

ИЕРАРХИЧЕСКАЯ СИСТЕМА МОДЕЛИРОВАНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ НА БАЗЕ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОЙ КОНФИГУРАЦИИ СКИФ К-1000

В.В. Баркалин, С.В. Медведев, В.В. Нелаев, П.А. Случак, С.Н. Юркевич

Расчет свойств материалов, прогноз ресурсов и надежности конструкций и деталей требуют максимально полной диагностики их состояния. Традиционно используемые на промышленных предприятиях средства измерений обеспечивают определение механических и физико-химических свойств образцов макроскопического размера при пространственном разрешении в лучшем случае на уровне нескольких микрон. При этом время одного измерения с учетом длительности последующей обработки данных может достигать десятков минут. Учитывая существенную роль технологической и эксплуатационной наследственности свойств материалов и тот факт, что процессы износа, разрушения и восстановления в материалах имеют характерные размеры порядка микро- и нанометров и характерные времена процессов порядка наносекунд, очевидно, что состояния исследуемых материалов и самой детали оказываются практически ненаблюдаемыми при использовании традиционных методов и средств диагностики.

Выход из такого положения уже предложен в микро- и нанотехнологии и заключается в согласованном развитии средств диагностики и компьютерного моделирования деталей и процессов их обработки. В этой связи одним из наиболее перспективных и практически значимых направлений является разработка материалов с заранее заданными функциональными свойствами, включая расширение функциональных возможностей технологически освоенных материалов. Функциональные свойства таких материалов формируются в микро- и нано-метровом пространственном масштабе. С физико-химической точки зрения такие материалы и структуры относятся к области наноструктурированных систем, поскольку под нанотехнологией обычно понимается как отрасль науки и техники, объектом которой являются структуры, функции и процессы, основанные на использовании материалов, свойства которых определяются их структурой на пространственных масштабах 1 - 100 нм. Фундаментальной трудностью нанотехнологии является тот факт, что наноустройства настолько малы, что на них трудно точно воздействовать, и слишком велики для использования точных химических методов типа геной инженерии. В этой связи особую важность приобретают методы компьютерного моделирования наносистем, которые должны быть достаточно быстрыми и точными для корректного прогноза структуры и свойств наноструктурированных материалов при внешних воздействиях, поскольку оптимизация наноматериалов, наноструктур и нанотехнологий включает исследование свойств широкого круга веществ в многообразных физических условиях и химическом окружении. Исключительно экспериментальный подход к решению указанных задач практически себя исчерпал как ввиду огромного числа подлежащих исследованию соединений и фазовых состояний, так и по экономическим соображениям. В качестве альтернативы экспериментальным исследованиям в микро- и нанотехнологии развиваются методы компьютерного моделирования на базе высокопроизводительных вычислительных систем.

В применении к наноразмерным системам подход на основе моделирования имеет принципиальные трудности. В таких системах отсутствует дальний порядок, свойственный кристаллам и позволяющий уменьшить число независимых степеней свободы системы. С другой стороны, ближний порядок, характерный для жидкостей, не позволяет определить все функциональные свойства таких материалов. Следует учитывать также технические трудности, связанные с моделированием на атомном уровне макрообъектов. Так, в кубе вещества со стороной 100 нм содержится примерно 10^7 атомов. Прямое моделирование таких систем в приближении молекулярной динамики и, тем более, квантовой механики затруднительно даже с использованием современной суперкомпьютерной техники. В связи с этим представляется необходимым использование иерархического многомасштабного подхода [1]. При этом на каждом нижнем уровне вычисляются параметры и переменные, необходимые для построения моделей верхнего уровня. Цели, достигаемые на верхнем уровне иерархического моделирования, тем самым определяют задачи моделирования на нижних уровнях. Таким образом, выстраивается согласованная иерархия моделей, направленная на "сквозное" моделирование систем от уровня конструкции и поведения конечного изделия вплоть до атомно-молекулярного уровня. Следует отметить, что прикладное и промышленное значение имеет именно такой "сквозной" подход, позволяющий снизить затраты на проведение многочисленных экспериментальных исследований.

Предлагаемая иерархическая система моделирования на базе известных и доступных пакетов, допускающих параллельную вычислительную реализацию, весьма актуальна и может быть реализована с использованием кластерных высокопроизводительных мультипроцессорных вычислительных систем. При этом верхний уровень

определяет задачи моделирования на нижнем уровне, а используемые модели образуют иерархию принятия решений. Уровни рассматриваемой иерархии моделей свойств материалов представлены в Таблице 1.

Таблица 1

Уровни иерархического моделирования физических процессов и свойств материалов

№	Название уровня, основные уравнения для описания объектов	Пространственно-временные масштабы	Количество атомов в моделируемой системе	Элемент уровня	Параметры, вычисляемые на данном уровне	Программное обеспечение
1	Конструкционный Уравнения теории систем	1 мм - 1 м 1 мс - 1 год	$\cong 10^{23}$	Деталь, компонент системы	Долговременное поведение, передаточные функции, анализ надежности	MATLAB+ SIMULINK
2	Сплошная среда Уравнения баланса, макроскопические уравнения Максвелла	500 нм - 1 мм 1 мкс - 100 с	$10^6 - 10^9$	Элемент сплошной среды	Волновые процессы в элементах, макроскопические процессы в материалах	Пакеты ANSYS, LS DYNA и др.
3	Мезоскопический Уравнения сплошной среды с источниками мелко-масштабных и крупномасштабных флуктуаций	100 нм - 100 мкм 1 нс - 1 с	$10^6 - 10^9$	Зерна, глобулы, псевдоатомы, гранулы	Вязкость, теплопроводность, коэффициенты трения, модули упругости, пьезомодули, проницаемости неоднородного вещества, фазовые диаграммы	Разрабатывается
4	Молекулярно-динамический Уравнения классической механики	1 нм - 200 нм 1 пс - 100 нс	$10^6 - 10^9$	Многоатомный кластер, Моделируемый кристаллит	Кинетические коэффициенты, уравнения состояния, усредненные по ячейке величины, равновесная структура, фазовые переходы, неравновесные процессы	TINKER, HyperChem, NWChem
	Кинетический Уравнение Лиувилля	1 нм - 10 мкм 1 пс - 10 мкс	$10^2 - 10^9$			Функция распределения или матрица плотности атомов
5	Квантово-механический Уравнение Шредингера	0.1 - 20 Å 1 - 1000 фс	$10^1 - 10^2$	Молекула, элементарная ячейка, кластер	Заряды атомных остовов, потенциалы межатомного взаимодействия	Модели <i>ab initio</i> , методы молекулярных орбиталей, пакеты GAMESS, VASP, NWChem

Моделирование на квантово-механическом уровне осуществляется для малых кластеров с числом атомов 10-100, определяющих существование возможных в материале фаз. Описание моделируемого объекта строится на языке волновых функций и заданного гамильтониана системы (изолированный кластер). Целевыми функциями являются электронный энергетический спектр, собственные функции и плотность состояний изолированного кластера при фиксированном положении ядер, потенциальная энергия системы с учетом электронно-ядерных подсистем.

На квантово-статистическом уровне используются модели, учитывающие окружение кластеров. Кластер описывается статистическим оператором, усредненным по переменным его окружения. На кинетическом уровне исследуется эволюция квантовых неравновесных систем, состоящих из сотен кластеров, в нестационарных внешних полях. В качестве альтернативы кинетическому уровню используются методы молекулярной динамики для атомов, рассматриваемых как классические частицы. На основе классических уравнений молекулярной динамики становится возможным рассматривать системы, насчитывающие 1000 и более атомов (до 1 млн.) в зависимости от производительности используемых вычислительных систем. Таким образом можно описать объекты размером $100 - 1000 \text{ нм}^3$, а также промоделировать работу устройств молекулярных размеров.

Для описания больших по объему систем требуется проводить усреднение характеристик материала по объему элемента следующего (мезоскопического) уровня и приписывать этому элементу полученные усредненные характеристики. Следует отметить, что на этом уровне существенны не только средние значения физических величин, но и их флуктуации. Учет флуктуаций является наиболее существенным отличием мезофизики от уровня макрофизики, на котором достаточно ограничиться феноменологической динамикой средних значений величин. На мезоскопическом уровне моделирования используются уравнения баланса массы, энергии, импульса, момента импульса, энтропии, макроскопические уравнения Максвелла вместе со своими граничными условиями - совокупность уравнений сплошной среды с источниками мелкомасштабных и крупномасштабных флуктуаций. Для некоторых систем возможно включить определение переменных мезоскопического уровня в модель молекулярно-динамического уровня.

Результаты мезоскопической модели применяются для определения параметров метода конечных элементов, реализующего модели сплошной среды и модели уровня конструкций, базирующегося на теории механизмов и машин и теории систем. Конструкционный уровень по мере развития нанотехники и технологии спускается по иерархии масштабов вплоть до квантовых уровней и, следовательно, элементы каждого уровня иерархии могут представлять собой не только те или иные физические системы или кластеры материала, но быть конструкциями, то есть логико-динамическими системами.

В настоящее время за рубежом исследования и разработки в области иерархического моделирования интенсивно развиваются [2-3]. Существует целый ряд институтов и лабораторий, занимающихся разработкой его отдельных аспектов. Разработано большое количество компьютерных программ, ориентированных на различные аппаратные платформы, для квантово-механического и молекулярно-динамического моделирования атомно-молекулярных систем, в том числе программные пакеты Molecular Studio фирмы Accelrys, HyperChem фирмы Hypercube, Chem Office Кембриджского университета, TINKER Вашингтонского университета, GAMESS университета штата Айова и PC GAMESS МГУ и другие, рассчитанные, в основном, на персональные компьютеры и не имеющие встроенных средств распараллеливания кодов; системы NWChem Северо-западной тихоокеанской национальной лаборатории Министерства энергетики США и VASP Венского университета, Австрия, которые могут быть реализованы на параллельных компьютерах; программные средства, реализующие метод конечных элементов (ANSYS, LS-DYNA и др.), имеющие средства распараллеливания. Указанные пакеты позволяют рассчитывать квантово-механические системы, содержащие до нескольких тысяч электронов, и молекулярно-динамические системы, насчитывающие миллионы атомов, на промежутках времени до наносекунд. В конечно-элементных расчетах могут использоваться сетки, содержащие десятки миллионов узлов.

Представленная система иерархического моделирования реализуется на базе кластера СКИФ К-1000 [4]. Рассматривается возможность интеграции разрабатываемого комплекса в GRID-системы [5]. Нижним уровнем моделирования для наноструктурированных материалов является уровень молекул и кластеров атомов, образующих микроскопическую атомно-молекулярную структуру материала. Моделирование на следующем - молекулярно-динамическом уровне - включает рассмотрение процессов дефектообразования, в том числе образование и распространение микротрещин, а также определение механических и прочностных параметров наноструктурированного материала. Верхний уровень базируется на использовании конечно-элементной аппроксимации механики деформируемого твердого тела.

Программно-алгоритмическая структура системы иерархического моделирования представлена на рис. 1.

Программное обеспечение системы из базовых исполняемых параллельных модулей, устанавливаемых на мультипроцессорной высокопроизводительной системе (СКИФ), программного обеспечения терминального пользователя (ТЕРМИНАЛ), предназначенного для подготовки заданий и содержащего приложение инженерного уровня, а также системы связи ТЕРМИНАЛ-СКИФ.

Макроскопический уровень моделирования в иерархической системе основан на пакетах ANSYS и LS DYNA. На нижележащих уровнях рассчитываются только параметры материалов, используемые в этих пакетах, и условия перехода между встроенными в эти пакеты моделями поведения материалов при выходе напряженного состояния конструкций за соответствующие ограничения.

Квантово-механический и молекулярно-динамический уровни системы реализуются на базе пакетов NWChem и VASP. Следует отметить, что пакет NWChem позволяет реализовывать смешанные стратегии квантово-механического и молекулярно-динамического моделирования, в которых определенные локальные области материала моделируются на квантово-механическом, а другие - на молекулярно-динамическом уровнях.

Взаимодействие и согласование макроскопического и микроскопического уровней моделирования осуществляется программным обеспечением генератора наноструктурных элементов и генератора макромоделей свойств материалов. Физико-химические данные о материалах позволяют формировать базовый набор наноэлементов, в совокупности представляющих фазовую и дефектную структуру материала. Свойства базовых наноэлементов рассчитываются на микроскопическом уровне моделирования. На основе этих расчетов и данных эксперимента генератор свойств материалов формирует параметры материалов макроскопического уровня моделирования как функцию

свойств базовых наноэлементов с весовыми коэффициентами, обеспечивающими согласование с экспериментально определяемыми макроскопическими параметрами, список которых отличается в общем случае от списка параметров макроскопического уровня моделирования. Оптимизация свойств материалов также подразумевает варьирование весовых коэффициентов свойств наноэлементов с целью достижения экстремума соответствующего функционала качества.

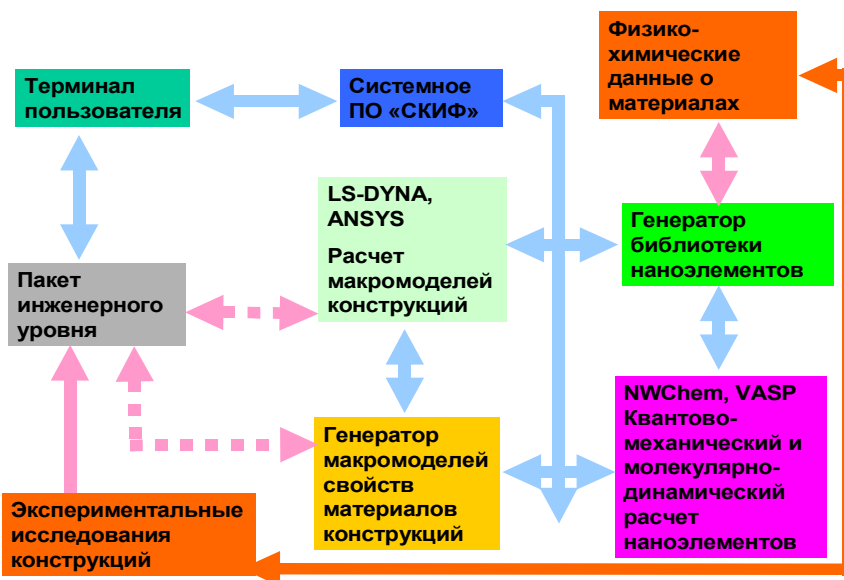


Рисунок 1 – Программно-алгоритмическая структура системы иерархического моделирования и оптимизации свойств наноматериалов

В качестве основного программного обеспечения системы иерархического моделирования используются пакеты NWChem, VASP, VIEN, ANSYS и LS-DYNA, MATLAB. Приложение инженерного уровня предназначено для подготовки и выполнения обычных заданий инженерной практики на предприятии-потребителе и идентификации модели материала из репертуара моделей пакета LS-DYNA.

К настоящему времени в рамках задания ПА 2.7 «Разработка и внедрение математических методов и программных средств иерархического моделирования и оптимизации свойств наноструктурных материалов» Научно-технической программы Союзного государства «Триада» выполнен следующий комплекс работ:

- разработана структура иерархических моделей для расчета и оптимизации свойств наноструктурных материалов;
- разработаны математические методы и программное обеспечение для иерархического моделирования свойств наноструктурных материалов и процессов нанотехнологии;
- создан интерфейс конечного пользователя иерархической системы моделирования с терминальным доступом к кластеру СКИФ К-1000 и пакетом программ инженерного уровня;
- проведено моделирование и экспериментально-теоретическая верификация свойств базовых наноструктурных систем на согласованных микроскопическом, мезоскопическом и макроскопическом уровнях с использованием кластерных высокопроизводительных мультипроцессорных вычислительных систем. Основным модельным объектом выбраны углеродные нанотрубки как перспективный элемент наноэлектроники [6-7];
- проведены исследования работоспособности модели теплопереноса в углеродной нанотрубке;
- разработаны программы генерации кристаллической атомной структуры для четырех- и шести- гранных конечных элементов произвольной формы с произвольной ориентацией атомных плоскостей, а также генерации атомной структуры произвольных многослойных углеродных нанотрубок;
- проведено квантовомеханическое моделирование молекул фуллерена, кластеров титана и функциональных групп на поверхности углеродных нанотрубок методом функционала электронной плотности. Показана адекватность алгоритмов пакетов NWChem и VASP в применении к указанным структурам;
- проведено моделирование влияния малого изменения концентрации примеси на электрофизические свойства полупроводника;
- квантово-механическими/молекулярно-динамическими методами проведены исследования биомолекулярной структуры на примере ретикулярной молекулы как потенциального элемента квантовых компьютеров;

- по результатам исследования электронно-ядерной подсистемы контактов углеродной нанотрубки с различными металлами и магнитнофункционализированных углеродных нанотрубок выявлена природа возникновения особых свойств, проявляемых данными структурами, установлены основные предпосылки использования таких объектов в нанoeлектронике [8];

- отдельную область представляет собой исследование органических объектов и объектов биологического происхождения, позволяющее не только более подробно изучить протекающие в них процессы, но и найти новые области применения таких объектов [9-10];

- проведено исследование механических свойств, разработана методика определения модулей упругости наноструктурных материалов методом молекулярной динамики на примере углеродных наноматериалов. Показана существенная роль ван-дер-ваальсовского взаимодействия в формировании механических свойств таких материалов;

- проведено моделирование собственных и вынужденных колебаний упорядоченных массивов углеродных нанотрубок в пакете LS-DYNA и показано наличие множественных ультразвуковых резонансов в такой структуре;

- проведено моделирование разрушения патрубка авиационного двигателя из титана ПТ-7М при гидростатическом нагружении его внутренней поверхности. Проведен анализ прочности восстановленной стальной полуоси стабилизатора самолета СУ-17. Проведены расчеты напряженного состояния лонжерона самолета МИГ-29. Для прогноза ресурса лонжерона предложен подход на основе двусоставной модели, которая учитывает усталостные характеристики материала в зонах наибольшей концентрации напряжений;

- в пакете LS-DYNA было проведено моделирование испытаний стандартных образцов из титановых сплавов на растяжение, чистый изгиб и микротвердость (по Виккерсу).

ЛИТЕРАТУРА:

1. В.В. Баркалин, И.А. Миклашевич. Модели деформирования твердых тел и их описание. - В кн.: И.А. Миклашевич. Микромеханика разрушения в обобщенных пространствах. - Минск: "Логвинов", 2003, с.1-28.
2. W.A. Goddard, T. Cagin, Y. Qi, Y. Zhou, J. Che. First Principles Multiscale Modeling of Physico-Chemical Aspects of Tribology // *27th Leeds-Lyon Symposium on Tribology, Tribological Research: From Model Experiment to Industrial Problems: Mechanics, Materials Science, Physico-chemistry*. Lyon, France, September 5, 2000.
3. High Performance Computing in the Max Planck Society. *Review of Garching Computing Centre of the Max Planck Society (RZG) and Max Planck Institute for Plasma Physics*, 2005.
4. <http://skif.pereslavl.ru/skif/index.cgi>
5. <http://www.osp.ru/os/2003/01/182405/>
6. V.A. Basov, A.I. Melker, and V.V. Nelayev. Fracture of single-wall chiral carbon nanotubes under compression: molecular dynamics study // *Proc. NATO Workshop "Carbon Nanotubes: From Basic Research to Nanotechnology"*, 21 – 31 May, Sozopol, Bulgaria, 2005.
7. V.V. Barkaline. Carbon nanotubes' arrays based surface acoustic wave chemical sensor element // *Proc. of Eurosensors XIX International Conf.*, September 11-14, Barcelona, Spain, 2005, p. 13.
8. K. Dovzhik, *Ab-initio* simulation of magnetically functionalized carbon nanotubes // *Proc. of 15th All-Russian Young Scientists Conf. "Microelectronics and Informatics - 2008"* 2008, p. 6.
9. V. Nelayev, K. Dovzhik and V. Lyskouski, Quantum effects in biomolecular structures // *Rev. Adv. Mater. Sci.* 14 2007, pp. 14-19.
10. V. Nelayev, K. Dovzhik Biomolecular structures in quantum computation. *Ab initio* research // *Proc. of 1st Int. Scientific Conf. "Nanostructured Materials – 2008: Belarus – Russia – Ukraine (NANO – 2008)"* 2008, p. 665.