

ИПМ им. М.В. Келдыша РАН
НИЯУ МИФИ

**Суперкомпьютерное молекулярное
моделирование газодинамического
напыления наночастиц на подложку**

С.В. Поляков, В.О. Подрыга, Д.В. Пузырьков, Т.А. Кудряшова

Суперкомпьютерные дни в России, 24-25.09.2018, Москва

Цели и задачи работы

Общая цель – разработка вычислительных основ и комплексов программ для моделирования с помощью современных суперкомпьютерных систем физических процессов в сложных технических системах с помощью метода молекулярной динамики как независимо, так и в рамках многомасштабных моделей

Конкретные задачи

- моделирование течений газовых смесей через металлические микроканалы технических систем
- моделирование процессов напыления наночастиц на подложку

Приложения

- сверхзвуковое холодное газодинамическое напыление наночастиц на подложку в установках нанопринтинга и нанолитографии
- совершенствование конструкций установок напыления

Многомасштабный математический подход

Макроуровень: размеры технической системы (ТС) составляют 10^3 - 10^9 длин структурных элементов

Микроуровень: размеры приповерхностных слоев ТС (или границ раздела отдельных ее частей) и структурных единиц близки к атомным

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

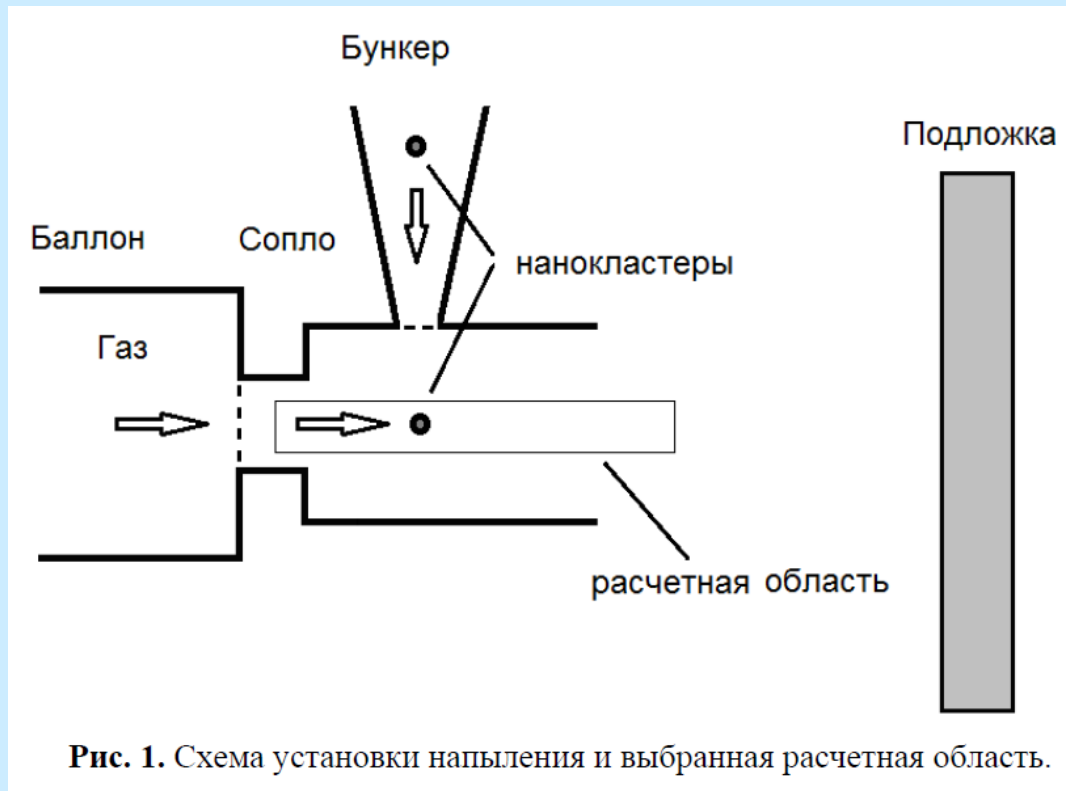
В качестве макромоделей выбрана система уравнений гидродинамики (ГД) в нескольких вариантах

В качестве микромоделей выбрана система уравнений Ньютона (МД)

Зачем нужна молекулярная динамика?

- расчет свойств каждой компоненты среды в реальных условиях
- корректировка макропараметров среды в условиях многокомпонентности и многофазности
- правильное описание условий сопряжения на границах раздела сред
- расчет кинетических коэффициентов и параметров для уравнений ГД

Задача газодинамического напыления



Методы решения:

- КГД
- Молекулярная динамика

Ограничения на данном этапе:

- Газ не проникает в металл
- Наночастиц нет

Входные данные:

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

Макромодель: Квазигазодинамическая (КГД) система уравнений для смеси газов

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

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

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

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

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

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

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

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

Микромодель: Молекулярная динамика

Система уравнений Ньютона

$$\begin{cases} m_l \frac{d\mathbf{c}_{l,i}}{dt} = \mathbf{F}_{l,i} \\ \frac{d\mathbf{r}_{l,i}}{dt} = \mathbf{c}_{l,i} \end{cases}$$

Схема Верле:

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

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

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

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

Алгоритмы решения

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

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

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

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

Алгоритм класса 4 предполагает, что:

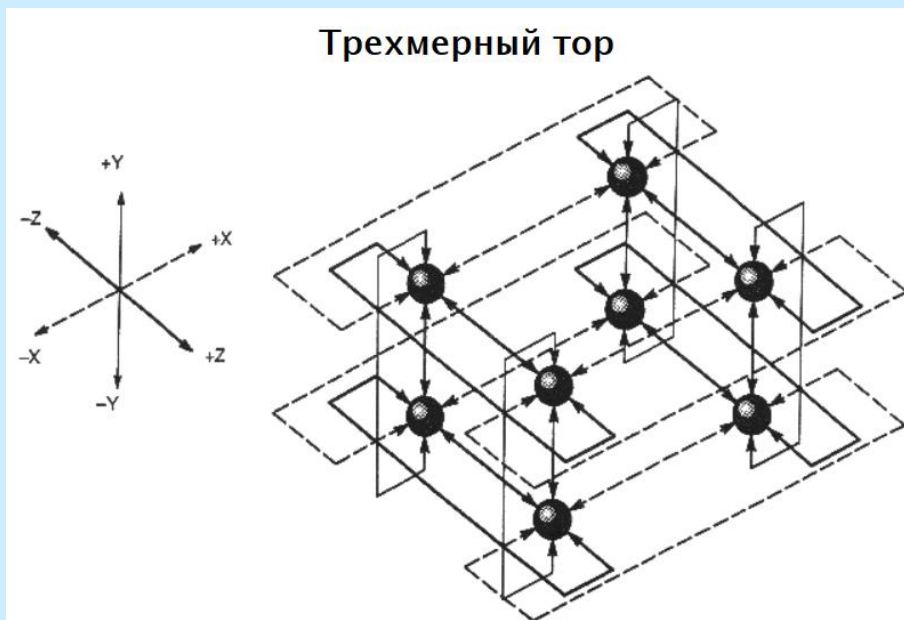
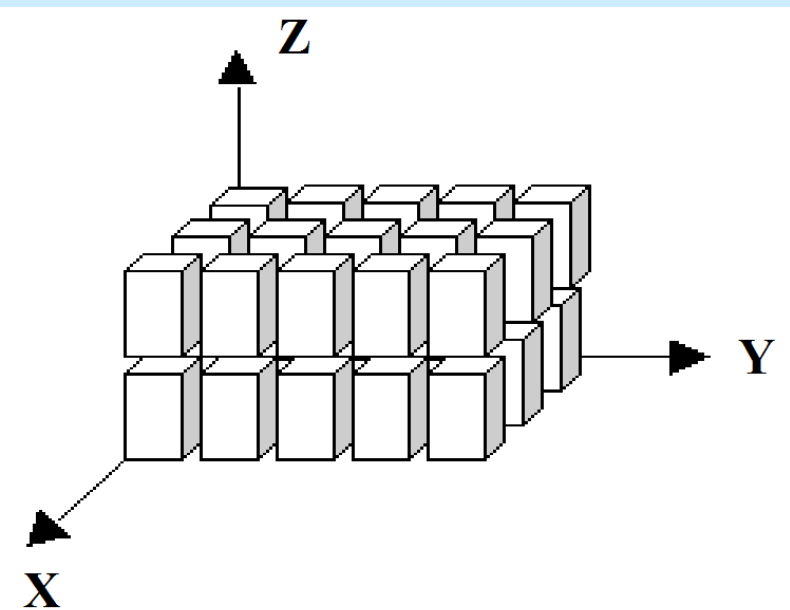
- старт с предварительно рассчитанного равновесного состояния
- в цикле по времени попеременно в центрах ячеек сетки вычисляются:
 - Предикторные макропараметры течения по КГД уравнениям
 - Корректирующие макропараметры течения по МД уравнениям и статистическим суммам внутри отдельных ячеек
 - Макропараметры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

Параллельные алгоритмы для МД

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

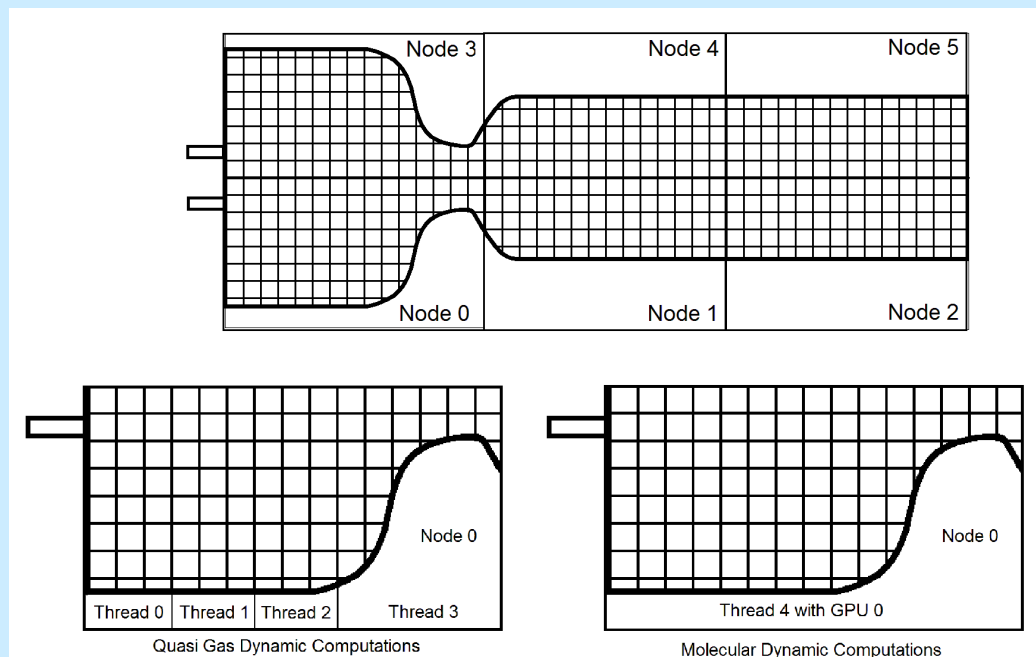
- 1) MPI + OpenMP
- 2) MPI + CUDA

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



Параллельные алгоритмы для КГД+МД

- 1) MPI + OpenMP: MPI реализует распределение КГД и МД вычислений между узлами и ЦПУ и/или ВПУ внутри узлов
OpenMP реализует распределение КГД и МД вычислений внутри процессора по трэдам
- 2) MPI + OpenMP + CUDA: MPI реализует распределение КГД и МД вычислений между узлами и ЦПУ, ВПУ и ГПУ внутри узлов
OpenMP реализует распределение КГД вычислений внутри ЦПУ и ВПУ по трэдам
CUDA реализует распределение МД вычислений внутри ГПУ по мультипроцессорам и блокам трэдов



Суперкомпьютеры и кластеры

K100 Supercomputer (ИПМ РАН):

- 64 узлов, в каждом:
- 2 x CPU Intel Xeon 3GHz microprocessor with 6 cores
- 3 x GPU NVidia Tesla C2050 with 448 video cores
- Пиковая производительность 108 TFlops
- Интерконнект - QDR InfiniBand

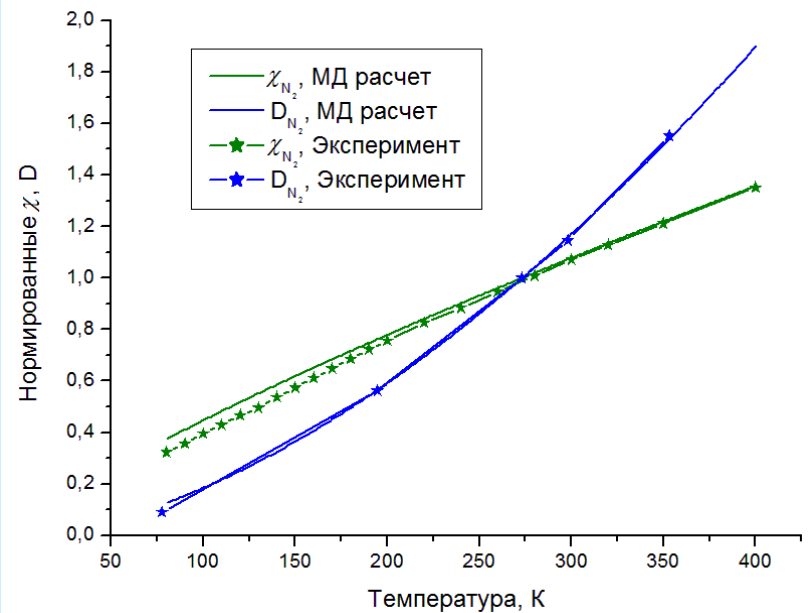
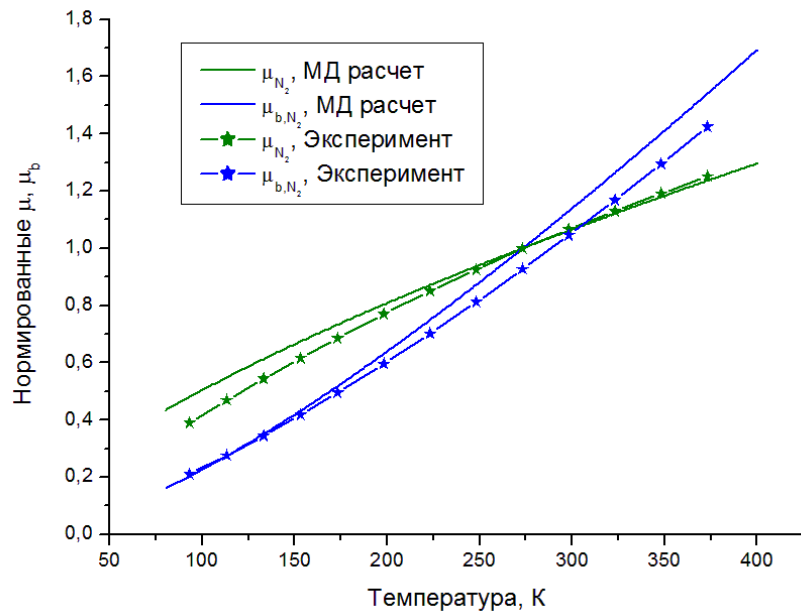
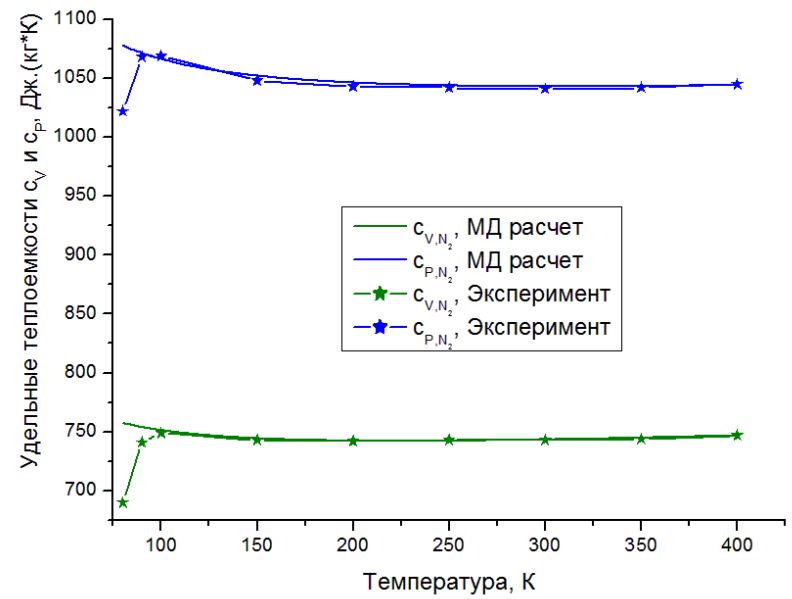
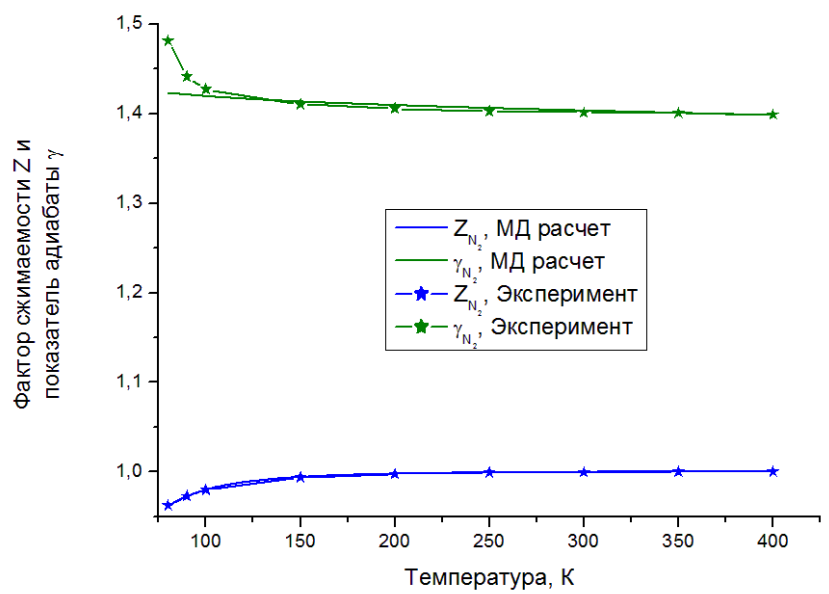
MVS-10P Supercomputer (МСЦ РАН):

- 207 узлов, в каждом:
- 2 x CPU Intel Xeon 2,9 GHz microprocessors with 8 cores
- 2 x VPU Intel Xeon Phi 7110X microprocessors with 61 cores
- Пиковая производительность 524 TFlops
- Интерконнект FDR InfiniBand

K1 Cluster (НИЦЭВТ):

- 36 узлов, в каждом:
- 2 x CPU Intel Xeon 2.3 GHz microprocessors with 6 cores
- Пиковая производительность 7.95 TFlops
- Интерконнект Ангара (аналог FDR InfiniBand)

Задача 1. Определение макропараметров газовой среды (МД): УРС реального газа и кинетические коэффициенты



Задача 2. Газ и поверхность микроканала – прямой МД расчет

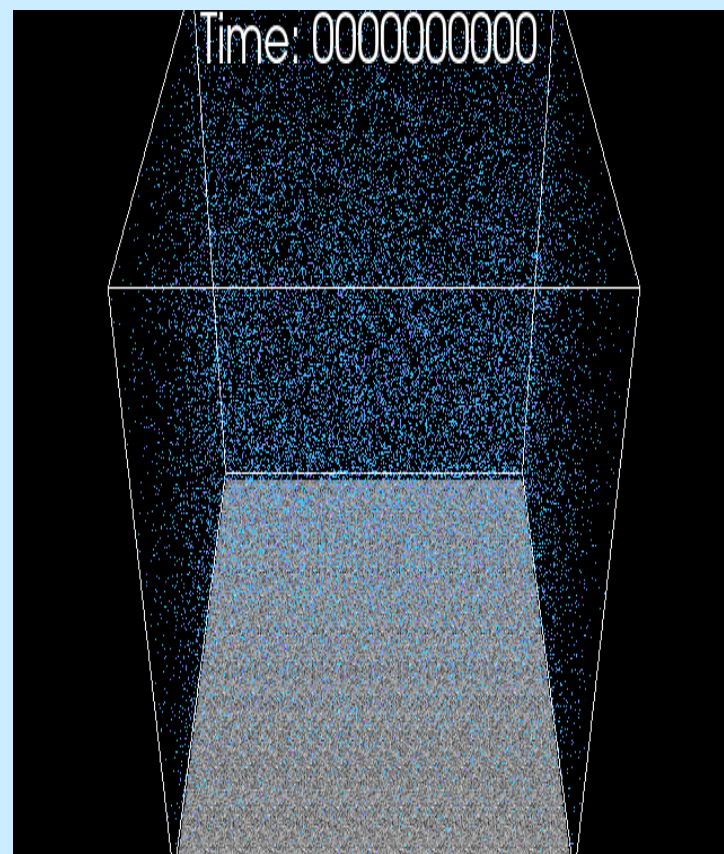
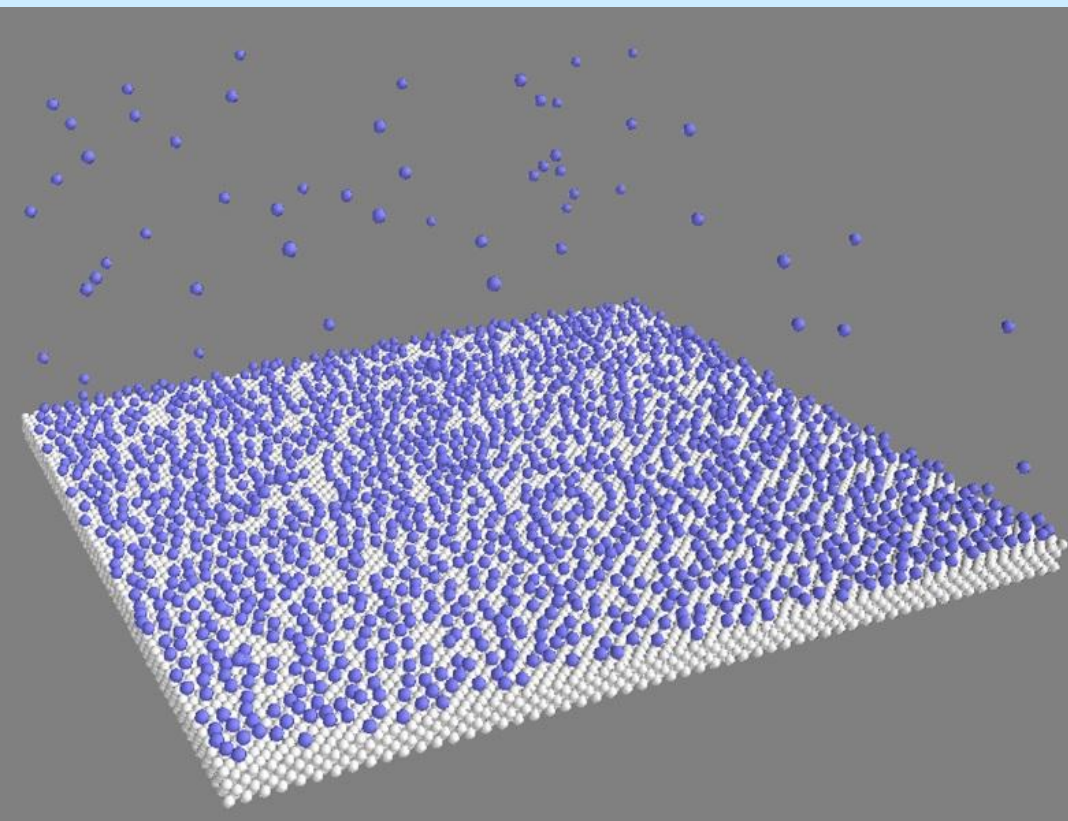
Расчет взаимодействия азота со стенками никелевого микроканала

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

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

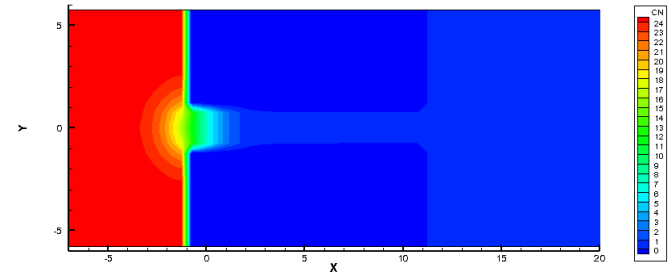
Число шагов по времени: 1 150 000 шагов, 1 шаг = 2 фс

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



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

Задача 3. Определение параметров течения в микросопле КГД+МД



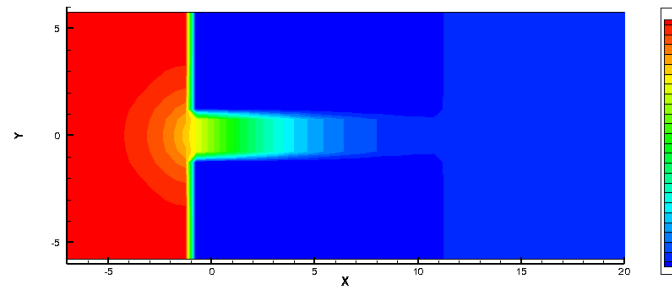
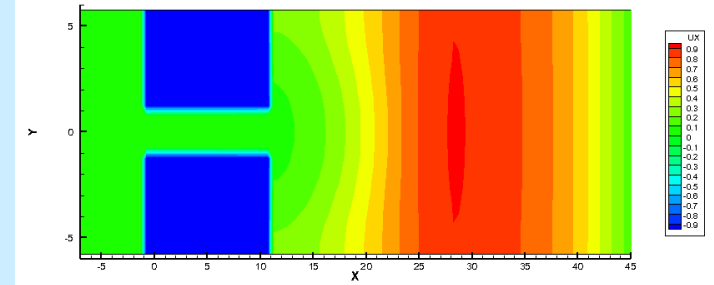
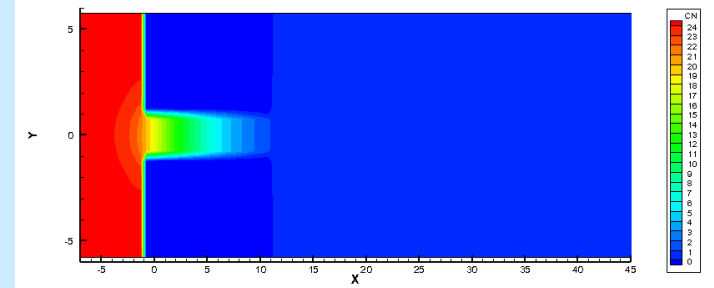
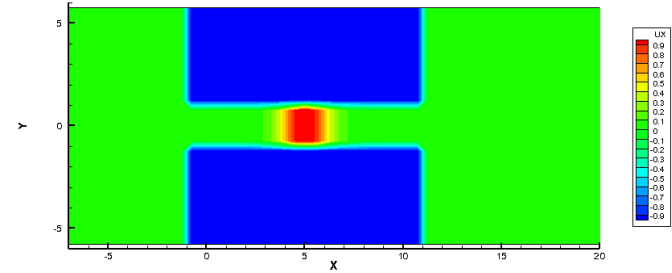
концентрация
частиц газа

0.053 мкс



1.106 мкс

продольная
скорость



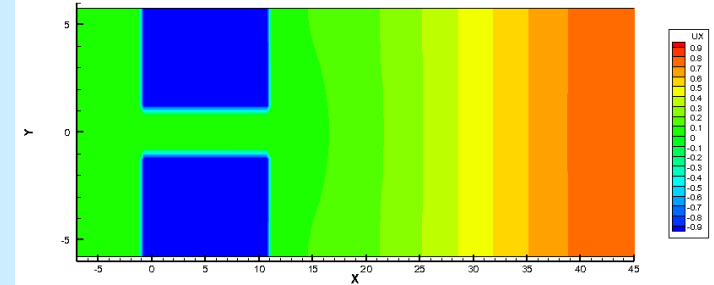
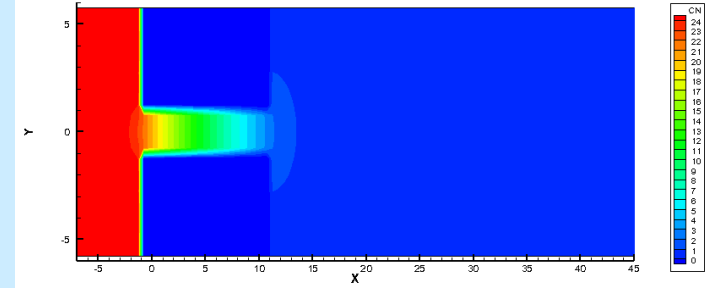
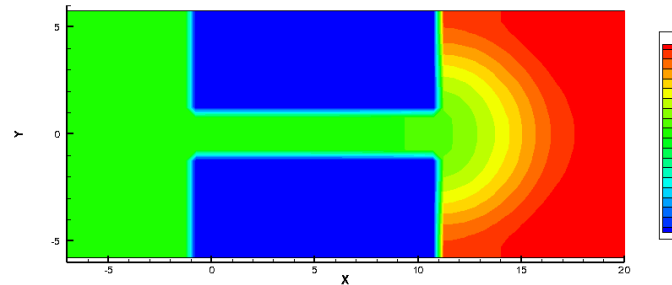
концентрация
частиц газа

0.553 мкс



2.211 мкс

продольная
скорость

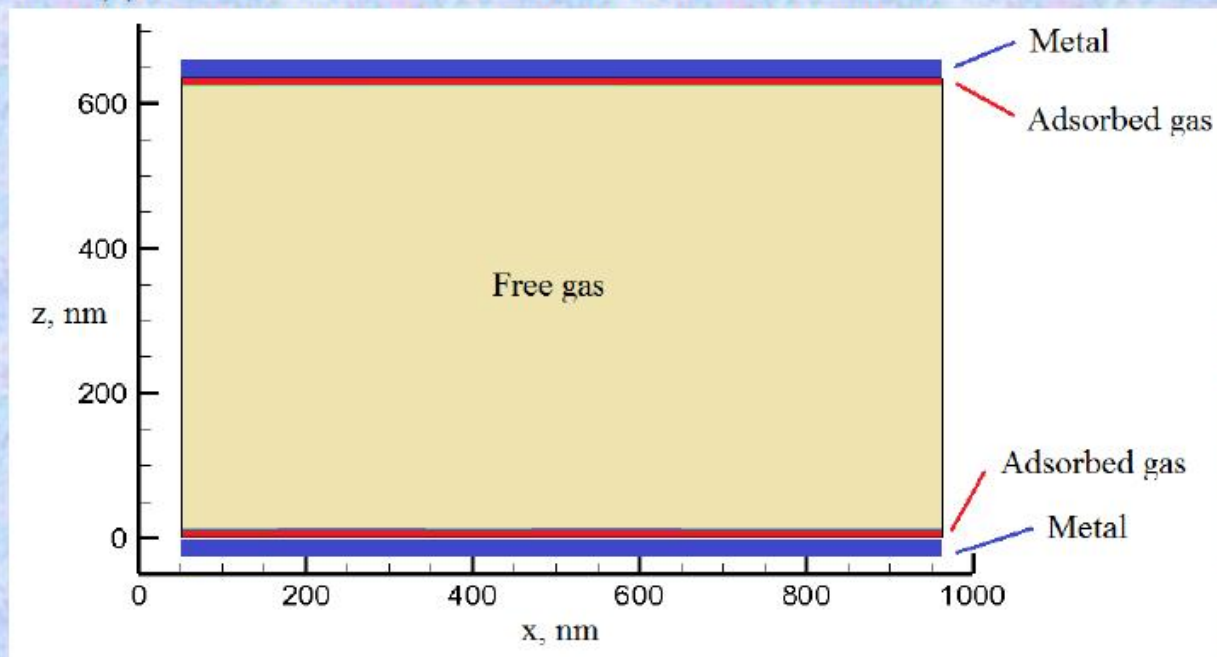


Задача 4. Определение параметров течения в микроканале.

Исходные данные

прямой МД расчет течения азота в тонком никелевом микроканале.

Использовались результаты предыдущих исследований, связанных с расчетами термодинамического равновесия отдельных систем частиц азота и никеля, а также с расчетом взаимодействия азота с никелевой пластиной.



Размеры микроканала: $L_x=1017$ нм, $L_y=101.7$ нм, $L_z=631.5$ нм

Толщина стенок: $W_z=8.5$ нм (24 кристаллических ячейки)

Подготовительные расчеты: $T = 273.15$ К, $p = 101325$ Па

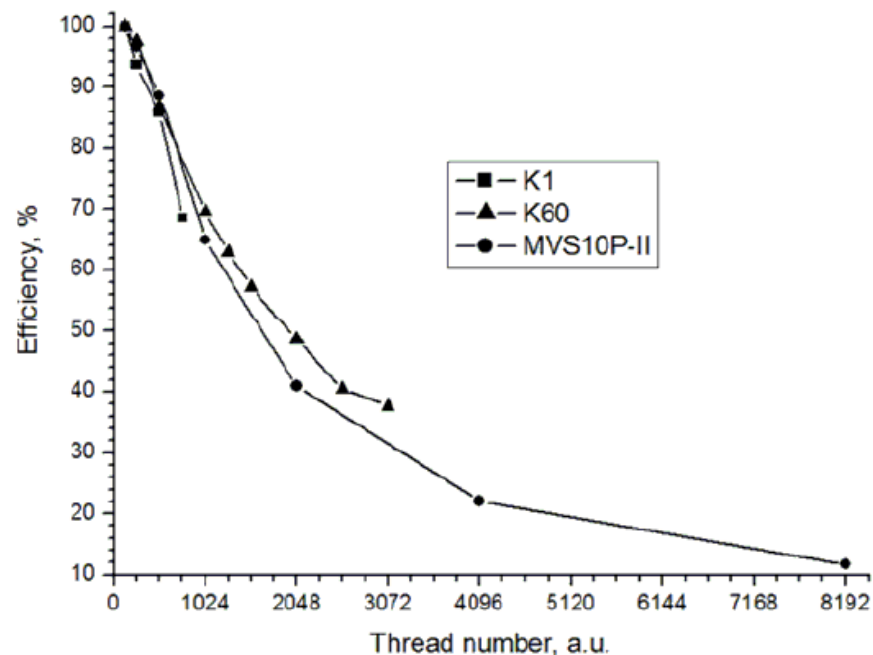
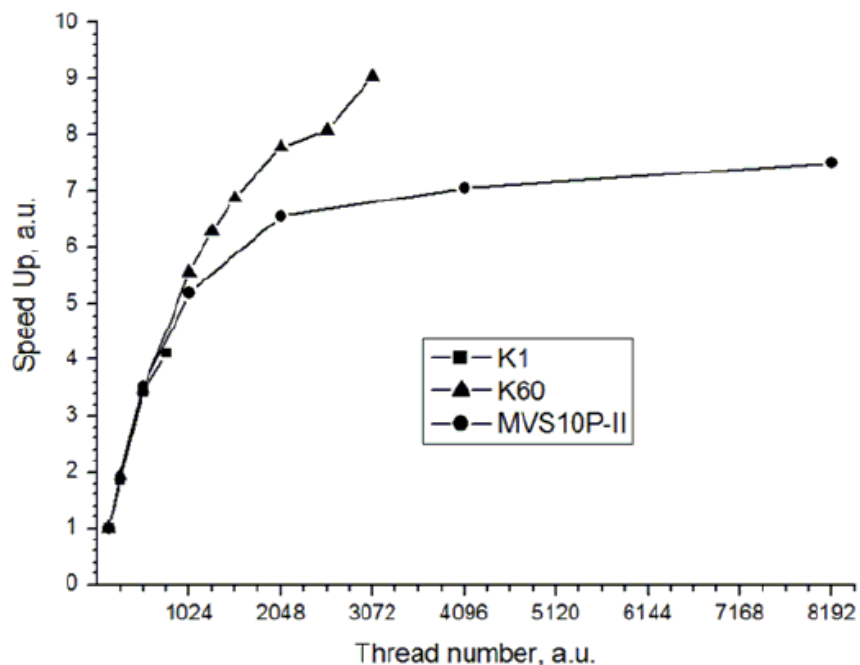
Ширина потока: $H_z = 305.1, 406.8, 508.5, 610.2$ нм

Скорость потока: $V_x = 0.4$ нм/пс (скорость звука при н.у. 354 м/с)

Задача 4. Определение параметров течения в микроканале.

Вычислительные системы

Name	Owner	Node number	Inter-connect type	Processor type	Performance, TFLOPS	Proc. per node	Cores / Threads per proc.	RAM size on the node, GB
K60	KIAM RAS	78	InfiniBand FDR	Intel Xeon E5-2690 v4	74,2	2	14/2	256,0
MVS10 P-II	JSCC RAS	86	Omni Path	Intel Xeon E5-2697A v4	110,5	2	16/2	128,0
K1	JSC NICEVT	36	Angara-1	Intel Xeon E5-2630/2660 v0	14,4	2	6/2; 4/2	32,0



Задача 4. Определение параметров течения в микроканале.

Результаты расчетов

МД расчет: Усредненные по x и y мгновенные профили продольной скорости для различной ширины начального потока

Число частиц: 164 млн
(162 металл + 2 газ)

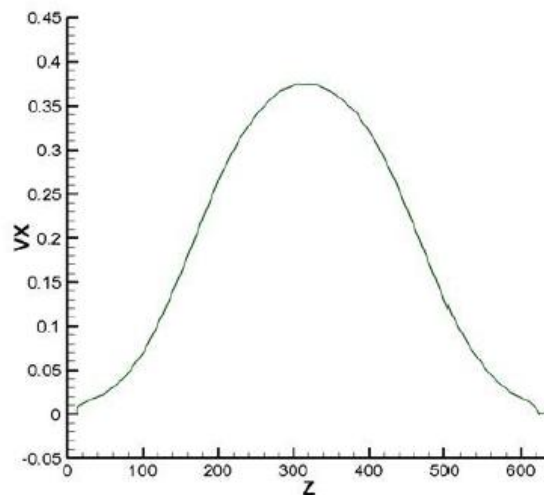
$\text{Hz} = 305.1, 406.8,$
 $508.5, 610.2 \text{ нм}$

1 шаг = 2фс
(95 с реальных)

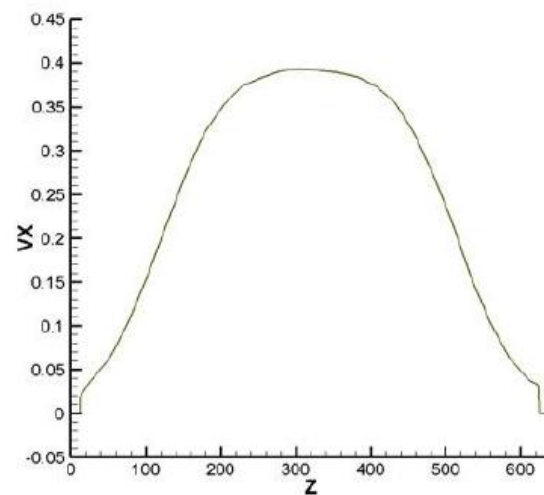
Всего: 412 пс

В поперечном сечении микроканала устанавливается профиль отличный от параболического и более похожий на гауссово распределение

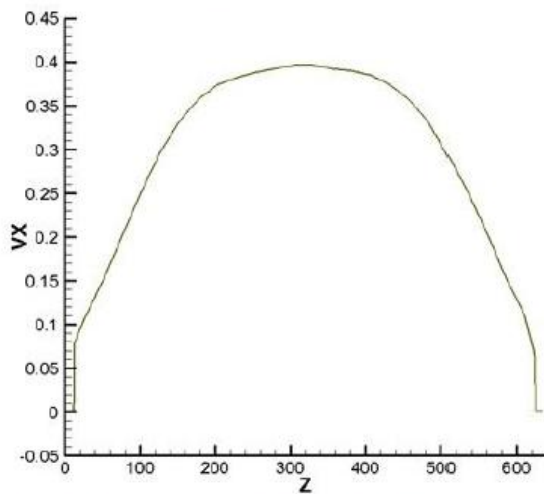
$w=12*72*0.35314 \text{ нм}$



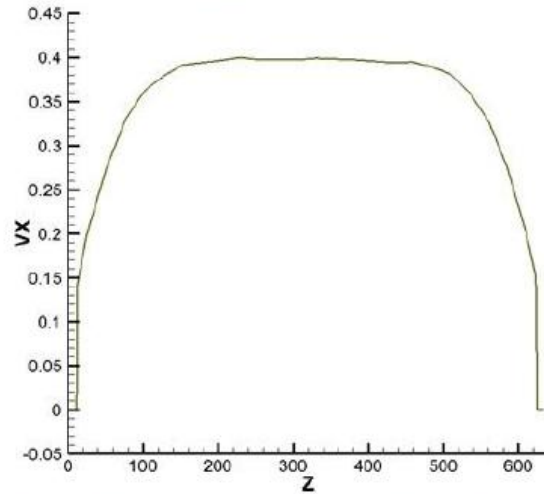
$w=16*72*0.35314 \text{ нм}$



$w=20*72*0.35314 \text{ нм}$

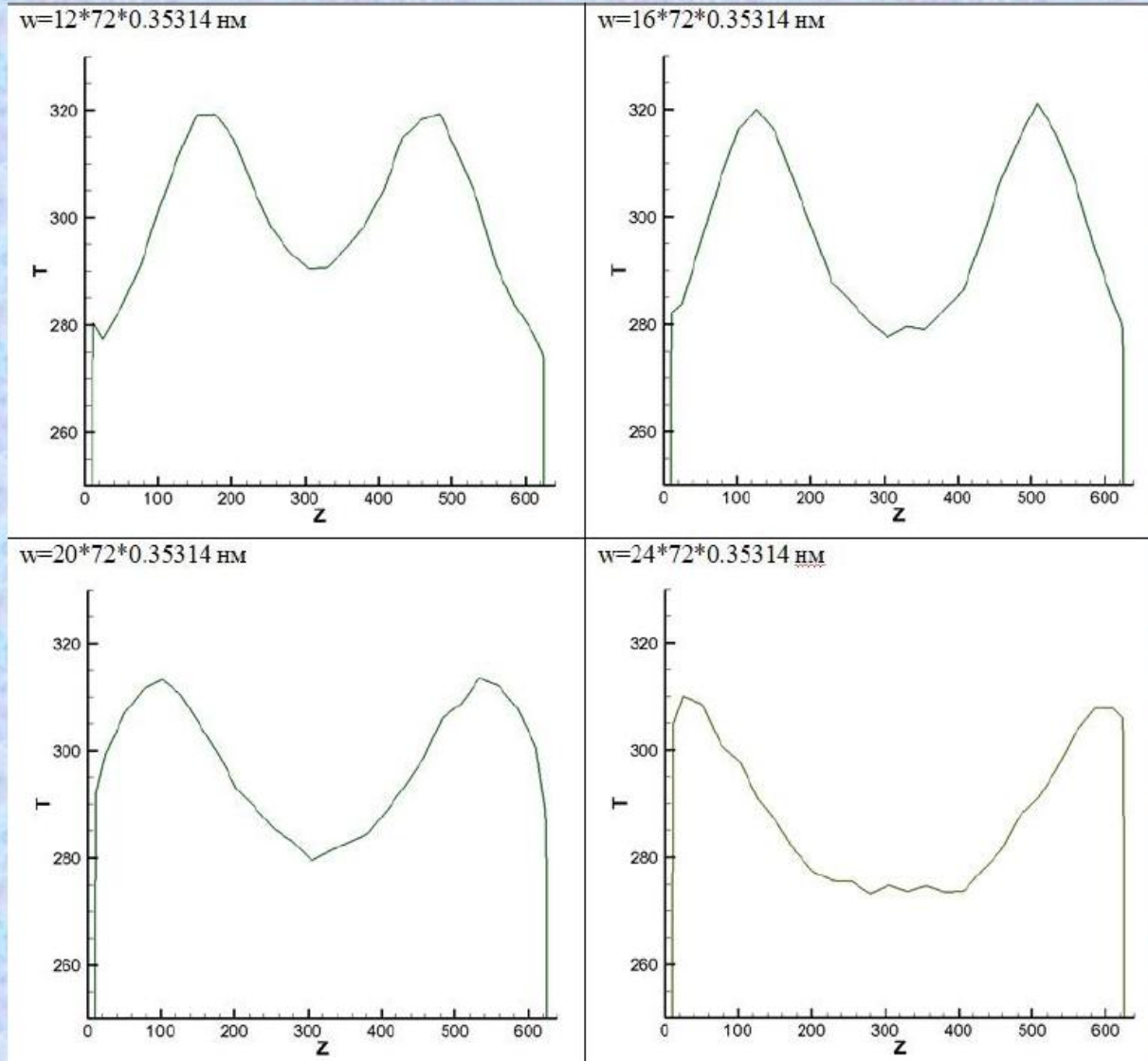


$w=24*72*0.35314 \text{ нм}$



Задача 4. Определение параметров течения в микроканале. Результаты расчетов

МД расчет: Усредненные по x и y мгновенные профили температуры для различной ширины начального потока



Задача 4. Определение параметров течения в микроканале.

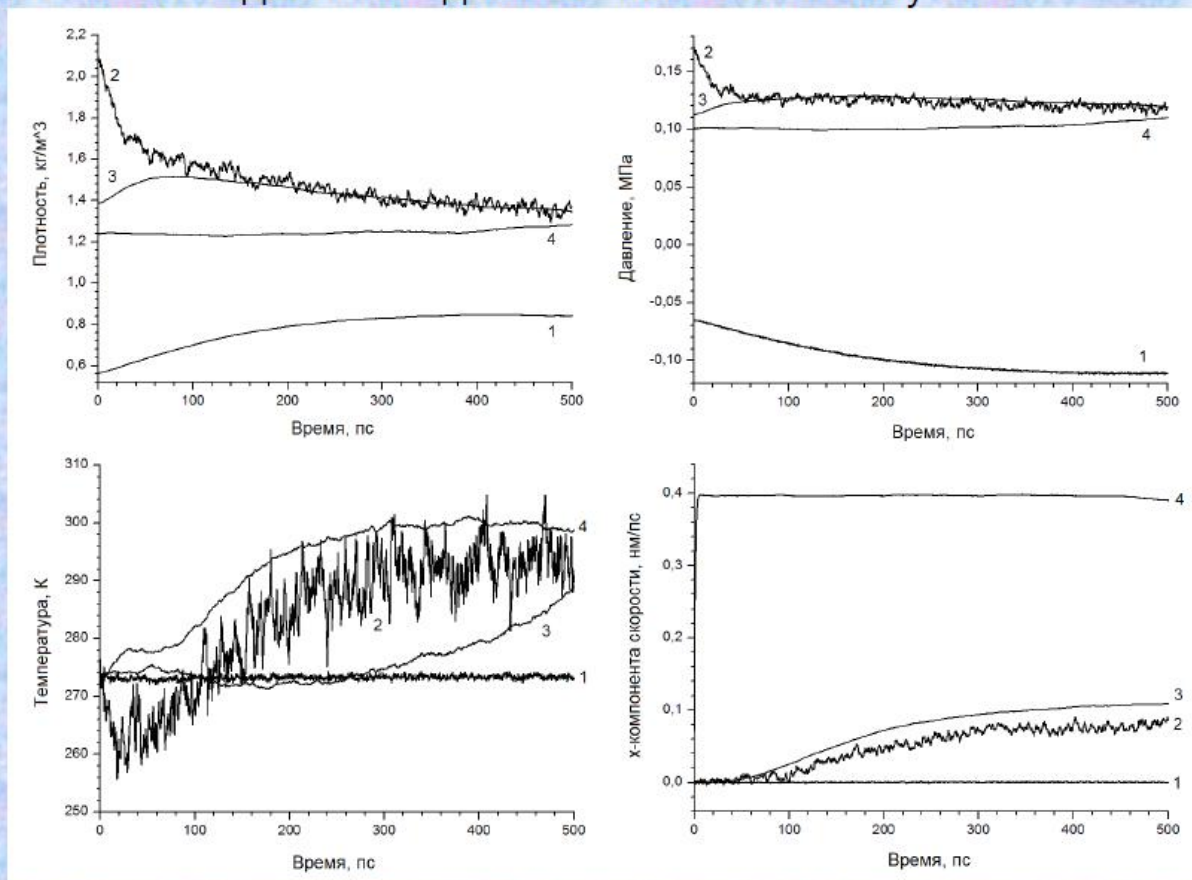
Результаты расчетов

МД расчет: Течение вблизи стенки.

Динамика значений основных газодинамических параметров в сечениях по z :

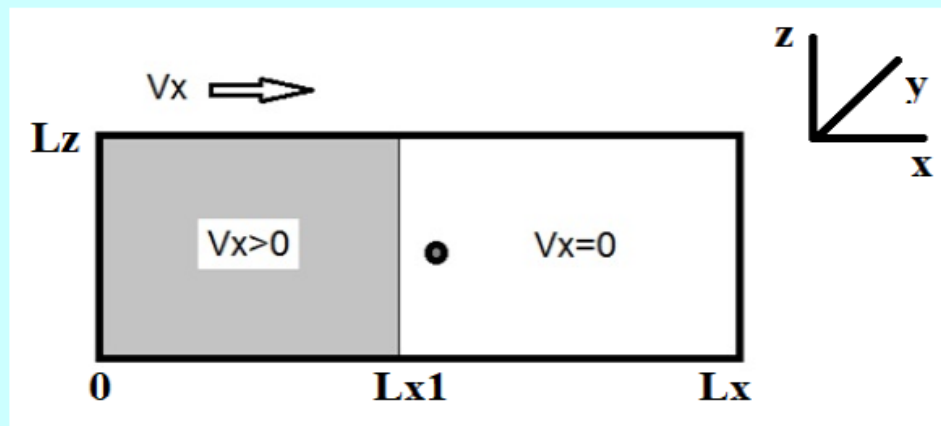
- 1 - в адсорбированном на металле слое газа ($z=11.12$ нм),
- 2 - в ближайшем к нему движущемся слое газа ($z=12.18$ нм),
- 3 - в среднем сечении кнудсеновского слоя ($z=25.43$ нм $\sim 1/3 \lambda$ в N_2 при н.у.),
- 4 - в центре канала ($z=305.11$ нм).

Кривые 1 плотности и давления домножены на величину 0.001.



Задача 5. Разгон нанокластера сверхзвуковой струей газа

Start Statement



Main parameters of calculation

Domain sizes: $L_x=533.96$ nm, $L_y=76.28$ nm, $L_z=76.28$ nm

Boundary of thermostated area: $L_{x1}= 228.84$ nm

Nanocluster size: $W_z=8.5^3$ nm³ (24^3 elementary cells)

Start nanocluster location: (266.98, 38.14, 38.14)

Particle number: 82904 (Gas) + 55296 (Metal) = 138 200

Conditions for preparatory stages: $T = 273.15$ K, $p = 101325$ Pa

Boundary conditions: PBC and free exit

Thermostat for metal: Berendsen (for preparation)

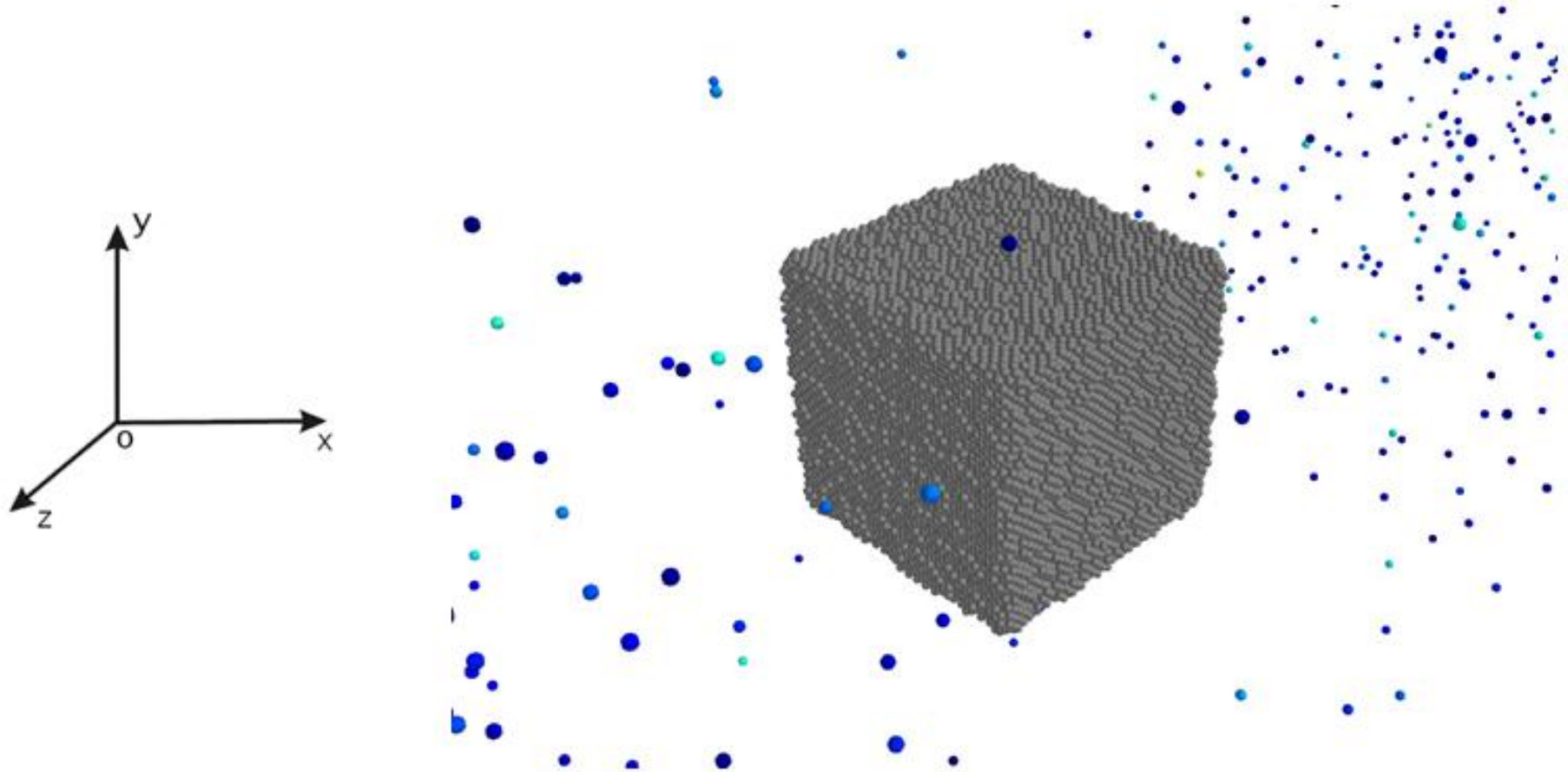
Thermostat for gas: Langevin (for preparation)

Longitudinal velocity of the flow:

$V_x = 1;2;3;4;5$ nm/ps = 2.8; 5.6; 8.4; 11.2; 14 Ma

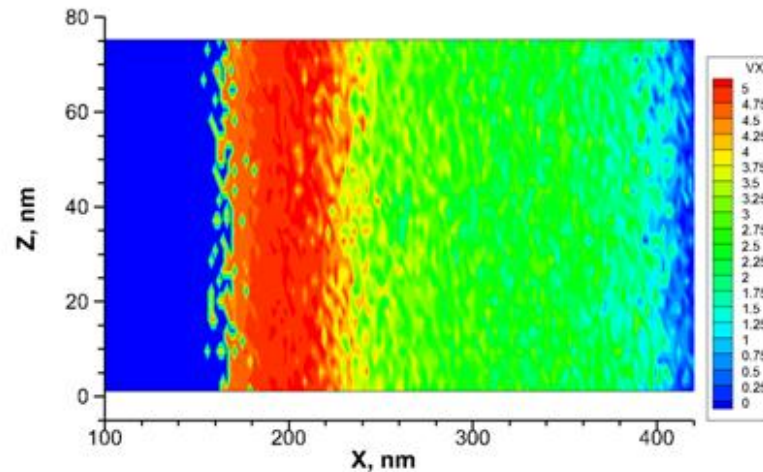
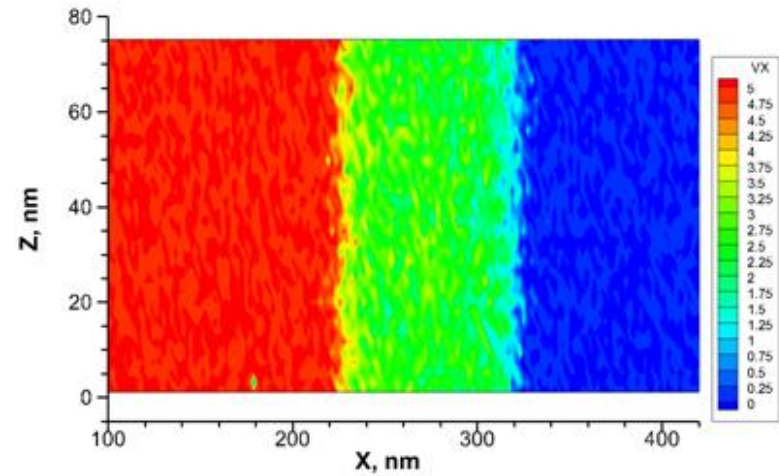
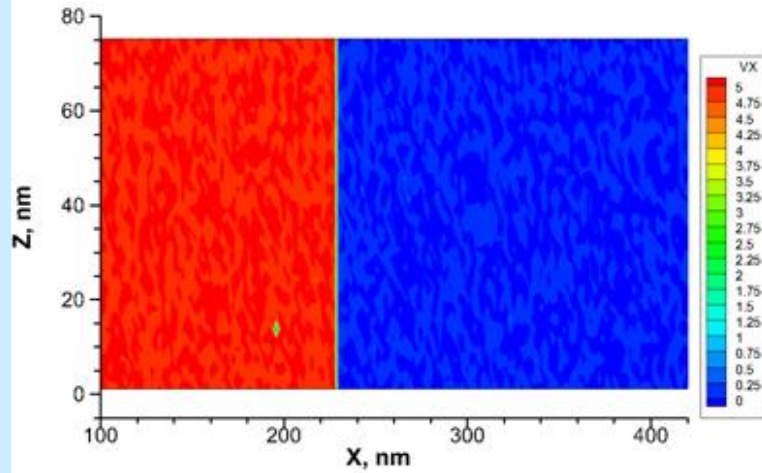
Calculation time for 5th stage: 1 ns (500 000 steps), 1 step = 2 fs

Задача 5. Разгон нанокластера сверхзвуковой струей газа



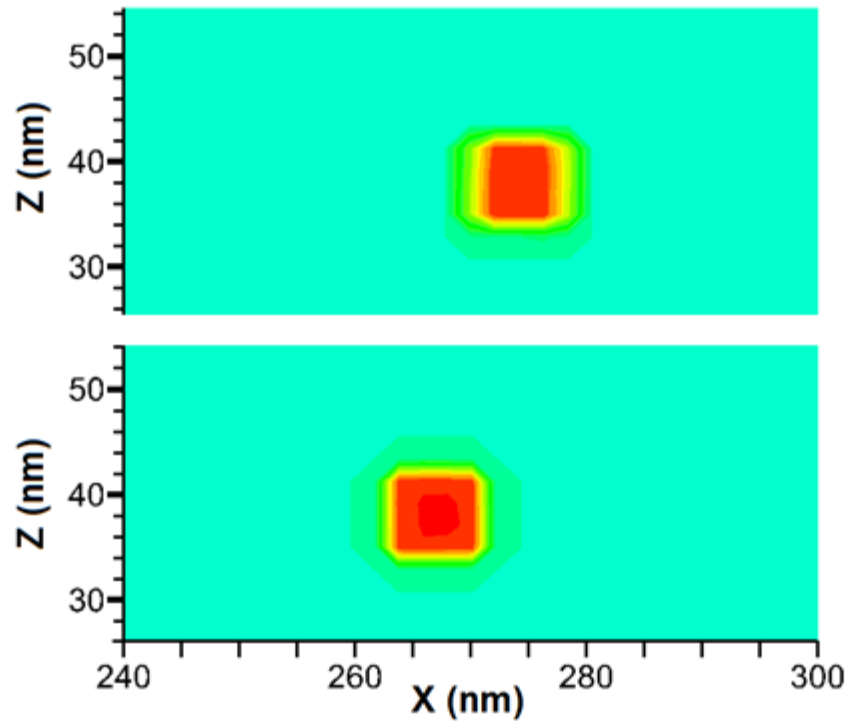
3D image of nanocluster and gas molecules

Задача 5. Разгон нанокластера сверхзвуковой струей газа



Distributions of the longitudinal velocity of the gas averaged over the coordinate y at time points 0, 18, 38 ps

Задача 5. Разгон нанокластера сверхзвуковой струей газа



Position of nanocluster at initial time (below) and at time point 350 ps (above)

Задача 5. Разгон нанокластера сверхзвуковой струей газа

Nickel nanocluster in nitrogen flow

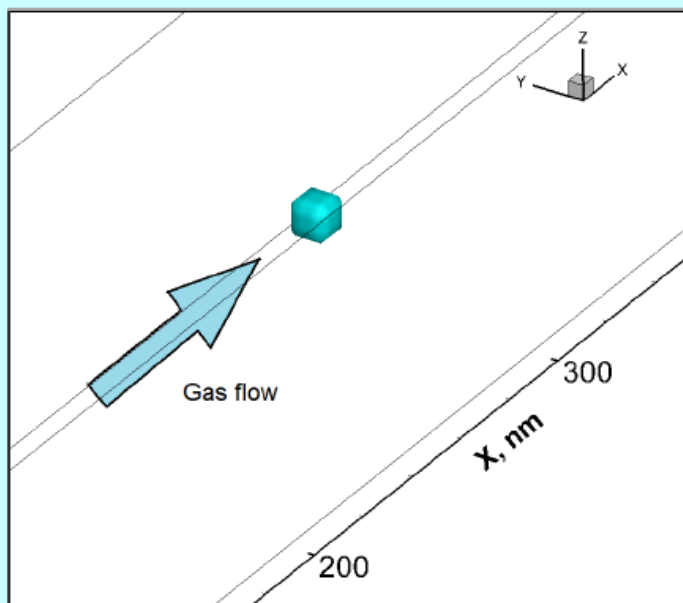
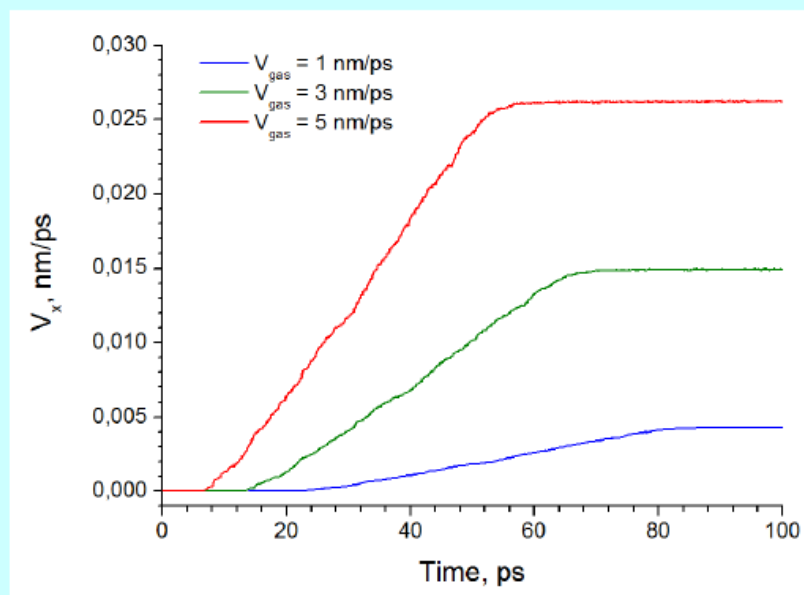


Illustration of the oncoming flow of gas on a nanocluster



The resulting longitudinal velocity of the nanocluster, obtained by the acceleration for three values of the gas velocity

Most of the **gas begins to move** in the same direction as the supersonic flow that has struck it.

For the same reason, the gas surrounding the cluster quickly "flies" forward. Initially **nanocluster is not moving**, but then it **starts moving**.

Nanocluster moves much **more slowly**.

It eventually accelerates evenly to a certain limited velocity

The magnitude of this velocity is related to the amount of gas colliding with the cluster and its total momentum.

Заключение

- 1) Разработан многомасштабный численный подход на основе моделей гидро- и квазигидроднамики и молекулярной динамики для расчета нелинейных процессов в многокомпонентных многофазных микросистемах, применяющихся в нанотехнологиях
- 2) Разработаны параллельные алгоритмы и комплексы программ для решения нескольких парактически важных задач современной электроники, проведено тестирование на различных вычислительных системах с гибридной архитектурой, подтвердившее работоспособность и эффективность разработанных кодов
- 3) Проведены модельные расчеты, связанные с газодинамическим напылением наночастиц на подложки
- 4) Будущее – решение задачи в комплексе

Спасибо за внимание!