



Н.И. Тарасов, В.О. Подрыга, С.В.  
Поляков, А.В. Тимаков

**Разработка цифровой  
веб-платформы для  
суперкомпьютерного моделирования  
напыления частиц на подложки**

***Рекомендуемая форма библиографической ссылки***

Тарасов Н.И., Подрыга В.О., Поляков С.В., Тимаков А.В. Разработка цифровой веб-платформы для суперкомпьютерного моделирования напыления частиц на подложки // Научный сервис в сети Интернет: труды XXIV Всероссийской научной конференции (19-22 сентября 2022 г., онлайн). — М.: ИПМ им. М.В.Келдыша, 2022. — С. 486-498.

<https://doi.org/10.20948/abrau-2022-37>

<https://keldysh.ru/abrau/2022/theses/37.pdf>

***Видеозапись выступления***

# **Разработка цифровой веб-платформы для суперкомпьютерного моделирования напыления частиц на подложки**

**Н.И. Тарасов, В.О. Подрыга, С.В. Поляков, А.В. Тимаков**

*ИПМ им. М.В. Келдыша РАН*

**Аннотация.** В работе рассматривается построение современной цифровой платформы для суперкомпьютерного моделирования задач напыления частиц на подложки. Предложен веб-подход, позволяющий сформировать единую пользовательскую систему для проведения полного цикла численного расчета, включающего конфигурацию прикладных приложений, их запуск на удаленных вычислительных ресурсах, мониторинг за прохождением задачи, анализ результатов, а также интерактивную визуализацию. При этом взаимодействие с суперкомпьютерами и кластерами реализуется посредством графического интерфейса, не требующего от компьютера пользователя наличия дополнительного программного обеспечения, кроме веб-браузера. Не менее важным преимуществом является возможность проведения многопользовательского вычислительного эксперимента, вытекающая из естественных принципов построения клиент-серверных платформ, при которой специалисты разных областей могут иметь доступ к актуальным данным, полученным в ходе моделирования. Данная цифровая веб-платформа была апробирована на вычислительных кластерах ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, кроме того с ее помощью проводится групповое обучение студентов МФТИ современным информационным технологиям. Данная работа посвящена обсуждению общей архитектуры, технологическому стеку и пользовательскому интерфейсу, полученному в результате.

**Ключевые слова:** суперкомпьютерное моделирование, цифровая платформа, веб-интерфейс

## **Development of digital web platform for supercomputer modeling of particle deposition on substrates**

**N.I. Tarasov, V.O. Podryga, S.V. Polyakov, A.V. Timakov**

*Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS*

**Abstract.** The work considers the construction of a modern digital platform for supercomputer modeling the problems of particles deposition on substrates. The web-based approach is proposed that makes it possible to form the unified user system for carrying out the full cycle of numerical calculation, including the configuration of applied applications, their launch on remote computing resources, monitoring of the task, analysis of the results, and interactive visualization. At the same time, the interaction with supercomputers and clusters is implemented through a graphical interface that does not require to have additional software, except for a web browser. Another advantage is the possibility of conducting a multi-user computational experiment, arising from the natural principles of building client-server platforms, in which specialists from different fields can access up-to-date data obtained during modeling. The digital web platform has been tested on KIAM clusters, and it is also used for group training of MIPT students in modern information technologies. This work is devoted to the discussion of the general architecture, the technological stack and the resulting user interface.

**Keywords:** supercomputer modeling, digital platform, web interface

Проблема напыления частиц на подложки входит в круг фундаментальных и прикладных задач нанотехнологии. В ее рамках актуально исследование математическими методами всех стадий процесса напыления, что позволит эффективно и экономно изготавливать наноматериалы и нанопокрyтия с заданными свойствами, использующиеся во многих отраслях промышленности. Вычислительное ядро, связанное с реализацией сеточных методов решения возникающих здесь задач механики сплошной среды, ориентировано изначально на применение мощных вычислительных кластеров и суперкомпьютеров. Оно предполагает работу исследователя с большими распределенными наборами данных, обработка которых также требует применения параллельных вычислений. В связи с этим целью настоящей работы является разработка специализированной веб-платформы для суперкомпьютерного моделирования процессов напыления в рамках различных физико-технических подходов.

Применение суперкомпьютерного моделирования в подобных исследованиях стало уже повсеместной практикой. Однако для достижения максимального эффекта от использования суперЭВМ необходима разработка многозадачных многопользовательских сред и сервисов. Последние в настоящее время разрабатываются в рамках облачных и веб-технологий. Практическая реализация таких сред предполагает создание удобного сетевого интерфейса пользователей и программных ядер, отвечающих за решение отдельных вычислительно емких задач прикладной направленности. Особое внимание при этом уделяется совместной работе пользователей над одним или несколькими проектами. В последнее время подобные программные среды получили название цифровых платформ, что связано с внедрением в них технологий

искусственного интеллекта. В классическом CFD-моделировании эти технологии используются на этапе анализа полученных численных результатов большого объема, то есть больших данных.

Выбирая концепцию создаваемой платформы, мы остановились на веб-решениях, которые в отличие от облачных технологий (имеется ввиду их вариант в виде инфраструктуры как услуги – IaaS) менее чувствительны к техническим параметрам конкретных компьютерных и суперкомпьютерных систем, менее затратны по срокам реализации и стоимости поддержки, но при этом поддерживают многоплатформенный и многопользовательский режим работы. К тому же веб-технологии не исключают возможности использования систем облачных вычислений при наличии стандартного или специализированного интерфейса доступа и становятся некоторой единой точкой взаимодействия для конечного пользователя. При этом допускается использование кластеров и суперкомпьютеров, не интегрированных в облачные системы (таких, например, как гибридные суперкомпьютеры ИПМ им. М.В. Келдыша РАН К-60 или К-100 [1]).

Выполнение конкретных расчетных задач традиционно было предложено реализовать с помощью запуска приложений в пакетном режиме. Такой подход позволяет гибко настраивать работу конкретных расчетных программ посредством формирования необходимых конфигурационных файлов и скриптов, которые можно запускать в локальном или удаленном режимах с помощью ssh-консоли. Подобная технология, реализуемая непосредственно пользователем, требует от него определенных знаний и навыков работы с терминалом, а также самостоятельного учета, мониторинга и анализа всех запущенных или завершившихся расчетов. Последнее фактически делает работу пользователя неэффективной, а иногда и просто невозможной. Для решения этой технической проблемы и создается интерактивная и интеллектуальная в определенном смысле веб-среда (веб-платформа), которая принимает на себя максимальное количество административных, технических и прочих трудоемких функций, а также предоставляет пользователю дружественное визуальное общение с большим количеством программ, данных и коллег по проектам.

Предлагаемая нами цифровая веб-платформа, схема которой изображена на рис. 1, представляет собой универсальный инструмент взаимодействия разработчиков и пользователей прикладных программных кодов с доступными им аппаратными средствами (от персональных компьютеров до рабочих станций и мощных вычислительных кластеров) посредством графического веб-интерфейса, поддерживающего следующие возможности:

- авторизация пользователей;
- проведение полного цикла компьютерного моделирования процесса напыления частиц, в том числе многопользовательского;
- возможность запуска заданий на удаленных суперкомпьютерных ресурсах;
- формирование базы данных расчетов и обеспечение доступа к их результатам;
- обеспечение возможностей анализа результатов.

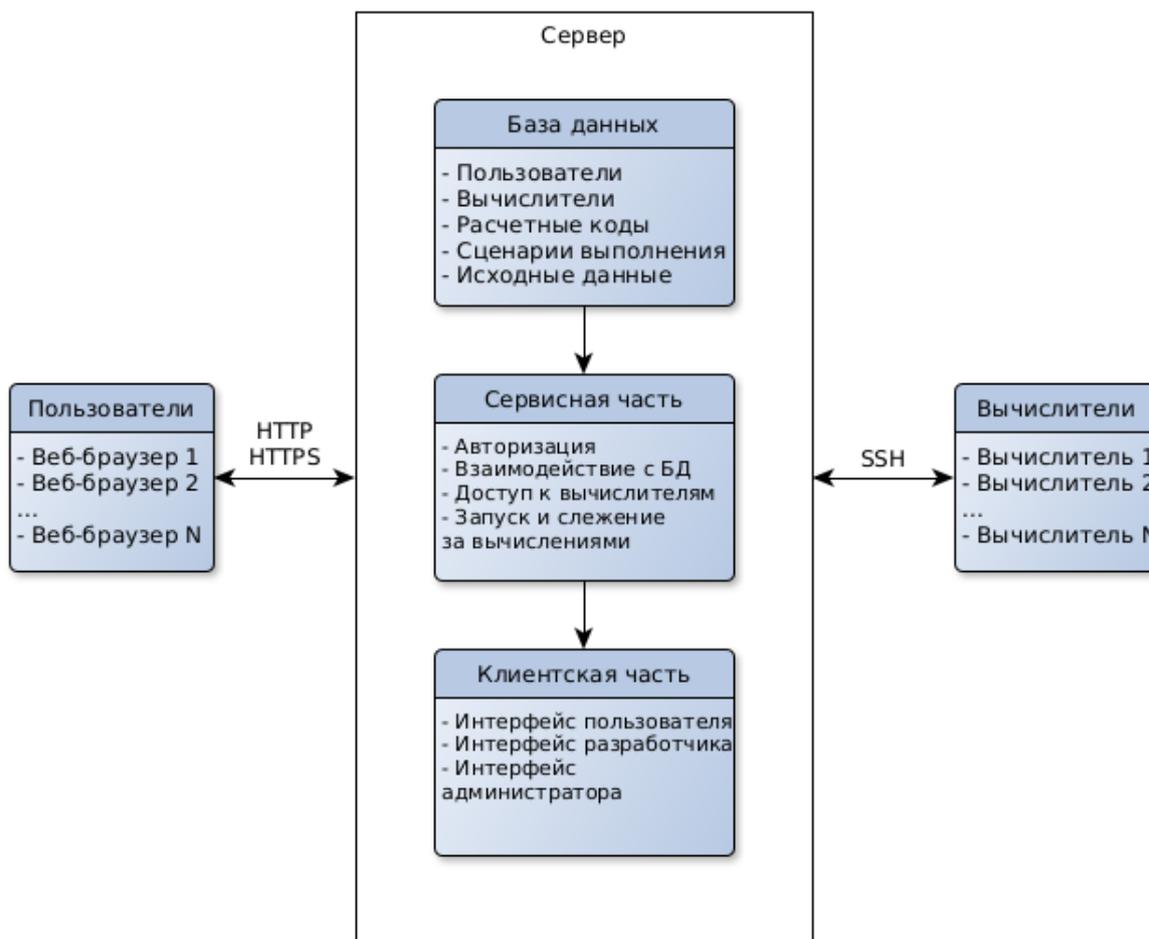


Рис. 1. Схема цифровой веб-платформы

Взаимодействие пользователей между собой заключается в следующем. Во-первых, это может быть совместная разработка кодов приложений, для чего используется система контроля версий и общие папки на сервере проекта. Во-вторых, это совместное проведение расчетов и обработка их результатов в рамках общего проекта. Такая возможность регулируется с помощью гибкой системы прав доступа к проекту и защиты от одновременного запуска расчетных программ с одинаковыми начальными данными из разных логинов. Отдельно отметим особую актуальность данного функционала, притекающую из практики

проведения комплексных вычислительных экспериментов. Так, например, рассмотрим многомасштабный подход при моделировании сложных физических процессов, часто включающий в себя классические модели механики сплошных сред, методы частиц и/или Монте-Карло, а также численный анализ свойств веществ и материалов на их основе (например, генерацию полуэмпирических уравнений состояния, расчет зависимостей материальных констант от термодинамических параметров и т.п.). Очевидно, проведение вычислительного эксперимента подобного объема и качества силами одного специалиста представляет собой трудоемкую задачу. Однако, при наличии возможности участия нескольких экспертов из различных прикладных областей, а также при использовании накопленных баз данных по свойствам веществ и материалов и решениям отдельных актуальных подзадач, проведение комплексных исследований в рамках выполнения совместных расчетных проектов становится достижимым и весьма эффективным решением.

Иллюстрацией реализации совместных расчетных проектов могут служить исследования ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, ОИЯИ и ИПЛИТ РАН в рамках разработки программного комплекса GIMM\_NANO [2]. Однако в этом решении еще не были задействованы в современном варианте ни облачные, ни веб-технологии. Тем не менее, объединение научных разработок вышеуказанных партнеров привело к существенному повышению качества научных исследований в области перспективных нанотехнологий.

Перейдем теперь к описанию работы пользователей предлагаемой цифровой веб-платформы.

После успешной авторизации пользователь, в соответствии с ролью (администратор, разработчик или обычный пользователь), получает доступ к разделам системы, которые можно разбить на следующие функциональные группы:

- проекты и расчеты, используемые обычными пользователями;
- приложения и сценарии, формируемые разработчиками;
- вычислители, доступные администраторам.

Подобное распределение пользователей по ролям видится необходимым как для разграничения областей ответственности, так и для обеспечения максимально эффективной их работы в соответствии со специализацией. Так, основной деятельностью обычного пользователя является проведение вычислений и анализ результатов компьютерного моделирования. При этом непосредственный доступ пользователя к кодам приложений, сценариям их работы и конкретным вычислителям ограничен возможностью получения справочной информации. Разработчики программного обеспечения заняты созданием новых и модификацией имеющихся приложений и сценариев, а также используют доступные вычислительные ресурсы с целью тестирования и адаптации кодов к тем

или иным архитектурам. Администраторы системы управляют аккаунтами пользователей, регистрируют в системе новые вычислительные ресурсы, подготавливают их к проведению пользователями масштабных вычислительных экспериментов, обеспечивают целостность и безопасность платформы в целом. Если все три роли будут совмещаться "в одних руках", неизбежно начнутся проблемы деградации платформы ввиду нехватки нужных компетенций и времени на оперативное реагирование на возникающие нештатные ситуации.

Основой численного эксперимента в рамках платформы является расчет, при доступе к странице которого пользователю предоставляются графические формы выбора вычислительных ресурсов и задания исходных данных, компонента запуска и слежения, список результатов моделирования. Генерация интерфейса происходит в соответствии с выбранным сценарием на основе метаописания – текстового файла, содержащего список используемых приложений, а также связывание управляющих параметров, файлов данных, логику и порядок исполнения. Прикладные приложения в системе также имеют метаописание, включающее в себя команды сборки и запуска, списки управляющих параметров, исходных данных и результатов исполнения.

Создание новых расчетов осуществляется на странице конкретного проекта, который позволяет каталогизировать и объединить некоторое их количество, задать общее описание.

Наш первый опыт в разработке цифровой веб-платформы [3] основывался на библиотеке Django [4] для языка программирования Python, предоставляющей полный набор инструментов для построения веб-сервисов, включающей, в том числе, ORM-интерфейс к базам данных и механизм шаблонных страниц. В процессе работы над сервисом выяснилось, что при использовании страниц-шаблонов теряется множество интерактивных возможностей, присущих веб-интерфейсам сегодня, что является следствием подхода, при котором подготовка страниц происходит на стороне сервера (Server Side Rendering – SSR). Для увеличения интерактивности все больше и больше приходилось полагаться на JavaScript, что в итоге вылилось в решение использовать SPA-технологии (Single Page Application) на базе библиотеки Vue.js [5].

В текущей разработке было принято решение полностью отказаться от Django на сервере, поскольку большая часть ее возможностей, касающихся SSR, оказалась не актуальна в рамках цифровой платформы, и перевести реализацию серверной части на JavaScript для единообразия кодовой базы. Более того, использование асинхронного подхода, являющегося естественным для данного языка программирования, существенно упростило задачи масштабирования, а также реализацию функций управления и мониторинга за пользовательскими заданиями. В

результате реализация текущей веб-платформы базируется на следующем стеке технологий:

1) серверная часть основана на использовании Node.js [6] с применением библиотеки express [7] для обеспечения безопасности, авторизации и маршрутизации, для взаимодействия с базой данных используется Sequelize ORM [8];

2) клиентская часть реализована с применением одностраничного (SPA) реактивного подхода посредством Vue.js, в качестве библиотеки компонентов применяется Quasar Framework [9];

3) клиент-серверное взаимодействие основано на веб-сокетах;

4) взаимодействие сервера с вычислительным ресурсом осуществляется с помощью протокола ssh;

5) анализ результатов расчетов, в том числе интерактивная визуализация, основан на применении ParaViewWeb [10-12];

6) файлы сценариев проектов и сценариев разрабатываются на языке Yaml [13].

В качестве примера работы первой версии веб-платформы приведем исследования в рамках проекта «Напыление». В его рамках возможно проведение расчетов нескольких прикладных задач. Одной из них является сверхзвуковое газодинамическое напыление отдельных металлических нанокластеров на подложку. В наших предыдущих работах по этой теме (см., например, [14, 15]) были представлены модель, численные алгоритмы и некоторые результаты параллельных расчетов и их постанализа. Однако для выполнения вышеуказанных расчетов необходимо было программно реализовать сложную цепочку вычислительных экспериментов. Она начиналась с генерации равновесных микро- и нанообъектов – столба азота микронных размеров и никелевого нанокластера. На основе этих данных генерировалось стартовое состояние системы газ-металл, в которой нанокластер погружен в неподвижный азот. Затем производился разгон газовой среды и формирование ударной волны, которая заставляла кластер двигаться в сторону подложки с нужной скоростью. На всех этапах такого моделирования использовались длительные параллельные вычисления. Переход от одного вычислительного эксперимента к другому производился пользователем "вручную". В частности, все расчеты сохранялись на дисках разных суперкомпьютеров, и их продолжение на очередной стадии требовало от пользователя переноса больших данных с одной вычислительной системы на другую. Большой проблемой было отслеживание качества решения на всех стадиях вычислений ввиду отсутствия универсальных средств постобработки и визуализации распределенных данных большого объема. Частично эти и другие задачи были решены с помощью разработанных нами ранее программных средств (см., [16, 17]). Однако полный цикл вычислений с минимальным участием

пользователя стал доступным только в рамках разработки представляемой цифровой веб-платформы.

В частности, хотелось бы отметить в качестве нового программного решения визуализацию распределенных данных сверхбольшого объема. Оно стало возможным с появлением пакета ParaViewWeb, который пока не стал традиционным средством визуального анализа в отличие от его классической параллельной версии. В рамках реализации представляемой веб-платформы удалось интегрировать этот пакет в общую систему управления платформы и, тем самым, обеспечить максимальную полноту его функционала и управляемость со стороны пользователя.

В качестве примера на Рис. 2 представлен этап визуализации рассчитанных на вычислительном кластере данных, представляющих собой распределения плотности в начальный и конечный моменты времени, описывающие процесс напыления на подложку. Наиболее значимым в данном примере является то, что такая возможность визуализации позволяет анализировать результаты во время расчета на выбранном суперкомпьютере (например, можно контролировать состояние кластера и его маршрут, проверять целостность, изменение температуры, формы и т.д.). Для этого требуется только доступ системы управления платформой к дисковому пространству этого суперкомпьютера, на котором сохраняются результаты вычислений.

Реализованное программное решение было апробировано на кластерах ИПМ им. М.В. Келдыша РАН при решении ряда задач вычислительной газо- и гидродинамики [18-21]. Эффективность его работы была подтверждена в период пандемии COVID-19, когда практически все участники проекта (порядка 10 человек) работали удаленно. Также с помощью разработанной учебной версии веб-платформы уже третий год реализуется проект, связанный с групповым обучением студентов МФТИ современным информационным технологиям (количество студентов в группах 12-15 вместе с преподавателем). При этом ограничением производительности веб-платформы является конкретный ресурс задействованных серверов проекта. Например, обычный веб-сервер легко справляется с одновременной работой 100 и более пользователей, выполняя одновременно до 30000 запросов. В представляемом решении основная нагрузка приходится не столько на обработку веб-запросов, сколько на сценарии работы прикладных сервисов, связанных с пред- и постобработкой больших данных. Поскольку все эти задачи выполняются на удаленных вычислительных ресурсах, то большая часть нагрузки с клиентской части компьютера пользователя и веб-сервера управления платформой снимается. Исключением пока является просмотр множества видеопотоков, инициированных несколькими пользователями.

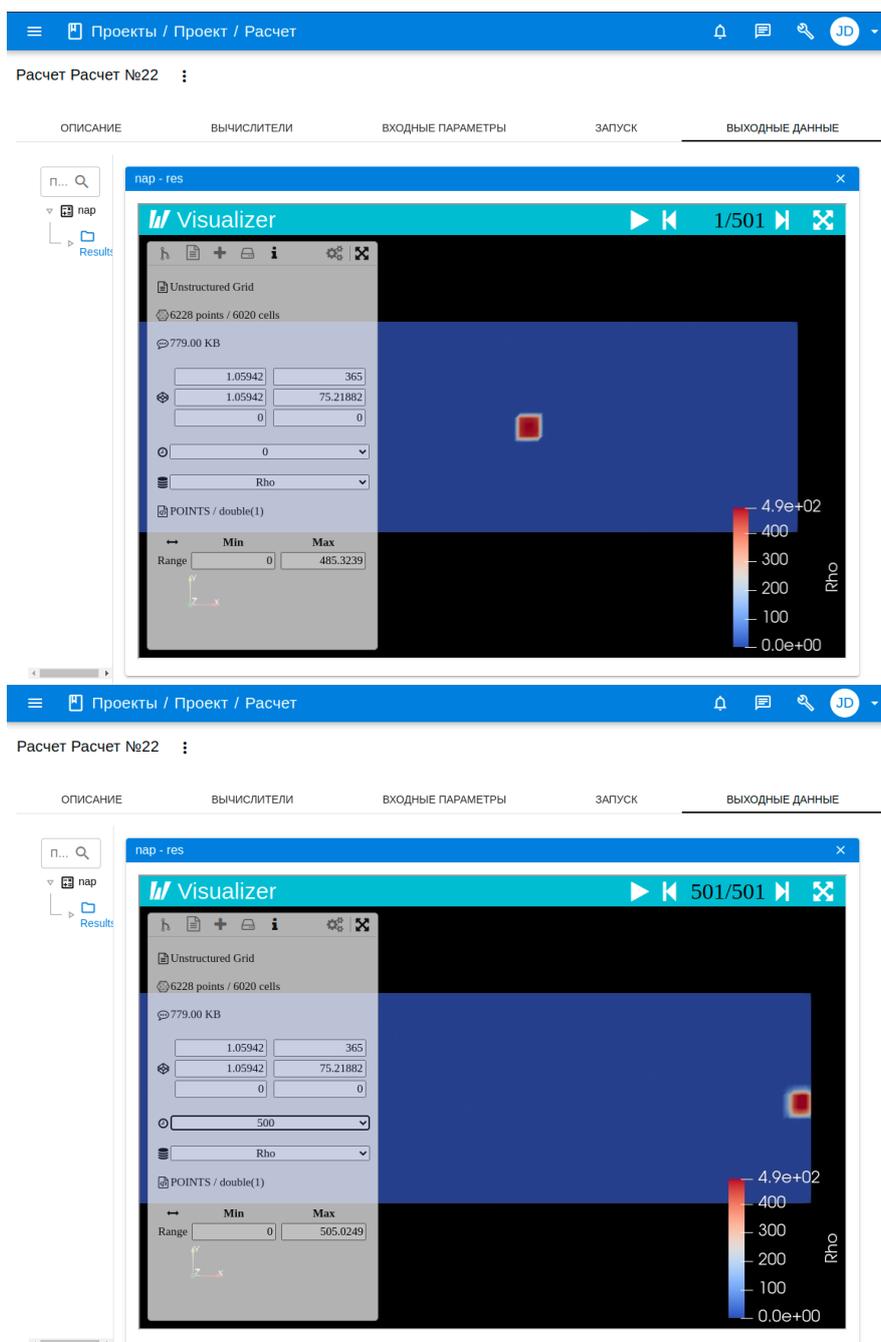


Рис. 2. Пример визуализации в рамках цифровой платформы

Подводя итог, отметим, что на основе доработки ранее созданных пробных решений удалось реализовать новую целевую версию веб-платформы, предназначенную для компьютерного и суперкомпьютерного моделирования задач напыления наночастиц на подложки и других связанных задач нанотехнологии. С ее помощью проведен ряд вычислительных экспериментов по напылению никелевых кластеров на подложки. Полученные результаты адекватны теоретическим представлениям об этом физическом процессе.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 21-71-20054.

### Литература

1. Center of Collective Usage of KIAM RAS. — <https://ckp.kiam.ru/?home>
2. Бондаренко А.А., Кононов Э.М., Косолапов О.А., Поляков С.В., Якобовский М.В. Программный комплекс GIMM\_NANO // Научный сервис в сети Интернет: все грани параллелизма: Труды Международной суперкомпьютерной конференции (23-28 сентября 2013 г., г. Новороссийск). — М.: Изд-во МГУ, 2013. — С. 333–337. — <http://agora.guru.ru/abrau2013/pdf/333.pdf>
3. Puzyrkov D.V., Podryga V.O., Polyakov S.V. Cloud service for HPC management: ideas and appliance // Lobachevskii Journal of Mathematics. — 2018. — V. 39, No. 9. — P. 1251–1261. — <https://doi.org/10.1134/S1995080218090172>
4. The web framework for perfectionists with deadlines | Django. — <https://www.djangoproject.com/>
5. Vue.js—The Progressive JavaScript Framework | Vue.js. — <https://vuejs.org/>
6. About | Node.js. — <https://nodejs.org/en/about/>
7. Express – Node.js web application framework. — <https://expressjs.com/>
8. Sequelize ORM. — <https://sequelize.org/>
9. Quasar Framework. — <https://quasar.dev/>
10. Web | ParaView. — <https://www.paraview.org/web/>
11. ParaViewWeb. — <http://kitware.github.io/paraviewweb/>
12. Visualizer. — <https://kitware.github.io/visualizer/>
13. The Official YAML Web Site. — <https://yaml.org/>
14. Поляков С.В., Подрыга В.О., Пузырьков Д.В., Кудряшова Т.А. Суперкомпьютерное молекулярное моделирование газодинамического напыления наночастиц на подложку // Суперкомпьютерные дни в России: Труды международной конференции (24-25 сентября 2018 г., г. Москва). — М.: Изд-во МГУ, 2018. — С. 782–792. — <http://russianscdays.org/files/pdf18/782.pdf>
15. Podryga V.O., Polyakov S.V. Multiscale mathematical modeling of the metal nanoparticles motion in a gas flow // In: Dimov I., Farago I., Vulkov L. (eds). Seventh International Conference on Finite Difference Methods. Theory and Applications. FDM 2018. Lecture Notes in Computer Science. — Cham: Springer, 2019. — V. 11386. — P. 387–394. — [https://doi.org/10.1007/978-3-030-11539-5\\_44](https://doi.org/10.1007/978-3-030-11539-5_44)
16. Puzyrkov D., Podryga V., Polyakov S., Iakobovskii M. KIAM\_JOB\_CONTROL task management environment and its application to cloud and GRID computing) // Selected Papers of the 7th International Conference Distributed Computing and Grid-technologies in Science and

- Education (GRID 2016), ed. by V. Korenkov, T. Zaikina, F. Nechaevskiy, July 4-9, 2016, Dubna, Russia. CEUR Workshop Proceedings. — 2017. V. 1787. — P. 416–422. — <http://ceur-ws.org/Vol-1787/416-422-paper-72.pdf>
17. Kornilina M.A., Podryga V.O., Polyakov S.V., Puzyrkov D.V., Yakobovskiy M.V. Cloud service for solution of promising problems of nanotechnology // *Supercomputing Frontiers and Innovations*. — 2017. — V. 4, No. 4. — P. 66–79. — <https://doi.org/10.14529/jsfi170405>
  18. Polyakov S.V., Podryga V.O., Kudryashova T.A. HPC simulation of non-linear processes in microsystems gas-metal // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. — 2020. — V. 41, No. 8. — P. 1554–1562. — <https://doi.org/10.1134/S1995080220080168>
  19. Podryga V.O., Polyakov S.V., Tarasov N.I. Developing of multiscale approach to HPC-simulation of multiphase fluid flows // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. — 2021. — V. 42, No. 11. — P. 2626–2636. — <https://doi.org/10.1134/S1995080221110160>
  20. Tarasov N., Karamzin Yu., Kudryashova T., Podryga V., Polyakov S. Computer modeling of air flows purification using sorption filters // *Journal of Physics: Conf. Series*. — 2021. — V. 2028. — Paper 012025 (7 p.). — <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2028/1/012025>
  21. Kudryashova T.A., Polyakov S.V., Tarasov N.I. Mathematical modelling of electrophysical water treatment // *Defect and Diffusion Forum*. — 2021. — V. 412. — P. 149–162. — <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.412.149>

## References

1. Center of Collective Usage of KIAM RAS. — <https://ckp.kiam.ru/?home>
2. Bondarenko A.A., Kononov Je.M., Kosolapov O.A., Poliakov S.V., Iakobovskii M.V. Programmnyi kompleks GIMM\_NANO // *Nauchnyi servis v seti Internet: vse grani parallelizma: Trudy Mezhdunarodnoi superkompiuternoi konferentsii (23-28 sentiabria 2013 g., g. Novorossiisk)*. — M.: Izd-vo MGU, 2013. — P. 333–337. — <http://agora.guru.ru/abrau2013/pdf/333.pdf>
3. Puzyrkov D.V., Podryga V.O., Polyakov S.V. Cloud service for HPC management: ideas and appliance // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. — 2018. — V. 39, No. 9. — P. 1251–1261. — <https://doi.org/10.1134/S1995080218090172>
4. The web framework for perfectionists with deadlines | Django. — <https://www.djangoproject.com/>
5. Vue.js—The Progressive JavaScript Framework | Vue.js. — <https://vuejs.org/>
6. About | Node.js. — <https://nodejs.org/en/about/>
7. Express – Node.js web application framework. — <https://expressjs.com/>

8. Sequelize ORM. — <https://sequelize.org/>
9. Quasar Framework. — <https://quasar.dev/>
10. Web | ParaView. — <https://www.paraview.org/web/>
11. ParaViewWeb. — <http://kitware.github.io/paraviewweb/>
12. Visualizer. — <https://kitware.github.io/visualizer/>
13. The Official YAML Web Site. — <https://yaml.org/>
14. Poliakov S.V., Podryga V.O., Puzyrkov D.V., Kudriashova T.A. Superkompiuternoe molekuliarnoe modelirovanie gazodinamicheskogo napyleniia nanochastits na podlozhku // Superkompiuternye dni v Rossii: Trudy mezhdunarodnoi konferentsii (24-25 sentiabria 2018 g., g. Moskva). — M.: Izd-vo MGU, 2018. — P. 782–792. — <http://russianscdays.org/files/pdf18/782.pdf>
15. Podryga V.O., Polyakov S.V. Multiscale mathematical modeling of the metal nanoparticles motion in a gas flow // In: Dimov I., Farago I., Vulkov L. (eds). Seventh International Conference on Finite Difference Methods. Theory and Applications. FDM 2018. Lecture Notes in Computer Science. — Cham: Springer, 2019. — V. 11386. — P. 387–394. — [https://doi.org/10.1007/978-3-030-11539-5\\_44](https://doi.org/10.1007/978-3-030-11539-5_44)
16. Puzyrkov D., Podryga V., Polyakov S., Iakobovskii M. KIAM\_JOB\_CONTROL task management environment and its application to cloud and GRID computing) // Selected Papers of the 7th International Conference Distributed Computing and Grid-technologies in Science and Education (GRID 2016), ed. by V. Korenkov, T. Zaikina, F. Nechaevskiy, July 4-9, 2016, Dubna, Russia. CEUR Workshop Proceedings. — 2017. V. 1787. — P. 416–422. — <http://ceur-ws.org/Vol-1787/416-422-paper-72.pdf>
17. Kornilina M.A., , Podryga V.O., Polyakov S.V., Puzyrkov D.V., Yakobovskiy M.V. Cloud service for solution of promising problems of nanotechnology // Supercomputing Frontiers and Innovations. — 2017. — V. 4, No. 4. — P. 66–79. — <https://doi.org/10.14529/jsfi170405>
18. Polyakov S.V., Podryga V.O., Kudryashova T.A. HPC simulation of non-linear processes in microsystems gas-metal // Lobachevskii Journal of Mathematics. — 2020. — V. 41, No. 8. — P. 1554–1562. — <https://doi.org/10.1134/S1995080220080168>
19. Podryga V.O., Polyakov S.V., Tarasov N.I. Developing of multiscale approach to HPC-simulation of multiphase fluid flows // Lobachevskii Journal of Mathematics. — 2021. — V. 42, No. 11. — P. 2626–2636. — <https://doi.org/10.1134/S1995080221110160>
20. Tarasov N., Karamzin Yu., Kudryashova T., Podryga V., Polyakov S. Computer modeling of air flows purification using sorption filters // Journal of Physics: Conf. Series. — 2021. — V. 2028. — Paper 012025 (7 p.). — <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2028/1/012025>

21. Kudryashova T.A., Polyakov S.V., Tarasov N.I. Mathematical modelling of electrophysical water treatment // Defect and Diffusion Forum. — 2021. — V. 412. — P. 149–162. — <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.412.149>