

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ УНС В ПЛАЗМЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

А. Н. Гаврилов

Воронежский государственный университет инженерных технологий

Поступила в редакцию 06.06.2018 г.

Аннотация. В статье рассматривается методика решения математической модели образования кластерных групп углерода, которые формируют углеродные наноструктуры (УНС) в низкотемпературной плазме при термической возгонке графита. Традиционно модели такого типа решаются численно, с использованием суперкомпьютеров или Grid-технологий. Данный подход имеет достаточно высокую стоимость и не всегда доступен для инженерных расчетов. Альтернативным вариантом является использование ресурсов современных персональных компьютеров (ПК). Применение технологии распараллеливания на CPU и GPU позволяет выполнять вычисления общего назначения на базе графических процессоров видеокарты ПК. Представленный алгоритм на основе метода крупных частиц (МКЧ) позволяет получить численное решение рассматриваемой модели с применением технологии Nvidia CUDA на ПК. Предложены подходы к распараллеливанию вычислений на CPU и GPU и проведен анализ времени выполнения различных алгоритмов расчета параметров электромагнитного поля и поиска столкновений частиц в плазме. Получены количественные характеристики влияния основных параметров процесса на число образований кластерных групп углерода в плазме межэлектродного пространства, являющихся базой формирования УНС.

Ключевые слова: УНС, моделирование, МКЧ, параллельное программирование, GPU, CPU, Nvidia CUDA.

Annotation. The article deals with the method of solving a mathematical model of the formation of cluster groups of carbon, which form carbon nanostructures (CNS) in low-temperature plasma during thermal sublimation of graphite. Traditionally, mathematical models of this type are solved numerically, using supercomputers or Grid-technologies. This approach has a high cost and is not always available for engineering calculations. An alternative option is to use the resources of modern personal computers (PC). Technology application parallelization on CPU and GPU allows us to perform General-purpose computations on the graphics processors of the graphics card of the PC. The presented algorithm based on the method of large particles (MCC) allows to obtain a numerical solution of the model with the use of Nvidia CUDA technology on a PC. Approaches to parallelization of CPU and GPU calculations are proposed and the execution time of various algorithms for calculation of the electromagnetic field parameters and search for collisions of particles in plasma is analyzed. The quantitative characteristics of the influence of the main parameters of the process on the number of carbon cluster groups in the plasma of interelectrode space, which are the basis of the formation of the CNS, are obtained.

Keywords: CNS, the modelling, MCC, parallel programming, GPU, CPU, Nvidia CUDA.

ВВЕДЕНИЕ

Открытие новых аллотропных модификаций углерода (фуллерены, нанотрубки) обладающих уникальными свойствами определило большие перспективы их использования в различных областях науки и техники [1]. Так,

например введение углеродных наноструктур (УНС) в матрицу полимерных смол всего в количестве 0,01 ÷ 5 мас. % позволяет получать композитные материалы наделенных комплексом улучшенных или новых свойств [2, 3].

Широкое использование УНС в промышленности сдерживает высокая стоимость и низкая производительность существующих

сегодня технологий синтеза, что связано с недостаточностью изученности особенностей процессов характеризующих образование и рост наноструктур.

Применяемые в основном технологии получения УНС предполагают использование различных методов возгонки графитового сырья или пиролиз углеродосодержащих газов с последующим осаждением формируемых структур на охлаждаемую поверхность. Во всех технологиях происходит термическое разрушение структуры исходного материала с последующим формированием новых форм углерода. Использование различных катализаторов позволяет значительно увеличить выход и изменить характеристики конечного продукта, но приводит к дополнительным дефектам, неоднородности, загрязнению катализатором наноматериала, что требует дополнительной очистки, которая влияет на конечный выход, качество и стоимость УНС [4]. Одним из наиболее распространенных методов синтеза УНС, является метод термического испарения графита плазмой дугового разряда в среде буферного газа, позволяющий вовлекать в технологический процесс большие объемы сырья и синтезировать различные виды УНС высокого качества [5, 6].

Исследование и понимание особенностей данного процесса позволяет целенаправленно определять условия и характеристики, синтезируемых УНС с максимальным выходом, что дает возможность повысить эффективность существующих технологий.

Протекание электродугового синтеза УНС характеризуется рядом особенностей (наноразмерность продукта, быстротечность, малые размеры зоны синтеза, высокая температура, необходимость стабилизации параметров), которые значительно усложняют проведение эмпирических исследований. Поэтому актуальным направлением изучения процессов при синтезе УНС является их теоретическое описание с применением методов математического моделирования [7]. Однако, многочисленное количество частиц и их взаимодействий одновременно присутствующих в плазме, требует больших вычислительных

затрат, что значительно увеличивает сложность численного решения модели.

Традиционно задачи такого класса решаются с применением суперкомпьютеров или Grid-технологий [8]. Такие расчеты имеют достаточно высокую стоимость и не всегда доступны для инженерных расчетов. Поэтому альтернативным вариантом обработки большого объема данных модели является использование ресурсов современных ПК. Персональные компьютеры уже сегодня содержат аппаратные (центральные и графические многоядерные процессоры) и программные средства, позволяющие выполнять расчеты с использованием распределенных параллельных вычислений. Однако при этом необходимо учитывать особенности решаемых задач с целью повышения эффективности алгоритмов распараллеливания вычислений, путем минимизации процессорного времени.

Одним из возможных вариантов решения обозначенной проблемы является использование технологии распараллеливания на CPU (Central Processing Unit) и GPU (Graphics Processing Unit) [9]. Данная технология позволяет использовать графический процессор видеокарты для выполнения вычислений общего назначения, достигать высокий уровень параллелизма, и при этом не получить значительных временных затрат на передачу данных между вычислительными узлами и синхронизацию результатов вычислений [10]. В качестве средства для программирования графического процессора была использована технология Nvidia CUDA (Compute Unified Device Architecture).

Целью данной работы является разработка методики моделирования процессов при формировании УНС в низкотемпературной плазме и разработка эффективных алгоритмов расчета рассматриваемой ресурсоемкой задачи. Математическая модель должна описывать процессы образования и роста кластерных групп углерода, формирующих объемные УНС с учетом условий, определяющих движение и взаимодействия частиц в многокомпонентной плазме.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

При построении математической модели считаем, что межэлектродное пространство электродугового разряда заполняет многокомпонентная низкотемпературная плазма, состоящая из электронов, однозарядных катионов углерода и буферного газа, кластеров углерода. Начальное распределение для всех типов частиц предполагается максвелловским.

Для моделирования коллективных явлений в плазме дугового разряда наиболее подходит кванто-кинетический подход, позволяющий учесть влияние электромагнитного поля на движение и взаимодействие частиц в плазме, а также выполнить оценку характеристик и условий образования кластерных групп углерода в плазме [11, 12].

В основу математической формирования УНС в плазме положена система уравнений Больцмана (1), записанных для каждой компоненты плазмы $\alpha = e, h, c$ (e – электрон, h – ион буферного газа, c – ион углерода) в виде [13]:

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \vec{g} \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{r}} - \frac{q_\alpha}{m_\alpha} (\vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{g}, \vec{B}]) \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{g}} = \sum_{\beta=e,c,h} \iint_V (f'_\alpha f'_\beta - f_\alpha f_\beta) |\vec{g} - \vec{g}'| d\sigma d\vec{g}'. \quad (1)$$

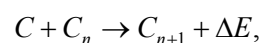
Здесь: \vec{E} – напряженность электрического поля; \vec{B} – магнитная индукция; q_α , m_α – заряд и масса частицы; c – скорость света; \vec{r} – координаты частицы; f_α , f'_α – функции распределения частиц α до столкновения и после столкновения; \vec{g} , \vec{g}' – векторы скоростей до и после столкновения частиц; $d\sigma$ – дифференциальное эффективное сечение рассеяния частиц.

Для нахождения параметров электромагнитного поля система уравнений (1) дополняется системой уравнений Максвелла, описывающих самосогласованное поле и позволяющие определять плотности заряда и тока в плазме, через функции распределения частиц. Использование функций распределения частиц макроскопической системы по координатам и скоростям позволяет за счет

рассмотрения коллективных явлений в плазме спрогнозировать образование в плазме кластерных групп углерода формирующих УНС.

Использование в правой части уравнения (1) интегралов парных столкновений частиц позволяет учесть упругие и неупругие столкновения компонент плазмы. Неупругий удар между двумя частицами углерода в плазме, возникающий при их сближении на расстояние меньшее длины ковалентной связи и с суммарной кинетической энергией больше энергии активации химической связи приводит к образованию устойчивой кластерной группы углерода со связями типа $C_n - C$ и $C_n = C$. Атомы со связью $C \equiv C$ в формировании рассматриваемых УНС не участвуют, поэтому в работе не рассматривались.

В результате образования химической связи между частицами углерода выделяется дополнительная энергия ΔE :



$$\Delta E = (E_1 + E_2) - (n-1) \cdot E_{cs}, \quad (2)$$

где E_1 , E_2 – кинетические энергии взаимодействующих частиц, n – количество атомов углерода в частице.

Решение предложенной модели возможно только численным методом, путем разбиения на три вспомогательных задачи, решаемые последовательно: формирование начального положения частиц, расчет их перемещений, вычисление столкновений и образование кластеров углерода. Одновременное присутствие большого количества разнообразных частиц в плазме межэлектродного пространства, делают расчеты очень ресурсоемкими, поэтому для получения физически оправданных результатов численного моделирования использовался метод крупных частиц (МКЧ) [14, 15]. Данный метод, позволяет снизить объем необходимых вычислений, за счет сокращения количества однотипных частиц участвующих в расчете, путем их группировки до обобщенного уровня. Полученные макрочастицы имеют такое же отношение заряда к массе, как у исходных, усредненную скорость и направление движения. Расчетная схема рассматриваемого процесса представлена на рис. 1.

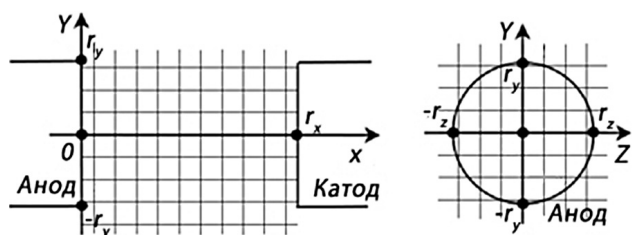


Рис. 1. Расчетная схема процесса

Область моделирования на рис. 1 имеет сеточную форму со сторонами параллельными осям декартовой системы координат. Параметр r_i определяет размер сетки по координатам.

При использовании МКЧ в расчетных ячейках сетки плазма моделируется набором из N заряженных макрочастиц. На основе распределения большого числа частиц в расчетном пространстве, вычисляются значения плотности заряда в узлах сетки. Решая уравнения Пуассона при этих значениях, получаем значения потенциала и силы, действующие на частицы в ячейках сетки. Следующим шагом является определение новых координат частиц из уравнений их движения. Тем самым, распределение частиц в пространстве изменяется под действием самосогласованного поля, а также из-за взаимодействия частиц между собой.

Одной из основных характеристик алгоритма расчета модели, оказывающей непосредственное влияние на точность, процессорное время и сложность вычислений является размер сетки моделируемой области. Проведенный анализ показал, что расчетная сетка размером $100 \times 100 \times 100$ ячеек позволяет выполнять численные расчеты с относительной погрешностью изменения результатов не превышающей 0,01 %. Дальнейшее увеличение размерности сетки практически не оказывает влияния на конечные результаты расчета, но значительно повышает расчетное время и ресурсозатратность вычислений [16].

Использование технологии Nvidia CUDA для организации параллельных вычислений предполагает построение вычислительного алгоритма рассматриваемой задачи. Учитывая особенности данной технологии, зависящей от используемого видеоадаптера, исходная расчетная сетка разбивается на заданное

число блоков, содержащих одинаковое количество узлов, и один параллельный поток рассчитывает значение в одном узле сетки. Аппаратная часть самостоятельно распределяет ресурсы вычислительного устройства между блоками.

Использование технологии распараллеливания на CPU и GPU предполагает, что часть однородных потоков, запущенных параллельно в один момент времени, заканчивает выполнение вычислительного процесса не одновременно. Поэтому необходима синхронизация параллельных участков вычисления. Для этого на каждом временном шаге, после выполнения необходимых расчетов на графическом ускорителе, управление передается центральному процессору, где происходит итоговая обработка результатов и только после этого происходит переход к следующей итерации алгоритма.

Кроме производительности процессорных ядер продуктивность организации параллельных вычислений на GPU напрямую зависит от конфигурации запуска [17, 18]. Поэтому с целью минимизации процессорного времени были рассмотрены различные версии организации алгоритмов распараллеливания основных задач модели. Проведенный анализ показал, что основное процессорное время (~70 %) в процессе численного расчета по модели занимают задачи расчета параметров электромагнитного поля методом установления, траекторий движения и поиска столкновений частиц [19].

В табл. 1 приведен сравнительный анализ расчетного времени (в секундах) применения различных версий параллельных алгоритмов решения задачи, а также последовательного (однопотокового) алгоритма. Вычисления выполнены для задачи расчета электромагнитного поля дугового разряда на ПК, оснащенном процессором Intel® Core™2 Quad Q8200 2.3GHz и видеокартой Nvidia GeForce GTX 660 Ti. Эффективность применения различных версий параллельных алгоритмов протестирована на основе численных эксперименты для двух сеток расчетной области с количеством узлов $25 \times 25 \times 25$ и $50 \times 50 \times 50$. Использование таких расчетных сеток объясня-

ется значительными временными затратами, необходимых для выполнения расчета.

Таблица 1

Сравнение расчетного времени выполнения алгоритмов на CPU и GPU с учетом передачи данных

Версия алгоритма	Время расчета, сек.	
	Размер сетки 25×25×25	Размер сетки 50×50×50
Последовательный	5594,49	55927,15
Алгоритм 1.1	420,48	1956,72
Алгоритм 1.2	150,51	1140,28
Алгоритм 1.3	26,08	158,31

Алгоритм 1.1 представляет собой реализацию расчета, в которой вычисление потенциала в узлах сетки выполняется в параллельном режиме, а синхронизация и вычисление погрешности расчета производится в последовательном режиме.

В алгоритме 1.2 каждый блок параллельных потоков синхронизируется и вычисляет точность своих узлов, а получение общего значения точности осуществляется в последовательном режиме.

В алгоритме 1.3 для расчета точности решения использовалась разделяемая память. Данный вид памяти отличается высокой скоростью доступа, что позволяет максимизировать количество работы выполняемого в параллельном режиме, т. е. до процесса синхронизации и минимизировать число циклов внутри потока, т. е. уменьшить вычислительную сложность потока. Разделяемая память адресуется одинаково для всех задач внутри блока, поэтому её можно использовать для обмена данными между потоками одного блока. Данная реализация алгоритма является наиболее эффективной по времени расчета, и в дальнейшем использовалась в расчетах по модели. Алгоритм 1.3 в сравнении с последовательным, позволяет снизить время вычислений в 214,5 раза для сетки 25×25×25, а для сетки 50×50×50 в 353,3 раза.

Решение задачи поиска взаимодействующих друг с другом частиц состоит в проверке факта пересечения траекторий объектов в

расчетной ячейке. Для этого область каждой ячейки расчетной сетки дополнительно разбивается на 27 клеток фиксированного размера имеющих определенные координаты. Разработанный алгоритм состоит из двух этапов. На первом этапе в качестве входных данных используется информация о начальном и конечном положении частиц. Каждый поток на основе этих данных определяет номер ячейки, в которой находилась частица изначально, номер ячейки, куда частица переместилась и формируется список ячеек, в которых могло произойти взаимодействие. На следующем этапе производится поиск столкновений внутри каждой из таких ячеек.

Каждый из описанных шагов может выполняться как в однопоточном, так и в многопоточном режиме. Анализа эффективности применения разработанного алгоритма, был выполнен на основе численных экспериментов путем замера временных затрат, необходимых для выполнения различных версий алгоритма для фиксированного количества частиц. Были рассмотрены 4 модификации алгоритма поиска столкновений частиц:

- простой однопоточный перебор всех крупных частиц на предмет обнаружения их столкновений (алгоритм 2.1);
- однопоточный поиск столкновений с использованием оптимизации на основе ячеек, описанной выше (алгоритм 2.2);
- простой многопоточный перебор всех крупных частиц на предмет обнаружения их столкновений (алгоритм 2.3);
- многопоточный поиск столкновений с использованием оптимизации на основе ячеек (алгоритм 2.4).

Сравнительный анализ расчетного времени (в секундах) исполнения разработанных версий алгоритма поиска представлен в табл. 2.

Количество столкновений, найденных разработанным алгоритмом в сравнении с простым перебором больше на 5 %. Многопоточный алгоритм 2.4 позволяет добиться ускорения процесса вычислений в сравнении с простым однопоточным перебором на примере 15625 частиц в 12 раз, а для 125000 в 51,6 раз.

Таблица 2
Сравнение расчетного времени исполнения различных версий алгоритма поиска столкновений частиц

Версия алгоритма	Время расчета, сек.	
	15625 частиц	125000 частиц
Алгоритм 2.1	146,22	4682,93
Алгоритм 2.2	87,19	1837,5
Алгоритм 2.3	56,59	643,38
Алгоритм 2.4	12,18	90,73

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На количество взаимодействий и образований кластерных групп типа $C - C = C$ (C_3) являющихся основой формирования УНС в плазме, непосредственное влияние оказывают напряжение на электродах и плотность тока, которые определяют параметры электромагнитного и температурного полей действующих на частицы. Поддержание параметров процесса синтеза, при которых образуется максимальное число C_3 , характеризует максимальный выход конечного продукта. Численные исследования количества образований кластерных групп C_3 по построенной модели от параметров тока представлены на рис. 2 и 3.

Расчеты выполнены для графитовых электродов диаметром 12 мм, межэлектродном расстоянии 1 мм и давлении буферного газа (He) в камере синтеза 53,3 кПа.

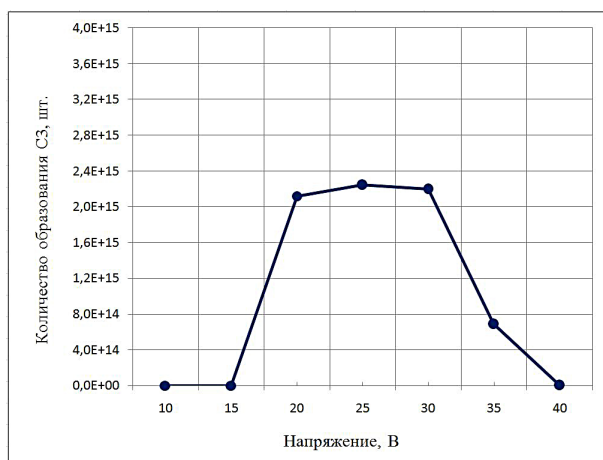


Рис. 2. Изменение количества образований кластеров C_3 в плазме от напряжения

Согласно расчетам, наибольшее количество образований кластеров C_3 происходит при напряжении на электродах в диапазоне 20 ÷ 30 В и плотности тока $1,33 \cdot 10^6 \div 3,17 \cdot 10^6$ А/м².

Таким образом, разработанная модель позволяет моделировать кинетику формирования углеродных наноструктур в низкотемпературной плазме электродугового разряда с учетом особенностей синтеза.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена методика математического моделирования образования различных кластерных групп углерода формирующих УНС в низкотемпературной плазме на основе системы уравнений Больцмана-Максвелла, с учетом парных взаимодействий между частицами. Представлен алгоритм решения модели на основе метода крупных частиц позволяющий получить численное решение рассматриваемой модели с применением технологии Nvidia CUDA на ПК. Предложены подходы к распараллеливанию вычислений большого объема данных на CPU и GPU и представлен расчет времени исполнения различных модификаций алгоритмов на примере вычислений параметров электромагнитного поля и поиска столкновений частиц в плазме. Получены количественные характеристики влияния основных параметров процесса на число образований кластерных групп углерода в плазме межэлектродного пространства. Выполнены

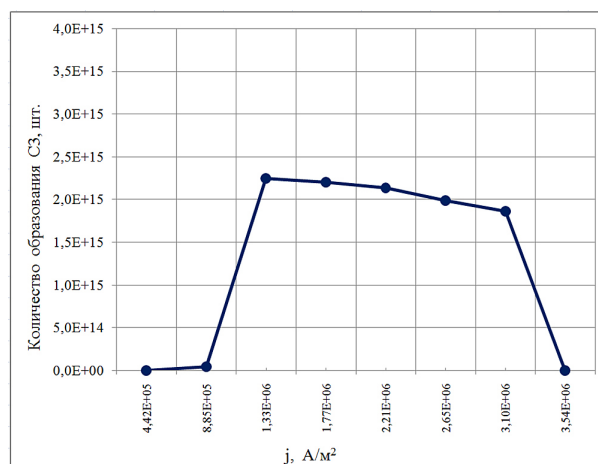


Рис. 3. Изменение количества образований кластеров C_3 от плотности тока

исследования на основе полученной модели количества образований кластерных групп $C = C - C$ для разных параметров тока. Определены условия, при которых образуется наибольшее количество кластеров СЗ. Разработанная методика может быть использована при расчетах параметров технологического процесса синтеза УНС методом плазменной возгонки графита, а также для управления процессом.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *De Volder, M. F. L. Carbon nanotubes: present and future commercial applications / M. F. L. De Volder, S. H. Tawfik, R. H. Baughman, A. J. Hart // Science. – 2013. – V. 339, № 6119. – P. 535–539.*
2. *Ершова, О. В. Современные композиционные материалы на основе полимерной матрицы / О. В. Ершова [и др.] // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2015. – № 4(1). – С. 14–18.*
3. *Shahil, K. M. F. Graphene-multilayer graphene nanocomposites as highly efficient thermal interface materials / K. M. F. Shahil, A. A. Balandin // Nano Letters. – 2012. – V. 12, № 2. – P. 861–867.*
4. *Амиров, Р. Х. Синтез углеродных нанотрубок в плазмоструйном реакторе в присутствии катализаторов / Р. Х. Амиров [и др.] // Успехи прикладной физики. – 2014. – Т. 2, № 3. – С. 217–223.*
5. *Гаврилов, А. Н. Анализ методов синтеза и промышленное производство углеродных нанотрубок / А. Н. Гаврилов, Е. А. Пологно, А. Н. Рязанов // ФЭС: Финансы. Экономика. Стратегия. Серия: Инновационная экономика: человеческое измерение. – 2010. – № 6. – С. 14–19.*
6. *Макунин, А. В. Технологические аспекты синтеза наноструктур электродуговым и газопиролитическим методами / А. В. Макунин [и др.] // Физика и химия обработки материалов. – 2010. – № 6. – С. 38–41.*
7. *Зинченко, Л. А. Особенности математического моделирования в задачах проектирования наносистем / Л. А. Зинченко, В. А. Шахнов // Информационные технологии и вычислительные системы. – 2009. – № 4. – С. 84–92.*
8. *Берендеев, Е. А. Эффективное использование суперЭВМ для решения больших задач физики плазмы методом частиц в ячейках / Е. А. Берендеев [и др.] // Вісник Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут». Серія: Інформатика, управління та обчислювальна техніка. – 2012. – № 56. – С. 71–77.*
9. *GPGPU.RU Использование видеокарт для вычислений. URL. – Режим доступа: <http://www.gpgpu.ru>. – (Дата обращения 28.09.2016).*
10. *Егоров, М. Ю. Применение графических ускорителей для повышения производительности вычислений при численном моделировании функционирования сложных технических систем / М. Ю. Егоров, С. М. Егоров, Д. М. Егоров // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Аэрокосмическая техника. – 2015. – № 1 (40). – С. 81–91.*
11. *Цветков, И. В. Применение численных методов для моделирования процессов в плазме: учеб. пособие / И. В. Цветков. – Москва : МИФИ, 2007. – 84 с.*
12. *Abramov, G. V. Formation of Clusters of Carbon Structures in Plasma under Thermal Destruction of Graphite / G. V. Abramov [et. al.] // Nanotechnologies in Russia. – 2017. – № 12. (3–4). – P. 139–146.*
13. *Черчиньяни, К. Теория и приложения уравнения Больцмана / К. Черчиньяни; перевод с англ.; под редакцией Р. Г. Баранцева. – М. : Мир, 1978. – 495 с.*
14. *Сурмин, И. А. Моделирование плазмы методом частиц в ячейках с использованием сопроцессоров Intel Xeon Phi / И. А. Сурмин [и др.] // Вычислительные методы и программирование. – 2014. – Т. 15, № 3. – С. 530–536.*
15. *Decyk, V. K. Particle-in-cell algorithms for emerging computer architectures / V. K. Decyk, T. V. Singh // Computer Physics Communications. – 2014. – V. 185, № 3. – P. 708–719.*
16. *Abramov, G. V. The application of the large particles method of numerical modeling of the process of carbonic nanostructures synthesis*

in plasma / G. V. Abramov, A. N. Gavrilov // Journal of Physics: Conf. Series. – 2018. – V. 973. – P. 012022.

17. nVidia CUDA – неграфические вычисления на графических процессорах. – Режим доступа: <http://www.ixbt.com/video3/cuda-1.shtml>. (Дата обращения 28.09.2016).

18. *Ferreiro, A. M.* An efficient implementation of parallel simulated annealing algorithm in

GPUs / A. M. Ferreiro, J. A. García, J. G. López-Salas // Journal of Global Optimization. – 2013. – V. 57, № 3. – P. 863–890.

19. *Абрамов, Г. В.* Математические методы исследования кинетики формирования кластеров углерода в плазме / Г. В. Абрамов, А. Н. Гаврилов // Системы и средства информатики. – 2018. – Т. 28, № 2. – С. 116–127.

Гаврилов Александр Николаевич – канд. техн. наук, доцент, доцент кафедры информационных и управляющих систем Воронежского государственного университета инженерных технологий.

Тел.: 8-951-557-62-23

E-mail: ganivrn@mail.ru

Gavrilov Alexander Nikolayevich – Candidate of Sciences, PhD, associate professor, Department of information and control systems, Voronezh State University of Engineering Technologies.

Tel.: 8-951-557-62-23

E-mail: ganivrn@mail.ru