

УДК 004.942

DOI: 10.22213/2410-9304-2026-1-26-34

Моделирование синтеза углеродных наноструктур модифицированным численным методом крупных частиц

А. В. Калач, доктор химических наук, профессор,
Воронежский государственный университет инженерных технологий, Воронеж, Россия
И. С. Толстова, Воронежский государственный университет инженерных технологий,
Воронеж, Россия

В статье рассмотрен вопрос моделирования кинетики заряженных частиц в межэлектродном пространстве при плазменно-дуговом синтезе углеродных наноструктур в присутствии катализатора с использованием модифицированного численного метода крупных частиц. Основное внимание уделяется адаптации стандартных алгоритмов молекулярной динамики для работы с большим числом частиц и их взаимодействием на макроскопическом уровне, а также разработке эффективных методов, позволяющих ускорить процесс моделирования с использованием персональных компьютеров. Модификация численного метода основана на адаптивном распределении крупных частиц в зависимости от активности столкновений в локальных областях межэлектродного пространства. В областях с высокой частотой столкновений вес макрочастиц уменьшается и их количество возрастает для обеспечения точности описания большого числа взаимодействий, а в областях с низкой частотой столкновений наоборот. Предложена методика балансировки загрузки рабочих станций вычислительного кластера и расчета необходимого числа ядер, основанная на назначении вычислительных ресурсов в зависимости от числа модельных крупных частиц в области расчета. Установлено, что разработанные методика и алгоритмы обработки больших объемов данных на основе параллельных вычислений, необходимых для решений многомерных нелинейных задач с использованием ресурсов распределенной вычислительной системы с балансировкой загрузки процессора, позволяют минимизировать процессорное время расчета. Получено максимальное ускорение в 266 раз по сравнению с последовательным алгоритмом, в то время как параллельный алгоритм с использованием графического процессора позволяет ускорить расчеты лишь в 153 раза. Работа имеет потенциал для дальнейшего улучшения методов синтеза углеродных наноструктур и разработки высокопроизводительных вычислительных инструментов в области нанотехнологий.

Ключевые слова: углеродные наноструктуры, плазма, моделирование, численный метод крупных частиц, параллельные алгоритмы, распределенные вычисления, динамическая балансировка нагрузки.

Введение

Востребованность углеродных наноструктур (УНС) во многих сферах человеческой деятельности обусловлено уникальными свойствами, которыми обладают углеродные наноматериалы: высокая прочность и электропроводность, термостабильность, биосовместимость и др. Среди различных методов получения УНС особое место занимает плазменно-дуговой синтез [1, 2], отличающийся высокой производительностью, относительной простотой реализации и возможностью масштабирования для промышленных целей. Но данный процесс сложен из-за необходимости учета множе-

ства параметров, таких как температура, катализаторы, газовые потоки (рис. 1) [3–5].

Поэтому, несмотря на большое число экспериментальных работ, механизмы образования углеродных кластеров в плазменных условиях остаются недостаточно изученными.

Прямые эксперименты редко дают детальное представление о локальных распределениях полей, энергий столкновений и динамике заряженных частиц в микромасштабе, тогда как именно эти параметры определяют кинетику процесса, размер, морфологию и чистоту получаемых УНС [6].



Рис. 1. Структурная модель плазменно-дугового синтеза УНС

Fig. 1. Structural model of plasma-arc synthesis of CNS

Поэтому, несмотря на большое число экспериментальных работ, механизмы образования углеродных кластеров в плазменных условиях остаются недостаточно изученными.

Прямые эксперименты редко дают детальное представление о локальных распределениях полей, энергий столкновений и динамике заряженных частиц в микромасштабе, тогда как именно эти параметры определяют кинетику процесса, размер, морфологию и чистоту получаемых УНС [6].

Катализатор в процессе изменяет траектории заряженных и нейтральных частиц, влияет на скорость роста наноструктур и может смещать равновесия реакций, что требует точного описания взаимодействий в неравновесном плазменном окружении. В условиях ограничений экспериментальных исследований виртуальные эксперименты становятся важнейшим инструментом для быстрой проверки гипотез, оценки того, как изменение состава газовой среды или напряженности дуги скажутся на кинетике процесса и качестве продукции, а также для задания целевых характеристик конечных материалов. В связи с этим без математиче-

ской модели трудно оценить вклад каждого параметра и предсказать результаты при изменении состава катализатора, геометрии дуговой плазмы или условий охлаждения. Моделирование позволяет системно исследовать влияние параметров и геометрии установки на кинетику частиц и выход продукции.

Актуальной научной задачей является разработка адекватной математической модели кинетики частиц в межэлектродном пространстве и реализация эффективных численных алгоритмов для ее решения, т. к. понимание динамики распределений скоростей, концентраций и температур различных компонент плазмы необходимо для оптимизации условий синтеза УНС, повышения выхода целевых наноструктур и снижения энергетических затрат.

Материалы и методы

Для плазменно-дугового синтеза углеродных наноструктур традиционные модели, основанные на гидродинамических приближениях, оказываются недостаточными, так как предполагают термодинамическое равновесие и локальную изотропию распределений скоростей частиц [7]. В условиях

плазменно-дугового разряда наиболее адекватным инструментом является кинетический подход, основанный на решении уравнения Больцмана для функции распределения частиц [8, 9]. Такой подход позволяет учесть неравновесность, дискретность взаимодействий и влияние конкретных механизмов столкновений между всеми компонентами плазмы.

Для моделирования плазмы чаще всего применяют математическое описание с помощью системы уравнений Больцмана для каждой компоненты плазмы и уравнений Максвелла, которая описывает эволюцию функций распределения электронов, ионов и нейтральных атомов под действием собственных электромагнитных полей, возникающих в результате зарядового разделения и токовых процессов между электродами. Решение системы уравнений позволяет проследить взаимосвязь микроскопической кинетики и макроскопических электромагнитных процессов. Однако аналитическое решение системы Больцмана – Максвелла возможно лишь в упрощенных случаях, что не подходит для моделирования процесса получения УНС. Для практического применения требуется использование численных методов.

Для численного решения системы уравнений Больцмана – Максвелла чаще всего применяется метод крупных частиц (МКЧ), суть которого заключается в аппроксимации распределения частиц конечным числом макрочастиц, представляющих собой ансамбль реальных частиц, участвующих в процессе с одинаковыми свойствами [10]. Однако у классического метода есть недостатки, заключающийся в возникновении так называемых численных шумов, причин возникновения которых очень много. Самым действенным способом для уменьшения шумов является увеличение числа модельных частиц, чтобы приблизиться к реальным значениям.

Для реализации численного решения классическим МКЧ предъявляются высокие требования к вычислительным системам, а именно к быстродействию и памяти, т. к. в данном методе на фазовом пространстве размещается большое количество модель-

ных частиц. В случае плазменно-дугового разряда структура межэлектродного пространства существенно неоднородна. В областях, близких к электродам наблюдаются интенсивные процессы ионизации, рекомбинации, эмиссии и тепломассопереноса, поэтому частота столкновений частиц в этих областях высокая. В центральной зоне дугового столба и особенно в периферийных областях плазмы концентрация частиц и частота столкновений существенно ниже. Применение одинакового числа макрочастиц по всему объему приводит к значительной избыточной вычислительной нагрузке. Предложена модификация метода крупных частиц для повышения точности предсказаний распределения частиц и их скоростей, а также для устойчивости к численным шумам, возникающим при резком изменении плотности частиц в зоне дугового разряда.

Основная идея модифицированного численного метода заключается в динамическом изменении веса макрочастиц, т. е. числа реальных частиц, представляемых одной модельной крупной частицей, в зависимости от условий в локальной области плазмы. Соответственно, общее число макрочастиц в данной области сокращается, что снижает вычислительную нагрузку. В областях с высокой частотой столкновений, наоборот, вес макрочастиц уменьшается и их количество возрастает для обеспечения точности описания большого числа взаимодействий. С учетом предложенной модификации разработан последовательный обобщенный алгоритм решения кинетической модели методом крупных частиц (рис. 2).

Численное решение задачи требует эффективной реализации на современных вычислительных платформах, где объем данных и вычислительная нагрузка ограничивают традиционные подходы [11–13]. В контексте модифицированного МКЧ для моделирования кинетики частиц в межэлектродном пространстве необходимо одновременно обрабатывать несколько зон пространства, учитывать дальние взаимодействия между частицами и полями, а также синхронно обмениваться распределениями частиц и параметрами реакции между узлами [14, 15].

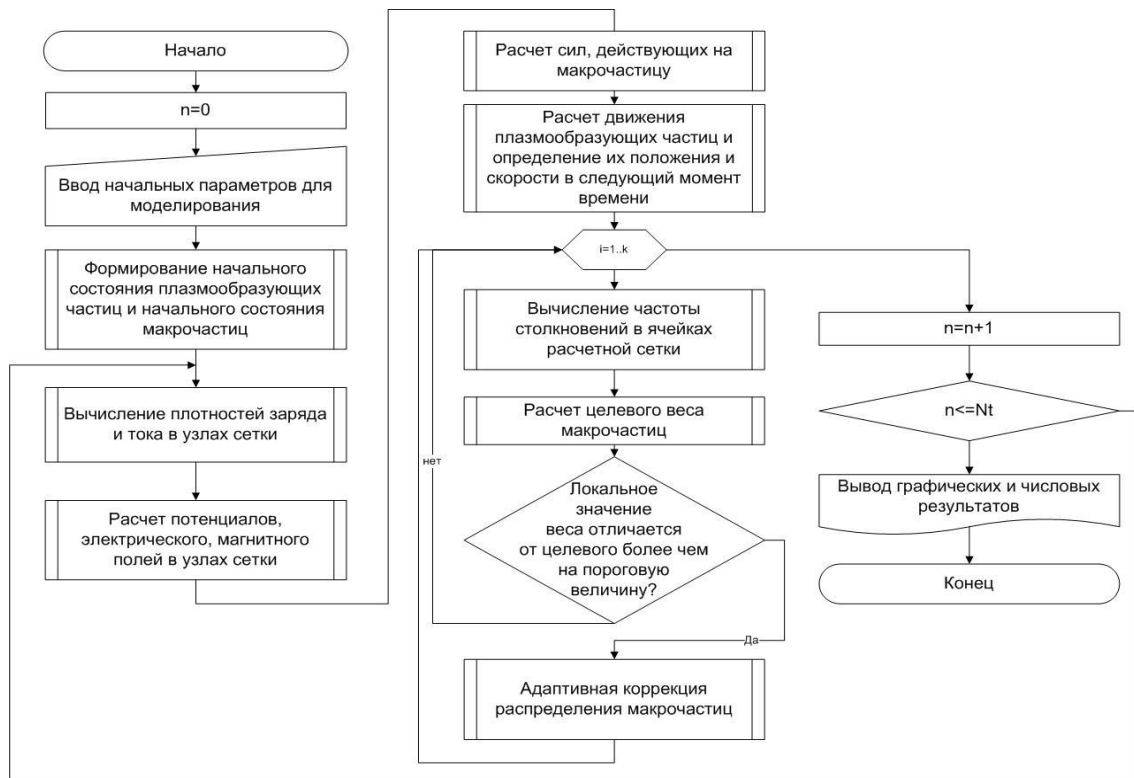


Рис. 2. Обобщенная последовательная схема решения задачи модифицированным МКЧ

Fig. 2. Generalized sequential scheme for solving a problem using the modified large particle method

Поскольку трехмерное моделирование системы Больцмана – Максвелла с миллионами макрочастиц и мелкой сеткой вычислительной области требует обработки больших массивов данных и множества итераций, необходимо разрабатывать и реализовывать эффективные параллельные вычислительные алгоритмы, способные использовать возможности и ресурсы современных вычислительных систем.

Для практической реализации модели в качестве инструмента реализации выбраны технологии OpenMP и MPI. Использование MPI позволяет разделить расчетную область и массив макрочастиц между несколькими вычислительными узлами, организуя обмен данными между ними посредством передачи сообщений. При этом каждая группа процессоров обрабатывает локальную часть задачи, а именно определенный участок пространственной сетки, и периодически синхронизируется с остальными для согласования электромагнитных полей и потоков частиц [16, 17].

При моделировании кинетики частиц в межэлектродном пространстве плазменно-

дуговой системы адаптивным методом крупных частиц, основанным на распределении частиц по активности их столкновений, наблюдается неравномерное пространственно-временное распределение вычислительной нагрузки между вычислительными процессорами. Часть вычислительных узлов оказывается недогруженной, тогда как другие перегружены обработкой интенсивных столкновений и частиц. В связи с этим растет время на межпроцессорную синхронизацию и снижается эффективность масштабирования модели на многопроцессорных системах. Для устранения этих эффектов предложена динамическая балансировка загрузки процессоров [18], основанная на назначении вычислительных ресурсов в зависимости от числа модельных крупных частиц в области расчета (рис. 3).

Такой подход позволяет поддерживать равномерную загрузку процессоров, минимизировать время простоя и повысить эффективность параллельного вычисления при сохранении корректности физических взаимодействий между частицами и ячейками сетки.



Рис. 3. Схема динамической балансировки нагрузки процессоров вычислительного кластера

Fig. 3. Dynamic load balancing scheme for computing cluster processors

Результаты и обсуждение

Разработанные параллельные вычислительные алгоритмы программно реализованы с использованием комбинированной схемы технологий MPI+OpenMP и протестированы на вычислительном кластере, состоящем из 4-16 четырехъядерных персональных компьютеров, оснащенных процессорами IntelCore i7. Размер расчетной сетки в вычислительных экспериментах составлял $250 \times 250 \times 250$, $500 \times 500 \times 500$ расчетных узлов.

Установлено, что разработанные методика и алгоритмы обработки больших объемов данных на основе параллельных вычислений, необходимых для решений многомерных нелинейных задач с использованием ресурсов распределенной вычислительной системы с балансировкой загрузки процессора, позволяют минимизировать процессорное время расчета. В качестве меры эффективности выбрано время решения задачи синтеза углеродных наноструктур. Оптимальная загрузка процессора при этом составляла 85–95 %.

Сравнительный анализ эффективности предлагаемого алгоритма вычислений параметров модели синтеза УНС приведен в таблице.

Эффективность исследованных алгоритмов

Версия алгоритма	Время расчета, с	
	Число расчетных ячеек $250 \times 250 \times 250$	Число расчетных ячеек $500 \times 500 \times 500$
Последовательный алгоритм	6682,93	60182,83
Параллельный алгоритм с балансировкой загрузки (MPI+OpenMP)	32,8 (ускорение в 204 раза)	226,02 (ускорение в 266 раз)
Параллельный алгоритм (GPU)	50,62 (ускорение вычислений в 132 раза)	391,31 (ускорение вычислений в 153 раза)

Для решения задачи моделирования кинетики заряженных частиц преимущественно использовали комбинированную схему MPI+OpenMP, которая позволила получить максимальное ускорение в 266 раз по сравнению с последовательным алгоритмом, в то время как параллельный алгоритм с использованием графического процессора позволяет ускорить расчеты лишь в 153 раза.

Заключение

Таким образом, моделирование кинетики частиц в межэлектродном пространстве при

плазменно-дуговым синтезе углеродных наноструктур представляет собой актуальную, научно и практически значимую задачу, находящуюся на стыке физики плазмы, вычислительной математики и нанотехнологий.

Необходимость учета неравновесных эффектов требует применения системы Больцмана – Максвелла, которая обеспечивает фундаментальное описание динамики частиц и полей. Для численного решения такой системы целесообразно использовать модифицированный метод крупных частиц, основанный на адаптивном распределении числа крупных частиц в зависимости от активности столкновений.

Реализация этих методов в параллельной вычислительной архитектуре на базе гибридной технологии OpenMP+MPI обеспечивает требуемую производительность и масштабируемость, позволяет уменьшить вычислительные затраты за счет сокращения числа частиц в равномерных областях, повысить точность описания динамики углеродных кластеров и ионов в приэлектродных областях.

Библиографические ссылки

1. Перспективные методы синтеза углеродных нанотрубок / А. А. Бидилдаева, Ж. К. Мышырова, А. Т. Тасимханова, С. В. Агасиева // Нанотехнологии: разработка, применение – XXI век. 2021. Т. 13, № 1. С. 36–47. DOI 10.18127/j22250980-202101-04. EDN YJDGVE.
2. Калеева А. А. Перспективы плазменно-дугового метода синтеза наноматериалов // XXV Туполевские чтения (школа молодых ученых) : Международная молодежная научная конференция, посвященная 60-летию со дня осуществления Первого полета человека в космическое пространство и 90-летию Казанского национального исследовательского технического университета им. А.Н. Туполева-КАИ, Казань, 10–11 ноября 2021 года. Т. III. Казань : Изд-во ИП Сагиева А.Р., 2021. С. 17–20. EDN WGUPTG.
3. Пространственные характеристики плазмы дугового разряда применительно к синтезу кремниевых наноструктур / А. А. Калеева, Б. А. Тимеркаев, О. А. Петрова, А. А. Сайфутдинов // Вестник Казанского государственного технического университета им. А. Н. Туполева. 2022. Т. 78, № 2. С. 10–16. EDN JVOZGZ.
4. Timerkaev B. A., Sofronitskiy A. O., Andreeva A. A. Carbon nanotubes formation in the decomposition of heavy hydrocarbons creeping along the surface of the glow discharge // Journal of Physics: Conference Series. 2016. Vol. 669, no. 1. P. 012062. DOI 10.1088/1742-6596/669/1/012062. EDN WWDULL.
5. Synthesis of carbon nanostructures in electric discharge / B. A. Timerkaev, B. R. Shakirov, A. L. Galieva [et al.] // Journal of Physics: Conference Series : Scientific Technical Conference on Low Temperature Plasma During the Deposition of Functional Coatings, Kazan, 05–08 ноября 2018 года. Vol. 1328. – Kazan: Institute of Physics Publishing, 2019. – P. 012039. – DOI 10.1088/1742-6596/1328/1/012039. – EDN GHRNEA.
6. Болдышева В. К., Сайфутдинов А. И. Исследование плазмохимического реактора на основе разряда постоянного тока в аргоне с графитовыми электродами в задачах синтеза углеродных наноструктур // Когерентная оптика и оптическая спектроскопия : сборник статей XXVI молодежной научной школы, Казань, 01–03 ноября 2022 года. Казань: Издательство «Фэн» Академии наук Республики Татарстан, 2022. С. 38–43. EDN BARYNB.
7. Polyakov S. V., Podryga V. O., Kudryashova T. A. HPC Simulation of Non-Linear Processes in Microsystems Gas–Metal // Lobachevskii Journal of Mathematics. 2020. Vol. 41, no. 8. P. 1554–1562. DOI 10.1134/S1995080220080168. EDN AFGGOF.
8. Абрамов Г. В., Гаврилов А. Н. Математические методы исследования кинетики формирования кластеров углерода в плазме // Системы и средства информатики. 2018. Т. 28, № 2. С. 116–127. DOI 10.14357/08696527180209. EDNUP-LENJ.
9. Калач А. В., Толстова И. С. Компьютерное моделирование процесса синтеза углеродных наноструктур с применением технологий параллельного программирования // Интеллектуальные системы в производстве. 2024. Т. 22, № 1. С. 62–68. DOI 10.22213/2410-9304-2024-1-62-68. EDN NHOJWD.
10. Абрамов Г. В., Гаврилов А. Н. Использование метода крупных частиц для численного моделирования процессов синтеза углеродных наноструктур в плазме // Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики : сборник трудов Международной научно-технической конференции, Воронеж, 18–20 декабря 2017 года / Воронежский государственный университет. Воронеж : Научно-

исследовательские публикации ; Вэлборн, 2017. С. 479–489. EDN YRQAVQ.

11. Берендеев Е. А., Тимофеев И. В. Параллельный алгоритм для полуэвьявного метода частиц в ячейках с сохранением энергии и заряда // Сибирский журнал вычислительной математики. 2024. Т. 27, № 4. С. 365–378. DOI 10.15372/SJNM20240401. EDN MIQMZD.

12. Снытников А. В. Реализация на Pytorch расчета столкновений частиц методом Монте-Карло для моделирования плазмы методом частиц в ячейках // Балтийский морской форум : материалы XII Международного Балтийского морского форума : в 6 т. Калининград, 30 сентября – 04 ноября 2024 года. Калининград : Балтийская государственная академия рыбопромышленного флота, Калининградский государственный технический университет, 2024. С. 168–174. EDN RPTVIM.

13. Четверушкин Б. Н., Марков М. Б., Усков Р. В. О распараллеливании метода частиц для гибридного суперкомпьютера // Доклады Российской академии наук. Математика, информатика, процессы управления. 2022. Т. 505, № 1. С. 19–23. DOI 10.31857/S2686954322040063. EDN WSCWUJ.

14. Реализация метода частиц на компьютере с графическими ускорителями / А. В. Березин, Н. В. Заложный, О. С. Косарев [и др.] // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2022. № 61. С. 1–21. DOI 10.20948/prepr-2022-61. EDN MGLWJP.

15. Использование параллельных вычислений в ресурсоемких задачах моделирования процессов движения и взаимодействия частиц в плазме при синтезе углеродных наноструктур / Г. В. Абрамов, А. Н. Гаврилов, А. Л. Ивашин, И. С. Толстова // Вестник Московского государственного технического университета им. Н. Э. Баумана. Серия Естественные науки. 2018. № 5(80). С. 4–14. DOI 10.18698/1812-3368-2018-5-4-14. EDN VKFGRP.

16. Толстова И. С. Параллельный алгоритм численного моделирования синтеза углеродных наноструктур // Вестник Воронежского института ФСИИ России. 2024. № 1. С. 125–131. EDN SAFQEU.

17. Толстова И. С. Моделирование синтеза углеродных наноструктур с использованием параллельных вычислений // Научный бюллетень Воронежского института МВД России. 2024. № 2. С. 120–127. EDN QRENXI.

18. Суков С. А. Метод балансировки загрузки для гетерогенных численных алгоритмов моделирования газодинамических течений // Журнал

Средневожского математического общества. 2021. Т. 23, № 2. С. 193–206. DOI 10.15507/2079-6900.23.202102.193-206. EDN DSKKCW.

References

1. Bidildaeva A.A., Myshyrova ZH. K., Tasimkhanova A.T., Agasieva S.V. [Promising Methods for the Synthesis of Carbon Nanotubes]. *Nanotekhnologii: razrabotka, primenenie - XXI vek*, 2021, vol. 13, no. 1, pp. 36-47 (in Russ.). DOI 10.18127/j22250980-202101-04.

2. Kaleeva A.A. *Perspektivy plazmenno-dugovogo metoda sinteza nanomaterialov* [Prospects for the plasma-arc method of synthesizing nanomaterials]. *XXV Tupolevskiechteniya (shkola molodykh uchenykh)* : *Mezhdunarodnaya molodezhnaya nauchnaya konferentsiya, posvyashchennaya 60-letiyu so dnya osushchestvleniya Pervogo poleta cheloveka v kosmiches koeprostranstvoi 90-letiyu Kazanskogonatsional'nogoissledovatel'skogotekhnicheskogouniversitetaim. A.N. Tupoleva-KAI, Kazan', 10–11 noyabrya 2021 goda* [Proc. XXV Tupolev Readings (School of Young Scientists): International Youth Scientific Conference dedicated to the 60th anniversary of the first human flight into space and the 90th anniversary of the Kazan National Research Technical University named after A.N. Tupolev-KAI]. Kazan', 2021, pp. 17-20 (in Russ.).

3. Kaleeva A.A., Timerkaev B.A., Petrova O.A., Saifutdinov A.A. [Spatial characteristics of arc discharge plasma as applied to the synthesis of silicon nanostructures]. *Vestnik Kazanskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta im. A.N. Tupoleva*, 2022, vol. 78, no 2, pp. 10-16 (in Russ.).

4. Timerkaev B.A., Sofronitskiy A.O., Andreeva A.A. Carbon nanotubes formation in the decomposition of heavy hydrocarbons creeping along the surface of the glow discharge. *Journal of Physics: Conference Series*, 2016, vol. 669, no. 1, P. 012062. DOI 10.1088/1742-6596/669/1/012062.

5. Timerkaev B.A., Shakirov B.R., Galieva A.L. [et al.] Synthesis of carbon nanostructures in electric discharge. *Journal of Physics: Conference Series : Scientific Technical Conference on Low Temperature Plasma During the Deposition of Functional Coatings*. 2019, Vol. 1328, P. 012039. DOI 10.1088/1742-6596/1328/1/012039.

6. Boldysheva V. K., Saifutdinov A. I. *Issledovanie plazmokhimicheskogo reaktora na osnove razryada postoyannogo toka v argone s grafitovymi ehlektrodami v zadachakh sinteza uglerodnykh nanostruktur* [Study of a plasma-chemical reactor based on a direct current discharge in argon with graphite electrodes in the problems of synthesis of carbon nanostructures]. *Kogerentnaya optika i opti-*

cheskaya spektroskopiya : sbornik statei XXVI molodezhnoi nauchnoi shkoly, Kazan', 01–03 noyabrya 2022 goda [Proc. Coherent Optics and Optical Spectroscopy: Collection of articles of the XXVI youth scientific school]. Kazan', 2022, pp. 38-43 (in Russ).

7. Polyakov S.V., Podryga V.O., Kudryashova T.A. HPC Simulation of Non-Linear Processes in Microsystems Gas–Metal. *Lobachevskii Journal of Mathematics*, 2020, Vol. 41, No. 8, P. 1554-1562. DOI 10.1134/S1995080220080168.

8. Abramov G.V., Gavrilov A.N. [Mathematical methods for studying the kinetics of carbon cluster formation in plasma]. *Sistemy i sredstva informatiki*, 2018, vol. 28, no. 2, pp. 116-127 (in Russ.). DOI 10.14357/08696527180209.

9. Kalach A.V., Tolstova I. S. [Computer simulation of the process of synthesis of carbon nanostructures using parallel programming technologies]. *Intellektual'nyesistemy v proizvodstve*, 2024, vol. 22, no. 1, pp. 62-68 (in Russ.). DOI 10.22213/2410-9304-2024-1-62-68.

10. Abramov G.V., Gavrilov A.N. *Ispol'zovanie metoda krupnykh chastits dlya chislennogo modelirovaniya protsessov sinteza uglerodnykh nanostruktur v plazme* [Using the large particle method for numerical modeling of the processes of synthesis of carbon nanostructures in plasma]. *Aktual'nye problem prikladnoi matematiki, informatiki i mekhaniki : sbornik trudov Mezhdunarodnoi nauchno-tehnicheskoi konferentsii, Voronezh, 18–20 dekabrya 2017 goda* [Proc. Current issues in applied mathematics, computer science and mechanics: Proceedings of the International Scientific and Technical Conference]. Voronezh, 2017, pp. 479-489 (in Russ).

11. Berendeev E.A., Timofeev I.V. [A parallel algorithm for the semi-implicit particle-in-cell method with conservation of energy and charge]. *Sibirskii zhurnal vychislitel'noi matematiki*, 2024, vol. 27, no. 4, pp. 365-378 (in Russ.). DOI 10.15372/SJNM20240401.

12. Snytnikov A.V. *Realizatsiya na Pytorch rascheta stolknovenii chastits metodom Monte-Karlo*

dlya modelirovaniya plazmy metodom chastits v yacheikakh [Pytorch implementation of Monte Carlo particle collision simulation for particle-in-cell plasma simulations]. *Baltiiskii morskoi forum : materialy XII Mezhdunarodnogo Baltiiskogo morskogo foruma: v 6 t., Kaliningrad, 30 sentyabrya – 04 2024 goda* [Proc. Baltic Maritime Forum: Proceedings of the XII International Baltic Maritime Forum]. Kaliningrad, 2024, pp. 168-174 (in Russ).

13. Chetverushkin B.N., Markov M.B., Uskov R.V. [On parallelization of the particle method for a hybrid supercomputer]. *Doklady Rossiiskoi akademii nauk. Matematika, informatika, protsessy u pravleniya*, 2022, vol. 505, no. 1, pp. 19-23 (in Russ.). DOI 10.31857/S2686954322040063.

14. Berezin A.V., Zalozhnyi N.V., Kosarev O.S. [i dr.]. [Implementation of the particle method on a computer with graphics accelerators]. *Preprinty IPM im. M.V. Keldysha*, 2022, no. 61, pp. 1-21 (in Russ.). DOI 10.20948/prepr-2022-61.

15. Abramov G.V., Gavrilov A.N., Ivashin A.L. [The use of parallel computing in resource-intensive problems of modeling the processes of motion and interaction of particles in plasma during the synthesis of carbon nanostructures]. *Bulletin of Moscow State Technical University. N.E. Bauman. Series Natural Sciences*, 2018, No. 5(80), pp. 4-14. DOI 10.18698/1812-3368-2018-5-4-14.

16. Tolstova I.S. [Parallel algorithm for numerical simulation of the synthesis of carbon nanostructures]. *Vestnik Voronezhskogo instituta FSIN Rossii*, 2024, no. 1, pp. 125-131 (in Russ).

17. Tolstova I. S. [Simulation of the synthesis of carbon nanostructures using parallel computing]. *Nauchnyi byulleten' Voronezhskogo instituta MVD Rossii*, 2024, no. 2, pp. 120-127 (in Russ.).

18. Sukov S. A. [Load balancing method for heterogeneous numerical algorithms for modeling gas-dynamic flows]. *Zhurnal Srednevolzhskogo matematicheskogo obshchestva*, 2021, vol. 23, no. 2, pp. 193-206 (in Russ.). DOI 10.15507/2079-6900.23.202102.193-206.

* * *

Modeling The Synthesis of Carbon Nanostructures Using a Modified Numerical Method of Large Particles

A. V. Kalach, Doctor of Chemical Sciences, Professor, Voronezh State University of Engineering Technologies, Russia

I. S. Tolstova, Voronezh State University of Engineering Technologies, Russia

The article considers the issue of modeling the kinetics of charged particles in the interelectrode space during plasma-arc synthesis of carbon nanostructures in the presence of a catalyst using a modified numerical method of large particles. The main focus is on adapting standard molecular dynamics algorithms to work with a large number of particles and their interactions at the macroscopic level, as well as developing

effective methods to speed up the simulation process using personal computers. A modification of the numerical method is based on the adaptive distribution of large particles depending on the collision activity in local regions of the interelectrode space. In areas with a high collision frequency, the weight of macroparticles decreases and their number increases to ensure the accuracy of describing a large number of interactions, while in areas with a low collision frequency, the opposite is true. A method for balancing the load of computing cluster workstations and calculating the required number of cores is proposed, based on the assignment of computing resources depending on the number of large model particles in the calculation area. It is established that the developed methodology and algorithms for processing large amounts of data based on parallel calculations necessary for solving multidimensional nonlinear problems using the resources of a distributed computing system with processor load balancing can minimize the processor calculation time. The maximum acceleration was obtained by 266 times compared to the sequential algorithm, while the parallel algorithm using a GPU allows calculations to be accelerated only by 153 times. The work has the potential to further improve methods for the synthesis of carbon nanostructures and the development of high-performance computational tools in the field of nanotechnology.

Keywords: carbon nanostructures, plasma, modeling, particle simulation, parallel algorithms, distributed computing, dynamic load balancing.

Получено: 24.11.25

Образец цитирования

Калач А. В., Толстова И. С. Моделирование синтеза углеродных наноструктур модифицированным численным методом крупных частиц // Интеллектуальные системы в производстве. 2026. Т. 24, № 1. С. 26–34. DOI: 10.22213/2410-9304-2026-1-26-34.

For Citation

Kalach A.V., Tolstova I.S. [Modeling The Synthesis of Carbon Nanostructures Using a Modified Numerical Method of Large Particles]. *Intellektual'nye sistemy v proizvodstve*. 2026, vol. 24, no. 1, pp. 26-34 (in Russ.). DOI: 10.22213/2410-9304-2026-1-26-34.