

НАНОМАТЕРИАЛЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ

NANOMATERIALS AND NANOTECHNOLOGY

Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2018. Т. 21, № 3. С. 175—181.
DOI: 10.17073/1609-3577-2018-3-175-181

УДК 544.022.341

Расчет теплопереноса в наноразмерных гетероструктурах

© 2018 г. К. К. Абгарян^{1,2,§}, И. С. Колбин¹

¹ *Вычислительный центр им. А. А. Дородницына Федерального исследовательского центра
«Информатика и управление» РАН,
ул. Вавилова, д. 40, Москва, 119333, Россия*

² *Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет),
Волоколамское шоссе, д. 4, Москва, 125993, Россия*

Аннотация. Проведен расчет температурного режима в наноразмерных бинарных гетероструктурах AlAs/GaAs. При моделировании теплопереноса в нанокompозитах важно учитывать, что рассеивание тепла в многослойных структурах при размерах слоев порядка длины свободного пробега носителей энергии (фононов и электронов) происходит не на кристаллической решетке, а на границах слоев (интерфейсах). Поэтому использование классических численных моделей, основанных на законе Фурье, сильно ограничено, так как дает существенные погрешности. Для получения более точных результатов. Использована модель, в которой распределение тепла предполагалось постоянным внутри слоя, при этом температура ступенчато изменялась на интерфейсах слоев. Для вычисления использован гибридный подход: конечно-разностный метод с неявной схемой для временной аппроксимации и бессеточная модель на основе набора радиально-базисных функций для пространственной аппроксимации. Расчет параметров базисов проведен через решение системы линейных алгебраических уравнений. При этом подбирали только весовые коэффициенты нейроэлементов, а центры и «ширины» были фиксированы. В качестве аппроксиматоров рассмотрен набор часто используемых базисных функций. Для увеличения скорости вычислений выполнена параллелизация алгоритма. Проведены замеры времени счета для оценки прироста производительности при использовании параллельной реализации метода.

Ключевые слова: численное моделирование, теплоперенос, наноразмерные гетероструктуры, интерфейс

Введение

В настоящее время наноразмерные гетероструктуры представляют высокий интерес, что обусловлено рядом уникальных свойств, которые демонстрируют материалы, основанные на них [1]. В частности, нанокompозитные материалы могут обеспечивать крайне высокие показатели теплопроводности, что является ключевым аспектом в эффективном рассеивании избыточной энергии. Это свойство материалов востребовано, например, в микроэлектронике [2, 3], так как отвод тепла яв-

ляется одним из важнейших факторов, определяющих плотность размещения полупроводниковых элементов, при которой проектируемое устройство может успешно функционировать. В связи с этим постоянно ведутся работы по построению эффективных моделей теплопереноса в подобных наноструктурах [4].

Исследования нанокompозитных материалов показали, что основными барьерами для теплопереноса в гетерогенных наноструктурах являются интерфейсы — граничные области между слоями [5]. Этот факт обусловлен тем, что в интерфейсах происходит основное рассеивание фононов [6—8], из-за чего характеристики теплопереноса существенно отличаются от однослойных материалов, где большая часть энергии рассеивается на кристаллической решетке.

Абгарян Каринэ Карленовна^{1,2,§} — канд. физ.-мат. наук, зав. отделом (1), зав. кафедрой (2), e-mail: kristal83@mail.ru; **Колбин Илья Сергеевич**¹ — канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник, e-mail: iskolbin@gmail.com

§ Автор для переписки

Одним из перспективных подходов для описания тепловых процессов в гетероструктурах в наномасштабе является применение бессеточных методов, в частности нейросетевых. Эти методы хорошо зарекомендовали себя в задачах с высокой размерностью, при расчете на сложной области, также нейросетевые методы успешно применяли для решения некорректных задач [9–12].

Ниже рассмотрено построение метода расчета теплопереноса в наноразмерных гетероструктурах на макроскопическом уровне. Использовали одномерную модель теплового баланса слоев, предложенную в работе [13]. Авторы работы [13] воспользовались неявной конечно-разностной схемой, в настоящей работе использован гибридный метод с конечно-разностным разбиением времени и нейросетевой аппроксимацией каждого слоя.

Постановка задачи

Требуется рассчитать распределение температуры многослойной структуры AlAs/GaAs. В работе [13] предложена модель, в которой температура постоянна внутри слоя, а все изменения происходят на границах (интерфейсах) слоев. Тепловой баланс задан как

$$C_i \rho_i h_i \frac{dT_i}{dt} = \sigma_{i-1} (T_{i-1} - T_i) - \sigma_i (T_i - T_{i+1}), \quad i = 1, \dots, N, \quad (1)$$

где C — теплоемкость; ρ — плотность; h — ширина слоя; σ — тепловая проводимость; N — число слоев; T — температура слоя. Внешние границы структуры изолированы, что достигается обнулением значений тепловой проводимости для первого и последнего слоя. Так как рассматривается начально-краевая задача, то задано начальное распределение температуры по слоям:

$$T_i(x, 0) = T_i^0(x). \quad (2)$$

Метод решения

Для расчета распределения температуры по слоям использовали гибридный конечно-разностный нейросетевой алгоритм. Применяли конечно-разностную разбивку по времени, а для получения приближенных решений в пространстве использовали нейросетевые аппроксиматоры. Выбор архитектуры сетей является достаточно обширным вопросом, в общем случае подбор оптимальной конфигурации требует глубокого изучения условий задачи [11, 14]. Использовали достаточно простые нейросетевые модели: сети радиально-базисных функций с одинаковым числом элементов и заданной базисной функцией.

Сначала рассмотрим конечно-разностное решение, так как оно будет использоваться в качестве эталонного для проверки точности полученных нейросетевых аппроксимаций. Для дискретизации производной температуры по времени t используем неявную конечно-разностную схему:

$$\frac{dT_i^{k+1}}{dt}(x) = \frac{T^{k+1}(x) - T^k(x)}{\tau}. \quad (3)$$

Подставим уравнение (3) в выражение (1), после элементарных преобразований можно составить трехдиагональную матрицу коэффициентов относительно температуры слоев T :

$$A_{i,i-1} = -q_{i-1}, A_{i,i} = 1 + q_{i-1} + q_i, A_{i,i+1} = -q_i, \quad (4)$$

где $q_i = \frac{\tau \sigma_i}{C_i \rho_i h_i}$.

Таким образом, температура на очередном временном шаге может быть вычислена как

$$T^{k+1} = A^{-1} T^k. \quad (5)$$

Теперь рассмотрим гибридный подход с конечно-разностным разбиением по времени и нейросетевым по пространству. На каждом временном слое рассчитываем приближенное решение в виде сети радиально-базисных функций [11, 12, 14]. Выход сети можно записать в следующем виде:

$$u(x) = \sum_{i=1}^M \omega_i \varphi_i(x), \quad (6)$$

$$\varphi_i(x) = \varphi(r_i(x), \varepsilon_i), \quad (7)$$

$$r_i(x) = (x - x_i^c), \quad (8)$$

где ω_i — весовые коэффициенты; ε_i — «ширина» базиса; x_c — координаты центров. Также, можно воспользоваться нормализацией [15–17], при этом в ряде случаев можно получить более высокую точность решения [9, 10, 15]. В этом случае выход аппроксимирующей сети будет иметь вид

$$u(x) = \frac{\sum_{i=1}^M \omega_i \varphi_i(x)}{\sum_{i=1}^M \varphi_i(x)}. \quad (9)$$

В рассматриваемой модели температура постоянна на слое и меняется скачкообразно на границах, поэтому для упрощения задачи учитывается только выход нейросети в центре каждого из слоев и предполагается, что данное значение идентично по

всей ширине слоя. В качестве радиально базисной функции были выбраны для дальнейшего сравнения результатов следующие функции:

– мультиквадрик [18, 19]

$$\varphi(x) = \sqrt{1 + \varepsilon^2 r^2}, \quad (10)$$

– функция Гаусса

$$\varphi(x) = \exp(-\varepsilon^2 r^2), \quad (11)$$

– обратный мультиквадрик

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{1 + \varepsilon^2 r^2}}. \quad (12)$$

В работе для подбора параметров использовали метод Канзы [20—22], т. е. центры и ширины задаются в начале алгоритма и остаются фиксированными на всем протяжении, а подбираются только весовые коэффициенты. Выпишем алгоритм для получения весов. Введем вспомогательные матрицы

$$B_{i,j} = A_{i,i-1}C_{i-1,j} + A_{i,i}C_{i,j} + A_{i,i+1}C_{i+1,j}; \quad (13)$$

$$C_{i,j} = \varphi_{i,j}.$$

В таком случае весовые коэффициенты на очередном временном шаге могут быть вычислены как

$$W^{k+1} = B^{-1}T^k; \quad (14)$$

$$T^{k+1} = CW^{k+1}.$$

Результаты расчетов

В качестве тестовой задачи для демонстрации работоспособности описываемого метода решения рассмотрена многослойная структура с $N = 1000$ чередующимися слоями AlAs/GaAs шириной $h = 50$ нм, одинаковой для всех слоев, заданы теплофизические параметры материалов (табл. 1).

Для решения использовали нормализованные и ненормализованные радиально-базисные аппрокси-

Таблица 1

Термоэлектрические параметры материалов
[Thermoelectric parameters of materials]

| Параметр | Слой | |
|------------------------------------|------------------|-------------------|
| | AlAs | GaAs |
| C , Дж/(кг · К) | 424 | 327 |
| ρ , кг/м ³ | 3730 | 5320 |
| σ , Вт/(м ² · К) | $9,6 \cdot 10^9$ | $1,92 \cdot 10^9$ |

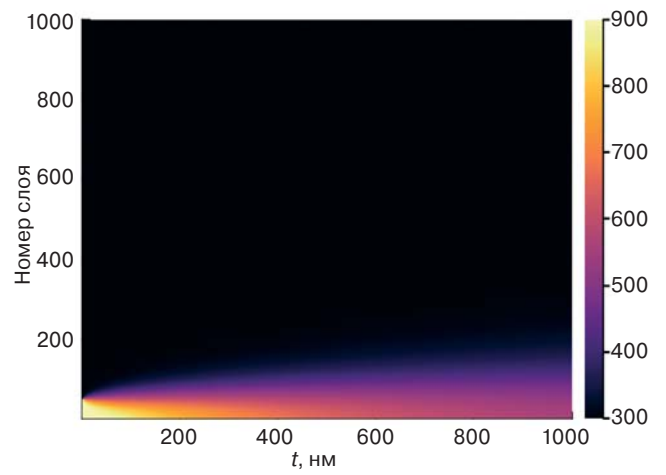


Рис. 1. Распределение тепла по слоям гетерогенной наноструктуры в процессе симуляции с использованием нормализованной радиально-базисной сети с гауссовым аппроксиматором

Fig. 1. Heat distribution over the layers of a heterogeneous nanostructure in the process of simulation using a normalized radial-basis network with a Gaussian approximator

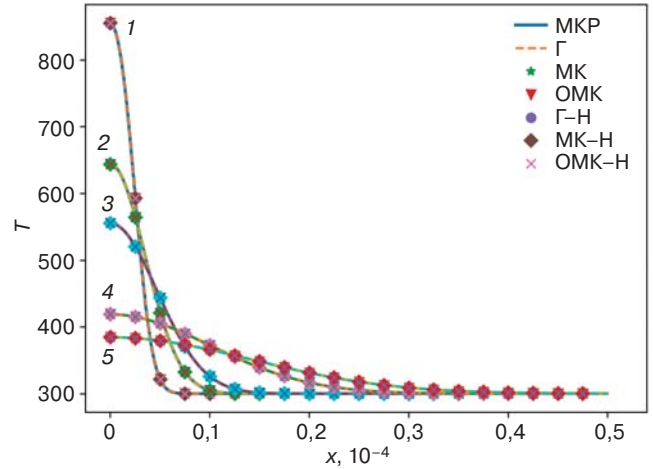


Рис. 2. Решения для выбранных аппроксиматоров для различных моментов времени t , нс: 1 — $t = 10$ нс; 2 — 50; 3 — 100; 4 — 500; 5 — 1000.

МКР — решение методом конечных разностей, далее решения сетями радиально-базисных функций; Г — с функцией Гаусса; МК — с мультиквадрик; ОМК — с обратным мультиквадрик; нормализованные аппроксимации — с добавлением окончания «Н»

Fig. 2. Solutions for selected approximators for different instants of time t , ns: (1) 10; (2) 50; (3) 100; (4) 500; (5) 1000.

(МКР) solution by the method of finite differences, then solutions by networks of radial basis functions; (Г) with Gauss function; (МК) with multiquadric; (ОМК) with reverse multiquadric; normalized approximations — with the addition of the ending «Н»

маторы, центры базисов размещались в центрах слоев наноструктуры: $x_i^c = (i - 0,5)h$. Ширины базисов были фиксированы: $\varepsilon_i = 1/h$. Временной шаг принимался как $\tau = 10^{-10}$ с. Для оценки точности полученных решений провели расчет конечно-разностным методом и вычислили среднеквадратичное отклонение между конечно-разностным и нейросетевым решением в слоях. На рис. 1 представлена динамика изменения теплового баланса по слоям для варианта с гауссовым аппроксиматором, выход нейросетевой

модели был нормализован. Для остальных случаев вид графика аналогичный.

Решения для различных моментов времени для выбранных аппроксиматоров приведены на рис. 2.

Из рис. 2 видно насколько близко полученные нейросетевые решения совпадают с эталонным, что говорит о высокой точности метода. Различные аппроксиматоры дали незначительно отличающиеся по точности решения, абсолютное среднеквадратичное отклонение относительно МКР-решения составляет порядка 10^{-5} К.

Параллелизация алгоритма

Для увеличения производительности метода была проведена параллелизация алгоритма. Использовали библиотеку OpenMP [23, 24]. Вычисления проводили на 2 стендах и персональном (домашнем) компьютере:

– Домашняя система на базе Intel Core i74800Q, 4 физических ядра, 8 виртуальных, 8GB RAM, ОС Linux Ubuntu LTS 18.04, компилятор GCC 7.3.0, версия OpenMP 4.5.

– Специализированная вычислительная система на базе IBM PowerNV 8335–GTB, 8 физических ядер, 128 виртуальных, 512GB RAM, ОС Ubuntu LTS 16.04, компилятор IBL XLC_R 13.01.0005.0001, версия OpenMP 4.0.

– Специализированная вычислительная система на базе IBM PowerNV 8335–GTB, 10 физических ядер, 160 виртуальных, 512GB RAM, ОС CentOS Linux release 7.3.1611 (AltArch), компилятор IBL XLC_R 13.01.0005.0001, версия OpenMP 3.1.

В качестве отправной точки использовали последовательную реализацию алгоритма, далее рас-

чет вели с увеличением числа потоков. Результаты сведены в табл. 2—4. В строке ускорение указано увеличение скорости счета относительно последовательного режима. Совместный результат представлен на рис. 3.

Из табл. 2—4 видно, что параллелизация существенно сократила время счета для вычислительных систем. Результаты для домашнего компьютера демонстрируют сублинейное ускорение от количества потоков, в том числе при использовании виртуальных ядер (последний столбец): производительность хоть и незначительно (~10 %), но выросла.

Для компьютеров Power8 все не так однозначно. Так, для второго стенда при увеличении числа потоков с 1 до 8 (число физических ядер) наблюдается стабильный сублинейный рост скорости (для 1—4 практически линейный). Далее, для 16 потоков скорость оказалась незначительно ниже, чем для 8 потоков, 32 и 64 потока демонстрируют ускорение. Версия с 128 потоками выполнялась аномально долго, сопоставимо с вариантом с 4 потоками. По-видимому, это связано с недостаточно тонкой настройке библиотеки OpenMP. Аналогичная ситуация наблюдается с третьим стендом: стабильный

Таблица 2

Время счета и ускорение на Intel i74800Q
[Count time and acceleration on the Intel i74800Q]

| Параметр | Число потоков | | | |
|----------------|---------------|--------|--------|--------|
| | 1 | 2 | 4 | 8 |
| Время счета, с | 350,04 | 202,18 | 154,41 | 139,58 |
| Ускорение | 1 | 1,73 | 2,27 | 2,51 |

Таблица 3

Время счета и ускорение на PowerNV 8335–GTB с 8 ядрами
[Counting time and acceleration on PowerNV 8335–GTB with 8 cores]

| Параметр | Число потоков | | | | | | | |
|----------------|---------------|---------|--------|--------|-------|--------|--------|--------|
| | 1 | 2 | 4 | 8 | 16 | 32 | 64 | 128 |
| Время счета, с | 198,997 | 101,793 | 55,344 | 34,494 | 35,47 | 30,245 | 28,303 | 50,862 |
| Ускорение | 1 | 1,955 | 3,59 | 5,769 | 5,610 | 6,579 | 7,03 | 3,912 |

Таблица 4

Время счета и ускорение на PowerNV 8335–GTB с 10 ядрами
[Counting time and acceleration on PowerNV 8335–GTB with 10 cores]

| Параметр | Число потоков | | | | | | | | | | |
|----------------|---------------|--------|-------|-------|------|------|-------|-------|-------|-------|-------|
| | 1 | 2 | 4 | 8 | 10 | 16 | 32 | 64 | 80 | 128 | 160 |
| Время счета, с | 202,37 | 114,41 | 56,64 | 39,31 | 30,7 | 39,1 | 38,95 | 31,69 | 26,11 | 36,05 | 73,38 |
| Ускорение | 1 | 1,769 | 3,57 | 5,14 | 6,59 | 5,17 | 5,2 | 6,39 | 7,75 | 5,61 | 2,76 |

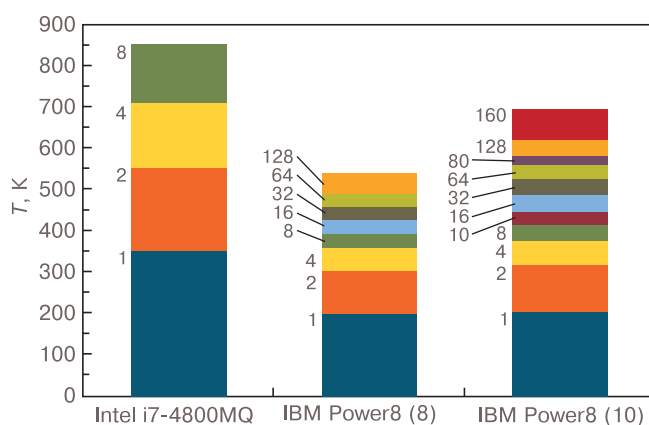


Рис. 3. Изменение времени счета в зависимости от числа потоков (чем короче полоска, тем быстрее)

Fig. 3. Change in counting time depending on the number of flows (the shorter the bar, the faster)

рост производительности, если число потоков не превышает число физических ядер, и неоднозначное поведение при дальнейшем увеличении числа потоков.

Из рис. 3 видно, что специализированные вычислительные платформы существенно быстрее домашнего компьютера на рассматриваемой задаче, особенно при использовании большого числа ядер. Максимальная производительность Power8 стенов была достигнута при расчете в 64 потока для второго стенов с 8-ми физическими ядрами и в 80 потоков для третьего стенов.

Заключение

Рассмотрен гибридный конечно-разностный нейросетевой метод для расчета теплового режима гетерогенных наноструктур. Продемонстрирована высокая точность алгоритма для различных радиально-базисных аппроксиматоров. Для увеличения скорости счета реализована параллелизация метода. Показано, что с использованием многоядерных систем можно добиться существенного роста производительности. Отмечено, что при задействовании виртуальных ядер компьютеров не обязательно происходит ускорение.

Библиографический список

1. Njuguna J., Pielichowski K. Polymer nanocomposites for aerospace applications: properties // *Adv. Eng. Mater.* 2003. V. 5, Iss. 11. P. 769—778. DOI: 10.1002/adem.200310101
2. Endo M., Strano M. S., Ajayan P. M. Potential applications of carbon nanotubes // In: *Carbon Nanotubes. Advanced Topics in the Synthesis, Structure, Properties and Applications* / (Eds.) A. Jorio, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus. Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 2008. P. 13—62. DOI: 10.1007/978-3-540-72865-8_2
3. Zweben C. Advances in composite materials for thermal management in electronic packaging // *JOM*. 1998. V. 50, Iss. 6. P. 47—51. DOI: 10.1007/s11837-998-0128-6
4. Nitin Mehra, Liwen Mu, Tuo Ji, Xutong Yang, Jie Kong, Junwei Gu, Jiahua Zhu. Thermal transport in polymeric materials and across composite interfaces // *Appl. Mater. Today*. 2018. V. 12. P. 92—130. DOI: 10.1016/j.apmt.2018.04.004

5. Norris P. M., Le N. Q., Baker C. H. Tuning phonon transport: from interfaces to nanostructures // *J. Heat Transfer*. 2013. V. 135, Iss. 6. P. 061604. DOI: 10.1115/1.4023584
6. Tavman I. H., Akinci H. Transverse thermal conductivity of fiber reinforced polymer composites // *Int. Commun. Heat Mass Transfer*. 2000. V. 27, Iss. 2. P. 253—261. DOI: 10.1016/S0735-1933(00)00106-8
7. Kochetov R., Korobko A. V., Andritsch T., Morshuis P. H. F., Picken S. J., Smit J. J. Modelling of the thermal conductivity in polymer nanocomposites and the impact of the interface between filler and matrix // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2011. V. 44, N 39. P. 395401. DOI: 10.1088/0022-3727/44/39/395401
8. Zeng L., Chiloyan V., Huberman S., Maznev A. A., Peraud J.-P. M., Hadjiconstantinou N. G., Nelson K. A., Chen G. Monte Carlo study of non-diffusive relaxation of a transient thermal grating in thin membranes // *Appl. Phys. Lett.* 2016. V. 108, Iss. 6. P. 063107. DOI: 10.1063/1.4941766
9. Vasilyev A. N., Kolbin I. S., Reviznikov D. L. Meshfree computational algorithms based on normalized radial basis functions / In: L. Cheng, Q. Liu, A. Ronzhin (Eds). *Advances in neural networks – ISSN 2016. Lecture Notes in Computer Science*. Springer International Publishing, 2016. V. 9719. P. 583—591. DOI: 10.1007/978-3-319-40663-3_67
10. Колбин И. С., Ревизников Д. Л. Решение задач математической физики с использованием нормализованных радиально-базисных сетей // *Нейрокомпьютеры: разработка, применение*. 2012. № 2. С. 12—19.
11. Васильев А. Н., Тархов Д. А. Нейросетевое моделирование. Принципы, алгоритмы, приложения. СПб.: Изд-во Политех. ун-та, 2009. 528 с.
12. Chen W. New RBF Collocation Methods and Kernel RBF with Applications / In: M. Griebel, M. A. Schweitzer (Eds.). *Meshfree Methods for Partial Differential Equations. Lecture Notes in Computational Science and Engineering*. Berlin; Heidelberg: Springer, 2003. V. 26. P. 75—86. DOI: 10.1007/978-3-642-56103-0_6
13. Воробьев Д. А., Хвесюк В. И. Метод расчета нестационарного нагрева наноструктур // *Наука и образование*. 2013. С. 541—550. DOI: 10.7463/0913.0617255
14. Haykin S. S. *Neural Networks: A Comprehensive Foundation*. Prentice-Hall, 1999. 874 p.
15. Benaim M. On the functional approximation with normalized Gaussian units // *Neural Computation*. 1994. V. 6, Iss. 2. P. 319—333. DOI: 10.1162/neco.1994.6.2.319
16. Bugmann G. Normalized Gaussian radial basis function networks // *Neurocomputing*. 1998. V. 20, N 1–3. P. 97—110. DOI: 10.1016/S0925-2312(98)00027-7
17. Bugmann G., Koay K. L., Barlow N., Phillips M., Rodney D. Stable encoding of robot trajectories using normalised radial basis functions: Application to an autonomous wheelchair // *Proc. 29th Int. Symposium on Robotics (ISR)*. Birmingham (UK), 1998. P. 232—235.
18. Hardy R. L. Multiquadric equations of topography and other irregular surfaces // *J. Geophysical Research*. 1971. V. 76, N 8. P. 1905—1915. DOI: 10.1029/JB076i008p01905
19. Hardy R. L. Theory and applications of the multiquadric-biharmonic method 20 years of discovery 1968–1988 // *Computers & Mathematics with Applications*. 1990. V. 19, N 8–9. P. 163—208. DOI: 10.1016/0898-1221(90)90272-L
20. Kansa E. J. Multiquadrics — A scattered data approximation scheme with applications to computational fluid-dynamics — I surface approximations and partial derivative estimates // *Computers & Mathematics with Applications*. 1990. V. 19, N 8–9. P. 127—145. DOI: 10.1016/0898-1221(90)90270-T
21. Kansa E. J. Multiquadrics — A scattered data approximation scheme with applications to computational fluid-dynamics — II solutions to parabolic, hyperbolic and elliptic partial differential equations // *Computers & Mathematics with Applications*. 1990. V. 19, N 8–9. P. 147—161. DOI: 10.1016/0898-1221(90)90271-K
22. Sarra S. A., Kansa E. J. Multiquadric Radial Basis Function Approximation Methods for the Numerical Solution of Partial Differential Equations // *Advances in Computational Mechanics*. 2009. V. 2. URL: <http://www.techscience.com/acm/2009/v2.html> (дата обращения: 20.12.2016).

23. Honghoon Jang, Anjin Park, Keechul Jung. Neural network implementation using CUDA and OpenMP // *Digital Image Computing: Techniques and Applications*. 2008. DOI: 10.1109/DICTA.2008.82

24. Cramer T., Schmidl D., Klemm M., an Mey D. OpenMP programming on Intel® Xeon Phi™ coprocessors: An early performance comparison // *Many-core Applications Research Community Symposium*. Aachen (Germany), 2012.

Работа выполнена с использованием ЦКП ФИЦ ИУ РАН и ДВО РАН.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ по гранту № 16-08-01178 А и гранту № 18-29 03100 мк.

Статья поступила в редакцию 11 декабря 2018 г.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = *Materials of Electronics Engineering*. 2018, vol. 21, no. 3, pp. 175—181. DOI: 10.17073/1609-3577-2018-3-175-181

Calculation of heat transfer in nanoscale heterostructures

K. K. Abgarian^{1,2,*}, I. S. Kolbin¹

¹ *Dorodnicyn Computing Centre, Federal Research Center «Computer Science and Control» of Russian Academy of Sciences, 40 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia*

² *Moscow Aviation Institute (National Research University), 4 Volokolamskoe Shosse, Moscow 125993, Russia*

Abstract. The article discusses the calculation of the temperature regime in nanoscale AlAs/GaAs binary heterostructures. When modeling heat transfer in nanocomposites, it is important to take into account that heat dissipation in multilayer structures with layer sizes of the order of the mean free path of energy carriers (phonons and electrons) occurs not at the lattice, but at the layer boundaries (interfaces). In this regard, the use of classical numerical models based on the Fourier law is limited, because it gives significant errors. To obtain more accurate results, we used a model in which the heat distribution was assumed to be constant inside the layer, while the temperature was stepwise changed at the interfaces of the layers. A hybrid approach was used for the calculation: a finite-difference method with an implicit scheme for time approximation and a mesh-free model based on a set of radial basis functions for spatial approximation. The calculation of the parameters of the bases was carried out through the solution of the systems of linear algebraic equations. In this case, only weights of neuroelements were selected, and the centers and «widths» were fixed. As an approximator, a set of frequently used basic functions was considered. To increase the speed of calculations, the algorithm was parallelized. Calculation times were measured to estimate the performance gains using the parallel implementation of the method.

Keywords: numerical simulation, heat transfer, nanoscale heterostructures, interface

References

1. Njuguna J., Pielichowski K. Polymer nanocomposites for aerospace applications: properties. *Adv. Eng. Mater.*, 2003, vol. 5, no. 11, pp. 769—778. DOI: 10.1002/adem.200310101
2. Endo M., Strano M. S., Ajayan P. M. Potential applications of carbon nanotubes. In: *Carbon Nanotubes. Advanced Topics in the Synthesis, Structure, Properties and Applications*. Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 2008, pp. 13—62. DOI: 10.1007/978-3-540-72865-8_2
3. Zweben C. Advances in composite materials for thermal management in electronic packaging. *JOM*, 1998, vol. 50, no. 6, pp. 47—51. DOI: 10.1007/s11837-998-0128-6
4. Nitin Mehra, Liwen Mu, Tuo Ji, Xutong Yang, Jie Kong, Junwei Gu, Jiahua Zhu. Thermal transport in polymeric materials and across composite interfaces. *Appl. Mater. Today*, 2018, vol. 12, pp. 92—130. DOI: 10.1016/j.apmt.2018.04.004
5. Norris P. M., Le N. Q., Baker C. H. Tuning phonon transport: from interfaces to nanostructures. *J. Heat Transfer*, 2013, vol. 135, no. 6, p. 061604. DOI: 10.1115/1.4023584
6. Tavman I. H., Akinci H. Transverse thermal conductivity of fiber reinforced polymer composites. *Int. Commun. Heat Mass Transfer*, 2000, vol. 27, no. 2, pp. 253—261. DOI: 10.1016/S0735-1933(00)00106-8
7. Kochetov R., Korobko A. V., Andritsch T., Morshuis P. H. F., Picken S. J., Smit J. J. Modelling of the thermal conductivity in polymer nanocomposites and the impact of the interface between filler and matrix. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2011, vol. 44, no. 39, p. 395401. DOI: 10.1088/0022-3727/44/39/395401
8. Zeng L., Chiloyan V., Huberman S., Maznev A. A., Peraud J.-P. M., Hadjiconstantinou N. G., Nelson K. A., Chen G. Monte Carlo study of non-diffusive relaxation of a transient thermal grating in thin membranes. *Appl. Phys. Lett.*, 2016, vol. 108, no. 6, p. 063107. DOI: 10.1063/1.4941766
9. Vasilyev A. N., Kolbin I. S., Reviznikov D. L. Meshfree computational algorithms based on normalized radial basis functions. In: *Advances in neural networks – ISNN 2016. Lecture Notes in Computer Science*. Springer International Publishing, 2016, vol. 9719, pp. 583—591. DOI: 10.1007/978-3-319-40663-3_67
10. Kolbin I. S., Reviznikov D. L. The solution of problems of mathematical physics using normalized radial basis networks. *Neurocomputers*, 2012, no. 2, pp. 12—19. (In Russ.)
11. Vasilev A. N., Tarkhov D. A. *Neiroseteovoe modelirovanie. Printsipy, algoritmy, prilozheniya* [Neural network modelling principles, algorithms, applications]. St. Petersburg: Izdatel'stvo Politehnicheskogo universiteta, 2009, 528 p. (In Russ.)
12. Chen W. New RBF Collocation Methods and Kernel RBF with Applications. In: *Meshfree Methods for Partial Differential Equations. Lecture Notes in Computational Science and Engineering*. Berlin; Heidelberg: Springer, 2003, vol. 26, pp. 75—86. DOI: 10.1007/978-3-642-56103-0_6
13. Vorob'ev D. A., Hvesyuk V. I. Calculation method for non-stationary heating of nano-structures. *Science and Education of Bauman MSTU*, 2013, pp. 541—550. (In Russ.). DOI: 10.7463/0913.0617255
14. Haykin S. S. *Neural Networks: A Comprehensive Foundation*. Prentice-Hall, 1999, 874 p.
15. Benaïm M. On the functional approximation with normalized Gaussian units. *Neural Computation*, 1994, vol. 6, no. 2, pp. 319—333. DOI: 10.1162/neco.1994.6.2.319

Information about authors:

Karine K. Abgarian^{1,2,*}: Cand. Sci. (Phys.-Math.), Head of the Department (1,2) (kristal83@mail.ru); **Ilya S. Kolbin¹:** Cand. Sci. (Phys.-Math.), Researcher (iskolbin@gmail.com)

* Corresponding author

16. Bugmann G. Normalized Gaussian radial basis function networks. *Neurocomputing*, 1998, vol. 20, no. 1–3, pp. 97–110. DOI: 10.1016/S0925-2312(98)00027-7

17. Bugmann G., Koay K. L., Barlow N., Phillips M., Rodney D. Stable encoding of robot trajectories using normalised radial basis functions: Application to an autonomous wheelchair. *Proc. 29th Int. Symposium on Robotics (ISR)*. Birmingham (UK), 1998, pp. 232–235.

18. Hardy R. L. Multiquadric equations of topography and other irregular surfaces. *J. Geophysical Research*, 1971, vol. 76, no. 8, pp. 1905–1915. DOI: 10.1029/JB076i008p01905

19. Hardy R. L. Theory and applications of the multiquadric-biharmonic method 20 years of discovery 1968–1988. *Computers & Mathematics with Applications*, 1990, vol. 19, no. 8–9, pp. 163–208. DOI: 10.1016/0898-1221(90)90272-L

20. Kansa E. J. Multiquadrics — A scattered data approximation scheme with applications to computational fluid-dynamics — I surface approximations and partial derivative estimates. *Computers & Mathematics with Applications*, 1990, vol. 19, no. 8–9, pp. 127–145. DOI: 10.1016/0898-1221(90)90270-T

21. Kansa E. J. Multiquadrics — A scattered data approximation scheme with applications to computational fluid-dynamics — II solutions to parabolic, hyperbolic and elliptic partial differential

equations. *Computers & Mathematics with Applications*, 1990, vol. 19, no. 8–9, pp. 147–161. DOI: 10.1016/0898-1221(90)90271-K

22. Sarra S. A., Kansa E. J. Multiquadric Radial Basis Function Approximation Methods for the Numerical Solution of Partial Differential Equations. *Advances in Computational Mechanics*, 2009, vol. 2. URL: <http://www.techscience.com/acm/2009/v2.html> (accessed: 20.12.2016).

23. Honghoon Jang, Anjin Park, Keechul Jung. Neural network implementation using CUDA and OpenMP // *Digital Image Computing: Techniques and Applications*. 2008. DOI: 10.1109/DICTA.2008.82

24. Cramer T., Schmidl D., Klemm M., an Mey D. OpenMP programming on Intel® Xeon Phi™ coprocessors: An early performance comparison. *Many-core Applications Research Community Symposium*. Aachen (Germany), 2012.

Acknowledgments. *This work was performed using the Shared Use Center of the Federal Research Center «Computer Science and Control» of the Russian Academy of Sciences and the Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences.*

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research under grant No. 16-08-01178 A and grant No. 18-29 03100 мк.

Received December 11, 2018

* * *