

УДК 004.942
DOI: 10.15827/0236-235X.134.324-330

Дата подачи статьи: 03.03.21
2021. Т. 34. № 2. С. 324–330

Моделирование столкновений трех атомов после одновременного вылета с поверхности конденсированной фазы

С.А. Желтов¹, *ст. преподаватель, Zheltov.SA@tversu.ru*

¹ *Тверской государственный университет, г. Тверь, 170100, Россия*

Расчет технологических установок основан на движении газа в сложных системах. Взаимодействие газа со стенками систем имеет большое значение для оптимизации процесса переноса. Определяющим является поведение атомов и молекул в слое Кнудсена. В этом слое происходят наибольшие изменения всех величин: температуры, плотности, давления и т.д. В связи с тем, что отсутствуют данные о детальном описании движения атомов в данном слое, вводят скачки этих величин.

В настоящей работе рассмотрена модель вылета атомов с ограниченного участка поверхности конденсированной фазы в вакуум. Предполагалось, что атомы представляют собой жесткие сферы и после столкновения друг с другом не образуют молекул. Атомы могли столкнуться друг с другом после вылета с поверхности конденсированной фазы, а затем один из них мог столкнуться с третьим атомом.

Получены плотности распределений столкновений двух атомов, одновременно вылетевших с поверхности (первые столкновения), и плотности столкновений одного из этих атомов с третьим атомом (вторые столкновения). Установлены зависимости плотностей распределений первых и вторых столкновений в зависимости от температуры поверхности и размеров области испарения. Приведены распределения для средних значений этих величин.

В работе были использованы параллельные вычисления на графических процессорах.

Ключевые слова: *параллельные вычисления, метод Монте-Карло, столкновения атомов, моделирование.*

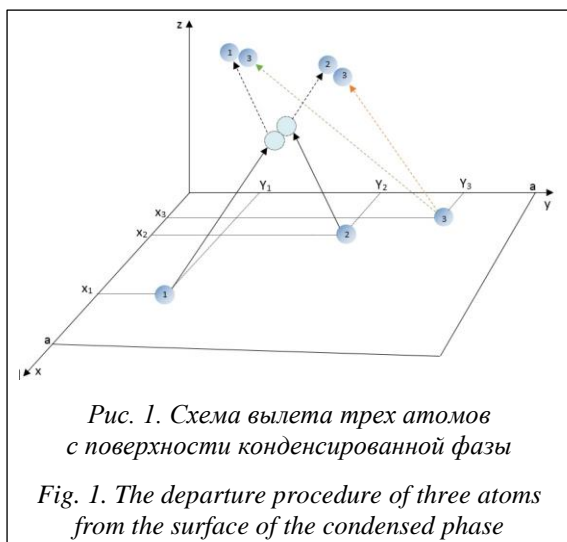
Возможная экономия энергии за счет повышения эффективности технологических печей оценивается в 35 % от общего потенциала неиспользуемых ресурсов вторичного тепла. Несколько факторов препятствуют внедрению таких систем. Одним из них является увеличение аэродинамического сопротивления и, соответственно, уменьшение разряжения на выходе из топочной камеры в условиях естественной тяги. Расчет паротурбинной установки заключается в определении температур и давлений потоков. Важными моментами являются коэффициенты теплоотдачи и потери давления.

Вылет атомов с поверхности конденсированной фазы представляет большой интерес при рассмотрении процесса испарения вещества с микроскопической точки зрения [1–3]. Это связано с начальной фазой процесса испарения жидкости в вакууме [4–6]. Теоретически процесс испарения важен для получения правильной физико-математической модели взаимодействия газ–твердое тело, граничных условий [7–9]. В процессе испарения атомы могут не только вылетать с поверхности, но и после нескольких столкновений друг с другом в газовой фазе попадать обратно в конденсированную фазу или на поверхность [10, 11]. В связи

с этим возникает задача более подробного рассмотрения влияния столкновений вылетающих атомов с поверхности конденсированной фазы.

В работах [12–14] рассматривается одновременный вылет двух атомов с ограниченного участка поверхности конденсированной фазы. Были получены плотности распределений столкновений атомов во времени и средние времена столкновений после вылета с поверхности. Распределения получены для различных температур поверхности и размеров области испарения.

В данной работе рассмотрен одновременный вылет трех атомов с ограниченного участка поверхности конденсированной фазы. Качественное отличие данного подхода заключается в том, что три атома могут не только образовать нанокластеры, но и после столкновения друг с другом попасть в конденсированную фазу. Кроме того, один из двух столкнувшихся атомов может столкнуться с третьим. Помимо времени столкновения двух атомов, определялось время столкновения одного из них с третьим атомом. На рисунке 1 приведена схема такого возможного столкновения: сначала сталкиваются два атома, затем один из них сталкивается с третьим атомом. При расчетах



использовалась модель атомов в виде твердых сфер. В этом случае два столкнувшихся атома не образуют соединения и после столкновения мгновенно разлетаются.

Расчеты проводились с атомами массой $m = 40$ а.е.м. Исходный размер области испарения – квадрат со стороной $a = 3 \cdot 10^{-10}$ м. Радиус атомов $R = 1.5 \cdot 10^{-9}$ м. Положения атомов на поверхности конденсированной фазы разыгрывались с помощью датчика равномерно распределенных случайных величин. Компоненты скоростей атомов разыгрывались с помощью датчика нормально распределенных случайных величин. Величина потенциального барьера на поверхности конденсированной фазы считалась равной нулю. В реальных ситуациях она отлична от нуля [15–17]. Атомы вылетали с поверхности конденсированной фазы равновероятно по всем направлениям.

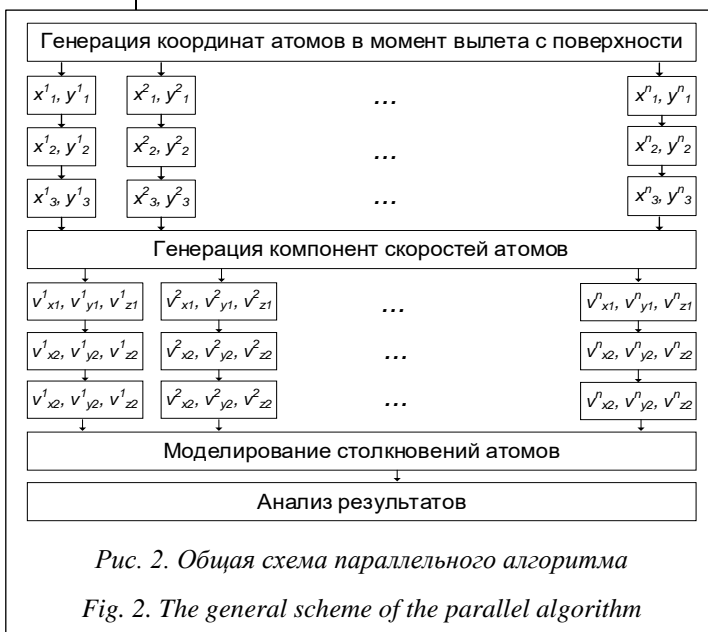
Параллельный алгоритм

Последовательная реализация на CPU метода Монте-Карло неэффективна и требует значительных затрат времени при низкой достоверности результатов численного эксперимента. Процесс моделирования столкновения трех атомов обладает параллелизмом по данным, и его можно адаптировать к вычислениям на графических процессорах компании nVidia с учетом особенностей архитектуры CUDA. Анализ и теоретические оценки сложности параллельного алгоритма по методике,

описанной в работе [18], позволяют сделать вывод о высокой эффективности параллельных вычислений. Использование вычислений на графических процессорах (GPGPU) с соответствующей адаптацией алгоритма позволяет добиться существенного снижения времени фактических расчетов при моделировании. Алгоритм расчета столкновений трех атомов требует значительных объемов памяти GPGPU, что влияет на количество одновременно выполняемых нитей и конфигурации GRID. Программная реализация выполнена на языке C++ с расширениями CUDA. Общая схема параллельного алгоритма представлена на рисунке 2. В рамках одной параллельной нити вычислительные операции выполняются в последовательном режиме аналогично модели вычислений на CPU.

Исходные данные численного эксперимента – это величины, распределенные по нормальному и равновероятному законам. Для задания начальных координат атомов на поверхности конденсированной фазы использовался генератор `curandGenerateUniformDouble` с параметрами нормального распределения. Компоненты скоростей атомов задавались с помощью генератора `curandGenerateNormalDouble`. Генераторы использовались из библиотеки CURAND. Для каждого их трех атомов создавался свой экземпляр генератора с различными начальными состояниями, но одинаковыми параметрами распределений.

Одна нить параллельного алгоритма производит расчет всех возможных комбинаций



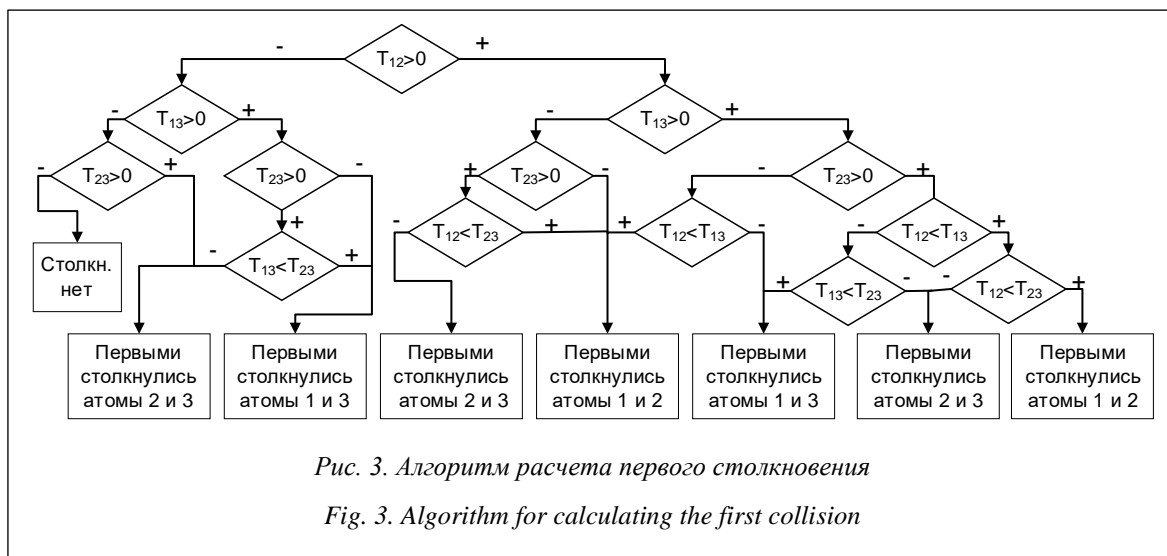


Рис. 3. Алгоритм расчета первого столкновения

Fig. 3. Algorithm for calculating the first collision

столкновений. Алгоритм определения первого столкновения двух атомов из трех приведен на рисунке 3. Если столкновение происходило, то анализировалась возможность второго столкновения с третьим атомом одного из двух столкнувшихся. Алгоритм отдельной нити приведен на рисунке 4.

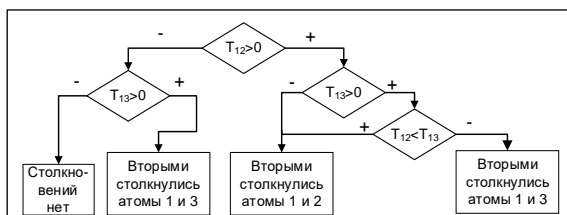


Рис. 4. Анализ второго столкновения атомов

Fig. 4. Analysis of the second atom-atom collision

Для получения результатов достаточной достоверности компьютерный эксперимент длился до тех пор, пока количество вторых столкновений не достигло 500 000.

Численное моделирование проводилось на линейке графических процессоров nVidia (Testla K20, K40, K80) гетерогенной платформы HybridIT, которая входит в многофункциональный информационно-вычислительный комплекс (МИВК) Лаборатории информационных технологий ОИЯИ, г. Дубна [19].

Результаты расчетов

Результаты расчетов по определению плотности распределений времен первых столкновений пар атомов в зависимости от температуры приведены на рисунке 5. Первые столкновения – столкновения двух атомов, вы-

летающих с поверхности. На рисунке 1 это атомы 1 и 2. Вторые столкновения – столкновения одного из двух столкнувшихся атомов с третьим атомом. На рисунке 1 это столкновение атомов 2 и 3. С увеличением температуры поверхности конденсированной фазы кривые нормированных распределений смещаются влево. Данное положение кривых распределений обусловлено тем, что у атомов, вылетающих с поверхности конденсированной фазы, имеющей меньшую температуру, меньшие средние скорости по сравнению с атомами, вылетающими с поверхности, имеющей большую температуру. Величины максимальных значений распределений не зависят от температуры поверхности. Нормировка производилась деле-

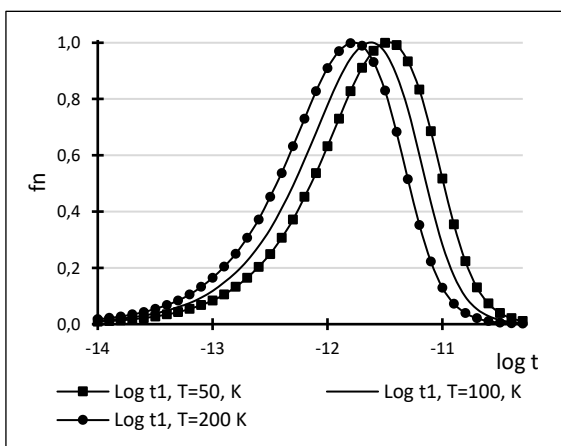


Рис. 5. Плотности распределений времен первых столкновений атомов в зависимости от температуры поверхности T

Fig. 5. The distribution density of the first atom collision time depending on the surface temperature T

нием значений в ячейках на максимальное значение числа событий. Было установлено, что отношение средних времен столкновений в зависимости от температур связано соотношением $t_{50} / t_{200} = \sqrt{T_{200} / T_{50}} = 2$.

Распределение плотностей вторых столкновений в зависимости от температуры поверхности представлено в виде графика (см. <http://www.swsys.ru/uploaded/image/2021-2/2021-2-dop/3.jpg>). Время второго столкновения определялось как время движения одного из двух столкнувшихся атомов до момента столкновения с третьим атомом. На рисунке 1 это время для второго и третьего атомов. При нормировке деление производилось на максимальное значение для первых двух столкновений. Получены закономерности плотностей распределений столкновений атомов во времени, как и для случая столкновения первых атомов. С увеличением температуры поверхности максимумы смещаются вправо, но их величина не изменяется. По величине максимумы вторых столкновений примерно в 15 раз меньше максимумов первых столкновений. Это означает, что вторых столкновений в 15 раз меньше, чем первых.

Получено соотношение, аналогичное соотношению между температурами поверхности и средними временами столкновений для первых атомов, для соотношения между температурами поверхности и средними временами вторых столкновений: $t_{50} / t_{200} = \sqrt{T_{200} / T_{50}} = 2$.

Сравнение плотностей распределений времен первых и вторых столкновений показывает, что плотности распределений вторых столкновений смещены влево, то есть в область меньших времен столкновений. На графике (см. <http://www.swsys.ru/uploaded/image/2021-2/2021-2-dop/4.jpg>) показано распределение средних арифметических значений времен столкновений атомов в зависимости от температуры поверхности конденсированной фазы T . С увеличением температуры поверхности средние времена столкновений как для первых, так и для вторых уменьшаются.

В следующей серии компьютерных экспериментов исследовалось влияние размеров области испарения на плотности распределений первых и вторых столкновений атомов во времени. На графике (см. <http://www.swsys.ru/uploaded/image/2021-2/2021-2-dop/5.jpg>) представлены плотности распределений для областей испарений, стороны которых увеличиваются в два раза. С увеличением размеров обла-

сти испарения плотности распределений и их максимумы смещаются в сторону больших времен и уменьшаются по величине.

На графике (см. <http://www.swsys.ru/uploaded/image/2021-2/2021-2-dop/6.jpg>) показаны плотности распределений вторых столкновений атомов во времени в зависимости от размера области испарения. Наблюдаются такие же закономерности, как и для плотностей распределений первых столкновений.

Результаты расчетов для средних значений времен первых и вторых столкновений атомов в зависимости от размера стороны a квадратной площади области испарения конденсированной фазы приведены на рисунке 6. Анализ результатов расчетов показал, что с увеличением размеров области испарения средние времена столкновений атомов увеличиваются аналогично плотностям распределений. Это объясняется тем, что вероятности столкновений атомов с увеличением области испарения уменьшаются и время столкновения двух атомов увеличивается. Все графики представляют линейные зависимости среднего времени столкновения атомов в зависимости от стороны площади испарения a . С увеличением температуры поверхности конденсированной фазы увеличиваются средние скорости вылетающих атомов и, следовательно, уменьшаются времена средних столкновений атомов.

Каждый компьютерный эксперимент для определенных значений параметров проводился один раз, поэтому возникает вопрос о

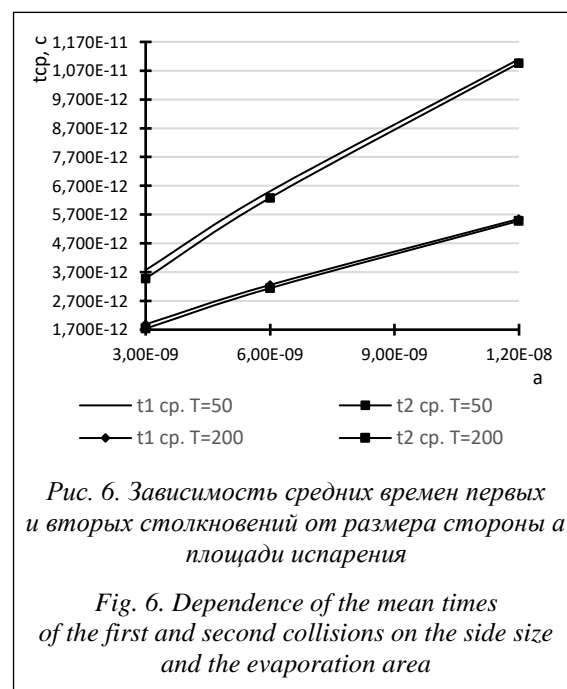


Рис. 6. Зависимость средних времен первых и вторых столкновений от размера стороны a площади испарения

Fig. 6. Dependence of the mean times of the first and second collisions on the side size and the evaporation area

статистических ошибках в получении результатов. В связи с этим была проведена серия компьютерных экспериментов для средних значений вторых времен столкновений атомов (см. <http://www.swsys.ru/uploaded/image/2021-2/2021-2-dop/7.jpg>).

Все полученные значения находятся в узкой полосе шириной $2 \cdot 10^{-14}$ с, что подтверждает правильность предположения о достоверном получении результатов в проведенных одноразовых компьютерных экспериментах. Относительная ошибка не превышает нескольких десятых процента.

Заключение

Проведенные расчеты позволили установить новые закономерности, связанные с испарением вещества с поверхности конденсированной фазы. Предложенная модель столкновения трех атомов позволила уточнить данные, полученные для столкновения двух атомов, и выявить вклад в распределения столкновений трех атомов. В рассмотренной модели столкновения трех атомов не вносят существенных изменений в распределения, полученные для столкновений двух атомов.

Литература

1. Lee J., Laoui T., Karnik R. Nanofluidic transport governed by the liquid/vapour interface. *Nature Nanotechnology*, 2014, vol. 9, no. 4, pp. 317–323. DOI: 10.1038/nano.2014.28.
2. Frezzotti A. Boundary conditions at the vapor-liquid interface. *Physics of Fluids*, 2011, vol. 23, iss. 3, art. 030609-9. DOI: 10.1063/1.3567001.
3. Ishiyama T., Fujikawa S., Kurz T., Lauterborn W. Nonequilibrium kinetic boundary condition at the vapor-liquid interface of argon. *Phys. Rev. E*, 2013, vol. 88, iss. 4, art. 042406. DOI: 10.1103/PhysRevE.88.
4. Kon M., Kobayashi K., Watanabe M. Liquid temperature dependence of kinetic boundary condition at vapor-liquid interface. *Int. J. Heat Mass Tran.*, 2016, vol. 99, pp. 317–326. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.03.088.
5. Kobayashi K., Hori K., Kon M., Sasaki K., Watanabe M. Molecular dynamics study on evaporation and reflection of monatomic molecules to construct kinetic boundary condition in vapor-liquid equilibria. *Int. J. Heat Mass Tran.*, 2016, vol. 52, iss. 9, pp. 1851–1859. DOI: 10.1007/s00231-015-1700-6.
6. Persad A.H., Ward A.C. Expressions for the evaporation and condensation coefficients in the Hertz-Knudsen relation. *Chem. Rev.*, 2016, vol. 116, iss. 4, pp. 7727–7767. DOI: 10.1021/acs.chemrev.5b00511.
7. Tcheremissine F.G. Solution to the Boltzmann kinetic equation for high-speed flows. *Comput. Math. and Math. Phys.*, 2006, vol. 46, no. 2, pp. 315–329. DOI: 10.1134/S0965542506020138.
8. Cheng S., Lechman J.B., Plimpton S.J., Grest G.S. Evaporation of Lennard-Jones fluids. *The Journal of Chemical Physics*, 2011, vol. 134, iss. 22, pp. 224704. DOI: 10.1063/1.3595260.
9. Kon M., Kobayashi K., Watanabe M. Method of determining kinetic boundary conditions in net evaporation/condensation. *Physics of Fluids*, 2014, vol. 26, iss. 7, art. 072003. DOI: 10.1063/1.3595260.
10. Kon M., Kobayashi K., Watanabe M. Kinetic boundary condition in vapor-liquid two-phase system during unsteady net evaporation/condensation. *Europ. J. of Mechanics – B/Fluids*, 2017, vol. 64, pp. 81–92. DOI: 10.1016/j.euromechflu.2016.12.001.
11. Knudsen M. Die maximale verdampfungsgeschwindigkeit des quecksilbers. *Ann. Phys.*, 1915, no. 47, pp. 697–708.
12. Плетнев Л.В., Желтов С.А. Моделирование столкновения двух атомов над поверхностью конденсированной фазы // Программные продукты и системы. 2020. Т. 33. № 2. С. 297–303. DOI: 10.15827/0236-235X.130.297-303.
13. Желтов С.А., Плетнев Л.В. Распределения времен столкновений двух атомов после вылета с поверхности конденсированной фазы // ИС & ИТ: сб. тр. Междунар. науч.-технич. конгр. 2020. С. 20–26.
14. Zheltov S., Pletnev L. Distributions of the collision times between two atoms that have overcome the potential barrier on the surface. *Software Engineering Perspectives in Intelligent Systems*, 2020, vol. 2, pp. 358–367. DOI: 10.1007/978-3-030-63319-6_32.
15. Pletnev L.V., Gamayunov N.I., Zamyatin V.M. Computer simulation of evaporation process into the vacuum. In: *Mathematical Models of Non-Linear Excitations, Transfer, Dynamics, and Control in Condensed Systems and Other Media*. 1999, pp. 153–156.
16. Pletnev L.V. Monte Carlo simulation of evaporation process into the vacuum. *Monte Carlo Methods and Applications*, 2000, vol. 6, no. 3, pp. 191–203. DOI: 10.1515/mcma.2000.6.3.191.
17. Уварова Л.А., Плетнев Л.В. Компьютерное моделирование столкновений частиц при вылете с поверхности конденсированной фазы // Тр. ИСА РАН. Динамика неоднородных систем. 2008. Т. 32. С. 131–139.

18. Желтов С.А. Методика получения оценки сложности параллельных алгоритмов, реализуемых в гетерогенных вычислительных системах // ИС & ИТ: сб. тр. IV Междунар. конгр. XIII Междунар. науч.-технич. конф. AIS'13. 2013. Т. 1. С. 208–211.

19. Гетерогенная платформа "HybriLIT". URL: <http://hlit.jinr.ru/> (дата обращения: 02.02.2021).

Software & Systems
DOI: 10.15827/0236-235X.134.324-330

Received 03.03.21
2021, vol. 34, no. 2, pp. 324–330

Simulation of three atoms collision after the concurrent emission from the condensed phase surface

S.A. Zheltov¹, Senior Lecturer, Zhetov.SA@tversu.ru

¹ Tver State University, Tver, 170100, Russian Federation

Abstract. The engineering units' calculation is based on the gas flow in complex systems. The gas-surface interaction of the systems has great importance for optimizing the transfer process. The determining factor is the behavior of atoms and molecules in the Knudsen layer. In this layer, the greatest changes in all quantities occur: temperature, density, pressure, etc. Because there are no data on a detailed description of the atomic motion in this layer, jumps in these quantities are introduced.

In this paper, we consider the atom emission model from a limited surface area of the condensed phase into a vacuum. We assumed the atoms represent hard spheres and after colliding with each other do not form molecules. The atoms could collide with each other after the condensed phase escaped from the surface, and one of them could collide with the third atom.

The author obtained the distribution density of two-atom collision that simultaneously escaping from the surface in time after escaping from the surface (first collisions) and the density of collisions of one of these atoms with a third atom (second collisions)

The dependences of the distribution densities of the first and second collisions are determined depending on the surface temperature and the size of the vapor area. There are the distributions for the mean values of these quantities.

In this work, we used parallel computing on graphics processors.

Keywords: parallel computing, Monte Carlo method, atom collisions, modeling.

References

1. Lee J., Laoui T., Karnik R. Nanofluidic transport governed by the liquid/vapour interface. *Nature Nanotechnology*, 2014, vol. 9, no. 4, pp. 317–323. DOI: 10.1038/nnano.2014.28.
2. Frezzotti A. Boundary conditions at the vapor-liquid interface. *Physics of Fluids*, 2011, vol. 23, iss. 3, art. 030609-9. DOI: 10.1063/1.3567001.
3. Ishiyama T., Fujikawa S., Kurz T., Lauterborn W. Nonequilibrium kinetic boundary condition at the vapor-liquid interface of argon. *Phys. Rev. E*, 2013, vol. 88, iss. 4, art. 042406. DOI: 10.1103/PhysRevE.88.
4. Kon M., Kobayashi K., Watanabe M. Liquid temperature dependence of kinetic boundary condition at vapor-liquid interface. *Int. J. Heat Mass Tran.*, 2016, vol. 99, pp. 317–326. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.03.088.
5. Kobayashi K., Hori K., Kon M., Sasaki K., Watanabe M. Molecular dynamics study on evaporation and reflection of monatomic molecules to construct kinetic boundary condition in vapor-liquid equilibria. *Int. J. Heat Mass Tran.*, 2016, vol. 52, iss. 9, pp. 1851–1859. DOI: 10.1007/s00231-015-1700-6.
6. Persad A.H., Ward A.C. Expressions for the evaporation and condensation coefficients in the Hertz-Knudsen relation. *Chem. Rev.*, 2016, vol. 116, iss. 4, pp. 7727–7767. DOI: 10.1021/acs.chemrev.5b00511.
7. Tcheremissine F.G. Solution to the Boltzmann kinetic equation for high-speed flows. *Comput. Math. and Math. Phys.*, 2006, vol. 46, no. 2, pp. 315–329. DOI: 10.1134/S0965542506020138.
8. Cheng S., Lechman J.B., Plimpton S.J., Grest G.S. Evaporation of Lennard-Jones fluids. *The Journal of Chemical Physics*, 2011, vol. 134, iss. 22, pp. 224704. DOI: 10.1063/1.3595260.

9. Kon M., Kobayashi K., Watanabe M. Method of determining kinetic boundary conditions in net evaporation/condensation. *Physics of Fluids*, 2014, vol. 26, iss. 7, art. 072003. DOI: 10.1063/1.3595260.
10. Kon M., Kobayashi K., Watanabe M. Kinetic boundary condition in vapor-liquid two-phase system during unsteady net evaporation/condensation. *Europ. J. of Mechanics – B/Fluids*, 2017, vol. 64, pp. 81–92. DOI: 10.1016/j.euromechflu.2016.12.001.
11. Knudsen M. Die maximale verdampfungsgeschwindigkeit des quecksilbers. *Ann. Phys.*, 1915, no. 47, pp. 697–708.
12. Zheltov S.A., Pletnev L.V. Simulation of a collision of two atoms over a condensed phase surface. *Software and Systems*, 2020, vol. 33, no. 2, pp. 197–206. DOI: 10.15827/0236-235X.130.297-303 (in Russ.).
13. Zheltov S.A., Pletnev L.V. Distributions of the collision times of two atoms after the ejection of the condensed phase from the surface. *Proc. Intern. Sci.-Tech. Congress IS&IT'20*, 2020, pp. 20–26 (in Russ.).
14. Zheltov S., Pletnev L. Distributions of the collision times between two atoms that have overcome the potential barrier on the surface. *Software Engineering Perspectives in Intelligent Systems*, 2020, vol. 2, pp. 358–367. DOI: 10.1007/978-3-030-63319-6_32.
15. Pletnev L.V., Gamayunov N.I., Zamyatin V.M. Computer simulation of evaporation process into the vacuum. In: *Mathematical Models of Non-Linear Excitations, Transfer, Dynamics, and Control in Condensed Systems and Other Media*, 1999, pp. 153–156.
16. Pletnev L.V. Monte Carlo simulation of evaporation process into the vacuum. *Monte Carlo Methods and Applications*, 2000, vol. 6, no. 3, pp. 191–203. DOI: 10.1515/mcma.2000.6.3.191.
17. Uvarova L.A., Pletnev L.V. Computer simulation of particle collisions during departure from the surface of the condensed phase. *Proc. ISA RAS. Dynamics of Inhomogeneous Systems*, 2008, vol. 32, pp. 131–139 (in Russ.).
18. Zheltov S.A. A method for obtaining an estimate of the complexity of parallel algorithms implemented in heterogeneous computing systems. *Proc. IV ICAI, XIII Intern. Sci.-Tech. Conf. AIS'13*, 2013, vol. 1, pp. 208–211 (in Russ.).
19. *Heterogeneous HybriLIT Platform*. Available at: <http://hlit.jinr.ru> (accessed February 02, 2021) (in Russ.).

Для цитирования

Желтов С.А. Моделирование столкновений трех атомов после одновременного вылета с поверхности конденсированной фазы // Программные продукты и системы. 2021. Т. 34. № 2. С. 324–330. DOI: 10.15827/0236-235X.134.324-330.

For citation

Zheltov S.A. Simulation of three atoms collision after the concurrent emission from the condensed phase surface. *Software & Systems*, 2021, vol. 34, no. 2, pp. 324–330 (in Russ.). DOI: 10.15827/0236-235X.134.324-330.