

Суперкомпьютерное молекулярное моделирование газодинамического напыления наночастиц на подложку*

С.В. Поляков^{1,2}, В.О. Подрыга^{1,3}, Д.В. Пузырьков¹, Т.А. Кудряшова¹

ИПМ им. М.В. Келдыша РАН¹, НИЯУ МИФИ², МАДИ³

Работа посвящена суперкомпьютерному молекулярному моделированию процессов газодинамического напыления наночастиц на подложку. Актуальность данной проблемы связана с разработкой технологий производства перспективных нанопокровов и наноматериалов. Качество и свойства указанных нанопокровов и наноматериалов определяется многими факторами, в том числе, способом и параметрами процесса напыления. Одним из возможных способов напыления является газодинамический разгон наночастиц и доставка их в необходимую зону подложки. Детали и оптимальные параметры данного процесса можно определить лишь с помощью массовых компьютерных расчетов. Наблюдаемое возрастание мощности современных компьютерных и суперкомпьютерных систем позволяет использовать в численных экспериментах математические модели, базирующиеся на первых принципах. Одной из таких моделей является молекулярная динамика Ньютона. В настоящей работе представляется новая методика и результаты использования данной модели для расчета разгона никелевого нанокластера струей азота. Данная прикладная задача весьма актуальна для создания центров роста углеродных нанотрубок, имеющих широкую область применения в электронной промышленности. В работе рассматриваются все аспекты компьютерного моделирования и обсуждаются полученные результаты.

Ключевые слова: молекулярное моделирование, напыление наночастиц на подложку, высокопроизводительные вычисления.

1. Введение

Одним из наиболее важных факторов современного развития являются перспективные нанотехнологии. Они играют важную роль в различных областях науки и производства, включая все виды машиностроения, ядерную и солнечную энергетику, телекоммуникации, медицину, биологию и т.д.. Создание микро- и наноструктур и систем с заданными параметрами и свойствами открывает человечеству широчайшие возможности. Создавая объекты подобные существующим в природе человек может эффективно и безопасно контролировать и преобразовывать окружающую среду. Однако для реализации этих планов необходимо проведение многочисленных детальных научных исследований во многих областях знания.

Одним из интенсивно развивающихся научных направлений является изучение свойств поверхностей различных материалов на микро- и наномасштабах. В рамках этого направления одной из задач является изучение и развитие различных способов создания поверхностей с заданными свойствами с помощью технологий плазменного или газодинамического напыления [1-8]. Одной из причин внимания к этим производственным процессам является их относительная технологическая простота и широкое поле конкретных промышленных приложений. В настоящий момент практически пройден этап создания методами напыления сплошных микро- и нанопокровов в целях упрочнения конструкционных материалов. Однако другие производственные направления, в том числе, низкоэнергетичная нанoeлектроника и наномеханика, нанороботы, биоинженерия и биомедицина на основе наноструктурных материалов и др. пока еще ждут результаты соответствующих исследований.

В данной работе изучаются процессы газодинамического нанoимпринтинга при низких и комнатных температурах (100-350 К). Холодный разреженный газ, ускоренный до скоростей

* Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты 17-01-00973-а, 16-07-00206-а.

близких к сверхзвуковым используется для транспортировки наночастиц металла к поверхности горячей подложки. В отличие от методов создания сплошного нанопокрывтия (где требуется создать лишь равномерный поток наночастиц) здесь рассматривается технология формирования на подложке определенного рисунка или маски, состоящей из нескольких десятков наночастиц. Например, в целях массового выращивания сверхтонких углеродных нанотрубок, широко используемых в электронных приборах нового поколения, на подложке из полимерного материала формируется матрица никелевых кластеров, которые используются в дальнейшем в качестве центров роста нанотрубок. Подобная точечная технология напыления требует от соответствующих установок наноимпринтинга высокой управляемости процессом и высокой же точности формирования масок. Данная технологическая задача в полном объеме пока не исследована. Одной из причин такой ситуации является высокая техническая сложность и стоимость натуральных исследований. Теоретический анализ указанной задачи до сих пор испытывал трудности как на уровне формирования адекватных математических моделей, так и на уровне их компьютерных реализаций. Однако в последнее время фактор вычислительной сложности компьютерных реализаций начал снижаться за счет использования современных суперЭВМ. В результате появилась возможность апробации сложных математических моделей и проверки тех или иных математических подходов.

В наших предыдущих работах уже анализировались различные аспекты компьютерного и суперкомпьютерного моделирования струйных течений газов, потоков газовых смесей в микроканалах технических систем и др. на основе квазигазодинамических моделей механики сплошных сред [9-12], а также нового многомасштабного подхода [13-21], сочетающего решение макроскопических уравнений газовой динамики с уравнениями динамики Ньютона для отдельных частиц.

В настоящей работе в качестве основного метода исследования использовалось прямое молекулярно-динамическое моделирование [22-30]. В данном случае интересно было получить информацию о моделируемом процессе на основе первых принципов. В качестве модельной задачи был рассмотрен процесс разгона металлического нанокластера сверхзвуковым потоком газа. Цель моделирования состояла в воспроизведении реального процесса разгона с учетом внутреннего состояния нанокластера.

2. Математическая постановка

Задача моделирования разгона металлического нанокластера сверхзвуковым потоком газа имеет целью определить управляющие факторы данного процесса. Разгонная стадия в натурном эксперименте используется для сообщения нанокластерам заданной постоянной скорости при отсутствии вращений наночастиц вокруг центров инерции. Обеспечение именно таких условий увеличивает вероятность прилипания нанокластеров к горячей подложке. При этом сообщаемый подложке суммарный импульс должен быть существенно ниже предела прочности, составляющих ее материалов.

Процедура процесса газодинамического напыления проиллюстрирована на рис. 1, где показан один из элементов экспериментальной установки. В данном элементе основным движущимся агентом является ускоренный газ, который воздействует на первоначально слабо движущиеся нанокластеры. В данной работе рассматривается индивидуальный процесс взаимодействия одного конкретного нанокластера с окружающей газовой средой.

Для описания движений молекул газа и атомов нанокластера использовались уравнения двухкомпонентной молекулярной динамики:

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

где i – номер частицы, l – тип частиц (a – атомы нанокластера, b – молекулы окружающего его газа), N_l – полное число частиц типа l . Частица типа l с номером i имеет свои массу $m_{l,i}$,

радиус-вектор $\mathbf{r}_{l,i} = (r_{x,l,i}, r_{y,l,i}, r_{z,l,i})$, вектор скорости $\mathbf{v}_{l,i} = (v_{x,l,i}, v_{y,l,i}, v_{z,l,i})$ и суммарную силу $\mathbf{F}_{l,i} = (F_{x,l,i}, F_{y,l,i}, F_{z,l,i})$, действующую на эту частицу.

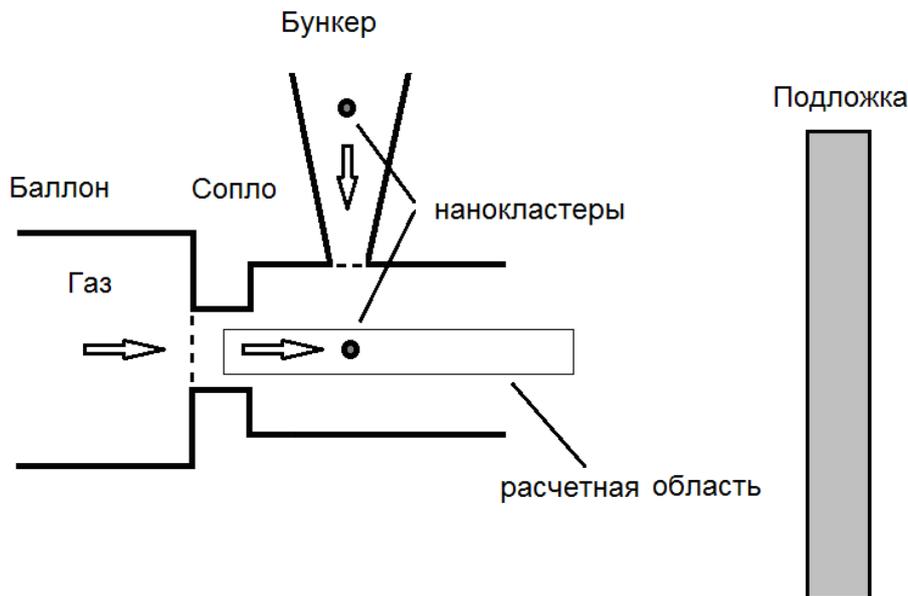


Рис. 1. Схема установки напыления и выбранная расчетная область.

Силы представляют собой сумму компоненты взаимодействия i -ой частицы с окружающими частицами, зависящей от потенциальной энергии, и компоненты, отвечающей за внешнее воздействие. Потенциальная энергия системы представляется в виде суммы парциальных энергий, вычисление которых происходит по формуле выбранного потенциала взаимодействия.

$$\mathbf{F}_{l,i} = -\frac{\partial U(\mathbf{r}_{l,1}, \dots, \mathbf{r}_{l,N_l})}{\partial \mathbf{r}_{l,i}} + \mathbf{F}_{l,i}^{ext}, \quad U = \sum U_{ll'}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad (2)$$

где U – суммарная потенциальная энергия, $U_{ll'}$ – потенциал взаимодействия частиц типа l с частицами типа l' , $\mathbf{F}_{l,i}^{ext}$ – сила взаимодействия с внешней средой.

Выбор потенциала взаимодействия основывается на сравнении механических свойств компьютерной модели потенциала и реального материала. В данной работе в качестве материала нанокластера использовался никель, в качестве газа использовался азот. Для этих конкретных веществ были выбраны соответствующие потенциалы (см. [28, 29]). Макропараметры металлической и газовой подсистем определялись стандартными способами [28, 29].

При решении уравнений (1), (2) необходимо было задать некоторые начальные и граничные условия. Для упрощения анализа был выделен фрагмент системы напыления (Рис. 1), находящийся вдали от ограничивающих поверхностей и достаточно большой, чтобы избежать влияния искусственных границ на решение. На границах выделенной области были заданы естественные граничные условия, соответствующие сохранению постоянных макроскопических газодинамических параметров. Например, на левом конце области поддерживалась постоянная плотность, средняя скорость и температура газа, на правом конце использовались условия свободного вылета молекул газа в окружающее пространство. На боковых границах были использованы периодические граничные условия, которые в данном случае соответствуют отсутствию влияния окружающей среды на выделенный нами газовый слой.

В начальный момент времени газовая среда была разделена на две части – левую и правую (Рис. 2). Каждая часть предварительно была промоделирована по отдельности до состояния термодинамического равновесия при выбранных значениях температуры, давления и скорости потока. Для контроля над температурой и скоростью потока использовался специальный алго-

ритм термостатирования, который был отключен при расчете общей системы. В левой части газ был разогнан до сверхзвуковой скорости, в правой – газ покоился. Нанокластер в начальный момент времени находился в начале правой покоящейся части газовой среды. Релаксация системы атомов металлического кластера также проводилась для выбранных макропараметров предварительно.

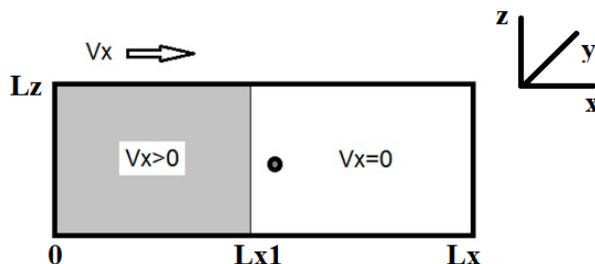


Рис. 2. Начальное состояние моделируемой микросистемы.

3. Численный алгоритм, параллельная реализация и дополнительный программный инструментарий

Система обыкновенных дифференциальных уравнений (1), (2) решается с помощью разностной схемы Верле в скоростной форме [27] с постоянным шагом по времени. Выбор именно этой схемы неоднократно обсуждался в литературе. Многими авторами было подтверждено, что данная схема позволяет статистически правильно воспроизводить поведение системы частиц в течение длительного промежутка времени. Шаг интегрирования системы (1), (2) определяется характерными значениями потенциалов взаимодействия частиц. Во многих случаях его приходится выбирать в диапазоне $10^{-16} \div 10^{-14}$ сек.

Параллельная реализация выбранной численной схемы подробно рассмотрена в [20, 30]. В ее основе лежит метод статической декомпозиции расчетной области на элементарные боксы, связанные с величиной радиуса обрезания потенциалов парного взаимодействия. Такое разбиение при использовании даже больших конфигураций вычислителей является намеренно избыточным. Именно оно позволяет выровнять загрузку вычислителей путем "переброски" части боксов с одного вычислительного узла на другой. При реализации расчетов на основе алгоритмов молекулярной динамики (далее МД вычислений) внутри одного вычислительного узла используется также распараллеливание по трэдам центрального процессора (CPU) или видеоядрам графического ускорителя (GPU). При этом помимо геометрической декомпозиции используется также разбиение по частицам и динамическая балансировка загрузки внутри вычислительного узла.

Программная реализация базового численного алгоритма была выполнена в двух вариантах. Первый вариант использует только центральные (CPU) и/или векторные (VPU) процессоры. В этом варианте используются стандарты параллельного программирования MPI и OpenMP. Второй вариант позволяет использовать графические ускорители (GPU). В этом варианте используются стандарты параллельного программирования MPI, OpenMP и CUDA. Результаты сравнения данных вариантов программной реализации приведены в [19, 29].

Исследование разработанных кодов на эффективность параллельной реализации проводилось неоднократно в наших более ранних работах (см. например, [19, 29]). Здесь приведем данные, полученные на кластерах и суперкомпьютерах с центральными процессорами, характеристики которых приведены в Табл. 1. Результаты тестирования на примере микросистемы газ-металл с числом частиц 165,25 млн. приведены на Рис. 3. Анализ приведенных на Рис. 3 данных показывает, что при выбранных стратегии распараллеливания и алгоритмах балансировки загрузки расчеты больших микросистем требуют большого количества ОЗУ. При этом чем больше оперативной памяти имеется на вычислительном узле, тем выше ускорение и эффективность распараллеливания.

Если сравнивать приведенные кривые ускорения и эффективности, полученные на разных системах, то можно отметить следующее. У суперкомпьютера K60, несмотря на небольшую эффективность (порядка 37%), запас параллелизма очевидно не заканчивается на 3072 потоках.

В данном случае возможен дополнительный пик ускорения, связанный с попаданием в кэш процессоров при уменьшении размера используемой оперативной памяти за счет увеличения числа процессов. Кластер K1 имеет хорошие показатели ускорения и эффективности. Однако он слишком мал, чтобы дать точный прогноз о масштабируемости таких систем при использовании больших конфигураций. Проблемы суперкомпьютера MVS10P-II связаны с иерархической коммутацией узлов и также недостаточной оперативной памятью узлов. В результате преимущества сети Omni Path становятся не видны.

Таблица 1
 Параметры использованных в расчетах компьютерных и суперкомпьютерных систем

Название	Организация	Число узлов	Тип интерконнекта	Тип процессоров	Производительность, ТФлопс	Число процессоров на узле	Число ядер/потоков процессора	Величина на ОЗУ на узле, Гб
K60	ИПМ РАН	78	InfiniBand FDR	Intel Xeon E5-2690 v4	74,2	2	14/2	256,0
MVS10P-II	МСЦ РАН	86	Omni Path	Intel Xeon E5-2697A v4	110,5	2	16/2	128,0
K1	НИЦЭВТ	36	Ангара-1	Intel Xeon E5-2630/2660 v0	14,4	2	6/2; 4/2	32,0

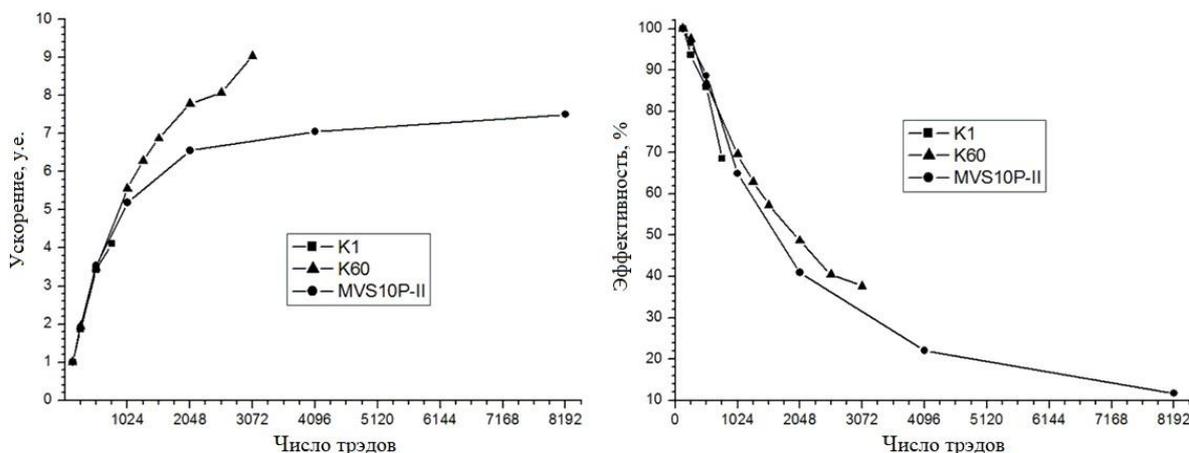


Рис. 3. Ускорение (слева) и эффективность распараллеливания (справа), полученные на суперкомпьютерах K1, K60, MVS10P-II.

Также необходимо отметить результаты расчетов, проведенных на векторных и графических процессорах. В первом случае результаты тестирования были представлены в [29]. Они показали, что на алгоритмах молекулярной динамики VPU Intel Xeon Phi первого поколения (например, спецификация 5110p) обгоняют CPU Intel Xeon на малых конфигурациях (1-4 вычислительных узла), однако при увеличении числа узлов конфигурации с CPU возвращают себе лидерство. Ситуация с VPU Intel Xeon Phi второго поколения (например, спецификация 7250) при использовании интерконнекта Omni Path и быстрой памяти MCDRAM несколько улучшила эту ситуацию.

При использовании графических процессоров в режиме расчетов с двойной точностью (тестировались отдельные GPU NVidia Tesla K40M, K80M-PB и V100-PCIe с оперативной памятью соответственно 12, 24 и 16 Гб) было получено ускорение МД вычислений относительно одного CPU Intel Xeon E5-2690 v4 (задействованы были все 14 ядер) соответственно в 3.2, 5.7 и 11.4 раза. По-видимому, эти показатели не предел для разработанного подхода, поскольку на КГД-вычислениях аналогичные ускорения получаются в 2.5-3 раза выше.

Помимо основной расчетной программы потребовалось разработать дополнительный инструментарий. Он связан с заданием начальных состояний микросистем, управлением расчетами, хранением и визуализацией результатов. Его итоговая версия превратилась в специализированный облачный сервис [31]. Опишем кратко некоторые возможности отдельных компонент данного сервиса.

Стартовое состояние моделируемых микро- и наносистем в простых случаях может быть сгенерировано "с нуля". Если речь идет о расчетах термодинамического равновесия металла в областях правильной формы, состоящих из целого числа кристаллов, можно воспользоваться табличными данными о кристаллической решетке металла при заданной температуре. Однако в более сложных ситуациях придется провести специальный МД расчет. В частности, если параметр решетки металла для данной температуры неизвестен, то его можно определить только в численных экспериментах путем минимизации функционала полной или свободной энергии по параметру решетки. Если также необходима сложная геометрическая конфигурация металлической микроструктуры, то придется провести серию физически обоснованных МД экспериментов по созданию термодинамически равновесных фрагментов микросистемы и последующему "склеиванию" из них и уравниванию итоговой геометрической формы.

В случае газовой среды любое априорное распределение частиц по пространству (в отличие от распределения по модулю скорости) для заданных температуры и давления является лишь отправной точкой для получения представительного распределения, которое получается в результате длительных МД вычислений. Здесь следует подчеркнуть, что получение термодинамического равновесия в газовых средах реализуется на временах в сотни и тысячи раз больших по сравнению с аналогичными временами уравнивания систем частиц в твердых телах. Еще более длительные МД вычисления потребуются в случае смеси газов.

Учитывая указанные обстоятельства, в рамках МД моделирования была создана специализированная база данных молекулярных расчетов (БДМР), в которую были помещены результаты большинства отдельных вычислительных экспериментов. В настоящее время она насчитывает порядка сотни вариантов, связанных с расчетами равновесных состояний конкретных газовых, металлических и смешанных микросистем и имеет суммарный объем порядка 100 Тб, размещенный распределенным образом на различных серверах хранения.

С помощью БДМР и специально разработанного редактора молекулярных структур возможно конструирование новых распределенных стартовых конфигураций практически произвольного объема. Единственным требованием к таким конфигурациям является их физическая обоснованность. Это означает, что для каждой выбранной конфигурации должен быть выработан сценарий натурального эксперимента, в котором такая конфигурация может быть реально получена. Например, если необходимо исследовать некоторый металлический каркас, необходимо разбить его на элементарные фрагменты, которые уже имеются в БДМР или легко могут быть рассчитаны с помощью основной программы. Далее необходимо провести процедуру склейки из этих фрагментов путем сближения их к нужной конфигурации с малыми скоростями. Завершается данная процедура итоговым уравниванием всей конструкции.

Как видно из описания процедуры генерации больших микросистем из малых, на отдельных этапах генерации потребуется запуск основной МД программы, возможно, на различных вычислителях. Эту функцию выполняет среда управления заданиями (см. [31] и связанные с ней работы). Также среда управления позволяет запустить фоновую распределенную постобработку результатов моделирования и инициирует последующую визуализацию данных. Визуализация также реализуется с помощью специальных процедур облачного сервиса.

4. Результаты предварительных расчетов

В данном разделе рассмотрим результаты предварительных расчетов сформулированной выше задачи о разгоне никелевого нанокластера струей азота. Для определенности была выбрана достаточно компактная микросистема с целью анализа процесса разгона на больших временах (как следует из предыдущего пункта, разработанный код поддерживает расчеты миллиардных микросистем, однако расчет длительной эволюции таких микросистем требует монопольного использования петафлопсных вычислительных систем в течение нескольких месяцев). Размеры общей системы соответствовали $L_x \times L_y \times L_z = 533.96 \times 76.28 \times 76.28 \text{ нм}^3$, область

с разогнанным газом имела длину по оси x , соответствующую трем величинам длины свободного пробега для данной системы при н.у. ($\lambda = 76.28$ нм), $Lx1 = 228.84$ нм. Размеры нанокластера кубической формы составляли 24^3 элементарных ячеек или $8,4753^3$ нм³, число атомов нанокластера равно 55296 (Рис. 4). Начальная позиция центра кластера находилась в точке (266.98, 38.14, 38.14) – здесь и далее все размеры приведены в нанометрах. Газовая среда в начальный момент содержала 82904 молекулы. Таким образом, общее количество частиц было 138200 частиц. Микросистема в целом находилась при нормальных условиях ($T = 273.15$ К, $p = 101325$ Па). Разгон в левой части системы осуществлялся путем сообщения газу ненулевой продольной скорости V_x . В проведенном расчете примерно половина молекул азота в левой части расчетной области имела на старте среднюю скорость $V_x \approx 14$ Ма (Рис. 5). С учетом того, что скорость звука в азоте при нормальных условиях составляет примерно 357 нм/нс, средняя величина V_x составила около 5000 нм/нс. Расчеты проводились на суперкомпьютере К60. В расчетах использовался код первого типа, расчеты проводились в конфигурации 324 MPI-процесса с числом трэдов на один MPI процесс равным 2.

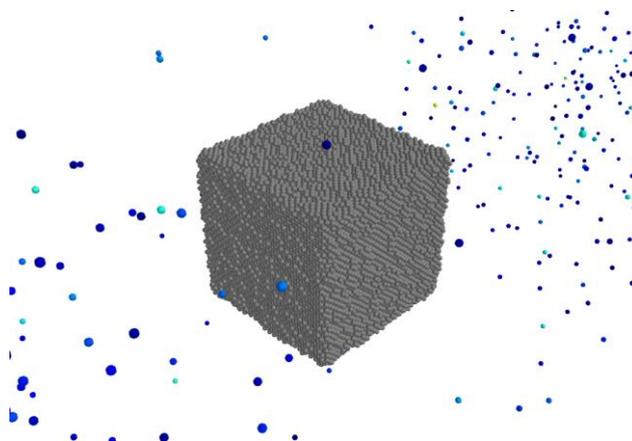


Рис. 4. 3D-изображение нанокластера и газа в начале процесса разгона.

Выполненный расчет был связан с анализом эволюции ударной волны и ее взаимодействием с атомами нанокластера и молекулами покоящегося газа. На Рис. 5 показаны продольные распределения скорости газа вблизи области, занятой нанокластером (значения усреднены по координате y). Они иллюстрируют некоторые детали процесса ускорения. В начале этого процесса фронт ударной волны рассеивается вблизи нанокластера. При этом импульс разогнанной части газа передается не только нанокластеру, но и находящемуся вблизи него покоящемуся газу. При этом, в отличие от стоячего газа, нанокластер сначала практически не движется. Однако накопление импульса в итоге заставляет нанокластер сначала медленно, а затем равномерно ускоряться до определенной предельной скорости (Рис. 6, 7). Величина этой скорости связана с количеством газа, сталкивающегося с кластером и его газовым окружением, а также с величиной начальной скорости разогнанного газа. Если значение полного импульса набегающего газа невелико, то для ускорения нанокластера до определенной средней скорости потребуются продолжительное время.

Из закона сохранения импульса можно оценить значение полной средней скорости, необходимое для осуществления разгона нанокластера:

$$\mathbf{v}^{(\infty)} = \frac{m_b N_b^*}{(m_a N_a + m_b N_b)} \mathbf{v}^{(0)},$$

где $\mathbf{v}^{(0)}$ – средняя начальная скорость ускоренных молекул азота, N_b^* – число таких молекул. Оценка времени разгона не так тривиальна и может быть получена лишь из проведенного эксперимента. Для вывода соответствующей многопараметрической формулы необходимо провести серию таких расчетов, меняя те или другие параметры.

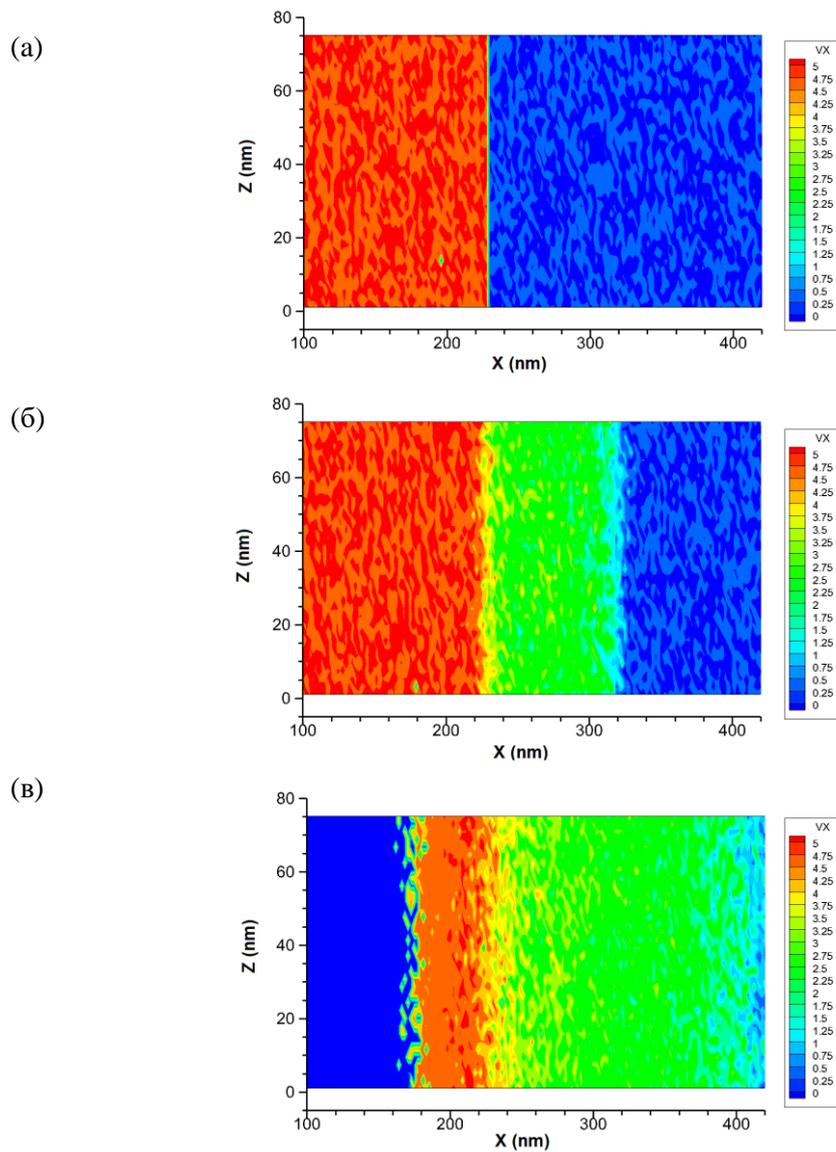


Рис. 5. Распределение продольной скорости газа, усредненное по координате y , в моменты времени 0, 18, 38 пс (а, б, в).

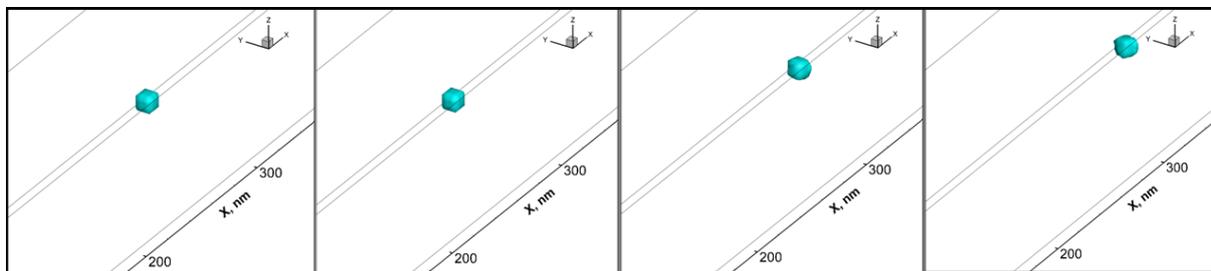


Рис. 6. Позиция нанокластера на моменты времени 0, 400, 600, 800 пс.

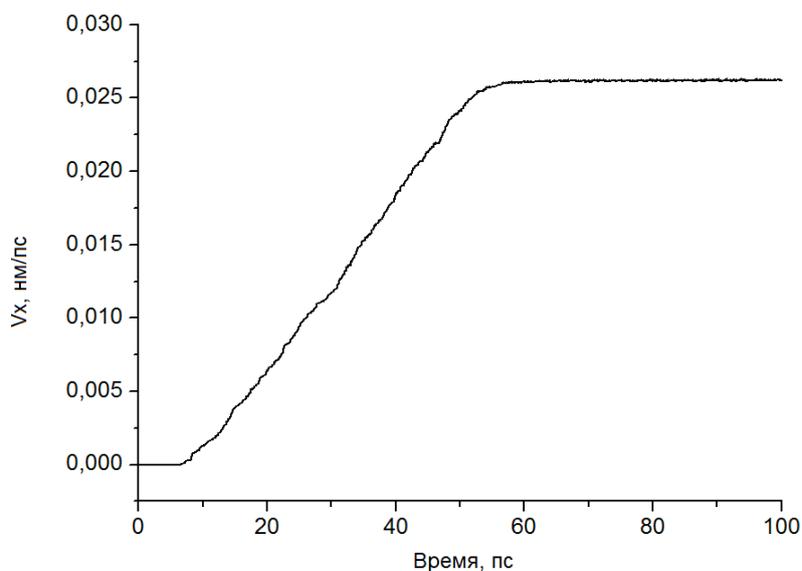


Рис. 7. Эволюция продольной скорости нанокластера.

Анализ процесса в целом позволяет сделать некоторые общие выводы. Рассчитанный начальный процесс разгона нанокластера соответствует теоретическим оценкам. Однако для большей реалистичности требуется учесть целевую функцию разгона и рассчитать остальные стадии процесса напыления. Для этого, во-первых, следует учесть, что разгон нанокластера необходим для транспортировки его к месту прикрепления на подложке и обеспечения условий гарантированного приклеивания. Поэтому кроме сообщения нанокластеру определенной поступательной скорости требуется еще контролировать вращательные движения нанокластера относительно его центра масс (а именно обеспечить отсутствие вращения). Во-вторых, следует учесть процесс торможения нанокластера вблизи поверхности подложки, а также попадание молекул газа в контактную зону между кластером и подложкой. Для учета этих факторов в численных экспериментах необходимо добавить к уравнениям (1) дополнительные уравнения для моментов частиц всех сортов, а также учесть взаимодействия атомов нанокластера и молекул газовой среды с атомами подложки. Такая модификация модели позволит получить реальную картину процесса напыления. В-третьих, добавление поверхности подложки и учет движений газа вдоль нее увеличит размеры моделируемой системы примерно в 100-200 раз, что потребует использования более мощной вычислительной установки. Для реализации этой возможности планируется использование вычислительной системы на основе графических ускорителей NVidia Tesla V100-PCIe.

5. Заключение

В данной работе представлены вычислительные основы, компьютерная реализация и предварительные результаты моделирования начальной стадии процесса напыления наночастиц на подложку, связанной с разгоном одиночного нанокластера. Для этой цели был использован численный подход, основанный на прямом молекулярном моделировании. Проведенные численные эксперименты показали в целом адекватное поведение моделируемой микросистемы. Продолжение работы будет связано как с расчетами взаимодействия нанокластера с подложкой на основе усложнения математической модели, так и с численной реализацией коллективного процесса напыления, в котором участвует множество нанокластеров и центров напыления.

Литература

1. Данилин Б.С. Применение низкотемпературной плазмы для нанесения тонких плёнок. М.: Энергоатомиздат, 1989. 328 с.

2. Соснин Н. А., Ермаков С. А., Тополянский П. А. Плазменные технологии. Руководство для инженеров. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2013. 406 с.
3. Гусев А.И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. М.: Наука-Физматлит, 2007. 416 с.
4. Mädler L., Friedlander S.K. Transport of Nanoparticles in Gases: Overview and Recent Advances // Aerosol and Air Quality Research. 2007. Vol. 7, No. 3. P. 304–342. DOI: 10.4209/aaqr.2007.03.0017
5. Каширин А.И., Шкодкин А.В. Газодинамическое напыление металлических покрытий - возникновение метода и его современное состояние // Упрочняющие технологии и покрытия. 2007. № 12(36). С. 22–33.
6. Irissou E., Legoux J.-G., Ryabinin A.N., Jodoin B., Moreau C. Review on Cold Spray Process and Technology: Part I - Intellectual Property // Journal of Thermal Spray Technology. 2008. Vol. 17, No. 4. P. 495–516. DOI: 10.1007/s11666-008-9203-3
7. Алхимов А.П., Клинков С.В., Косарев В.Ф., Фомин В.М. Холодное газодинамическое напыление. Теория и практика. М.: Физматлит, 2010. 536 с.
8. Zadegan R.M., Norton M.L. Structural DNA Nanotechnology: from Design to Applications // Int. J. Mol. Sci. 2012. Vol. 13, No. 6. P. 7149–7162.
9. Chetverushkin B.N. Kinetic Schemes and Quasi-Gasdynamic System of Equations. Barcelona: CIMNE, 2008. 298 p.
10. Elizarova T.G. Quasi-Gas Dynamic Equations. Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 2009. 286 p.
11. Граур И.А., Елизарова Т.Г., Кудряшова Т.А., Поляков С.В. Численное исследование струйных течений с использованием многопроцессорных систем // Математическое моделирование. 2002. Т. 14, № 6. С. 51–62.
12. Поляков С.В., Кудряшова Т.А., Свердлин А.А., Кононов Э.М., Косолапов О.А. Параллельный программный комплекс для решения задач механики сплошной среды на современных многопроцессорных системах // Математическое моделирование. 2010. Т. 22, № 6. С. 132–146.
13. Karamzin Yu., Kudryashova T., Podryga V., Polyakov S. Numerical Simulation of the Gas Mixture Flows Using Hybrid Computer Systems // Proc. of the Ninth International Conference on Engineering Computational Technology (ECT 2014), Stirlingshire, UK: Civil-Comp Press, Sept. 2014. Paper 28 (14 p.). DOI:10.4203/ccp.105.28
14. 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.
15. 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.
16. Kudryashova T., Karamzin Yu., Podryga V., Polyakov S. Two-scale Computation of N₂-H₂ Jet Flow Based on QGD and MMD on Heterogeneous Multi-core Hardware // Advances in Engineering Software, in press, online 31 March 2016. DOI: 10.1016/j.advengsoft.2016.02.005.
17. 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 // Proc. of the Seventh European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2016), June 2016. Vol. 2. P. 2331–2345.

18. Подрыга В.О. Многомасштабный подход к трехмерному расчету течений газов и их смесей в микроканалах технических систем // Доклады Академии Наук. 2016. Т. 469, № 6. С. 656–658.
19. 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.
20. Подрыга В.О., Поляков С.В. Многомасштабное моделирование истечения газовой струи в вакуум. М: Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, 2016. № 81. 52 с.
21. Kudryashova T., Podryga V., Polyakov S. HPC-simulation of gasdynamic flows on macroscopic and molecular levels // In: Nonlinearity. Problems, Solutions and Applications, L.A. Uvarova, A.B. Nadykto, A.V. Latyshev (Eds). New York: Nova Science Publishers, 2017. Vol. I, Chap. 26, P. 543–556.
22. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer Simulation of Liquids. Oxford: Oxford Univ. Press, 1989. 385 p.
23. Rapaport D.C. The Art of Molecular Dynamics Simulation. Cambridge: Cambridge University Press, 2004. 564 p.
24. Haile J.M. Molecular Dynamics Simulations. Elementary Methods. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1992. 489 p.
25. Frenkel D., Smit B. Understanding Molecular Simulation: from Algorithms to Applications. San Diego: Academic Press, 2002. 638 p.
26. Lennard-Jones J.E. Cohesion // Proc. Phys. Soc. 1931. Vol. 43, No. 5. P. 461–482.
27. Verlet L. Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // Phys. Rev. 1967. Vol. 159. P. 98–103.
28. Подрыга В.О., Поляков С.В. Молекулярно-динамическое моделирование процесса установления термодинамического равновесия нагретого никеля. М: Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, 2014. № 41. 20 с.
29. 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, № 1. С. 123–138.
30. Подрыга В.О., Поляков С.В. Молекулярно-динамический расчет макропараметров газа в потоке и на границе. М: Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, 2016. № 80. 26 с.
31. Пузырьков Д.В., Подрыга В.О., Поляков С.В. Облачный сервис для масштабных молекулярно-динамических расчетов: от идеи до реализации // Научный сервис в сети Интернет: труды XIX Всероссийской научной конференции, 18-23 сентября 2017 г., г. Новороссийск. М.: ИПМ им. М.В.Келдыша, 2017. С. 406–416.