные при использовании в расчетах КГД и МД блоков без учета граничных взаимодействий. Вычисления проведены на МВС-10П на ЦПУ и ВПУ. На каждый MPI-процесс приходится одно ЦПУ для расчетов КГД блока и одно ВПУ для расчетов МД блока

В-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.

2.4 Выводы по главе

- Разработано 4 класса численных алгоритмов, реализующие предлагаемый многомасштабный двухуровневый подход.
- Разработаны параллельные реализации указанных численных алгоритмов, использующие гибридные технологии параллельных вычислений.
- На основе разработанных параллельных алгоритмов создано 4 программы для моделирования газодинамических течений в микроканалах:
 1. GIMM_APP_MD_GPU_Gas_Metal (Подрыга В.О.)
 2. GIMM_APP_MD_CPU_Gas_Metal (Подрыга В.О., Поляков С.В.)
 3. GIMM_APP_QGD_CPU (Кудряшова Т.А., Подрыга В.О., Поляков С.В.)
 4. GIMM_APP_QGD_MD_CPU (Кудряшова Т.А., Подрыга В.О., Поляков С.В.)
- Проведены тестирование и анализ работоспособности и эффективности разработанных параллельных программ на кластерах и суперкомпьютерах с гибридной архитектурой. Результаты проведенных исследований подтвердили эффективность разработанного численного подхода в целом и робастность предложенных программных реализаций.

Глава 3

Молекулярно-динамические расчеты равновесных состояний отдельных компонент микросистемы

Для моделирования реальных технических систем и физических процессов, происходящих в них, необходимо задать начальные условия, которые на микроуровне определяются равновесным или квазиравновесным термодинамическим состоянием системы. С этой целью можно либо сначала привести исследуемую систему к термодинамическому равновесию и потом моделировать интересующие процессы, либо использовать заранее созданную базу данных начальных равновесных распределений координат и скоростей и сразу моделировать искомую задачу. В равновесной системе распределение частиц по выбранному объему становится равномерным, распределение скоростей частиц по модулю приближается к максвелловскому, а направления скоростей соответствуют заданному среднему импульсу газовой среды. Также одними из признаков релаксации системы являются выходы значений средних температуры и давления на постоянные значения.

В данной главе представлены вычислительные эксперименты по установлению термодинамического равновесия в системах, находящихся в разных агрегатных состояниях, разной геометрии и при разных условиях по температуре и давлению. В главе приведен пример расчета равновесия в системе атомов аргона с целью накопления базы данных для разных температур и давлений. Рассмотрены задачи релаксации микросистем молекул азота и атомов никеля при заданных итоговых значениях температуры и импульса. Также представлены расчеты моделирования термодинамического равновесия систем твердых частиц в геометрии пластины без условий на распределения давлений по образцу и с условиями ненапряженности пластины на примере систем частиц алюминия и никеля. Для всех примеров моделируемая система движется по уравнениям (1.51), интегрирование которых осуществляется с помощью схемы Верле в скоростной форме (1.78). В постановках меняются граничные и начальные условия, потенциалы взаимодействия, внешние воздействия и связанные с ними изменения в численном алгоритме.

3.1 Термодинамическое равновесие системы и расчет его состояний на примере системы атомов аргона

Целью данного параграфа было исследование процесса установления термодинамического равновесия системы. Равновесные координаты и скорости систем для разных полученных температур и давлений могут быть использованы для накопления базы данных. Исследовалась эволюция основных макропараметров системы. Исследование рассмотрено на примере системе частиц аргона [105, 305].

Рассматривается система $2N$ дифференциальных уравнений (1.51) для одного типа частиц:

$$m \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{F}_i, \quad \mathbf{v}_i = \frac{d\mathbf{r}_i}{dt}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (3.1)$$

где i – номер частицы, N – полное число частиц, m – масса частицы, $\mathbf{r}_i = (r_{x,i}, r_{y,i}, r_{z,i})$ и $\mathbf{v}_i = (v_{x,i}, v_{y,i}, v_{z,i})$ – радиус-вектор и вектор скорости i -ой частицы, $\mathbf{F}_i = (F_{x,i}, F_{y,i}, F_{z,i})$ – суммарная сила, действующая на данную частицу. Масса атома аргона соответствует $m = 66.34 \cdot 10^{-27}$ кг.

Силы, действующие на частицы, определяются через потенциал взаимодействия по формуле (1.52). В качестве потенциала взаимодействия выбран потенциал Леннарда-Джонса в форме со сглаживанием (1.69):

$$\varphi(r_{ij}) = \begin{cases} 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] - \varphi_{cut}, & r_{ij} \leq r_c \\ 0, & r_{ij} > r_c \end{cases}$$

Параметры потенциала для аргона [171, 173, 325] приняты как $\varepsilon = 1.65 \cdot 10^{-21}$ Дж, $\sigma = 0.34$ нм, $r_c = 0.85$ нм и функция сглаживания $\varphi_{cut} \approx -0.0269 \cdot 10^{-21}$ Дж.

Потенциальная энергия определяется как:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N u_i = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \varphi(r_{ij}), \quad (3.2)$$

где u_i – потенциальная энергия, приходящаяся на частицу i .

Рассматривается динамика системы атомов аргона в объемной геометрии. Задача решается в области конечного объема расчетной ячейки с периодическими условиями на всех границах (1.58). Расчетная ячейка представляет собой куб со сторонами $Lx = Ly = Lz = k_x \cdot rcr$. Частицы распределены по кубу равномерно, общее число частиц соответствует $N = k_x k_y k_z = (k_x)^3$.

Начальные скорости частиц задавались с одинаковыми значениями по абсолютной величине $|\mathbf{v}^0|$ и случайно распределенными по направлениям. Компоненты вектора скорости $\mathbf{v}^0 = (v_x^0, v_y^0, v_z^0)$ одной частицы получаются следующим образом:

$$v_x^0 = |\mathbf{v}^0| \cos \theta_1 \cos \theta_2, \quad v_y^0 = |\mathbf{v}^0| \cos \theta_1 \sin \theta_2, \quad v_z^0 = |\mathbf{v}^0| \sin \theta_1, \quad (3.3)$$

где случайная переменная θ_1 равномерно распределена в $\left[-\frac{\pi}{2}; \frac{\pi}{2}\right)$, а случайная переменная θ_2 – в интервале $[0; 2\pi)$.

Система (3.1) решается с помощью численной схемы Верле в скоростной форме (1.78). Алгоритм выглядит следующим образом:

- 1) Расчет новых координат частиц \mathbf{r}_i^{n+1} для момента времени, где n – номер шага.
- 2) Проверка граничных условий (1.58).
- 3) Вычисление парциальной U_i^{n+1} и полной потенциальных энергий системы U^{n+1} (3.2)
- 4) Определение сил \mathbf{F}_i^{n+1} (1.52), действующих на частицы.
- 5) Расчет новых скоростей частиц \mathbf{v}_i^{n+1} .
- 6) Вычисление кинетических энергий системы E_K^{n+1} и E_T^{n+1} по формуле (1.53).
- 7) Расчет температуры системы на данном шаге T^{n+1} по (1.55).
- 8) Вычисление полной энергии системы E^{n+1} (1.54).

Этапы 1) – 8) повторяются на каждом шаге по времени.

Далее представлено два расчета, выполненных для одинакового объема ячейки, соответствующего стороне куба $Lx = 10$ нм. Ребро элементарной ячейки rcr определяется в зависимости от числа частиц. Абсолютная величина скоростей частиц соответствовала $|\mathbf{v}^0| = 50$ м/с. Шаг интегрирования был равен $\Delta t = 0.007$ пс.

Расчеты проводились для количества частиц $N = 10^3$ и $N = 28^3$, что соответствует $k_x = 10$ и $k_x = 28$. Общее число шагов $NSTEP = 60000$ и $NSTEP = 90000$ шагов.

Результаты вычислений для $N = 10^3$ частиц в случаях $NSTEP = 60000$ и $NSTEP = 90000$ шагов представлены на рисунках 3.1 и 3.2 в виде распределений по квадратам скоростей. Как можно увидеть, система стремится к равновесному состоянию уже на момент времени $NSTEP = 60000$ шагов, но меньше флуктуаций на момент времени $NSTEP = 90000$ шагов, что говорит о более сильной релаксации системы.

Для дополнительного подтверждения установления термодинамического равновесия на момент времени $NSTEP = 90000$ шагов также было получено значение температуры, усредненное по ансамблям, которое вышло на константу: $T = 62$ К. Выход температуры на постоянное значение подтверждает равновесное состояние системы.

Результаты расчетов для $N = 28^3$ частиц показали, что система термолизировалась уже на момент времени $NSTEP = 60000$ шагов. Распределение по квадратам скоростей представлено на рисунке 3.3, данный профиль соответствует профилю максвелловского распределения. Термализация подтверждается выходом температуры на постоянное значение: $T = 87.2$ К.

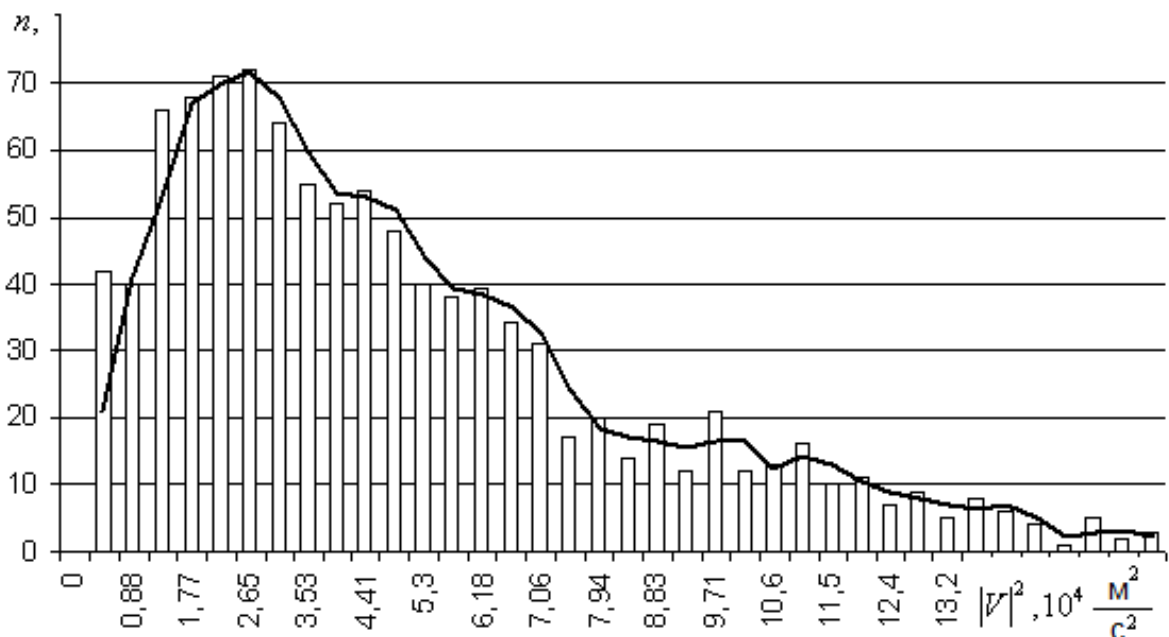


Рисунок 3.1 – Распределение частиц по квадратам скоростей для количества частиц $N = 10^3$ на момент времени $NSTEP = 60000$ шагов. Контурная черная линия соответствует линии тренда для данного распределения

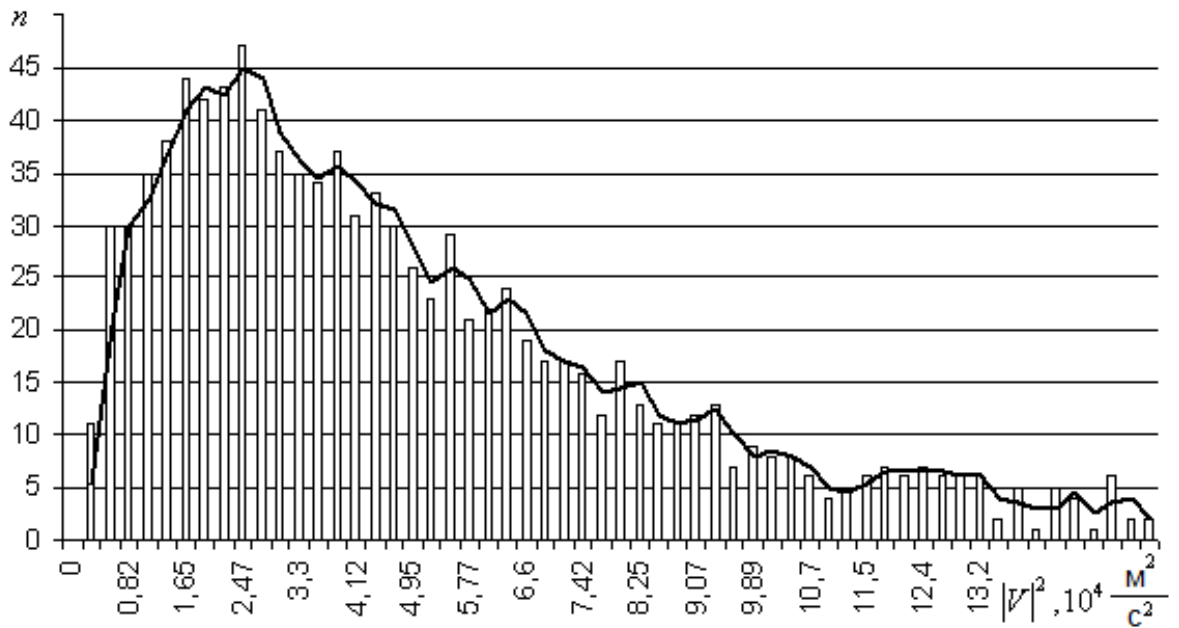


Рисунок 3.2 – Распределение частиц по квадратам скоростей для количества частиц $N = 10^3$ на момент времени $NSTEP = 90000$ шагов. Контурная черная линия соответствует линии тренда для данного распределения

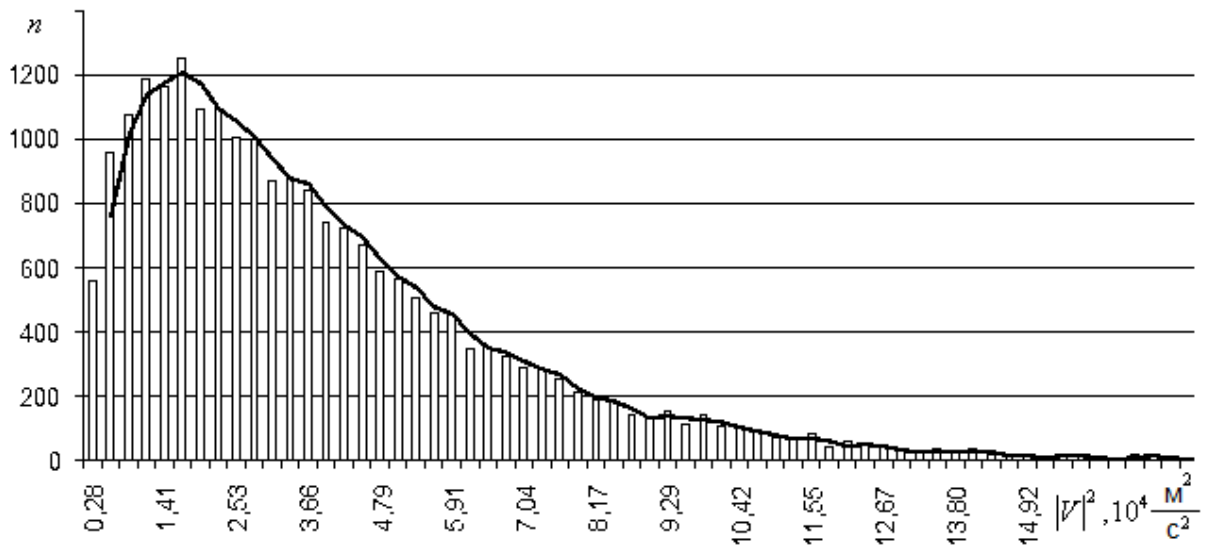


Рисунок 3.3 – Распределение частиц по квадратам скоростей для количества частиц $N = 28^3$ на момент времени $NSTEP = 60000$ шагов. Контурная черная линия соответствует линии тренда для данного распределения

Таким образом, термодинамическое равновесие в системе установилось. Анализ расчетов показывает, что для большей плотности газа время релаксации является меньшим, что

согласуется с физическими процессами в газовых системах. При фиксированном объеме, чем больше частиц в системе, тем быстрее такая система приходит к состоянию термодинамического равновесия.

3.2 Термодинамическое равновесие системы при желаемой температуре

Целью данного параграфа было исследование процесса установления термодинамического равновесия систем при нагреве или охлаждении образца до заданной температуры. Рассматривалось применение алгоритмов термостата Берендсена и термостата Ланжевена, определялись оптимальные параметры применяемых алгоритмов. Исследовалась эволюция основных макропараметров систем.

3.2.1 Расчет равновесного состояния газа при заданном значении температуры на примере системы молекул азота

В данном параграфе исследуется получение равновесного состояния системы частиц газа при определенной температуре. Решается система дифференциальных уравнений для одного типа частиц (3.1). В качестве системы частиц рассматривается система молекул азота. Масса молекулы азота составляет $m = 46.52 \cdot 10^{-27}$ кг.

Силы, действующие на частицы, определяются через потенциал взаимодействия по формуле (1.52). В качестве потенциала взаимодействия выбран потенциал Ми (1.70), который с учетом сглаживания и обрезания действия имеет вид:

$$\varphi(r_{ij}) = \begin{cases} \varepsilon \frac{n}{n-6} \left(\frac{n}{6}\right)^{\frac{6}{n-6}} \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^n - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^6 \right] - \varphi_{cut}, & r_{ij} \leq r_c \\ 0, & r_{ij} > r_c \end{cases} \quad (3.4)$$

$$\varphi_{cut} = \varepsilon \frac{n}{n-6} \left(\frac{n}{6}\right)^{\frac{6}{n-6}} \left[\left(\frac{\sigma}{r_c}\right)^n - \left(\frac{\sigma}{r_c}\right)^6 \right].$$

Трехпараметричность потенциала дает более точное соответствие экспериментальным данным. Параметры потенциала берутся из работы [167], где их значения представлены для азота, водорода и их смесей в разных пропорциях, что позволяет моделировать все перечисленные системы газов, используя лишь одну функцию взаимодействия. Для чистого

азота параметры принимают значения: $n = 11.5$, $\varepsilon = 1.35 \cdot 10^{-21}$ Дж, $\sigma = 0.3649$ нм, $r_c = 0.91$ нм и функция сглаживания $\varphi_{cut} \approx -0.0237 \cdot 10^{-21}$ Дж.

Потенциальная энергия всей системы определяется по формуле (3.2) как сумма парциальных потенциальных энергий на основе потенциала (3.4).

Моделируется динамика системы молекул азота, заключенных в микрообъем V . Расчетная ячейка представляет собой куб со сторонами $Lx = Ly = Lz$. На границах определены условия периодичности (1.58) с периодами Lx , Ly , Lz по осям x , y , z соответственно.

Начальное распределение координат частиц газа задается равномерным и согласуется с плотностью, соответствующей выбранным значениям температуры T_0 и давления p_0 . Общее количество частиц газа зависит от размеров микрообъема V , плотности газа ρ_0 и массы частиц m : $N = \rho \cdot V / m$, $V = Lx^3$.

Начальное распределение скоростей частиц по модулю задается согласно выбранной температуре T_0 по (1.59) и реализует максвелловское распределение. Суммарный импульс системы равен нулю.

Рассматривались стартовые значения, соответствующие нормальным условиям (когда давление газа составляет $p_0 = 1$ атм = 101325 Па, а температура газа равна $T_0 = 273.15$ К). Для этих условий большинство макропараметров газов, в том числе и азота, на примере которого проводился численный эксперимент, хорошо известно. В частности, плотность азота при этих условиях равна 1.24979 кг/м³.

Расчет проводился для $N = 27000$ молекул азота в соответствующем объеме V .

Для контроля над температурой использовался термостат Берендсена [196], основанный на корректировании текущего значения температуры по уравнению (1.62), что осуществлялось за счет использования коэффициента перемасштабирования скоростей λ (1.63). Наиболее оптимальное время взаимодействия с резервуаром составило $\tau_f = 1$ пс.

Система (3.1) решается с помощью схемы Верле в скоростной форме (1.78) по алгоритму (1.79) с учетом влияния термостата (1.80). Алгоритм в случае термостатирования выглядит следующим образом:

- 1) Расчет новых координат частиц \mathbf{r}_i^{n+1} для момента времени, где n – номер шага.
- 2) Проверка граничных условий.
- 3) Вычисление парциальной U_i^{n+1} и полной потенциальных энергий системы U^{n+1} .
- 4) Определение сил \mathbf{F}_i^{n+1} , действующих на частицы.

- 5) Расчет новых скоростей частиц \mathbf{v}_i^{n+1} .
- 6) Вычисление коэффициента λ и перемасштабирование скоростей.
- 7) Вычисление кинетических энергий системы E_K^{n+1} и E_T^{n+1} .
- 8) Расчеты температуры T^{n+1} и давления P^{n+1} системы на данном шаге.
- 9) Вычисление полной энергии системы E^{n+1} .

Этапы 1) – 9) повторяются на каждом шаге по времени.

Общий расчет проводился в 3 этапа. Сначала система приводилась в равновесие в условиях термостатирования с использованием термостата Берендсена. Время термостатирования составляло 8 нс. Затем также в условиях термостатирования в течение 4 нс проводился первый расчет средних макропараметров газа. Далее в условиях выключенного термостата в течение еще 4 нс проводился второй расчет средних макропараметров газа. Сравнение макропараметров газа в первом и втором расчетах подтвердило достижение газовой системой состояния газодинамического равновесия.

Подтверждением установления термодинамического равновесия является эволюция давления и температуры на завершающем этапе расчета, представленные на рисунке 3.4.

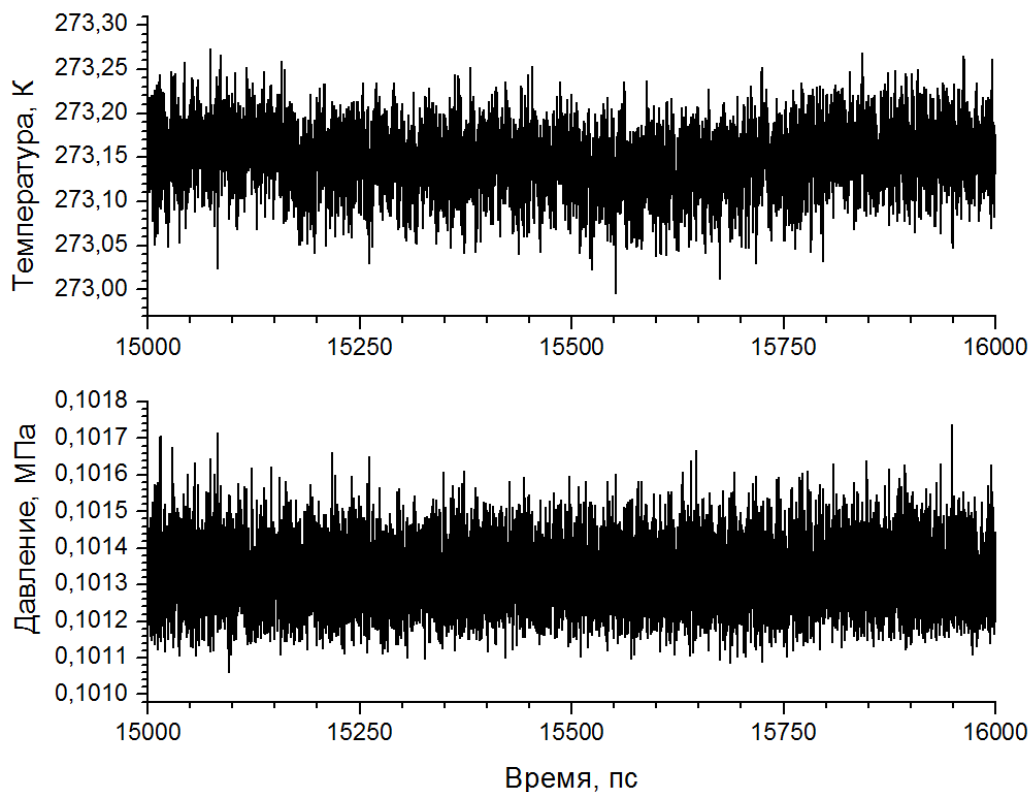


Рисунок 3.4 – Эволюция температуры и давления в газовой системе молекул азота при нормальных условиях

Как видно из рисунка колебания давления и температуры составляют не более 0.05% от средней величины. Также на рисунке можно убедиться, что система достигла необходимой температуры, а давление соответствует нормальным условиям ($p = 101325$ Па), что подтверждает корректность выбранных начальных параметров.

3.2.2 Расчет равновесного состояния металлического образца при заданном значении температуры на примере системы атомов никеля

В данном параграфе исследуется получение равновесного состояния твердого тела при определенной температуре. Для решения задачи рассматривается система уравнений (3.1) для одного типа частиц. В качестве твердого тела выбран образец, состоящий из атомов никеля. Масса атома никеля составляет $m = 97.46 \cdot 10^{-27}$ кг.

Силы, действующие на частицы, определяются через потенциал взаимодействия и внешнее воздействие на систему. В качестве потенциала взаимодействия используется ППА (1.67) в форме (1.74)–(1.76) [359]. Параметры потенциала для никеля представлены в Таблице 3.1. В рамках данной задачи радиус взаимодействия был взят $r_c = 0.9$ нм.

Таблица 3.1 – Параметры потенциала погруженного атома в форме [359] для никеля

r_e	f_e	ρ_e	ρ_s	α	β
2.488746	2.007018	27.562015	27.93041	8.383453	4.471175
A	B	κ	λ	ϖ_{n_0}	ϖ_{n_1}
0.429046	0.633531	0.443599	0.820658	-2.693513	-0.076445
ϖ_{n_2}	ϖ_{n_3}	ϖ_0	ϖ_1	ϖ_2	ϖ_3
0.241442	-2.735626	-2.7	0	0.26539	-0.152856
η	ϖ_e	m	n	ρ_n	ρ_0
0.469	-2.699486	20	20	$0.85 \rho_e$	$1.15 \rho_e$

Потенциальная энергия всей системы определяется по формуле (3.2) как сумма парциальных потенциальных энергий на основе указанного потенциала.

Начальные условия включают распределение координат частиц, которое для твердых материй имеет четкую структуру, и распределение скоростей, задаваемое согласно выбранной температуре моделирования.

Никель имеет кубическую ГЦК решетку с параметром (ребром элементарной ячейки) при нормальных условиях $rcr = 0.3524$ нм. Под длиной решетки при молекулярном моделировании подразумевается значение, связанное с используемым потенциалом взаимодействия, потому если нужны дополнительные свойства как ненапряженность системы, что соответствует нулевому давлению, ребро необходимо подбирать. В данном расчете это не имеет такого большого значения, потому в качестве длины элементарной ячейки взято это значение, и частицы распределены по области согласно ГЦК решетке с ребром $rcr = 0.3524$ нм.

Моделируется динамика частиц образца никеля в трехмерной геометрии. Расчетная ячейка представляет собой куб со сторонами $Lx = Ly = Lz$. На границах определены ПГУ с периодами Lx, Ly, Lz по осям x, y, z соответственно. Общее количество частиц составляет $N = 4k_x k_y k_z = 4(k_x)^3$, из которых $N = (k_x)^3$ частиц в узлах решетки и $N = 3(k_x)^3$ частиц в центрах граней кристаллической решетки.

Начальные векторы скоростей генерируются из распределения Максвелла, соответствующего необходимому значению температуры T , для задачи нахождения состояния релаксации системы за начальное можно взять значение, близкое к необходимому. Компоненты вектора скорости $\mathbf{v}^0 = (v_x^0, v_y^0, v_z^0)$ получаются с помощью преобразования Бокса-Мюллера по формулам (1.59). Далее проверяется равенство суммарного импульса нулю.

Для достижения желаемой температуры системы были рассмотрены термостат Берендсена [196] и термостат Ланжевена [173]. В результате рассмотрения разных значений параметра τ_t определилось оптимальное время взаимодействия с резервуаром в условиях поставленной задачи, благодаря которому система достигает равновесного состояния в более короткие периоды времени по сравнению с другими значениями данного параметра.

Расчеты проводились для различных размеров никелевой системы, измеряемых в длинах элементарных ячеек. Были выбраны следующие размеры системы: $k_x \times k_y \times k_z = 12 \times 12 \times 12$, $18 \times 18 \times 18$, $24 \times 24 \times 24$, что соответствует количеству частиц: $N = 6912, 23328, 55296$. Атомы никеля в начале расчетов располагались строго в узлах ГЦК решетки. Стартовые распределения скоростей вычислялись на основе распределения Максвелла при температуре $T_0 = 300$ К.

Температуры термостатирования также были равны 300 К. Вычисления производились для трех вариантов термостатирования: термостат Берендсена, термостат Ланжевена с заданным нулевым потоком, термостат Ланжевена с заданным ненулевым потоком. Времена взаимодействия атомов с тепловым резервуаром τ_t были равны: 1, 0.5, 0.25 и 0.125 пс. При использовании термостата Ланжевена скорость потока равнялась либо нулю, либо вектору $\mathbf{v}_f = (+1, -1, +0.5)$ нм/пс. Шаг интегрирования уравнений Ньютона составлял 0.002 пс.

Система (3.1) решается с помощью схемы Верле в скоростной форме (1.78) по численному алгоритму (1.79) с учетом влияния термостатов (1.80) и (1.82). Общий алгоритм в случае использования термостата Берендсена аналогичен алгоритму в параграфе 3.2.1. Общий алгоритм в случае термостата Ланжевена выглядит следующим образом:

- 1) Расчет скоростей $\mathbf{v}_i^{n+1/2}$ по силам прошлого шага \mathbf{F}_i^n
- 2) Расчет новых координат частиц \mathbf{r}_i^{n+1} .
- 3) Проверка граничных условий.
- 4) Вычисление парциальной U_i^{n+1} и полной потенциальных энергий системы U^{n+1} .
- 5) Определение сил \mathbf{F}_i^{n+1} , включающих силы взаимодействия и внешнего воздействия.
- 6) Расчет новых скоростей частиц \mathbf{v}_i^{n+1} .
- 7) Вычисление кинетических энергий системы E_K^{n+1} и E_T^{n+1} .
- 8) Расчеты температуры T^{n+1} и давления P^{n+1} системы на данном шаге.
- 9) Вычисление полной энергии системы E^{n+1} .

Этапы 1) – 9) повторяются на каждом шаге по времени.

Расчеты проводились вплоть до установления режима, соответствующего выходу средних величин на стационар.

На рисунках 3.5–3.7 показаны временные профили температуры для трех режимов термостатирования (термостат Берендсена, термостат Ланжевена с заданным нулевым потоком, термостат Ланжевена с заданным ненулевым потоком) и трех размеров никелевой системы ($12 \times 12 \times 12$, $18 \times 18 \times 18$ и $24 \times 24 \times 24$), измеряемых в элементарных ячейках, для времени взаимодействия с тепловым резервуаром $\tau_t = 1$ пс. Их анализ показывает, что все варианты термостатирования удерживают среднюю температуру системы на заданном уровне (300 К). Однако флуктуации температуры будут тем меньше, чем больше размеры моделируемой системы.

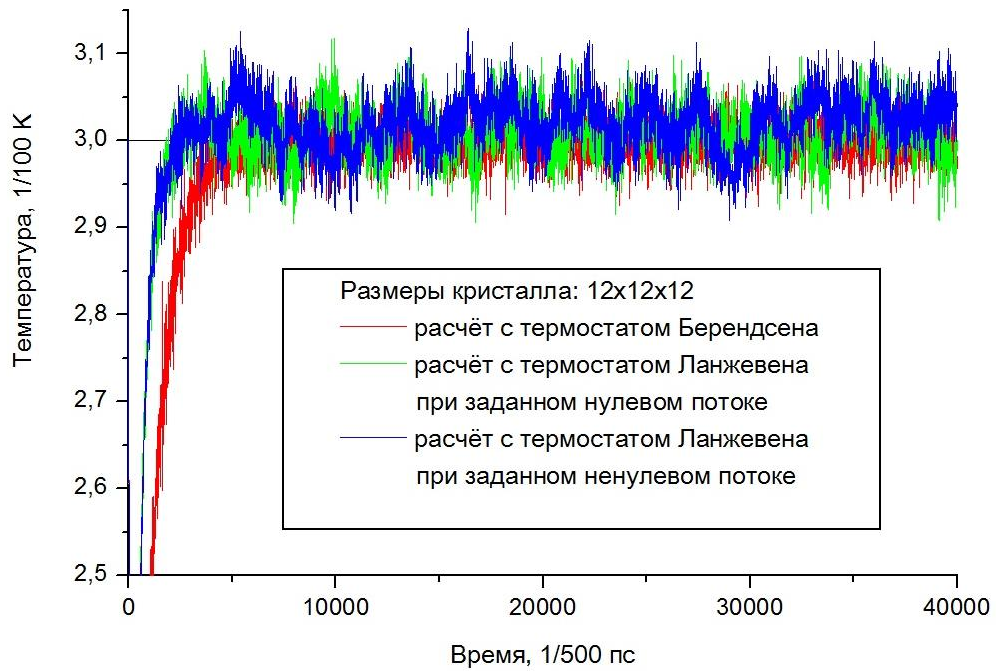


Рисунок 3.5 – Временные зависимости температуры для трех вариантов термостатирования (выделены цветом). Размеры системы – 12×12×12

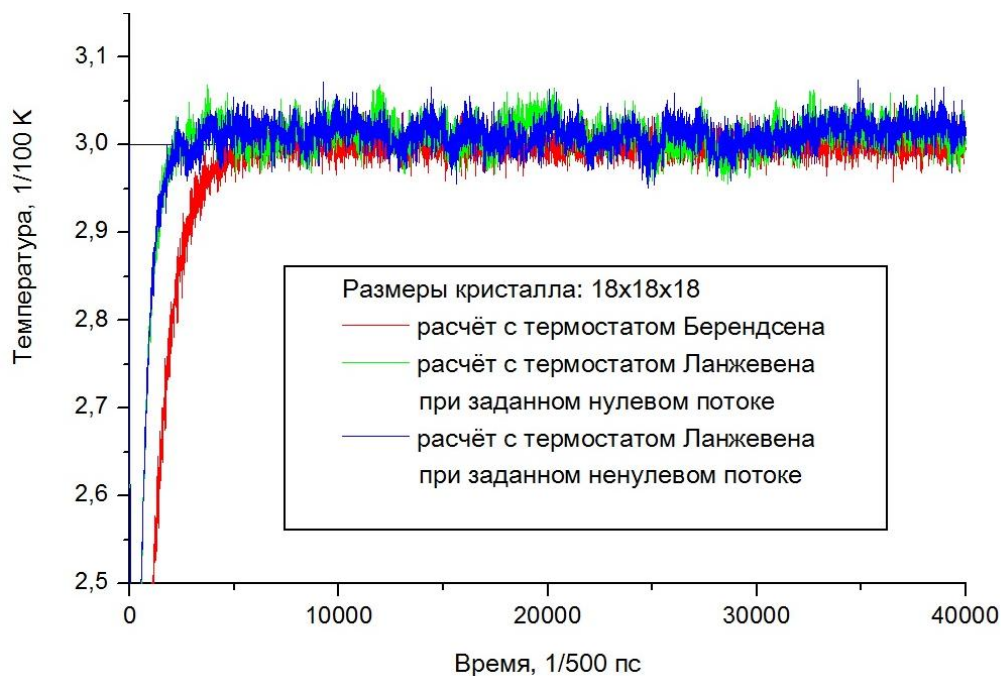


Рисунок 3.6 – Временные зависимости температуры для трех вариантов термостатирования (выделены цветом). Размеры системы – 18×18×18

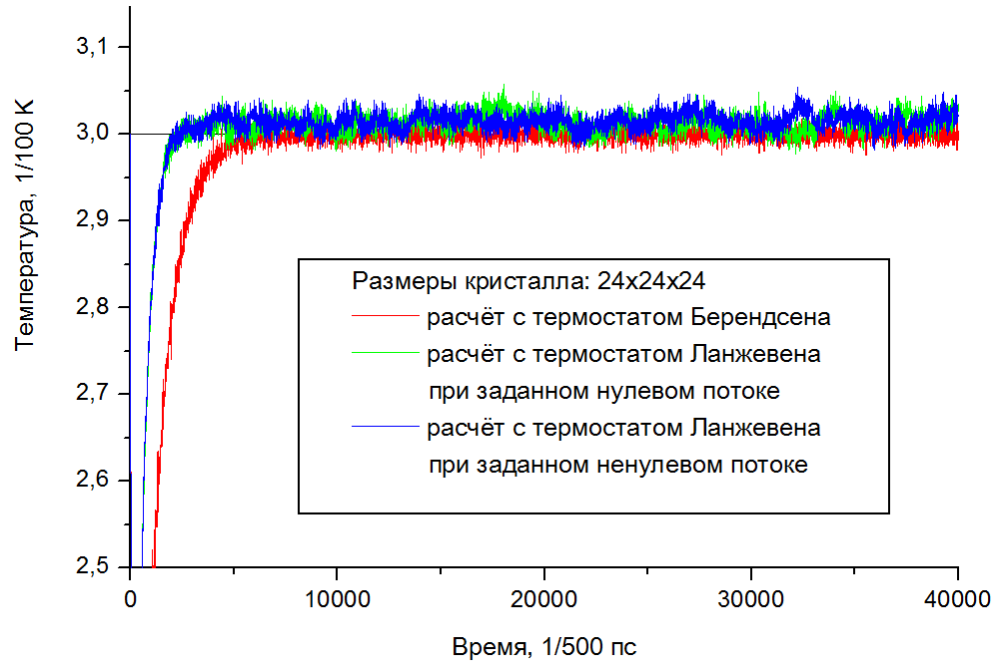


Рисунок 3.7 – Временные зависимости температуры для трех вариантов термостатирования (выделены цветом). Размеры системы – 24×24×24

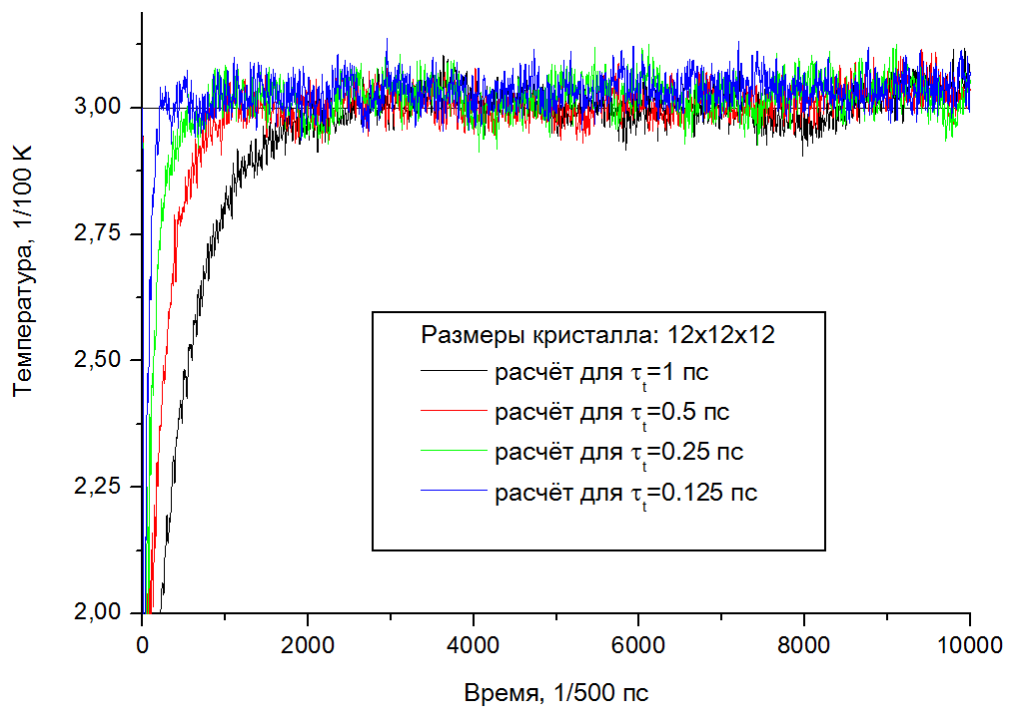


Рисунок 3.8 – Временные зависимости температуры для четырех значений времени взаимодействия с тепловым резервуаром $\tau_t = 1, 0.5, 0.25, 0.125$ (выделены цветом). Размеры системы – 12×12×12

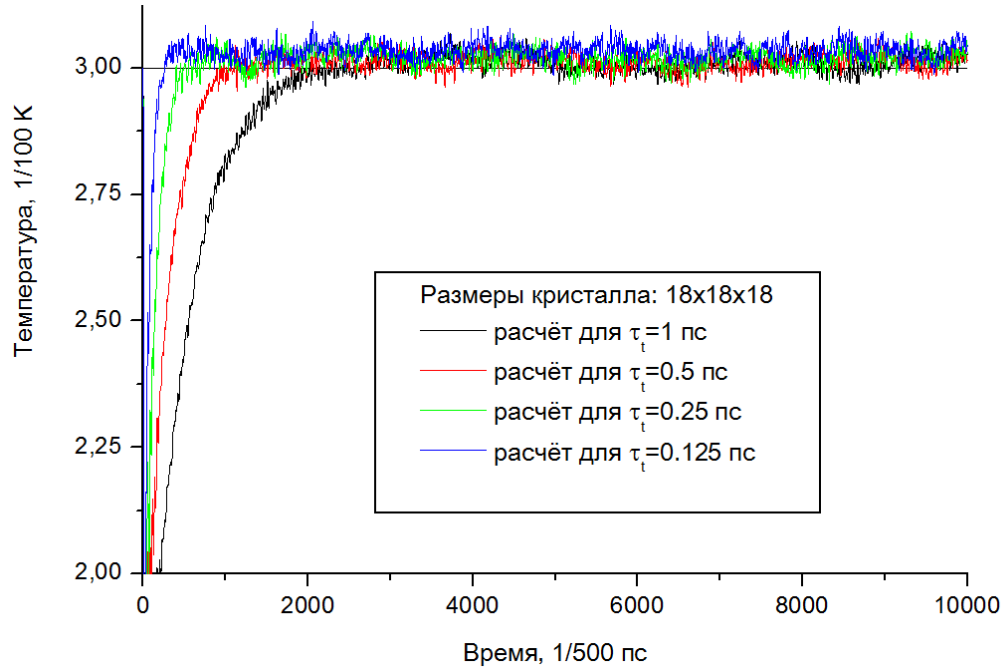


Рисунок 3.9 – Временные зависимости температуры для четырех значений времени взаимодействия с тепловым резервуаром $\tau_t = 1, 0.5, 0.25, 0.125$ (выделены цветом). Размеры системы – $18 \times 18 \times 18$

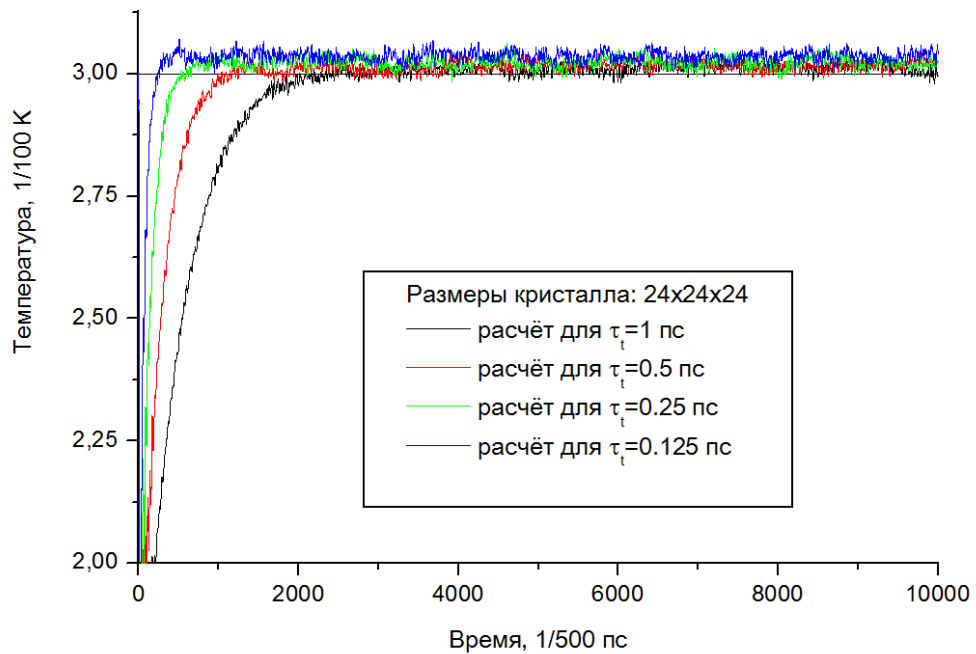


Рисунок 3.10 – Временные зависимости температуры для четырех значений времени взаимодействия с тепловым резервуаром $\tau_t = 1, 0.5, 0.25, 0.125$ (выделены цветом). Размеры системы – $24 \times 24 \times 24$

На рисунках 3.8–3.10 показаны временные профили температуры, полученные при использовании термостата Ланжевена с заданным нулевым потоком, для различных времен взаимодействия с тепловым резервуаром и размеров системы. Как показывают приведенные данные, уменьшение времени взаимодействия приводит к уменьшению времени установления термодинамического равновесия, однако и увеличивает величину флуктуаций. По этой причине оптимально остановиться на величине $\tau_t = 1$ пс. Наименьшие флуктуации температуры также соответствуют моделируемой системы большего размера.

На рисунке 3.11 показана гистограмма квадратов скоростей атомов никеля для системы размером $24 \times 24 \times 24$, полученная при использовании в расчетах термостата Ланжевена с заданным нулевым потоком и $\tau_t = 1$ пс на момент времени $t = 80$ пс, который близок к времени установления термодинамического равновесия. Диаграмма показывает хорошее совпадение численных результатов с аналитическим профилем распределения Максвелла.

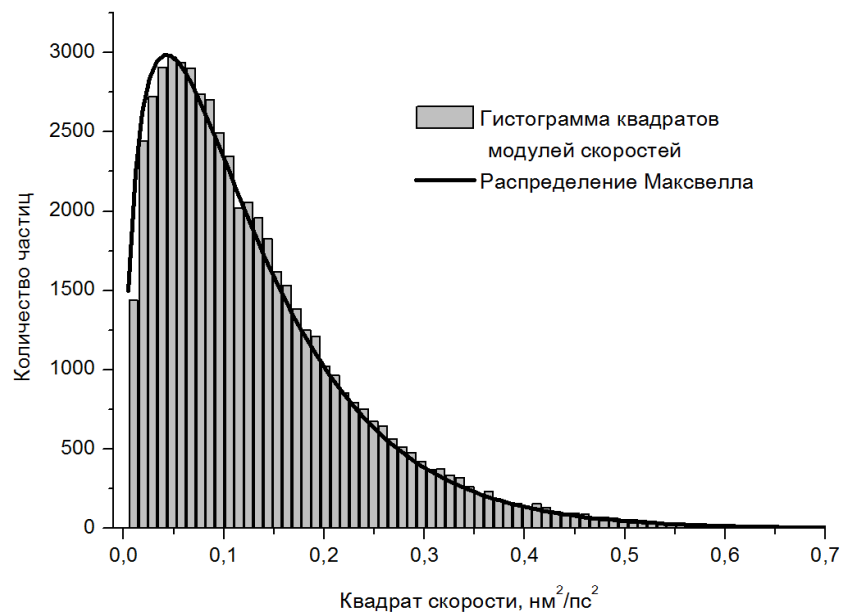


Рисунок 3.11 – Гистограмма квадратов модулей скоростей. Размеры системы – $24 \times 24 \times 24$

На рисунке 3.12 показаны временные профили давления для трех размеров системы. Анализ кривой показывает, что вблизи равновесия давление выходит на значение порядка 1.28 ГПа, что достаточно близко к значению для внутреннего давления в никеле, рассчитанного в [9] для низких температур. Полученное значение давления соответствует напряженному состоянию никеля.

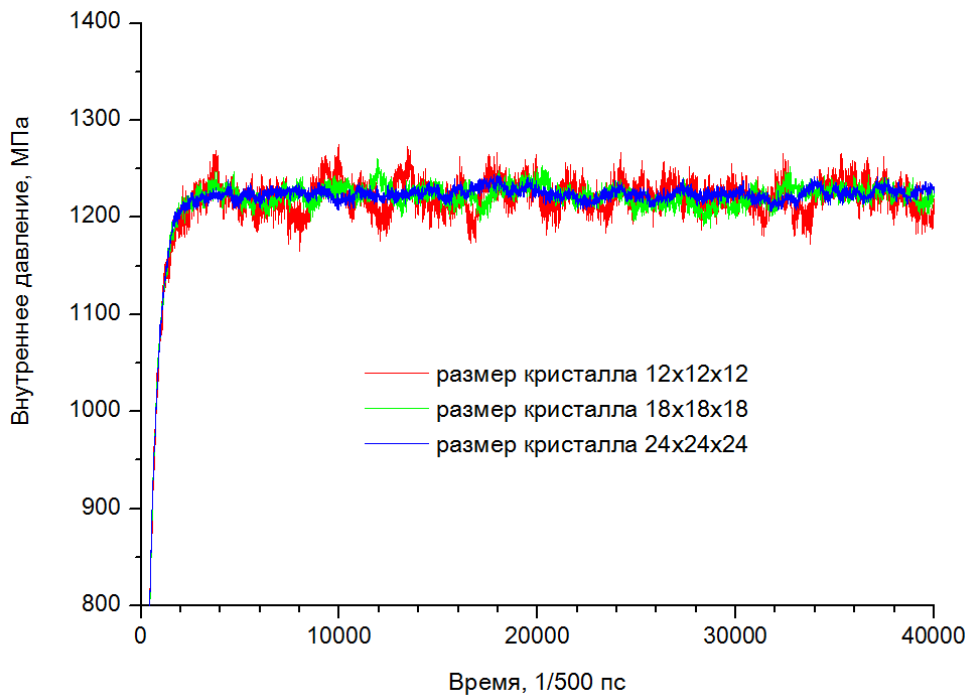


Рисунок 3.12 – Распределения внутреннего давления в кристалле по времени для трех размеров системы

Для получения ненапряженного состояния необходимо точно знать величину шага решетки (длину элементарной ячейки). Эту величину можно определить численно по величине давления. Как показали расчеты, нулевое внутреннее давление в никеле для комнатной температуры ($T = 300 \text{ K}$) реализуется при величине шага решетки $rcr \approx 0.3531 \pm 0.00005 \text{ нм}$. Более подробное описание задачи о моделировании ненапряженного образца в параграфе 3.3.2.

3.3 Термодинамическое равновесие металлической системы в геометрии пластины при желаемой температуре

В данном параграфе рассматриваются металлические системы в реальной геометрии на примере геометрии пластины. Исследуется эволюция основных макропараметров систем. Основной целью данного параграфа является моделирование термодинамического состояния металлической пластины при определенных значениях температуры и давления.

3.3.1 Расчет равновесного состояния металлического образца при заданном значении температуры на примере системы атомов алюминия

В данном параграфе описывается процесс получения металлической пластины в равновесном состоянии при определенной температуре, где в качестве материала пластины выбран алюминий [106]. Для решения задачи рассматривается система уравнений (3.1) для одного типа частиц. Масса атома алюминия составляет $m = 44.8 \cdot 10^{-27}$ кг.

Силы, действующие на частицы, определяются через потенциал взаимодействия и внешнее воздействие на систему. В качестве потенциала взаимодействия используется ППА (1.67) в форме (1.71)–(1.73) [356]. В рамках данной задачи радиус взаимодействия был взят $r_c = 0.6875$ нм.

Для достижения равновесия рассматриваемого твердого тела (пластины алюминия) при определенной температуре необходимо осуществить тепловое воздействие на образец. Температура системы поддерживается за счет энергообмена с внешней средой. В качестве метода достижения желаемой температуры системы был выбран термостат Берендсена. Целью являлось получить равновесное состояние системы при температуре $T = 300$ К.

Начальные условия включают распределение координат частиц, которое для твердых тел зависит от кристаллической решетки элемента, и распределение скоростей, задаваемое согласно выбранной температуре моделирования.

Алюминий имеет кубическую ГЦК решетку с реальной длиной элементарной ячейки при нормальных условиях $r_{cr} = 0.4$ нм [171].

Моделируется динамика частиц образца алюминия в геометрии пластины. Расчетная ячейка представляет собой параллелепипед со сторонами L_x, L_y, L_z . Для моделирования бесконечной пластины вдоль координатных осей x и y использовались ПГУ с периодами L_x и L_y соответственно. В направлении оси z пластина конечна, поэтому никаких специальных граничных условий в этом направлении не предполагается.

Общее количество частиц составляет $N = 2k_x k_y (2k_z + 1)$, из которых $N = k_x k_y (k_z + 1)$ частиц в узлах решетки и $N = k_x k_y (3k_z + 1)$ частиц в центрах граней кристаллической решетки.

Начальные векторы скоростей генерируются из распределения Максвелла, соответствующего заданному значению температуры T_0 . В данном расчете пластина изначально считалась холодной и за стартовое было взято значение температуры $T_0 = 10$ К.

Компоненты вектора скорости $\mathbf{v}^0 = (v_x^0, v_y^0, v_z^0)$ получаются с помощью преобразования Бокса-Мюллера по формулам (1.59). Далее проверяется равенство суммарного импульса нулю.

Система (3.1) решается с помощью схемы Верле в скоростной форме (1.78) по алгоритму (1.79) с учетом влияния термостата (1.80). Общий алгоритм в случае термостатирования совпадает с алгоритмом в параграфе 3.2.1.

Вычисления проводились для расчетной области $k_x \times k_y \times k_z = 6 \times 6 \times 20$ и $k_x \times k_y \times k_z = 10 \times 10 \times 50$ ячеек алюминия, что соответствует количеству частиц $N = 2952$ и $N = 20200$ атомов. Значение шага интегрирования по времени было $\Delta t = 0.002$ пс. Изучалось поведение системы при разных временах взаимодействия с резервуаром τ_t (разных значениях временного параметра алгоритма Берендсена), рассматривались времена порядка $\tau_t = 1$ пс и $\tau_t = 10$ пс. Расчеты велись в течение $NSTEP = 20000$ и $NSTEP = 40000$ шагов, общее время счета составило 40 пс и 80 пс соответственно.

Результаты вычислений для $N = 2952$ частиц в случае 20000 шагов при параметре термостата $\tau_b = 1$ пс представлены на рисунках 3.13 и 3.14 в виде распределения по квадратам скоростей и графика эволюции температуры в процессе моделирования.

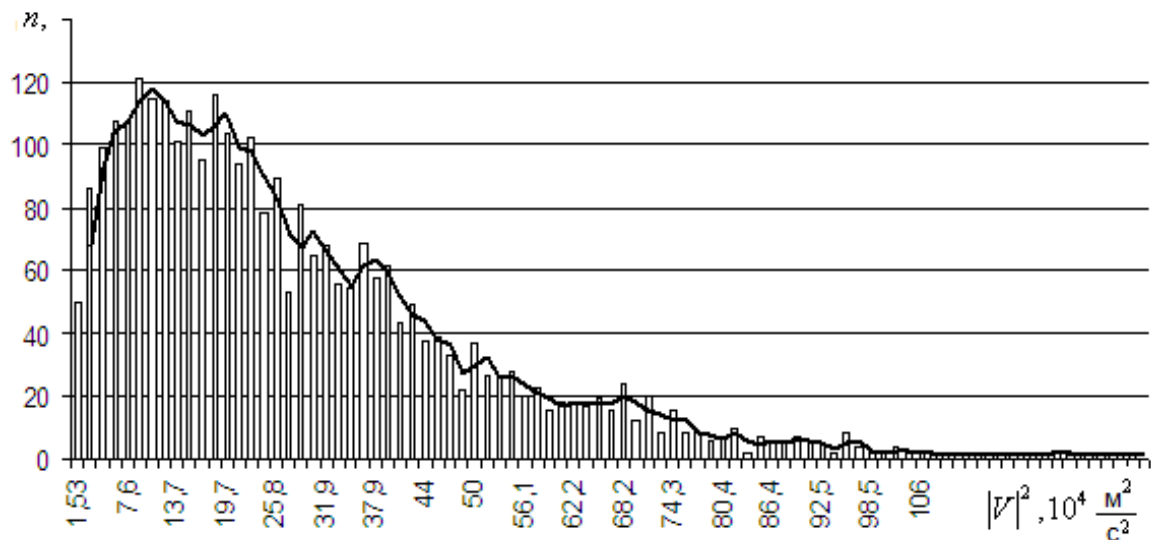


Рисунок 3.13 – Распределение частиц по квадратам скоростей для количества частиц $N = 2952$ на момент времени 40 пс при параметре термостата $\tau_b = 1$ пс. Контурная черная линия соответствует линии тренда для данного распределения

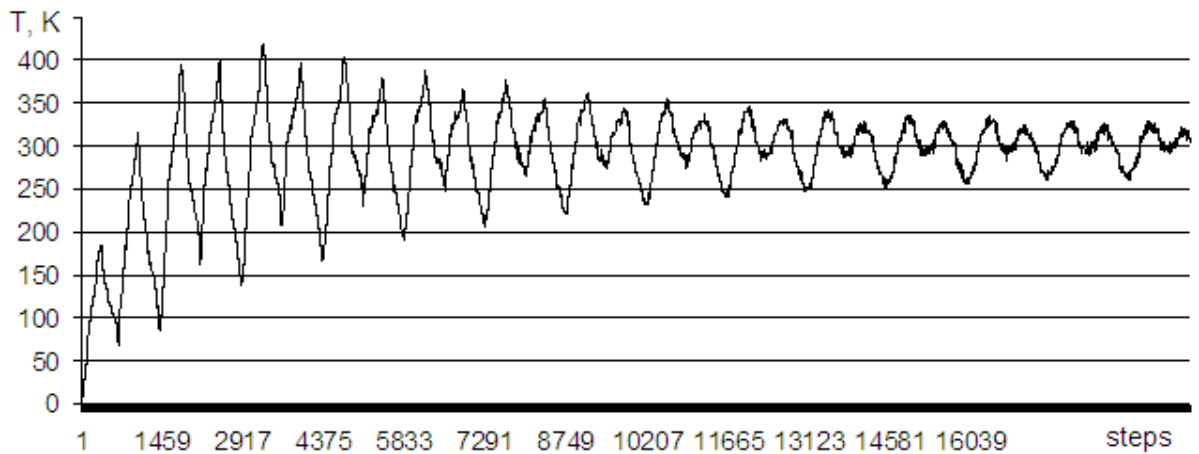


Рисунок 3.14 – График изменения температуры в процессе моделирования для количества частиц $N = 2952$ на момент времени 40 пс при параметре термостата $\tau_b = 1$ пс

Результаты вычислений для $N = 2952$ частиц в случае 20000 шагов при параметре $\tau_b = 10$ пс представлены на рисунках 3.15 и 3.16. Как можно увидеть, система находится на переходе в равновесное состояние на момент времени 40 пс, но график температуры имеет большую амплитуду относительно желаемого значения.

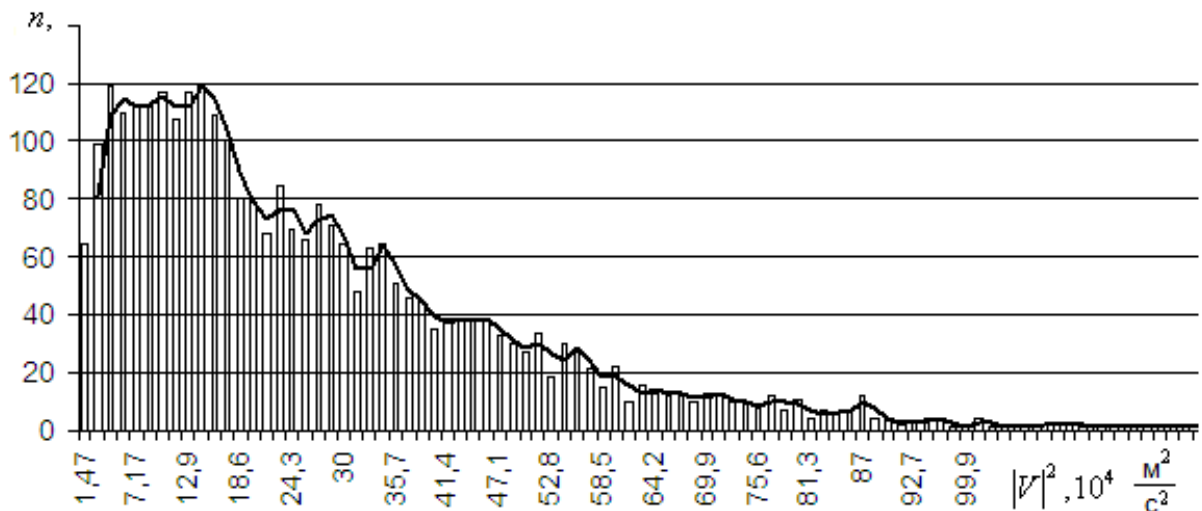


Рисунок 3.15 – Распределение частиц по квадратам скоростей для количества частиц $N = 2952$ на момент времени 40 пс при параметре термостата $\tau_b = 10$ пс. Контурная черная линия соответствует линии тренда для данного распределения

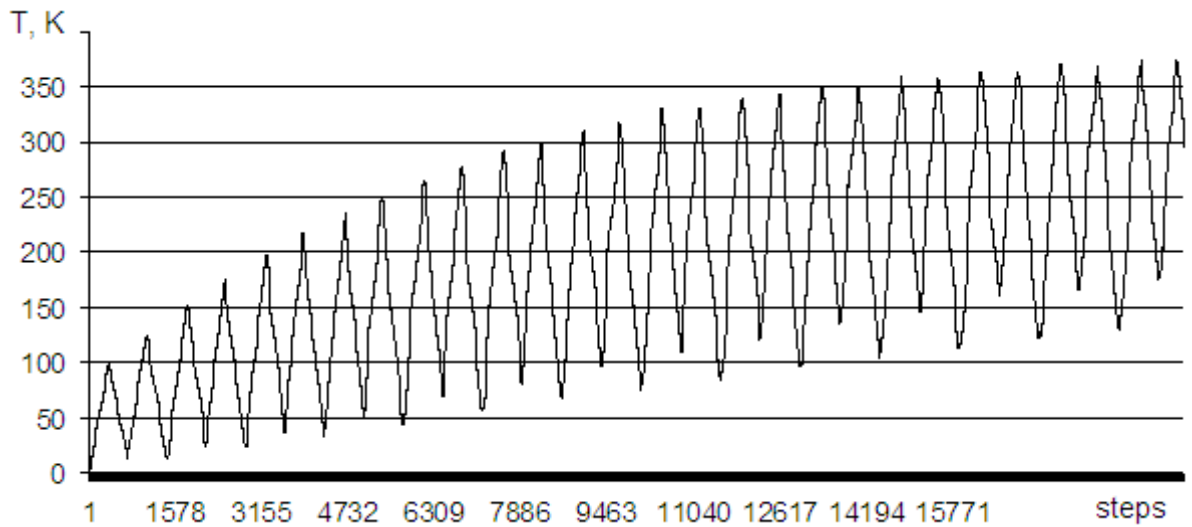


Рисунок 3.16 – График изменения температуры в процессе моделирования для количества частиц $N = 2952$ на момент времени 40 пс при параметре термостата $\tau_b = 10$ пс

В случае 40000 шагов были сделаны аналогичные расчеты, которые для параметра термостата $\tau_b = 1$ пс представлены на рисунках 3.17 и 3.18. На момент времени 80 пс система близка к равновесному состоянию и колебания значений температуры минимальны – желаемый результат получен. Для параметра термостата $\tau_b = 10$ пс на момент времени 80 пс исследуемые графики изменились незначительно.

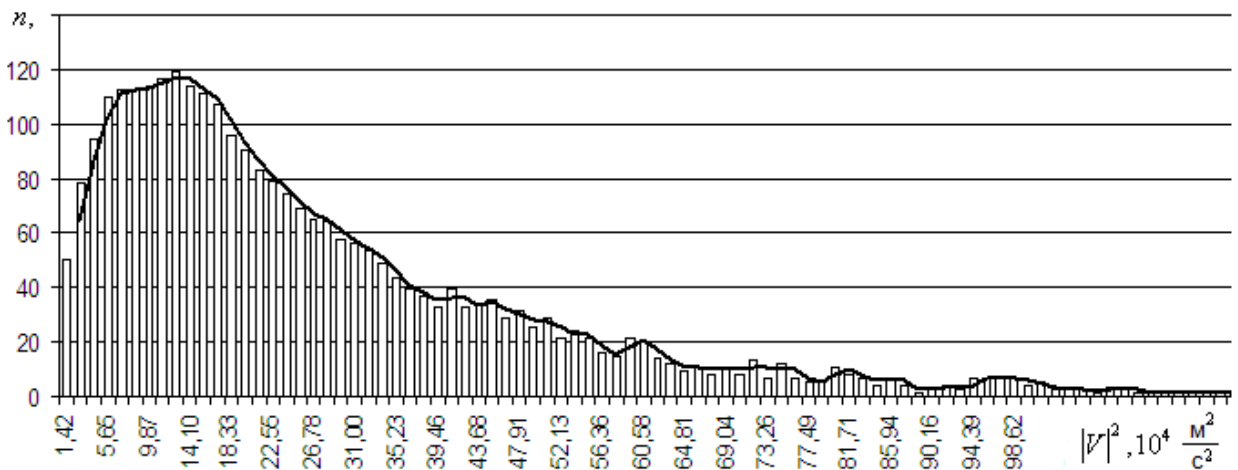


Рисунок 3.17 – Распределение частиц по квадратам скоростей для количества частиц $N = 2952$ на момент времени 80 пс при параметре термостата $\tau_b = 1$ пс. Контурная черная линия соответствует линии тренда для данного распределения

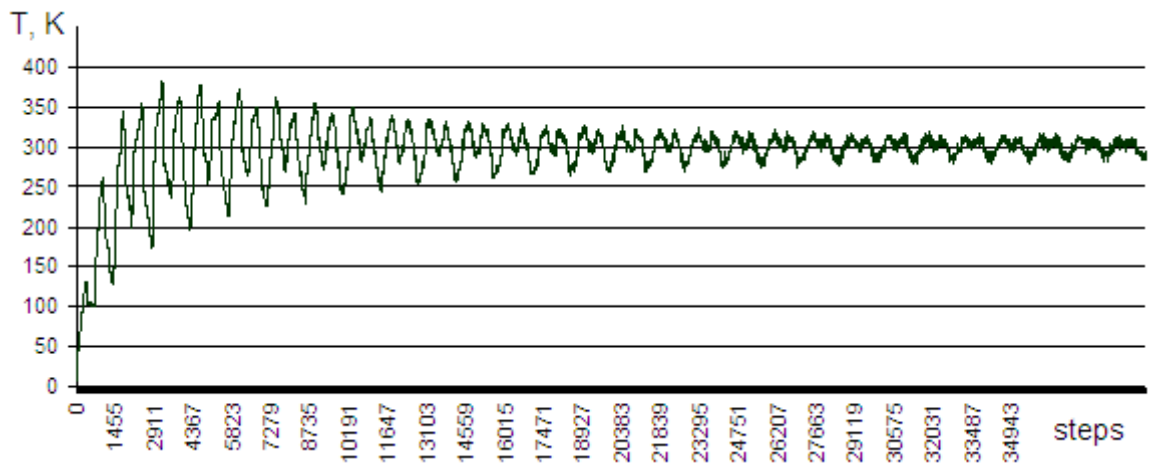


Рисунок 3.18 – График изменения температуры в процессе моделирования для количества частиц $N = 2952$ на момент времени 80 пс при параметре термостата $\tau_b = 1$ пс

Аналогичные вычисления для количества частиц $N = 20200$ показали, что равновесное состояние системы и достижение небольших амплитуд относительно необходимой температуры достигаются при параметре термостата $\tau_b = 1$ пс уже на момент расчета 40 пс, результаты представлены на рисунках 3.19 и 3.20 в виде распределения по скоростям и графика изменения температуры в процессе моделирования.

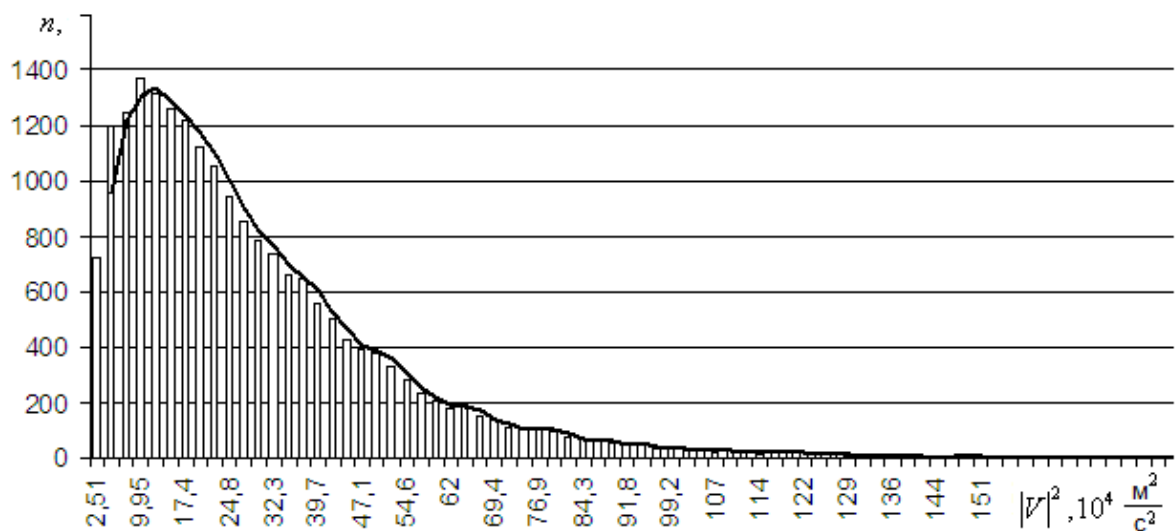


Рисунок 3.19 – Распределение частиц по квадратам скоростей для количества частиц $N = 20200$ на момент времени 40 пс при параметре термостата $\tau_b = 1$ пс. Контурная черная линия соответствует линии тренда для данного распределения

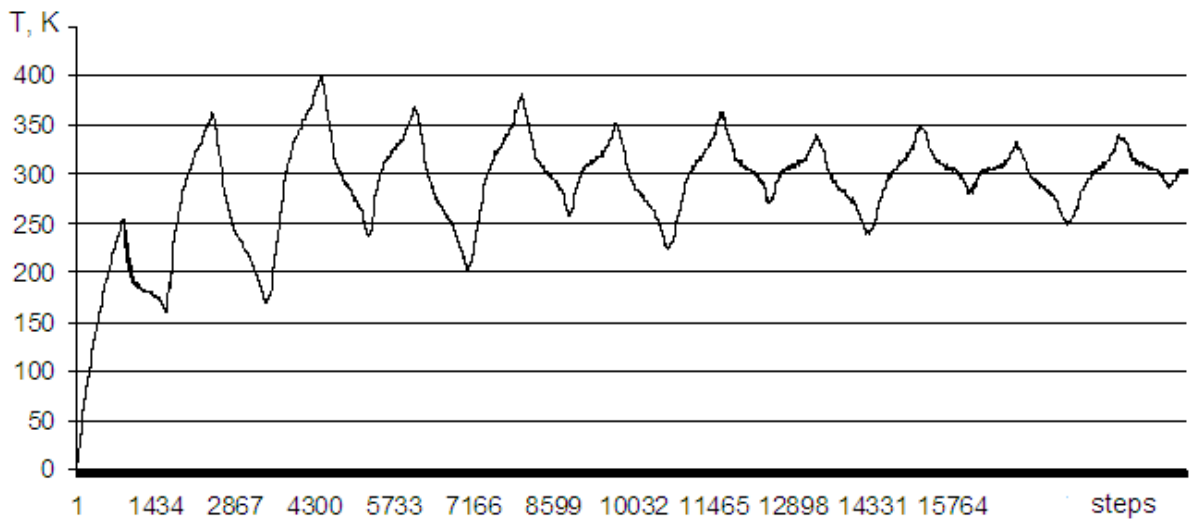


Рисунок 3.20 – График изменения температуры в процессе моделирования для количества частиц $N = 20200$ на момент времени 40 пс при параметре термостата $\tau_b = 1$ пс

Расчет температуры системы, усредненной по ансамблю, для числа атомов алюминия $N = 2952$ на момент времени 80 пс ($NSTEP = 40000$) с параметром термостата $\tau_b = 1$ пс дает значение $T = 302$ К, а для числа частиц $N = 20200$ с параметром термостата $\tau_b = 1$ пс на момент времени 40 пс ($NSTEP = 20000$) $T = 304$ К.

Исследование показало, что оптимальным значением времени взаимодействия с тепловым резервуаром является $\tau_b = 1$ пс. Погрешность вычислений находится в пределах 1%, что является хорошим показателем и подтверждает корректность алгоритмов.

3.3.2 Расчет равновесного состояния металлического образца при заданном значении температуры и необходимом давлении на примере системы атомов никеля

В данном параграфе исследуется получение равновесного состояния металлической пластины при определенных значениях температуры и давления. Для решения задачи рассматривается система уравнений (3.1) для одного типа частиц. В качестве материала пластины выбран никель. Масса атома никеля составляет $m = 97.46 \cdot 10^{-27}$ кг.

Силы, действующие на частицы, определяются через потенциал взаимодействия и внешнее воздействие на систему. В качестве потенциала взаимодействия используется ППА (1.67) в форме (1.74)–(1.76) [359]. Параметры потенциала для никеля представлены в Таблице 3.1. В рамках данной задачи радиус взаимодействия был взят $r_c = 0.9$ нм.

Для расчета термодинамического равновесия в пластине металла технической микросистемы приходится учитывать, что в реальном эксперименте пластина должна быть ненапряженной. Это означает равенство нулю диагональных компонент тензора давления. Такая ситуация реализуется путем изменения ребра кристаллической решетки, то есть реальная металлическая микросистема подстраивает свои размеры так, чтобы минимизировать функционал энергии и тензор давления. Такое поведение микросистемы в численных экспериментах можно реализовать двумя способами. Первый основан на введении специальных алгоритмов баростатов, которые вносят дополнительные осцилляции и добавляют сложность общему алгоритму вычислений. Второй (менее трудоемкий и без дополнительных изменений) состоит в подборе ребра элементарной ячейки никеля, обеспечивающего равенство нулю давления в объемном образце при заданной температуре. Третий подход предлагается использовать, и именно он представлен в расчетах этого параграфа.

Третий подход разбивается на три подзадачи: определение оптимального времени взаимодействия с тепловым резервуаром для термостатирования системы, подбор ребра решетки для обеспечения нулевого давления в образце, приведение системы в форме пластины к термодинамическому равновесию.

Первые две задачи решаются для образца в объемной геометрии аналогично расчетам, приведенным в параграфе 3.2.2. Для достижения необходимого значения температуры был выбран термостат Берендсена. Система исследовалась при следующих температурах: $T = 126.85; 200; 273.15; 346.30$ К.

Начальные условия включали распределение координат частиц согласно кубической ГЦК решетке аналогично параграфу 3.2.2 и распределение скоростей, задаваемое согласно выбранным температурам моделирования.

Расчет объемной никелевой микросистемы проводился для размера $k_x \times k_y \times k_z = 24 \times 24 \times 24$, измеряемого в длинах элементарных ячеек. Данный размер системы соответствует количеству атомов никеля $N = 55296$. В расчетах для всех 4 значений температуры 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.

Далее для этой же системы с использованием термостата Берендсена при параметре $\tau_t = 1$ пс для всех 4 значений температуры были определены соответствующие ребра элементарных ячеек, значения которых представлены в Таблице 3.2.

Таблица 3.2 – Значения ребер элементарных ячеек никеля, соответствующие условию ненапряженности пластины при выбранных температурах

T, K	126.85	200.00	273.15	346.30
rcr, 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 в форме пластины варьировались от $k_x \times k_y \times k_z = 24 \times 24 \times 24$ до $k_x \times k_y \times k_z = 288 \times 288 \times 24$ элементарных ячеек.

Вдоль координатных осей x и y использовались ПГУ с периодами $Lx = k_x \cdot rcr$ и $Ly = k_y \cdot rcr$ соответственно. В направлении оси z никаких специальных граничных условий не накладывалось, так как пластина по данной оси конечна. Термостат и время взаимодействия с тепловым резервуаром задавались аналогично подготовительным этапам.

Размер минимальной системы $k_x \times k_y \times k_z = 24 \times 24 \times 24$ для образца в форме пластины соответствует количеству частиц $N = 2k_x k_y (2k_z + 1) = 56448$, размер максимальной системы $k_x \times k_y \times k_z = 288 \times 288 \times 24$ соответствует $N = 8128512$. Начальные распределения скоростей растажирированных частиц совпадали с распределениями в исходном объемном образце в соответствии с температурами расчетов.

Система (3.1) решалась с помощью схемы Верле в скоростной форме (1.78) по алгоритму (1.79) с учетом влияния термостата (1.80). Значение шага интегрирования по времени было $\Delta t = 0.002$ пс. Общий алгоритм в случае термостатирования совпадает с алгоритмом в параграфе 3.2.1.

Расчеты образцов в форме пластины производились довольно продолжительное время. Этим достигалось полная термализация системы (выход диагональной zz -компоненты тензора давления на нулевой уровень). В качестве иллюстрации приведены результаты по следующему расчету. Термализация пластин происходила в течение 1 нс, что соответствует $NSTEP = 500000$ шагов, окончательная релаксация в режиме отсутствия термостатирования заняла еще 200 пс ($NSTEP = 100000$ шагов). Такая длительность расчетов связана с сильными колебаниями на границах пластины.

Приведем ниже результаты расчета при желаемой температуре системы $T = 273.15$ К и ребре элементарной ячейки $rcr = 0.353140$ нм соответственно. На рисунке 3.21 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.

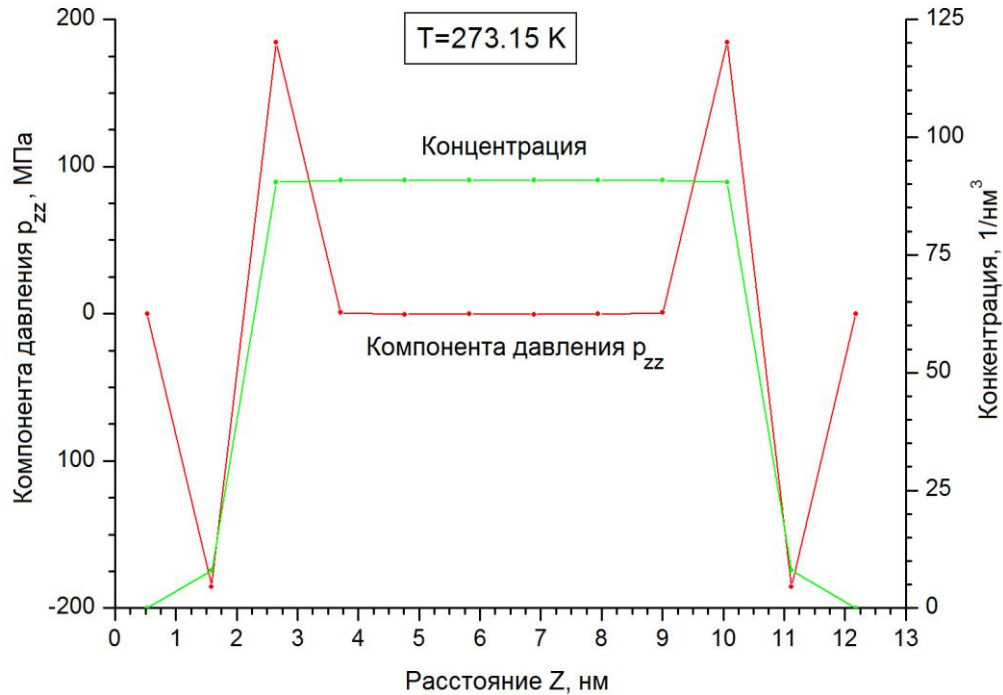


Рисунок 3.21 – Распределения диагональной компоненты тензора давления и концентрации частиц в пластине по слоям относительно оси z

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 слоев с отклонением, то видно, что они компенсируют друг друга и в сумме дадут ноль.

На рисунке 3.22 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.

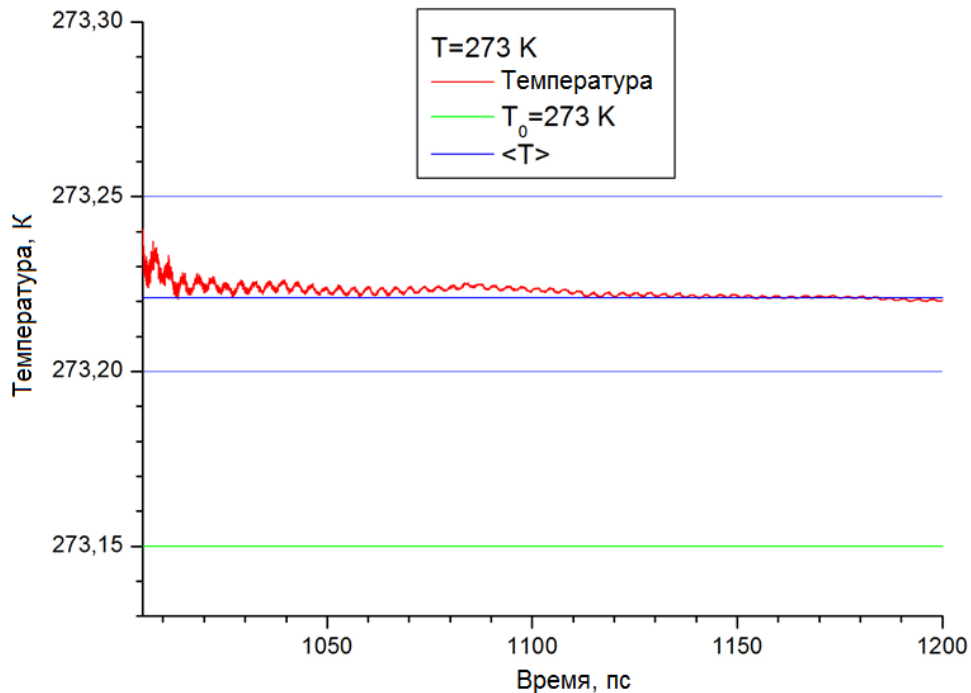


Рисунок 3.22 – Профиль усредненной по пространству и времени равновесной температуры в пластине из атомов никеля

Таким образом, равновесие в пластине установилось, необходимая температура достигнута, пластина находится в ненапряженном состоянии.

3.4 Выводы по главе

- Выполнены подготовительные калибровочные расчеты, позволяющие уточнить параметры термостатов, представительные размеры ансамблей молекул и расчетной области.
- Решены дополнительные задачи по подготовке данных, включающие нахождение длины элементарной ячейки металла для ненапряженного состояния образца, определение массивов координат и скоростей в термодинамическом равновесии при выбранной температуре.
- Рассчитаны и проанализированы равновесные состояния газа и металла.

Глава 4

Молекулярно-динамические расчеты параметров уравнений состояния и кинетических коэффициентов реальных газов

В данной главе представлены модели, численные методы и алгоритмы для моделирования уравнений состояния и кинетических коэффициентов реальных газов. Глава начинается описанием методов молекулярно-динамического моделирования уравнений состояния реального газа, которые определяются из расчетов по давлению и энергии и основаны на вычислении коэффициентов сжимаемости и теплоемкости. Представлены результаты моделирования на примере системы молекул азота. Далее в главе представлены различные методики определения кинетических коэффициентов газовой среды с учетом молекулярных процессов, происходящих в потоке газа. Подробно описываются и сравниваются методики определения коэффициентов диффузии, сдвиговой (динамической), объемной и кинематической вязкостей, теплопроводности. Для определения данных коэффициентов представлены соотношения Эйнштейна [243, 280, 325], формулы Грина-Кубо [234–236, 254, 255, 325] и смешанный подход. В качестве примера рассмотрено моделирование системы молекул азота, для которого рассчитаны коэффициенты самодиффузии, вязкости и теплопроводности.

4.1 Моделирование уравнений состояния реального газа методами молекулярной динамики

Основной целью данного параграфа является моделирование уравнений состояния реального газа. Уравнения состояния включают термическое и калорическое уравнения, они определяются из молекулярно-динамических расчетов по давлению и энергии и основаны на вычислении коэффициентов сжимаемости и теплоемкости. Представлены расчеты, в которых в качестве системы частиц газа рассматривается система молекул азота.

4.1.1 Постановка задачи

Рассматривается система дифференциальных уравнений (1.51) для одного типа частиц:

$$m \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{F}_i, \quad \mathbf{v}_i = \frac{d\mathbf{r}_i}{dt}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (4.1)$$

где i – номер частицы, N – полное число частиц, m – масса частицы, $\mathbf{r}_i = (r_{x,i}, r_{y,i}, r_{z,i})$ и $\mathbf{v}_i = (v_{x,i}, v_{y,i}, v_{z,i})$ – радиус-вектор и вектор скорости i -ой частицы, $\mathbf{F}_i = (F_{x,i}, F_{y,i}, F_{z,i})$ – суммарная сила, действующая на данную частицу. Масса молекулы азота соответствует $m = 46.52 \cdot 10^{-27}$ кг.

Моделирование состоит из двух основных этапов. Первый этап вычислений заключается в приведении газодинамической системы в состояние равновесия при выбранной температуре, после чего наступает второй этап, на котором из молекулярно-динамических расчетов определяются уравнения состояния по давлению и энергии (коэффициенты сжимаемости и теплоемкости), внутренняя энергия системы и энтальпия.

Рассматривается система молекул азота N_2 , заключенных в некотором микрообъеме V , который представляет собой куб со сторонами $Lx = Ly = Lz$. По трем осям x, y, z определены ПГУ с периодами Lx, Ly, Lz соответственно. Силы, действующие на частицы, определяются через потенциал взаимодействия по формуле (1.52). В качестве потенциала выбран потенциал Ми (1.70), который с учетом сглаживания и обрезания действия имеет вид (3.4).

Постановка задачи релаксации для системы частиц газа при заданной температуре описана в Главе 3 в параграфе 3.2.1.

Целью моделирования является получение средних значений макропараметров газа. Во множество макропараметров входят: кинетическая (1.53), потенциальная (3.2) и полная (1.54) энергии; температура (1.55) и давление (1.57); коэффициенты сжимаемости; энтальпия и теплоемкость. Далее приведены формулы для определения макропараметров, необходимых для расчета параметров уравнений состояния.

Для удобства приведем формулу для вычисления температуры для системы частиц одного типа при наличии трех поступательных степеней свободы:

$$T = \frac{1}{3 \cdot N \cdot k_b} \left\langle \sum_{i=1}^N m |\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_m|^2 \right\rangle, \quad i = 1, \dots, N. \quad (4.2)$$

где $\langle \rangle$ – усредненное значение по состояниям системы, k_b – постоянная Больцмана.

Запишем давление в общем виде по теореме вириала [173, 242, 325]:

$$p = \frac{N \cdot k_b \cdot T}{V} + \frac{1}{3 \cdot V} \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j>i} (\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{F}_{ij}) \right\rangle, \quad i = 1, \dots, N. \quad (4.3)$$

Коэффициент сжимаемости Z_C описывает отклонение термодинамических свойств реального газа от идеального газа и выражается через результат расчета (4.3):

$$Z_C = \frac{p \cdot V}{N \cdot k_b \cdot T} = 1 + \frac{1}{3 \cdot N \cdot k_b \cdot T} \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j>i} (\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{F}_{ij}) \right\rangle, \quad i = 1, \dots, N. \quad (4.4)$$

Также в литературе исследуется отношение, описывающее отклонение свойств газа от свойств рассматриваемого газа при нормальных условиях:

$$Z_p = \frac{p \cdot V}{p_0 \cdot V_0}, \quad (4.5)$$

где p_0, V_0 – давление и объем системы при нормальных условиях.

Энтальпия H в случае реального газа вычисляется следующим образом:

$$H = NE_I + pV. \quad (4.6)$$

Теплоемкости при постоянном объеме и постоянном давлении определяются по формулам [192, 229, 343, 350]:

$$C_V = \left(\frac{dE}{dT} \right)_V = \frac{\langle \delta E^2 \rangle_{NVT}}{k_b T^2} = \frac{\langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle_{NVT}}{k_b T^2} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_b T^2}, \quad (4.7)$$

$$C_p = \left(\frac{dH}{dT} \right)_p = \frac{\langle \delta (E + pV)^2 \rangle_{NPT}}{k_b T^2} = \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{k_b T^2}. \quad (4.8)$$

Для определения уравнений состояния необходимо знать величину теплоемкости газа при постоянном объеме C_V , потому далее следует более подробное описание расчета этого коэффициента. Существует множество способов вычислений теплоемкости газа при постоянном объеме [24, 138, 173, 192, 229, 240, 242, 259, 260, 322, 325], ниже представлены наиболее популярные варианты, по которым велись расчеты:

$$C_V = \frac{3 \cdot k_b}{2} \left[1 - \frac{3 \cdot N}{2} \frac{\langle E_K^2 \rangle - \langle E_K \rangle^2}{\langle E_K \rangle^2} \right]^{-1}, \quad (4.9)$$

$$C_V = \frac{3 \cdot k_b}{2} \left[1 - \frac{3 \cdot N}{2} \frac{\langle T^2 \rangle - \langle T \rangle^2}{\langle T \rangle^2} \right]^{-1}, \quad (4.10)$$

$$C_V = \frac{3 \cdot N \cdot k_b}{2} \left[1 + \frac{2}{3 \cdot N \cdot (k_b \cdot \langle T \rangle)^2} (\langle E_P^2 \rangle - \langle E_P \rangle^2) \right], \quad (4.11)$$

$$C_V = \frac{3 \cdot N \cdot k_b}{2} \left[1 + \frac{3}{2 \cdot N} \frac{\langle E_P^2 \rangle - \langle E_P \rangle^2}{\langle E_K \rangle^2} \right]. \quad (4.12)$$

Наиболее робастной показала себя формула (4.9), поэтому она использовалась при получении основных результатов в параграфе 4.1.2.

Система (4.1) решается с помощью схемы Верле в скоростной форме (1.78) по алгоритму (1.79). В случае термостатирования численная схема изменяется с учетом (1.80), а алгоритм вычислений соответствует алгоритму, описанному в Главе 3 в параграфе 3.2.1. Алгоритм вычислений второго этапа выглядит следующим образом:

- 1) Расчет новых координат частиц \mathbf{r}_i^{n+1} для момента времени, где n – номер шага.
- 2) Проверка граничных условий.
- 3) Вычисление потенциальной энергии системы U^{n+1} .
- 4) Определение сил \mathbf{F}_i^{n+1} , действующих на частицы.
- 5) Расчет новых скоростей частиц \mathbf{v}_i^{n+1} .
- 6) Вычисление кинетической энергии системы E_K^{n+1} .
- 7) Расчеты температуры T^{n+1} и давления P^{n+1} системы на данном шаге.
- 8) Вычисление полной энергии системы E^{n+1} и энтальпии H^{n+1} .
- 9) Расчет коэффициентов сжимаемости Z_C^{n+1} и Z_P^{n+1} .
- 10) Определение коэффициента теплоемкости при постоянном давлении C_V^{n+1} .

Вычисления 1) – 10) повторяются на каждом шаге по времени.

Общий алгоритм расчета представляет собой следующую последовательность действий. В начальный момент времени задаются распределения координат и скоростей всех частиц, после чего решаются уравнения движения для первого этапа согласно алгоритму с учетом внешнего воздействия на систему со стороны термостата. Расчеты ведутся до выхода температуры (4.2) и давления (4.3) на стационарные значения, что означает установление термодинамического равновесия. Далее происходит переход ко второму этапу, где в качестве начальных значений берутся равновесные координаты и скорости, полученные в результате

расчетов первого этапа. Вычисления по второму этапу проводятся в соответствии с представленным алгоритмом.

4.1.2 Результаты моделирования

Среди стратегий расчета макропараметров газа различают две основных. Первая и самая простая из них состоит в фиксации объема и количества частиц. В результате получается "замороженной" плотность газа. В такой ситуации можно изменять либо давление и рассчитывать его температуру и другие макропараметры (первый вариант расчетов), либо наоборот, изменять температуру и рассчитывать давление и другие макропараметры (второй вариант расчетов). В результате получаем зависимости основных макропараметров газа либо от давления, либо от температуры (ниже обсуждаются результаты, полученные по второму варианту).

Вторая стратегия состоит в фиксации давления путем использования баростата. В этом случае при фиксированном числе частиц изменяется объем системы, а значит и плотность газа. В рамках этой стратегии также имеется два варианта расчетов: либо при заданной температуре (которая контролируется термостатом) вычисляется плотность и другие макропараметры газа, либо при заданном числе частиц вычисляются плотность, температура и другие макропараметры газа.

Выбор той или иной стратегии связан с целевой функцией расчетов. Наиболее популярным и наименее затратным по числу операций является расчет по первой стратегии (фиксации объема и количества частиц) и второму варианту. В этой ситуации достаточно просто определяются все температурные зависимости макропараметров газа. Именно этот подход используется в данной работе.

Методика получения средних характеристик в рамках выбранной стратегии состоит в следующем. Сначала рассчитывается стартовая точка на p - T диаграмме, соответствующая нормальным условиям (когда давление газа составляет $p = 101325$ Па, а температура газа равна $T = 273.15$ К). Для этих параметров большинство макропараметров газов хорошо известно. В частности, плотность азота, на примере которого проводился численный эксперимент, при этих условиях равна 1.24979 кг/м³. Расчет стартовой точки проводился для $N = 27000$ молекул азота в соответствующем объеме V .

Использовался термостат Берендсена в качестве алгоритма контроля температуры с параметром термостатирования $\tau_t = 1$ пс.

Первый этап заключался в термализации системы при температуре $T = 273.15$ К. Расчет проводился в 3 ступени. Сначала система приводилась в равновесие под действием термостата в течение 8 нс. Затем проводились расчеты в течение 4 нс с термостатом и 4 нс без термостата средних макропараметров газа, сравнение которых в первом и втором расчетах подтвердило достижение газовой системой состояния газодинамического равновесия. Проведенные вычисления аналогичны расчетам, описанным в Главе 3 в параграфе 3.2.1.

После наступал второй этап расчетов, входными данными для которого служили равновесные координаты и скорости, полученные по результатам первого этапа.

Проводились расчеты температурных зависимостей макропараметров газа. Для этого на температурной шкале были выбраны реперные точки 273.15, 263.15, 253.15, ..., 93.15 К, в которых были рассчитаны макропараметры. Для каждой реперной точки, отличной от 273.15 К, расчет стартовал с состояния системы для 273.15 К на момент времени 8 нс. При этом сразу включался термостат с реперной температурой. Расчет проводился в течение 4 нс. Затем термостат отключался и в течение еще 4 нс рассчитывались средние макропараметры газа.

Для упрощения расчетов реальной теплоемкости азота было принято допущение, в котором двухатомная молекула представляется шаром. В результате вместо добавления уравнений для расчета момента импульса частиц [141] можно остановиться на описании только поступательных движений, что соответствует трем степеням свободы. При данном упрощении модели необходимо делать перенормировку теплоемкости C_V . В работе исследовался газ в диапазоне температур от 130 до 360 К, необходимый нормировочный параметр для данных температур соответствует значению 5/3.

На рисунках 4.1–4.5 показаны итоговые температурные зависимости давления, кинетической и потенциальной энергий и энтальпии, рассчитанных на одну молекулу, теплоемкости при постоянном объеме, коэффициента сжимаемости (показывающего фактически отклонение уравнения состояния реального газа по давлению от уравнения состояния идеального газа). Анализ полученных зависимостей показал следующее.

Во-первых, вблизи стартовой реперной точки газ близок к идеальному, а его параметры близки к известным табличным данным [160] (см. рисунок 4.3 и рисунок 4.5). Также можно увидеть согласованность данных, полученных для точек 143.15, 173.15 и 223.15, значения Z_p для которых представлены в [160] и соответствуют рассчитанным значениям на рисунке 4.5.

Во-вторых, при низких температурах видна тенденция сжижения газа (см. рисунок 4.5), которая близка по числовым данным к данным справочника [160]. В частности, теплоемкость при постоянном объеме вблизи точки сжижения азота начинает экспоненциально расти.

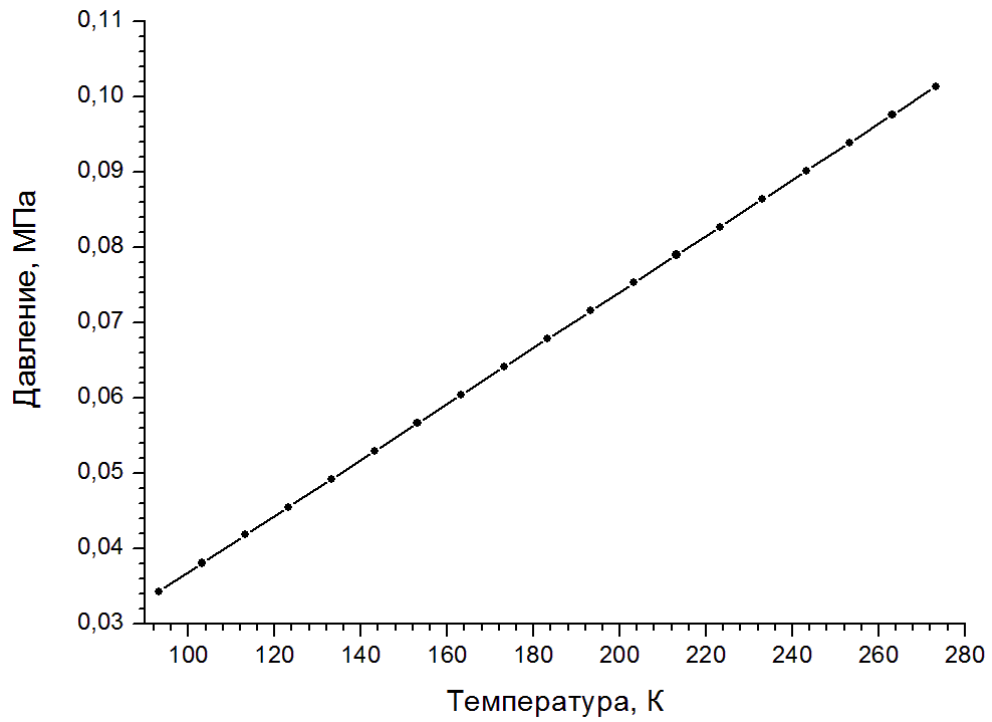


Рисунок 4.1 – Зависимость давления от температуры при постоянной плотности

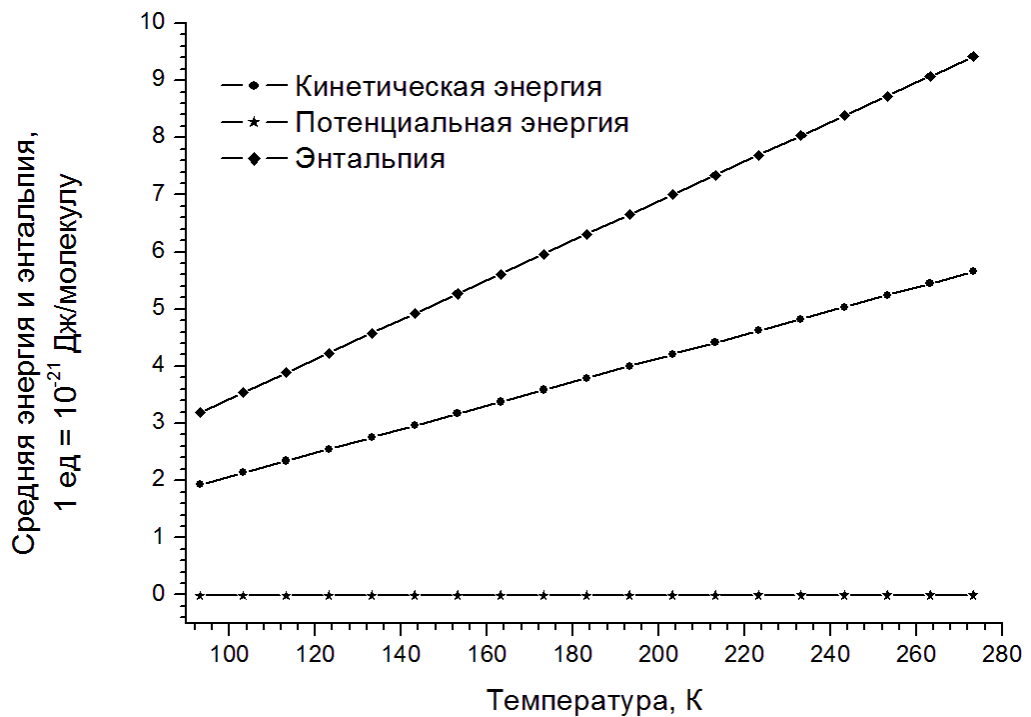


Рисунок 4.2 – Зависимость средних энергий и энтальпии (в пересчете на одну молекулу) от температуры при постоянной плотности

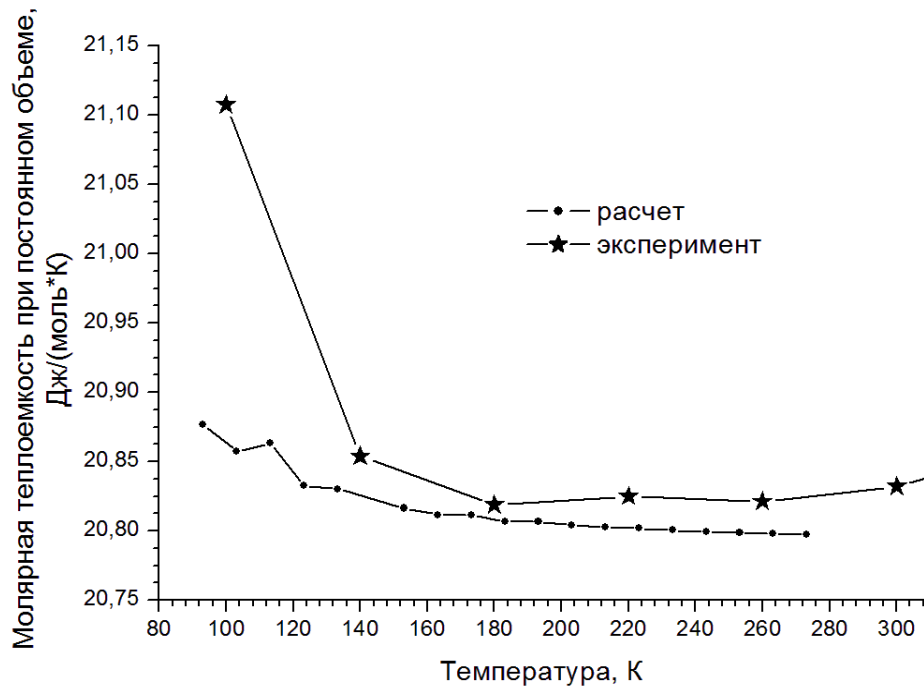


Рисунок 4.3 – Зависимость теплоемкости при постоянном объеме от температуры

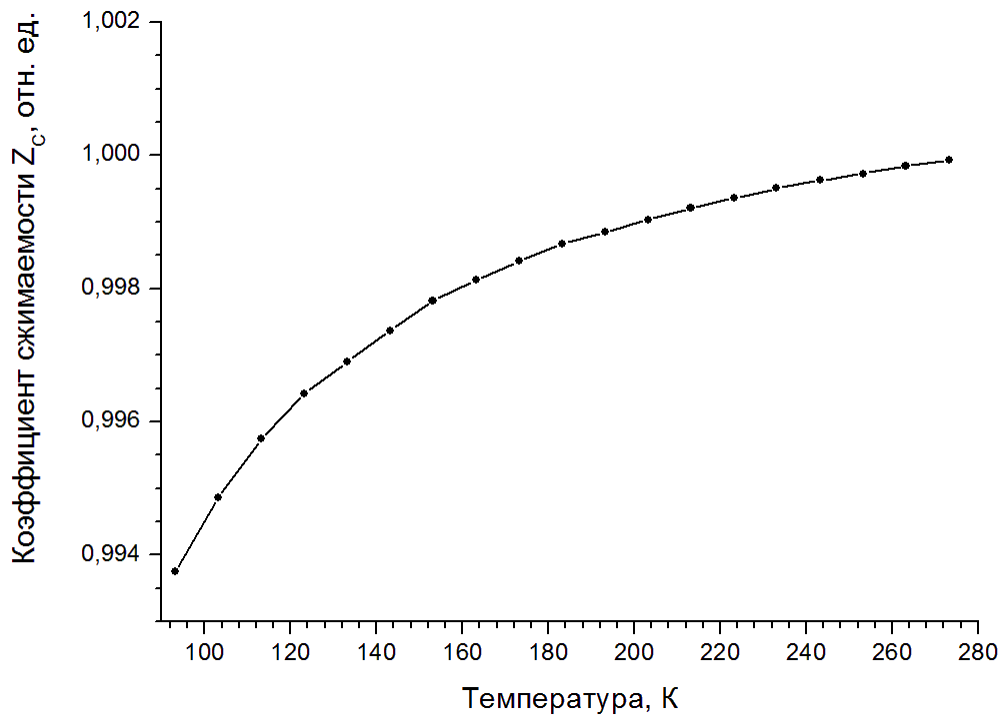


Рисунок 4.4 – Зависимость коэффициента сжимаемости Z_C (отклонения от идеальности) от температуры

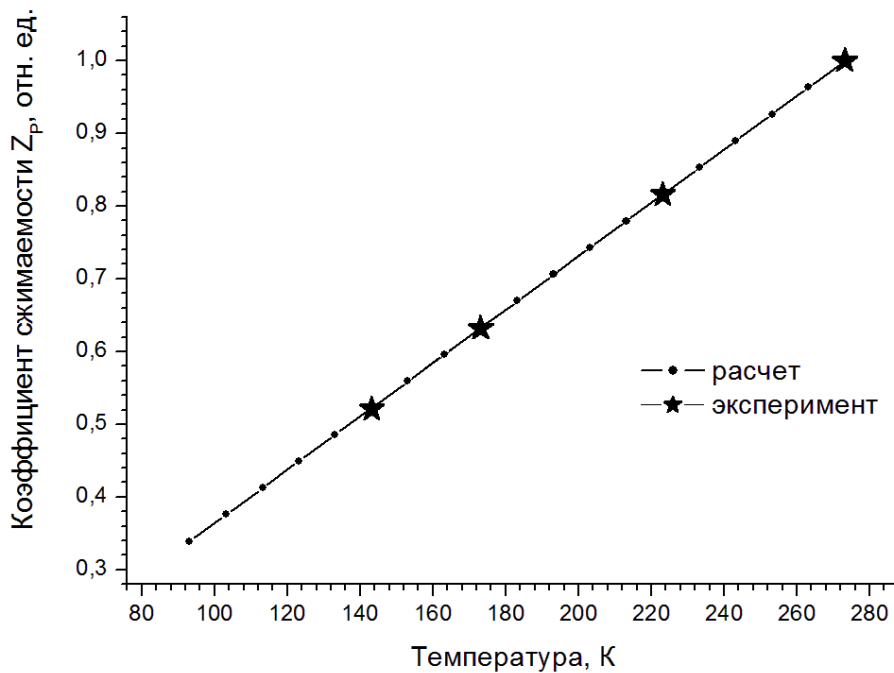


Рисунок 4.5 – Зависимость коэффициента сжимаемости Z_p от температуры

В-третьих, линейный характер изменения таких макропараметров как давление, кинетическая и полная энергии, коэффициент сжимаемости Z_p вблизи точки сжижения азота (77 К), означают, что выбранная стратегия расчета в этой области уже не отражает состояние газа, и в этом случае необходимо переходить ко второй стратегии, то есть использовать баростат.

Таким образом, представленная методика позволяет рассчитать макропараметры газа (или смеси газов) в диапазоне комнатных и низких температур. При этом вблизи точки сжижения газа следует использовать обе указанные выше стратегии расчета с применением термо- и баростатов.

Полученные температурные зависимости для коэффициента сжимаемости и коэффициента теплоемкости при постоянном объеме и определяют термическое и калорическое уравнения состояния (1.33), используемые в макромоделе, описанной в Главе 1 в параграфе 1.2.1 и представляемые в случае одного типа частиц в следующем виде:

$$p = Z_c \rho \mathcal{R} T, \quad E = \frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2 + \rho \varepsilon, \quad \varepsilon = c_v T. \quad (4.13)$$

4.2 Молекулярно-динамическое моделирование кинетических коэффициентов газовых систем

Основной целью данного параграфа является моделирование кинетических (транспортных) коэффициентов газовой среды с учетом молекулярных процессов, происходящих в потоке газа. Молекулярная динамика позволяет следить за полными траекториями частиц системы, численно измерять зависящие от времени равновесные и неравновесные свойства. Это дает возможность определять различные параметры, связанные с корреляционными функциями, такие как коэффициенты диффузии, сдвиговой (динамической), объемной и кинематической вязкостей, теплопроводности. Во многих работах описаны методы определения этих коэффициентов [16, 49, 145, 192, 265, 266, 281–284, 325, 357]. В данном параграфе рассматриваются и сравниваются методики определения кинетических коэффициентов газов на основе методов МД. Для определения данных коэффициентов представлены соотношения Эйнштейна, формулы Грина-Кубо и смешанный подход. В качестве примера рассмотрено течение азота, для которого рассчитаны коэффициенты самодиффузии, вязкости и теплопроводности.

4.2.1 Постановка задачи

Для решения задачи рассматривается система уравнений (4.1) для одного типа частиц. В качестве системы частиц выбрана система, состоящая из молекул азота.

Силы, действующие на частицы, определяются через потенциал взаимодействия по формуле (1.52). В качестве потенциала выбран потенциал Ми (1.70), который с учетом сглаживания и обрезания действия имеет вид (3.4). В рамках данной задачи радиус взаимодействия был взят $r_c = 0.91$ нм.

Начальные условия на микроуровне определяются равновесным термодинамическим состоянием системы частиц. Расчеты газовых сред на макроуровне также обычно начинают с равновесных условий, соответствующих термодинамическому равновесию при заданных температуре и давлении. По этой причине задача моделирования кинетических коэффициентов разбивается на два этапа. Первый этап заключается в релаксации газодинамической системы при выбранной температуре, после чего наступает второй этап, на котором из молекулярно-динамических расчетов определяются кинетические коэффициенты (диффузия, вязкость и теплопроводность).

Начальное распределение координат и скоростей молекул газа в выбранном микрообъеме берется равномерным по координатам частиц и максвелловским по скоростям частиц. При этом средняя скорость частиц должна соответствовать заданной температуре газа. Однако такое искусственное состояние может быть далеко от состояния истинного термодинамического равновесия. Поэтому для достижения релаксации системы при заданной температуре газа производится корректирующий молекулярно-динамический расчет с использованием методики термостатирования. Этот расчет производится вплоть до выхода микросистемы на постоянные значения температуры и давления. В качестве термостата был рассмотрен термостат Берендсена, влияние которого осуществляется за счет перемасштабирования скоростей.

Граничные условия на молекулярном уровне выбираются в зависимости от моделируемой ситуации. В частности, когда расчеты направлены на определение свойств среды, то рассматривается некоторый выделенный трехмерный ее объем и по всем трем координатам используются ПГУ.

Моделирование задачи релаксации для системы частиц газа при заданной температуре описано в параграфе 3.2.1 Главы 3.

Система (4.1) решается с помощью схемы Верле в скоростной форме (1.78) по алгоритму (1.79) с учетом влияния термостата (1.80). Алгоритм расчета в случае термостатирования аналогичен алгоритму, описанному в Главе 3 параграфе 3.2.1. После достижения релаксации получают равновесные распределения координат и скоростей для выбранной температуры, которые можно использовать в качестве начальных условий для моделирования второго этапа задачи. На втором этапе термостат не используется, общий алгоритм выглядит следующим образом:

- 1) Расчет новых координат частиц \mathbf{r}_i^{n+1} для момента времени, где n – номер шага.
- 2) Проверка граничных условий.
- 3) Вычисление потенциальной энергии системы U^{n+1} .
- 4) Определение сил \mathbf{F}_i^{n+1} , действующих на частицы.
- 5) Расчет новых скоростей частиц \mathbf{v}_i^{n+1} .
- 6) Вычисление кинетической энергии системы E_K^{n+1} .
- 7) Расчеты температуры T^{n+1} и давления P^{n+1} системы на данном шаге.
- 8) Вычисление полной энергии системы E^{n+1} .
- 9) Расчет кинетических коэффициентов для данного шага.

Вычисления 1) – 9) повторяются на каждом шаге по времени.

4.2.2 Моделирование кинетических коэффициентов по соотношению Эйнштейна на основе среднеквадратичных отклонений

В данном параграфе описывается метод расчета кинетических коэффициентов по соотношению Эйнштейна, в основе которого лежит определение среднеквадратичских отклонений.

Коэффициент диффузии определяется следующим образом:

$$D = \frac{1}{6N} \frac{1}{t} \left\langle \sum_i [\mathbf{r}_i(t_0 + t) - \mathbf{r}_i(t_0)]^2 \right\rangle, \quad t = N\text{STEPS} \cdot \Delta t, \quad i = 1 \dots N, \quad (4.14)$$

где $N\text{STEPS}$ – число шагов с начала расчета, t_0 – начальный момент времени при расчетах коэффициентов, $\langle \rangle$ – усредненное значение по состояниям системы.

Для ПГУ формула (4.14) будет давать корректный результат, но для этого необходимо ввести дополнительный массив координат и производить расчет диффузии по нему. Данный массив должен содержать атомные смещения без циклического возврата, т.е. без учета ПГУ.

Коэффициенты сдвиговой (динамической) μ и объемной μ_b вязкостей:

$$\mu = \frac{m^2}{2k_B T V} \frac{1}{t} \left\langle \frac{1}{3} \sum_{\alpha\beta} \left[\sum_i (r_{i,\alpha}(t_0 + t) \cdot v_{i,\beta}(t_0 + t) - r_{i,\alpha}(t_0) \cdot v_{i,\beta}(t_0)) \right]^2 \right\rangle, \quad \alpha\beta = xy, yz, zx \quad (4.15)$$

$$\mu_b = \frac{V}{2k_B T} \frac{1}{t} \left\langle \left[\frac{m}{3V} \sum_i (\mathbf{r}_i(t_0 + t) \cdot \mathbf{v}_i(t_0 + t) - \mathbf{r}_i(t_0) \cdot \mathbf{v}_i(t_0)) - \langle p \rangle t \right]^2 \right\rangle, \quad (4.16)$$

где V – объем исследуемой системы, k_b – постоянная Больцмана, T – температура, $\langle p \rangle$ – усредненное по времени значение давления системы.

Коэффициент относительной объемной вязкости определяется через коэффициенты сдвиговой и объемной вязкостей соотношением: $\zeta = \mu_b / \mu$.

При использовании ПГУ формулы (4.15) и (4.16) будут давать некорректный результат, т.е. их использовать в прямом виде нельзя [191].

На производствах наиболее часто используют коэффициент кинематической вязкости, получаемый из коэффициента сдвиговой вязкости:

$$\eta = \frac{\mu}{\rho}, \quad (4.17)$$

здесь ρ – плотность вещества.

Коэффициент теплопроводности определяется следующим образом:

$$\chi = \frac{1}{2k_B T^2 V} \frac{1}{t} \left\langle \frac{1}{3} \sum_{\alpha} [\delta E_{\alpha}(t_0 + t) - \delta E_{\alpha}(t_0)]^2 \right\rangle, \quad \alpha = x, y, z, \quad (4.18)$$

$$\delta E_{\alpha} = \sum_i r_{\alpha,i} E_i, \quad E_i = \frac{m \mathbf{v}_i^2}{2} + \varphi_i,$$

где E_i – мгновенная полная энергия молекулы i .

При использовании ПГУ соотношение Эйнштейна для теплопроводности (4.18) также в прямом виде использовать нельзя [191].

Расчет коэффициентов переноса (4.14)–(4.18) производится до тех пор, пока значения не выйдут на некоторую константу, так называемое плато. Значение коэффициента на этом плато и соответствует результату. Но для соотношения Эйнштейна время роста функции до данного значения может быть довольно большим, потому рассчитывают функции:

$$D'(t) = D \cdot t, \quad \mu'(t) = \mu \cdot t, \quad \mu'_b(t) = \mu_b \cdot t, \quad \chi'(t) = \chi \cdot t. \quad (4.19)$$

Эти функции строят в зависимости от времени, в результате получаются линии и по их наклону определяются коэффициенты. Время расчета коэффициентов существенно сокращается.

4.2.3 Моделирование кинетических коэффициентов по формулам Грина-Кубо на основе интегрирования автокорреляционных функций

В данном параграфе описывается метод расчета кинетических коэффициентов по формулам Грина-Кубо, в основе которого лежит интегрирование автокорреляционных функций скорости, тензора давления и потока теплоты. Эти формулы применимы при ПГУ и для их использования не нужны дополнительные массивы.

Коэффициент диффузии зависит от автокорреляционной функции скорости C^{DIFF} :

$$D = \frac{1}{N} \int_0^{\infty} \langle C^{DIFF} \rangle dt, \quad C^{DIFF} = \frac{1}{3} \sum_{\alpha} C_{\alpha\alpha}^{DIFF}, \quad (4.20)$$

$$C_{\alpha\alpha}^{DIFF} = \sum_i [v_{\alpha,i}(t_0 + t) \cdot v_{\alpha,i}(t_0)], \quad \alpha = x, y, z, \quad i = 1 \dots N.$$

Коэффициенты сдвиговой и объемной вязкостей зависят от автокорреляционной функций C^{VISC} и C^{BVISC} , определяемых через тензор давления:

$$\mu = \frac{1}{k_B TV} \int_0^\infty \langle C^{VISC} \rangle dt, \quad C^{VISC} = \frac{1}{3} \sum_{\alpha\beta} C_{\alpha\beta}^{VISC}, \quad C_{\alpha\beta}^{VISC} = p_{\alpha\beta}(t_0+t) \cdot p_{\alpha\beta}(t_0), \quad (4.21)$$

$$p_{\alpha\beta} = \sum_i m \cdot v_{\alpha,i} \cdot v_{\beta,i} + \sum_i \sum_{j>i} (r_{\alpha,i} - r_{\alpha,j}) \cdot (F_{\beta,i} - F_{\beta,j}), \quad \alpha\beta = xy, yz, zx, \quad i, j = 1 \dots N;$$

$$\mu_b = \frac{1}{k_B TV} \int_0^\infty \langle C^{BVISC} \rangle dt, \quad C^{BVISC} = \frac{1}{9} \sum_{\alpha,\beta} C_{\alpha\beta}^{BVISC}, \quad (4.22)$$

$$C_{\alpha\beta}^{BVISC} = [p_{\alpha\alpha}(t_0+t) - \langle p_{\alpha\alpha} \rangle] \cdot [p_{\beta\beta}(t_0) - \langle p_{\beta\beta} \rangle], \quad \alpha, \beta = x, y, z,$$

где $p_{\alpha\beta}$ – недиагональные компоненты тензора давления, $p_{\alpha\alpha}$ – диагональные компоненты тензора давления.

Коэффициент теплопроводности зависит от автокорреляционной функции потока теплоты C^{TCOND} :

$$\chi = \frac{1}{k_B T^2 V} \int_0^\infty \langle C^{TCOND} \rangle dt, \quad C^{TCOND} = \frac{1}{3} \sum_{\alpha} C_{\alpha\alpha}^{TCOND}, \quad C_{\alpha\alpha}^{TCOND} = [q_{\alpha}(t_0+t) \cdot q_{\alpha}(t_0)], \quad (4.23)$$

$$q_{\alpha} = \frac{d\delta E_{\alpha}}{dt} = \sum_i E_i v_i + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \mathbf{r}_{ij} (\mathbf{F}_{ij} \cdot \mathbf{v}_i), \quad \mathbf{F}_{ij} = \mathbf{F}_i - \mathbf{F}_j, \quad \alpha = x, y, z, \quad i, j = 1 \dots N.$$

Время расчета коэффициентов переноса (4.20)–(4.23) определяется временем релаксации автокорреляционной функции. Автокорреляционная функция будет затухать, стремиться к нулю и через некоторое время выйдет на стационар близкий к нулю. Транспортные коэффициенты следует считать не менее этого времени. На значения коэффициентов имеет большое влияние потенциал межмолекулярного взаимодействия, это следует учесть. Расчет коэффициентов по формулам Грина-Кубо не имеет ограничений на использование граничных условий, но более затратен по выполняемым операциям.

4.2.4 Моделирование кинетических коэффициентов с помощью смешанного подхода

Вычисления коэффициентов вязкости и теплопроводности являются затратными по числу и сложности операций, а в виду того по необходимым машинному времени и объему памяти. Коэффициент диффузии в сравнении с ними вычисляется гораздо проще, и нет никаких дополнительных ограничений, связанных с использованием ПГУ.

В данном параграфе предлагается использовать смешанный подход, основанный на определении коэффициентов вязкости и теплопроводности по формулам газовой динамики

[30], используя значения диффузии, посчитанные с помощью МД по соотношению Эйнштейна или формулам Грина-Кубо:

$$\mu = \frac{\rho \cdot D}{a}, \quad a = 1.3, \quad (4.24)$$

$$\chi = \zeta \cdot C_V \cdot \mu, \quad \zeta = \frac{1}{4}(9\gamma - 5), \quad \gamma = \frac{C_p}{C_V}, \quad (4.25)$$

где $\gamma = \gamma(T)$ – показатель адиабаты, C_V и C_p – удельные теплоемкости при постоянном объеме и при постоянном давлении, которые могут быть рассчитаны с помощью МД (более подробно об этом написано в параграфе 4.1) или взяты из экспериментальных данных [261].

В формуле (4.18) используется константа a , значение которой взято в обобщенном случае [30]. Данное обобщение в рассматриваемом диапазоне температур 100–700 К приводит к погрешности 1–10 % в зависимости от типа газа и температуры. Если необходима более высокая точность, то константу можно уточнить [351]: $a = 3A$, $A = A(\Omega)$, где Ω – интеграл столкновений [175, 244].

4.2.5 Результаты моделирования

Начальные условия включают распределения координат и скоростей частиц. Стартовое распределение координат частиц по объему в данной работе является равномерным и согласуется с плотностью, соответствующей выбранным значениям температуры и давления. Стартовое распределение скоростей частиц задается согласно выбранной температуре и реализует распределение Максвелла.

Рассматривалась система молекул азота N_2 , заключенных в некотором микрообъеме, при нормальных условиях ($T = 273.15$ К, $p = 101325$ Па). Микрообъем представляет собой куб со сторонами $L_x = L_y = L_z$, объем которого $V = L_x^3$. При выбранных условиях распределение частиц по данному кубу будет соответствовать кубической примитивной кристаллической решетке с длиной элементарной ячейки rcr и числом элементарных ячеек по каждому направлению k_x . Число частиц соответствует $N = (k_x)^3$, длина стороны куба $L_x = k_x \cdot rcr$.

Такой параметр, как плотность газа, хорошо известен при нормальных условиях. Плотность азота соответствует $\rho \approx 1.25$ кг/м³ [261], масса молекулы азота равна

$m = 46.517 \cdot 10^{-27}$ кг. Зная плотность и массу, можно найти общий объем $V = m \cdot N / \rho$, тогда длину элементарной ячейки можно определить как $rcr \approx \sqrt[3]{m/\rho}$.

Число частиц необходимо выбирать так, чтоб частиц было не очень много, чтоб было проще считать, но не очень мало, чтоб выборка была представительна и полученные результаты имели наименьшие отклонения. Наименьшим представительным размером для расчета транспортных коэффициентов является размер в $N = 27000$ частиц, что соответствует $k_x = 30$. Также были рассмотрены размеры системы при $k_x = 10, 20, 60, 90, 150$, которые показали, что для меньшего числа частиц большие отклонения, а для большего - точность выше, для $k_x = 90, 150$ можно не использовать усреднение по ансамблю, но объем необходимой машинной памяти и число операций повышаются в разы.

В качестве граничных условий рассмотрены условия периодичности с периодами L_x, L_y, L_z по осям x, y, z соответственно.

Для достижения желаемой температуры газа используется термостат Берендсена [196], реализующийся за счет перемасштабирования скоростей.

Методика получения средних характеристик состояла в следующем. Сначала рассчитывалась стартовая точка на р-Т диаграмме, соответствующая нормальным условиям. Расчет стартовой точки проводился для $N = 27000$ молекул азота в фиксированном объеме V .

Расчет выполнялся в 3 этапа. Сначала система приводилась в равновесие в условиях включенного термостата. Время термостатирования составляло 6 нс, что соответствует числу шагов $NSTEPS = 3000000$, 1 шаг равен $\Delta t = 2$ фс = 0.002 пс. Затем также в условиях термостатирования в течение 0.5 нс проводился первый расчет средних макропараметров газа. Далее в условиях выключенного термостата в течение еще 0.5 нс проводился второй расчет средних макропараметров газа. Сравнение макропараметров газа в первом и втором расчетах подтвердило достижение газовой системой состояния газодинамического равновесия. Выходными данными проведенных расчетов являются распределения координат и скоростей частиц системы, находящей в термодинамическом равновесии при выбранных температуре и давлении. Полученные массивы используются в дальнейших расчетах в качестве стартовых данных.

Основной расчет по вычислению транспортных коэффициентов стартует с равновесных координат и скоростей. Длительность счета составляла 2-3 нс, что соответствует $NSTEPS = 1000000 - 1500000$ шагов.

Прямой расчет коэффициента самодиффузии азота по соотношению Эйнштейна показал, что функция растет долгое время, на рисунке 4.6 можно увидеть, что время 2,6 нс не является достаточным для определения коэффициента, так как за это время функция еще не вышла на некоторое плато.

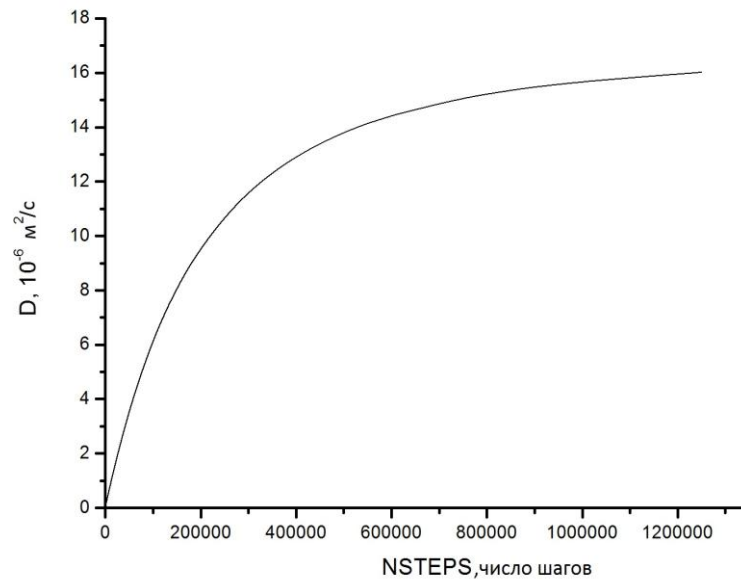


Рисунок 4.6 – Коэффициент самодиффузии азота, определенный по соотношению Эйнштейна

На рисунке 4.7 представлен график для диффузии через наклон функции (4.19).

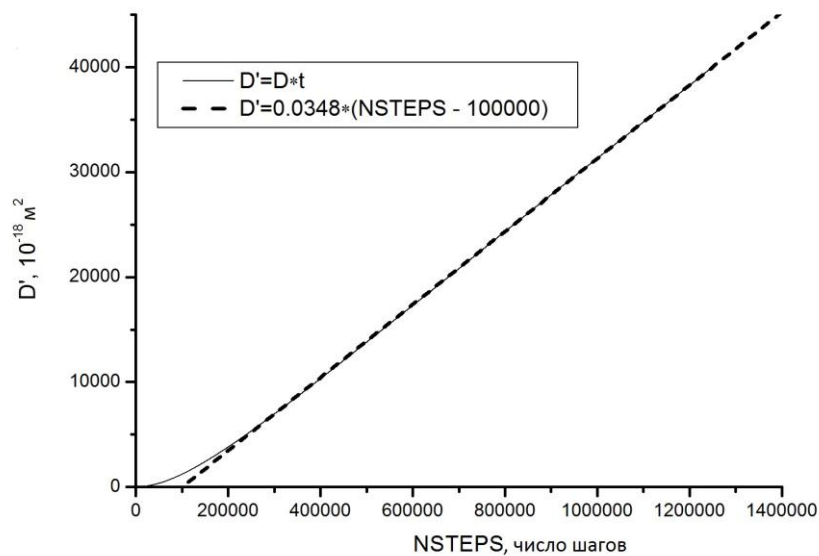


Рисунок 4.7 – Результат расчета коэффициента диффузии по наклону функции (4.19)

Для определения значения коэффициента диффузии по наклону строится функция (4.19) в зависимости от номера шага, на нее накладывается линейная аппроксимация и определяется величина наклона. Для данного расчета получаем наклон $\alpha_D = 0.0348$, тогда диффузия определяется как $D \sim \alpha_D / \Delta t = 0.0348 / 0.002 = 17.4$, $D = 17.4 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$.

Результаты расчетов коэффициента самодиффузии азота по формулам Грина-Кубо представлены на рисунке 4.8. Как видно из графика функция растет, пока не достигнет некоторого значения и выйдет на плато.

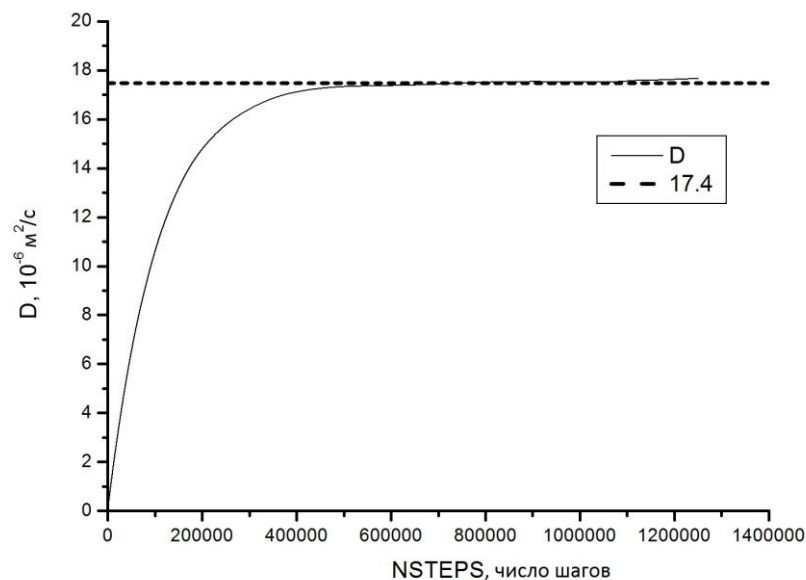


Рисунок 4.8 – Коэффициент самодиффузии азота, определенный по формулам Грина-Кубо

Рисунок 4.9 показывает график автокорреляционной функции скорости, затухание которой и выход на значение, близкое к нулю, подтверждает время установления значения диффузии. Таким образом, выход диффузии на корректное значение происходит с 1.2 нс, что соответствует $NSTEPS = 600000$ шагов. Расчет проводился до 2.6 нс, что является достаточным временем счета. Полученный результат согласуется с предыдущим расчетом $D = 17.4 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$.

Результаты расчетов коэффициента самодиффузии азота, полученные численно в данной работе, согласуются с высокой точностью с экспериментально полученными значениями $D = (17.2 \pm 0.2) \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$ [352] и численно полученными значениями [244], где $D = 17.4 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$.

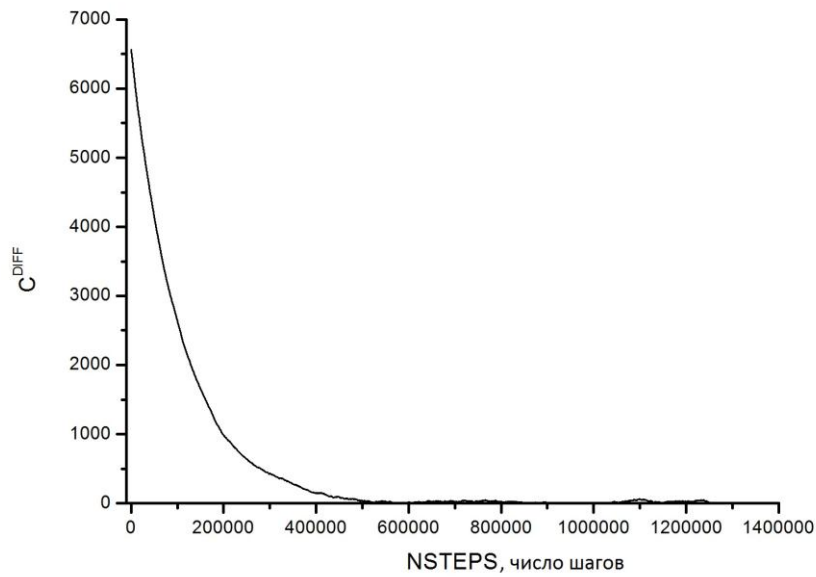


Рисунок 4.9 – Автокорреляционная функция скорости

Результаты расчетов коэффициента вязкости азота по формулам Грина-Кубо представлены на рисунке 4.10. Функция растет до выхода на некоторое значение, далее функция флуктуирует вокруг этого значения.

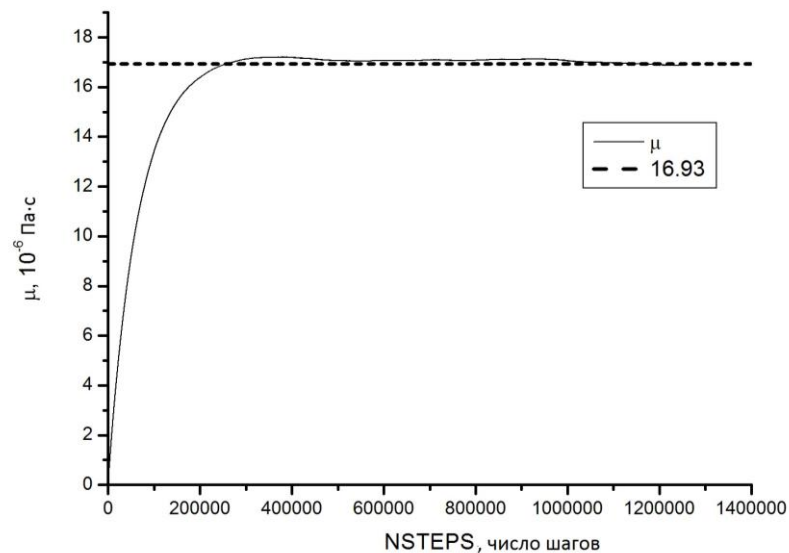


Рисунок 4.10 – Коэффициент вязкости азота, рассчитанный по формулам Грина-Кубо

На рисунке 4.11 изображен график автокорреляционной функции давления, затухание которой и выход на значение, близкое к нулю, аналогично рисунку 4.9, подтверждают время установления необходимого режима. Расчет проводился до 2.6 нс, что является достаточным

временем счета. Полученный численный результат $\mu = 16.93 \cdot 10^{-6}$ Па·с согласуется с экспериментальными значениями $\mu = (16.65 \pm 0.01) \cdot 10^{-6}$ Па·с [30, 261].

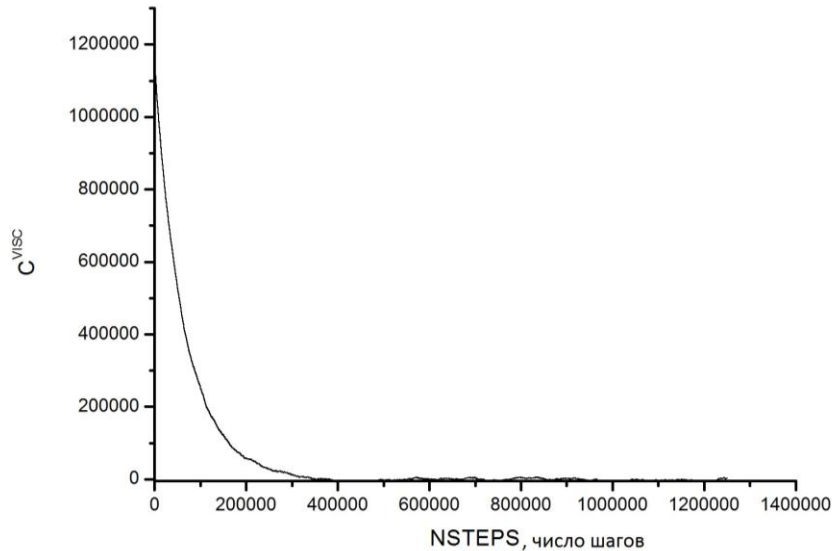


Рисунок 4.11 – Автокорреляционная функция давления

Для расчетов коэффициента вязкости и теплопроводности по смешанному подходу воспользуемся результатами молекулярно-динамического моделирования, а также значением удельной теплоемкости (например, из результатов параграфа 4.1 или из [261]) и получим значения: $\mu = 16.73 \cdot 10^{-6}$ Па·с и $\chi = 0.024$ Дж/(с·м·К) = 0.024 Вт/(м·К), что согласуется с экспериментальными данными [261] и данными, полученными с помощью формул Грина-Кубо.

4.3 Выводы по главе

- Рассмотрена проблема расчета макропараметров газовых сред методами молекулярно-динамического моделирования.
- Выбраны наиболее устойчивые и робастные алгоритмы расчета макропараметров: давления и внутренней энергии в соответствующих уравнениях состояния, коэффициентов сжимаемости, теплоемкости при постоянном объеме, вязкости, теплопроводности, диффузии.
- Получены конкретные температурные зависимости макропараметров азота в диапазоне комнатных и низких температур.

ГЛАВА 5

Молекулярно-динамические расчеты в пограничном слое

Исследование микротечений газа предполагает хорошее знание свойств материалов и сред, используемых в технологических процессах. При моделировании технических систем малых размеров, включающих микроканалы, по которым течет жидкость или газ, неизвестны точные условия и параметры взаимодействия флюидов со стенками каналов. В таких случаях обычно используются стандартные граничные условия прилипания или скольжения, которые, к сожалению, могут сильно исказить истинную картину течения. Одним из способов получения информации о реальных свойствах газовой среды и ее взаимодействия со стенками микроканалов является молекулярно-динамическое моделирование. В данной главе основное внимание уделяется газодинамическим процессам, происходящим на границе с поверхностями твердых материй. С помощью метода МД исследуются взаимодействия газа и металлической поверхности. Проведено моделирование процессов релаксации в системе газ-металл при заданных итоговых значениях температуры и импульса. Система состоит из газовой подсистемы в объемной геометрии и металлической подсистемы в форме пластины. Представлены результаты анализа процессов, происходящих в пограничном слое. Исследовано взаимодействие газового потока и металлической стенки с целью определения коэффициентов аккомодации (по плотности, импульсу, энергии) и параметров граничных условий. Описан подход по прямому МД вычислению на границе потоков массы, импульса и энергии, используемых в макроскопических моделях газовой динамики. Это позволяет рассчитывать единым образом как течения, характеризующиеся прилипанием газа к стенкам, так и течения, характеризующиеся скольжением газа вдоль стенки. Особенно важно использовать такой подход в случае нестационарных течений с переходным режимом вблизи стенок. В качестве примера газодинамической системы рассмотрена система молекул азота, в качестве материала стенок микроканала рассмотрен никель.

5.1 Математическая постановка в задачах молекулярно-динамического моделирования систем газ-металл

В данном параграфе приведена математическая постановка для задач моделирования взаимодействия газовой и металлической микросистем. При моделировании микроканала технической системы и протекающего через него газа рассматривается система, состоящая из двух подсистем: газовой подсистемы (один и более газов) и подсистемы, представляющей собой материал стенки микроканала (например, металл или металлический сплав). В параграфе описываются построение расчетной геометрии, уравнения движения, начальные и граничные условия, потенциалы взаимодействия всех компонент системы, описание принципов применения термостатов, численный алгоритм решения. Для простоты описания рассматривается система, состоящая из одного сорта газа и одного вида металла. В качестве газа выбрана система молекул азота, в качестве металла – система атомов никеля.

Физико-математическая модель на молекулярном уровне детализации представляется совокупностью частиц газа и металла, находящихся в некотором выделенном фиксированном объеме. При этом объем должен соответствовать оптимальному с точки зрения времени и сложности расчетов количеству частиц газа и металла, но при этом число частиц не должно было слишком маленьким для корректного представления статистических данных. Твердые структуры имеют более плотную упаковку, потому их значительно больше в одном и том же объеме. По перечисленным причинам геометрию необходимо выбирать таким образом, чтоб толщина металла была минимальна из модельно возможных, а высота области с газом соответствовала величине не менее нескольких длин свободного пробега. Рассматриваемая геометрия системы в общем виде изображена на рисунке 5.1.

Начальные условия на молекулярном уровне определяются равновесным термодинамическим состоянием системы частиц.

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

Металлические части задаются в геометрии пластин и 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.

По вышеописанным причинам до начала расчета взаимодействия на границе раздела сред необходимо провести этап подготовки. Данный этап вычислений заключается в приведении обеих подсистем (газовой и металлической) по отдельности в состояние термодинамического равновесия при выбранных температуре, импульсе и давлении. Вычисления на этом этапе происходят аналогично вычислениям, приведенным в Главе 3. Полученные равновесные распределения координат и скоростей при заданных условиях и будут являться начальными данными для последующего расчета задачи по взаимодействию газ-металл. Далее из подготовленных подсистем конструируется одна общая система, соответствующая геометрии рисунка 5.1, и проводятся исследования взаимодействия на границе раздела сред.

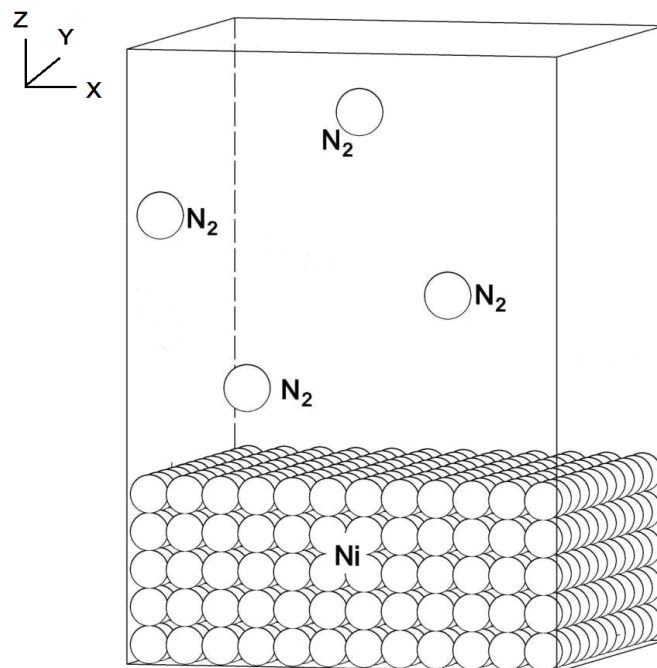


Рисунок 5.1 – Геометрия системы, используемая при постановке модельной задачи

Граничные условия на молекулярном уровне выбираются в зависимости от моделируемой ситуации. В представленной геометрии для моделирования процессов в пограничных слоях вдоль координатных осей x , y используются ПГУ с периодами L_x , L_y соответственно. По оси z микросистема имеет конечный размер. На верхней границе ставятся зеркальные условия, на нижней границе и на границе газ-металл специальные граничные условия не ставятся.

Управление температурой и скоростью потока газа осуществляется с помощью механизма термостатирования. В случае, когда необходимо поддерживать только температуру, можно использовать термостат Берендсена [196, 182] или термостат Ланжевена [173] с заданным нулевым потоком. В случае, когда нужно также поддерживать скорость потока, используют термостат Ланжевена с заданным потоком соответствующего значения. При этом учитывается, что в зонах взаимодействия газа с металлом, для которых рассчитываются интересующие характеристики, термостаты включать нельзя, так как они могут исказить картину взаимодействия. Во избежание таких ситуаций расчетная область разделяется на специальные слои по типам внешних влияний. Плоская проекция области с указанием четырех вертикальных слоев представлена на рисунке 5.2.



Рисунок 5.2 – Плоская проекция расчетной области с разделением на вертикальные слои, отличающиеся составом среды и способами внешнего влияния на нее: А – верхний слой газа с фиксированными параметрами, В – нижний слой газа, С – верхний слой металла, D – нижний слой металла с фиксированной температурой

В верхней вертикальной подобласти с газом (подобласти А) задается и поддерживается постоянная температура, также можно задать и поддерживать скорость газового потока.

В нижней вертикальной подобласти с газом (подобласть В) в начальный момент задаются условия, аналогичные условиям подобласти А, но со временем они будут изменяться в соответствии с внутренними процессами и переносом молекул на границах подобласти.

В верхней подобласти с металлом (подобласть С) параметры системы вычисляются естественным образом.

В нижней подобласти с металлом (подобласти D) задается и поддерживается постоянная температура.

Для описания движения частиц используется система дифференциальных уравнений (1.51) для двух видов частиц:

$$m_{l,i} \frac{d\mathbf{v}_{l,i}}{dt} = \mathbf{F}_{l,i}, \quad \mathbf{v}_{l,i} = \frac{d\mathbf{r}_{l,i}}{dt}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad l = a, b, \quad (5.1)$$

где i – номер частицы, $l = a, b$ – тип частиц (a – молекулы газа, b – 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 -ой 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.

В рамках решения задач взаимодействия газовых систем со стенками каналов исследуются процессы теплопередачи, для чего необходимо в некоторые области расчета вводить дополнительное тепло. Таким образом, система частиц не является замкнутой. В ней присутствует внешнее тепловое воздействие, позволяющее контролировать температуру системы.

Указанные выше силы представляют собой сумму сил взаимодействия i -й частицы с окружающими частицами, определяющихся функционалом потенциальной энергии, и сил внешнего воздействия:

$$\mathbf{F}_{l,i} = - \frac{\partial U(\mathbf{r}_{l,1}, \dots, \mathbf{r}_{l,N_l})}{\partial \mathbf{r}_{l,i}} + \mathbf{F}_{l,i}^{ext}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad l = a, b, \quad (5.2)$$

где U – суммарная потенциальная энергия, $\mathbf{F}_{l,i}^{ext}$ – сила взаимодействия с внешней средой (под внешней средой понимается термостатическое воздействие).

Потенциальная энергия системы представляется в виде суммы парциальных энергий, вычисление которых происходит по формуле выбранного потенциала взаимодействия. В случае моделирования системы газ-металл необходимо рассмотреть взаимодействия частиц газа друг с другом, частиц металла друг с другом и частиц газа с частицами металла, что соответствует трем потенциалам взаимодействия:

$$\begin{aligned}
 U &= U_{aa} + U_{bb} + U_{ab}, \\
 U_{aa} &= \sum_{i=1, j>i}^{N_a} \varphi_{aa}(|\mathbf{r}_{a,i} - \mathbf{r}_{a,j}|), \quad U_{ab} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_a} \sum_{j=1}^{N_b} \varphi_{ab}(|\mathbf{r}_{a,i} - \mathbf{r}_{b,j}|), \\
 U_{bb} &= \sum_{i=1}^{N_b} \left[\varphi_{1,bb}(\rho_{b,i}) + \sum_{j>i} \varphi_{2,bb}(|\mathbf{r}_{b,i} - \mathbf{r}_{b,j}|) \right], \quad \rho_{b,i} = \sum_{k \neq i} f(|\mathbf{r}_{b,i} - \mathbf{r}_{b,k}|), \quad k = 1, \dots, N_{b,i},
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

где U_{aa} , U_{bb} , U_{ab} – потенциальные функции взаимодействия для систем частиц газа с газом, металла с металлом и газа с металлом соответственно. Каждый вид взаимодействия описывается с помощью соответствующего потенциала $\varphi_{ll'}$. При этом U_{aa} , U_{ab} зависят только от парного взаимодействия, U_{bb} – потенциал ППА, включающий компоненту парного взаимодействия $\varphi_{2,bb}$ и компоненту $\varphi_{1,bb}$, учитывающую влияние окружения на определенную частицу. Компонента $\varphi_{1,bb}$ зависит от: $\rho_{b,i}$ – суммарная электронная плотность, создаваемая атомами системы, окружающими i -ую частицу типа b ; $f(r_{b,ik})$ – это электронная плотность, создаваемая k -ым атомом в месте расположения i -ого атома типа b , $N_{b,i}$ – число атомов, находящихся в соседстве с i -ым атомом типа b .

Для взаимодействия молекул азота между собой использовался потенциал Ми (1.70), который с учетом сглаживания имеет вид:

$$\varphi(r_{ij}) = \varepsilon \frac{n}{n-6} \left(\frac{n}{6} \right)^{\frac{6}{n-6}} \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^n - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] - \varphi_{cut}. \tag{5.4}$$

Для азота параметры потенциала принимают значения [167]: $n = 11.5$, $\varepsilon = 1.35 \cdot 10^{-21}$ Дж, $\sigma = 0.3649$ нм и функция сглаживания $\varphi_{cut} = \varphi(r_c)$.

Для взаимодействия атомов никеля между собой использовался потенциал ППА, общий вид которого представлен в (5.3). Форма потенциала была выбрана в соответствии с (1.74)–(1.76) [359]. Для удобства восприятия повторена здесь:

$$f(r) = \frac{f_e \exp(-\beta[r/r_e - 1])}{1 + (r/r_e - \lambda)^n}, \quad \varphi_2(r) = \frac{A \exp(-\alpha[r/r_e - 1])}{1 + (r/r_e - \kappa)^m} - \frac{B \exp(-\beta[r/r_e - 1])}{1 + (r/r_e - \lambda)^n},$$

$$\varphi_1(\rho) = \sum_{i=0}^3 \varpi_{n_i} \left(\frac{\rho}{\rho_n} - 1 \right)^i, \quad \rho < \rho_n, \quad \varphi_1(\rho) = \sum_{i=0}^3 \varpi_i \left(\frac{\rho}{\rho_e} - 1 \right)^i, \quad \rho_n \leq \rho < \rho_0, \quad (5.5)$$

$$\varphi_1(\rho) = \varpi_e \left[1 - \ln \left(\frac{\rho}{\rho_s} \right)^n \right] \left(\frac{\rho}{\rho_s} \right)^n, \quad \rho_0 \leq \rho.$$

Все параметры для никеля представлены в Таблице 3.1.

Для учета взаимодействий газ-металл использовался стандартный потенциал Леннарда-Джонса [262] в форме со сглаживанием (1.69):

$$\varphi(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] - \varphi_{cut}. \quad (5.6)$$

Параметры для потенциала рассчитывались по формулам Лоренца-Бершелота [198, 273]: $\varepsilon = 654.94 \cdot 10^{-21}$ Дж, $\sigma = 0.2795$ нм и функция сглаживания $\varphi_{cut} = \varphi(r_c)$.

При большом удалении частиц друг от друга значение энергии взаимодействия таких частиц становится мало. С целью оптимизации расчетов общепринято рассматривать потенциальную энергию (5.3) при условии:

$$U_{ij}(r \geq r_c) \equiv 0. \quad (5.7)$$

В рамках данной задачи радиус «обрезания» действия потенциалов был взят единым для всех видов взаимодействий и соответствовал $r_c = 0.9$ нм.

Система (5.1) решается с помощью схемы Верле в скоростной форме (1.78) по алгоритму (1.79). В случае термостатирования численная схема для зоны применения термостата меняется с учетом (1.80) или (1.82) в зависимости от выбранного термостата.

Общий алгоритм в слоях, свободных от внешнего воздействия:

- 1) Расчет новых координат частиц \mathbf{r}_i^{n+1} для момента времени, где n – номер шага.
- 2) Проверка граничных условий.
- 3) Вычисление парциальной U_i^{n+1} и полной потенциальных энергий системы U^{n+1} .
- 4) Определение сил \mathbf{F}_i^{n+1} , действующих на частицы.
- 5) Расчет новых скоростей частиц \mathbf{v}_i^{n+1} .

- 6) Вычисление кинетических энергий системы E_K^{n+1} и E_T^{n+1} .
- 7) Расчеты температуры T^{n+1} и давления P^{n+1} системы на данном шаге.
- 8) Вычисление полной энергии системы E^{n+1} .

Этапы 1) – 8) повторяются на каждом шаге по времени.

Общий алгоритм в случае использования термостата Берендсена:

- 1) Расчет новых координат частиц \mathbf{r}_i^{n+1} для момента времени, где n – номер шага.
- 2) Проверка граничных условий.
- 3) Вычисление парциальной U_i^{n+1} и полной потенциальных энергий системы U^{n+1} .
- 4) Определение сил \mathbf{F}_i^{n+1} , действующих на частицы.
- 5) Расчет новых скоростей частиц \mathbf{v}_i^{n+1} .
- 6) Вычисление коэффициента λ и перемасштабирование скоростей.
- 7) Вычисление кинетических энергий системы E_K^{n+1} и E_T^{n+1} .
- 8) Расчеты температуры T^{n+1} и давления P^{n+1} системы на данном шаге.
- 9) Вычисление полной энергии системы E^{n+1} .

Этапы 1) – 9) повторяются на каждом шаге по времени.

Общий алгоритм в случае применения термостата Ланжевена:

- 1) Расчет скоростей $\mathbf{v}_i^{n+1/2}$ по силам прошлого шага \mathbf{F}_i^n
- 2) Расчет новых координат частиц \mathbf{r}_i^{n+1} .
- 3) Проверка граничных условий.
- 4) Вычисление парциальной U_i^{n+1} и полной потенциальных энергий системы U^{n+1} .
- 5) Определение сил \mathbf{F}_i^{n+1} , включающих силы взаимодействия и внешнего воздействия.
- 6) Расчет новых скоростей частиц \mathbf{v}_i^{n+1} .
- 7) Вычисление кинетических энергий системы E_K^{n+1} и E_T^{n+1} .
- 8) Расчеты температуры T^{n+1} и давления P^{n+1} системы на данном шаге.
- 9) Вычисление полной энергии системы E^{n+1} .

Этапы 1) – 9) повторяются на каждом шаге по времени.

Общий алгоритм расчета представляет собой следующую последовательность действий.

В начальный момент времени подготавливают отдельно равновесные газовую и металлическую системы, либо берут уже готовые равновесные распределения координат и скоростей всех

частиц, если есть насчитанная заранее база данных. Далее конструируют из равновесных систем единую систему с общим видом в соответствии с геометрией, представленной на рисунке 5.1. После чего решаются уравнения движения согласно описанным выше алгоритмам с учетом внешнего воздействия на систему, которое осуществляется с помощью термостатов в соответствии с зонами их применения, представленными на рисунке 5.2.

5.2 Молекулярно-динамическое моделирование термодинамического равновесия в системах газ-металл

Для выполнения вычислительного эксперимента по взаимодействию газовых потоков с металлическими поверхностями технических установок используемые металлические и газовые микросистемы должны быть специальным образом подготовлены, а именно должны быть собраны в необходимой геометрии, находиться при выбранной температуре и желаемом давлении с минимальными осцилляциями, т.е. находиться в термодинамическом равновесии. Для реализации этого подготовительного этапа были проведены расчёты, результаты которых приведены в данном разделе. Целью подготовительных расчетов было определение равновесных макропараметров (средние температура, давление и др.) и оптимальных параметров численного алгоритма для задачи релаксации смешанной микросистемы, состоящей из газовой и металлической подсистем.

Начальными данными для расчета единой системы были распределения равновесных координат и скоростей подсистем газа и металла, полученных на подготовительных этапах.

Моделирование термодинамического равновесия в металлической микросистеме в форме пластины, состоящей из атомов никеля, проводилось в соответствии с расчетами, представленными в параграфе 3.3.2 Главы 3. Пластина рассматривалась с размерами $k_x \times k_y \times k_z = 288 \times 288 \times 24$ элементарных ячеек с ребром элементарной ячейки $r_{cr} = 0.353140$ нм, соответствующим ненапряженному состоянию пластины при температуре $T = 273.15$ К.

Моделирование термодинамического равновесия в газовой микросистеме в объемной геометрии, состоящей из молекул азота, проводилось аналогично расчетам, представленным в параграфе 3.2.1 Главы 3. Размеры газовой микросистемы брались в соответствии с размерами металлической системы для упрощения дальнейшего конструирования общей модели. Потому

рассматривался фиксированный объем с размерами $k_x \times k_y \times k_z = 288 \times 288 \times 288$ элементарных ячеек с ребром элементарной ячейки $r_{cr} = 0.353140$ нм, что соответствует объему микросистемы $V = (101.7)^3$ нм³. Система исследовалась при давлении $p = 101325$ Па, в трех разных вариантах температур: $T = 273.15; 200; 346.3$ К.

Смешанная микросистема конструируется из описанных выше подсистем, разделенных на зоны влияния термостатов, а также включает дополнительно узкие вакуумные слои для возможности постепенного детального исследования физических процессов, происходящих около металлической поверхности. В расчетах данного параграфа для термостатирования системы использовался термостат Берендсена.

Таким образом, микросистема состоит из шести основных слоев: слой вакуума, слой никеля с термостатом, слой никеля без термостата, слой вакуума, слой азота без термостата, слой азота с термостатом. Геометрия представлена на рисунке 5.3.

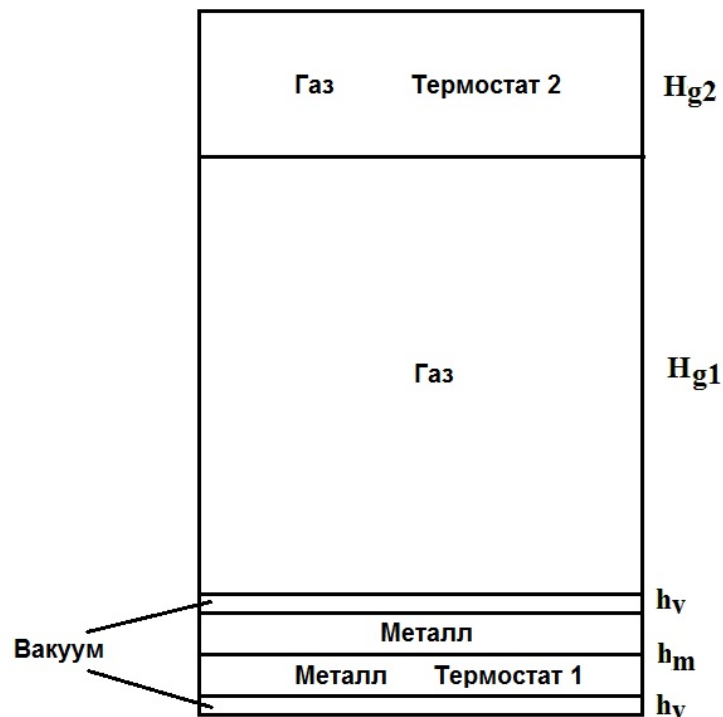


Рисунок 5.3 – Начальное состояние смешанной микросистемы

Размеры микросистемы: $k_x \times k_y \times k_z = 288 \times 288 \times 4356$ элементарных ячеек. Поперечные размеры микросистемы составляют 288 элементарных ячеек или 101.70432 нм по каждому

направлению. Общая высота микросистемы составляет 4356 элементарных ячеек или 1538.27784 нм. Первый и второй вакуумный слои одинаковы по высоте, которая составляет 6 элементарных ячеек или 2.11884 нм. Первый и второй металлический слои одинаковы по высоте и в сумме составляют 24 элементарных ячейки или 8.47536 нм. Первый слой газа имеет высоту 2880 элементарных ячеек или 1017.0432 нм. Второй слой газа в 2 раза меньше и имеет высоту 1440 элементарных ячеек или 508.5216 нм.

В начальный момент времени микросистемы металла и газа независимы. В них содержится соответственно 8128512 атомов никеля и 423840 молекул азота. Со временем они начинают взаимодействовать друг с другом. При этом суммарная высота и ширина (и соответственно объем) и количество частиц в смешанной микросистеме в расчетах не изменяются. Это достигается тем, что с боков объема используются ПГУ, снизу добавлен вакуумный слой, а сверху используются граничные условия типа зеркала.

Поскольку смешанная микросистема изготовлена путем тиражирования соответствующих микросистем меньшего размера, находящихся в термодинамическом равновесии, то ее стартовое состояние характеризуется средней температурой 273 К, средним давлением в 1 атмосферу в газовой части и средним вертикальным давлением -0.511 МПа в металле (что для металла практически равно 0).

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

Все макропараметры газа и металла вычисляются как средние по набору частиц в слоях по вертикальной оси микросистемы. При этом проникновение молекул азота в структуру никелевой решетки не происходит ввиду рассмотрения процессов в диапазоне температур от 80 до 600 К [43, 56, 203, 239, 271, 294] и сравнимых размеров молекул азота и атомов никеля.

Было проведено три варианта расчетов. Первый вариант характеризовался тем, что обе температуры термостатов совпадали и были равны 273.15 К. Во втором варианте температура нижнего термостата была равна 273.15 К, а верхнего термостата равна 200 К. В третьем варианте температура нижнего термостата была равна 273.15 К, а верхнего термостата равна 346.3 К. Температура верхнего термостата устанавливалась мгновенно, то есть уже на первом

же шаге расчета. Вычисления проводились достаточно долгое время вплоть до начала процесса адсорбции молекул азота на поверхности никеля.

Сначала приведены результаты первого варианта расчета. Поскольку температуры термостатов в этом случае совпадают, то основным процессом в данном случае является именно адсорбция. Она состоит из нескольких стадий, начальная из которых рассчитана достаточно подробно. Эта стадия имеет несколько характерных моментов. Первый из них связан с тем, что газ постепенно заполняет два вакуумных слоя и начинает взаимодействовать с поверхностью никеля. Длительность этого процесса составляет несколько пикосекунд при величине одного шага в 2 фемтосекунды. Далее начинается процесс адсорбции молекул азота, и небольшое вертикальное сжатие металлического слоя. В итоге этот процесс должен привести к существенному разрежению газа в свободном пространстве и накоплению большей части газа вблизи поверхности металла. Время стабилизации процесса может быть очень велико (десятки наносекунд).

На рисунках 5.4 и 5.5 приведены данные о заполнении слоев смешанной микросистемы в моменты времени 0 и 0.6 нс.

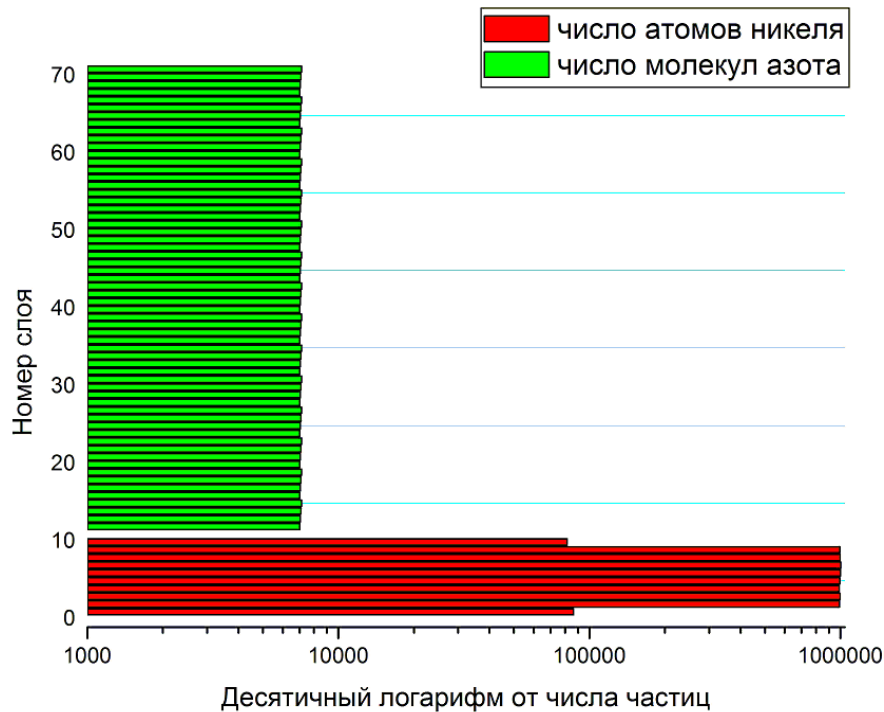


Рисунок 5.4 – Распределение частиц по слоям смешанной микросистемы в начальный момент для варианта 1

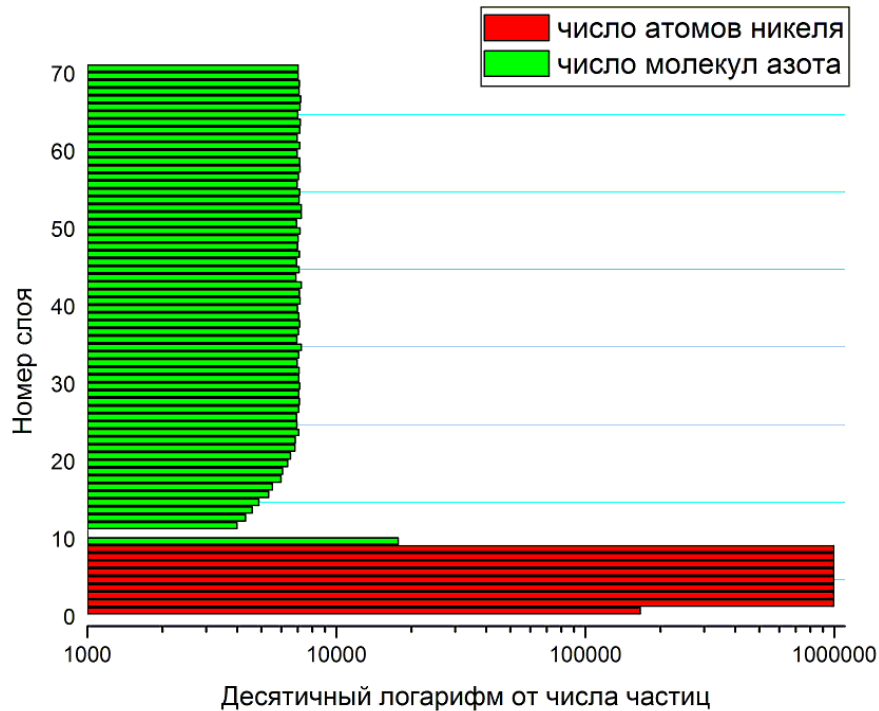


Рисунок 5.5 – Распределение частиц по слоям смешанной микросистемы в момент времени 0.6 нс для варианта 1

Сравнение данных на рисунках 5.4 и 5.5 подтверждает, что в начальный момент металлическая и газовая микросистемы были разделены вакуумным слоем, а в момент времени 0.6 нс они уже смешались. При этом никель сжался (теперь он занимает 7 слоев, а не 9) и произошло существенное накопление молекул азота вблизи поверхности никеля.

Над адсорбированной частью газа образуется тонкий пограничный слой, который содержит малое число молекул и определяет условия прилипания-скольжения газа к стенке при возникновении бокового течения.

Качественная картина адсорбции изображена на рисунках 5.6 и 5.7. На рисунке 5.6 показан фрагмент распределения молекул азота вблизи поверхности никеля в момент времени 0.6 нс для варианта 1. На рисунке 5.7 показано это же распределение с учетом температуры отдельных молекул. Размер представленной области соответствует площади $20 \times 20 \text{ нм}^2$.

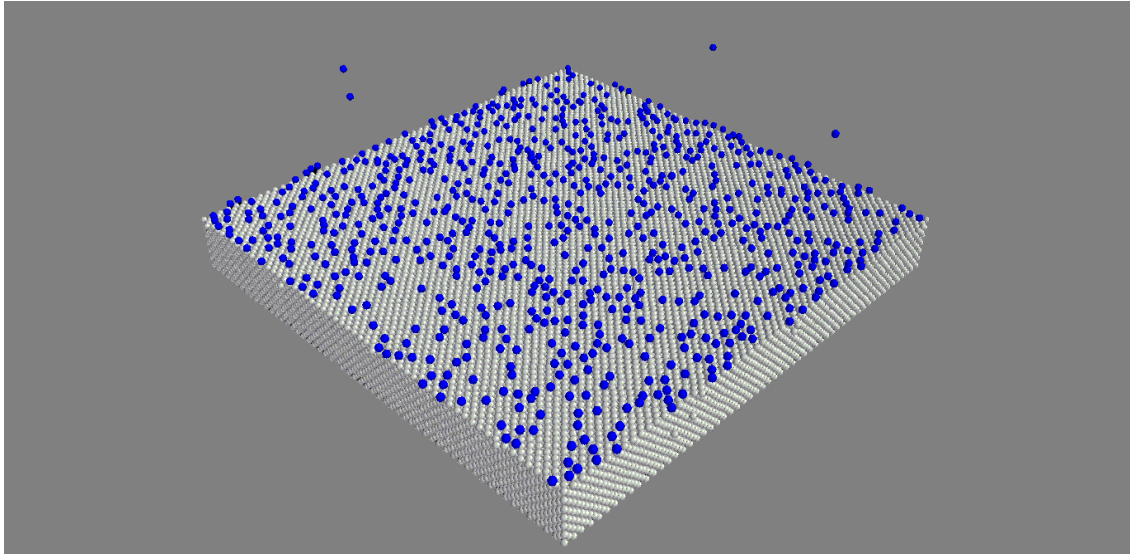


Рисунок 5.6 – Фрагмент распределения молекул азота (область 20x20 нм), адсорбированных на поверхности никелевой пластины, в момент времени 0.6 нс для варианта 1

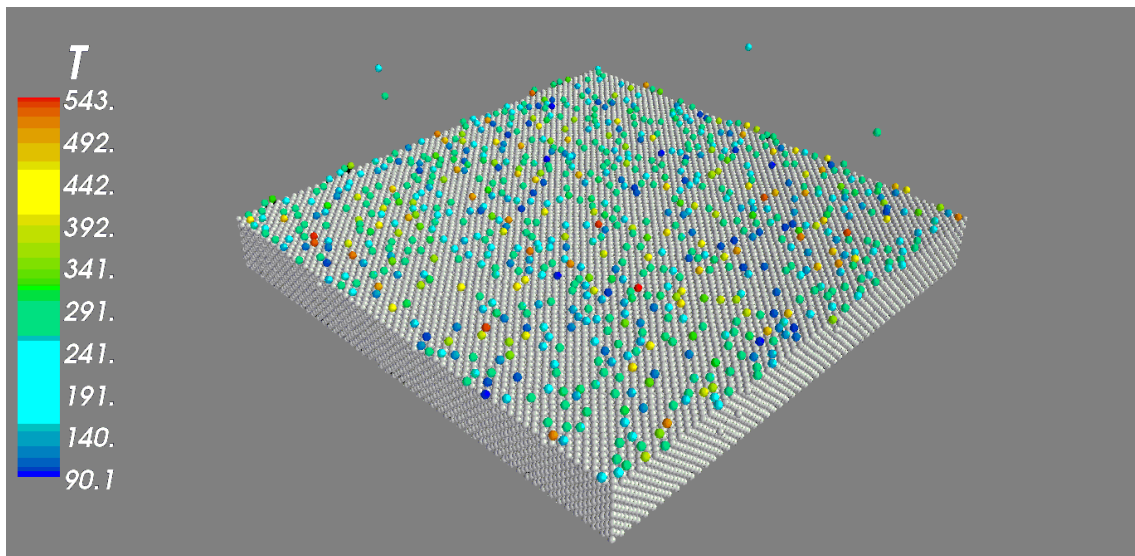


Рисунок 5.7 – Распределение температур молекул азота, адсорбированных на поверхности никелевой пластины, в момент времени 0.6 нс для варианта 1

Далее представлены результаты расчетов в вариантах 2, 3 в сравнении с расчетом варианта 1. Следует подчеркнуть, что в вариантах 2 и 3 адсорбция сопровождается соответственно остыванием и нагревом газа в объеме до температуры термостата и изменениями давления. В результате возникают характерные профили температуры и давления газа вдоль вертикальной оси. На рисунках 5.8 и 5.9 показаны профили температуры и давления в газе для всех трех вариантов в момент времени 0.6 нс.

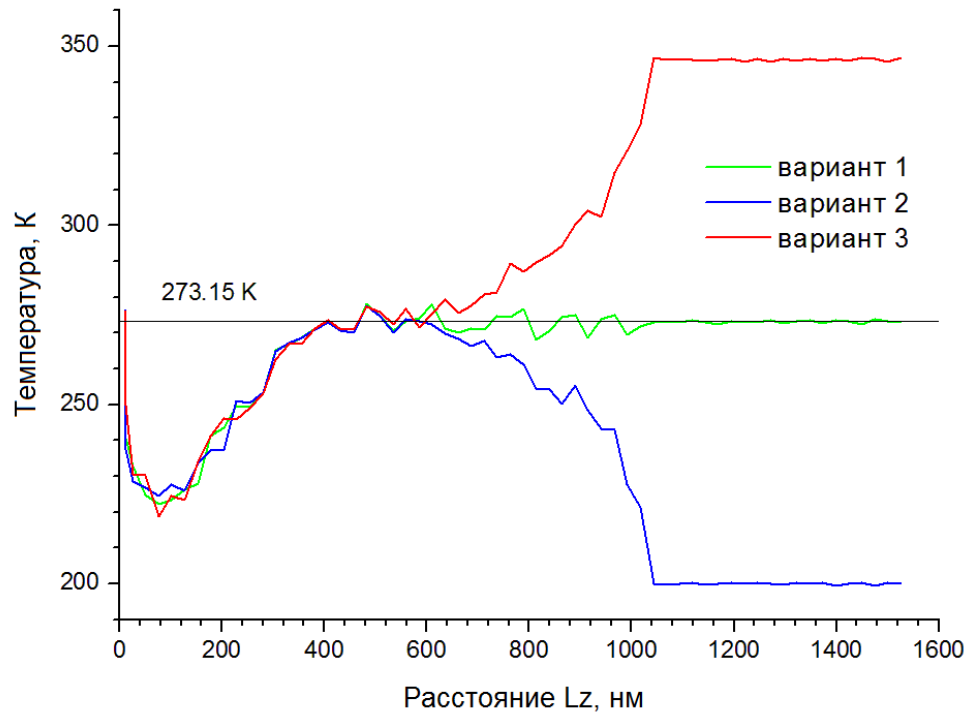


Рисунок 5.8 – Мгновенные профили температуры азота вдоль вертикальной оси СМС в момент времени 0.6 нс для вариантов 1, 2, 3

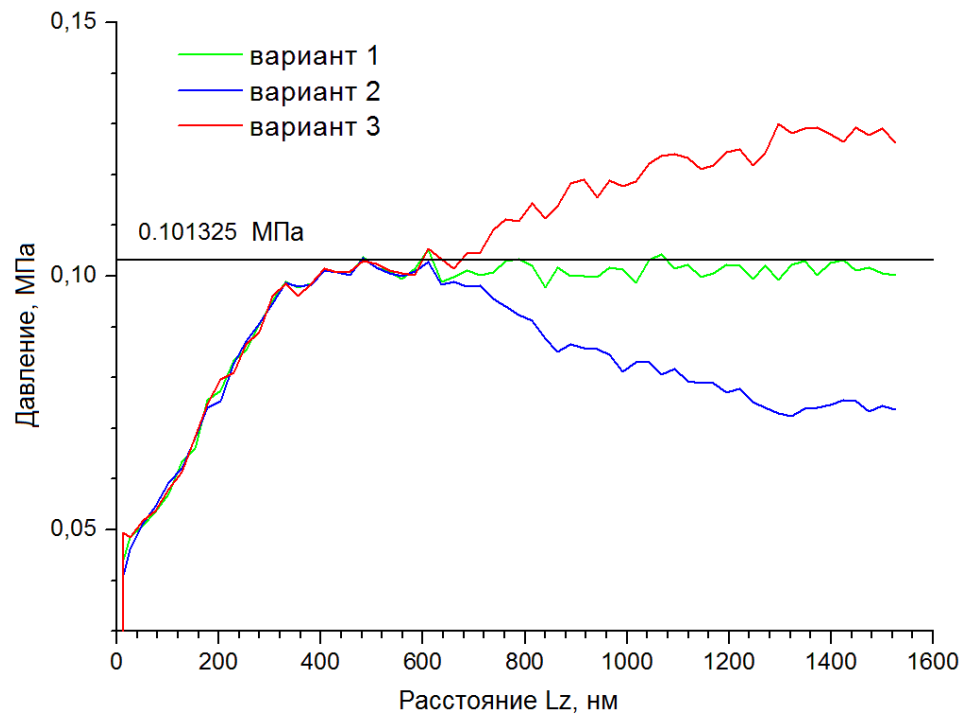


Рисунок 5.9 – Мгновенные профили давления азота вдоль вертикальной оси СМС в момент времени 0.6 нс для вариантов 1, 2, 3

На рисунке 5.10 показаны мгновенные распределения концентрации азота вдоль вертикальной оси в различные моменты времени, а на рисунке 5.11 динамика максимума концентрации азота вблизи поверхности никеля. Эти данные показывают, что процесс адсорбции начинается в период времени порядка нескольких пикосекунд и имеет несколько периодов, характеризующихся скачкообразным ростом концентрации азота вблизи поверхности никеля. В результате этого процесса газ вдали от поверхности никеля становится все более разреженным. Это обусловлено отсутствием притока газа через граничное условие типа зеркала в верхней части газового столба в подобласти А (рисунок 5.2). На практике такая ситуация реализуется в узком микроканале, нижняя часть которого покрыта никелем, а верхняя состоит из аморфного материала, например, стекла. Также из рисунков 5.10 и 5.11 видно, что равновесие в такой системе устанавливается за длительный период времени порядка нескольких наносекунд и связано с формированием монослоя молекул азота (в положении $z \sim 11$ нм на расстоянии 1-1.5 нм от пластинки) и обеднением газового столба вблизи верхней границы.

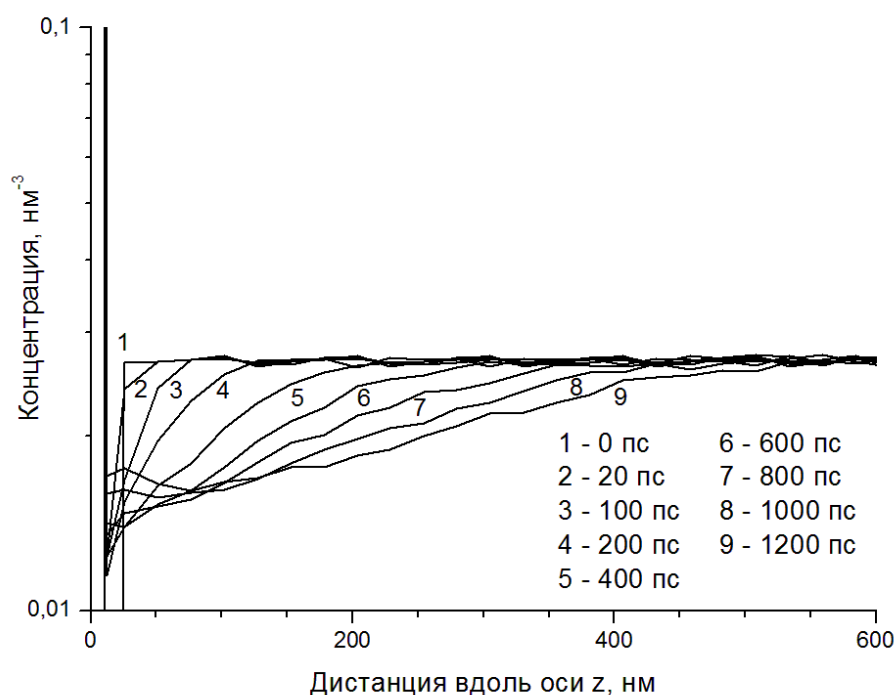


Рисунок 5.10 – Мгновенные профили концентрации азота вблизи поверхности никеля в различные моменты времени. В положении $z \sim 11$ нм видно формирование монослоя азота.

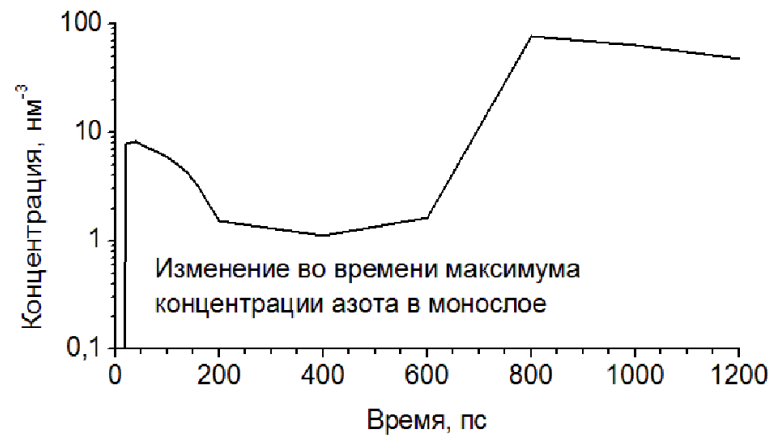


Рисунок 5.11 – Эволюция концентрации азота в монослое показана на рисунке-вставке

На рисунке 5.12 показаны усредненные распределения давления и температуры в азоте спустя достаточно большое время после начала процесса адсорбции.

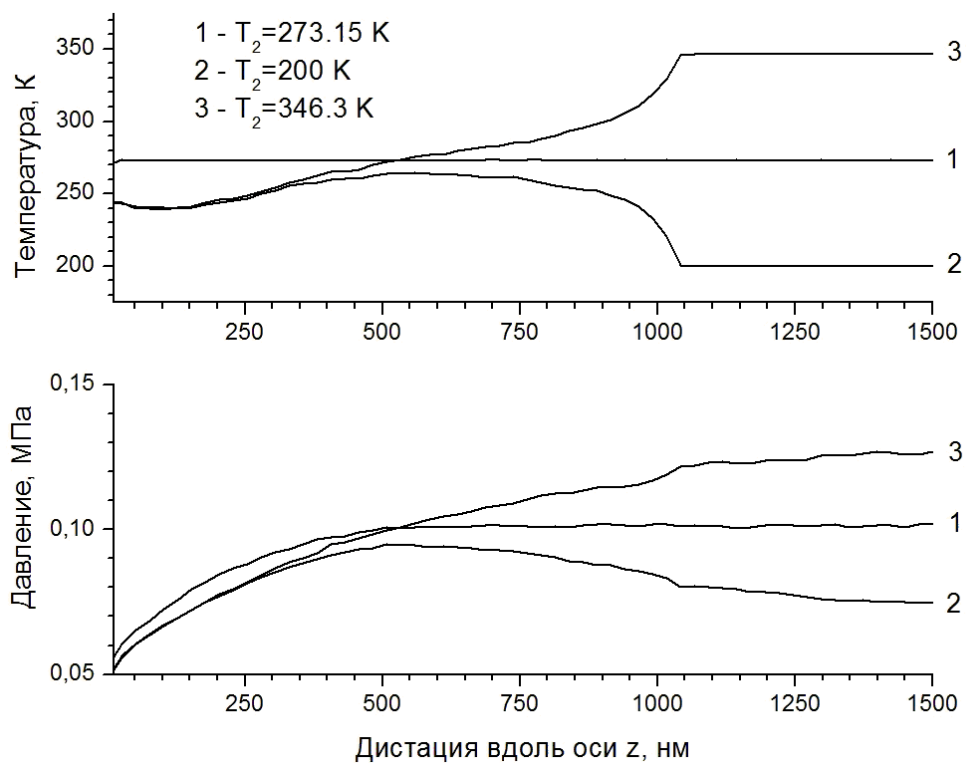


Рисунок 5.12 – Осредненные профили давления и температуры газовой подсистемы в момент времени 1500 пс.

Распределения показывают, что температура газа в варианте 1 вблизи поверхности никеля отличается от температуры термостата, поскольку в этой области происходит адсорбция. В вариантах 2 и 3 это отличие более существенно, поскольку температуры верхних термостатов отличаются от температуры поверхности никеля. С другой стороны, вдали от поверхности никеля температура газа практически совпадает с температурой термостата, в том числе, в вариантах 2 и 3.

Профили давления газа ведут себя в соответствии с уравнением состояния реального газа (которое в МД расчетах воспроизводится с точностью до второго вириального коэффициента). Вблизи поверхности никеля давление в газе уменьшается ввиду падения его концентрации, вдали давление в основном зависит от изменений температуры при почти фиксированной концентрации.

Таким образом, качественная картина процесса совпадает с общими представлениями о процессе адсорбции газа на металлической поверхности [43, 158, 203, 239, 246, 294, 324].

Дальнейшее установление термодинамического равновесия в рассматриваемой микросистеме связано с процессом образования стационарного профиля концентрации газа и множественным отражением волн температуры и давления от нижней и верхней границ расчетной области. В итоге должны сформироваться более гладкие распределения этих макропараметров вдоль вертикальной оси. Указанные процессы протекают достаточно медленно, и достигнутые в данном расчете времена еще не совсем соответствуют термодинамическому равновесию системы газ-металл. Тем не менее, полученные для представленного момента времени данные позволяют перейти к расчетам состояний смешанных микросистем в условиях развитых течений газа и более сложной пространственной геометрии.

5.3 Молекулярно-динамическое моделирование граничных условий и их параметров при взаимодействии газового потока с металлической пластиной

В данном параграфе рассматривается задача по взаимодействию газового потока с металлической пластиной с целью расчета параметров граничных условий и коэффициентов

аккомодации на границе взаимодействия. Процесс взаимодействия рассчитывается при учете обмена массой, импульсом и энергией молекул газа с атомами пластины.

Как отмечается в [67], исследованию процессов аккомодации импульса и энергии при взаимодействии газов с поверхностями твердых материалов посвящено большое количество экспериментальных и теоретических работ. Первоначально данная задача была востребована в аэродинамике разреженного газа [2, 14] и решалась методами статистической физики. Однако в последнее время интерес к ней снова усилился вследствие развития нанотехнологий, а именно, при анализе течений газа в микро- и наноканалах технических систем. В этой ситуации стали применяться новые математические подходы, в том числе связанные с молекулярно-динамическим моделированием.

В работе [67] приведен пример расчета коэффициентов аккомодации молекул водорода к поверхности графита. Применяемая там методика близка к методике, представляемой в этом параграфе. Однако в отличие от работы [67] здесь предлагается вычисление не только равновесных коэффициентов аккомодации (что достигается усреднением по времени), но и их мгновенных значений. Дело в том, что процесс аккомодации является существенно нестационарным и относительно быстро протекающим. Как показано в предыдущем параграфе даже при расчете термодинамического равновесия покоящегося газа вблизи металлической поверхности процесс аккомодации (адсорбции) протекает в несколько стадий. Первая стадия характеризуется накоплением молекул газа вблизи поверхности металла. Вторая стадия характеризуется взаимодействием адсорбированных молекул с атомами металла и молекулами вышележащих газовых слоев. При заметном движении газовой среды вдоль поверхности возникают нестационарные процессы, связанные с чередованием первой и второй стадий. В этой ситуации предлагается несколько иная схема расчетов.

Общий вид микросистемы газ-металл соответствует рисунку 5.2. Детальная геометрия задачи для удобства представлена средним сечением расчетной области по координате y (см. рисунок 5.13). Как видно из рисунка, среднее сечение расчетной области имеет следующие размеры: L – длина вдоль координаты x , $H = h_0 + h_1 + h_2 + h_3$ – высота вдоль координаты z , складывающаяся из высот h_k ($k = 0, 1, 2, 3$). В третьем измерении y расчетная область имеет толщину D . В нижней части области располагается металлическая поверхность, разделенная на два слоя. Верхний слой металла взаимодействует с газом. Нижний слой металла сбрасывает избыточную энергию и импульс. Газовая среда разделена на две части. Верхняя часть соответствует набегающему потоку с заданной продольной скоростью, нижняя часть,

изначально покоившаяся, приходит постепенно в движение и одновременно формирует адсорбционный слой молекул газа на поверхности металла.

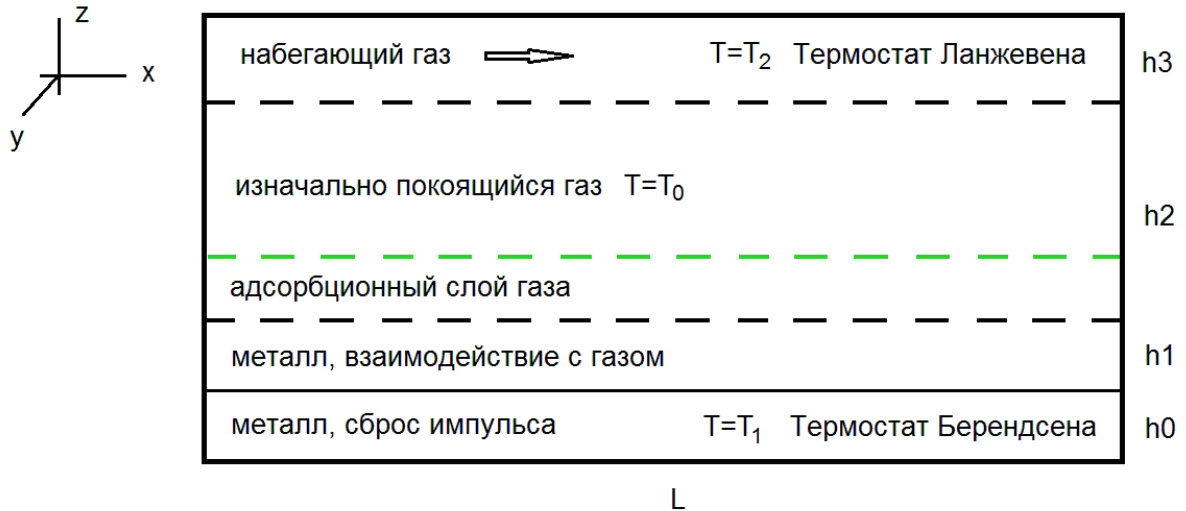


Рисунок 5.13 – Среднее сечение расчетной области

Параметрами расчета являются: температуры T_1 , T_0 , T_2 металла, покоящегося и набегающего газовых потоков, а также продольная скорость v_x набегающего газового потока. Температура нижней части металлической пластины поддерживается термостатом Берендсена. Положение пластины фиксировано, для чего ее суммарный импульс поддерживается равным нулю. Газ в набегающем потоке также имеет фиксированную температуру и импульс, что определяется использованием термостата Ланжевена. Изначально покоящийся газ и частично адсорбированный на поверхности металла газ со временем приобретают температуры T и импульсы \mathbf{P} (распределенные по высоте и длине), отличные от импульсов набегающего потока и пластины.

Задача расчета состоит в определении динамики величин T и \mathbf{P} во всей расчетной области, а также толщины адсорбционного слоя газа h_a и основных макропараметров газа в нем: ρ_a , T_a , p_a и $\mathbf{P}_a = m_g \mathbf{v}_a$ (индексом «а» обозначаются макропараметры молекул газа в адсорбционном слое). Эти данные получают непосредственно из молекулярно-динамических расчетов. Расчеты на молекулярном уровне проводятся в три этапа.

На первом этапе производится расчет параметров металлической и газовой систем в условиях термодинамического равновесия и отсутствия течения $v_x = 0$. Для этого

рассчитываются по отдельности металлическая пластина при температуре T_1 по аналогии с расчетами параграфа 3.3.2 Главы 3 и две компоненты газовой среды с температурами T_0 и T_2 по аналогии с расчетами параграфа 3.2.1 Главы 3. В расчетах используются ПГУ по двум координатам (x и y) для металла и по всем трем координатам для газа. В этом начальном расчете используются только термостаты Берендсена.

На втором этапе производится сборка трех систем в единую атомно-молекулярную систему, показанную на рисунке 5.13, и производится расчет до формирования совместного термодинамического равновесия системы металл-газ аналогично предыдущему параграфу. В качестве граничных условий по координатам x и y в этом случае также используются ПГУ. В направлении оси z условий периодичности нет, нижние слои металла держатся за счет потенциала взаимодействия в своей решетке. На границе металла с газовыми частицами также никаких специальных граничных условий не предполагается. На верхней границе газовой среды поставлено условие зеркального отражения. Целью расчетов второго этапа является определение параметров адсорбционного слоя.

На третьем этапе производится расчет, связанный с разгоном верхней части газа до заданной скорости $v_{x,\max}$ путем включения термостата Ланжевена с той же температурой T_2 , что и в термостате Берендсена. При этом темп изменения продольной скорости может быть бесконечным (при существенно дозвуковом режиме стартового течения) или конечным. Предлагается в любой ситуации (вне зависимости от режима стартового течения) изменять величину скорости потока в термостате Ланжевена плавно, например, по формулам:

$$v_x(t) = \begin{cases} 0, & t < t_0, \\ v_{x,\max} \cdot f(t), & t \geq t_0, \end{cases} \quad f(t) = 1 - \exp\left[-\frac{t-t_0}{\tau_0}\right]. \quad (5.8)$$

Здесь t_0 – время включения термостата Ланжевена, τ_0 – интервал изменения временного профиля скорости $f(t)$, в зависимости от величины $v_{x,\max}$ может быть либо совсем малым (совпадать с шагом схемы Верле Δt), либо иметь длительность порядка десятка или сотни пикосекунд.

Целью третьего этапа расчета является определение коэффициентов аккомодации. Однако перед тем как выбрать окончательные формулы для их определения, следует уточнить состояние газа вблизи поверхности металла. Для этого необходимо сначала рассмотреть результат, получаемый на втором этапе расчетов.

При формировании совместного равновесного состояния системы металл-газ различают две ситуации. В первой ситуации при умеренных температурах и давлениях проникновение молекул газа в решетку металла не происходит (межатомные пространства в решетке металла оказываются меньше эффективного диаметра молекул газа). Во второй ситуации при нарушении указанных условий проникновение молекул газа в решетку металла происходит, но с течением времени этот процесс выходит на насыщение, и поглощение газа металлом прекращается. В дальнейшем для упрощения анализа будет рассматриваться только первая ситуация, которая характерна для исследуемого взаимодействия азота и никеля [43, 56, 203, 233, 239, 271, 294]. Тогда ширина адсорбционного слоя будет слабо зависеть от меняющихся параметров газа в объеме и будет определяться только потенциалом взаимодействия молекул газа с атомами металла.

С учетом выше сказанного при соблюдении соответствующих условий на второй стадии расчета формируется первичный адсорбционный слой с фиксированной высотой h_a^0 , которая определяется по скачку плотности или концентрации газа вблизи поверхности металла. По сути h_a^0 есть ширина скачка на одномерном графике плотности, построенном в зависимости от координаты z (см. рисунок 5.14).

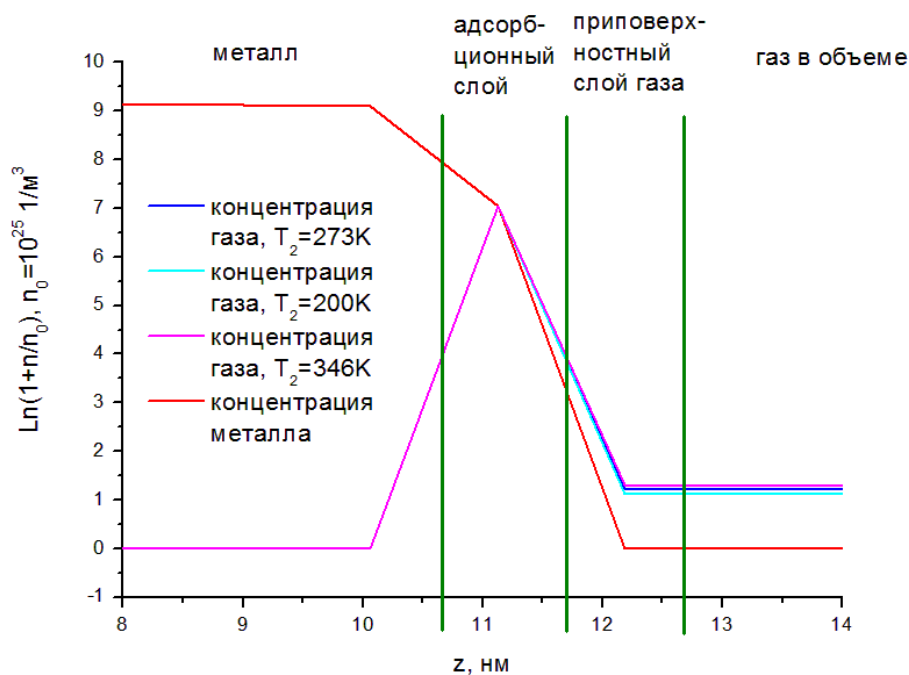


Рисунок 5.14 – Структура системы никель-азот в состоянии термодинамического равновесия при температурах верхнего термостата 273, 200 и 346 К

В качестве подтверждения на рисунке 5.14 показаны результаты расчетов установления термодинамического равновесия системы никель-азот при равенстве всех трех температур $T_1 = T_2 = T_0 = 273.15$ К, а также при $T_2 = 200$ К и 346.3 К (все параметры моделируемой системы описаны в предыдущем параграфе). Нормированные распределения концентраций никеля и азота показаны в логарифмической шкале на момент времени, при котором мгновенные и усредненные по времени распределения совпадают, что и свидетельствует об установлении термодинамического равновесия.

Ширина адсорбционного слоя h_a^0 в расчетах составила примерно 1.06 нм, что соответствует трем длинам решетки никеля ($rcr = 0.353140$ нм при $T_1 = 273$ К, значения получены в параграфе 3.3.2 Главы 3). Из рисунка 5.14 также видно, что при изменении температуры верхнего термостата вниз (до 200 К) или вверх (до 346.3 К) получаются практически такие же равновесные распределения концентраций, что и при температуре верхнего термостата равной 273.15 К. При этом ширина адсорбционного слоя h_a^0 не изменяется, а изменяются (соответственно уменьшаются и увеличиваются) уровни концентрации в приповерхностных слоях газа.

Далее рассматриваются более подробно четыре микросистемы частиц, формирующиеся вблизи поверхности металла в условиях термодинамического равновесия на примере той же системы никель-азот. Первая из них состоит из N_1^0 атомов никеля в адсорбционном слое. Вторая состоит из N_2^0 молекул газа, адсорбированных на поверхности металла, и располагается в этом же слое. Третья состоит из N_3^0 молекул газа в следующем слое такой же высоты h_a^0 . Четвертая состоит из N_4^0 молекул газа в выделенном из объема подслое высотой h_λ^0 , равной величине порядка средней длины свободного пробега азота в рассматриваемых условиях $\langle \lambda \rangle \approx 101.7$ нм.

Мотивацией выделения этих четырех микросистем является то, что первая микросистема является металлом, вторая микросистема фактически проявляет металлические свойства, не свойственные газу при данной температуре. Третья микросистема является неустойчивой и имеет параметры, сильно отличающиеся от параметров газа в объеме (четвертая микросистема). Для подтверждения этих фактов ниже приведены параметры этих систем на момент времени, близкий к установлению термодинамического равновесия.

В проведенных расчетах размеры системы соответствуют $L = D = \langle \lambda \rangle \approx 288 \cdot rcr$, объемы адсорбционного и следующего за ним, а также объемного слоя равны $V_a^0 = L \cdot D \cdot h_a^0 = 288^2 \cdot 3rcr^3 \approx 1.09584 \times 10^5 \text{ нм}^3$ и $V_\lambda^0 = \langle \lambda \rangle^3 \approx 1.052006 \times 10^6 \text{ нм}^3$. Макропараметры микросистем для трех температур верхнего термостата приведены в таблице 5.1.

Анализ данных таблицы 5.1 показывает, что равновесный коэффициент аккомодации молекул газа на поверхности металла по концентрации или по плотности может быть определен только на основе МД расчета. Его истинную величину можно определить по параметрам адсорбционного слоя, а именно по соотношениям:

$$\alpha_N \approx \frac{N_2^0}{N_1^0 + N_2^0} \text{ или } \alpha_\rho \approx \frac{\rho_2^0}{\rho_1^0 + \rho_2^0} \quad (5.9)$$

Здесь ρ_k^0 – плотность в микросистеме частиц в соответствующем слое.

В проведенных расчетах эти величины соответственно равны $\alpha_N \approx 0.3402, 0.3306, 0.3497$ и $\alpha_\rho \approx 0.3231$ для $T_2 = 273.15, 200$ и 346.3 К. Приведенные значения соответствуют тому факту, что при малых скоростях течения (или в его отсутствии) аккомодация газа с поверхностью металла является слабой для металлов с малой атомной массой. В таких случаях в технологических целях для увеличения коэффициента аккомодации поверхность покрывается атомами тяжелых металлов, например, цирконием [154].

Таблица 5.1 – Равновесные параметры микросистем

№ системы	Среднее число частиц	Плотность, кг/м ³	Температура, К	Давление, МПа
$T_2 = 273.15 \text{ К}$				
1	84467	1119.285	271.553	-1101.742
2	43559	534.357	271.452	-77.651
3	274	1.0763	270.630	0.08643
4	6571	1.0692	271.992	0.08643

№ системы	Среднее число частиц	Плотность, кг/м ³	Температура, К	Давление, МПа
$T_2 = 200 \text{ К}$				
1	84613	1111.914	271.548	-1094.032
2	41788	530.8381	270.973	-79.027
3	219	0.9534	264.314	0.07470
4	5309	0.9586	263.792	0.07510
$T_2 = 346.3 \text{ К}$				
1	84468	1127.872	271.565	-1111.817
2	45426	538.4567	272.090	-75.84529
3	354	1.252989	280.455	0.10454
4	8340	1.231771	282.335	0.10379

Равновесный коэффициент аккомодации по температуре (энергии) при дозвуковых течениях (а значит, и в покоящемся газе) в соответствии с [2] должен рассчитываться по формуле:

$$\alpha_T \approx \frac{T_3^0 - T_2^0}{T_3^0 - T_1^0}. \quad (5.10)$$

Здесь T_k^0 – температура микросистемы частиц в соответствующем слое.

В проведенных расчетах эта величина равна $\alpha_T \approx 0.8906, 0.9205, 0.9409$ для $T_2 = 273.15, 200$ и 346.3 К . Полученные данные близки (погрешность порядка 5-10 %) к данным экспериментов из [2]. Для модельных расчетов полученной точности достаточно, однако для прецизионных расчетов точность следует повысить. Для этого, в частности, можно увеличить время расчета до 10 нс (приведенные данные соответствуют времени 4.4 нс), а также учесть ротационные степени свободы непосредственно в МД вычислениях, как это предложено в

[141]. В этом случае разница температур $T_2^0 - T_1^0$ будет рассчитана точнее, а коэффициенты α_T примут значение, близкое к 0.8 [37].

В формуле (5.10) можно использовать вместо температуры T_3^0 температуру T_4^0 . Однако в представленном расчете это приводит к более грубой оценке коэффициентов аккомодации. Другими словами, в рамках многомасштабного подхода, использующего молекулярно-динамические вычисления представленных параметров в определении условий на границах, имеется возможность увеличить разрешение модели в пограничном слое, что и было сделано.

Расчет коэффициентов аккомодации по импульсу (скорости) для покоящегося газа не так представителен. Однако поскольку в системе имеется небольшой градиент плотности и температуры по координате z , то нормальные коэффициенты аккомодации по импульсу α_n должны быть отличны от нуля, а тангенциальные коэффициенты α_T равны нулю. Расчет нормальных коэффициентов аккомодации можно также производить по формуле:

$$\alpha_n \approx \frac{P_{z,3}^0 - P_{z,2}^0}{P_{z,3}^0 - P_{z,1}^0}. \quad (5.11)$$

Здесь $P_{z,k}^0$ – импульс микросистемы частиц в соответствующем слое.

Далее описано несколько замечаний относительно вычислений коэффициентов аккомодации при ненулевой скорости потока.

Во-первых, в случае, когда необходимо проследить формирование параболического профиля модуля скорости вблизи металлической поверхности на молекулярном уровне, следует учитывать, что это длительный процесс, связанный с многовариантными расчетами. В такой ситуации для упрощения вычислений можно руководствоваться результатами таких работ, как [154]. Из нее следует, что при малых дозвуковых скоростях особенности аккомодации не будут сильно отличаться от случая покоящегося газа, рассмотренного выше, за исключением значений коэффициентов α_T , которые будут теперь отличны от нуля. При приближении к звуковому порогу коэффициенты аккомодации по импульсу α_n будут уменьшаться, а α_T возрастать, но затем выйдут на насыщение.

Во-вторых, при расчетах течений в реальных каналах придется учитывать рельеф поверхности. В этом случае гипотеза постоянства ширины адсорбционного слоя нарушается. Поэтому в процессе разгона потока вблизи поверхности в каждый момент времени t необходимо произвести пересчет величины h_a по профилю плотности газа вблизи поверхности

металла $\rho(z)$. Далее стандартным образом пересчитываются параметры микросистемы в трех слоях, также как это было сделано выше для равновесного состояния.

В-третьих, в МД вычислениях возможно дополнительно рассчитать потоки массы, импульса и энергии, проходящие через границы адсорбционного слоя с металлом $\mathbf{W}_m^{(\rho)}$, $\mathbf{W}_m^{(P)}$, $\mathbf{W}_m^{(E)}$ и адсорбционного слоя с остальным газом $\mathbf{W}_g^{(\rho)}$, $\mathbf{W}_g^{(P)}$, $\mathbf{W}_g^{(E)}$. Эти расчеты ведутся по прямым формулам:

$$W^{(A)} = \frac{\Delta A}{|S|}, \quad (5.12)$$

то есть поток величины A через сечение S равен изменению этой величины ΔA к площади сечения $|S|$. Если говорить, например, о плотности молекул газа, то поскольку выбрана ситуация непроницаемости металла для этих молекул, то поток $\mathbf{W}_m^{(\rho)}$ через поверхность металла будет равен 0. Однако поток $\mathbf{W}_g^{(\rho)}$ будет со временем изменяться.

В-четвертых, нормальные компоненты потоков можно выразить через известные выражения, связанные с коэффициентами аккомодации [2, 14]:

$$\begin{aligned} (\mathbf{W}_m^{(\rho)}, \mathbf{n}_m) &\approx \alpha_m (\rho_a - \rho_m), & (\mathbf{W}_m^{(P_k)}, \mathbf{n}_m) &\approx \beta_{m,k} (u_{a,k} - u_{m,k}), & k = x, y, z, \\ (\mathbf{W}_m^{(E)}, \mathbf{n}_m) &\approx \gamma_m (E_a - E_m); \end{aligned} \quad (5.13)$$

$$\begin{aligned} (\mathbf{W}_g^{(\rho)}, \mathbf{n}_g) &\approx \alpha_g (\rho_g - \rho_a), & (\mathbf{W}_g^{(P_k)}, \mathbf{n}_g) &\approx \beta_{g,k} (u_{g,k} - u_{a,k}), & k = x, y, z, \\ (\mathbf{W}_g^{(E)}, \mathbf{n}_g) &\approx \gamma_g (E_g - E_a). \end{aligned} \quad (5.14)$$

Коэффициенты пропорциональности α_m , α_g , $\beta_{m,k}$, $\beta_{g,k}$, γ_m , γ_g в (5.13), (5.14) можно пересчитать через коэффициенты аккомодации [2].

Итоговая процедура определения потоков на границе может использовать две стратегии.

Первая состоит в накоплении базы данных значений α_m , α_g , $\beta_{m,k}$, $\beta_{g,k}$, γ_m , γ_g для различных диапазонов температур и давлений и использовании этой базы данных в расчетах по макромоделям механики сплошной среды.

Вторая стратегия состоит в непосредственном определении потоков по формулам (5.12). Данная стратегия используется в случае расчетов по многомасштабной модели, базирующейся

на чередовании вычислений по уравнениям механики сплошной среды и уравнениям Ньютона для ансамбля микрочастиц в пограничном слое.

5.4 Выводы по главе:

Выполнено исследование процессов взаимодействия газа с металлической стенкой с учетом атомной структуры поверхности. В качестве примера выбрана микросистема азот - никель. Для этой микросистемы:

- получен эффект адсорбции, подтверждающий на качественном уровне адекватность разработанного численного подхода;
- проанализированы этапы эволюции микросистемы к квазиравновесному состоянию, в том числе рассмотрен переходный процесс от состояния прилипания молекул газа к поверхности до состояния скольжения их в приповерхностном слое, вследствие чего на макроуровне реализуются нестационарные граничные условия (последний факт свидетельствует о том, что в расчетах по алгоритмам класса 4 – чередующиеся КГД и МД расчеты, – оптимально вычислять методами МД сами потоки массы, импульса и энергии, идущие внутрь области из граничных ячеек, а не коэффициенты аккомодации);
- рассчитаны параметры граничных условий, используемые в макромоделях газовой динамики;
- получены характеристики взаимодействия азота с никелевой пластиной для разных температур газа, обнаружено образование монослоя газа вблизи поверхности пластины, получено условие скольжения газовой макросреды вдоль пластины, определяющееся взаимодействием движущихся газовых частиц с частицами газа в адсорбированном монослое.

Также было исследовано взаимодействие газового потока и металлической стенки с целью определения коэффициентов аккомодации (по плотности, импульсу, энергии) и параметров граничных условий. На основании результатов предложено использовать на границе прямые молекулярно-динамические вычисления для определения потоков массы, импульса и энергии. Это позволяет рассчитывать единым образом как течения, характеризующиеся прилипанием газа к стенкам, так и течения, характеризующиеся скольжением газа вдоль стенки. Особенно важно использовать такой подход в случае нестационарных течений с переходным режимом вблизи стенок.

ГЛАВА 6

Моделирование течений газов в микроканалах

В данной главе представляются вычислительные основы моделирования течения бинарной смеси газов в микроканалах технических систем. В начале главы представлена математическая постановка задачи. В качестве иллюстрации подхода рассмотрена задача истечения сверхзвуковой струи смеси азота и водорода в вакуум. На данном примере исследована численная реализация подхода, проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными и численными данными.

6.1 Математическая постановка течения бинарной газовой смеси в микроканале технической системы

Рассматривается смесь азота и водорода, истекающая со сверхзвуковой скоростью из идеального сопла цилиндрической геометрии в область технического вакуума. Выбор именно данной смеси газов основан на ее популярности в газодинамических технологиях [3, 221, 299, 323]. Предполагается, что в окружающей среде уже находится небольшое количество этой же смеси при существенно меньшем давлении и температуре, совпадающей с температурой торможения. Для моделирования можно было бы воспользоваться такими известными методиками как: (а) решение задачи на основе уравнения Больцмана (см., например, [73, 146, 161, 183, 290, 339]), (б) расчет свободномолекулярных течений [7, 15, 21, 31–34, 50, 97, 136, 155, 172, 184]. Мотивацией к такой альтернативе является в первом случае тот факт, что в сильно разреженном газе функция распределения молекул по скоростям превращается в случайный набор дельта-функций и, строго говоря, не является непрерывной. Во втором случае мотивацией является невозможность точного описания взаимодействий молекул газов разных сортов в рамках моделей только твердых сфер (HS или VHS), мягких сфер (VSS) или шероховатых сфер (VRS), поскольку имеется нелинейная зависимость взаимодействия даже двух молекул при столкновении от их расположения, температуры (скорости) и окружения (наличия других соседних молекул). Во всей расчетной области используются

многомасштабные вычисления. Общая модель определяется двумя основными уровнями детализации: макроскопический и микроскопический. Далее приведены описания моделей на каждом уровне в случае бинарной смеси газов.

6.1.1 Макроскопическое описание

Для описания задачи на макроскопическом уровне используются КГД уравнения (1.30)–(1.32) для случая бинарной смеси. Система КГД уравнений записывается для каждого газа отдельно и в одинаковой форме. Уравнения в трехмерной постановке для бинарной смеси газов в инвариантном относительно системы координат виде в размерных переменных (ниже используется система единиц СИ) вместе с уравнениями связей и состояния имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{W}_l^{(\rho)} &= 0, \quad \mathbf{W}_l^{(\rho)} = \rho_l \mathbf{u}_l - \rho_l \mathbf{w}_l, \\ \mathbf{w}_l &= \frac{\tau}{\rho_l} [\operatorname{div}(\rho_l \mathbf{u}_l)] \mathbf{u}_l + \mathbf{w}_l^*, \quad \mathbf{w}_l^* = \frac{\tau}{\rho_l} [(\rho_l \mathbf{u}_l \nabla) \mathbf{u}_l + \nabla p_l], \quad l = a, b; \end{aligned} \quad (6.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\rho_l u_{l,k})}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{W}_l^{(\rho u_k)} &= S_{l,k}^{(\rho u)}, \quad \mathbf{W}_l^{(\rho u_k)} = \mathbf{W}_l^{(\rho)} u_{l,k} + \mathbf{e}_k p_l - \Pi_{l,k}, \\ \Pi_{l,k} &= (\Pi_{l,j,k}), \quad \Pi_{l,j,k} = \Pi_{l,j,k}^{NS} + \Pi_{l,j,k}^{QGD}, \\ \Pi_{l,j,k}^{NS} &= \mu \left(\frac{\partial u_{l,j}}{\partial x_k} + \frac{\partial u_{l,k}}{\partial x_j} + \delta_{j,k} \left(\zeta - \frac{2}{3} \right) \operatorname{div}(\mathbf{u}_l) \right), \end{aligned} \quad (6.2)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{l,j,k}^{QGD} &= \rho_l u_{l,j} w_{l,k}^* + \delta_{j,k} \tau ((\mathbf{u}_l \nabla) p_l), \\ \mathbf{S}_l^{(\rho u)} &= \sum_{l'=1, l' \neq l}^N v_{ll'} \rho_{l'} (\mathbf{u}_{l'}^* - \mathbf{u}_l), \quad l = a, b, \quad j, k = 1, 2, 3; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_l}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{W}_l^{(E)} &= S_l^{(E)}, \quad \mathbf{W}_l^{(E)} = \mathbf{W}_l^{(\rho)} H_l + \mathbf{q}_l - \Pi_l \mathbf{u}_l, \\ \mathbf{q}_l &= \mathbf{q}_l^{NS} + \mathbf{q}_l^{QGD}, \\ \mathbf{q}_l^{NS} &= -\chi \nabla T_l, \quad \mathbf{q}_l^{QGD} = -\tau \left[(\mathbf{u}_l \nabla) \varepsilon_l + p_l (\mathbf{u}_l \nabla) \left(\frac{1}{\rho_l} \right) \right] \rho_l \mathbf{u}_l, \end{aligned} \quad (6.3)$$

$$\begin{aligned} S_l^{(E)} &= \sum_{l'=1, l' \neq l}^N v_{ll'} (E_{l'}^* - E_l), \quad l = a, b; \\ E_l &= \rho_l \left(\frac{1}{2} |\mathbf{u}_l|^2 + \varepsilon_l \right), \quad H_l = \frac{E_l + p_l}{\rho_l}, \quad p_l = Z_l \rho_l \mathfrak{R}_l T_l, \quad \varepsilon_l = c_{v,l} T_l, \\ \gamma_l &= \frac{c_{p,l}}{c_{v,l}}, \quad \tau_l = \frac{\mu_l}{p_l \operatorname{Sc}_l}, \quad \operatorname{Pr}_l = \frac{\mu_l c_{p,l}}{\kappa_l}, \quad \operatorname{Sc}_l = \frac{\mu_l}{\rho_l D_l}, \quad l = a, b. \end{aligned} \quad (6.4)$$

Здесь предполагается, что смесь состоит из газов a и b с числовыми плотностями (концентрациями) n_l и массовыми плотностями $\rho_l = m_l n_l$ (m_l – масса молекул газа l , $l = a, b$). 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; μ , ζ , χ и τ – кинетические коэффициенты смеси, а именно: коэффициенты динамической вязкости, относительной объемной вязкости, теплопроводности смеси и время релаксации смеси к квазиравновесному состоянию, выражающиеся через соответствующие коэффициенты компонент смеси $\mu_l = \mu_l(T_l)$, $\zeta_l = \zeta_l(T_l)$, $\chi_l = \chi_l(T_l)$ и $\tau_l = \tau_l(T_l, \rho_l)$. Переменные $Z_l = Z_l(T_l, \rho_l)$, $\gamma_l = \gamma_l(T_l, \rho_l)$, $c_{v,l} = c_{v,l}(T_l)$, $c_{p,l} = c_{p,l}(T_l)$ и $\mathfrak{R}_l = k_B / m_l$ – коэффициенты сжимаемости, показатели адиабат, удельные теплоемкости и индивидуальные газовые постоянные компонент смеси (k_B – постоянная Больцмана, Sc_l и Pr_l – числа Шмидта и Прандтля для компонент смеси); векторы $\mathbf{W}_l^{(\rho)}$, $\mathbf{W}_l^{(\rho u_k)}$, $\mathbf{W}_l^{(E)}$ с точностью до знака совпадают с потоками плотности, соответствующих компонент плотности импульса и плотности энергии; $\rho_l \mathbf{w}_l$ – векторы КГД поправок к потокам плотности компонент смеси $\rho_l \mathbf{u}_l$; \mathbf{q}_l – векторы тепловых потоков компонент смеси; \mathbf{e}_k ($k = 1, 2, 3$) – единичные орты, div и ∇ – операторы дивергенции и градиента.

Обменные члены $S_{l,k}^{(\rho u)}$ и $S_l^{(E)}$ учитывают перераспределения импульса и энергии между компонентами смеси. Обменные члены содержат в качестве параметров компоненты скоростей \mathbf{u}_l^* и плотности энергии E_l^* . Эти параметры соответствуют равновесному состоянию смеси, но не реализуются при переходном процессе. Фактически они служат ориентиром для динамических переменных. Также в обменных членах присутствуют $\nu_{ll'}$ – частоты взаимных столкновений между молекулами сорта l с молекулами сорта l' , которые вычисляются через ν_l – частоты взаимных столкновений между молекулами одного сорта.

В [46] в рамках моделей VHS (модель твердых сфер) и VSS (модель мягких сфер) предложено вычислять векторы скоростей \mathbf{u}_l^* и плотности энергии E_l^* , по формулам (более подробно описано в Главе 1):

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}_l^* &= \frac{m_a \mathbf{u}_a + m_b \mathbf{u}_b}{m_a + m_b}, \quad E_l^* = \rho_l \left(\frac{1}{2} |\mathbf{u}_l^*|^2 + \varepsilon_l^* \right), \quad \varepsilon_l^* = c_V (T_l^*) T_l^*, \quad l = a, b; \\
T_a^* &= T_a + \frac{2m_a m_b}{(m_a + m_b)^2} \left(T_b - T_a + \frac{m_b}{6k_B} |\mathbf{u}_b - \mathbf{u}_a|^2 \right), \\
T_b^* &= T_b + \frac{2m_a m_b}{(m_a + m_b)^2} \left(T_b - T_a + \frac{m_a}{6k_B} |\mathbf{u}_b - \mathbf{u}_a|^2 \right).
\end{aligned} \tag{6.5}$$

Там же частоты столкновений предложено вычислять по формулам:

$$\begin{aligned}
v_{ab} &= v_a \left(\frac{\sigma_{ab}}{\sigma_a} \right)^2 \sqrt{\frac{m_a + m_b}{2m_b} \frac{n_b}{n_a}}, \quad v_{ba} = v_{ab} \frac{n_a}{n_b} = v_b \left(\frac{\sigma_{ab}}{\sigma_b} \right)^2 \sqrt{\frac{m_a + m_b}{2m_a} \frac{n_a}{n_b}}, \\
\sigma_{ab} &= \frac{\sigma_a + \sigma_b}{2}, \quad v_l = \frac{p_l}{\mu_l} \Omega_l, \quad l = a, b.
\end{aligned} \tag{6.6}$$

где σ_l – эффективный радиус взаимодействия молекул сорта l , Ω_l – безразмерные параметры, характеризующие процесс столкновения молекул сорта l .

Вместо формул (6.5) можно воспользоваться непосредственными вычислениями векторов скоростей \mathbf{u}_l^* и плотностей энергии E_l^* на молекулярном уровне. При решении задачи с помощью алгоритмов классов 3 и 4, описанных в Главе 2, именно этот подход и используется. Аналогично вместо формул (6.6) можно производить непосредственные МД вычисления частот столкновений.

Для последующего численного анализа задачи используются локальные скорости звука и средние длины свободного пробега для компонент смеси, которые можно рассчитать по формулам (подробнее см. в Главе 1 и в работе [46]):

$$a_l^2 = \left(\frac{\partial p_l}{\partial \rho_l} \right)_s \approx \gamma_l \frac{p_l}{\rho_l}, \quad \lambda_l \approx \frac{\mu_l}{\rho_l \sqrt{Z_l \mathfrak{R}_l T_l}} A_l, \quad l = a, b. \tag{6.7}$$

Здесь A_l – безразмерные параметры, зависящие от используемой модели взаимодействия молекул [46, 48]. Для определения длин свободного пробега наряду с аппроксимацией, указанной в (6.7), так же можно использовать более точные значения, полученные с помощью МД вычислений.

При анализе результатов расчетов могут понадобиться местные значения таких параметров течения, как числа Маха, Рейнольдса и Кнудсена:

$$\text{Ma}_l = \frac{|\mathbf{u}_l|}{a_l}, \quad \text{Re}_l = \frac{\rho_l |\mathbf{u}_l| \lambda_l}{\mu_l}, \quad \text{Kn}_l = \frac{L}{\lambda_l}, \quad l = a, b. \quad (6.8)$$

Здесь L – характерный размер задачи.

Коэффициенты вязкости, теплопроводности и сжимаемости, а также удельные теплоемкости для компонент смеси в общем случае определяются с помощью МД вычислений (описано в Главе 4). При этом при решении задачи с помощью алгоритмов класса 2, описанных в Главе 2, используется их аппроксимация по значениям, полученным по алгоритмам класса 1 в необходимых диапазонах изменения температур и давлений.

Параметры газовой смеси определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} \rho &= \rho_a + \rho_b, \quad \mathbf{u} = \frac{\rho_a \mathbf{u}_a + \rho_b \mathbf{u}_b}{\rho}, \quad p = p_a + p_b, \quad E = E_a + E_b, \\ \varepsilon &= \frac{E}{\rho} - \frac{1}{2} |\mathbf{u}|^2, \quad n = n_a + n_b, \quad T = \frac{n_a T_a + n_b T_b}{n}, \quad m = \frac{m_a n_a + m_b n_b}{n}, \\ \Re &= \frac{k_B}{m}, \quad Z = \frac{p}{\rho \Re T}, \quad c_V = \frac{\varepsilon}{T}, \quad c_p = \frac{\rho_a c_{p,a} + \rho_b c_{p,b}}{\rho_a + \rho_b}, \quad \gamma = \frac{c_p}{c_V}, \\ \lambda &= \frac{n_a \lambda_a + n_b \lambda_b}{n_a + n_b}, \quad \tau = \frac{\mu}{p Sc}, \quad \text{Sc} = \frac{\mu}{\rho D}, \quad \text{Pr} = \frac{\mu c_p}{\chi}. \end{aligned} \quad (6.9)$$

Формулы (6.9) реализуются в полном объеме только при наличии известных коэффициентов μ , D , χ . Данные коэффициенты, а также относительная объемная вязкость ζ определяются либо по эмпирическим формулам через соответствующие параметры компонент смеси [26, 30, 143, 175], либо непосредственно в МД вычислениях.

В данной Главе в рамках алгоритмов класса 2 для определения коэффициентов вязкости, диффузии и теплопроводности бинарной газовой смеси (состоящей из неполярных молекул газов) использовались формулы (1.39)–(1.42) в случае $l = a, b$:

$$\begin{aligned} \mu &= \mu_a \left(1 + G_{ab} \frac{X_b}{X_a} \right)^{-1} + \mu_b \left(1 + G_{ba} \frac{X_a}{X_b} \right)^{-1}, \\ \zeta &= \zeta_a \frac{\mu_a}{\mu} \left(1 + G_{ab} \frac{X_b}{X_a} \right)^{-1} + \zeta_b \frac{\mu_b}{\mu} \left(1 + G_{ba} \frac{X_a}{X_b} \right)^{-1}, \\ \chi &= \chi_a \left(1 + G_{ab} \frac{X_b}{X_a} \right)^{-1} + \chi_b \left(1 + G_{ba} \frac{X_a}{X_b} \right)^{-1}, \end{aligned} \quad (6.10)$$

$$D = D_{ab} = X_a D_b + X_b D_a,$$

$$G_{ll'} = \left(1 + \sqrt{\frac{\mu_l}{\mu_{l'}}} \sqrt{\frac{M_{l'}}{M_l}} \right)^2 \left(2 \sqrt{2 \left(1 + \frac{M_l}{M_{l'}} \right)} \right)^{-1}, \quad l = a, b, \quad l' = b, a. \quad (6.11)$$

Здесь $X_l = \frac{\rho_l V}{M_l}$ – мольная доля газа сорта l в объеме V , M_l – молярная масса газа сорта l .

Средние локальная скорость звука, числа Маха, Рейнольдса и Кнудсена для смеси двух газов равны:

$$a^2 = \gamma \frac{p}{\rho}, \quad \text{Ma} = \frac{|\mathbf{u}|}{a}, \quad \text{Re} = \frac{\rho |\mathbf{u}| \lambda}{\mu}, \quad \text{Kn} = \frac{L}{\lambda}. \quad (6.12)$$

Система уравнений (6.1)–(6.3) замыкается начальными и граничными условиями. Начальные условия соответствуют равновесному состоянию газовой среды в отсутствие взаимодействия с внешними факторами. В обсуждаемых ниже расчетах был рассмотрен случай покоящейся газовой среды:

$$\rho_l = \rho_{l,0}, \quad \mathbf{u}_l = 0, \quad P_l = P_{l,0}, \quad T_l = T_0, \quad l = a, b. \quad (6.13)$$

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

На входе в среду задаются параметры смеси, которые зависят от конкретной постановки задачи и в общем случае определяются следующим образом:

$$(\mathbf{u}_l, \mathbf{n}) = u_{in,l}, \quad \rho_l = \rho_{in,l}, \quad T_l = T_{in,l}, \quad l = a, b, \quad (6.14)$$

где параметры с индексом in соответствуют заданным значениям параметров на входе в среду.

На свободных поверхностях расчетной области задаются так называемые "мягкие" граничные условия (см., например, [46, 48, 185]):

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial (\rho_l \mathbf{u}_l)}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial p_l}{\partial n} = 0, \quad l = a, b. \quad (6.15)$$

Система КГД уравнений (6.1)–(6.3) решается с помощью сеточного численного алгоритма, имеющего в своей основе метод контрольных объемов (более подробно описано в параграфе 1.2.4). При расчетах использовались все четыре класса алгоритмов, конкретные реализации описаны в Главе 2.

6.1.2 Микроскопическое описание

В случае, когда на макроуровне рассчитывается течение бинарной газовой смеси, на микроуровне также рассматриваются молекулы двух сортов a и b . Эволюция исследуемой системы микрочастиц (молекул) описывается уравнениями (1.51). Для системы двух типов частиц эти уравнения имеют следующий вид:

$$m_l \frac{d\mathbf{v}_{l,i}}{dt} = \mathbf{F}_{l,i}, \quad \mathbf{v}_{l,i} = \frac{d\mathbf{r}_{l,i}}{dt}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad l = a, b, \quad (6.16)$$

где i – номер частицы, $l = a, b$ – тип частиц (молекулы какого-то газа или атомы металла, в данной Главе индексом " a " помечен водород, индексом " b " – азот), 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 -ой 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 -ой частицы с окружающими частицами, зависящей от потенциальной энергии, и компоненты, отвечающей за внешнее воздействие:

$$\mathbf{F}_{l,i} = - \frac{\partial U(\mathbf{r}_{l,1}, \dots, \mathbf{r}_{l,N_l})}{\partial \mathbf{r}_{l,i}} + \mathbf{F}_{l,i}^{ext}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad l = a, b, \quad (6.17)$$

где U – суммарная потенциальная энергия, $\mathbf{F}_{l,i}^{ext}$ – сила взаимодействия с внешней средой.

Потенциальная энергия системы представляется в виде суммы парциальных энергий (1.65), вычисление которых происходит по формуле выбранного потенциала взаимодействия. В случае взаимодействия двух видов газа рассматривается три типа взаимодействий, описываемых парными потенциалами:

$$\begin{aligned} U &= U_{aa} + U_{bb} + U_{ab}, \\ U_{aa} &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_a} \varphi_{i,aa}, \quad \varphi_{i,aa} = \sum_{j=1, j \neq i}^{N_a} \varphi_{aa}(|\mathbf{r}_{a,i} - \mathbf{r}_{a,j}|), \\ U_{bb} &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_b} \varphi_{i,bb}, \quad \varphi_{i,bb} = \sum_{j=1, j \neq i}^{N_b} \varphi_{bb}(|\mathbf{r}_{b,i} - \mathbf{r}_{b,j}|), \\ U_{ab} &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_a} \varphi_{i,ab}, \quad \varphi_{i,ab} = \sum_{j=1, j \neq i}^{N_b} \varphi_{ab}(|\mathbf{r}_{a,i} - \mathbf{r}_{b,j}|), \end{aligned} \quad (6.18)$$

где U_{aa} , U_{bb} , U_{ab} – потенциальные функции взаимодействия для систем частиц одного типа газа между собой и между частицами разных типов газа. Каждый вид взаимодействия описывается с помощью соответствующего потенциала φ_{ij} . Для примера рассматривалось течение газовой смеси, состоящей из азота и водорода. В качестве потенциальной функции использовался потенциал Ми в форме "n-6" (1.70) [285], адаптированный в работе [167] к расчетам как смеси водорода и азота в разных пропорциях, так и чистых газовых компонент. С учетом сглаживания и обрезания потенциал имеет вид:

$$\varphi(r_{ij}) = \begin{cases} \varepsilon \frac{n}{n-6} \left(\frac{n}{6}\right)^{\frac{6}{n-6}} \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^n - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^6 \right] - \varphi(r_c), & r_{ij} \leq r_c, \\ 0 & , r_{ij} > r_c. \end{cases} \quad (6.19)$$

Параметры потенциала представлены в таблице 6.1 и зависят от мольной доли азота X_b в смеси. Радиус обрезания для удобства вычислений берется одинаковым для всех вариантов смеси и соответствует $r_c = 2.5 \max(\sigma_{ij})$.

Таблица 6.1 – Зависимость параметров потенциала Ми [167] от доли азота в смеси

№№	Формула	$X_b(N_2)$	$\varepsilon, 10^{-21}$ Дж	n	σ , нм
1	N_2	1	1.3500	11.5	0.3649
2	$2N_2 + H_2$	0.67	0.6242	10.15	0.3450
3	$N_2 + 2H_2$	0.33	0.9564	8.95	0.3271
4	H_2	0	0.3722	8.00	0.3124

Кинетическая энергия E_K , кинетическая энергия теплового движения E_T и полная энергия E системы вычисляются отдельно для частиц каждого типа согласно (1.53)–(1.54). Для системы двух типов частиц формулы имеют следующий вид:

$$E_{Kl} = \frac{1}{2} \sum_i m_{l,i} |\mathbf{v}_{l,i}|^2, \quad E_{Tl} = \frac{1}{2} \sum_i m_{l,i} |\mathbf{v}_{l,i} - \mathbf{v}_{l,m}|^2, \quad E_l = E_{Kl} + U_l, \quad (6.20)$$

$$\mathbf{v}_{l,m} = \frac{1}{N_l} \sum_i \mathbf{v}_{l,i}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad l = a, b, \quad (6.21)$$

где $|\mathbf{v}_{l,i}|$ – длина вектора скорости i -ой частицы типа l , $\mathbf{v}_{l,m}$ – скорость центра масс системы частиц типа $l = a, b$.

Температура T системы частиц газа или металла определяется по (1.55), в случае системы двух типов частиц формула имеет следующий вид:

$$T_l = \frac{2}{3} \frac{\langle E_{Tl} \rangle}{N_l k_b}, \quad l = a, b, \quad (6.22)$$

где k_b – постоянная Больцмана, $\langle \rangle$ – усредненное значение по состояниям системы.

Диагональные компоненты тензора давления для системы частиц типа $l = a, b$ определяются по соотношению (6.23). Индекс типа частиц из формулы удален для наглядности выражения.

$$P_{\alpha\alpha} = \frac{1}{V} \sum_i m_i (v_{i,\alpha} - v_{m,\alpha})^2 + \frac{1}{V} \sum_i \sum_{j>i} r_{ij,\alpha} \cdot F_{ij,\alpha}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad (6.23)$$

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

Давление в системе в трехмерной постановке задачи определяется так:

$$p = \frac{1}{3} (P_{xx} + P_{yy} + P_{zz}). \quad (6.24)$$

Транспортные коэффициенты микросистемы для компонент газа определяются по формулам Грина-Кубо (индекс компоненты для удобства восприятия опущен):

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{1}{k_B T V} \int_0^\infty \langle C^{VISC} \rangle dt, \\ C^{VISC} &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha\beta} C_{\alpha\beta}^{VISC}, \quad C_{\alpha\beta}^{VISC} = p_{\alpha\beta}(t_0 + t) \cdot p_{\alpha\beta}(t_0), \\ p_{\alpha\beta} &= \sum_i m v_{\alpha,i} v_{\beta,i} + \sum_i \sum_{j>i} r_{ij,\alpha} F_{ij,\beta}, \quad \alpha\beta = xy, yz, zx, \quad i, j = 1 \dots N; \end{aligned} \quad (6.25)$$

$$\chi = \frac{1}{k_B T^2 V} \int_0^\infty \langle C^{TCOND} \rangle dt, \quad C^{TCOND} = \frac{1}{3} \sum_\alpha C_{\alpha\alpha}^{TCOND},$$

$$C_{\alpha\alpha}^{TCOND} = [q_\alpha(t_0+t) \cdot q_\alpha(t_0)], \quad q_\alpha = \sum_i E_i \mathbf{v}_i + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \mathbf{r}_{ij} (\mathbf{F}_{ij} \cdot \mathbf{v}_i), \quad (6.26)$$

$$E_i = \frac{m \mathbf{v}_i^2}{2} + \varphi_i, \quad \alpha = x, y, z, \quad i, j = 1 \dots N;$$

$$\mu\zeta = \frac{1}{k_B T V} \int_0^\infty \langle C^{BVISC} \rangle dt, \quad C^{BVISC} = \frac{1}{9} \sum_{\alpha, \beta} C_{\alpha\beta}^{BVISC}, \quad (6.27)$$

$$C_{\alpha\beta}^{BVISC} = [p_{\alpha\alpha}(t_0+t) - \langle p_{\alpha\alpha} \rangle] \cdot [p_{\beta\beta}(t_0) - \langle p_{\beta\beta} \rangle], \quad \alpha, \beta = x, y, z;$$

$$D = \frac{1}{N} \int_0^\infty \langle C^{DIFF} \rangle dt, \quad C^{DIFF} = \frac{1}{3} \sum_\alpha C_{\alpha\alpha}^{DIFF}, \quad (6.28)$$

$$C_{\alpha\alpha}^{DIFF} = \sum_i [v_{\alpha,i}(t_0+t) \cdot v_{\alpha,i}(t_0)], \quad \alpha = x, y, z, \quad i = 1 \dots N.$$

Здесь C^{VISC} , C^{TCOND} , C^{BVISC} , C^{DIFF} – автокорреляционные функции, t_0 – начальный момент времени при расчетах коэффициентов, $p_{\alpha\beta}$ и $p_{\alpha\alpha}$ – недиагональные и диагональные компоненты тензора давления, E_i – мгновенная полная энергия молекулы i .

Теплоемкости описаны в Главе 4 и вычисляются в соответствии с формулами (4.7), (4.8).

Начальные условия на микроуровне определяются равновесным термодинамическим состоянием системы частиц. Расчеты газовых сред обычно стартуют с нормальных условий. Для этого системы частиц приводятся к термодинамическому равновесию при заданных температуре и давлении. В результате распределение частиц по выбранному объему становится равномерным, распределение скоростей частиц по модулю приближается к максвелловскому, а направления скоростей соответствуют заданному среднему импульсу газовой среды.

Граничные условия на молекулярном уровне выбираются в зависимости от моделируемой ситуации. В частности, когда расчеты направлены на определение свойств среды, то рассматривается некоторый выделенный трехмерный ее объем и на границах используются периодические условия. Дополнительно отдельные части микросистем термостатировались с помощью термостатов Берендсена [196] и Ланжевена [173].

Система уравнений (6.16) решается с помощью численного метода Верле в скоростной форме (см. параграф 1.3.6 Главы 1). Программные реализации описаны в Главе 2.

6.2 Результаты моделирования истечения сверхзвуковой струи азотно-водородной смеси в вакуум

В данном параграфе приводятся результаты расчетов течения азот-водородной смеси после выхода из сопла в свободное пространство. Данная задача была выбрана в связи с тем, что она является центральной во многих современных технологических процессах, а также в связи с наличием экспериментальных данных, представленных в работе [323]. Геометрия выбранной модельной постановки задачи соответствует описанной в [323] и представлена на рисунке 6.1.

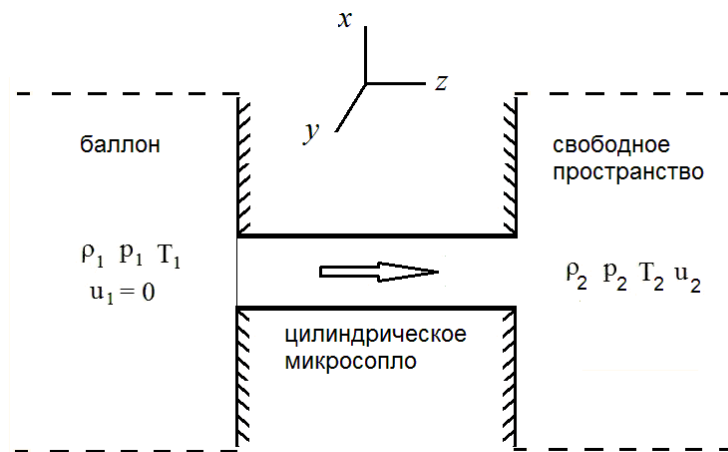


Рисунок 6.1 – Геометрия прикладной задачи

Цилиндрическое микросопло имеет диаметр $D_0 \approx 310 \text{ мкм}$, длину $L_0 = 6D_0 \approx 1860 \text{ мкм}$. Оно соединяет баллон с азот-водородной смесью и открытое пространство вакуумной камеры, заполненной изначально той же сильно разреженной смесью. В начальный момент смесь покоится: $u_1 = u_2 = 0$. При этом в баллоне она находится при стандартных нормальных условиях: $T_1 = 295.15 \text{ К}$, $p_1 = 101325 \text{ Па}$; в сопле и вакуумной камере она находится при той же температуре, но при более низких давлениях: $T_2 = 295.15 \text{ К}$, $p_2 = \delta_0 p_1$, $\delta_0 \sim 10^{-3} \div 10^{-5}$ – параметр откачки. Сопло слева перекрыто перегородкой, которая в начале расчета открывается мгновенно. Внутренняя поверхность сопла считается идеально гладкой и теплоизолированной. Основным параметром в задаче является мольная доля азота в смеси X_b .

Задача рассматривается в постановке максимально близкой к условиям эксперимента. Во-первых, рассматривается полная геометрия системы. Во-вторых, учитывается форма и реальные размеры сопла. В-третьих, учитывается фактор сжимаемости и другие параметры, которые определяют свойства реального газа. При этом, также как в эксперименте [323], рассмотрено 4 основные варианта расчета, указанные в таблице 6.2.

Таблица 6.2 – Параметры вариантов расчетов

№№	Формула	$X_b(N_2)$	δ_0
1	N_2	1	0.00008
2	$2N_2 + H_2$	0.67	0.00010
3	$N_2 + 2H_2$	0.33	0.00013
4	H_2	0	0.00035

Размеры расчетной области были выбраны следующими.

Диаметры расчетных частей в баллоне и в вакуумной камере были равны $D_1 = D_2 = 5D_0$.

Длина расчетной части в баллоне была равна $L_1 = 10L_0$; длина расчетной части в вакуумной камере была равна $L_2 = 50L_0$.

Наряду с истинными размерами исследуемой системы были рассмотрены и существенно меньшие. Для этого величина D_0 уменьшалась максимально в 50 раз до 6.2 мкм.

Результаты проведенных численных экспериментов представлены в следующих параграфах.

6.2.1 Анализ и верификация алгоритмов класса 1

Перед анализом численного решения выбранной прикладной задачи были проведены предварительные верификационные расчеты. Прежде всего они касались анализа качества алгоритмов класса 1. Такие исследования уже проводились и частично представлены в Главе 4.

В них было показано, что реализованный МД подход дает хорошее приближение по таким характеристикам, как фактор сжимаемости, коэффициенты диффузии, вязкости, теплопроводности, теплоемкость при постоянном объеме. В рамках данной Главы с целью решения поставленной задачи это исследование было продолжено, далее будут представлены результаты расчетов на примере чистого азота.

В соответствии с концепцией выделения и расчета базовых зависимостей – Z_{N_2} , c_{V,N_2} , c_{p,N_2} , μ_{N_2} , $\mu_{b,N_2} = \mu_{N_2} \zeta_{N_2}$, χ_{N_2} , D_{N_2} – были проведены серии МД вычислений этих характеристик в диапазоне температур от 80 до 400 К при давлении $p_0 = 101325 \text{ Па}$. Полученные данные были аппроксимированы рядом зависимостей и приведены на рисунках 6.2–6.7 в сравнении с известными экспериментальными и теоретическими данными из [6, 19, 39–41, 49, 159, 160, 213].

Для удобства анализа коэффициенты μ_{N_2} , μ_{b,N_2} , χ_{N_2} , D_{N_2} и время релаксации τ_{N_2} нормированы на их значения $\mu_{N_2}^0 = 1.667 \cdot 10^{-5} \text{ Па} \cdot \text{с}$, $\mu_{b,N_2}^0 = 1.288 \cdot 10^{-5} \text{ Па} \cdot \text{с}$, $\chi_{N_2}^0 = 2.419 \cdot 10^{-2} \frac{\text{Вм}}{\text{м} \cdot \text{К}}$, $D_{N_2}^0 = 1.850 \cdot 10^{-5} \frac{\text{м}^2}{\text{с}}$, $\tau_{N_2}^0 = 2.283 \cdot 10^{-10} \text{ с}$ при температуре $T_0 = 273.15 \text{ К}$.

Как видно из рисунков, построенные аппроксимации в целом хорошо согласуются с данными указанных выше источников. Исключение составляют зависимости удельных теплоемкостей в области низких температур (менее 100 К), где азот постепенно переходит в жидкую фазу. Для этой зоны следует учесть зависимость теплоемкостей c_{V,N_2} и c_{p,N_2} от плотности (давления). Также имеется некоторое расхождение в кривых динамической и объемной вязкостей, которое наблюдается и в литературе в связи со сложностью определения этих величин в теории и в экспериментах.

Полученные данные были использованы ниже при расчетах выбранных модельных задач.

На рисунке 6.7 представлены зависимости чисел Прандтля, Шмидта и нормированного времени релаксации. Они иллюстрируют необходимые для реализации КГД расчеты зависимости от температуры. Нормировка времени релаксации ($\tau_{N_2}^0 = 2.283 \cdot 10^{-10} \text{ с}$) подтверждает тот факт, что КГД система содержит лишь малые поправки к уравнениям Навье-Стокса которые играют существенную роль при расчетах в области гиперзвука и больших числах Кнудсена.

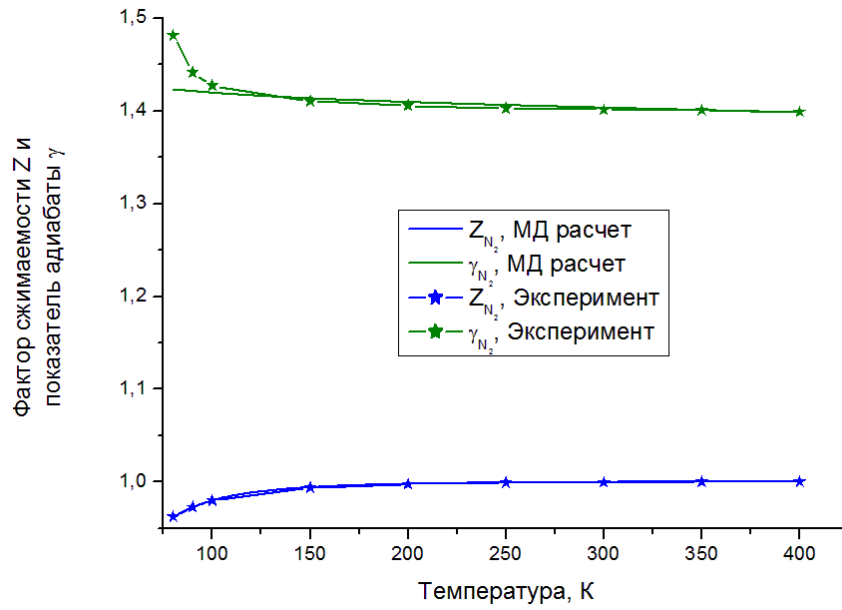


Рисунок 6.2 – Фактор сжимаемости Z_{N_2} и показатель адиабаты γ_{N_2} азота в зависимости от температуры при $p_0 = 101325 \text{ Па}$

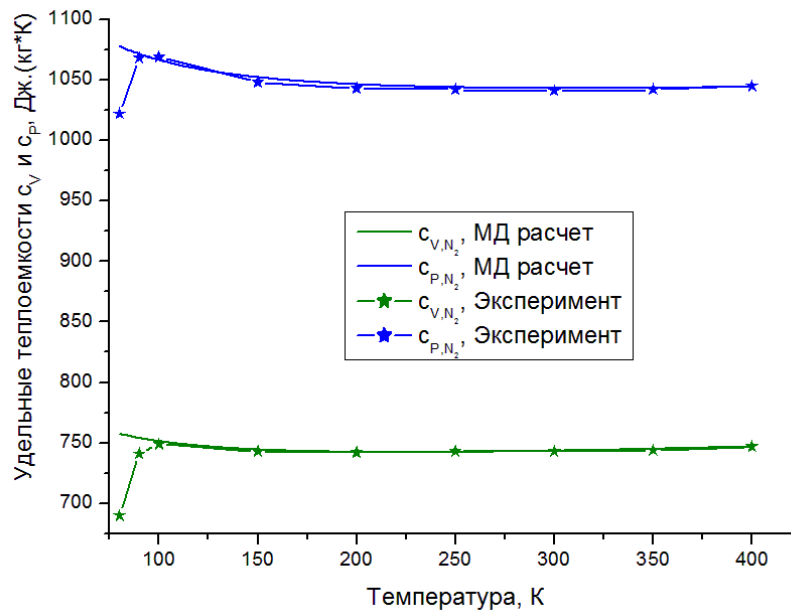


Рисунок 6.3 – Зависимости удельных теплоемкостей азота c_{V,N_2} и c_{P,N_2} от температуры при $p_0 = 101325 \text{ Па}$

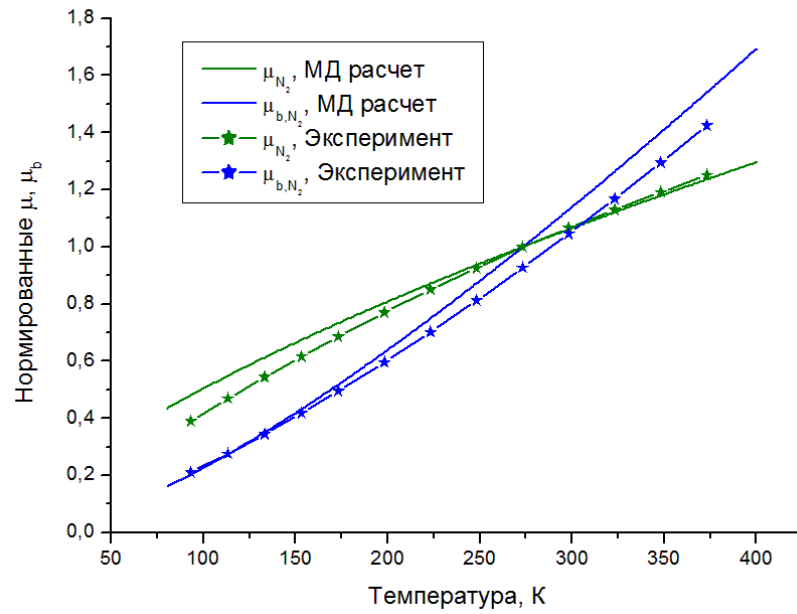


Рисунок 6.4 – Коэффициенты нормированной динамической и относительной объемной вязкостей азота $\mu_{N_2} / \mu_{N_2}^0$ и $\mu_{b,N_2} / \mu_{b,N_2}^0$ в зависимости от температуры

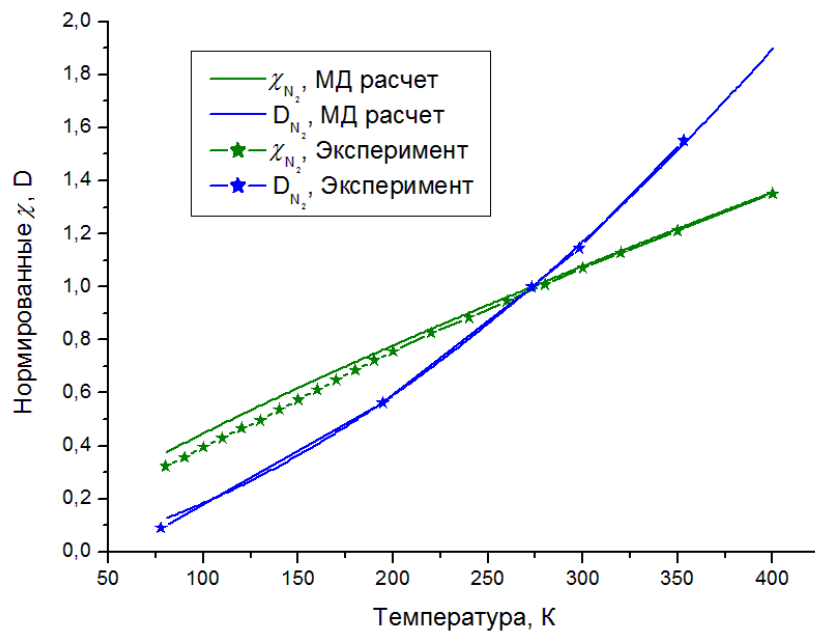


Рисунок 6.5 – Нормированные коэффициенты теплопроводности $\chi_{N_2} / \chi_{N_2}^0$ и диффузии азота $D_{N_2} / D_{N_2}^0$ в зависимости от температуры

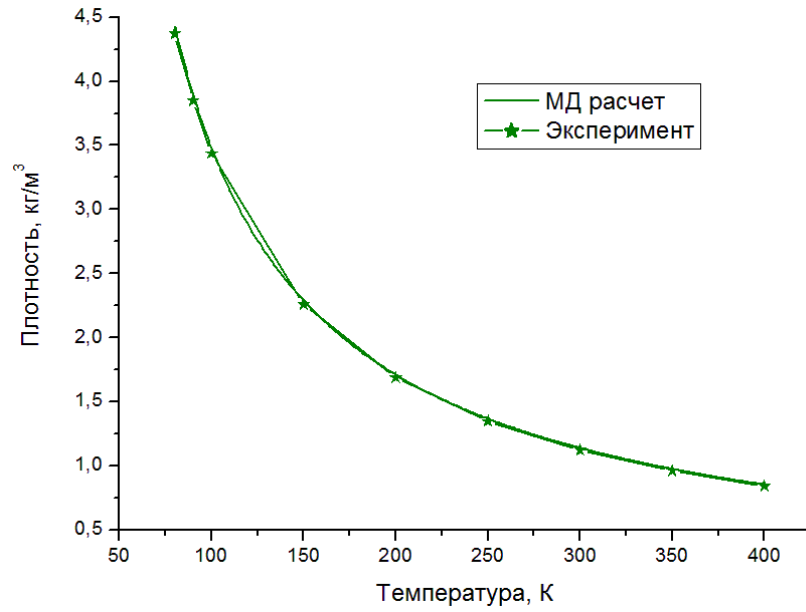


Рисунок 6.6 – Зависимость плотности азота ρ_{N_2} от температуры, рассчитанная по уравнению состояния при $p = p_0$

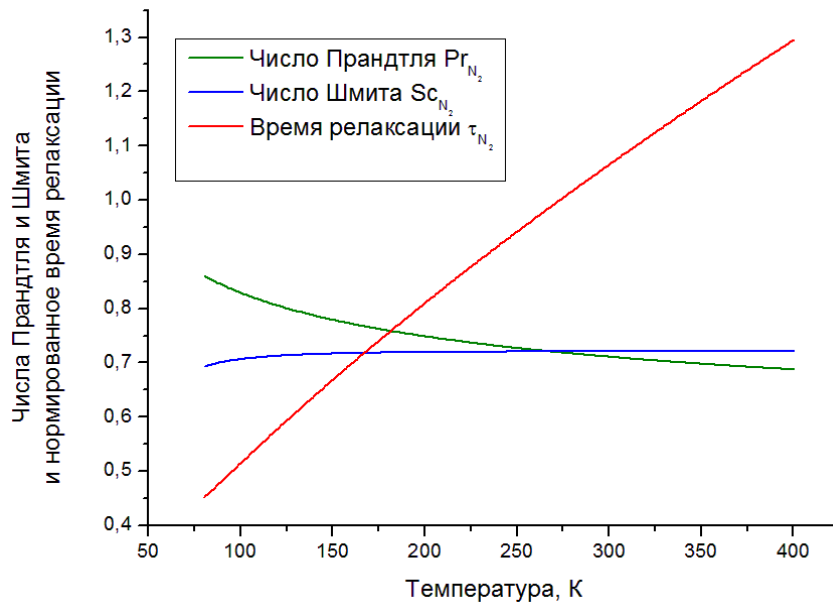


Рисунок 6.7 – Зависимость чисел Прандтля Pr_{N_2} и Шмидта Sc_{N_2} и нормированного времени релаксации $\tau_{N_2} / \tau_{N_2}^0$ от температуры

6.2.2 Анализ и верификация алгоритмов класса 2

Для анализа алгоритмов классов 2, 3 и 4 прежде всего был исследован первый из них, характеризующий решение задач на макроуровне. Для этого было проведено несколько классических тестов.

Первый тест был связан с одномерным расчетом задачи о распаде сильного разрыва в комбинации с имитацией испускания струи газа из баллона с высоким давлением. Для этого была выбрана исходная геометрия задачи с длиной расчетной области $L = L_1 + L_0 + L_2 = 61L_0 = 366D_0$. При обезразмеривании задачи в качестве нормировки по пространству x_n выбирался диаметр сопла D_0 , в качестве нормировки скорости u_n выбиралась величина $a_{N_2}^* = 12 \cdot a_{N_2}$, где $a_{N_2} = a_{N_2}(T_0, p_0) \approx 350.58$ мкм/мкс – скорость звука в азоте при нормальных условиях. Расчеты проводились на последовательности сеток $\bar{\omega}_x^{(k)} = \{x_i^{(k)} = -50 + h_x^{(k)}, i = 0, \dots, N_x^{(k)}\}$, $h_x^{(k)} = L_x / N_x^{(k)}$, $L_x = L / x_n$, $N_x^{(k)} = 366 \cdot 2^{(k-1)}$, $k = 1, 2, 3, 4$ (здесь за ноль по координате x выбран левый край микросопла). Расчеты проводились на равномерной сетке по времени с шагом $\Delta t = 10^{-3} (h_x^{(k)})^2$. Искусственная вязкость была взята равной $\nu = \frac{3}{2} \cdot h_x^{(k)} + \frac{1}{8} \cdot (h_x^{(k)})^4$. Как и в [135], первая адаптивная искусственная вязкость вводилась только в зоне скачка газодинамических параметров и была отлична от нуля лишь на первой стадии расчета. Расчеты проводились до установления с точностью $\varepsilon_t = 10^{-3}$.

Результаты расчетов, иллюстрирующие сходимость по сетке, представлены на рисунках 6.8–6.11. Профили плотности, давления, температуры и скорости показаны на момент физического времени $t = 7.37$ мкс, когда разрыв сильно расплылся, но еще не достиг левого конца расчетной области. Анализ приведенных данных показывает, что существенно изменяются в процессе эволюции решения лишь профили скорости и температуры, поскольку внутренняя энергия используется на первоначальный разгон газа. При этом через всю область проходит тепловая ударная волна. Параметры тепловой волны безусловно зависят от качества используемой разностной схемы и сеточного разрешения. Как показывают рисунки 6.8–6.11, примененная схема с искусственной вязкостью является монотонной по плотности и давлению. Разностная схема для уравнения энергии таким свойством не обладает, однако итоговый результат правильно реагирует на сгущение сетки. В итоге увеличение разрешения дает все

более резкие профили плотности и давления и уменьшает колебания температуры до разумного уровня.

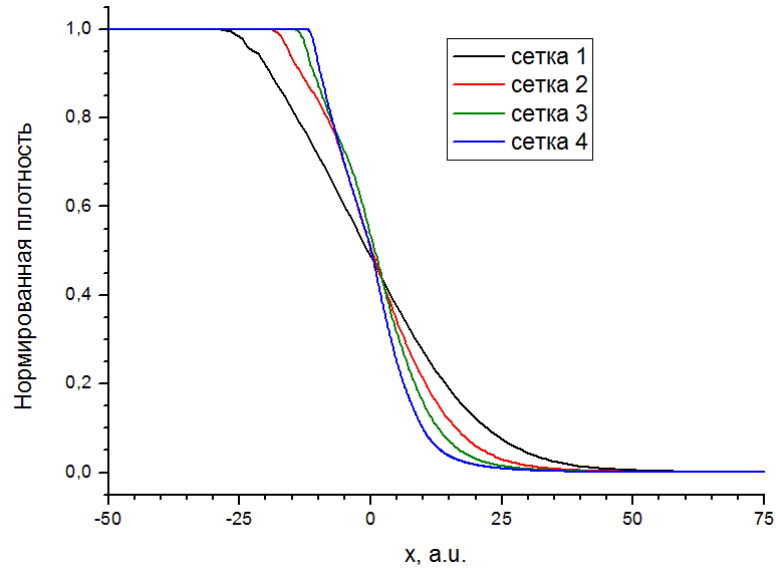


Рисунок 6.8 – Профили плотности на момент времени $t = 7.37$ мкс
в расчетах на последовательности сеток

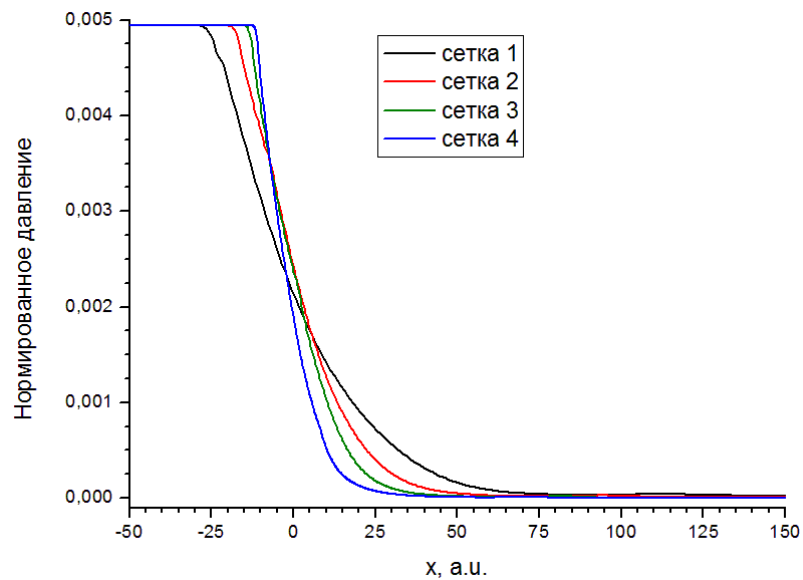


Рисунок 6.9 – Профили давления на момент времени $t = 7.37$ мкс
в расчетах на последовательности сеток

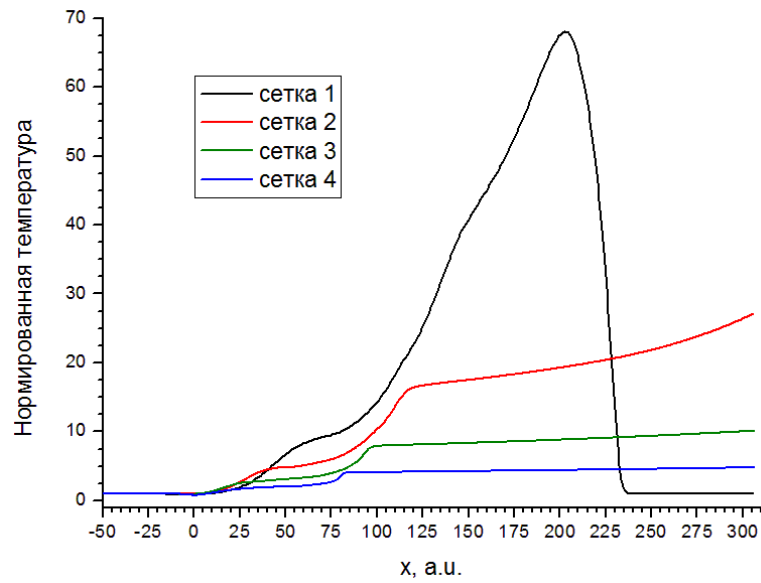


Рисунок 6.10 – Профили температуры на момент времени $t = 7.37$ мкс в расчетах на последовательности сеток

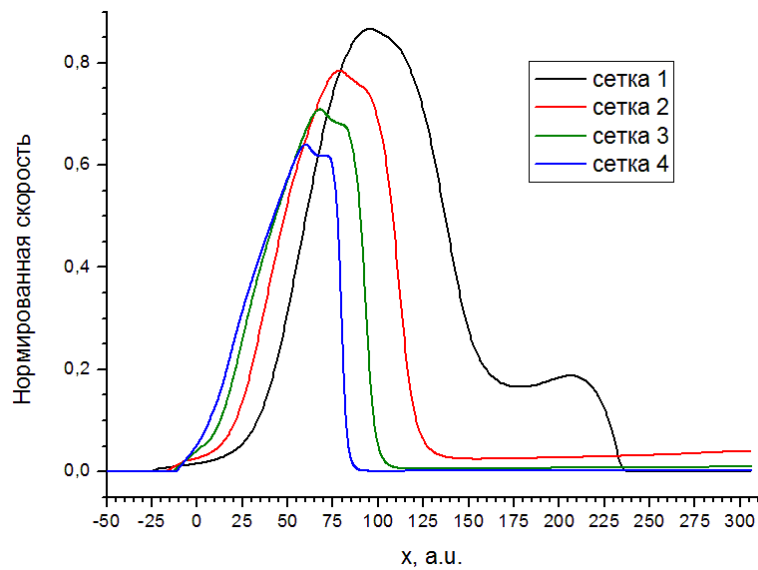


Рисунок 6.11 – Профили скорости на момент времени $t = 7.37$ мкс в расчетах на последовательности сеток

Приведенные расчеты также показывают, что адаптивная искусственная вязкость ν_1 , имеющая первый порядок по шагу сетки, в совокупности с измельчением сетки позволяет устранить нефизичные скачки температуры и скорости. Если данный алгоритм реализовать на

адаптивной к зоне разрыва сетке, то измельчение последней не будет приводить к существенным вычислительным затратам, но позволит существенно улучшить точность расчетов. К тому же при выходе решения на регулярный или стационарный режим адаптивная искусственная вязкость отключается, а суммарная искусственная вязкость выходит на вязкость ν_2 , имеющую порядок малости меньший, чем погрешность аппроксимации исходной схемы.

На рисунке 6.12 показаны стационарные профили плотности, скорости, давления и температуры, полученные на сетке 2. Анализ полученных данных показал, что стационарные профили решения слабо зависят от шага сетки. В частности, если стационарные профили для сеток 1 и 2 немного отличаются, то для сеток 2, 3 и 4 эти отличия практически не видны.

Второй тест касался сравнения решений, получаемых в рамках разработанного алгоритма по КГД уравнениям (функция τ отлична от нуля в уравнениях (1)-(3)) и по уравнениям Навье-Стокса (функция $\tau \equiv 0$ в уравнениях (1)-(3)). Сравнение производилось как для стартовой стадии расчета, так и в стационаре.

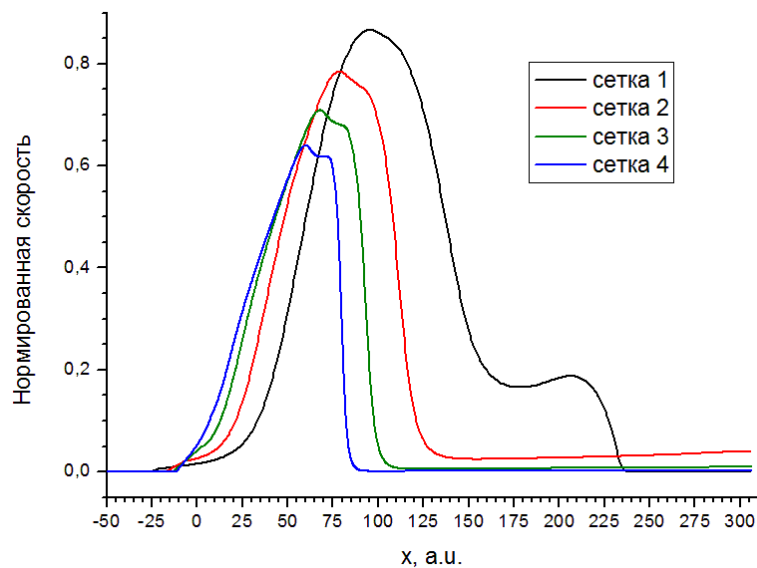


Рисунок 6.12 – Стационарные профили плотности, скорости, давления и температуры, рассчитанные на сетке 2

В таблице 6.3 приведены отличия указанных выше профилей плотности, давления, температуры и скорости от их аналогов, полученных на основе системы уравнений Навье-Стокса. Как видно из таблицы, максимальные отличия видны на профилях температуры и скорости. В тоже время при сгущении сетки эти отличия уменьшаются.

Таблица 6.3 – Нормы разницы плотности, давления, температуры и скорости, полученных при решении модельной задачи по КГД уравнениям и по уравнениям Навье-Стокса на последовательности сеток в момент времени 7.37 мкс

№ сетки	$\ \rho_{QGD} - \rho_{NS}\ _C$	$\ p_{QGD} - p_{NS}\ _C$	$\ T_{QGD} - T_{NS}\ _C$	$\ u_{QGD} - u_{NS}\ _C$
1	1.489065e-04	3.610558e-05	6.697678e+01	3.416233e-01
2	3.325793e-04	4.858511e-05	2.606323e+01	6.628984e-01
3	5.433237e-04	4.312629e-05	2.138386e+01	7.265100e-01
4	9.930080e-04	3.506289e-05	1.724653e+01	6.530866e-01

При установлении стационарных профилей отличия практически исчезают. В подтверждение этому на рисунке 6.12 представлены кружками профили, полученные по уравнениям Навье-Стокса на сетке 2. Как видно из рисунка, профили, полученные по уравнениям Навье-Стокса, мало отличаются от профилей, полученных по КГД уравнениям.

6.2.3 Анализ и верификация алгоритмов смешанного типа

Дополнительное тестирование было связано с проведением расчетов в условиях двух- и трехмерной реальной геометрии. Рассмотрим результаты двумерных расчетов, выполненных по алгоритмам класса 2 в области, содержащей часть баллона, микросопло и часть вакуумной камеры, как показано на рисунке 6.1. Параметры геометрии были такие же, как в эксперименте [323]: $L = L_1 + L_0 + L_2 = 61L_0 = 366D_0$ (общая длина) и $D_1 = D_2 = 6D_0$ (общий диаметр). Параметр нормировки x_n был равен $0.5D_0$. В безразмерных переменных длина области составила $L_x = 732$, диаметр $D_y = D_z = 12$.

В двумерном случае расчеты проводились в прямоугольнике $L_x \times D_y$ на декартовой сетке с параметрами $h_x^{(k)} = h_y^{(k)} = 2^{-k}$, $N_x^{(k)} = 732 \cdot 2^k$, $N_y^{(k)} = 12 \cdot 2^k$, $N_C^{(k)} = N_x^{(k)} \cdot N_y^{(k)}$, $k = 1 \div 6$. В трехмерном случае расчеты проводились в цилиндре квадратного сечения с общими габаритами $L_x \times D_y \times D_z$ на декартовой сетке с параметрами $h_x^{(k)} = h_y^{(k)} = h_z^{(k)} = 2^{-k}$, $N_x^{(k)} = 732 \cdot 2^k$, $N_y^{(k)} = N_z^{(k)} = 12 \cdot 2^k$, $N_C^{(k)} = N_x^{(k)} \cdot N_y^{(k)} \cdot N_z^{(k)}$, $k = 1 \div 4$. Параметры сеток приведены в таблице 6.4.

Таблица 6.4 – Параметры декартовых сеток

№ сетки	d^*	Число расчетных ячеек	Число ячеек, граничащих с металлом	Объем трехмерной ячейки сетки, $мкм^3$	Число молекул азота в 3D-ячейке** сетки при н.у.	Число молекул азота в 3D-ячейке** сетки при $p=0.00008$
2.1	2	34656	92	465484.38	1.16e+13	9.26e+8
2.2	2	138624	180	58185.55	1.45e+12	1.16e+8
2.3	2	554496	356	7273.19	1.81e+11	1.45e+7
2.4	2	2217984	708	909.15	2.26e+10	1.81e+6
2.5	2	8871936	1412	113.64	2.83e+9	2.26e+5
2.6	2	35487744	2820	14.21	3.53e+8	28258
3.1	3	829824	1432	465484.38	1.16e+13	9.26e+8
3.2	3	6638592	5880	58185.55	1.45e+12	1.16e+8
3.3	3	53108736	23800	7273.19	1.81e+11	1.45e+7
3.4	3	424869888	95736	909.15	2.26e+10	1.81e+6

*) Здесь d – размерность пространства.

**) На молекулярном уровне всегда используются трехмерные ячейки.

Рассмотрим решение с учетом баллона и сопла. На рисунке 6.13 представлены двумерные распределения плотности, давления, температуры, модуля скорости и концентрации молекул азота на начальном этапе в момент времени $t = 0.055 мкс$, полученные на сетке 2.2. Данный момент времени соответствует прохождению тепловой волны через середину микросопла. Динамику процесса можно проследить на примере распределения концентрации, представленной на рисунках 6.14 и 6.15 нормированной на величину $10^{24} м^{-3}$ в различные моменты времени. Анализ приведенных данных показывает, что прохождение газа в микросопло реализуется симметричным образом и соответствует физике процесса.

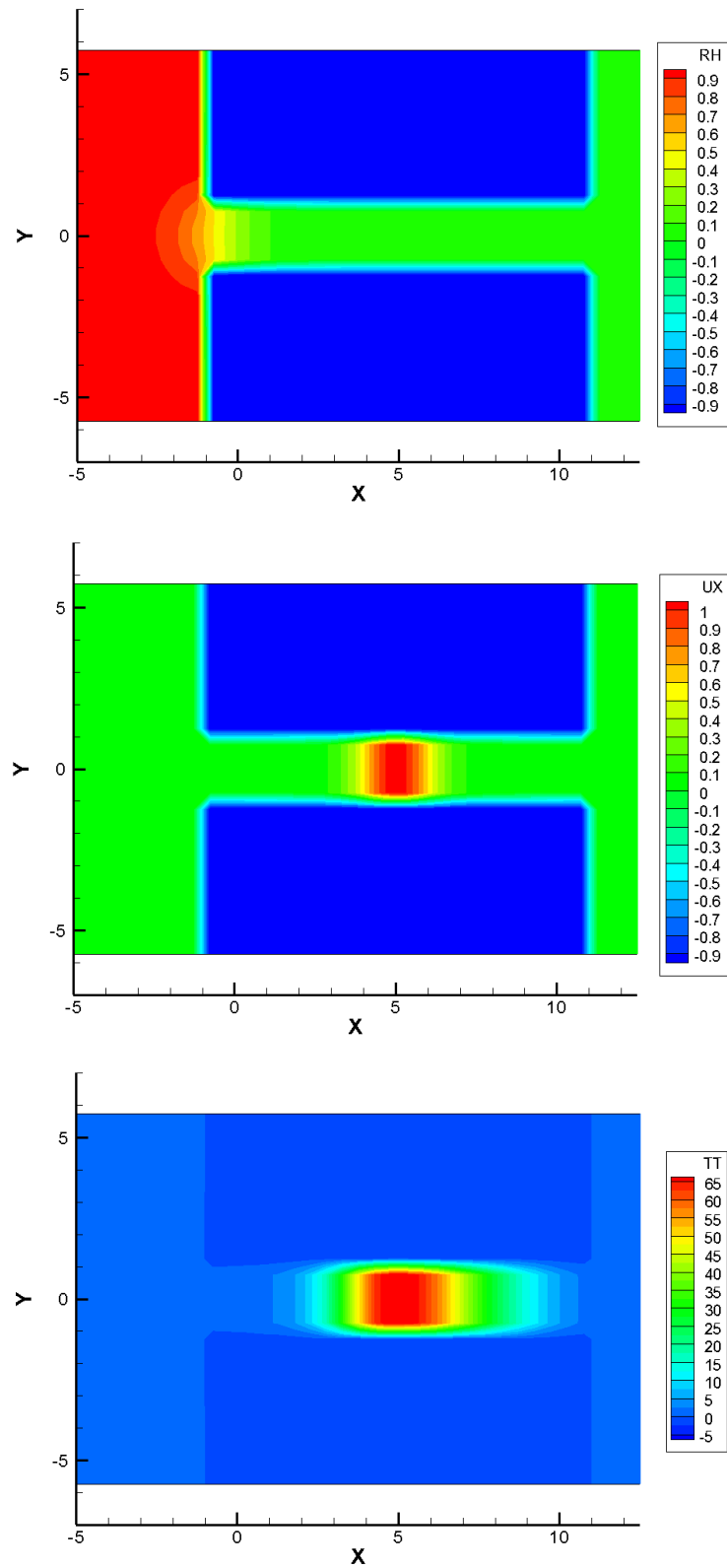


Рисунок 6.13 – Распределения плотности (сверху), продольной скорости (в середине) и температуры (внизу) в момент времени $t = 0.055 \mu\text{с}$, рассчитанные на сетке 2.2

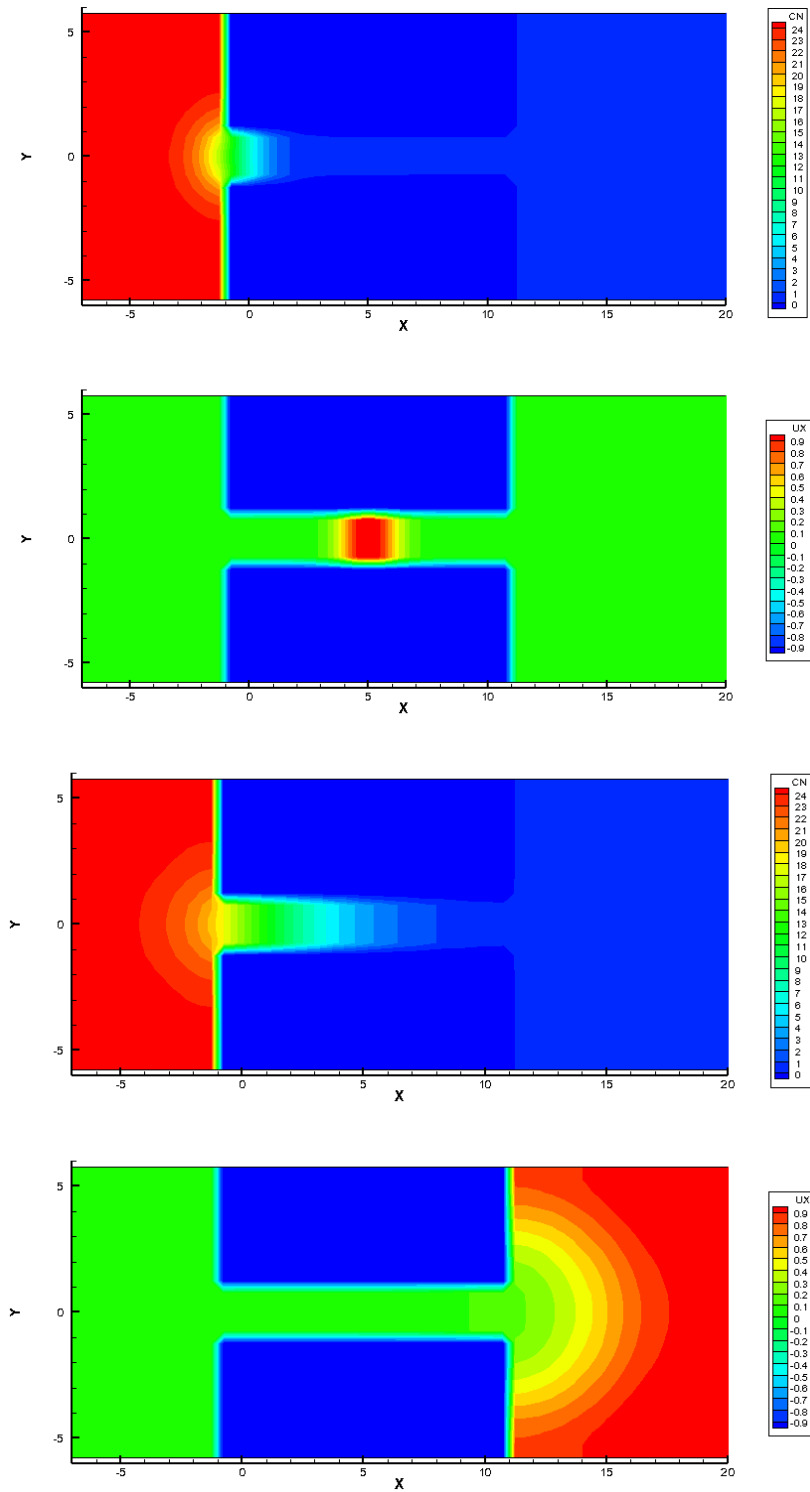


Рисунок 6.14 – Распределения нормированной концентрации молекул азота и продольной компоненты скорости в моменты времени $t = 0.0553, 0.553$ мкс , рассчитанные на сетке 2.2. Рисунки располагаются соответственно сверху вниз; сначала показана концентрация, затем продольная скорость

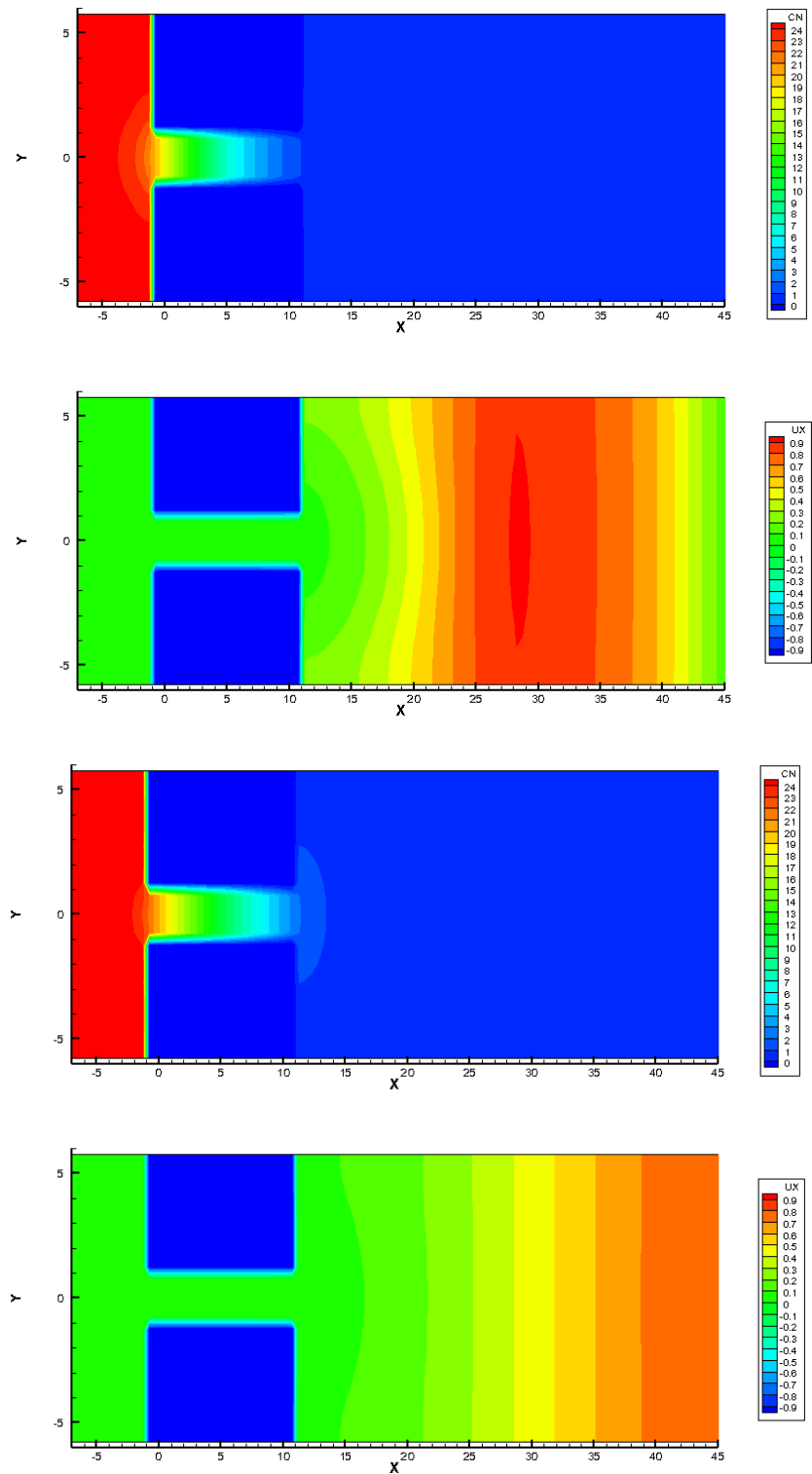


Рисунок 6.15 – Распределения нормированной концентрации молекул азота и продольной компоненты скорости в моменты времени $t = 1.106, 2.211 \mu\text{с}$, рассчитанные на сетке 2.2. Рисунки располагаются соответственно сверху вниз; сначала показана концентрация, затем продольная скорость

По алгоритмам класса 2 были проведены и трехмерные расчеты на указанных выше сетках. Они подтвердили полученные в двумерном случае результаты, а именно динамику распределений основных газодинамических параметров. Отличие трехмерных расчетов от двумерных выразилось в разнице времен формирования конкретных распределений. В частности, отличались примерно в 1.3 раза времена выхода тепловой волны из микросопла. По-видимому, это связано с выбранной квадратной формой микросопла.

Далее рассмотрим данные двумерных расчетов смеси азота и водорода, выполненных на основе алгоритмов класса 2 и использующих полученные методом молекулярной динамики материальные коэффициенты вязкости, теплопроводности, диффузии, сжимаемости и теплоемкости. Расчеты проводились на сетках 2.2-2.4. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными работы [323]. На рисунках 6.16 и 6.17 показаны профили нормированной концентрации компонент смеси на оси вакуумной камеры для четырех вариантов параметров. Как видно из рисунка основное поведение кривых совпадает с данными эксперимента. Таким образом, с помощью разработанного подхода возможно получение информации о реальных физических процессах.

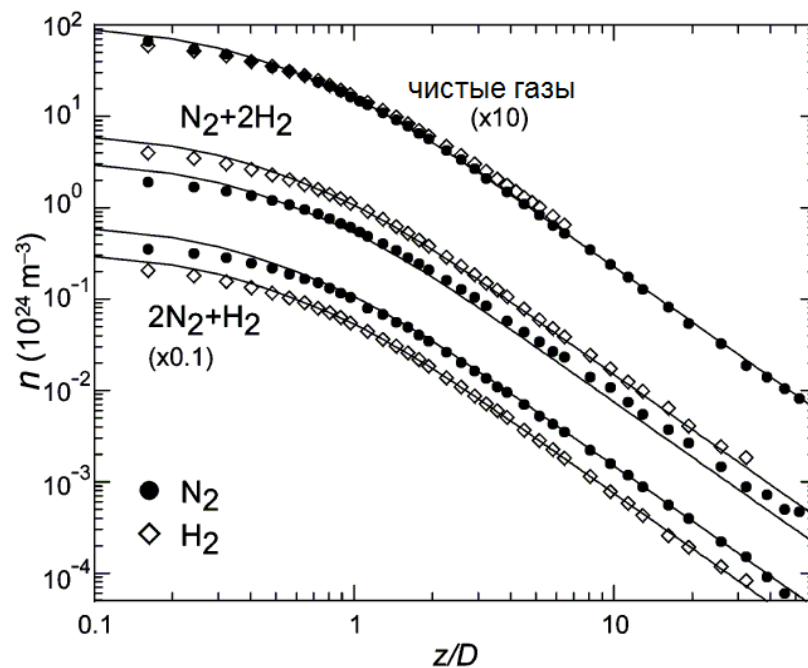


Рисунок 6.16 – Установившиеся профили нормированной концентрации смеси азота и водорода, полученные в натурном эксперименте [323]

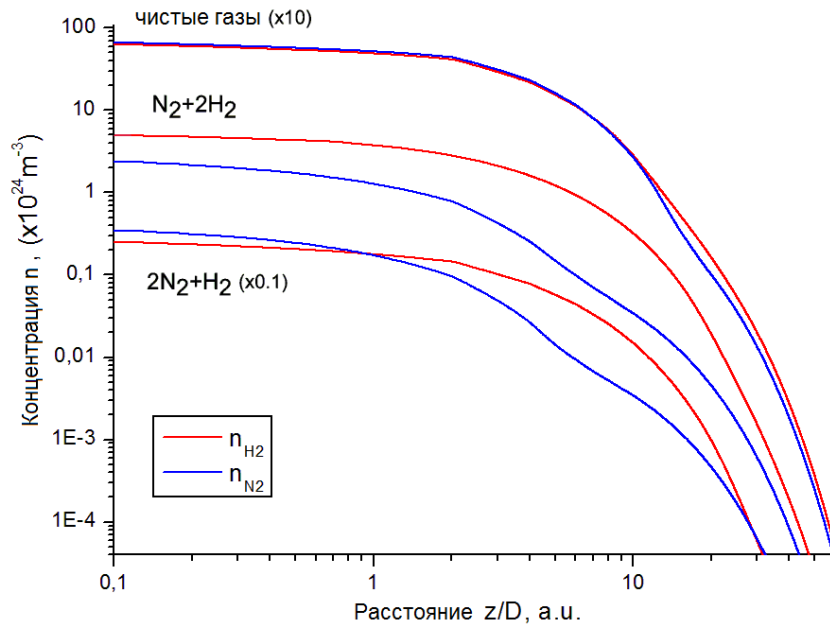


Рисунок 6.17 – Установившиеся профили нормированной концентрации смеси азота и водорода, полученные при численном расчете

6.3 Выводы по главе

- Проведено применение разработанного многомасштабного подхода к решению практической задачи об истечении азот-водородной смеси в вакуумную камеру через цилиндрическое сопло малого размера.
- В рамках данной задачи получены базовые зависимости материальных коэффициентов и параметров УРС для чистого азота и для смеси азота и водорода в диапазоне температур от 100 до 400 К близкие к известным теоретическим и экспериментальным данным.
- Проведено решение задачи в одномерном, двухмерном и трехмерном случаях на последовательности вложенных сеток. Сравнение решений подтвердило их сходимость к распределениям, отвечающим теоретическим оценкам.
- В численных экспериментах показано, что решения, получаемые по КГД уравнениям и по уравнениям Навье-Стокса, в динамике совпадают с высокой точностью за исключением узких зон, содержащих сильную ударную волну. В стационарном режиме данные решения практически идентичны.
- Проведено сравнение решения двумерной задачи с экспериментальными данными. Как показал анализ полученных данных, разница стационарных распределений концентраций компонент смеси не превосходит 5%.

Заключение

В диссертации получены следующие основные результаты.

1. Предложен новый многомасштабный двухуровневый подход к математическому моделированию газодинамических течений в микро- и наноканалах технических систем, легко адаптируемый к современной вычислительной технике и охватывающий все стадии моделирования, включая формулировку математических моделей, создание численных алгоритмов, разработку их параллельных версий и соответствующих компьютерных программ, проведение тестовых и верификационных расчетов.

2. Разработаны численные алгоритмы реализации многомасштабного подхода в четырех вариантах, отличающиеся назначением и методикой вычислений.

3. Разработаны параллельные версии указанных алгоритмов и реализующие их программы, ориентированные на использование современных компьютеров и суперкомпьютеров с гибридной архитектурой.

4. Разработан комплекс параллельных программ для моделирования течения газовых смесей в сложных технических микросистемах с помощью методов механики сплошной среды и молекулярной динамики в рамках многомасштабных моделей.

5. Разработан комплекс параллельных программ для моделирования свойств материалов технических нано- и микросистем с помощью метода молекулярной динамики.

6. Выполнен ряд тестовых и верификационных расчетов по моделированию отдельных компонент микросистемы (свойств газов и материалов стенок в условиях термодинамического равновесия), а также общего течения в канале, получен репрезентативный набор данных для валидации полученных численных результатов.

7. Выполнено исследование процессов взаимодействия газа с металлической стенкой с учетом атомной структуры поверхности. Разработана методика определения методами молекулярной динамики параметров граничных условий для решения практических газодинамических задач на макроскопическом уровне.

Наиболее перспективными направлениями дальнейшего развития работы являются:

- расширение модельного ряда и программной базы по потенциалам взаимодействия различных молекулярных систем;

- накопление базы данных по свойствам разных веществ в широком диапазоне термодинамических параметров;

- расширение подхода путем включения в рассмотрение дополнительных математических моделей на макро- и мезоуровнях;

- решение актуальных фундаментальных и прикладных проблем нанотехнологий.

Результаты работы могут быть использованы:

- при расчетах свойств различных веществ, в том числе перспективных наноматериалов и нанопокровов, применяющихся в современной электронике и медицине,

- при моделировании нелинейных процессов в установках газодинамического напыления, газоанализаторах, медицинских приборах по очистке лекарственных препаратов методом испарения в газовую фазу и последующего осаждения и др.,

- в качестве программного продукта для обучения студентов и аспирантов.

Результаты работы могут использоваться специалистами институтов Российской академии наук и ФАНО, МГУ имени М.В. Ломоносова и других профильных вузов, отечественными и зарубежными компаниями, занимающимися разработкой высокотехнологичного прикладного программного обеспечения компьютеров и суперЭВМ.

Список литературы

1. Абалакин И.В., Бахвалов П.А., Горобец А.В., Дубень А.П., Козубская Т.К. Параллельный программный комплекс NOISETTE для крупномасштабных расчетов задач аэродинамики и аэроакустики // Вычислительные методы и программирование. – 2012. – Т. 13, № 2. – С. 222–237.
2. Абрамович Г.Н. Прикладная газовая динамика: учебное руководство. – 5-е изд., перераб. и доп. – М.: Наука, 1991. – 600 с.
3. Алхимов А.П., Клинков С.В., Косарев В.Ф., Фомин В.М. Холодное газодинамическое напыление: теория и практика. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. – 536 с.
4. Аристов В.В., Черемисин Ф.Г. Расщепление неоднородного кинетического оператора уравнения Больцмана // Докл. АН СССР. – 1976. – Т. 231, № 1. – С. 49–52.
5. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. Т. 1. – М.: Мир, 1979. – 458 с.
6. Бабичев А.П., Бабушкина Н.А., Братковский А.М. и др. Физические величины. Справочник. / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.
7. Белоцерковский О.М., Хлопков Ю.И. Методы Монте-Карло в механике жидкости и газа. – М.: Азбука, 2008. – 330 с.
8. Берд Г. Молекулярная газовая динамика. – М.: Мир, 1981. – 319 с.
9. Бертяев Б.И., Реут И.И. Об одном уравнении состояния и внутреннем давлении в металлах // Известия Самарского научного центра Российской академии наук, 2010. – Т. 12, №4. – С. 70–75.
10. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. – 3-е изд., перераб. и доп. – М.: Наука, 1971. – 400 с.
11. Больцман Л. Избранные труды. – М.: Наука, 1984. – 590 с.
12. Больцман Л. Лекции по теории газов. – М.: Гостехиздат, 1956. – 556 с.
13. Боресков А.В., Харламов А.А. Основы работы с технологией CUDA. – М.: ДМК Пресс., 2010. – 232 с.
14. Брунауэр С. Адсорбция газов и паров. Т. 1. Физическая адсорбция. – М.: ГИИЛ, 1948. – 784 с.
15. Булавин Л.А., Выгорницкий Н.В., Лебовка Н.И. Компьютерное моделирование физических систем. – Долгопрудный: Издательский Дом "Интеллект", 2011. – 352 с.
16. Булат П.В., Упырев В.В. Расчет ударно-волновых структур в реальном газе // Ударные волны: Сборник научных статей Международного научного подразделения Университета ИТМО "Механики и энергетических систем" / КБ "Динамика"; Университет ИТМО. – Краснодар: Издательский Дом – Юг, 2015. – С. 271–290.

17. Бурнышев И.Н., Бесогонов В.В. Моделирование поведения водорода в ОЦК-решетке железа при высоких скоростях нагрева. /Актуальные проблемы физики твердого тела: сб. докл. Международной научной конференции 26 – 28 октября 2005 г. – Минск: Изд. центр БГУ, 2005. – Т.2. – С. 312–314.
18. Валуев А.А., Норман Г.Э., Подлипчук В.Ю. Метод молекулярной динамики: теория и приложения // Математическое моделирование. Физико–химические свойства вещества / под ред. А.А. Самарского, Н.Н. Калиткина. – М.: Наука, 1989. – С. 5–40.
19. Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. – М.: Наука, 1972. – 721 с.
20. Веденяпин В.В. Кинетические уравнения Больцмана и Власова. – М.: Физматлит, 2001. – 112 с.
21. Власов В.И. Улучшение метода статистических испытаний (Монте-Карло) для расчета течений разреженных газов // Докл. АН СССР. – 1966. – Т. 167, №5. – С. 1016–1018.
22. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. – СПб: БХВ–Петербург, 2004. – 608 с.
23. Гаврилин В.А., Злотник А.А. О пространственной дискретизации одномерной квазигазодинамической системы уравнений с общими уравнениями состояния и балансе энтропии. // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2015. – Т. 55, №2. – С. 267–284.
24. Гайдук Е.Д., Салеев В.А. Моделирование явлений переноса фуллеренов в жидкости методом молекулярной динамики // Вестник СамГУ. "Естественнонаучная серия". – 2011. – №5(86). – С. 93–103.
25. Галанин М.П., Савенков Е.Б. Методы численного анализа математических моделей. – М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2010. – 591 с.
26. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. – М.: Издательство иностранной литературы, 1961. – 928 с.
27. Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я., Крайко А.Н., Прокопов Г.П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. – М.: Наука, 1976. – 400 с.
28. Головченко Е.Н. Параллельный пакет декомпозиции больших сеток // Математическое моделирование. – 2011. – Т. 23, №10. – С. 3–18.
29. Головченко Е.Н., Якобовский М.В. Пакет параллельной декомпозиции больших сеток GridSpiderPar // Вычислительные методы и программирование. – 2015. – Т. 16. – С. 507–517.
30. Голубев И.Ф. Вязкость газов и газовых смесей. – М.: Физматгиз, 1959. – 375 с.

31. Горелов С.Л. Компьютерное моделирование аэротермодинамики летательных аппаратов в верхних слоях атмосферы // Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы. – М.: ЦАГИ, 2015. – 197 с.
32. Горелов С.Л., Ерофеев А.И. Влияние внутренних степеней свободы на обтекание пластины гиперзвуковым потоком разреженного газа // Изв. АН СССР, МЖГ. – 1978. – № 6. С. 151–156.
33. Горелов С.Л., Русаков С.В. Модель вращательно-колебательного взаимодействия молекул для метода прямого статистического моделирования // Математическое моделирование. – 2000. – Т. 12, №9. – С. 55–64.
34. Горелов С.Л., Русаков С.В. Модель шероховатых сферических молекул переменного диаметра // Математическое моделирование. – 1997. – Т. 9, №10. – С. 43–49.
35. Граур И.А., Елизарова Т.Г., Кудряшова Т.А., Поляков С.В. Численное исследование струйных течений с использованием многопроцессорных систем // Матем. моделирование – 2002. – Т. 14, №6. – С. 51–62.
36. Граур И.А., Елизарова Т.Г., Четверушкин Б.Н. Численное моделирование обтекания каверн сверхзвуковым потоком вязкого сжимаемого газа // Инженерно-физический журнал. – 1991. – Т. 61(4). – С. 570–577.
37. Грошковский Я. Техника высокого вакуума. – М.: Мир, 1975. – 622 с.
38. Грэд Г. Кинетическая теория газов // Термодинамика газов / под ред. В.С. Зуева. – М.: Машиностроение, 1970. – 169 с.
39. ГСССД 4-78 Азот жидкий и газообразный. Плотность, энтальпия, энтропия и изобарная теплоемкость при температурах 70-1500 К и давлениях 0,1-100 МПа. – М.: Издательство стандартов, 1978. – 12 с.
40. ГСССД 49-83. Азот. Второй вириальный коэффициент, коэффициенты динамической вязкости, теплопроводности, самодиффузии и число Прандтля разреженного газа в диапазоне температур 65-2500 К. Таблицы стандартных справочных данных. Вигасин А.А., Люстерник В.Е., Фокин Л.Р. – М.: Издательство стандартов, 1984. – 30 с.
41. ГСССД 89-85 Азот. Коэффициенты динамической вязкости и теплопроводности при температурах 65...1000 К и давлениях от состояния разреженного газа до 200 МПа. Таблицы стандартных справочных данных. Козлов А.Д., Кузнецов В.М. и др. – М.: Издательство стандартов, 1986. – 18 с.
42. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. Часть 1. – М.: Мир, 1990. – 352 с.

43. Диаграммы состояния двойных металлических систем: Справочник: В 3 т.: Т. 3. Кн. 1 / Под общ. ред. Н.П. Лякишева. – М.: Машиностроение, 2001. – 872 с.
44. Дорофеев А.А. Основы теории тепловых ракетных двигателей. Теория, расчет и проектирование: учебник. – 3-е изд., перераб. и доп. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2014. – 571 с.
45. Еленин Г.Г., Шляхов П.И. Геометрическая структура пространства параметров трехстадийных симплектических методов Рунге-Кутты // Математическое моделирование. – 2011. – Т. 23, №5. – С. 16–34.
46. Елизарова Т.Г. Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. – М.: Научный мир, 2007. – 352 с.
47. Елизарова Т.Г., Злотник А.А., Четверушкин Б.Н. О квазигазо- и гидродинамических уравнениях бинарных смесей газов // Доклады Академии Наук. – 2014. – Т. 459, №4. – С. 395–399.
48. Елизарова Т.Г., Соколова М.Е., Шеретов Ю.В. Квазигазодинамические уравнения и численное моделирование течений вязкого газа // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2005. – Т. 45, №3. – С. 545–556.
49. Жданов В.М., Алиевский М.Я. Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. – М.: Наука, 1989. – 335 с.
50. Закиров М.А. Свободномолекулярные течения в сложных каналах // Ученые записки ЦАГИ. – 1973. – Т. 4, Вып. 2. – С. 112–119.
51. Злотник А.А. О новой пространственной дискретизации многомерной квазигазодинамической системы уравнений со свойством неубывания полной энтропии // Доклады Академии наук. Математика. – 2016. – Т. 469, №4. – С. 402–408.
52. Злотник А.А. О квазигазодинамической системе уравнений с общими уравнениями состояния и источником тепла // Матем. Моделирование. – 2010. – Т. 22, №7. – С. 53–64.
53. Злотник А.А. О консервативных пространственных дискретизациях баротропной квазигазодинамической системы уравнений с потенциальной массовой силой // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2016. – Т. 56, №2. – С. 301–317.
54. Злотник А.А., Гаврилин В.А. О дискретизации одномерной квазигидродинамической системы уравнений для реального газа // Вестник Московского энергетического института. – 2016. – №1. – С. 5–14.
55. Ильин В.П. Разностные методы решения эллиптических уравнений. – Новосибирск: НГУ, 1970. – 263 с.

56. Ильин О.И., Климин В.С. Термодинамический анализ взаимодействия в системе Ni–Cr–Si при выращивании углеродных нанотрубок методом химического осаждения из газовой фазы // Известия Южного федерального университета. Серия: "Технические науки". – 2014. – Вып. №9(158). – С. 79–92.
57. Каплан И.Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. – М.: Наука, 1982. – 312 с.
58. 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.
59. Карамзин Ю.Н., Кудряшова Т.А., Подрыга В.О., Поляков С.В. Моделирование сверхзвуковых течений газа в металлических микроканалах // Тезисы докладов XX Всероссийской конференции и Молодежной школы–конференции «Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов решения задач математической физики», посвященным памяти К.И. Бабенко (Дюрсо, 15–20 сентября 2014 г.). – М: Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша, 2014. – С. 68–69.
60. Карамзин Ю.Н., Кудряшова Т.А., Подрыга В.О., Поляков С.В. Мультимасштабное моделирование в задачах сверхзвукового газодинамического напыления // Математические Модели и Моделирование в Лазерно–Плазменных Процессах и Передовых Научных Технологиях (LPPM3 2015): Сборник аннотаций докладов Тринадцатого Международного Междисциплинарного Семинара, 30 Мая – 6 Июня 2015, Петровац, Черногория. – Подгорица, Черногория: Пресс АП ПРИНТ, 2015. – С. 62.
61. Карамзин Ю.Н., Кудряшова Т.А., Поляков С.В. Моделирование течений смесей разреженных газов в микроканалах технических систем // Сеточные методы для краевых задач и приложения. Материалы Девятой Всероссийской конференции. – Казань: Отечество, 2012. – С. 208–217.
62. Карлеман Т. Математические задачи кинетической теории газов. – М.: ИЛ, 1960. – 118 с.
63. Китайгородский А.И. Молекулярные кристаллы. – М.: Наука, 1971. – 424 с.
64. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. – М.: Наука, 1978. – 791 с.
65. Ковалев В.Л., Сазонова В.Ю., Якунчиков А.Н. Моделирование взаимодействия струи разреженного газа с преградой методами молекулярной динамики // Вестн. Моск. ун–та. Матем. Механ. – 2008. – №2. – С. 56–58.
66. Ковалев В.Л., Якунчиков А.Н. Исследование течения и теплообмена в микро– и наноканалах методами молекулярной динамики // Вестн. Моск. ун–та. Матем. Механ. – 2008. – №5. – С. 67–70.

67. Ковалев В.Л., Якунчиков А.Н. Коэффициенты аккомодации для молекулярного водорода на поверхности графита // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. – 2010. – №6. – С. 158–165.
68. Коган М. Н. Динамика разреженного газа. – М.: Наука, 1967. – 440 с.
69. Козелков А.С., Дерюгин Ю.Н., Зеленский Д.К., Глазунов В.А., Голубев А.А., Денисова О.В., Лашкин С.В., Жучков Р.Н., Тарасова Н.В., Сизова М.А. Многофункциональный пакет программ ЛОГОС для расчета задач гидродинамики и тепломассопереноса на суперЭВМ. Базовые технологии и алгоритмы // Сборник трудов XII Международного семинара “Супервычисления и математическое моделирование”. 11–15 октября 2010. Саров, Россия. – Саров: РФЯЦ–ВНИИЭФ, 2011. – С. 215–230.
70. Королева О. Н., Мажукин В. И. Математическое моделирование лазерного плавления и испарения многослойных материалов // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2006. – Т. 46, №5. – С. 887–901.
71. Косилов А.Т., Маливанчук А.А., Михайлов Е.А. Молекулярно-динамическое моделирование двухкомпонентных кластеров Cu–Ni, Cu–Pd // Физика твердого тела. – 2008. – Т. 50, Вып. 7. – С. 36–40.
72. Кошкин Н., Васильчикова Е. Элементарная физика. Справочник. – М.: Столетие, 1996. – 304 с.
73. Кривовичев Г.В. Об устойчивости решеточной кинетической схемы Больцмана для расчета плоских течений // Вычислительные методы и программирование. – 2011. – Т. 12, Вып. 1. – С. 194–204.
74. Кривцов А.М. Описание пластических эффектов при молекулярно-динамическом моделировании откольного разрушения // Физика твердого тела. – 2004. – Т. 46, Вып. 6. – С. 1025–1030.
75. Кривцов А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. – 304 с.
76. Кривцов А.М., Кривцова Н.В. Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела // Дальневосточный математический журнал ДВО РАН. – 2002. – Т. 3, №2. – С. 254–276.
77. 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.

78. Кудряшова Т.А., Подрыга В.О., Поляков С.В. Параллельная программа расчета на ЦПУ течений газа в микроканалах на основе уравнений квазигазодинамики GIMM_APP_QGD_CPU программного комплекса GIMM_NANO, версия 1. Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ № 2016612717, 9 марта 2016.
79. Кудряшова Т.А., Подрыга В.О., Поляков С.В. Параллельная программа расчета на ЦПУ течений газа в микроканалах на основе уравнений квазигазодинамики и методов молекулярной динамики GIMM_APP_QGD_MD_CPU программного комплекса GIMM_NANO, версия 1. Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ No. 2016612716, 9 марта 2016.
80. Кудряшова Т.А., Поляков С.В., Свердлин А.А. Расчет параметров течения газа вокруг спускаемого аппарата // Матем. моделирование. – 2008. – Т. 20, №7. – С. 13–22.
81. Янилкин А.В., Жилияев П.А., Куксин А.Ю., Норман Г.Э., Писарев В.В., Стегайлов В.В. Применение суперкомпьютеров для молекулярно-динамического моделирования процессов в конденсированных средах // Вычислительные методы и программирование. – 2010. – Т. 11. – С. 111–116.
82. Кутателадзе С.С. Основы теории теплообмена. – М.: Атомиздат, 1979. – 416 с.
83. Кутателадзе С.С. Теплопередача и гидродинамическое сопротивление. – М.: Энергоатомиздат, 1990. – 367 с.
84. Кутателадзе С.С., Боришанский В.М. Справочник по теплопередаче. – М.: Гос. энергетическое издательство, 1958. – 418 с.
85. Лагарьков А.Н., Сергеев В.М. Метод молекулярной динамики в статистической физике // Успехи физических наук. – 1978. – Т. 125, Вып. 3. – С. 409–448.
86. Ланфорд О.Э., Гринберг, Полевчак Я. и др. Неравновесные явления: уравнение Больцмана. – М.: Мир, 1986. – 269 с.
87. Мажукин В.И., Шапранов А.В. Математическое моделирование процессов нагрева и плавления металлов. Часть I. Модель и вычислительный алгоритм // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. – 2012. – № 31. – 27 с.
88. Мажукин В.И., Шапранов А.В. Математическое моделирование процессов нагрева и плавления металлов. Часть II. Вычислительный эксперимент // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. – 2012. – № 32. – 25 с.
89. Майер Р.В. Компьютерное моделирование физических явлений. – Глазов: ГГПИ, 2009. – 112 с.
90. Марчук Г.И. Методы расщепления. – М.: Наука, 1988. – 263 с.
91. Мейсон Э., Сперлинг Т. Вириальное уравнение состояния. – М.: Мир, 1982. – 280 с.

92. Метод молекулярной динамики в физической химии / отв. ред. Товбин Ю.К. – М.: Наука, 1996. – 334 с.
93. Мирный В., Фрэнер М. Об одной программе моделирования молекулярной динамики газа с элементами распараллеливания алгоритма // Вычислительные технологии. – 2001. – Т. 6, №3. – С. 32–50.
94. Миснар А. Теплопроводность твердых тел, жидкостей, газов и их композиций. – М.: Мир, 1968. – 464 с.
95. Михеев М.А., Михеева И.М. Основы теплопередачи. – М.: Энергия, 1977. – 344 с.
96. Морозов И.В., Норман Г.Э., Смыслов А.А. Объемная релаксация в простой жидкости, молекулярно-динамическое моделирование // ТВТ. – 2008. – Т. 46, №6. – С. 836–843.
97. Никитин Е.Е. Теория элементарных атомно-молекулярных процессов в газах. – М.: Химия, 1970. – 456 с.
98. Норман Г.Э., Куксин А.Ю., Стегайлов В.В., Янилкин А.В. Многоуровневое моделирование пластичности и разрушения металлов // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. – 2008. – Т. 7. – С. 1–7.
99. Норман Г.Э., Стегайлов В.В. Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // Математическое моделирование. – 2012. – Т. 24, № 6. – С. 3–44.
100. Официальная документация и учебные пособия по MPI [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.mcs.anl.gov/research/projects/mpi/>.
101. Официальная документация и учебные пособия по OpenMP [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.openmp.org>, <http://www.llnl.gov/computing/tutorials/openMP>.
102. Пестряев Е.М. Тестирование многоядерных графических процессоров на алгоритме молекулярной динамики // Математическое моделирование. – 2014. – Т. 26, №1. – С. 69–82.
103. Подмурная О.А. Определение параметров потенциальной функции парного взаимодействия молекул азота и воды // Письма в ЖТФ. – 2004. – Том 30, Вып. 2. – С. 72–75.
104. Подрыга В.О. Многомасштабный подход к трехмерному расчету течений газов и их смесей в микроканалах технических систем // Доклады Академии Наук. – 2016. – Т. 469, №6. – С. 656–658.
105. Подрыга В.О. Моделирование процесса установления термодинамического равновесия методом молекулярной динамики // Математическое моделирование. – 2010. – Т. 22, № 11. – С. 39–48.
106. Подрыга В.О. Моделирование процесса установления термодинамического равновесия нагретого металла // Математическое моделирование. – 2011. – Т. 23, № 9. – С. 105–119.

107. Подрыга В.О. Определение макропараметров реального газа методами молекулярной динамики // Математическое моделирование. –2015. –Т. 27, № 7. – С. 80–90.
108. Подрыга В.О. Параллельная программа расчета на ГПУ термодинамического равновесия в микросистемах газ–металл GIMM_APP_MD_GPU_Gas_Metal программного комплекса GIMM_NANO, версия 1. Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ No. 2015618972, 20 августа 2015.
109. Подрыга В.О. Расчет транспортных коэффициентов реальных газов с использованием метода молекулярной динамики // Тезисы докладов VIII Всероссийской конференции «Актуальные проблемы прикладной математики и механики», посвященной памяти А.Ф. Сидорова (Абрау–Дюрсо, 5–10 сентября 2016 г.). – Екатеринбург: УрО РАН, 2016. – С. 85–86.
110. Подрыга В.О., Жаховский В.В., С.В. Поляков. Молекулярное моделирование взаимодействия газового потока с металлической стенкой // Современные проблемы прикладной математики и информатики (МРАМС 2014): Тезисы докладов международной конференции, 25–29 августа 2014 г., Дубна, Россия. – Дубна: ОИЯИ, 2014. – С. 112–117.
111. Подрыга В.О., Поляков С.В. Параллельная программа расчета на ЦПУ термодинамического равновесия в микросистемах газ–металл GIMM_APP_MD_CPU_Gas_Metal программного комплекса GIMM_NANO, версия 1. Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ No. 2015618870, 19 августа 2015.
112. Подрыга В.О., Поляков С.В. Многомасштабное моделирование истечения газовой струи в вакуум // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. – 2016. – № 81. – 50 с.
113. Подрыга В.О., Поляков С.В. Многомасштабный подход к моделированию течений газа в микроканалах // Материалы XI Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ 2016), 25–31 мая 2016 г., Алушта, Россия. – М.: Изд–во МАИ, 2016. – С. 227–228.
114. Подрыга В.О., Поляков С.В. Многомасштабный подход к трехмерному расчету газового потока в микроканалах // Тезисы докладов XXI Всероссийской конференции и Молодежной школы–конференции «Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов решения задач математической физики», посвященным памяти К.И. Бабенко (Дюрсо, 5–11 сентября 2016 г.). – М: Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша, 2016. – С. 52–53.
115. Подрыга В.О., Поляков С.В. Молекулярно-динамический расчет макропараметров газа в потоке и на границе // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. – 2016. – № 80. – 26 с.

116. Подрыга В.О., Поляков С.В. Молекулярно–динамическое моделирование газового потока вблизи металлической стенки // Тезисы докладов VII Всероссийской конференции «Актуальные проблемы прикладной математики и механики», посвященной памяти А.Ф. Сидорова (Абрау–Дюрсо, 15–20 сентября 2014 г.). – Екатеринбург: УрО РАН, 2014. – С. 49–50.
117. Подрыга В.О., Поляков С.В. Молекулярно–динамическое моделирование процесса установления термодинамического равновесия нагретого никеля // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. – 2014. – No. 41. – 20 с.
118. Подрыга В.О., Поляков С.В. Молекулярно–динамическое моделирование течения разреженного газа в металлическом микроканале // Математические Модели и Моделирование в Лазерно–Плазменных Процессах и Передовых Научных Технологиях (LPPM3 2015): Сборник аннотаций докладов Тринадцатого Международного Междисциплинарного Семинара, 30 Мая – 6 Июня 2015, Петровац, Черногория. – Подгорица, Черногория: Пресс АП ПРИНТ, 2015. – С. 39.
119. Подрыга В.О., Поляков С.В. Молекулярно–динамическое моделирование установления термодинамического равновесия в никеле // Математическое моделирование. – 2015. – Т. 27, №3. – С. 3–19.
120. Подрыга В.О., Поляков С.В. Молекулярное моделирование взаимодействия газовой смеси с металлической поверхностью // Материалы Десятой Международной конференции «Сеточные методы для краевых задач и приложения», 24 – 29 сентября 2014 г., Казань. – Казань: Казанский университет, 2014. – С. 496–502.
121. Подрыга В.О., Поляков С.В. Мультимасштабное моделирование сильно разреженного газового потока внутри металлического микроканала // Материалы XIX Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС 2015), 24–31 мая 2015 г., Алушта, Россия. – М.: Изд–во МАИ, 2015. – С. 602–604.
122. 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.
123. Подрыга В.О., Поляков С.В. Параллельная реализация многомасштабного подхода для расчета течений газа в микроканалах технических систем // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2016): труды международной научной конференции (28 марта – 1 апреля 2016 г., г. Архангельск). – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2016. – С. 270–283.

124. Подрыга В.О., Поляков С.В. Применение метода молекулярной динамики к моделированию микросистем // *Фундаментальные основы МЭМС– и нанотехнологий: доклады V Всероссийской конференции, Новосибирск, 15–18 июня 2015 г.: в 2 т. / Новосибир. гос. архитектур.–строит. унит. (Сибстрин); Ин–т теплофизики им. С.С. Кутателадзе; Ин–т теорет. и приклад. механики им. С.А. Христиановича; под ред. проф. В.Я. Рудяка. – Новосибирск: НГАСУ (Сибстрин), 2015. – Вып. 5, Т. 2. – С. 73–77.*
125. Подрыга В.О., Поляков С.В. Суперкомпьютерное моделирование термодинамического равновесия в микросистемах // *Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2015): труды международной научной конференции (31 марта–2 апреля 2015 г., г. Екатеринбург). – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2015. – С. 237–249.*
126. Подрыга В.О., Поляков С.В. Трехмерное молекулярно–динамическое моделирование термодинамического равновесия нагретого никеля // *Компьютерные исследования и моделирование. – 2015. – Т. 7, №3. – С. 573–579.*
127. 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.*
128. Подрыга В.О., Поляков С.В., Жаховский В.В. Молекулярно–динамическое моделирование теплообмена газовых потоков с металлической пластиной // *Материалы X Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ 2014), 25–31 мая 2014 г., Алушта, Россия. – М.: Изд–во МАИ, 2014. – С. 271.*
129. 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, Вып. 1. – С. 123–138.*
130. 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 (131). – С. 105–115.*
131. Поляков С.В., Подрыга В.О., Пузырьков Д.В., Кудряшова Т.А. Суперкомпьютерное моделирование задач нанотехнологий методами молекулярной динамики // *Программа и тезисы докладов Шестого Московского суперкомпьютерного форума (МСКФ 2015), 29 октября, 2015, Москва, Россия [под ред. Волкова Д.В.]. – М.: Открытые системы, 2015. – С. 20–21.*
132. Попов А.М. *Вычислительные нанотехнологии: учебное пособие. – М.: КНОРУС, 2014. – 312 с.*

133. Попов И.В., Фрязинов И.В. Конечно-разностный метод решения трехмерных уравнений газовой динамики с введением адаптивной искусственной вязкости // Матем. моделирование. – 2011. – Т. 23, №3. – С. 89–100.
134. Попов И.В., Фрязинов И.В. Метод адаптивной искусственной вязкости для уравнений газовой динамики на треугольных и тетраэдральных сетках // Матем. моделирование. – 2012. – Т. 24, №6. – С. 109–127.
135. Попов И.В., Фрязинов И.В. Метод адаптивной искусственной вязкости численного решения уравнений газовой динамики. – М.: КРАСАНД, 2015. – 288 с.
136. Поршнева С.В. Компьютерное моделирование физических процессов в пакете MATLAB. – М.: Горячая линия - Телеком, 2003. – 592 с.
137. Поттер Д. Вычислительные методы в физике. – М.: Мир, 1975. – 392 с.
138. Проценко С.П., Байдаков В.Г., Козлова З.Р. Молекулярно–динамическое моделирование метастабильных фазовых состояний. Термодинамические свойства леннард–джонсовской системы // Вестник УГАТУ. - 2014. - №1 (62). – С. 214–223.
139. Пузырьков Д.В., Подрыга В.О., Поляков С.В. Распределенная визуализация в задачах моделирования термодинамического равновесия в микросистемах газ–металл методами молекулярной динамики // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2016): труды международной научной конференции (28 марта – 1 апреля 2016 г., г. Архангельск). – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2016. – С. 284–297.
140. Пузырьков Д.В., Подрыга В.О., Поляков С.В. Распределенная обработка данных в задачах моделирования термодинамического равновесия в микросистемах газ–металл методами молекулярной динамики // Вестник УГАТУ. – 2016. – Т. 20, №. 1(71). – С. 175–186.
141. Рапапорт Д.К. Искусство молекулярной динамики. – М.–Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", Ижевский институт компьютерных исследований, 2012. – 632 с.
142. Ривкин С.Л. Термодинамические свойства газов. – 4-е изд., перераб. – М.: Энергоатомиздат, 1987. – 288 с.
143. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. – Л.: Химия, 1982. – 592 с.
144. Розова М.Г., Шпанченко Р.В. Элементы структурной неорганической химии. Учебно–методическое пособие для студентов 1–ого курса. – М: Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, 2001. – 23 с.
145. Рудяк В.Я. Математические модели природных явлений и технологических процессов. В 2 ч. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2003. – Ч. 1. – 181 с.
146. Рудяк В.Я. Статистическая теория диссипативных процессов в газах и жидкостях. – Новосибирск: Наука, 1987. – 272 с.

147. Рудяк В.Я., Анискин В.М., Кузнецов В.Я., Маслов А.А., Минаков А.В., Миронов С.Г. Моделирование микро- и нанотечений. – Новосибирск: НГАСУ, 2014. – 342 с.
148. Рудяк В.Я., Белкин А.А., Егоров В.В., Иванов Д.А. Моделирование течений в наноканалах методом молекулярной динамики // Наносистемы: физика, химия, математика. – 2011. – Т. 2, №4. – С. 100–112.
149. Рыдалевская М.А., Морозов А.А. Равновесный состав и скорость звука реагирующих газовых смесей // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 1. – 2012. – Вып. 2. – С. 122–130.
150. Самарский А.А. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1977. – 616 с.
151. Самарский А.А., Андреев В.Б. Разностные методы для эллиптических уравнений. – М.: Наука, 1976. – 352 с.
152. Самарский А.А., Колдоба А.В., Повещенко Ю.А., Тишкин В.Ф., Фаворский А.П. Разностные схемы на нерегулярных сетках. – Минск: ЗАО «Критерий», 1996. – 196 с.
153. Сивухин Д.В. Общий курс физики. – М.: Наука, 1990. – Т. 2. Термодинамика и молекулярная физика. – 592 с.
154. Скворцов В.В., Успенский А.А., Берсенев А.Ю., Заболотный В.Т., Терновой А.И. Исследование изменения коэффициента аккомодации энергии молекул азота при ионно-атомном осаждении циркония на поверхность конструкционных материалов // Теплофизика высоких температур. – 1994. – Т. 32, №5. – С. 675–680.
155. Смирнов Б.М. Модель твердой сферы в физике плазмы и газа // УФН. – 1982. – Т. 138, Вып. 3. – С. 517–533.
156. Смирнов Г.С., Стегайлов В.В. Эффективность алгоритмов классической молекулярной динамики на суперкомпьютерном аппаратном обеспечении // Матем. моделирование. – 2016. – Т. 28, №5. – С. 95–108.
157. Солодовников С.Ф. Справочно-методические материалы к курсу «Основы кристаллохимии». – Новосибирск: НГУ, 2006. – 78 с.
158. Строение и свойства адсорбентов и катализаторов / Под ред. Б.Г. Линсена. – М.: Мир, 1973. – 648 с.
159. Сычев В.В., Вассерман А.А., Козлов А.Д., Спиридонов Г.А., Цымарный В.А. Термодинамические свойства азота. – М.: Изд-во стандартов, 1977. – 352 с.
160. Таблицы физических величин. Справочник / Ред. И.К. Кикоин. – М.: Атомиздат, 1976. – 1008 с.
161. Титарев В.А. Численный метод расчета двухмерных нестационарных течений разреженного газа в областях произвольной формы // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2009. – Т. 49, №7. – С. 1197–1211.

162. Турлей Е.В., Шайтан К.В., Балабаев Н.К. Динамическая гетерогенность фосфолипидного бислоя и диффузия молекул на границе раздела фаз. - М.: Биофизика. – 2005. – Т. 50., Вып. 6. – С. 1042–1047.
163. Федоренко Р.П. Введение в вычислительную физику: Учеб. пособие для вузов. – М.: Изд-во Моск. физ.-техн. ин-та, 1994. – 528 с.
164. Федоров Е.С. Краткое руководство по кристаллографии. Часть 1. – Спб.: Типогр. Ю.Н. Эрлих, 1891. – 98 с.
165. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Т. 1, Вып. 1–2. – М.: Мир, 1976. – 440 с.
166. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. – М.: Мир, 1976. – 556 с.
167. Фокин Л.Р., Калашников А.Н. Транспортные свойства смеси разреженных газов N₂–H₂ в базе данных ЭПИДИФ // Теплофизика высоких температур. – 2009. – Т. 47, №5. – С. 675–687.
168. Фрязинов И.В. Метод баланса и вариационно–разностные схемы // Дифференциальные уравнения. – 1980. – Т. 16, №7. – С. 1332–1343.
169. Харламов В.С., Трушин Ю.В., Журкин Е.Е., Лубов М.Н., Пецольдт Й. Исследование методом молекулярной динамики атомов Si и C и кластеров SiC на поверхности кремния // Журнал технической физики. – 2008. – Т. 78, Вып. 11. – С. 104–118.
170. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в компьютерной физике. – М.: Наука, 1990. – 176 с.
171. Химическая Энциклопедия. Том 1 / ред. Кнунянц И.Л. – М.: Советская энциклопедия, 1988. – 625 с.
172. Хлопков Ю.И. Статистическое моделирование в вычислительной аэродинамике. – М.: Азбука, 2006. – 158 с.
173. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. – М.: Мир, 1987. – 640 с.
174. Холмуродов Х.Т., Алтайский М.В., Пузынин И.В., Дардин Т., Филатов Ф.Т. Метод молекулярной динамики для моделирования физических и биологических процессов // Физика элементарных частиц и атомного ядра. – 2003. – Т. 34, Вып. 2. – С. 474–515.
175. Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. – М.: Изд-во иностранной литературы, 1960. – 512 с.
176. Черемисин Ф.Г. Консервативный метод вычисления интеграла столкновений Больцмана // Доклады РАН. – 1997. – Т. 357, №1. – С. 53–56.
177. Черчиньяни К. Математические методы в кинетической теории газов. – М.: Мир, 1973. – 246 с.

178. Черчиньяни К. Теория и приложения уравнения Больцмана. – М.: Мир, 1978. – 496 с.
179. Четверушкин Б.Н. Кинетически согласованные схемы в газовой динамике. – М.: Изд-во МГУ, 1999. – 232 с.
180. Четверушкин Б.Н. Кинетические схемы и квазигазодинамическая система уравнений. – М.: МАКС Пресс, 2004. – 328 с.
181. Чиркин В.С. Теплофизические свойства материалов ядерной техники. – М.: Атомиздат, 1967. – 474 с.
182. Шайтан К.В., Терёшкина К.Б. Молекулярная динамика белков и пептидов. Методическое пособие. – М.: Кафедра биоинженерии биологического факультета МГУ, 2004. – 108 с.
183. Шарипов Ф.М., Селезнев В.Д. Движение разреженных газов в каналах и микроканалах. – Екатеринбург: Изд-во УрО РАН, 2008. – 230 с.
184. Шахов Е.М. Метод исследования движений разреженного газа. – М.: Наука, 1974. – 209 с.
185. Шеретов Ю.В. Динамика сплошных сред при пространственно–временном осреднении. – Москва–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2009. – 400 с.
186. Шеретов Ю.В. Математическое моделирование течений жидкости и газа на основе квазигидродинамических и квазигазодинамических уравнений. – Тверь: ТвГУ, 2000. – 235 с.
187. Шноль Э.Э., Гривцов А.Г. и др. Метод молекулярной динамики в физической химии. – М.: Наука, 1996. – 336 с.
188. Яненко Н.Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики: лекции для студентов НГУ. – Новосибирск: НГУ, 1966. – 255 с.
189. Alexiadis A., Lockerby D.A., Borg M.K., Reese J.M. A Laplacian-based algorithm for non-isothermal atomistic-continuum hybrid simulation of micro and nano-flows // *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* – 2013. – Vol. 264. – P. 81–94.
190. Allen M.P. Introduction to Molecular Dynamics Simulation // *Computational Soft Matter: From Synthetic Polymers to Proteins*, Lecture notes. John von Neumann Institute for Computing, Julich, NIC Series. – 2004. – Vol. 23. – P. 1–28.
191. Allen M.P., Masters A.J. Some Notes on Einstein Relationships // *Mol. Phys.* – 1993. – Vol. 79. – P. 435–443.
192. Allen M.P., Tildesley A.K. *Computer Simulation of Liquids*. – Oxford: Clarendon Press, 1987. – 385 p.
193. Anisimov S.I., Zhakhovskii V.V., Inogamov N.A., Nishihara K., Oparin A.M. and Petrov Yu.V. Destruction of a Solid Film under the Action of Ultrashort Laser Pulse // *JETP Letters*. – 2003. – Vol. 77, No. 11. – P. 606–610.

194. ANSYS: ANSYS FLUENT и ANSYS CFX [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.ansys.com/products/fluids>, <http://www.fluent.com>.
195. Beeman D. Some multistep methods for use in molecular dynamics calculations // *Journal of Computational Physics*. – 1976. – Vol. 20, Issue 2. – P. 130–139.
196. 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.
197. Berendsen H.J.C., Spoel D., Drunen R. GROMACS: a message-passing parallel molecular dynamics implementation // *J. Computer Physics Communications*. – 1995. – Vol. 91. – P. 43–56.
198. Berthelot. D. Sur le Melange des Gaz // *Comptes Rendus de L'Academie des Sciences*. – 1889. – Vol. 126. – P. 1703–1706.
199. Bhatnagar P.L., Gross E.P. and Krook M. A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems // *Phys. Rev.* – 1954. – Vol. 94. – P. 511–525.
200. Bird G.A. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. – Oxford: Science simulations, Clarendon Press, 1994. – 478 p.
201. Borg M.K., Lockerby D.A. and Reese J.M. A hybrid molecular–continuum method for unsteady compressible multiscale flows // *Journal of Fluid Mechanics*. – 2015. – Vol. 768. – P. 388–414.
202. Box G.E.P., Muller M.E. A Note on the Generation of Random Normal Deviates // *The Annals of Mathematical Statistics*. – 1958. – Vol. 29, No. 2. – P. 610–611.
203. Brubaker M.E. and Trenary M. Adsorbate ordering processes and infrared spectroscopy: An FT-IRAS study of N₂ chemisorbed on the Ni (110) surface // *J. Chem. Phys.* – 1986. – Vol. 85. – P. 6100–6109.
204. Buddenberg J.W. and Wilke C.R. Calculation of Gas Mixture Viscosities // *Ind. Eng. Chem.* – 1949. – Vol. 41, No. 7. – P. 1345–1347.
205. Cai J., Wang J.-S. Friction between Si Tip And (001)-2x1 surface: a molecular dynamics simulation // *Computer Physics Communications*. – 2002. – Vol. 147, No. 1. – P. 145–148.
206. Cengel Yu.A., Boles M.A. *Thermodynamics: An Engineering Approach*. – 5th Ed. – Boston: McGraw-Hill College, 2006. – 988 p.
207. Cercignani C. Elementary solutions of the linearized gas – dynamics Boltzmann equation and their applications to the slip – flow problem // *Ann. Phys. (USA)*. – 1962. – Vol. 20, No. 2. – P. 219–233.
208. Cercignani C. Kinetic model for gas–surface interaction // *Transport Theory and Statist. Physics*. – 1971. – Vol. 1. – P. 101–109.

209. Cercignani C. *Mathematical Methods in Kinetic Theory*. – New York: Plenum Press, 1969. – 268 p.
210. Cercignani C. The method of elementary solutions for kinetic models with velocity–dependent collision frequency // *Ann. Phys.* – 1966. – Vol. 40. – P. 469–481.
211. Cercignani C., Sernagiotto F. The method of elementary solutions for time-dependent problems in linearized kinetic theory // *Ann. Phys.* – 1964. – Vol. 30. – P. 154–167.
212. COMSOL Multiphysics, Molecular Flow [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.comsol.ru/products>.
213. Cramer M.S. Numerical estimates for the bulk viscosity of ideal gases // *Phys. Fluids*. – 2012. – Vol. 24. – Paper 066102 (23 p.).
214. CUDA Toolkit Documentation v8.0. Santa Clara (CA, USA): NVIDIA Corporation, September 2016. URL: <http://docs.nvidia.com/cuda/#>.
215. Darken L.S. Diffusion, mobility and their interrelation through free energy in binary metallic systems // *Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers*. – 1948. – Vol. 175. – P. 184–201.
216. Daw M.S. Model of metallic cohesion: The embedded–atom method // *Phys. Rev.* – 1989. – Vol. 39, No. 11. – P. 7441–7452.
217. Daw M.S., Baskes M. Embedded–atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // *Physical Review B*. – 1984. – Vol. 29. – P. 6443–6453.
218. Daw M.S., Foiles S., Baskes M.I. The embedded–atom method: a review of theory and applications // *Materials Science Rep.* – 1993. – Vol. 9. – P. 251–310.
219. Docherty S.Y., Borg M.K., Lockerby D.A., Reese J.M. Multiscale simulation of heat transfer in a rarefied gas // *Int. J. Heat and Fluid Flow*. – 2014. – Vol. 50. – P. 114–125.
220. Dongarra J., Foster I., Fox J., Gropp W., Kennedy K., Torczon L. White A. *Sourcebook of Parallel Computing*. – Amsterdam: Morgan Kaufmann, 2002. – 866 p.
221. Elizarova T.G., Khokhlov A.A., Montero S. Numerical simulation of shock wave structure in nitrogen // *Phys. Fluids*. – 2007. – Vol. 19. – Paper 068102 (4 p.).
222. Ercolessi F. *A molecular dynamics primer*. Trieste: Spring College in Computational Physics, ICTO, 1997. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.fisica.uniud.it/~ercolessi/md/md/>
223. Erkok S. Empirical many–body potential energy functions used in computer simulations of condensed matter properties // *Physics Reports*. – 1997. – P. 79–105.
224. Eymard R., Gallouet T.R., Herbin R. The finite volume method // In: *Handbook of Numerical Analysis* (eds. P.G. Ciarlet, J.L. Lions). – Amsterdam: North Holland Publishing Company. – 2000. – Vol. VII. – P. 713–1020.

225. Fairbanks D.F., Wilke C.R. Diffusion Coefficients in Multicomponent Gas Mixtures // *Ind. Eng. Chem.* – 1950. – Vol. 42, No. 3. – P. 471–475.
226. Ferziger J.H., Kaper H.G. *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases.* – Amsterdam: North–Holland Publishing Company. – 1972. – 568 p.
227. FlowVision [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://flowvision.ru/>.
228. Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S. Embedded–atom–method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys // *Phys. Rev.* – 1986. – Vol. 33. – P. 7983–7991.
229. Frenkel D., Smit B. *Understanding Molecular Simulation. From Algorithm to Applications.* – New York: Academic Press, 2002. – 638 p.
230. Garzo V., Santos A., Brey J.J. A kinetic model for a multicomponent gas // *J. Phys. Fluids A.* – 1989. – Vol. 1, No. 2. – P. 380–383.
231. Gautschi W. *Numerical Analysis.* – 2nd ed. – New York: Springer / Birkhäuser, 2012. – 588 p.
232. Giordano N.J. *Computational Physics.* – New Jersey: Prentice Hall, 1997. – 419 p.
233. Golze M., Grunze M., and Unertl W. A multitechnique approach to chemisorption studies: The N₂–Ni(110) system // *Prog. Surf. Sci.* – 1986. – Vol. 22, No. 2. – P. 101–179.
234. Green M.S. Comment on a paper of Mori on time–correlation expressions for transport properties // *Phys. Rev.* – 1960. – Vol. 119, No. 3. – P. 829–830.
235. Green M.S. Markoff random processes and the statistical mechanics of time–dependent phenomena // *J. Chem. Phys.* – 1952. – Vol. 20, No. 8. – P. 1281–1295.
236. Green M.S. Markoff random processes and the statistical mechanics of time–dependent phenomena. II. Irreversible processes in fluids // *J. Chem. Phys.* – 1954. – Vol. 22, No. 3. – P. 398–413.
237. GROMACS [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.gromacs.org>.
238. Gross E.P., Krook M. Model for collision processes in gases: Small–amplitude oscillations of charged two–component systems // *Phys. Rev.* – 1956. – Vol. 102. – P. 593–598.
239. Grunze M., Kleban P.H., Unertl W., Rys N., Franz S. Evidence for a commensurate–incommensurate phase transition with an intermediate fluid phase: molecular nitrogen adsorbed on nickel(110) // *Physical Review Letters.* – 1983. – Vol. 51, No. 7. – P. 582–585.
240. Haile J.M. *Molecular Dynamics Simulations. Elementary Methods.* – New–York: John Wiley and Sons Inc., 1992. – 489 p.
241. Hairer E., Lubich C., Wanner G. *Geometric Numerical Integration: Structure–Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations.* – 2nd Ed. – Berlin: Springer-Verlag, Springer Series in Computational Mathematics, Vol. 31, 2006. – 644 p.

242. Heermann D.W. *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics*. – Berlin: Springer-Verlag, 1986. – 148 p.
243. Helfand E. Transport coefficients from dissipation in a canonical ensemble // *Phys. Rev.* – 1960 – Vol. 119, No. 1. – P. 1–9.
244. Hirschfelder J.O., Curtiss Ch.F., Bird R.B. *Molecular theory of gases and liquids*. – New York: John Wiley and Sons, Inc., 1954. – 1249 p.
245. HOOMD-blue [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://glotzerlab.engin.umich.edu/hoomd-blue/>.
246. Horn K., Dinardo J., Eberhardt W., Freund H.J., and Plummer E.W. The adsorption of N₂: Chemisorbed on Ni(110) and physisorbed on Pd(111) Original Research Article. // *Surf. Sci.* – 1982. – Vol. 118. – P. 465 – 495.
247. Karamzin Yu., Kudryashova T., Podryga V. and Polyakov S. Numerical Simulation of the Gas Mixture Flows on Hybrid Computer Systems // *Proceedings of The Ninth International Conference on Engineering Computational Technology (ECT2014)*, ed. by P. Ivanyi and B.H.V. Topping. – Stirlingshire, Scotland: Civil-Comp Press. – 2014. – Paper 28 (14 p.).
248. Karamzin Yu.N., Kudryashova T.A., Podryga V.O., Polyakov S.V. Multiscale modeling in supersonic gasdynamic sputtering problems // *Mathematical Models and Modeling in Laser Plasma Processes and Advanced Science Technologies (LPPM3 2015): Book of abstracts of the Thirteenth International Interdisciplinary Seminar, 30 May – 6 June, 2015, Petrovac, Montenegro*. – Podgorica, Montenegro: Press AP PRINT. – 2015. – P. 61.
249. Karypis G., Kumar V. METIS – A Software Package for Partitioning Unstructured Graphs, Partitioning Meshes, and Computing Fill-Reducing Orderings of Sparse Matrices. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis>.
250. Karypis G., Schloegel K., Kumar V. ParMETIS – Parallel Graph Partitioning and Sparse Matrix Ordering Library. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/parmetis>.
251. Krishna R., Baten J.M. The Darken relation for multicomponent diffusion in liquid mixtures of linear alkanes: an investigation using Molecular Dynamics (MD) simulations // *Ind. Eng. Chem. Res.* – 2005. – Vol. 44, No. 17. – P. 6939–6947.
252. Krishna R., Baten J.M. Validating the Darken relation for diffusion in fluid mixtures of varying densities by use of MD simulations // *Chem. Eng. Technol.* – 2006. – Vol. 29, No. 6. – P. 761–765.
253. Krook M. Continuum equation in the dynamics of rarefied gases // *J. of Fluid Mechanics*. – 1959. – Vol. 6, Issue 4. – P 523–531.

254. Kubo R. Statistical-mechanical theory of irreversible processes. I. General theory and simple applications to magnetic and conduction problems // *J. Phys. Soc. Japan.* – 1957. – Vol. 12, No. 6. – P. 570–586.
255. Kubo R., Yokota M., Nakajima S. Statistical-mechanical theory of irreversible processes. II. Response to thermal disturbance // *J. Phys. Soc. Japan.* – 1957. – Vol. 12, No. 11. – P. 1203–1211.
256. Kudryashova T.A., Podryga V.O., Polyakov S.V. HPC–Simulation of Gasdynamic Flows On Macroscopic And Molecular Levels // Моделирование нелинейных процессов и систем (MNPS 2015): Сборник тезисов Третьей международной конференции, 22–26 июня, 2015, Москва, Россия. – М.: Янус–К. – 2015. – С. 20–21.
257. LAMMPS [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://lammps.sandia.gov/>.
258. Landau L.D., Teller E. On the theory of sound dispersion // *Physik. Zeits. Sowjetunion.* – 1936. – Vol. 10. – P. 34–43.
259. Lebowitz J.L., Percus J.K. Thermodynamic Properties of Small Systems // *Phys. Rev.* – 1961. – Vol. 124, No. 6. – P. 1673–1681.
260. Lebowitz J.L., Percus J.K., Verlet L. Ensemble Dependence of Fluctuations with Application to Machine Computations // *Phys. Rev.* – 1967. – Vol. 153, No. 1. – P. 250–254.
261. Lemmon E.W., McLinden M.O., Friend D.G. Thermophysical Properties of Fluid Systems. In: Linstrom P.J., Mallard W.G. (eds.) NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, 20899. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://webbook.nist.gov>.
262. Lennard–Jones J.E. Cohesion // *Proceedings of the Physical Society.* – 1931. – Vol. 43, No. 5. – P. 461–482.
263. Lennard–Jones J. E. Wave functions of many–electron atoms // *Proc. Camb. Phil. Soc.* – 1931. – Vol. 27. – P. 469–480.
264. LeVeque R.J. Numerical Methods for Conservation Laws. – Basel: Birkhauser, 2008. – 232 p.
265. Levesque D., Verlet L. Molecular dynamics calculations of transport coefficients // *Molec. Phys.* – 1987. – Vol. 61, No. 1. – P. 143–159.
266. Levesque D., Verlet L., Kurkijarvi J. Computer “experiments” on classical fluids. IV. Transport properties and time-correlation functions of the Lennard-Jones liquid near its triple point // *Phys. Rev. A.* – 1973. – Vol. 7, No. 5. – P. 1690–1700.
267. Li R, Chen Zh., Wu W. Generalized Difference Methods for Differential Equations. Numerical analysis of finite volume methods. – New-York: Marcel Dekker Inc., 2000. – 472 p.
268. Lian Y.S., Xu K. A gas-kinetic scheme for multimaterial flows and its application in chemical reactions // *Journal of Computational Physics.* – 2000. – Vol.163, No. 2. – P. 349–375.

269. Lindsay A.L., Bromley L.A. Thermal Conductivity of Gas Mixtures // *Industrial and Engineering Chemistry*. – 1950. – Vol. 42, No. 8. – P. 1508–1511.
270. Lipnikov K., Vassilevski Yu. On control of adaptation in parallel mesh generation // *Engineering with Computers*. – 2004. – Vol. 20, No. 3. – P. 193–201.
271. Liu T., Temprano I., Jenkins S.J., King D.A. Non-dissociative activation of chemisorbed dinitrogen on Ni{110} by co-adsorbed lithium // *The Journal of Chemical Physics* – 2013. – Vol. 139, No. 18. – Paper 184708 (9 p.).
272. Liu X., Vlugt T.J.H., Bardow A. Predictive Darken equation for Maxwell-Stefan diffusivities in multicomponent systems // *Ind. Eng. Chem. Res.* – 2011. – Vol. 50, No. 17. – P. 10350–10358.
273. Lorentz H.A. Uber die Anwendung des Satzes vom Virial in der kinetischen Theorie der Gase // *Ann. Phys.* – 1881. – Vol. 248. – P. 127–136.
274. Luo L.-S. and Girimanji S.S. Theory of the lattice Boltzmann method: Two-fluid model for binary mixtures // *Phys. Rev. E*. – 2003. – Vol. 67, Issue 3. – Paper 036302 (11 p.).
275. Marchuk G.I. Some application of splitting-up methods to the solution of mathematical physics problems // *Aplikace matematiky*. – 1968. – Vol. 13, Issue 2. – P. 103–132.
276. Marchuk G.I. Splitting and alternating direction methods. *Handbook of Numerical Analysis* / Edited by P.G. Ciarlet, J.L. Lions. – Amsterdam: North-Holland Publishing Company. – 1990. – P. 197–462.
277. Maruyama S. Molecular dynamics method for microscale heat transfer // In: *Advances in Numerical Heat Transfer* / Eds. W. J. Minkowycz, E. M. Sparrow. – New York: Taylor & Francis. – 2000. – Vol. 2, Chap. 6. – P. 189–226.
278. Mason E.A., Saxena S.C. Approximate Formula for the Thermal Conductivity of Gas Mixtures // *The Physics of Fluids*. – 1958. – Vol. 1, No. 5. – P. 361–369.
279. McCourt F.R.W., Beenakker J.I.M., Kohler W.E. and Kuscer I. *Non-Equilibrium Phenomena in Polyatomic Gases*. – Oxford: Clarendon Press, 1990. – 879 p.
280. McQuarrie D.A. *Statistical Mechanics*. – New York: Harper & Row, 1976. – 641 p.
281. Meier K. *Computer Simulation and Interpretation of the Transport Coefficients of the Lennard-Jones Model Fluid*. – Aachen: Shaker Verlag, 2002. – 279 p.
282. Meier K., Laesecke A., Kabelac S. Transport coefficients of the Lennard-Jones model fluid. I. Viscosity // *J. Chem. Phys.* – 2004. – Vol. 121, No. 8. – P. 3671–3687.
283. Meier K., Laesecke A., Kabelac S. Transport coefficients of the Lennard-Jones model fluid. II. Self-diffusion // *J. Chem. Phys.* – 2004. – Vol. 121, No. 19. – P. 9526–9535.
284. Meier K., Laesecke A., Kabelac S. Transport coefficients of the Lennard-Jones model fluid. III. Bulk viscosity // *J. Chem. Phys.* – 2005. – Vol. 122, No. 1. – Paper 014513 (9 p.).

285. Mie G. Zur kinetischen theorie der einatomigen korper // *Ann. Phys. Leipzig*. – 1903. – Vol. 11, No. 8. – P. 657–697.
286. Milstein F. Applicability of exponentially attractive and repulsive interatomic potential function in the cubic crystals // *J. Appl. Phys.* – 1973. – Vol. 44, No. 9. – P. 3825–3832.
287. Mishin Y., Farkas D., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A. Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and ab initio calculations // *Phys. Rev.* – 1999. – Vol. 59. – P. 3393–3407.
288. Mishin Y., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A. Embedded–atom potential for B2–NiAl // *J. Physical Review B*. – 2002. – Vol. 65, Issue 22. – Paper 224114 (14 p.).
289. *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.
290. Morinishi K. Numerical simulation for gas microflows using Boltzmann equation // *Computers and Fluids*. – 2006. – Vol. 35, Issues 8–9. – P. 978–985.
291. Morse P.M. Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels // *Phys. Rev.* – 1929. – Vol. 34. – P. 57–64.
292. Morse T.F. Kinetic model equation for gas mixture // *Phys. Fluids*. – 1964. – Vol. 7(12). – P. 2012–2013.
293. NAMD [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://charm.cs.uiuc.edu/research/moldyn/>, <http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>.
294. Nigra P., Freeman D.L., Sabo D. and Doll J.D. On the Encapsulation of Nickel Clusters by Molecular Nitrogen // *Journal of Chemical Physics*. – 2004. – Vol. 121, No. 1. – P. 475–482.
295. Norman G.E., Stegailov V.V. Stochastic and dynamic properties of molecular dynamics systems: Simple liquids, plasma and electrolytes, polymers // *Computer Physics Communications*. – 2002. – Vol. 147. – P. 678–683.
296. Onsager L. Reciprocal relations in irreversible processes. I // *Phys. Rev.* – 1931. – Vol. 37. – P. 405–426.
297. Onsager L. Reciprocal relations in irreversible processes. II // *Phys. Rev.* – 1931. – Vol. 38. – P. 2265–2279.
298. OpenFOAM [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://openfoam.org/>.
299. Papyrin A., Kosarev V., Klinkov S., Alkhimov A., Fomin V. *Cold Spray Technology*. – Amsterdam: Elsevier Science, 2007. – 336 p.
300. Patronis A., Lockerby D.A. Multiscale simulation of non–isothermal microchannel gas flows // *Journal of Computational Physics*. – 2014. – Vol. 270. – P. 532–543.

301. PHOENICS [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.cham.co.uk/about.php>.
302. 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.
303. Podryga V., Polyakov S. Parallel realization of multiscale approach for calculating the gas flows in microchannels of technical systems // Proceedings of the 10th Annual International Scientific Conference on Parallel Computing Technologies (PCT 2016), ed. by L. Sokolinsky, I. Starodubov, March 29–31, 2016, Arkhangel'sk, Russia. – CEUR Workshop Proceedings, 2016. – Vol. 1576. – P. 270–283.
304. Podryga V.O. Calculation of Kinetic Coefficients for Real Gases on Example of Nitrogen // Sixth Conference on Numerical Analysis and Applications (NAA 2016): Book of Abstracts, June 15–22, 2016, Lozenetz, Bulgaria. – University of Rouse, Rouse, Bulgaria, 2016. – P. 43.
305. Podryga V.O. Molecular Dynamics Method for Simulation of Thermodynamic Equilibrium // Mathematical Models and Computer Simulations. – 2011. – Vol. 3, No. 3. – P. 382–388.
306. Podryga V.O. Multiscale Approach to Computation of Three-Dimensional Gas Mixture Flows in Engineering Microchannels // Doklady Mathematics. – 2016. – Vol. 94, No. 1. – P. 458–460.
307. 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. – Vol. 2. – P. 2331–2345.
308. Podryga V.O., Kudryashova T.A., Polyakov S.V. 3D Molecular dynamic simulation of gas mixture properties // Mathematical Models and Modeling in Laser–Plasma Processes and Advanced Science Technologies (LPPM3 2013): Book of abstracts of the Eleventh International Seminar, 14–21 September 2013, Budva, Montenegro. – Podgorica, Montenegro: Press AP PRINT, 2013. – P. 46.
309. Podryga V.O., Kudryashova T.A., Polyakov S.V. MD–simulation of gas mixture in microchannels // Mathematical Modeling and Computational Physics (MMCP 2013): Book of Abstracts of the International Conference, 8–12 July 2013, Dubna, Moscow region, Russia. – Dubna, Russia: JINR, 2013. – P. 147–148.

310. Podryga V.O., Polyakov S.V. Determination of materials macroparameters for technical microsystems // Japan–Russia workshop on Supercomputer modeling, instability and turbulence in fluid dynamics (JR SMIT2015): Book of Abstracts, March 4–6, 2015, Moscow, Russia. – Moscow: Keldysh Institute for Applied Mathematics RAS, 2015. – P. 31.
311. Podryga V.O., Polyakov S.V. Molecular dynamic simulation of rarefied gas flow in metallic microchannel // Mathematical Models and Modeling in Laser Plasma Processes and Advanced Science Technologies (LPPM3 2015): Book of abstracts of the Thirteenth International Interdisciplinary Seminar, 30 May – 6 June, 2015, Petrovac, Montenegro. – Podgorica, Montenegro: Press AP PRINT, – 2015. – P. 38.
312. Podryga V.O., Polyakov S.V. Molecular Dynamics Simulation of Thermodynamic Equilibrium Establishment in Nickel // Mathematical Models and Computer Simulations. – 2015. – Vol. 7, No. 5. – P. 456–466.
313. Podryga V.O., Polyakov S.V., Puzyrkov D.V. Simulation of Non–linear Processes In Nitrogen–Nickel Microsystem // Моделирование нелинейных процессов и систем (MNPS 2015): Сборник тезисов Третьей международной конференции, 22–26 июня, – 2015, Москва, Россия. – М.: Янус–К, 2015. – С. 32.
314. Podryga V.O., Polyakov S.V., Zhakhovsky V.V. Molecular dynamic simulation of gas flow along a metal plate // Mathematical Models and Modeling in LaserPlasma Processes and Advanced Science Technologies (LPPM3 2014): Book of abstracts of the Twelfth International Seminar, 31 May – 7 June 2014, Budva, Montenegro. – Podgorica, Montenegro: Press AP PRINT, 2014. – P. 46.
315. Podryga Victoria, Polyakov Sergey. 3D molecular dynamic simulation of thermodynamic equilibrium problem for heated nickel // Distributed Computing and Grid–technologies in Science and Education: Book of Abstracts of the 6th International Conference, 30 June – 5 July 2014, Dubna, Moscow region, Russia. – Dubna, Russia: JINR, 2014. – P. 45.
316. Polyakov S.V., Karamzin Yu.N., Kudryashova T.A., Podryga V.O. Multiscale simulation of nonlinear processes in gas–metal Microsystems // Mathematical Models and Modeling in Laser Plasma Processes and Advanced Science Technologies (LPPM3 2016): PROGRAM, ABSTRACTS and LECTURES of the XIV International Seminar, July, 4 – 9, 2016, Moscow, Russia. – Moscow University for Humanities, Moscow, Russia, 2016. – P. 99.
317. Puzyrkov D., Podryga V., Polyakov S. Distributed visualization in application to the molecular dynamics simulation of equilibrium state in the gas–metal microsystems // Proceedings of the 10th Annual International Scientific Conference on Parallel Computing Technologies (PCT 2016), ed. by L. Sokolinsky, I. Starodubov, March 29–31, 2016, Arkhangelsk, Russia. – CEUR Workshop Proceedings, 2016. – Vol. 1576. – P. 284–297.

318. Puzyrkov D., Polyakov S., Podryga V. Super-Computer Simulation and the Visualization of Thermodynamic Equilibrium in the Gas-Metal Microsystems // *Mathematical Modeling and Computational Physics 2015 (MMCP 2015): Book of Abstracts, July 13–17, 2015, Stara Lesna, Slovakia.* – Kosice: Technical University, 2015. – P. 74–75.
319. Puzyrkov D., Polyakov S., Podryga V. Visualization for Molecular Dynamics Simulation of Gas and Metal Surface Interaction // *EPJ Web of Conferences.* – 2016. – Vol. 108. – Paper 02037 (6 p.).
320. Puzyrkov D.V., Podryga V.O., Polyakov S.V. Parallel processing and visualization for results of molecular simulations problems // *Proceedings of the Institute for System Programming.* – 2016. – V. 28, Issue 2. – P. 221–242.
321. Rahman A. Correlations in the motion of atoms in liquid argon // *Phys. Rev.* – 1964. – Vol. 136. – P. 405–411.
322. Rajabpour A., Akizi F.Y., Heyhat M.M., Gordiz K. Molecular dynamics simulation of the specific heat capacity of water-Cu nanofluids // *International Nano Letters.* – 2013. – No. 3(1). – P. 1–6.
323. Ramos A., Tejada G., Fernandez J.M., Montero S. Nonequilibrium Processes in Supersonic Jets of N₂, H₂, and N₂ + H₂ Mixtures: (I) Zone of Silence. // *J. Phys. Chem. A.* – 2009. – Vol. 113. – P. 8506–8512.
324. Rao C.N.R., Ranga Rao G. Nature of nitrogen adsorbed on transition metal surfaces as revealed by electron spectroscopy and cognate techniques // *Surf. Sci. Rep.* – 1991. – Vol. 13, Issue 7. – P. 223–263.
325. Rapaport D.C. *The Art of Molecular dynamics Simulation.* – 2nd Ed. – Cambridge: Cambridge University Press, 2004. – 549 p.
326. 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.
327. Rieth M., Schommers W. *Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology.* – American Scientific Publishers, 2006. – 8000 p.
328. Ruda M., Farkas D., Abriata J. Embedded atom interatomic potentials for hydrogen in metals and intermetallic alloys // *J. Phys. Rev. B.* – 1996. – Vol. 54 (14). – P. 9765–9774.
329. Si H. TetGen, a Delaunay-based quality tetrahedral mesh generator // *ACM Trans. Math. Softw.* – 2015. – Vol. 41, No. 2. – Paper 11 (36 p).
330. SigmaFlow [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.itp.nsc.ru/applied-exploit/programmniy-paket-sigmaflow>, <http://www.torins.ru/products/modelling/sigmaflow.php>.

331. Simonelli G., Pasianot R., Savino E.J. Point-defect computer simulation including angular forces in bcc iron // *Phys. Rev.* – 1994. – Vol. 50, Issue 2. – P. 727–738.
332. Sirovich L. Kinetic modeling of gas mixtures // *Phys. Fluids.* – 1962. – Vol. 5 (8). – P. 908–918.
333. STAR-CD/STAR-CCM+ [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://mdx.plm.automation.siemens.com/>.
334. Stillinger F.H., Weber T.A. Computer Simulation of Local Order in Condensed Phases of Silicon // *Phys. Rev. B.* – 1985. – Vol. 31. – P. 5262–5271.
335. Sutherland W. The Viscosity of Mixed Gases // *Philosophical Magazine. Series 5.* – 1895. – Vol. 40, No. 246. – P. 421–431.
336. 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.
337. Tersoff J. Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties // *Phys. Rev. B.* – 1988. – Vol. 38. – P. 9902–9905.
338. Tersoff J. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems // *Phys. Rev. B.* – 1988. – Vol. 37(12). – P. 6991–7000.
339. Titarev V.A. Efficient Deterministic Modelling of Three-Dimensional Rarefied Gas Flows // *Commun. Comput. Phys.* – 2012. – Vol. 12, No. 1. – P. 161–192.
340. Toselli A., Widlund O. *Domain Decomposition Methods: Algorithms and Theory.* – Berlin: Springer, Springer Series in Computational Mathematics, 2005. – Vol. 34. – 450 p.
341. Verlet L. Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard–Jones molecules // *Phys. Rev.* – 1967. – Vol. 159. – P. 98–103.
342. Verlet L. Computer «experiments» on classical fluids. II. Equilibrium correlation functions // *Phys. Rev.* – 1967. – Vol. 165. – P. 201–214.
343. Wang Q., Keffer D.J., Petrovan S., Thomas J.B. Molecular Dynamics Simulation of Polyethylene Terephthalate Oligomers // *J. Phys. Chem. B.* – 2010. – Vol. 114(2). – P. 786–795.
344. Wassiljewa A. Heat Conduction in Gas Mixtures // *Physikalische Zeitschrift.* – 1904. – Vol. 5(22). – P. 737–742.
345. Welander P. On the temperature jump in rarefied gas // *Arkiv for Fysik.* – 1954. – Vol. 7, No. 44. – P. 507–564.
346. Wilke C.R. A Viscosity Equation for Gas Mixtures // *J. Chem. Phys.* – 1950. – Vol. 18, No. 4. – P. 517–519.
347. Wilke C.R. Diffusional properties of multicomponent gases // *J. Chem. Eng. Progr.* – 1950. – Vol. 46, No. 2. – P. 95–104.

348. Wilke C.R., Lee C.Y. Estimation of Diffusion Coefficients for Gases and Vapors // *Ind. Eng. Chem.* – 1955. – Vol. 47. – P. 1253–1257.
349. Williams P.L., Mishin Y., Hamilton J.C. An embedded-atom potential for the Cu–Ag system // *Modeling in materials science and Engineering.* – 2006. – No. 14. – P. 817–833.
350. Winkler R.G., Morawitz H., Yoon D.Y. Novel Molecular Dynamics Simulations at Constant Pressure // *Mol. Phys.* – 1992. – Vol. 75. – P. 669–688.
351. Winter E.R.S. Diffusion Properties of Gases // *Trans. Faraday Soc.* – 1950. – Vol. 46. – P. 81–92.
352. Winter E.R.S. Diffusion Properties of Gases. Part IV. The Self-Diffusion Coefficients of Nitrogen, Oxygen and Carbon Dioxide // *Trans. Faraday Soc.* – 1951. – Vol. 47. – P. 342–347.
353. Woolfson M.M., Pert G.J. *An Introduction to Computer Simulation.* – Oxford: Oxford University Press, 1999. – 311 p.
354. Wu Y., Lee C.H. Kinetic Theory of Shock Tube Problems for Binary Mixtures // *The Physics of Fluent.* – 1971. – Vol. 14, No. 2. – P. 313–322.
355. Xu K. BGK-based scheme for multicomponent flow calculations // *Journal of Computational Physics.* – 1997. – Vol. 134, No. 1. – P. 122–133.
356. Zhakhovskii V.V., Inogamov N.A., Petrov Yu.V., Ashitkov S.I., Nishihara K. Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials // *Applied Surface Science.* – 2009. – Vol. 255. – P. 9592–9596.
357. Zhang Y., Guo G., Nie G. A molecular dynamics study of bulk and shear viscosity of liquid iron using embedded-atom potential // *Phys. Chem. Minerals.* – 2000. – Vol. 27. – P. 164–169.
358. Zhdanov V.M. *Transport Processes in Multicomponent Plasma.* – London: Taylor and Francis, 2002. – 277 p.
359. Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers // *Phys. Rev. B.* – 2004. – Vol. 69, Issue 14. – Paper 144113 (10 p.).
360. Zope R.R., Mishin Y. Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti–Al system // *J. Physical Review B.* – 2003. – Vol. 68, Issue 2. – Paper 024102 (14 p.).