

Тема работы

Создание функционирующего в режиме удаленного доступа интерактивного учебно-научного комплекса для выполнения работ по моделированию процессов газофазного синтеза наноразмерных структур и наноматериалов в проблемно-ориентированной среде высокопроизводительных вычислений

Subject

Creating remote access interactive educational and scientific complex for process modeling gas-phase synthesis of nanostructures and nanomaterials in the task-oriented environment for High Performance Computing

Номер и дата государственного контракта

№ 16.647.12.2020 от 25 ноября 2010 г.

Государственный заказчик

Министерство образования и науки Российской Федерации

Исполнитель работы

Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет», г. Санкт-Петербург.

Период выполнения государственного контракта

2010 - 2011 гг.

Краткая аннотация

Большинство задач, которые связаны со многими аспектами развития нанотехнологий по своей природе существенно междисциплинарны. Одним из наиболее характерных примеров этого является проблематика применения газофазного синтеза в нанотехнологиях. По своему существу такие технологии являются реализацией процессов химического осаждения вещества из газообразного состояния, подаваемого в реакционную зону, в твердое состояние.

Классический эксперимент в процессе обучения показал свою слабость: он не является наглядным, не позволяет изучать зависимость конечного материала от различных физических параметров системы, занимает много времени, дорог. На смену ему пришел виртуальный эксперимент, моделирование (рисунок 1).

Использование высокопроизводительных вычислений позволило распределить вычислительные ресурсы таким образом, чтобы сервисом одновременно могло воспользоваться большое количество студентов на практических занятиях в СПбГПУ, и затраченное на расчет время было минимальным.

NANOREACTOR

Приветствие Моделирование Выход

FTIM


Г А З О Ф А З Н Ы Й С И Н Т Е З

Система моделирования

Добро пожаловать в интерактивный учебно-научный комплекс для выполнения работ по моделированию процессов газофазного синтеза наноразмерных структур и наноматериалов в проблемно-ориентированной среде высокопроизводительных вычислений.

Данный сайт является интерфейсом доступа к моделям газофазного синтеза, реализованных при помощи высокопроизводительного кластера.

- Для начала работы с системой Вам необходимо перейти в раздел [Моделирование](#), где будет предложено выбрать программу модели.
- В разделе [Моделирование](#) Вы сможете ознакомиться с методическими указаниями по работе с системой, а также воспользоваться интерактивным симулятором.
- Далее необходимо сформировать задание вычислительной системе, т.е. задать параметры моделирования. При формировании задания необходимо сконфигурировать виртуальный реактор, а также задать химию моделируемого процесса.
- Результаты моделирования будут доступны как в виде статических растровых изображений, так и в виде интерактивных визуализаций.



NANOREACTOR

Приветствие Моделирование Выход

FTIM

М О Д Е Л И Р О В А Н И Е

Выберите модель

CVD реактор

Для всех типов реакторов газофазного осаждения пленок основными процессами, влияющими на особенности реакций в газовой фазе, являются процессы переноса. В данном случае под процессами переноса подразумеваются процессы газовой динамики, тепло- и массопереноса.

Граничные условия для уравнений, описывающих CVD процесс, зависят от конфигурации реактора. Обычно на твердых гранях ставят условия прилипания и непроницаемости. Однако, данный подход не совсем верен. Вследствие включения атомов и освобождения газообразных продуктов на рабочей поверхности, в действительности, существует некоторая конечная скорость, направленная по нормали к подложке. Но в то же время, она достаточно мала в случае разреженных реагентов и нуждается в учете только в случае больших скоростей роста или больших отличиях по массе между процессами на пленке и в газе.

Для описания условий потока на входе в реактор обычно задается скорость течения, а на выходе из него ставятся условия из предположения об отсутствии напряжений или полностью развитого течения. На практике обычно увеличивают расчетную область таким образом, что ее границы убираются из области осаждения. Подобный подход позволяет минимизировать эффекты, связанные с идеализированными условиями потока на входе и выходе из расчетной области CVD-реактора.

Температурные граничные условия существенно влияют на течение. Простое предположение о постоянной температуре стенки, изолированных боковых стенках и постоянного теплового потока через стенку, в общем, не верно. Поэтому для точного предсказания разнообразных явлений в потоке, играющих критическую роль в достижении равномерной скорости роста, необходимо включать подробное описание теплопереноса для стенок реактора.

- [Симулятор реактора](#)
- [Демонстрация интерактивной визуализации](#)
- [Моделирование процессов в CDV-реакторе](#)

Рисунок 1 Система моделирования научно-учебного комплекса

Brief summary

Most of the tasks that are associated with many aspects of nanotechnology development are essentially interdisciplinary by its nature. One of the most striking example is the use of gas-phase synthesis problems in nanotechnology. In essence, these technologies are the realization of the processes of the solid state chemical deposition from gaseous substance supplied to the reaction zone.

A classic experiment in the learning process has shown its weakness: it is not clear, does not allow to study the dependence of the final material from the different physical parameters of the system, it is time consuming, expensive. And was replaced by a virtual experiment i.e. simulation.

High-performance computing facilities provide distributed resources so that service gives possibility to work for a large number of students in practical classes. Such technology was implemented in the Saint-Petersburg State Polytechnical University and integrated into educational process.

Цель работы:

Совершенствование подготовки специалистов и развитие исследовательского и инженерного инструментария в области процессов газофазного синтеза наноразмерных структур и наноматериалов на базе технологий математического и имитационного моделирования с

использованием высокопроизводительных вычислений на основе разрабатываемых интерактивных проблемно-ориентированных средств и систем, работающих в режиме удаленного мультимедийного доступа.

Основные результаты выполнения проекта

Результатом работы в настоящем проекте является разработка совокупности технологий для создания мультимедийного интерактивного (рисунок 2) учебно-научного комплекса. Выполненная работа включает несколько взаимосвязанных научных направлений и методов исследований:

- 1) обобщение данных отечественной и зарубежной научной, патентной и нормативной литературы, посвященной технологиям газофазного синтеза наноразмерных структур и наноматериалов.
- 2) анализ современных типовых технологических установок (рисунок 3) химического осаждения веществ из газовой фазы, применяемых в ведущих странах мира.

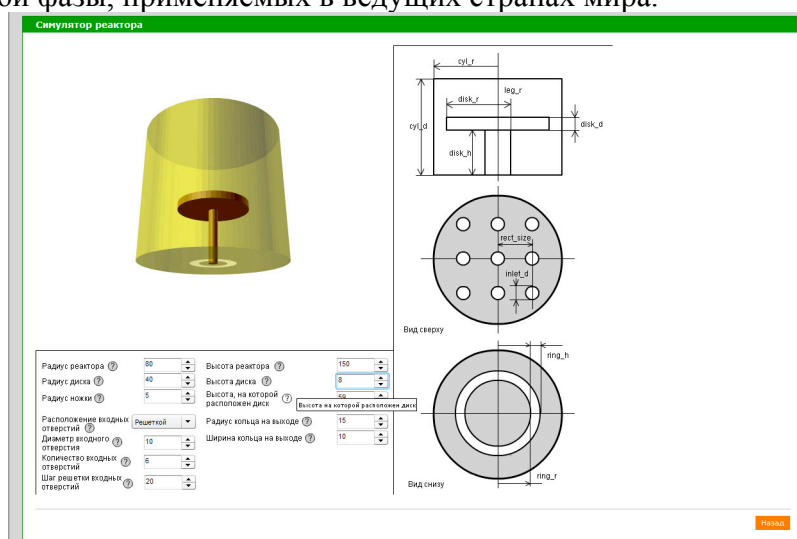


Рисунок 2 Интерфейс комплекса, постановка задачи

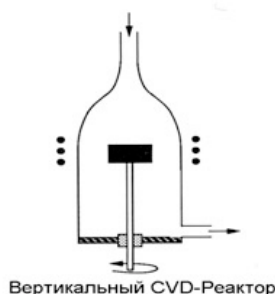


Рисунок 3 Типовая установка. Вертикальный CVD реактор

- 3) выявление влияния основных технологических параметров синтеза на структуру и свойства выбранных материалов.
- 4) создание и развитие физических, математических и имитационных моделей физико-химических процессов течений газовой среды, включая физические процессы нанотехнологий, связанные с методами химического осаждения материалов из газовой фазы, на основе современных многопроцессорных программных комплексов.
- 5) разработку и развитие методологий представления результатов, дающих полномасштабную информацию, о характеристиках описываемых течений, так и о детальном представлении при его визуализации (поля скоростей, давлений, концентраций реагентов и т.д. как в локальных областях течения, так и во всем реакционном объеме) (рисунок 4).

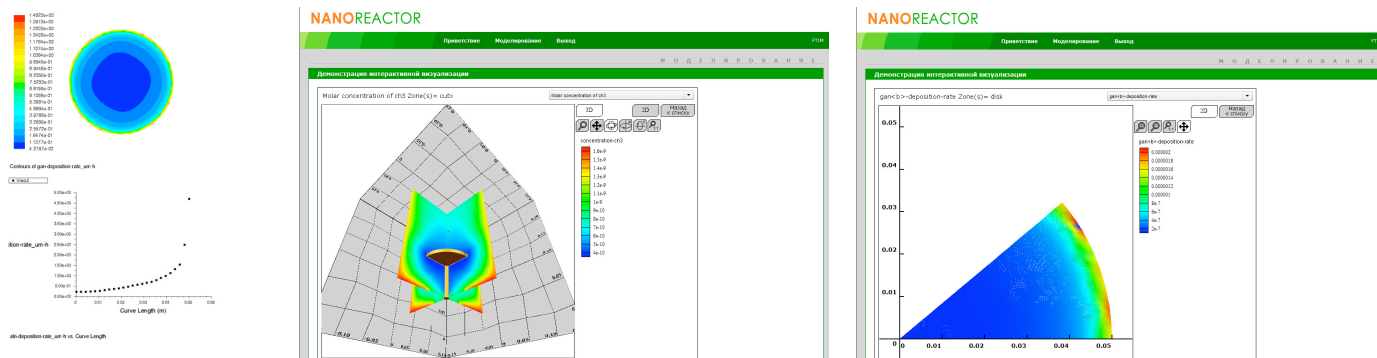


Рисунок 4 Визуализация результатов

- б) разработку и реализацию технологии удаленного доступа (рисунок 5) к серверам приложений среды моделирования и визуализации результатов численных экспериментов и интерактивного механизма визуализации результатов моделирования с использованием современных технологий отображения информации в сетевой среде.



Рисунок 5 Схема системы удаленного доступа

- 7) разработку базы экспериментальных данных по актуальным задачам нанотехнологий в области газофазного синтеза наноструктур и наноматериалов и реализацию интерактивного доступа к базе данных результатов экспериментов, включающую:
- структуру технологических систем для получения перспективных наноматериалов (пленок, наночастиц и наноструктур);
 - схемы и модели современных типовых технологических установок химического осаждения веществ из газовой фазы;
 - модели физико-химических закономерностей синтеза в выбранных системах;
 - комплекс данных, полученных современными методами физического анализа, дающих наиболее полное описание важнейших свойств выбранных наноматериалов.
- 8) учебно-методические материалы по использованию предлагаемого комплекса в специализированных лабораторных практикумах, направленных на подготовку специалистов и магистров по направлениям «нанотехнология», «микроэлектроника», «наноэлектроника», «механика» и др., а также при обучении аспирантов, переподготовке или повышении квалификации специалистов.

Таким образом, приведенные направления, очевидно, отвечают решению задач по совершенствованию подготовки специалистов и развитие исследовательского и инженерного инструментария в области процессов газофазного синтеза наноразмерных структур и наноматериалов на базе технологий математического и имитационного моделирования с использованием высокопроизводительных вычислений на основе разрабатываемых интерактивных проблемно-ориентированных средств и систем, работающих в режиме удаленного мультимедийного доступа.

В основе методологии проведения работ лежит разработка передовых технологий математического моделирования с использованием высокопроизводительных вычислений для создания и развития исследовательского и инженерного инструментария в области процессов

газофазного синтеза наноразмерных структур и наноматериалов. При этом важнейшей целью работы является обеспечение визуализации протекающих физико – химических процессов, а также и обеспечения удаленного доступа к проводимым исследованиям и разрабатываемым учебным ресурсам, которые служат основой для проведения лабораторных, курсовых работ о подготовке бакалаврских, магистерских и кандидатских диссертаций.

Область применения результатов проекта

Результаты проводимых исследований уже сегодня находят самое широкое использование в учебном процессе СПбГПУ как в рамках лабораторных и практических работ, НИРС, так и при подготовке бакалаврских и магистерских работ студентами старших курсов направлений 150100 «Материаловедение и технологии материалов» в рамках преподавания дисциплин: «Методы математического моделирования», «Физико-химические основы технологии наноматериалов и компонентов электронной техники», «Компьютерные технологии в науке и производстве в области материаловедения» при проведении лабораторных, курсовых и иных видов учебных работ (конкретные работы будут выбираться в процессе выполнения проекта):

Работы в данном направлении служат научной и научно-методической основой для разработки лекционных курсов и лабораторных работ, ориентированных на подготовку новых поколений специалистов в областях высоких технологий с применением суперкомпьютерных технологий в инженерных и естественнонаучных расчетах. Они также служат одним из ключевых элементов разрабатываемой магистерской программы направления «Суперкомпьютерные технологии (высокопроизводительные вычисления) в технике и естествознании» в рамках программ магистерской подготовки по направлению «Прикладная математика и информатика» и находятся в рамках Президентской инициативы по развитию суперкомпьютерного образования в высшей школе.

Контакты

Научный руководитель проекта, С.Е. Александров
зав. каф., д.х.н., проф. salexandrov@spbstu.ru

Ответственный исполнитель, Ю.Я. Болдырев
зав. каф., д.т.н., проф. boldyrev@phmf.spbstu.ru