



Моделирование структур и свойств материалов методом первопринципной молекулярной динамики



Гельчинский Б.Р., Мирзоев А.А., Бескачко В.П., Вяткин Г.П.
Южно-Уральский государственный университет
Челябинский научный центр УрО РАН

РЕШАЕМЫЕ ЗАДАЧИ:

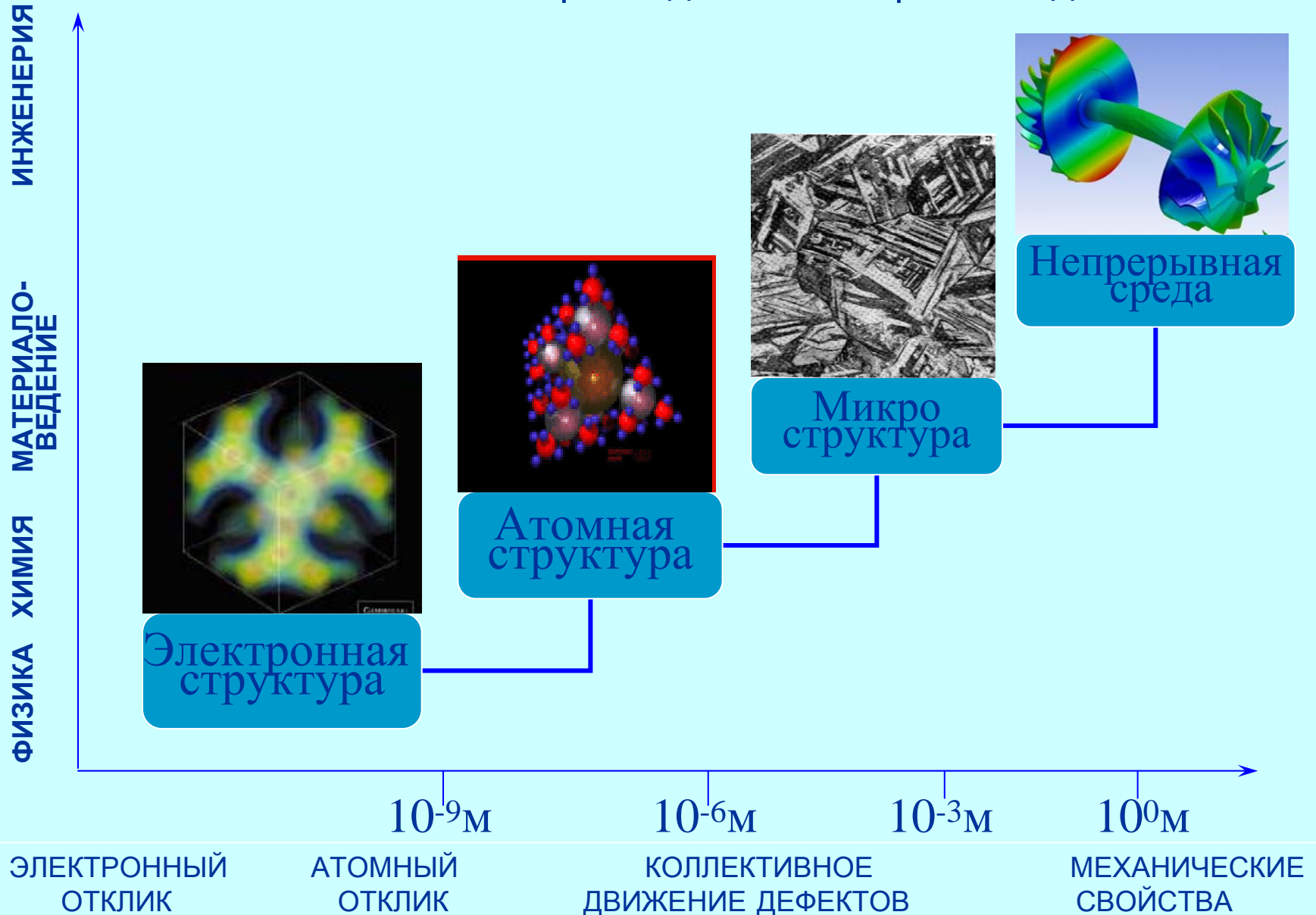
Фундаментальные

- компьютерное моделирование атомной структуры и свойств металлов и сплавов методами молекулярной динамики
- расчет электронной структуры металлов, сплавов и неорганических материалов методами ЛМТО-рекурсия

Прикладные

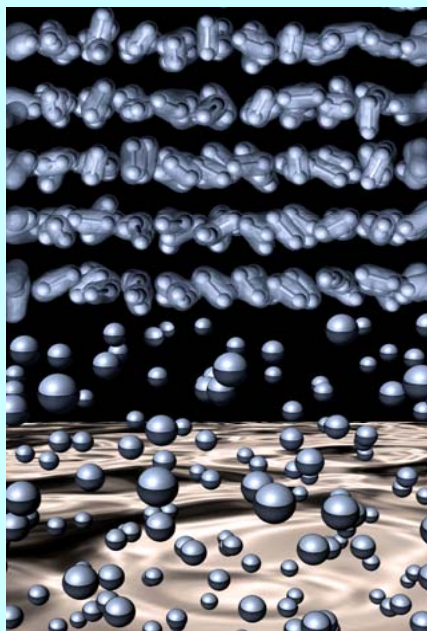
Исследование структуры и свойств специальных сталей, применяемых в медицине, химической и электротехнической промышленности,

В настоящее время методология компьютерного моделирования на атомном уровне достигла стадии, где уже возможно ее использование в области прикладного материаловедения



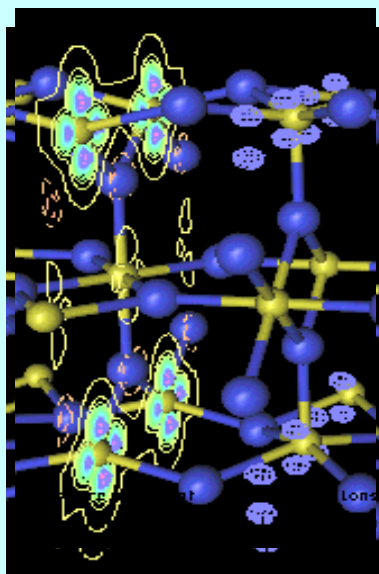
Моделирование на атомарном уровне

Классическая молекулярная динамика



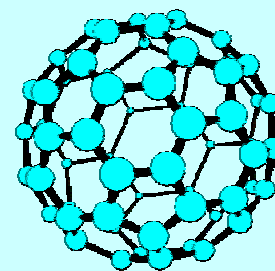
Уравнения Ньютона для ионов

Квантовая (перво-принципная) молекулярная динамика



Уравнения Ньютона и Шредингера для ионов и электронов

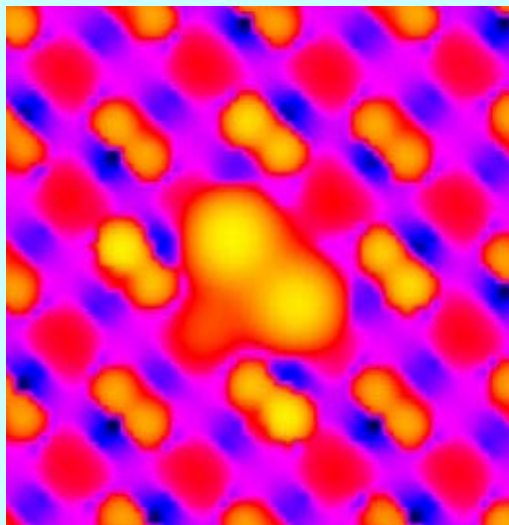
Квантово-химические методы / метод квантового Монте-Карло



Уравнение Шредингера для электронов

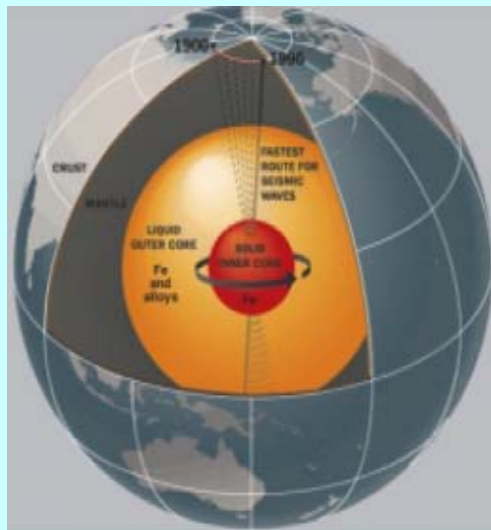
Моделирование на атомарном уровне

Интерпретация эксперимента, получение дополнительной информации



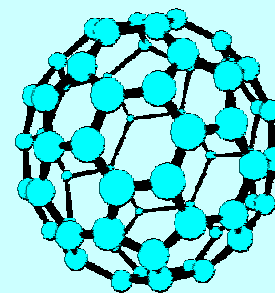
Определение структуры поверхности, ближнего порядка

Исследование свойств вещества в условиях труднодостижимых экспериментально



Вещество в экстремальных условиях

Предсказание физических свойств вещества



Создание новых веществ с заданными свойствами

Предсказание свойств вещества на основе квантовомеханических законов

Примеры приложений методик моделирования

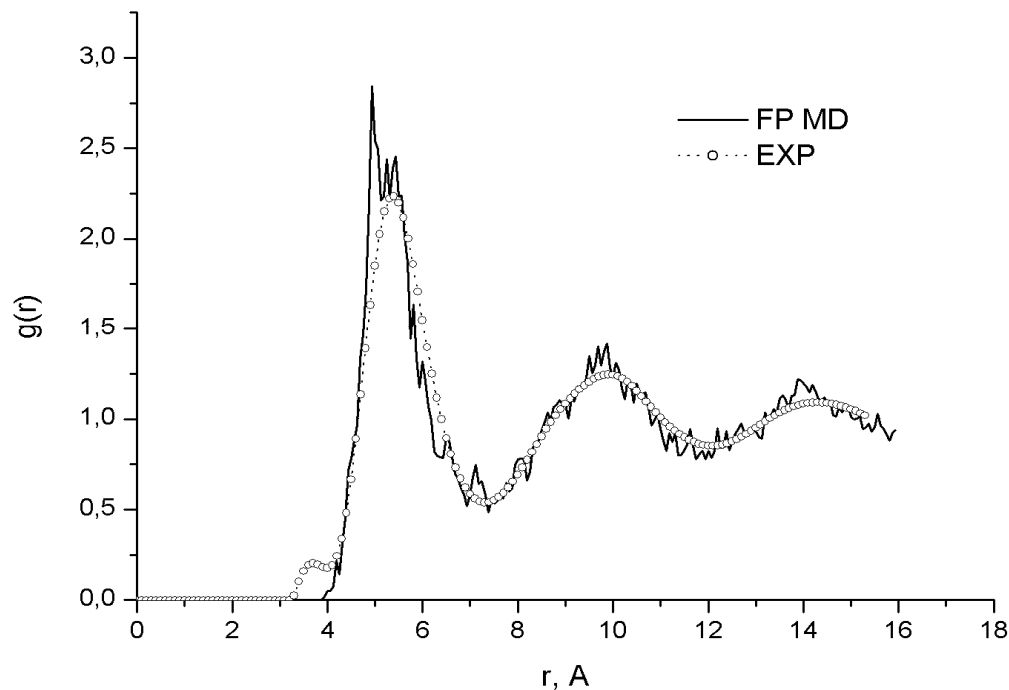
Проекты выполненные нашей группой в 2002-2004 гг

Моделирование структуры и свойств жидкого цезия (Метод «ab initio» MD)

Моделирование энергии смешения сплавов системы Fe-Cr (метод ЛМТО)

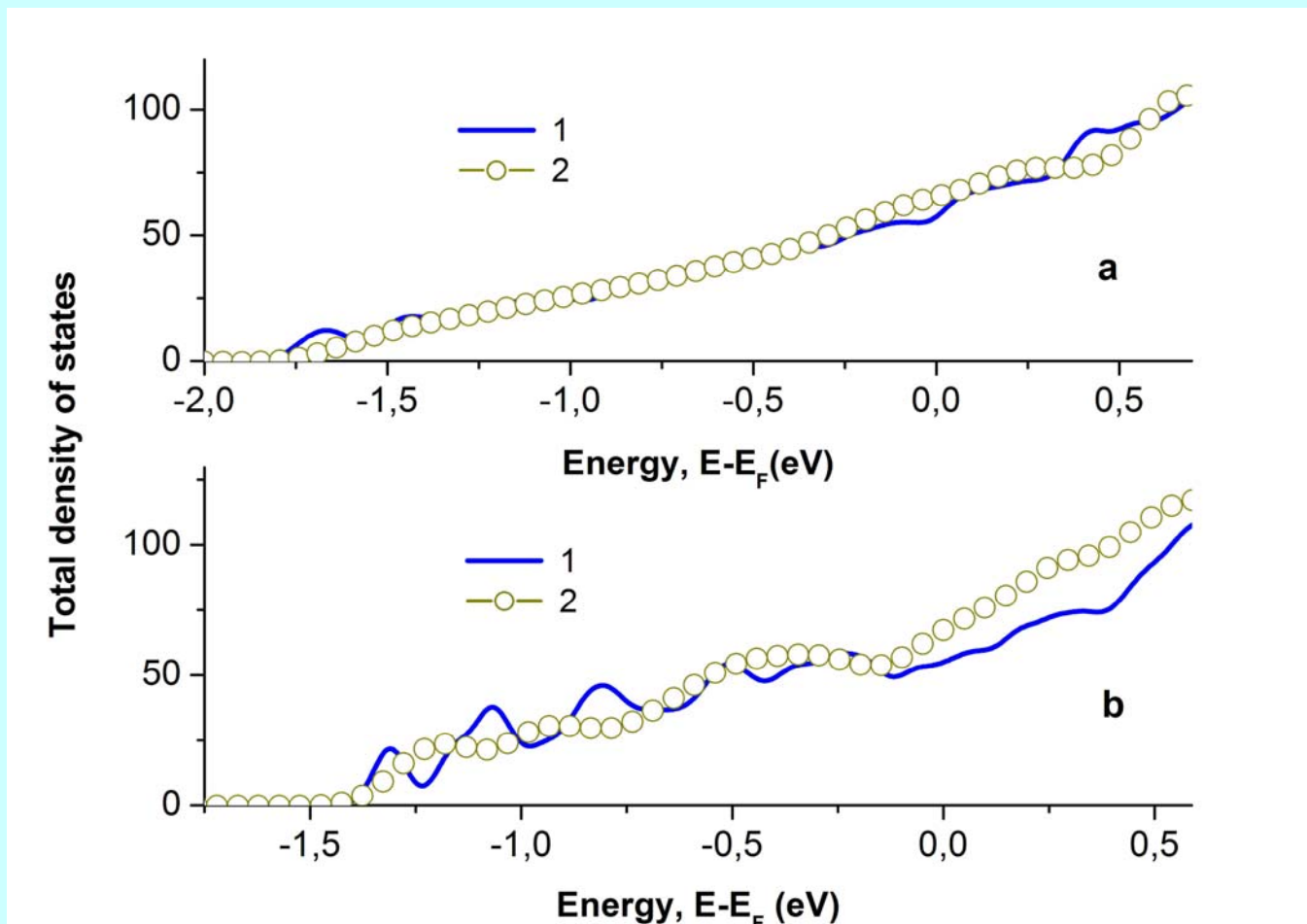
Моделирование нанотрубок и фуллеренов
(пакет Chem3D)

Результаты расчета: ансамбль из 54 атомов, в периодической суперячейке при температуре 323К и плотности, соответствующей равновесию жидкость-насыщенный пар расплава Cs



Функция радиального распределения :
результаты расчета и эксперимент

Расчеты полной плотности электронных состояний расплавов Cs для температур 323К и 1673К методом ab-initio МД (1) в сравнении с расчетами методом ЛМТО (2)



2. Исследование энергии смешения неупорядоченных сплавов системы **Fe-Cr**



Электронагревательные
элементы промышленных
и лабораторных печей

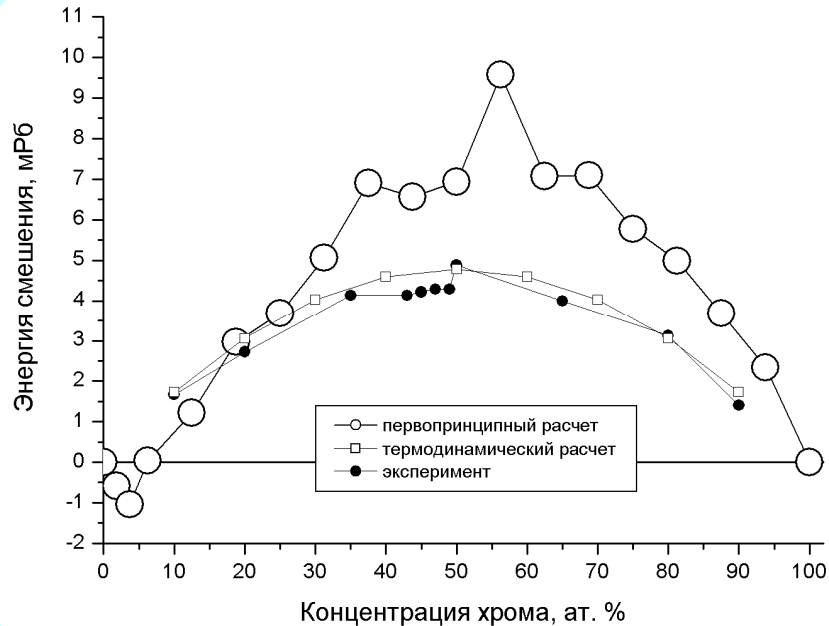
Нержавеющая фольга

Хирургическая сталь

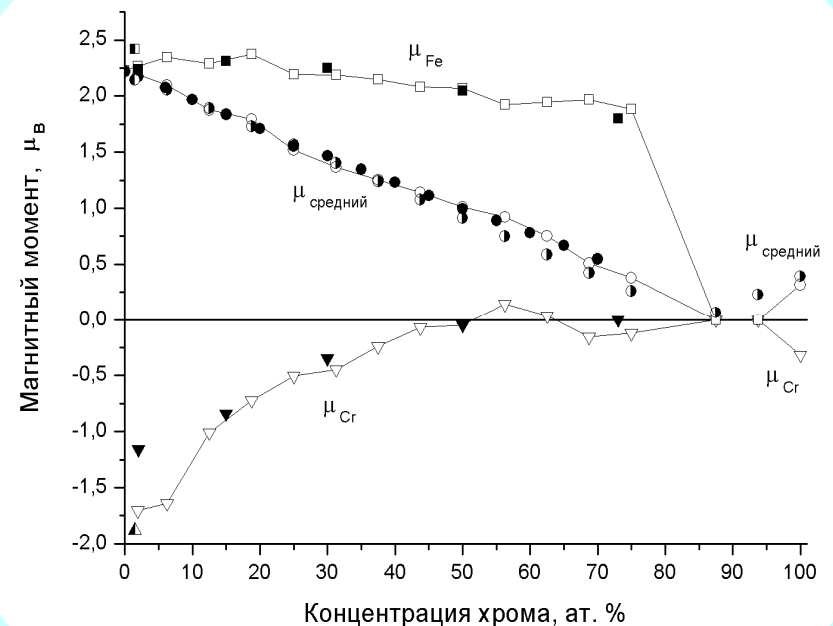
Столовые приборы

Контейнеры (в химической промышленности)

Результаты расчета системы Fe-Cr

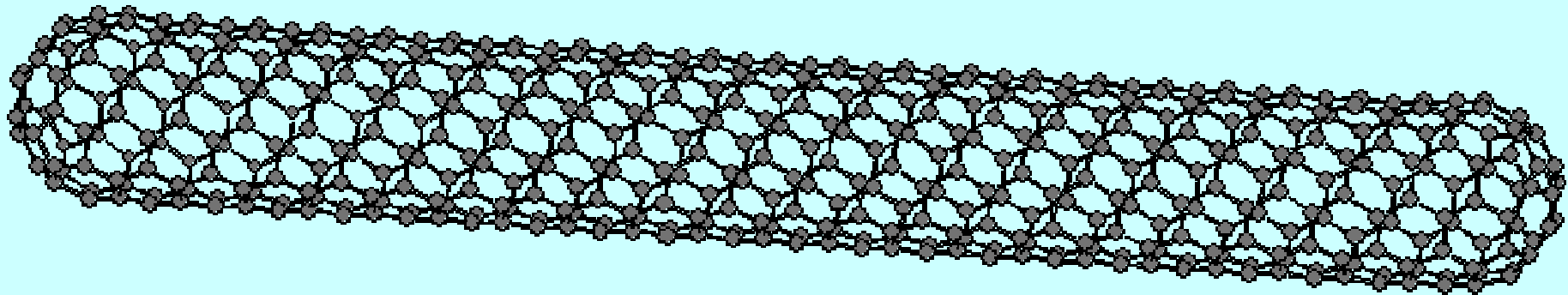


Энергия смешения сплавов системы Fe-Cr

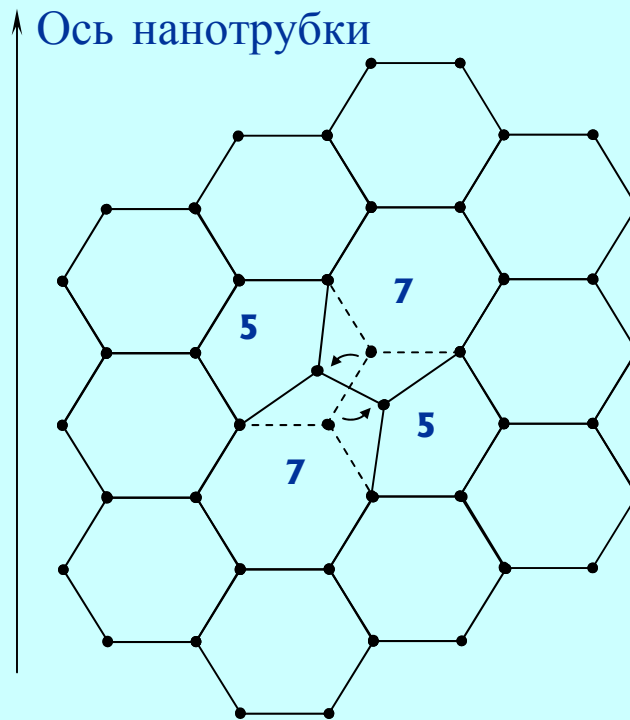
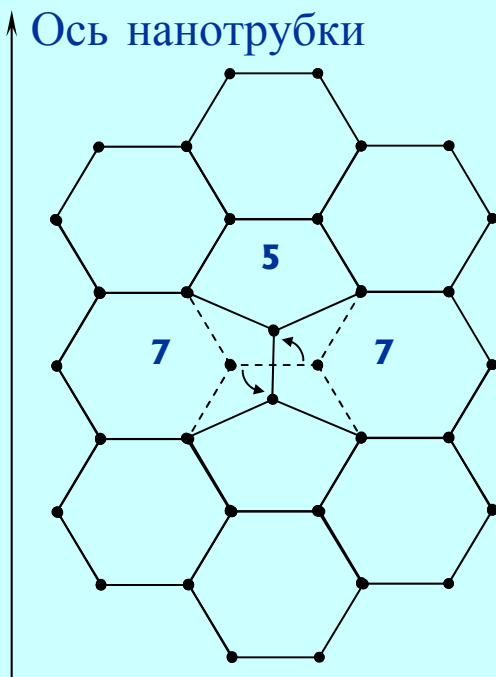


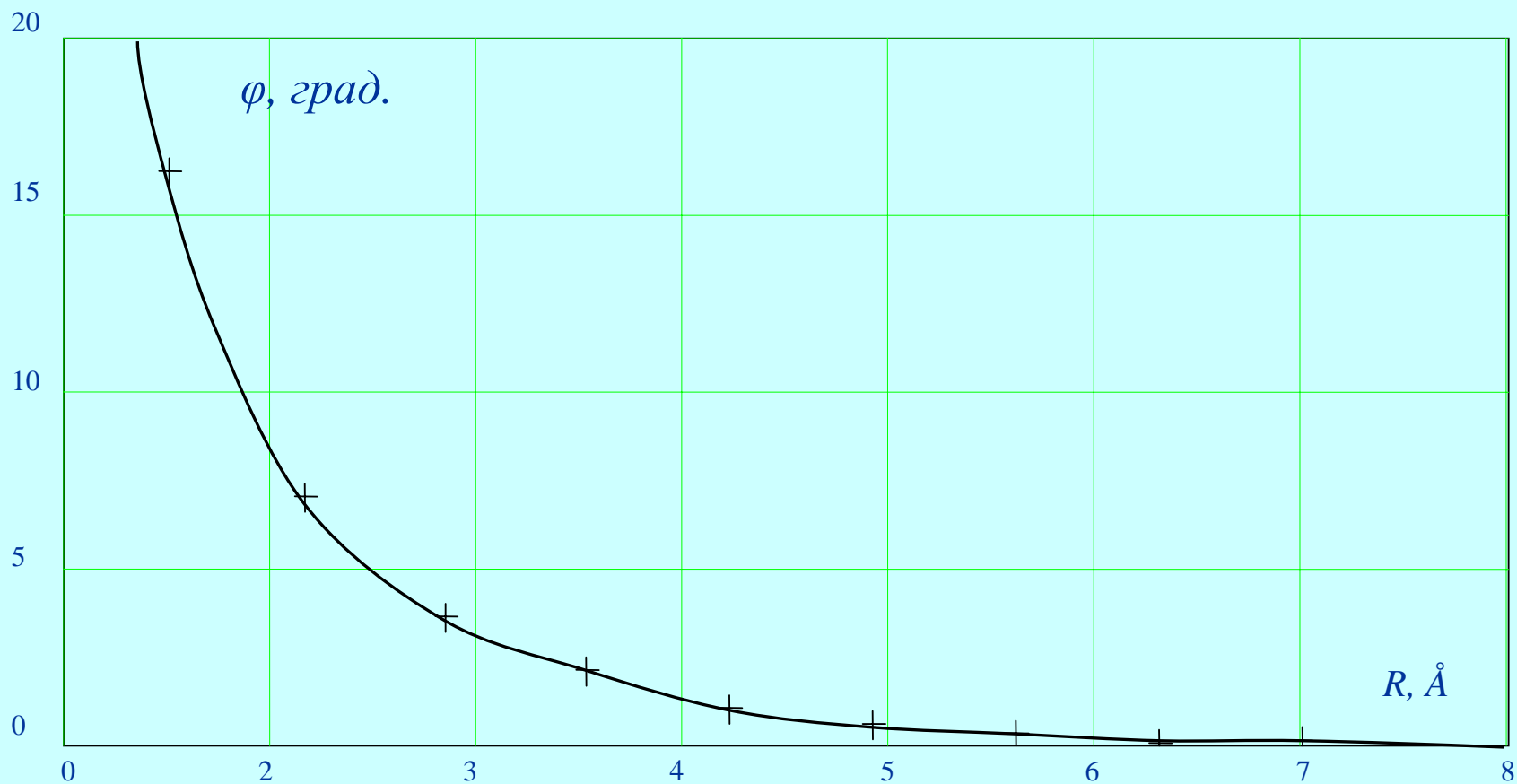
Магнитные моменты сплавов системы Fe-Cr

3. МОДЕЛИРОВАНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК



УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ С ДЕФЕКТАМИ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ СВЯЗЕЙ: МОЛЕКУЛЯРНО- ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ





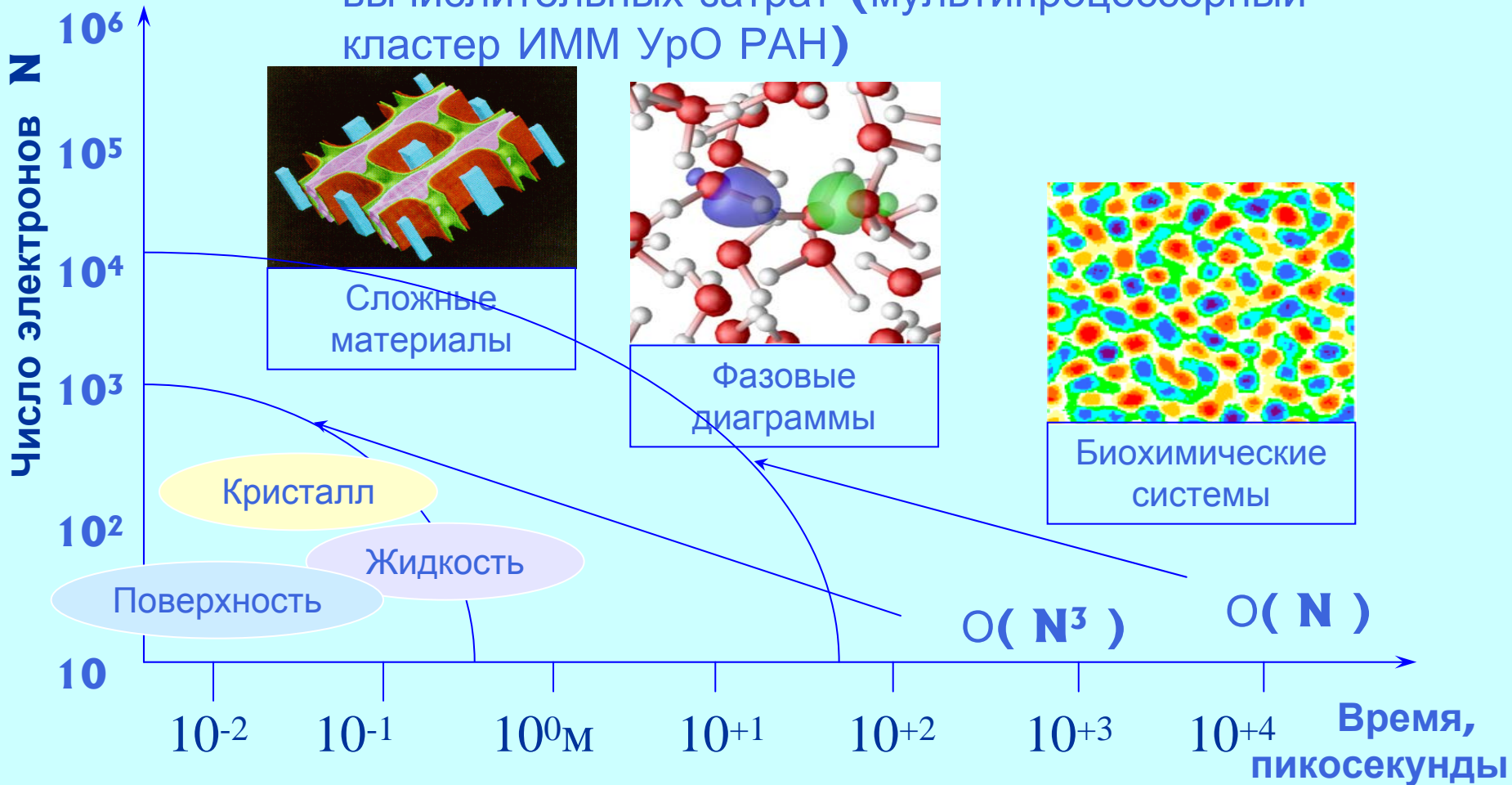
Зависимость угла изгиба φ зеркальной “кресловидной” нанотрубки под действием дефекта от ее радиуса R

Что дальше?

- ✦ Развитие методов моделирования будет проходить по 4 направлениям:
 - Высокая точность
 - Высокая скорость
 - Большое число частиц
 - Высокая общность (применимость к любым атомам и любому типу связи)
- ✦ В настоящее время Россия, как и Европа в целом, занимает ведущее положение в мире в области компьютерного моделирования, однако постепенно утрачивает свои позиции

Необходимо повышения вычислительной мощности компьютерной техники!

Обычная, $O(N^3)$, и линейная, $O(N)$, шкала роста вычислительных затрат (мультипроцессорный кластер ИММ УрО РАН)



При использовании обычных алгоритмов не удастся «дотянуться» до наиболее интересных проблем!

Оценка производительности кластеров

Пакет LMTO

8 процессорный кластер: При работе на 4-х процессорах выигрыш в 3,96 раза по сравнению с 1 процессором данного кластера

Суперкластер: При работе на 4-х процессорах выигрыш в 3,96 раза по сравнению с 1 процессором данного кластера.

Сравнение производительности процессоров: при пересчете на один процессор, выигрыш в производительности при переходе на суперкластер в 3 раза.

Пакет SIESTA

8 процессорный кластер: При расчете на 4 процессорах выигрыш в 2,5 раза по сравнению с 1 процессором данного кластера.

Суперкластер: При работе на 4-х процессорах выигрыш в 2,6 раза по сравнению с 1 процессором данного кластера.

Сравнение производительности процессоров: при пересчете на один процессор, выигрыш в производительности при переходе на суперкластер в 1,5 раза.

Выводы:

- ✦ Моделирование на атомном уровне играет все возрастающую роль в современном материаловедении и связанной с ним индустрией.
- ✦ Каждый из существующих методов имеет свои достоинства и ограничения и не способен решить все задачи, возникающие при материаловедческом исследовании. Поэтому в научной группе необходимо иметь набор различных методик компьютерного моделирования.
- ✦ По мере роста быстродействия компьютеров уровня успешного применения для реальных материалов достигают все более тонкие методы моделирования. В настоящий момент такими методами являются методы первопринципного моделирования, что влечет за собой необходимость широкого использования методов параллельных вычислений.

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ !