

# ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ И МНОГОМАСШТАБНЫХ ПРОЦЕССОВ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

А.Ю. Куксин, А.В. Ланкин, И.В. Морозов, Г.Э. Норман, Н.Д. Орехов, В.В. Писарев, Г.С. Смирнов, С.В. Стариков, В.В. Стегайлов, А.В. Тимофеев

*Объединенный институт высоких температур РАН*

Рассматривается подход, позволяющий выявить, для каких задач нужны суперкомпьютеры экзафлопсного класса. Имеются в виду задачи, для решения которых требуется загрузка всего или значительной части суперкомпьютера, то есть сотен тысяч или даже миллионов вычислительных ядер одновременно под одну задачу. Анализ ведётся на примерах из области многомасштабного атомистического моделирования — прорывного направления современной науки [1].

Уравнения движения Ньютона и Шрёдингера, составляющие основу атомистического моделирования на микро- и наноуровнях, достаточно универсальны. Развивая различные подходы к их численному решению и их включению в многомасштабное моделирование, коллектив авторов создаёт аппарат, с помощью которого можно, опираясь на прогресс лучших суперкомпьютеров, решать новые задачи предсказательного моделирования многомасштабных процессов в физике, химии и других естественных науках.

Основное внимание уделено многомасштабным моделям и предсказательному моделированию свойств и процессов в материаловедении твёрдых и жидких состояний, органических соединений. Рассмотрены проблемы: (а) квантово-механического описания на наноуровне и применения классической молекулярной динамики (МД) на микроуровне, (б) установления взаимосвязи моделирования на нано- и микроуровнях и их связи с кинетическим описанием и механикой сплошных сред на макроуровне, в особенности, в сильно неравновесных средах. Работы ведутся нами по следующим направлениям:

1) Модификация поверхности при облучении металла субпикосекундными лазерными импульсами. Используется и развивается двухтемпературная атомистическая модель вещества. Проводятся расчёты, способные напрямую воспроизвести экспериментальные данные по деформации поверхности вследствие процессов плавления и абляции, вызванных лазерным облучением. Развивается полномасштабный трёхмерный подход.

2) Радиационно-индуцированные структурные изменения в облучённом топливе ядерных реакторов нового поколения на быстрых нейтронах. Развиваются механистические модели: уточняются базовые механизмы диффузии точечных дефектов и их кластеров, диффузии продуктов деления (в первую очередь ксенона), образования кластеров точечных дефектов и пузырей ксенона, рекомбинации точечных дефектов. Определяются микроскопические параметры для указанных моделей.

3) Кинетика фазовых переходов в метастабильных жидкостях: кристаллизация при переохлаждении и вскипание при перегреве для расплавов металлов и воды. Методом МД исследуются механизмы зародышеобразования. Развивается теория нуклеации. Строятся модели распада метастабильных состояний, пригодные в гидродинамическом моделировании.

4) Свойства и структура супрамолекулярных соединений включения – газовых гидратов. Исследуются новые фазы гидратов водорода в области высоких давлений.

5) Многомасштабные модели для полимеров и нанокompозитных материалов на их основе, обладающие высокой параллельной эффективностью. Используются методы классической полноатомной и огрублённой МД.

6) Теплофизические свойства (теплоёмкость, вязкость и др.) систем пылевых частиц в плазме, влияние анизотропии плазменно-пылевой системы. Исследуется возможность термодинамического подхода для описания систем малого числа пылевых частиц.

7) Рекомбинация ионов в электроотрицательных жидких и газообразных диэлектрических средах на поздних стадиях электрического разряда и восстановление электрической прочности. Эффекты кулоновской неидеальности и сольватации в газах умеренной плотности, в частности, фтора и элегаза.

8) Двойной электрический слой на границе углеродного материала и электролита, влияние электронно-дырочной структуры материала электрода на ёмкостные свойства.

9) Распараллеливание, адаптация программ многомасштабного моделирования для выполнения на гибридных вычислительных системах, включающих графические ускорители.

Для каждой задачи проведено соответствие между набором изучаемых явлений и требуемым уровнем быстродействия (числа ядер) вычислительной системы. Показана масштабируемость параллельных программ моделирования и перспектива расширения предсказательной способности методов по мере увеличения числа вычислительных ядер и/или использования специализированных архитектур (графические ускорители). Рассмотрена иерархия методов моделирования, необходимых для адекватного описания свойств веществ на различных пространственных и временных масштабах. На наиболее глубоком нанометровом/пикометровом

масштабе для моделирования электронной динамики и построения эффективных потенциалов взаимодействия частиц применяется теория функционала плотности (квантовая молекулярная динамика). Классический метод молекулярной динамики позволяет явно рассмотреть системы движущихся атомов вплоть до микромасштабов. Выход на макромасштабы осуществляется с помощью кинетических подходов и механики сплошных сред. Проведены сравнения эффективности распараллеливания для топологий тора и толстого дерева для трёх классов задач.

#### ЛИТЕРАТУРА:

1. А.Ю. Куксин, А.В. Ланкин, И.В. Морозов, Г.Э. Норман, Н.Д. Орехов, В.В. Писарев, Г.С. Смирнов, С.В. Стариков, В.В. Стегайлов, А.В. Тимофеев "ЗАЧЕМ и КАКИЕ нужны суперкомпьютеры экзафлопсного класса? Предсказательное моделирование свойств и многомасштабных процессов в материаловедении" // Программные системы теория и приложения. 2014. Т. 1, № 19. С. 191–244.