

На правах рукописи

ПОДРЫГА ВИКТОРИЯ ОЛЕГОВНА

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

Специальность 05.13.18 - математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва – 2017

Работа выполнена на кафедре вычислительных методов факультета вычислительной математики и кибернетики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

Научный консультант: **Борис Николаевич Четверушкин**
доктор физико-математических наук, профессор,
академик РАН, научный руководитель ИПМ им.
М.В. Келдыша РАН

Официальные оппоненты: **Ковалишин Алексей Анатольевич**
доктор физико-математических наук,
руководитель отделения физики и моделирования
энергетики Национального исследовательского
центра "Курчатовский институт"

Копысов Сергей Петрович
доктор физико-математических наук, профессор,
ФГБУН Институт механики УрО РАН, главный
научный сотрудник

Мартыненко Сергей Иванович
доктор физико-математических наук,
ФГУП «ЦИАМ имени П.И. Баранова», научный
сотрудник

Ведущая организация: Федеральное государственное автономное
учреждение высшего профессионального
образования "Казанский (Приволжский)
федеральный университет"

Защита диссертации состоится «21» июня 2017 г. в 15 ч. 30 мин. на заседании диссертационного совета Д 501.001.43 при Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова по адресу: 119991, г. Москва, ГСП-1, Ленинские Горы, МГУ, 2-й учебный корпус, факультет ВМК, аудитория 685.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова по адресу: 119192, г. Москва, Ломоносовский проспект, д. 27.

Автореферат разослан «__»_____ 2017 г.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 501.001.43
доктор физико-математических наук,
профессор

Е.В. Захаров

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования и степень ее разработанности

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 взаимовлияющих нелинейных и разномасштабных процессов. Сказанное имеет прямое отношение к исследованию сложных газодинамических процессов в технических микро- и наносистемах, 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, 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) уравнений¹ с микроскопическими описаниями молекулярной динамики² (МД). 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:

¹ Елизарова Т.Г. Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. М.: Научный мир, 2007. 352 с.

² Rapaport D.C. The Art of Molecular dynamics Simulation. Cambridge: Cambridge University Press, 2004. 549 p.

- численный анализ течений газовых смесей в каналах технических микросистем,

- определение свойств реальных газов и наноматериалов, необходимых для конструирования или использования технических микро- и наносистем.

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.

Система КГД уравнений является дифференциальным аналогом кинетически согласованных разностных схем³ (КСРС). КСРС и КГД развивались практически параллельно с восьмидесятых 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

³ Четверушкин Б.Н. Кинетически согласованные схемы в газовой динамике. М.: Изд-во МГУ, 1999. 232 с.

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 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, PHOENICS компании CHAM, FLUENT и CFX корпорации ANSYS, программные модули Multiphysics и Molecular Flow компании COMSOL, OpenFOAM и многие другие. Среди отечественных разработок можно выделить такие программные продукты как FlowVision компании Тесис, пакет SigmaFlow от разработчиков из Института теплофизики СО РАН, Сибирского федерального университета и фирмы ООО «ТОРИНС», пакет ЛОГОС Института теоретической и математической физики Российского федерального ядерного центра, пакеты NOISETTE и MARPLE Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН 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, HOOMD от группы Глоцер из Университета Мичигана, GROMACS от команды из университета Гронингена, NAMD от разработчиков Иллинойского университета в Урбана-Шампейне. 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 полученных результатов

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.

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 тепломассоперенос и взаимодействие газа с поверхностями, при уменьшении линейных размеров системы до микронного и субмикронного уровня.

Практическую 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.

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 разделения 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.

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 микроуровней 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 [8] выполнялась совместно с В.В. Жаховским.

В работах [1, 2, 6, 11, 13, 18, 22] автору принадлежат создание многомасштабной двухуровневой модели, построение и реализация объединенных численных подходов для макро- и микроуровней модели, разработка основных алгоритмов решения задач и их параллельная реализация, разработка комплексов программ для суперкомпьютеров, анализ и интерпретация полученных результатов.

В работах [3–5, 8–10, 12, 14–18, 20] 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 [21] автору принадлежат построение трехмерной многокомпонентной макромоделей для течения реальных газов и их смесей, построение и реализация численных подходов.

Д.В. Пузырьков в работах [5, 10, 12, 14, 15] 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).

Основные публикации

По теме диссертации опубликовано 18 работ в журналах, входящих в Перечень рецензируемых научных изданий, рекомендованных ВАК РФ для

опубликования основных научных результатов диссертаций, или входящих в международные базы данных и системы цитирования Scopus, Web of Science. Также по результатам диссертации оформлено 4 свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ. Полный список публикаций приводится в конце автореферата.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения и списка литературы. Объем диссертации составляет 229 страниц, текст содержит 73 рисунка и 14 таблиц. Список литературы содержит 360 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении дана общая характеристика диссертационной работы. В частности, обоснована актуальность избранной темы исследования, определены цели и задачи диссертации, показаны научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, описаны методы исследования, сформулированы основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена вычислительным основам моделирования течения газов и газовых смесей в микроканалах технических систем.

В п. 1.1. 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. Реализация подхода основана на расщеплении по физическим процессам. На макроскопическом уровне в качестве основной математической модели выбрана система КГД уравнений, записанная для случая многокомпонентной смеси реальных газов. На микроскопическом уровне используется метод МД. С помощью МД 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.

В п. 1.2. производится вывод КГД уравнений для случая многокомпонентной смеси реальных газов. Полная система макроскопических уравнений в инвариантном относительно системы координат виде вместе с уравнениями связей и состояния имеет вид:

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

$$\mathbf{w}_l = \frac{\tau}{\rho_l} [\operatorname{div}(\rho_l \mathbf{u}_l)] \mathbf{u}_l + \mathbf{w}_l^*, \quad \mathbf{w}_l^* = \frac{\tau}{\rho_l} [(\rho_l \mathbf{u}_l \nabla) \mathbf{u}_l + \nabla p_l], \quad l=1, \dots, N;$$

$$\frac{\partial (\rho_l u_{l,k})}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{W}_l^{(\rho u_k)} = S_{l,k}^{(\rho u)}, \quad \mathbf{W}_l^{(\rho u_k)} = \mathbf{W}_l^{(\rho)} u_{l,k} + \mathbf{e}_k p_l - \mathbf{\Pi}_{l,k},$$

$$\mathbf{\Pi}_{l,k} = (\mathbf{\Pi}_{l,j,k}), \quad \mathbf{\Pi}_{l,j,k} = \mathbf{\Pi}_{l,j,k}^{NS} + \mathbf{\Pi}_{l,j,k}^{QGD},$$

$$\mathbf{\Pi}_{l,j,k}^{NS} = \mu \left(\frac{\partial u_{l,j}}{\partial x_k} + \frac{\partial u_{l,k}}{\partial x_j} + \delta_{j,k} \left(\zeta - \frac{2}{3} \right) \operatorname{div}(\mathbf{u}_l) \right), \quad (2)$$

$$\mathbf{\Pi}_{l,j,k}^{QGD} = \rho_l u_{l,j} w_{l,k}^* + \delta_{j,k} \tau ((\mathbf{u}_l \nabla) p_l),$$

$$S_l^{(\rho u)} = \sum_{l'=1, l' \neq l}^N \nu_{ll'} \rho_l (\mathbf{u}_l^* - \mathbf{u}_l), \quad l=1, \dots, N, \quad j, k=1, 2, 3;$$

$$\frac{\partial E_l}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{W}_l^{(E)} = S_l^{(E)}, \quad \mathbf{W}_l^{(E)} = \mathbf{W}_l^{(\rho)} H_l + \mathbf{q}_l - \mathbf{\Pi}_l \mathbf{u}_l, \quad \mathbf{q}_l = \mathbf{q}_l^{NS} + \mathbf{q}_l^{QGD},$$

$$\mathbf{q}_l^{NS} = -\chi \nabla T_l, \quad \mathbf{q}_l^{QGD} = -\tau \left[(\mathbf{u}_l \nabla) \varepsilon_l + p_l (\mathbf{u}_l \nabla) \left(\frac{1}{\rho_l} \right) \right] \rho_l \mathbf{u}_l, \quad (3)$$

$$S_l^{(E)} = \sum_{l'=1, l' \neq l}^N \nu_{ll'} (E_l^* - E_l), \quad l=1, \dots, N;$$

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

Здесь все переменные с индексом l относятся к газу типа l , j, k – индексы пространственных координат. Смесь состоит газов с массовыми плотностями $\rho_l = m_l n_l$, где m_l – масса молекул газа l , n_l – числовая плотность (концентрация) газа типа l ; \mathbf{u}_l – векторы макроскопических скоростей, p_l – парциальные давления, \mathbf{e}_k – единичные орты, $\mathbf{\Pi}_l$ – 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, $\mathfrak{R}_l = k_b / m_l$ – индивидуальная газовая постоянная, k_b – постоянная Больцмана. 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 $\tau_l = \tau_l(T_l, \rho_l)$. $Z_l = Z_l(T_l, \rho_l)$ – коэффициенты сжимаемости, $c_{v,l} = c_{v,l}(T_l)$ – удельные теплоемкости при постоянном объеме. Обменные члены $S_l^{(\rho u_k)}$ и $S_l^{(E)}$ учитывают перераспределения импульса и энергии между компонентами смеси, они зависят от \mathbf{u}_l^* , E_l^* – скорости и энергии молекул газа после столкновения и $\nu_{ll'}$ – частота столкновений частицы типа l с частицами типа l' . 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.

Все материальные коэффициенты и параметры в КГД уравнениях (1)-(4) предлагается определять одним из двух способов: вычисление по известным из литературы формулам или аппроксимациям табличных данных, либо вычисление методами МД. Второй способ позволяет получить всю информацию самосогласованным образом. Для реализации второго способа выделены следующие базовые материальные коэффициенты компонент смеси:

$$\begin{aligned} Z_l &= Z_l(T_l, \rho_l), \quad c_{v,l} = c_{v,l}(T_l), \quad c_{p,l} = c_{p,l}(T_l), \\ \mu_l &= \mu_l(T_l), \quad \zeta_l = \zeta_l(T_l), \quad \chi_l = \chi_l(T_l), \quad D_l = D_l(T_l), \end{aligned} \quad (5)$$

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 натуральных экспериментах. Остальные коэффициенты связаны с базовыми следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} \gamma_l &= \frac{c_{p,l}}{c_{v,l}}, \quad a_l^2 = \left(\frac{\partial p_l}{\partial \rho_l} \right)_s \approx \gamma_l \frac{p_l}{\rho_l}, \quad \tau_l = \frac{\mu_l}{p_l \text{Sc}_l}, \quad \text{Pr}_l = \frac{\mu_l c_{p,l}}{\chi_l}, \quad \text{Sc}_l = \frac{\mu_l}{\rho_l D_l}, \\ \text{Kn}_l &= \frac{L}{\lambda_l}, \quad \text{Ma}_l = \frac{|\mathbf{u}_l|}{a_l}, \quad \text{Re}_l = \frac{\rho_l |\mathbf{u}_l| \lambda_l}{\mu_l}, \quad l=1, \dots, N, \end{aligned} \quad (6)$$

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, 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, которые представлены в данном пункте. Например, следующие приближения:

$$\begin{aligned} \lambda_l &= \left[\sum_{l'=1}^N \left(\pi \sigma_{ll'}^2 n_{l'} \sqrt{1 + \frac{m_l}{m_{l'}}} \right) \right]^{-1}, \quad \sigma_{ll'} = \frac{\sigma_l + \sigma_{l'}}{2}, \quad l=1, \dots, N_l, \\ v_l &= \sum_{l'=1}^N v_{ll'}, \quad v_{ll'} = 2\sqrt{\pi} \sigma_{ll'}^2 n_{l'} \sqrt{2k_b T \frac{m_l + m_{l'}}{m_l m_{l'}}}, \end{aligned} \quad (7)$$

где σ_l – эффективный радиус взаимодействия молекул сорта l .

Динамическую и относительную объемную вязкости, теплопроводности смеси неполярных газов можно вычислять следующим образом:

$$\mu = \sum_{l=1}^N \mu_l \left(1 + \sum_{l'=1, l' \neq l}^N G_{ll'} \frac{X_{l'}}{X_l} \right)^{-1}, \quad \zeta = \frac{1}{\mu} \sum_{l=1}^N \mu_l \zeta_l \left(1 + \sum_{l'=1, l' \neq l}^N G_{ll'} \frac{X_{l'}}{X_l} \right)^{-1}, \quad (8)$$

$$\chi = \sum_{l=1}^N \chi_l \left(1 + \sum_{l'=1, l' \neq l}^N G_{ll'} \frac{X_{l'}}{X_l} \right)^{-1}, \quad G_{ll'} = \left(1 + \sqrt{\frac{\mu_l}{\mu_{l'}}} \sqrt{\frac{M_{l'}}{M_l}} \right)^2 \left(2 \sqrt{2 \left(1 + \frac{M_l}{M_{l'}} \right)} \right)^{-1}. \quad (9)$$

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.

Коэффициент диффузии смеси D определяется для каждого газа отдельно и представляет собой коэффициент диффузии одного типа газа l в многокомпонентной смеси из N газов:

$$D_{iN} = (1 - X_i) \left(\sum_{l'=1, l' \neq i}^N \frac{X_{l'}}{D_{il'}} \right)^{-1}, \quad D_{il'} = \frac{X_i}{X_i + X_{l'}} D_i + \frac{X_{l'}}{X_i + X_{l'}} D_{l'}, \quad l, l' = 1, \dots, N, \quad (10)$$

где $D_{il'}$ – диффузия бинарной смеси газов l и l' в многокомпонентной газовой смеси, которая зависит от самодиффузии газов D_l .

Параметры газовой смеси определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_{l=1}^N \rho_l, \quad \mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \sum_{l=1}^N \rho_l \mathbf{u}_l, \quad p = \sum_{l=1}^N p_l, \quad E = \sum_{l=1}^N E_l, \quad n = \sum_{l=1}^N n_l, \\ T &= \frac{1}{n} \sum_{l=1}^N n_l T_l, \quad m = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^N m_l n_l, \quad \Re = \frac{\sum_{l=1}^N m_l n_l \Re_l}{\sum_{l=1}^N m_l n_l} = \frac{k_B}{m}, \\ \varepsilon &= \frac{E}{\rho} - \frac{1}{2} |\mathbf{u}|^2, \quad c_v = \frac{\varepsilon}{T} = \frac{1}{\rho} \sum_{l=1}^N \rho_l c_{v,l}, \quad c_p = \frac{1}{\rho} \sum_{l=1}^N \rho_l c_{p,l}, \quad \gamma = \frac{c_p}{c_v}, \\ Z &= \frac{p}{\rho \Re T}, \quad a^2 = \gamma \frac{p}{\rho}, \quad \lambda = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^N n_l \lambda_l, \quad \tau = \frac{\mu}{p \text{Sc}}, \quad \nu = \frac{1}{n} \sum_{l=1}^N n_l \nu_l \\ Ma &= \frac{|\mathbf{u}|}{a}, \quad \text{Re} = \frac{\rho |\mathbf{u}| \lambda}{\mu}, \quad \text{Kn} = \frac{L}{\lambda}, \quad \text{Sc} = \frac{\mu}{\rho D}, \quad \text{Pr} = \frac{\mu c_p}{\chi}. \end{aligned} \quad (11)$$

Система уравнений (1)-(4) замыкается начальными и граничными условиями.

Для расчета макропараметров по КГД уравнениям используется явный по времени сеточный численный алгоритм, имеющий в своей основе метод

контрольных объемов на сетках произвольного. Вычислительная схема по времени выбирается явной и двухэтапной (предиктор-корректор).

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

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_{l,m} &= \rho_{l,m} + \frac{\Delta t}{|V_m|} \sum_{p=1}^{M_m} W_{l,n,m,p}^{(\rho)} |S_{m,p}|, \quad W_{l,n,m,p}^{(\rho)} = (\mathbf{W}_{l,m,p}^{(\rho)}, \mathbf{n}_{m,p}), \quad l=1, \dots, N, \\ \hat{\rho}_{l,m} \hat{u}_{l,k,m} &= \rho_{l,m} u_{l,k,m} + \frac{\Delta t}{|V_m|} \sum_{p=1}^{M_m} W_{l,n,m,p,k}^{(\rho u)} |S_{m,p}|, \quad W_{l,n,m,p,k}^{(\rho u)} = (\mathbf{W}_{l,m,p}^{(\rho u_k)}, \mathbf{n}_{m,p}), \quad k=1, \dots, K, \\ \hat{E}_{l,m} &= E_{l,m} + \frac{\Delta t}{|V_m|} \sum_{p=1}^{M_m} W_{l,n,m,p}^{(E)} |S_{m,p}|, \quad W_{l,n,m,p}^{(E)} = (\mathbf{W}_{l,m,p}^{(E)}, \mathbf{n}_{m,p}), \quad m=1, \dots, M.\end{aligned}\tag{12}$$

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 ($\alpha = \rho, \rho u_k, E$).

На втором (корректорном) этапе решаются две задачи.

Первая задача связана с расчетом обменных членов на основе предварительных молекулярно-динамических расчетов, результаты которых занесены в специальную базу данных, либо на основе прямых расчетов обменных членов методами МД.

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

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_{l,m} \hat{\mathbf{u}}_{l,k,m}^{**} &= \hat{\rho}_{l,m} \hat{\mathbf{u}}_{l,k,m}^* + \Delta t \nu_{ll',m} \hat{\rho}_{l',m} (\hat{u}_{l,k,m} - \hat{u}_{l,k,m}^*), \quad k=1, \dots, K, \\ \hat{E}_{l,m}^{**} &= \hat{E}_{l,m}^* + \Delta t \nu_{ll',m} (\hat{E}_{l',m} - \hat{E}_{l,m}^*), \quad m=1, \dots, M, \quad l, l'=1, \dots, N.\end{aligned}\tag{13}$$

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 (11), завершают численную процедуру расчета на новом слое по времени.

П. 1.3. посвящен молекулярно-динамической модели вычислений, 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. Это справедливо 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.

Система уравнений движения частиц сорта l :

$$m_{l,i} \frac{d\mathbf{v}_{l,i}}{dt} = \mathbf{F}_{l,i}, \quad \mathbf{v}_{l,i} = \frac{d\mathbf{r}_{l,i}}{dt}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad (14)$$

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 представляются определяются следующим соотношением:

$$\mathbf{F}_{l,i} = - \frac{\partial U(\mathbf{r}_{l,1}, \dots, \mathbf{r}_{l,N_l})}{\partial \mathbf{r}_{l,i}} + \mathbf{F}_{l,i}^{ext}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad (15)$$

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 следующим образом:

$$E_{Kl} = \sum_{i=1}^{N_l} \frac{m_l |\mathbf{v}_{l,i}|^2}{2}, \quad E_{Tl} = \sum_{i=1}^{N_l} \frac{m_{l,i} |\mathbf{v}_{l,i} - \mathbf{v}_{m,l}|^2}{2}, \quad \mathbf{v}_{m,l} = \frac{1}{N_l} \sum_{i=1}^{N_l} \mathbf{v}_{l,i}, \quad i=1, \dots, N_l, \quad (16)$$

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 E_l и полная E энергии представляют следующие суммы:

$$E_l = E_T + U, \quad E = E_K + U, \quad (17)$$

Температура системы определяется через тепловую энергию системы:

$$T_l = \frac{2}{d \cdot N_l \cdot k_b} \langle E_{Tl} \rangle, \quad (18)$$

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

Давление в системе определяется формулой (индекс типа частиц из формулы удален для наглядности выражения):

$$p = \frac{1}{3} (p_{xx} + p_{yy} + p_{zz}), \quad (19)$$

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

Здесь $p_{\alpha\alpha}$ – диагональные компоненты тензора давления определяются по теореме вириала, 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 .

Граничные условия в МД выбираются в зависимости от моделируемой ситуации. При определении свойств среды используются периодические граничные условия (ПГУ). При исследовании микросистем реальной геометрии одно или несколько направлений имеют конечный размер, тогда в качестве граничных условий могут использоваться либо зеркальные граничные условия, либо условия исчезновения частицы на границе и появления ее в другом месте

микросистемы (так чтобы не нарушалось общее равновесие в системе). Также может осуществляться свободный выход частиц на одной стороне выделенного объема и вход потока частиц – на другой. Для металлических микросистем характерно также отсутствие граничных условий, которые соблюдаются ввиду сил взаимного притяжения атомов в решетке металла.

Для поддержания или достижения необходимого значения температуры системы используют специальные алгоритмы – термостаты. Также они используются для релаксации системы с целью обеспечения непрерывности МД расчетов на начальном этапе и для определения потока течения. В работе использовались термостаты Берендсена и Ланжевена.

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. 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. Потенциальные функции являются весьма затратными с точки зрения числа операций, потому оптимальным вариантом для моделирования является найти такие функции, чтоб они удовлетворяли сразу нескольким типам взаимодействий, и таким образом уменьшить их количество. В диссертации были рассмотрены потенциал Леннарда-Джонса в форме «12-6», Ми в форме «n-6», потенциал погруженного атома (EAM) в разных формах.

Уравнения движения решаются с помощью схемы Верле в скоростной форме с учетом внешних воздействий, если они присутствуют:

$$\mathbf{r}^{n+1} = \mathbf{r}^n + \mathbf{v}^n \Delta t + \frac{\mathbf{F}^n}{m} \frac{(\Delta t)^2}{2}, \quad \mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^n + \frac{\mathbf{F}^{n+1} + \mathbf{F}^n}{2m} \Delta t \quad (20)$$

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

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:

$$0) \quad \mathbf{F}_{l,i}^0 = \mathbf{F}(\mathbf{r}_{l1,1}^0, \dots, \mathbf{r}_{l1,N_{l1}}^0; \mathbf{r}_{l2,1}^0, \dots, \mathbf{r}_{l2,N_{l2}}^0; \dots; \mathbf{r}_{lN,1}^0, \dots, \mathbf{r}_{lN,N_{lN}}^0), \quad i = 1, \dots, N_l;$$

$$\forall n = 0, 1, 2, \dots, :$$

$$1) \quad \mathbf{r}_{l,i}^{n+1} = \mathbf{r}_{l,i}^n + \mathbf{v}_{l,i}^n \Delta t + \frac{\mathbf{F}_{l,i}^n (\Delta t)^2}{2m_l}, \quad i = 1, \dots, N_l; \quad (21)$$

$$2) \quad \mathbf{F}_{l,i}^{n+1} = \mathbf{F}(\mathbf{r}_{l1,1}^{n+1}, \dots, \mathbf{r}_{l1,N_{l1}}^{n+1}; \mathbf{r}_{l2,1}^{n+1}, \dots, \mathbf{r}_{l2,N_{l2}}^{n+1}; \dots; \mathbf{r}_{lN,1}^{n+1}, \dots, \mathbf{r}_{lN,N_{lN}}^{n+1}), \quad i = 1, \dots, N_l;$$

$$3) \quad \mathbf{v}_{l,i}^{n+1} = \mathbf{v}_{l,i}^n + \frac{\mathbf{F}_{l,i}^{n+1} + \mathbf{F}_{l,i}^n}{2m_l} \Delta t, \quad i = 1, \dots, N_l.$$

Здесь \mathbf{F} – процедура вычисления сил на основе формулы (15).

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

$$4) \quad \mathbf{v}_{l,i}^{n+1} = \lambda_{l,i}^{n+1} \cdot \mathbf{v}_{l,i}^{n+1}, \quad i = 1, \dots, N_l. \quad (22)$$

В случае термостата Ланжевена можно использовать два варианта.

Первый вариант заключается в изменении только второго пункта, в котором, кроме вычисления сил взаимодействия между частицами, необходимо вычислять дополнительно внешние силы:

$$2) \quad \mathbf{F}_{l,i}^{n+1} = \mathbf{F}(\mathbf{r}_{l,i}^{n+1}) + \mathbf{F}_{ext,l,i}^{n+1}, \quad \mathbf{F}_{ext,l,i}^{n+1} = \mathbf{F}_{rl,i}^{n+1} + \mathbf{F}_{fl,i}^{n+1}(\mathbf{v}_{l,i}^n), \quad i = 1, \dots, N_l. \quad (23)$$

Второй вариант более сложен, так как схема разбивается на полушаги, но данный вариант обладает более высокой точностью:

$$1) \quad \mathbf{v}_{l,i}^{n+1/2} = \mathbf{v}_{l,i}^n + \frac{\mathbf{F}_{l,i}^n}{2m_l} \Delta t, \quad i = 1, \dots, N_l;$$

$$2) \quad \mathbf{r}_{l,i}^{n+1} = \mathbf{r}_{l,i}^n + \mathbf{v}_{l,i}^{n+1/2} \Delta t, \quad i = 1, \dots, N_l;$$

$$3) \quad \mathbf{F}(\mathbf{r}_{l,i}^{n+1}) + \mathbf{F}_{ext,l,i}^{n+1}, \quad \mathbf{F}_{ext,l,i}^{n+1} = \mathbf{F}_{rl,i}^{n+1} + \mathbf{F}_{fl,i}^{n+1}(\mathbf{v}_{l,i}^{n+1/2}), \quad i = 1, \dots, N_l;$$

$$4) \quad \mathbf{v}_{l,i}^{n+1} = \mathbf{v}_{l,i}^{n+1/2} + \frac{\mathbf{F}_{l,i}^{n+1}}{2m_l} \Delta t, \quad i = 1, \dots, N_l. \quad (24)$$

В п. 1.4. подробно описывается комбинированный многомасштабный численный подход. 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 МД, позволяющими наблюдать взаимодействия на уровне отдельных атомов и молекул.

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;

6) стартовое распределение направлений векторов тепловых скоростей молекул считается равномерным и таким, чтобы суммарный импульс молекул совпадал со средним импульсом микрообъема.

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 $c_{v,l}$.

Во-вторых, с помощью методов МД можно получать кинетические коэффициенты компонент газовой смеси (вязкости, теплопроводности, диффузии), необходимые для уравнений КГД.

В-третьих, микроскопическая модель может использоваться для расчета обменных слагаемых в уравнениях (2)–(3) для импульса и энергии. При этом компоненты скоростей \mathbf{u}_l^* и энергии E_l^* вычисляются с помощью следующих формул:

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}_l^* &= \frac{1}{N_l} \sum_{i=1}^{N_l} \mathbf{v}_{l,i}^*, & \mathbf{u}^* &= \sum_{l=1}^N m_l N_l \mathbf{u}_l^* / \sum_{l=1}^N m_l N_l; \\
\mathbf{u}_{l,T}^* &= \mathbf{u}_l^* - \mathbf{u}^*, & T_l^* &= \frac{|\mathbf{u}_{l,T}^*|^2}{\mathfrak{R}_l}, & T^* &= \sum_{l=1}^N n_l T_l^* / \sum_{l=1}^N n_l; \\
p_l^* &= \rho_l Z_l^* \mathfrak{R}_l T_l^*, & p^* &= \rho Z^* \mathfrak{R} T^*; \\
E_l^* &= \rho_l \left(\frac{|\mathbf{u}_l^*|^2}{2} + c_{v,l}^* T_l^* \right), & E^* &= \sum_{l=1}^N E_l^*.
\end{aligned} \tag{25}$$

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.

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.

Во **второй 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.

В **п. 2.1** вводится классификация алгоритмов по реализации предложенного многомасштабного подхода и описывается их реализация.

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. 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. 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.

Прямой МД расчет в рамках алгоритмов классов 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.

В п. 2.2. приводятся детали параллельной реализации описанных алгоритмов, представлены варианты вычислительных систем и замечания по использованию технологий параллельного программирования в рамках поставленных 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. Описаны проблемы разбиения вычислительной области и распределения вычислений между микро- и макроуровнями задачи для алгоритмов разных классов. Приведены примеры расчетов по разбиению исследуемой области на вычислительные домены по необходимому объему памяти в зависимости от разбиений и используемых алгоритмов. Также проведена оценка необходимых для вычисления ресурсов.

В п. 2.3. представлены результаты тестирования разработанных параллельных программ, реализующих алгоритмы указанных классов.

В третьей главе представлены методики и вычислительные эксперименты по приведению к термодинамическому равновесию систем, находящихся в разных агрегатных состояниях, разной геометрии и при разных условиях по температуре и давлению.

Целью **п. 3.1.** было рассмотрение процесса установления термодинамического равновесия системы атомов аргона без дополнительных условий на состояние системы.

Целью **п. 3.2.** 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. Моделирование осуществлялось для системы молекул азота и системы атомов никеля в объемной геометрии.

В **п. 3.3.** 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. Представлены расчеты моделирования термодинамического равновесия систем твердых частиц в геометрии пластины без условий на распределения давлений по образцу на примере системы атомов алюминия и с условиями ненапряженности пластины на примере системы атомов никеля.

В **четвертой главе** представлены модели, численные методы и алгоритмы для моделирования уравнений состояния и кинетических коэффициентов реальных газов. Выбраны наиболее устойчивые и робастные алгоритмы расчета транспортных коэффициентов и макропараметров в соответствующих уравнениях. Приведены результаты расчетов коэффициентов на примере системы молекул азота, результаты согласуются с известными табличными данными. Получены конкретные температурные зависимости макропараметров азота в диапазоне комнатных и низких температур.

Целью **п. 4.1.** является моделирование уравнений состояния реального газа, которые включают термическое и калорическое уравнения. Уравнения определяются из молекулярно-динамических расчетов по давлению и энергии и основаны на вычислении коэффициентов сжимаемости и теплоемкости.

Коэффициент сжимаемости Z_C описывает отклонение термодинамических свойств реального газа от идеального:

$$Z_c = \frac{p \cdot V}{N \cdot k_b \cdot T} = 1 + \frac{1}{3 \cdot N \cdot k_b \cdot T} \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j>i} (\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{F}_{ij}) \right\rangle, \quad i = 1, \dots, N. \quad (26)$$

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

$$Z_p = \frac{p \cdot V}{p_0 \cdot V_0}, \quad (27)$$

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

Энтальпия H в случае реального газа вычисляется следующим образом:

$$H = NE_T + pV. \quad (28)$$

Теплоемкости при постоянном объеме и постоянном давлении определяются соотношениями:

$$C_v = \left(\frac{dE}{dT} \right)_V = \frac{\langle \delta E^2 \rangle_{NVT}}{k_b T^2} = \frac{\langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle_{NVT}}{k_b T^2} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_b T^2}, \quad (29)$$

$$C_p = \left(\frac{dH}{dT} \right)_P = \frac{\langle \delta (E + pV)^2 \rangle_{NPT}}{k_b T^2} = \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{k_b T^2}. \quad (30)$$

Для определения уравнений состояния необходимо знать величину теплоемкости газа при постоянном объеме C_v , которую можно оценивать напрямую через (30) или с помощью соотношения:

$$C_v = \frac{3 \cdot k_b}{2} \left[1 - \frac{3 \cdot N}{2} \frac{\langle E_K^2 \rangle - \langle E_K \rangle^2}{\langle E_K \rangle^2} \right]^{-1}, \quad (31)$$

В п. 4.2. 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 используются соотношения Эйнштейна, формулы Грина-Кубо и смешанный подход на основе кинетической теории.

Пятая глава посвящена молекулярно-динамическим расчетам в пограничном слое. Основное внимание уделяется газодинамическим процессам, происходящим на границе с поверхностями твердых материй. С

помощью метода МД исследуются взаимодействия газа и металлической поверхности. В качестве примера газодинамической системы рассмотрена система молекул азота, в качестве материала стенок микроканала рассмотрена система атомов никеля.

В п. 5.1. 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 п. 5.2. проведено моделирование процессов релаксации в системе газ-металл при заданных итоговых значениях температуры и импульса. Система состояла из газовой подсистемы в объемной геометрии и металлической подсистемы в форме пластины. Выполнено исследование процессов взаимодействия газа с металлической стенкой с учетом атомной структуры поверхности, представлены результаты анализа процессов, происходящих в пограничном слое. 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. 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 (рисунок 1). Полученная качественная картина процесса совпадает с общими представлениями о процессе адсорбции газа на металлической поверхности.

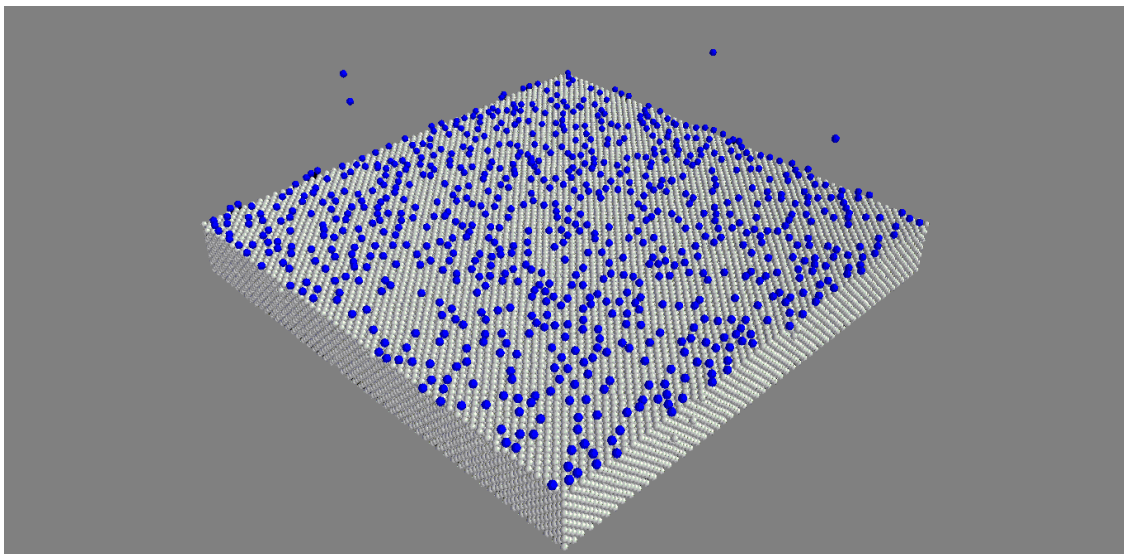


Рисунок 1 – Фрагмент распределения молекул азота (область 20x20 нм), адсорбированных на поверхности никелевой пластины, в момент времени 0.6 нс для варианта температур поверхности и газа, изначально равных 273.15 К

В п. 5.3. рассматривается задача по взаимодействию газового потока с металлической пластиной с целью расчета параметров граничных условий и коэффициентов аккомодации (по плотности, импульсу, энергии) на границе взаимодействия.

Описан подход по прямому МД вычислению на границе потоков массы, импульса и энергии, использующихся 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 **шестой главе** представляются вычислительные основы моделирования течения бинарной смеси газов в микроканалах технических систем. 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 экспериментальными⁴ и численными данными.

В п. 6.1. описывается математическая постановка задачи о смеси азота и водорода, истекающей со сверхзвуковой скоростью из идеального сопла цилиндрической геометрии в область технического вакуума.

В п. 6.2. приводятся результаты расчетов течения азот-водородной смеси после выхода из сопла в свободное пространство. Геометрия задачи представлена на рисунке 2.

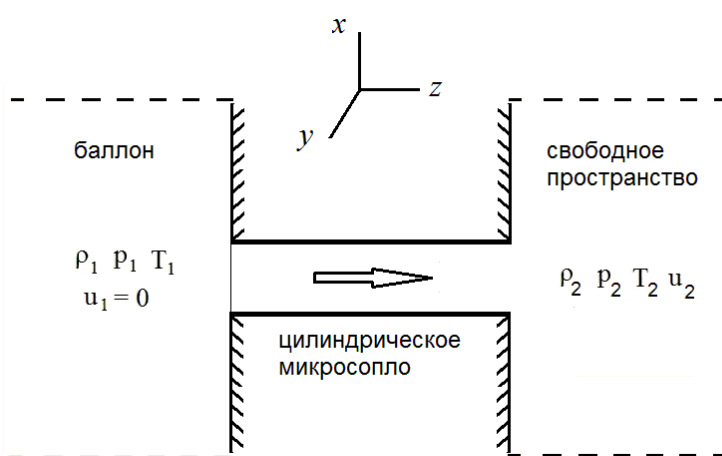


Рисунок 2 – Геометрия прикладной задачи

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: $T_1 = 295.15 \text{ K}$, $p_1 = 101325 \text{ Па}$; в сопле и вакуумной камере она находится при той же температуре, но при более низких давлениях. Сопло слева перекрыто перегородкой, которая в начале расчета открывается мгновенно. Внутренняя

⁴ 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. V. 113. P. 8506–8512.

поверхность сопла считается идеально гладкой и теплоизолированной. 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.

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, рассмотрено 4 основные варианта расчета в зависимости от мольной доли газов в смеси.

Данная задача объединяет в себе распад сильного разрыва в комбинации с имитацией испускания струи газа из баллона с высоким давлением

Были проведены анализ и верификация алгоритмов всех 4 классов.

Результатами расчетов по алгоритмам класса 1 является база материальных коэффициентов и параметров уравнений состояния для чистого азота и для смеси азота и водорода в диапазоне температур от 100 до 400 К при давлении $p_0 = 101325 \text{ Па}$.

Полученные данные для азота аппроксимированы рядом зависимостей и приведены на рисунках 3–6 в сравнении с известными экспериментальными и теоретическими данными.

Проведено решение задачи в одномерном, двухмерном и трехмерном случаях на последовательности вложенных сеток. Сравнение решений подтвердило их сходимость к распределениям, отвечающим теоретическим оценкам.

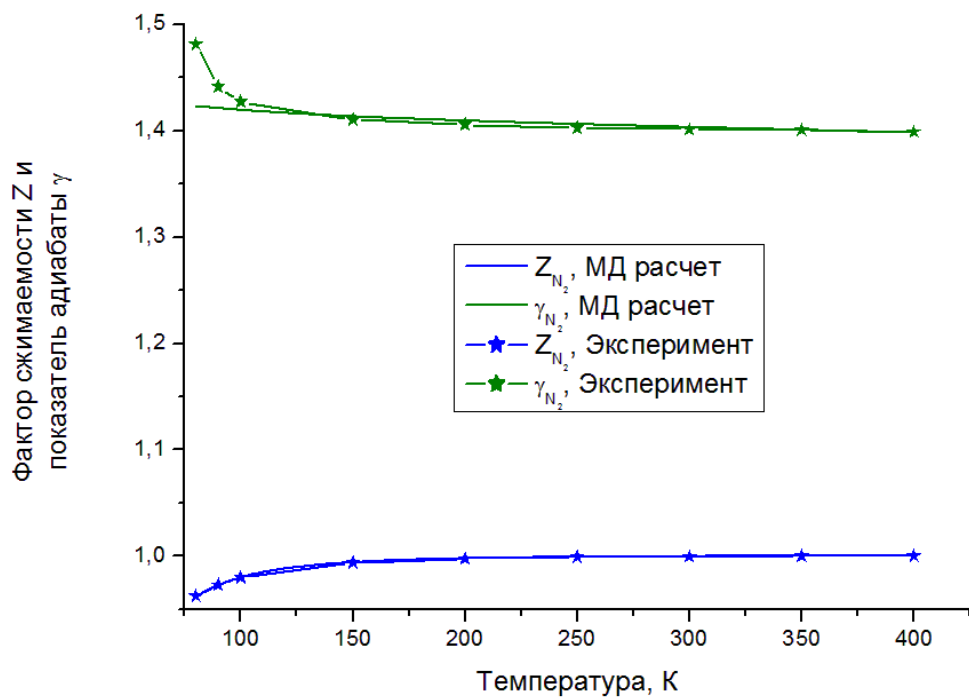


Рисунок 3 – Фактор сжимаемости Z_{N_2} и показатель адиабаты γ_{N_2} азота в зависимости от температуры при $p_0 = 101325 \text{ Па}$.

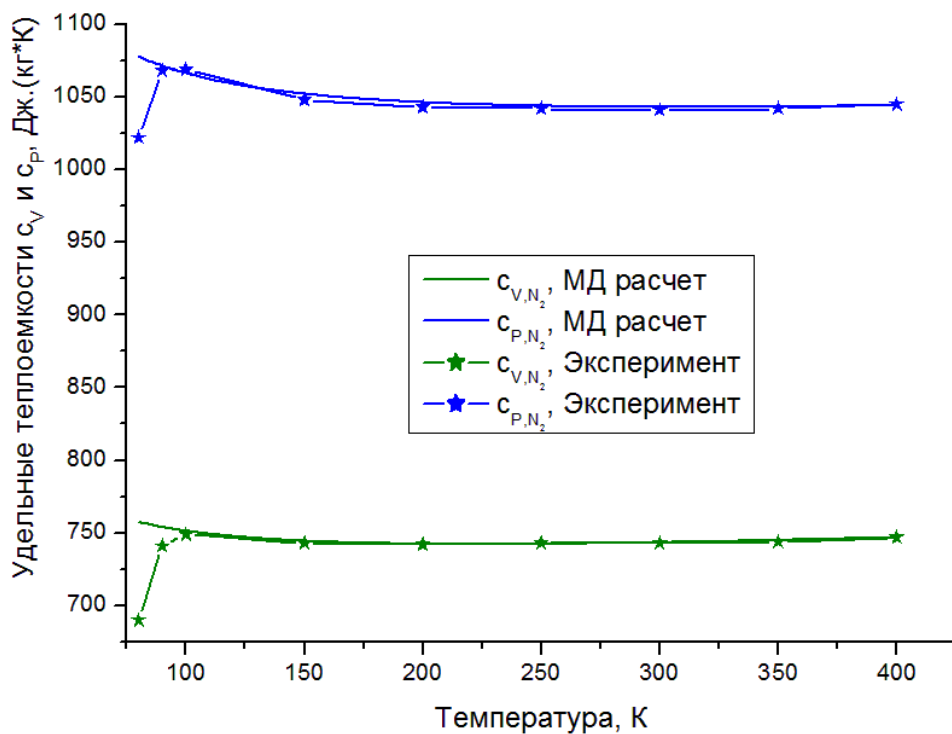


Рисунок 4 – Зависимости удельных теплоемкостей азота c_{v,N_2} и c_{p,N_2} от температуры при $p_0 = 101325 \text{ Па}$.

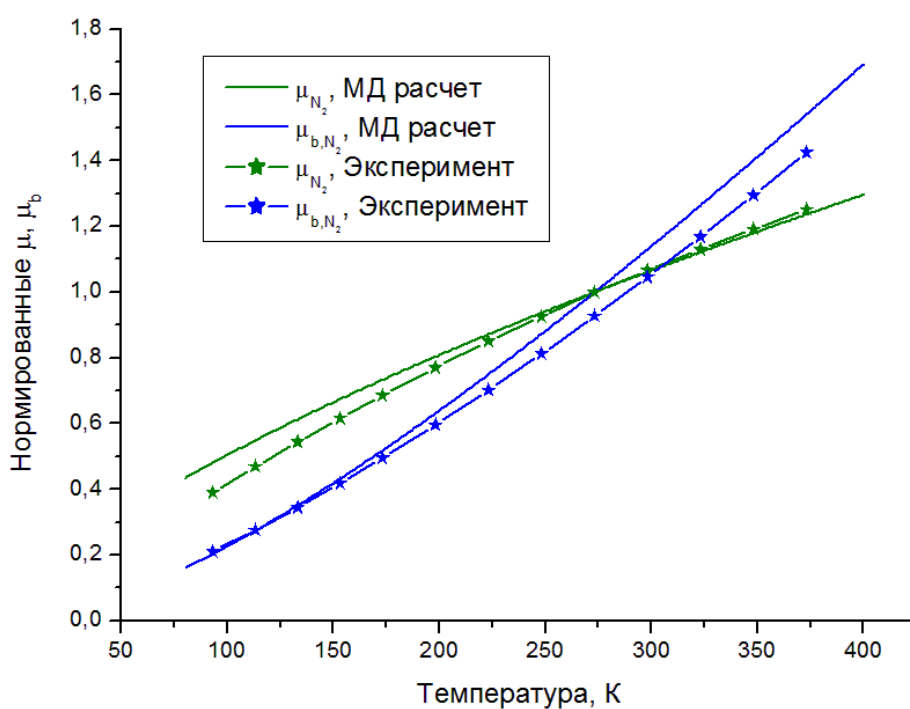


Рисунок 5 – Коэффициенты нормированной динамической и относительной объемной вязкости азота $\mu_{N_2} / \mu_{N_2}^0$ и $\mu_{b,N_2} / \mu_{b,N_2}^0$ в зависимости от температуры

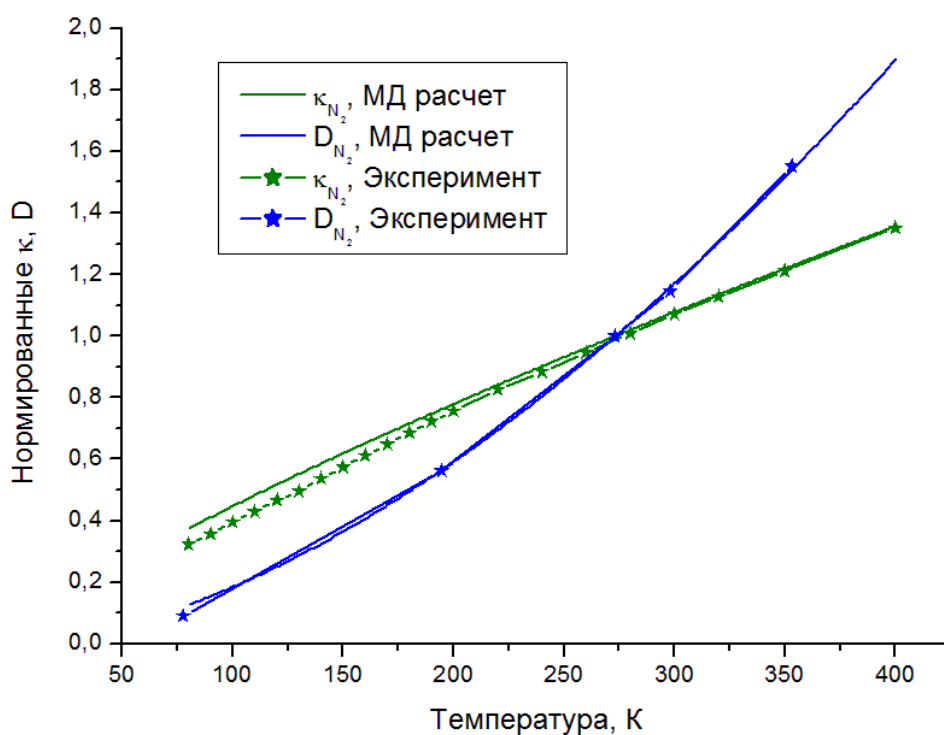


Рисунок 6 – Нормированные коэффициенты теплопроводности и диффузии азота $\kappa_{N_2} / \kappa_{N_2}^0$ и $D_{N_2} / D_{N_2}^0$ в зависимости от температуры.

Динамика процесса представлена на рисунке 7. Анализ приведенных данных показывает, что прохождение газа в микросопло реализуется симметричным образом и соответствует физике процесса.

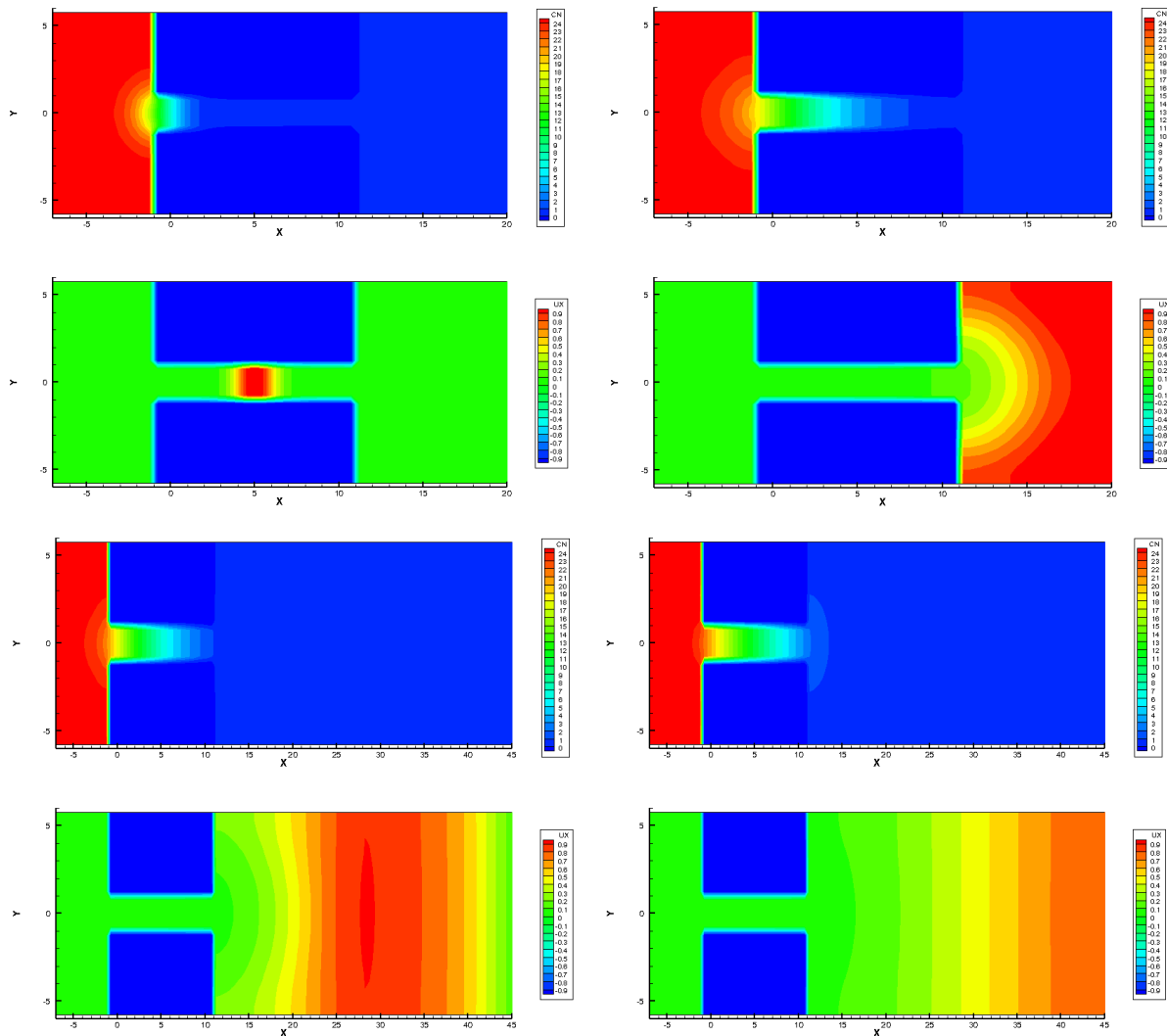


Рисунок 7 – Распределения нормированной концентрации молекул азота и продольной компоненты скорости в моменты времени $t = 0.0553, 0.553, 1.106, 2.211$ мкс, рассчитанные на сетке 2.2. Рисунки располагаются соответственно сверху вниз слева направо; сначала показана концентрация, затем продольная скорость

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 (рисунки 8 и 9). Как показал анализ полученных данных, разница стационарных распределений концентраций компонент смеси не превосходит 5%.

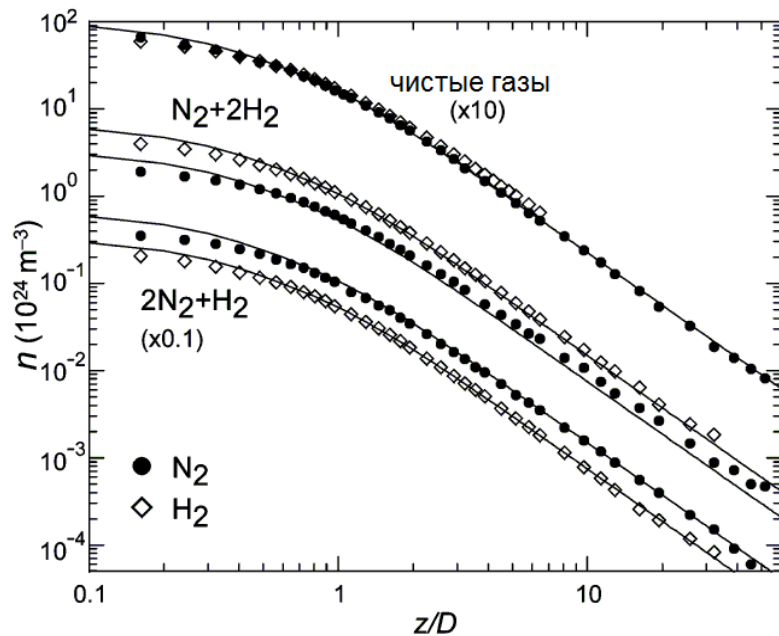


Рисунок 8 – Установившиеся профили нормированной концентрации смеси азота и водорода, полученные в натурном эксперименте

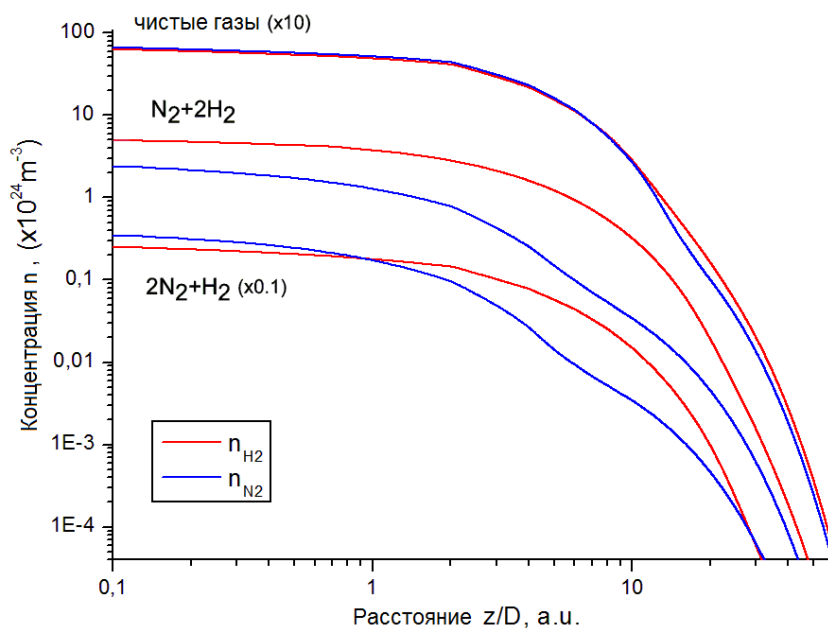


Рисунок 9 – Установившиеся профили нормированной концентрации смеси азота и водорода, полученные при численном расчете

В заключении диссертации сформулированы основные результаты выполненной работы, рекомендации по их использованию и перспективы дальнейшей разработки темы исследования.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

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.

ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

*Публикации в журналах и изданиях, включенных в Перечень ВАК
или в одну из баз данных и систем цитирования Web Of Science, Scopus*

1) 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.

2) 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. Civil-Comp Press, Stirlingshire, UK. 2014. Paper 28.

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

Перевод: 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.

4) 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.

5) 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.

6) 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.

7) Подрыга В.О. Определение макропараметров реального газа методами молекулярной динамики // Математическое моделирование. 2015. Т. 27. №7. С. 80–90.

8) 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.

9) 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. International Center for Numerical Methods in Engineering, Barcelona, Spain. 2015. P. 779–788.

10) Puzyrkov D., Polyakov S., Podryga V. Visualization for Molecular Dynamics Simulation of Gas and Metal Surface Interaction // EPJ Web of Conferences. 2016. Vol. 108. Art. 02037.

11) 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. CEUR Workshop Proceedings. 2016. Vol. 1576. P. 270–283.

12) 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. CEUR Workshop Proceedings. 2016. Vol. 1576. P. 284–297.

13) 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.

14) 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. Vol. 28. Issue 2. P. 221–242.

15) 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.

16) Подрыга В.О. Многомасштабный подход к трехмерному расчету течений газов и их смесей в микроканалах технических систем // ДАН. 2016. Т. 469. №6. С. 656–658.

Перевод: 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.

17) Подрыга В.О., Поляков С.В. Расчет макропараметров газа в потоке и на границе с помощью методов молекулярной динамики // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2016. №80.

18) Подрыга В.О., Поляков С.В. Многомасштабное моделирование истечения газовой струи в вакуум // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2016. №81.

Свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ

19) 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 № 2015618972, 20 августа 2015.

20) 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 № 2015618870, 19 августа 2015.

21) 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.

22) 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 № 2016612716, 9 марта 2016.

Публикации в других изданиях

23) 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.

24) 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.

25) Подрыга В.О., Поляков С.В. Молекулярно-динамическое моделирование процесса установления термодинамического равновесия нагретого никеля // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша*. 2014. №41.

26) В.О. Подрыга, В.В. Жаховский, 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.

27) 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 (ВСППС 2015), 24-31 мая 2015 г., Алушта, Россия. М.: Изд-во МАИ, 2015. С. 602–604.

28) 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. / Новосиб. 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.

29) 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.

30) 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.