

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

Предсказательное моделирование свойств и многомасштабных процессов в материаловедении. Для каких задач нужны суперкомпьютеры эксафлопсного класса?

АННОТАЦИЯ. Развиваются методы и подходы предсказательного многомасштабного (multiscale) атомистического моделирования. На наиболее глубоком нано- (пико-) пространственном масштабе теория функционала плотности (квантовый подход) применяется к подсистеме электронов. Классическое атомистическое моделирование позволяет явно рассмотреть системы движущихся атомов вплоть до микро-масштабов с помощью метода молекулярной динамики. Выход на макро-масштабы осуществляется с помощью кинетических подходов и механики сплошных сред. Особое внимание уделяется обмену информацией между различными масштабами, т.е. единому рассмотрению систем от нано- до макро-уровня. Развиваемый подход позволяет формулировать и решать все новые задачи с прогрессом суперкомпьютеров.

В работе рассмотрены: 1) радиационно-индуцированные структурные изменения в топливах ядерных реакторов, 2) модификация поверхности при обработке металла субпикосекундными лазерными импульсами, 3) кинетика фазовых переходов в метастабильных жидкостях, 4) структуры газовых гидратов метана и водорода и расчет их свойств, 5) построение многомасштабных моделей для полимеров, 6) пылевая плазма, 7) рекомбинация ионов в жидких и газообразных диэлектрических средах на поздних стадиях электрического разряда и восстановление электрической прочности, 8) формирование двойного электрического слоя на границе углеродного материала и электролита и влияние электронно-дырочной структуры материала электрода на емкостные свойства. По каждой задаче рассматривается ее масштабируемость и перспектива расширения возможностей исследования по мере увеличения числа доступных вычислительных ядер. Предложено требуемое развитие суперкомпьютерных технологий в атомистическом моделировании: распараллеливание и адаптация программ многомасштабного моделирования для выполнения на гибридных вычислительных системах, включающих графические ускорители.

Ключевые слова и фразы: атомистическое моделирование, электронная структура, молекулярная динамика, многомасштабное моделирование, радиационное старение, лазерная абляция, нуклеация, гидраты, полимеры, пылевая плазма, электрохимия, параллельная эффективность.

Введение

Рассматривается разработка многомасштабных численных моделей и предсказательное моделирование свойств и процессов в материаловедении твердых и жидких состояний, органических соединений на суперкомпьютерах пета- и эксафлопсного класса. Возникающие в связи с этим проблемы: (а) квантово-механического описания на нано-уровне и применения классической МД на микро-уровне, (б) установления взаимосвязи моделирования на нано- и микро-уровнях и их связи с кинетическим описанием и механикой сплошных сред на макро-уровне, в особенности, в сильно неравновесных средах.

Многомасштабное атомистическое моделирование стало прорывным направлением современной науки. Чтобы стала ясна роль этого направления, укажем, что около трети машинного времени и задач, решаемых на лучших суперкомпьютерах США, принадлежит к нему [1]. При этом основные траты машинного времени приходятся на атомистическое моделирование и квантовые задачи, т.е. на два самых глубоких масштаба. Поэтому неудивительно, что, например, при разработке архитектуры суперкомпьютеров IBM BlueGene/L задачи молекулярного моделирования рассматривались в качестве главного приоритета [2].

Пути развития архитектуры суперкомпьютеров эксафлопсного класса проанализированы В. В. Стегайловым в отдельном докладе, представленном на НСКФ-2013. В нем же обсуждаются требования к архитектуре суперкомпьютеров с точки зрения масштабируемости расчетов указанных задач молекулярного моделирования.

Уравнения движения Ньютона и Шредингера, составляющие основу атомистического моделирования на микро- и нано-уровнях, достаточно универсальны. Развивая различные подходы к их чис-

ленному решению и их включению в многомасштабное моделирование, коллектив авторов создает аппарат, с помощью которого можно, опираясь на прогресс лучших суперкомпьютеров, решать новые разнообразные задачи предсказательного моделирования многомасштабных процессов в материаловедении. Работы ведутся по следующим направлениям.

- (1) Радиационно-индуцированные структурные изменения в топливе ядерных реакторов на быстрых нейтронах. Развиваются механистические модели радиационно-индуцированных структурных изменений в облученном ядерном топливе реакторов нового поколения на быстрых нейтронах. А именно, 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.
- (2) Модификация поверхности при облучении металла субпикосекундными лазерными импульсами. Изучается процесс модификации поверхности металла при лазерном облучении с помощью развиваемой двухтемпературной атомистической модели вещества. Проводятся расчёты, способные напрямую воспроизвести экспериментальные данные по деформации поверхности вследствие процессов плавления и абляции, вызванных лазерным облучением. Развивается полномасштабный трехмерный подход к моделированию указанной задачи.
- (3) Кинетика фазовых переходов в метастабильных жидкостях. Изучается кинетика фазовых переходов в жидкостях методом молекулярной динамики (МД): вскипание при перегреве и кристаллизация при переохлаждении для воды и расплавов металлов. Исследуются механизмы зародышеобразования. Развивается теория нуклеации. Строятся модели распада метастабильных состояний, пригодные для использования в гидродинамическом моделировании.
- (4) Предсказание структур газовых гидратов водорода и расчет их свойств. Изучаются свойства супрамолекулярных соединений включения – газовых гидратов. Исследуются новые фазы гидратов водорода в области высоких давлений. моделируются полиморфные фазовые переходы; влияние различных ингибиторов на рост и образование газовых гидратов; диффузия моле-

кул газа в газовых гидратах. Исследуются зависимости механизмов диффузии от размеров молекул.

- (5) Построение многомасштабных моделей для полимеров, обладающих высокой параллельной эффективностью. Используются методы квантовой, классической и огрубленной МД.
- (6) Границы применимости термодинамического описания пылевой плазмы. Изучаются теплофизические свойства (теплоёмкость, теплопроводность, вязкость и др.) систем пылевых частиц в плазме. Определяются зависимости этих свойств от параметров системы пылевых частиц и плазмы. Обосновывается использование термодинамического подхода для описания систем малого числа пылевых частиц. Исследуется влияние анизотропии плазменно-пылевой системы на ее теплофизические свойства. Проверяется возможность построения аналогии между упорядоченной системой пылевых частиц и конденсированным веществом.
- (7) Рекомбинация ионов в жидких и газообразных диэлектрических средах на поздних стадиях электрического разряда и восстановление электрической прочности. Исследуются процессы рекомбинации ионов в жидких и газообразных диэлектриках. Изучается влияние эффектов, обусловленных неидеальностью и сольватацией, на рекомбинацию ионов в газах умеренной плотности, в частности, в среде фтора и элегаза. Планируется рассмотреть рекомбинацию ионов в воде и её флюиде, в органических средах, в частности, в углеводородных жидкостях, моделирующих трансформаторное масло.
- (8) Формирование двойного электрического слоя на границе углеродного материала и электролита и влияние электронно-дырочной структуры материала электрода на ёмкостные свойства. Строятся модели двойного электрического слоя на границе электролита и углеродного материала. Исследуется влияние электронной структуры углеродного материала на емкость двойного слоя. Изучается диффузия в ионной жидкости тетрафторбората 1-бутил-3-метилимидазолия ($[bmim]^+[BF_4]^-$) и её смачивания поверхности углеродного материала.
- (9) Распараллеливание и адаптация программ многомасштабного моделирования для выполнения на гибридных вычислительных системах, включающих графические ускорители.

1. Параллелизм в классических молекулярно-динамических расчетах

МД расчеты проводятся для миллионов и миллиардов частиц [4]. Для распараллеливания расчетный объем разделяется на подобласти (domain decomposition), каждая из которых «поручается» одному ядру, пример одномерного разделения приведен на Рис. 1. При фиксированном числе частиц увеличение числа подобластей, т.е. увеличение числа используемых вычислительных ядер и уменьшения числа частиц на каждое ядро вначале дает линейное ускорение расчетов, а потом проходит через максимум (Рис. 2, слева), когда межъядерный обмен становится затратным по времени. Таким образом, для каждого числа вычислительных ядер существует число частиц, оптимальное для расчетов. При увеличении числа ядер можно проводить расчеты для большего числа частиц (Рис. 2, справа) и, соответственно, расширяется круг явлений и процессов, доступных для исследования. Такой подход предложен в [1], где он проиллюстрирован на примере пластической деформации и разрушения при высокоскоростном деформировании. Набор других примеров приведен в данной работе.

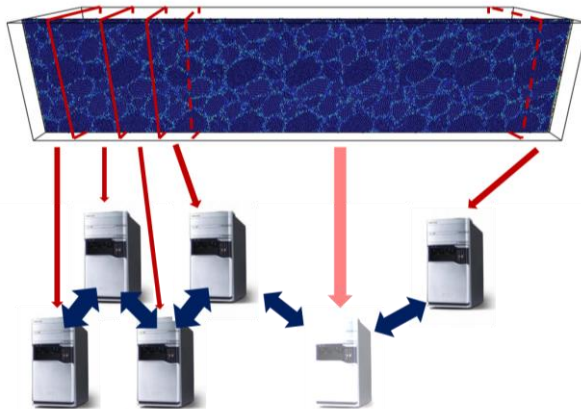


РИС. 1. Схема, поясняющая параллелизацию на основе декомпозиции по пространству в методе МД (короткодействующие потенциалы)

Отметим, то для систем с короткодействующими потенциалами типа ЕАМ время расчета пропорционально N , поэтому соответствующее увеличение M приводит к тому, что время расчета остается неизменным с ростом N .

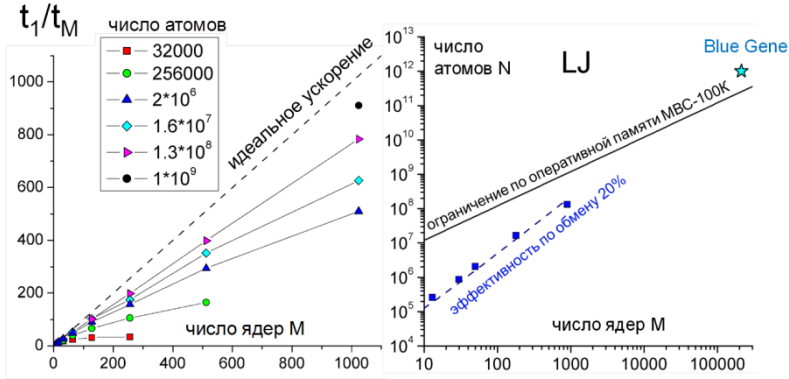


РИС. 2. Слева – зависимость ускорения от числа ядер для различных размеров систем с потенциалом Леннарда-Джонса (указано число частиц в системе). Справа – оптимальное соотношение числа атомов и ядер. Точками показаны расчеты с эффективностью 80%. Сплошная кривая – ограничение по оперативной памяти. Для сравнения приведен расчет на суперкомпьютере IBM BlueGene/L [3]

2. Примеры масштабируемых задач

2.1. Радиационные повреждения в ядерных топливах

Физические модели, используемые в существующих топливных кодах, как правило, содержат широкий набор подгоночных параметров и эмпирических корреляций, что существенно снижает предсказательные возможности этих кодов, а также их применимость для описания новых видов топлива. В связи с этим, во всем мире предпринимаются попытки усовершенствования топливных кодов и создания кодов нового поколения (вместо упрощенных «корреляционных», или «параметрических» моделей) [5][6].

Соединения актинидов являются весьма сложными материалами для атомистического описания (так, в рамках квантово-механических подходов необходимо учитывать сильную корреляцию f-электронов U, без чего не удастся, в частности, описать диэлектрические свойства UO_2). Такой подход требует значительных вычислительных ресурсов, и соответствующие исследования стало возможно проводить лишь около десяти лет назад. Как следствие, несмотря на большой поток исследований во всем мире, еще практически не предложено корректных атомистических моделей, способных предсказывать эволюцию радиационных дефектов в ядерных топливах. В процессе разработки моделей такого уровня формулируются новые предложения по планированию и проведению дополнительных экспериментальных исследований, необходимых для заполнения возникающих при использовании механистических моделей пробелов в базах данных.

Используя метод *force-matching* (метод согласования по силам), авторы разрабатывают новые многочастичные межатомные потенциалы для ураносодержащих материалов топлив для дальнейшего использования в МД расчетах базовых микроскопических параметров моделей более высокого уровня [7][8][9]. Мировая практика создания потенциалов межчастичного взаимодействия показывает, что использования только данных экспериментов при разработке потенциалов оказывается недостаточным. Это связано в основном с тем, что набор экспериментальных данных, которые напрямую можно использовать при разработке потенциалов, зачастую сильно ограничен, в особенности, прямых данных об энергиях образования и подвижности дефектов. В то же время, использование *ab initio* методов расчета (таких, как теория функционала электронной плотности – ТФП) сильно ограничено размерами систем из 100–1000 атомов и очень короткими временами расчетов (для квантовой МД), чего зачастую недостаточно для расчета поведения дефектов в решетке. Поэтому более подходящим на сегодняшний день вариантом является проведение расчетов в рамках классической МД, но с использованием потенциалов, описывающих свойства кристаллической решетки и энергетические характеристики дефек-

тов в согласии с ТФП расчетами (с привлечением экспериментальных данных, где они доступны).

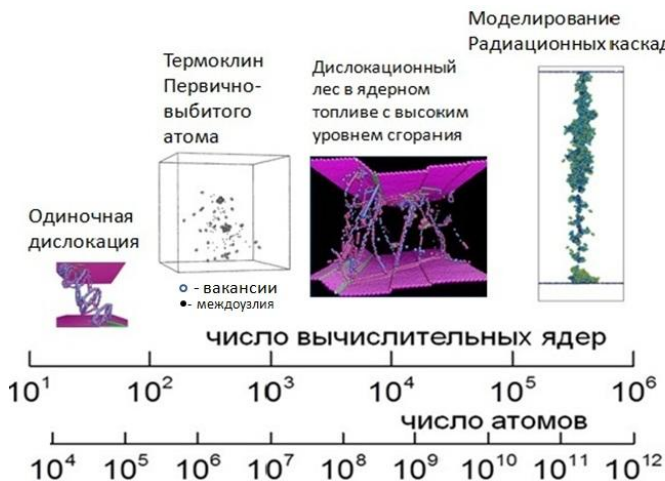


Рис. 3. Перспектива расширения круга доступных процессов образования дефектов при увеличении числа ядер в классических расчетах радиационного старения, использующих квантовые потенциалы межчастичного взаимодействия

В указанных выше работах для чистого урана достигнуто описание как низкотемпературной альфа, так и высокотемпературной гамма (ОЦК) фаз. Рассчитанные температуры фазового перехода альфа-гамма и температура плавления хорошо согласуются с экспериментальными данными. Созданные потенциалы использованы для выяснения особенностей развития столкновительных каскадов вблизи открытой поверхности материала и исследования положения линии плавления и объяснения расхождений в ее экспериментальном определении на основе динамических и статических измерений. Проведен расчет зависимостей от температуры для Мо ряда кинетических коэффициентов, необходимых для описания кинетики образования и роста дислокационных петель, полостей и пузырей Хе. Проводится расчет коэффициентов диффузии вакансий и

междоузельных атомов, их кластеров (в том числе вакансионных, например дефекта Шоттки в UO_2 , и междоузельных дислокационных петель), атомов Хе в монокристаллах, констант скорости рекомбинации, эффективного радиуса взаимодействия точечных дефектов и мощности их стоков в поры и пузыри.

Задачи описания диффузии в твердых тех не ограничиваются радиационным материаловедением. Так с помощью ТФП были рассчитаны энергии растворения Н и Не в различных положениях внедрения и замещения в ГПУ решетке $\alpha\text{-Ti}$, оценены барьеры для их миграции [10]. Рассчитанные частоты колебаний Н в различных положениях использованы для идентификации линий в спектре колебаний, получаемых методом неупругого рассеяния нейтронов.

Общая перспектива расширения круга доступных процессов при увеличении числа ядер в классических расчетах схематично представлена на Рис. 3. Две горизонтальные шкалы на этом и последующих рисунках показывают, что для каждого числа частиц существует максимальное число вычислительных ядер, когда распараллеливание расчета еще остается эффективным, т.е. приводит к ускорению. При дальнейшем увеличении числа ядер при неизменном числе частиц эффективность расчета начинает снижаться.

2.2. Лазерное наноструктурирование поверхности

В последнее время стало появляться значительное число экспериментальных работ, акцентирующих внимание на объемном характере процесса модификации поверхности при лазерном облучении. В то же время расчеты, проводимые разными авторами, остаются либо полностью одномерными (гидродинамическое моделирование) или квазиодномерными (атомистическое моделирование), когда только одно направление (вглубь металла) имеет микронный размер. Наша работа, заключается в переходе к полномасштабному объемному атомистическому моделированию процесса модификации. Такие расчёты требуют достаточно больших ресурсов по сравнению с гидродинамическим подходом, который тоже может быть развит до объемного моделирования, хотя для этого надо будет решить ряд принципиальных задач. Однако даже при

создании трехмерной гидродинамической модели, точность её будет значительно уступать атомистическому моделированию, так как при модификации вещества большую роль играют такие процессы как плавление, разрушение, нуклеация, т.е. процессы, учёт которых в гидродинамическом подходе вызывает особую трудность. С другой стороны, в атомистическом моделировании эти процессы описываются без привлечения каких-либо дополнительных приближений. Поэтому развитие такого рода объёмного атомистического моделирования является необходимым для решения задач в области физики взаимодействия высокоэнергичных импульсов с веществом.

При взаимодействии короткого лазерного импульса с веществом происходит сильный нагрев, в первую очередь, электронной подсистемы. Характерное время установления равновесия между электронами и ионами соизмеримо со временем самой модификации вещества и временами кинетических процессов происходящих при этом (теплоперенос, фазовые переходы, возникновение ударных волн и т.д.) Для моделирования процесса модификации поверхности авторами развивается атомистическая модель двухтемпературного состояния, в которой используется приближение сплошной среды для электронной подсистемы и МД моделирования для ионной подсистемы. Таким образом, совместно решается система уравнений Ньютона для ионов и кинетическое уравнение теплопроводности для электронной подсистемы. Электронная подсистема влияет на ионную подсистему через электрон-ионную релаксацию (ланжевенский термостат в ионной подсистеме) и электронное давление (зависимость межатомного потенциала от электронной температуры и дополнительный член в уравнении Ньютона для ионной подсистемы). Такой гибридный подход позволяет проводить расчеты с использованием систем с числом атомов около нескольких десятков миллионов и расчетным времени порядка наносекунды. Этого достаточно чтобы выполнить моделирование, позволяющее проводить прямое сравнение результатов с экспериментом.



Рис. 4. Качественное сопоставление числа вычислительных ядер и различных атомистических моделей процесса модификации поверхности, показаны результаты, полученные авторами проекта (фрагменты из [13]): 1–квазиодномерный расчёт с микронным масштабом вдоль направления вглубь вещества; 2–квазиодномерный расчёт с учётом трёхмерных особенностей процесса нуклеации; 3–квазидвумерный расчёт абляции вещества; 4–квазидвумерный расчёт процесса модификации вследствие плавления вещества и распространения волн вдоль поверхности; 5–прямое моделирование реального процесса в условиях эксперимента

В цикле работ [11][12][13][14] была развита атомистическая двухтемпературная модель абляции/плавления вещества при облучении субпикосекундными импульсами. Показано, что разработанный межатомный потенциал для золота с параметрической зависимостью от электронной температуры воспроизводит эффект увеличения температуры плавления ионной подсистемы при нагреве электронной подсистемы. В указанных работах модель применялась

в квазиодномерной постановке задачи. Переход к полномасштабному объёмному моделированию процесса модификации поверхности планируется. Совместно с экспериментальной группой А.Я. Фаенова и японскими коллегами было показано, что режим абляции наступает при несколько больших энерговкладах, чем требует модификация поверхности. В указанных работах обсуждается возможность модификации поверхности вследствие плавления и распространения волн релаксации вещества вдоль поверхности.

В рамках работы проводятся расчёты по модификации поверхности алюминия и золота с учётом большой площади открытой поверхности. В настоящее время все выполняемые расчёты подобных процессов проводятся в одномерном (гидродинамическое моделирование) или квазиодномерном случае (атомистическое моделирование), когда только одно направление (вглубь металла) имеет микронный размер. Предварительные расчёты, выполненные для расчётных систем с микронным масштабом в двух направлениях, показали, что переход к полномасштабному моделированию может дать принципиально новые эффекты и позволит напрямую воспроизвести процесс модификации поверхности.

На РИС. 4 различные атомистические модели процесса модификации поверхности схематично сопоставлены с числом вычислительных ядер, требуемым для их исследования.

2.3. Нуклеация и кинетика фазовых переходов

Фазовые переходы в веществе при интенсивных импульсных воздействиях нередко протекают через образование и распад метастабильных фазовых состояний — например, перегретой или переохлажденной жидкости, растянутого кристалла или жидкости. Распад таких состояний происходит через образование зародышей новой фазы — нуклеацию. В большинстве моделей распада метастабильного состояния используется классическая теория нуклеации (КТН), разработанная в 1920-1950-е гг. в предположении слабого отличия свойств зародыша от свойств объёмной среды. В работе [15] указывается на несоответствие КТН результатам прямого

атомистического моделирования процесса нуклеации при характерных размерах зародыша 1 нм. На основе прямого МД моделирования возможно детально исследовать кинетику распада метастабильного состояния, в частности, для состояний вблизи кинетической границы стабильности. Однако в большинстве работ, посвященным исследованию нуклеации методами компьютерного моделирования, рассматриваются единичные точки фазовой диаграммы, что не позволяет определить, как следует модифицировать КТН для соответствия численным экспериментам. В данной работе исследуется распад метастабильных состояний в широкой области фазовой диаграммы, оцениваются границы применимости КТН и разрабатывается теория нуклеации для той области, где неприменима КТН.

Пространственный масштаб задачи исследования нуклеации определяется размером критического зародыша при заданной степени метастабильности, а временной — временем ожидания критического зародыша [16]. Сложность задачи, таким образом, растет при движении от границы устойчивости фазы к кривой равновесия в силу роста размера критического зародыша и резкого увеличения времени жизни метастабильной фазы [17]. Применение высокопроизводительных вычислительных систем позволяет расширить диапазон метастабильности, в котором можно наблюдать нуклеацию в прямых расчетах. Хотя доступные в прямом моделировании частоты нуклеации пока на порядки выше достижимых в экспериментах, прямой расчет дает детальное описание кинетики формирования зародыша. Анализ МД траектории позволяет также получить форму энергетического барьера нуклеации, которая играет большую роль в теории нуклеации. С использованием непрямых методов, таких как *transition interface sampling*, можно расширить диапазон моделируемых частот нуклеации до экспериментально достижимых величин.



Рис. 5. Расширение круга доступных явлений при увеличении числа ядер в расчетах нуклеации

В [15] и [16] описана кинетика зарождения полостей в растянутой жидкости, кристалла в переохлажденном расплаве, а также кинетика роста полостей в жидкости. Особый интерес представляет режим постепенного создания метастабильности, что соответствует экспериментам по импульсному сжатию материалов или лазерной абляции. В таких процессах пространственный и временной масштаб определяются уже не единичным зародышем новой фазы, а зарождением и ростом одновременно множества зародышей. Для реализации такого режима в МД расчетах необходимо использование систем с размером миллионов до нескольких миллиардов атомов. На основе атомистического моделирования разрабатывается теория нуклеации при высоких перегревах и переохлаждениях. Развита модель для описания откола в жидкости при высоких скоростях растяжения на основе двухмасштабного подхода «нуклеация и рост полостей» (объединение МД с механикой сплошной среды) и сделана оценка откольной прочности гексана. В [18] приведены первые результаты для откола в жидком алюминии.

Расширение круга доступных явлений нуклеации при увеличении числа ядер, т.е. числа частиц в расчетах схематично показано на Рис. 5.

2.4. Супрамолекулярные системы

Газовые гидраты – нестехиометрические кристаллические соединения, внешне напоминающие лёд. Они состоят из молекул воды, образующих кристаллическую решётку, и молекул газа, заключённых в её полостях. Данные соединения, как правило, устойчивы при повышенных давлениях и низких температурах. Газовые гидраты формируют различные типы структур, что определяется главным образом размером молекул включения. Газовые гидраты активно изучаются в последние годы из-за их энергетического потенциала, а также рассматриваются как средство транспортировки газа на большие расстояния. В последние годы достигнуты большие успехи в понимании механизмов образования и распада газовых гидратов, развиты подходы для моделирования фазовой диаграммы, изучены процессы диффузии молекул газа.

Несмотря на существенный прогресс в области моделирования гидратов, много проблем еще не решено. В первую очередь это обусловлено большими характерными временами рассматриваемых процессов, вплоть до десятков и сотен микросекунд. Моделирование таких времен методами МД все еще затруднено и ограничивается небольшим, до 2-3 тысяч, числом атомов. Использование графических ускорителей (GPU) частично позволит обойти эту проблему и позволит существенно увеличить число атомов в системе.

На сегодняшний день моделирование газовых гидратов методами ТФП сильно затруднено, так как в них не существует однозначно корректного способа учета ван-дер-ваальсовского взаимодействия. По этой причине в большинстве работ используются классические методы МД и Монте-Карло. Существующие потенциалы взаимодействия позволяют качественно воспроизводить их свойства, тогда как в количественном отношении все еще есть расхождения с экспериментами. Следует учитывать, что моделирование таких систем требует больших вычислительных

затрат, что связано с необходимостью использования большого числа атомов для корректного описания фазовых превращений. Для эффективного моделирования таких систем необходимо использовать гибридные вычислительные системы (Рис. 6), что позволяет на порядки увеличить размер расчетной системы без существенного увеличения расчетного времени.

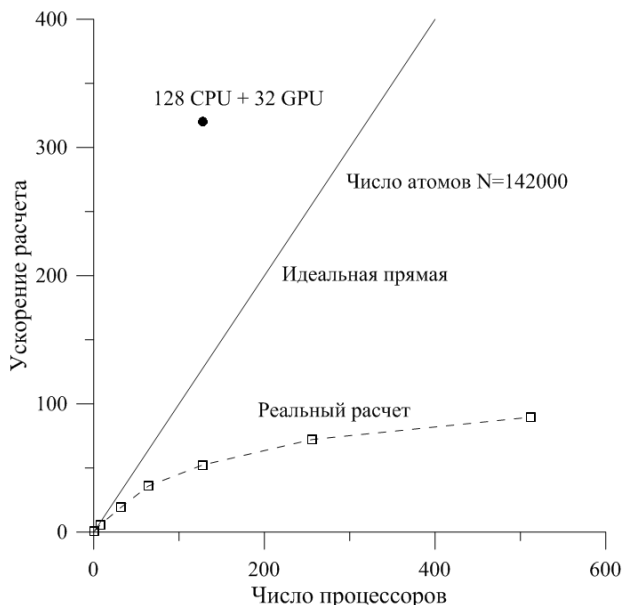


Рис. 6. Зависимость ускорения расчета от числа вычислительных ядер для 142000 атомов модели гидрата метана (тесты проведены на кластере «Ломоносов» Московского университета). Сплошная линия – идеальное ускорение, пунктирная линия – реальное ускорение. Точкой отмечен расчет с привлечением GPU

В работе [19] было проведено моделирование sI структуры гидрата метана методами МД, исследовано её плавление и перегрев. Проведено сравнение различных потенциалов для описания воды (SPC/E, TIP4P/2005, TIP4P/ICE), Исследованы метастабильные состояния перегретой sI структуры, рассчитана кинетическая гра-

ница устойчивости и кривая плавления. Изучено влияние числа молекул метана на распад метастабильное структуры.

В работе [20] изучалась недавно открытая экспериментально фаза C_0 гидратов водорода при давлениях порядка 5-7 кбар и температуре 170-250 К. Структура данной фазы в экспериментах однозначно не определена, предложено несколько различных вариантов расшифровки, один из которых ранее не наблюдался для других газовых гидратов. Методами молекулярной динамики исследованы возможные области устойчивости данных структур на фазовой диаграмме, установлены две возможные структуры, которые могут наблюдаться в эксперименте. В результате проведённых исследований получено более детальное описание фазовой диаграммы водородосодержащих гидратов в области высоких давлений.

2.5. Полимеры

Основу моделирования полимеров составляют методы классической и огрубленной молекулярной динамики. На низшем по длине и времени уровне используются метод классической МД. На более высоких мезо-уровнях используются так называемые огрубленные (coarse-grained) модели.

В МД моделях траектория движения отдельных атомов рассчитывается на основе эмпирических и полуэмпирических потенциалов взаимодействия. Физические свойства системы рассчитываются по формулам статистической физики, путем усреднения по числу частиц и времени.

В мезо- и макро моделях составные части полимеров и полимерных композитов представляются в упрощённой геометрии. Основной идеей метода является объединение нескольких маленьких частиц (групп атомов) в один большой блок (супер-атом) и использование общих силовых постоянных и геометрических параметров, основанных на простых соображениях гибридизации, вместо отдельных силовых постоянных и геометрических параметров, зависящих от конкретной комбинации атомов с учетом особенностей связи, валентных и торсионных углов.

Связь масштабов обеспечивается передачей параметров структуры нанокompозитного материала между уровнями. Ценность подобного последовательного с физической точки зрения подхода определяется тем, что основанные на нем многоуровневые модели могут иметь не только описательную, но и прогностическую силу, что чрезвычайно важно для решения задачи о создании материала с заданными свойствами и для разработки его состава *in silico* (Рис. 7).

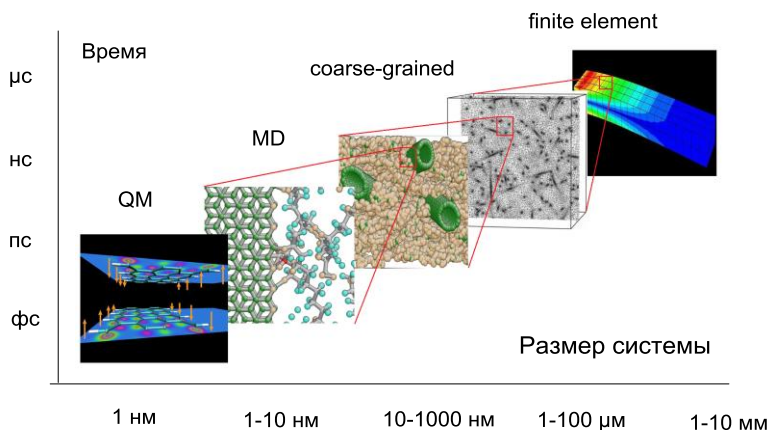


Рис. 7. Принципиальная схема многомасштабного моделирования полимерных композитов

3. Кулоновские системы

В силу дальнего действующего взаимодействия между заряженными частицами масштабируемость расчетов для кулоновских систем не столь очевидна, как для систем с короткодействующими потенциалами взаимодействия (Рис. 2). Поэтому приводимые ниже схемы носят в значительной степени качественный характер. Заметим, кулоновские силы имеют место и в некоторых примерах из приведенных в предыдущем разделе.

3.1. Пылевая плазма

Пылевая плазма является ионизованным газом, содержащим макрочастицы конденсированного вещества (пыль) микронных размеров. Такие частицы либо самопроизвольно образуются в плазме в результате различных процессов, либо вводятся в плазму извне. Пылевая плазма встречается в хвостах комет, кольцах планет-гигантов, верхних слоях атмосфер планет, и может образовываться в результате технологических процессов (при сгорании топлива, травлении и напылении, в производстве наночастиц и т.д.). Наличие макрочастиц в плазме может существенно влиять на ее свойства, а также на термодинамику системы и процессы переноса. Макрочастицы, изначально не обладающие ни электрическим зарядом, ни дипольным (квадрупольным и т.д.) моментом, в плазме могут заряжаться потоками электронов и ионов, а также путем фото-, термо- или вторичной эмиссии электронов и приобретать значительный отрицательный или положительный электрический заряд.

Теоретическое исследование плазменно-пылевой системы и её теплофизических свойств основывается на методах статистической физики, классической механики и МД моделирования. Учитывается анизотропию температуры системы пылевых частиц. Достоверность результатов проверяется самосогласованностью результатов и сопоставлением с экспериментальными данными.

В рамках рассматриваемых подходов было осуществлено предварительное исследование условий применимости термодинамических функций к пылевой плазме [21][22][23]. Создана методика по исследованию свойств плазменно-пылевой системы в газовом разряде с помощью метода МД, в частности, написаны уравнения движения пылевых частиц. Исследовано явление аномального разогрева колебаний пылевых частиц в плазме и предложен механизм разогрева. Обнаружена возможность резонанса колебаний пылевых частиц, откуда сделаны оценки частоты, амплитуды и кинетической энергии колебаний пылинок. Написан программный пакет, моделирующий движение системы пылевых частиц в газовом разряде при комнатной температуре с учётом флуктуаций за-

ряда и особенностей приэлектродного слоя. Наблюдаемая в эксперименте анизотропия кинетической температуры пылевых частиц была обнаружена и в моделировании.

Для исследования зависимости свойств системы от её параметров используется специальная методика. Большое число параметров и высокая вычислительная сложность такой задачи приводит к необходимости проводить большое число расчётов, что возможно осуществить только на больших вычислительных кластерах (Рис. 8).

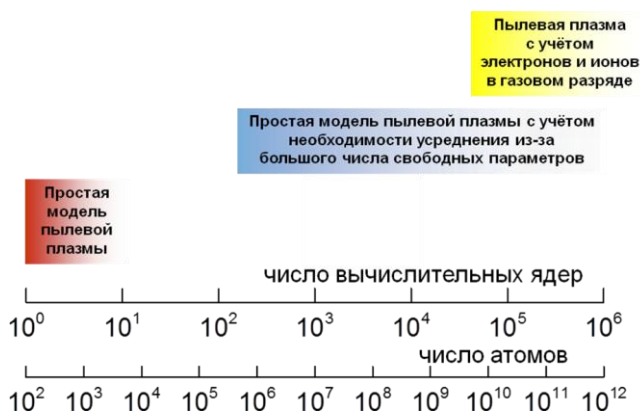


Рис. 8. Расширение круга моделей пылевой плазмы при увеличении числа ядер

Вычислительная сложность обусловлена резким отличием временных масштабов характерных процессов в системе, что требует значительно больше миллиарда шагов для вывода системы на равновесие. Необходимо проводить варьирование около 20 параметров, чтобы равнозначно необходимости заполнить сетку в 20-мерном пространстве, где каждый узел сетки соответствует какому-то набору параметров и, как минимум, одному численному эксперименту.

3.2. Ионная плазма и пробой газов и жидкостей

При импульсных разрядах в плотных электроотрицательных средах в результате прилипания электронов за времена порядка наносекунд образуется ионная плазма. Характерное время жизни такой системы может составлять десятки микросекунд или больше. Процессы рекомбинации ионов существенны при восстановлении электрической прочности после пробоя элегаза и трансформаторного масла в высоковольтном оборудовании, при релаксации после импульсного разряда в воде, при инициации химических лазеров, при разрядах в воздухе и др. На стадии распада плазмы разряда в таких средах может образовываться сильнонеидельная ионная плазма. Процессы рекомбинация должны учитываться при описании состава, кинетики химических процессов и гидродинамики плазмы, особенно в случае быстропротекающих сильнонеравновесных процессов.

В работах авторов решена задача описания рекомбинации в неидеальной электрон-ионной плазме [24][25][26]. Проведено предварительное рассмотрение рекомбинации в неидеальных ионных системах на примере элегаза и фтора [27]. Развита новый подход, сочетающий молекулярное моделирование и аналитическое рассмотрение. Был получен ряд оригинальных результатов.

- (1) При описании рекомбинации ионов в элегазе оказывается применима модель подавления рекомбинации в неидеальной плазме вследствие формирования “узкого горла” – зоны многочастичных флуктуаций ΔE , разделяющей области свободных зарядов и парных состояний. При этом значение параметра неидеальности Γ_0 , при котором происходит смена механизмов рекомбинации в ионной плазме оказывается меньше, чем в электрон-ионной плазме из-за увеличения ширины области ΔE в результате взаимодействия ионов с нейтральными молекулами.
- (2) Рекомбинация ионов в плазме фтора замедлена сольватацией ионов и проходит через образование промежуточной пары кластерных ионов. Объяснено подобие скорости рекомбинации как по температуре, так и давлению. Зависимость скорости рекомбинации от неидеальности при малых параметрах Γ обусловлена зависимостью равновесной концентрации рыхлых кластер-

ных пар от коэффициента активности ионов, который определяется в этом случае значением Γ .

Масштабируемости квантовых и классических расчетов схематично представлены на РИС. 9.

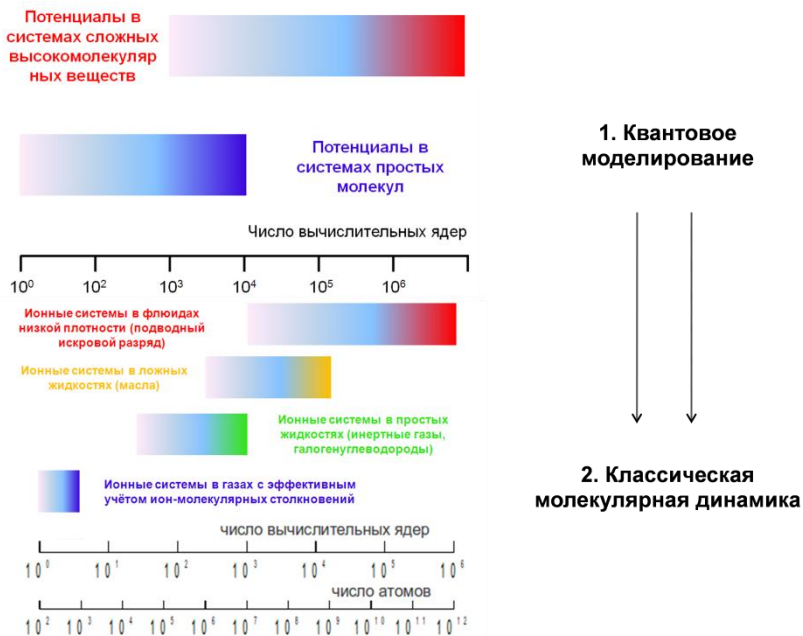


Рис. 9. Расширение доступных потенциалов межчастичного взаимодействия и повышение их точности при увеличении числа ядер при квантовых (1) и классических расчетах (2)

3.3. Электрохимия и электрический двойной слой

Целью работ в данной области является выявление “узких мест”, ограничивающих предельные параметры и рабочие характеристики суперконденсаторов. Имеются в виду емкость, внутреннее сопротивление и др. Результаты моделирования должны позволить

оптимизировать структуру и состав двойного слоя суперконденсатора с целью достижения наилучших рабочих характеристик.

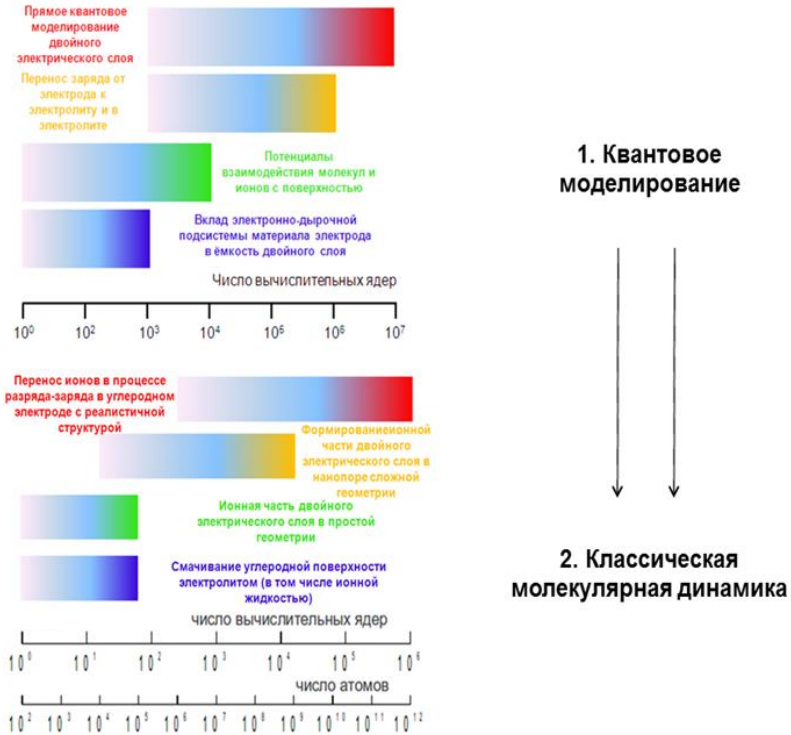


Рис. 10. Расширение круга явлений при квантовых расчетах (1) и круга систем в классических расчетах, использующих, квантовые результаты (2), при увеличении числа ядер

Двойной электрический слой в суперконденсаторах образуется на границе проводника и жидкого или твёрдого вещества, обладающего ионной проводимостью. Проводимость проводника может иметь электронную, дырочную или электронно-дырочную природу. В соответствии с типом используемого электролита устройства подразделяются на несколько групп. К первой группе относятся конденсаторы с твёрдым электролитом, в качестве которого чаще

всего находят применение двойные соли серебра, обладающие высокой ионной проводимостью при комнатной температуре. Такие конденсаторы, как правило, имеют сравнительно небольшие рабочее напряжение (порядка 0.7 В) и энергоёмкость. Это компактные твердотельные устройства, находящие применение в микроэлектронике. Ко второй группе относятся конденсаторы с водным электролитом, представляющим чаще всего водный раствор щелочей или серной кислоты. Рабочее напряжение в таких системах может составлять величину до 1.2 В, а энергоёмкость до 100 Дж/г. Такие конденсаторы обладают низким внутренним сопротивлением и высокой удельной мощностью, что объясняется высокой подвижностью протона в водных растворах. Наибольшими значениями удельной энергоёмкости обладают конденсаторы третьей группы, в которых в качестве электролита используются апротонные растворители, как правило, ионные жидкости, при этом, однако, конденсаторы с неводными электролитами обычно уступают конденсаторам с кислотными и щелочными электролитами по величине удельной мощности. Независимо от типа используемого электролита, в качестве материала электродов в суперконденсаторах, как правило, используются активированный уголь, углеродные нанотрубки, графен.

В рамках рассматриваемых подходов было осуществлено предварительное исследование двойного электрического слоя на границе плоского слоя графита и водного раствора щелочного электролита [28]. Это позволило установить следующие особенности такой системы:

- (1) Влияние двойного электрического слоя в электронно-дырочной плазме графита на ёмкость системы преобладает по сравнению с влиянием двойного слоя в электролите на плоском слое графита;
- (2) Сделана оценка предельных значений ёмкости двойного слоя на поверхности электрода в случае плоского бездефектного графита, показано, что данная оценка согласуется с имеющимися в литературе экспериментальными данными;

- (3) Сделаны предположения, что наличие большого количества дефектов и частичная разупорядоченность отдельных графитовых плоскостей объясняют отклонение реальных значений емкости углеродных суперконденсаторов от полученных оценок.

Расширение круга явлений при квантовых расчетах и круга систем в классических расчетах, использующих, квантовые результаты, при увеличении числа ядер схематично дано на РИС. 10.

4. Параллелизм классических атомистических моделей

Среди современных высокопроизводительных систем во всем мире все чаще используются гибридные системы, включающие графические (GPU) или иные ускорители для выполнения векторных операций в рамках модели SIMD. Эти ускорители демонстрируют быстроедействие, в десятки или сотни раз превышающее быстроедействие систем на традиционных процессорах (ЦПУ – центральное процессорное устройство). Однако создание программ, эффективно использующих вычислительные возможности ускорителей, это достаточно трудоемкий процесс, требующий учета специфики аппаратной архитектуры, без которого производительность на конкретной задаче может оказаться существенно меньше теоретического предела для данного устройства. В работе планируется использовать накопленные данные по эффективности использования ускорителей для тех или иных этапов моделирования, что позволит сократить время на разработку программ. Например, согласно многочисленным современным исследованиям и опыту авторов, GPU оказываются наиболее эффективны для задач классической МД.

Кроме того, существующие и перспективные вычислительные системы имеют всё более выраженную иерархичность в структуре доступа к памяти:

- многоядерные процессоры с общим кэшем – UMA SMP,
- многоядерные/многопроцессорные системы с отдельным кэшем – NUMA SMP, многоуровневая память графических ускорителей, различные уровни связности между узлами суперком-

пьютерного кластера, грид-система. Для обеспечения требуемой масштабируемости программ по числу ядер необходимо учитывать эту иерархию на программном уровне.

Важной тенденцией в современных методах программирования является минимизация вывода информации на внешние носители, обеспечение отказоустойчивости на программном уровне с учетом потенциальной ненадежности отдельных вычислительных узлов или каналов связи, создание приносимых программ для различных аппаратных платформ, использование грид-технологий, например, для проведения серийных расчетов.

Поскольку одной из ключевых задач работы является использование современных супер-ЭВМ пета- и эксафлопсного класса, большое внимание уделяется распараллеливанию и адаптации программ для современных и перспективных суперкомпьютерных архитектур. Ключевыми моментами при разработке программ являются:

- (1) использование многоуровневой (иерархической) модели памяти;
- (2) распараллеливание на верхнем уровне средствами MPI с учетом топологии коммуникационной сети верхнего уровня;
- (3) распараллеливание средствами MPI с учетом топологии коммуникационной сети нижнего уровня, связывающей вычислительные узлы в пределах локальной группы (supernode);
- (4) распараллеливание с использованием многоядерных центральных процессоров (ЦПУ) и графических ускорителей (GPU) в рамках модели общей памяти;
- (5) оптимизация программ для графических ускорителей с использованием наиболее быстрых компонент внутренней памяти (shared memory) внутри блока нитей исполнения;
- (6) параллельный вывод больших объемов информации на внешние носители или отказ от записи траекторий на диск (обработка «на лету»);
- (7) отказоустойчивость за счет создания множественных точек восстановления (контрольных точек);

- (8) автоматизация серийных расчетов в рамках численного эксперимента с учетом специфики системы управления заданий на целевом кластере.

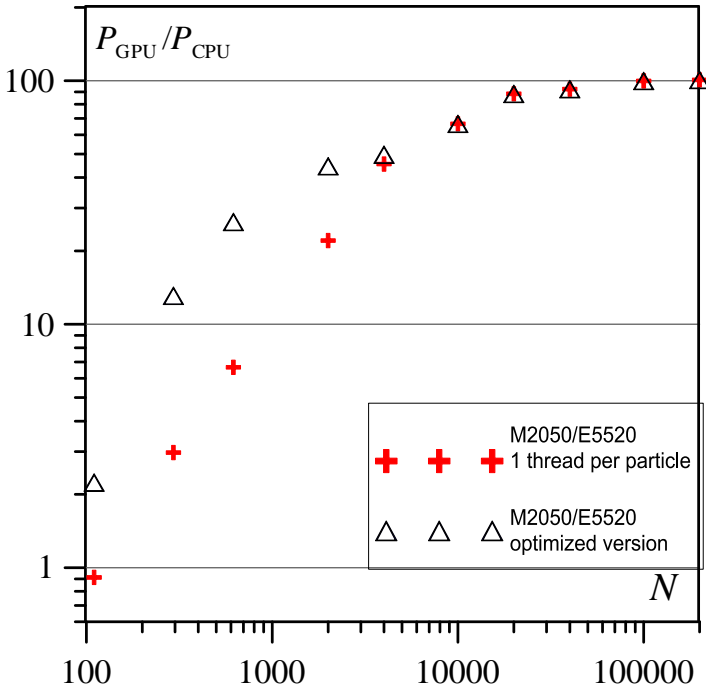


Рис. 11. Отношение быстродействия GPU Tesla M2050 к одному ядру ЦПУ Intel Xeon E5520 при моделировании неидеальной плазмы в зависимости от количества частиц в системе. Крестики – алгоритм с одним потоком на частицу, треугольники – алгоритм с несколькими потоками на частицу

Выбор метода распараллеливания на нижнем уровне (GPU/многоядерные процессоры) производится на основе специфики используемого метода (классическая молекулярная динамика, квантовая молекулярная динамика, кинетические уравнения и др.). Для разработки программ применяются языки C/C++, Fortran 90, CUDA, библиотеки MPI, Intel MKL, boost и др.

Авторами разработан алгоритм и создана программа МД моделирования неидеальной электрон-ионной плазмы, адаптированная для выполнения на GPU [29]. Создание данной программ позволило существенно сократить время проведения расчетов, увеличить число частиц в моделируемой системе и, как следствие, обнаружить качественно новые физические эффекты. Максимальное ускорение, достигнутое на GPU Tesla M2050, по сравнению с одним ядром ЦПУ Intel Xeon E5520 составило 100 раз (Рис. 11). Это, в свою очередь, позволило увеличить размеры моделируемой физической системы с 10^3 до 10^5 частиц в расчетной ячейке. Для оптимизации алгоритма при малом числе частиц был реализован метод расчета, увеличивающий число потоков на частицу для малого числа частиц (верхний ряд точек на Рис. 11). Полученная программа была использована для моделирования неидеальной плазмы, образующейся при ионизации твердотельных наноразмерных кластеров короткими лазерными импульсами [30].

Кроме того, была разработана библиотека подпрограмм C++ для атомистического моделирования на распределенных вычислительных системах облачного типа [31]. Реализован программный интерфейс для ресурс-брокеров PBS, SLURM, CCPB МСЦ РАН, который предоставляет разработчику научных приложений все функции для инициализации, запуска, мониторинга, остановки задач и передачи данных. Полученная библиотека была применена для задач квантовой и классической МД. Показано, что для метода классической МД суперкомпьютер МВС-100К позволяет проводить расчеты с 1 млрд. частиц и около 100 пс/сутки (100 тыс. шагов/сутки) при полной загрузке. Проведена адаптация программ моделирования к грид-системам, использующим гибридные вычислительные узлы с графическими ускорителями [32].

5. Параллелизм в квантовых расчетах

5.1. Масштабируемость

На РИС. 9 и РИС. 10 явно показан двухмасштабный характер проводимых нами работ. Наличие более глубокого, кантового уровня подразумевалось и в Разделе 2. Масштабируемость квантового уровня дана весьма условно, поскольку по сравнению с одномерной масштабируемостью РИС. 2 появляется еще одна ось – число базисных функций, по которым раскладывается квантовое решение (РИС. 12).

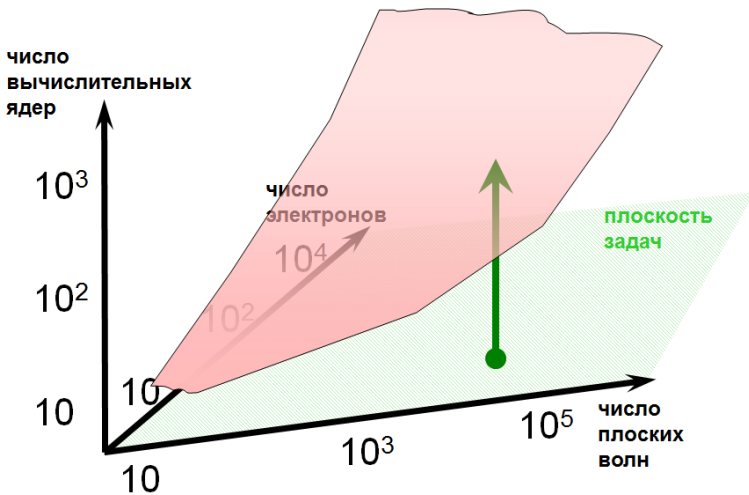


РИС. 12. Схема, иллюстрирующая многопараметрическую масштабируемость задач квантового моделирования

В работе [33] представлен обзор распараллеливания алгоритмов *ab initio* МД на основе теории функционала электронной плотности в базисе плоских волн. Проанализированы требования к балансу вычислительной мощности узлов и коммутационной сети супер-ЭВМ с точки зрения достижения максимальной эффективности для примеров особенно требовательных в вычислительном отношении задач физики разогретого плотного вещества. Описана альтер-

нативная стратегия параллелизации в вейвлетном базисе и выигрыш в производительности при использовании гибридных вычислительных систем в этом случае.

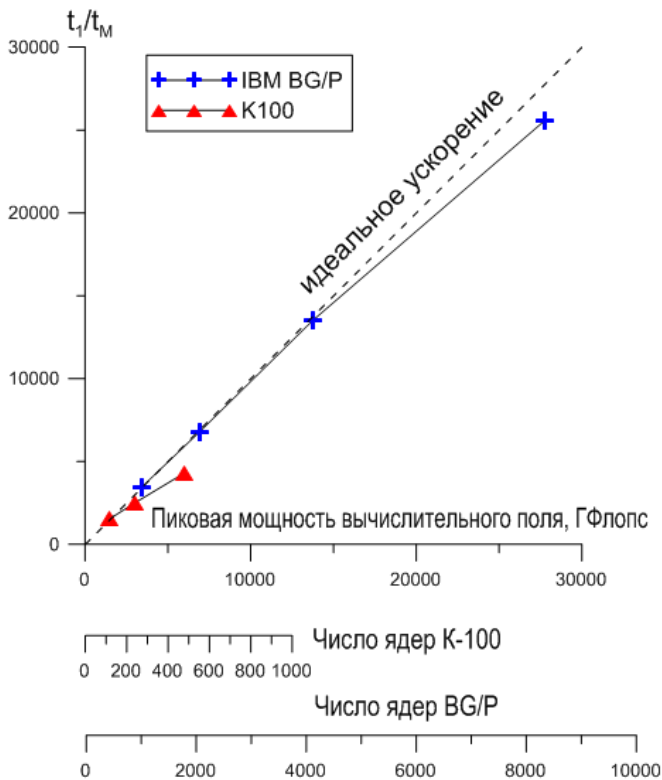


Рис. 13. Оценка параллельной эффективности для модели 2048 молекул воды для различных топологий суперкомпьютеров (расчет в рамках ТФП с использованием пакета CP2K). Приведены данные для топологии толстое дерево (суперкомпьютер K-100, ИИМ им. М.В. Келдыша РАН) и 3-х мерный тор [34] (IBM BG/P, Research Center Jülich, Германия)

5.2. Роль архитектуры

Как и молекулярно-динамические задачи, *ab initio* расчеты являются чувствительными к архитектуре вычислительных кластеров. Вклад в снижение масштабируемости вносит обмен данными между узлами, поскольку в задачах данного типа не представляется возможным добиться распараллеливания вычислений на полностью независимые потоки. В связи с этим, при увеличении количества задействованных вычислительных модулей величина эффективного ускорения расчета падает.

На Рис. 13 представлено сравнение эффективности масштабирования ТФП расчета для двух суперкомпьютеров с различной топологией коммутационных сетей: толстое дерево и трехмерный тор. В качестве тестового примера производительности был выбран пакет CP2K. Расчеты проводились для системы, насчитывающей 2048 молекул воды. Данные для IBM BlueGene/P взяты из [34]. Из графика видно, что на системе с топологией толстое дерево данный тип задач в пределах больших размеров вычислительного поля масштабируется хуже: существенное отклонение от прямой идеального масштабирования наблюдается уже при использовании 512 ядер, в то время как на IBM BlueGene/P ускорение растет линейно вплоть до подключения нескольких тысяч ядер.

6. Многомасштабные подходы

6.1. Выход за рамки атомистического моделирования

Многомасштабные подходы позволяют выйти за пределы временных и пространственных масштабов, доступных атомистическому моделированию. Становится возможным переход к кинетическим подходам, механике сплошных сред и др. При этом возникают теоретико-физические проблемы связи между моделями на разных масштабах. Последовательность взаимосвязанных подходов выстраивается от квантовых наномасштабов до макромасштабов для решения конкретных задач (Рис. 14). Возможно, первый пример такого подхода дан в [35].



Рис. 14. Ступени многомасштабного подхода и их взаимосвязи

6.2. Локальность обменов данными

Ограничение масштабируемости алгоритмов как молекулярной динамики, так и механики сплошных сред (МСС), определяется межпроцессорным обменом данными, что схематично проиллюстрировано на Рис. 15. В зависимости от геометрии системы задача разделяется на отдельные пространственные области, объемы которых считаются на разных процессорах. На границе областей процессоры обмениваются данными для расчета сил в атомистическом моделировании или данными для решения дифференциальных уравнений в МСС. Это примеры методов распараллеливания на основе декомпозиции по пространству. И в атомистических, и в МСС моделях пространственная локальность взаимодействия зачастую обеспечивает высокую параллельную эффективность данного подхода. Очевидно, что такого рода параллельные алгоритмы могут быть особенно хорошо оптимизированы на большие размеры вычислительного поля для сетей с тороидальной топологией, которая демонстрирует аналогичную локальность и, соответственно, обеспечивает высокую скорость обменов данными между топологически близкими вычислительными элементами [36].

Нелокальные обмены, однако, являются распространенной чертой вычислительных алгоритмов. Широкий класс подобных алгоритмов в области молекулярного моделирования соответствует многомерному быстрому преобразованию Фурье. Адаптация подоб-

ных алгоритмов на сети тороидальной топологией является уже весьма разработанной частью необходимого инструментария параллельных вычислительных алгоритмов [37].

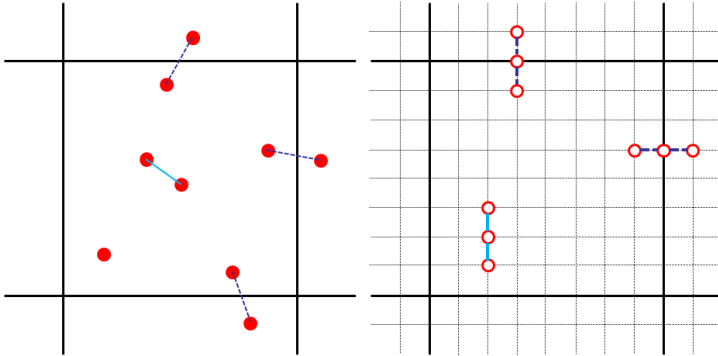


Рис. 15. Схематичное сопоставление масштабируемости атомистического моделирования (слева) и в задачах механики сплошных сред (справа)

Тороидальные топологии представляют собой одно из магистральных направлений развития интерконнекта. Суперкомпьютеры IBM BlueGene/Q основаны на топологии 5-ти мерного тора, интерконнект Fujitsu Tofu соответствует неполному 6-ти мерному тору. Таким образом, развитие идет в направлении роста локальной связности коммуникаций. Хотя «тороидальность» сама по себе и не является обязательной. Так на смену интерконнекту с топологией 3-х мерного тора Cray Gemini пришла новая коммуникационная сеть Cray Aries с гибридной топологией «бабочка» (dragonfly).

Очевидно, что развиваемые вычислительные алгоритмы «эксафлопсной эры» должны будут учитывать особенности интерконнекта. И наоборот: выбор коммуникационной сети должен определяться будущими задачами. При этом проблема наилучшего отображения коммуникационного шаблона задачи на топологию коммуникационной сети — выходит на передний план [38] вместе с требованиями повышения локальности коммуникаций используемых алгоритмов для снижения энергозатрат [39].

Заключение

Предложен набор примеров, позволяющий выяснять потребности перспективных физических задач в полномасштабных расчетах на суперкомпьютерах, т.е. может ли решение той или иной задачи загрузить одновременно сотни тысяч и более вычислительных ядер в одном расчете и, главное, нужно ли это. Подход основан на проверке масштабируемости алгоритмов при переходе к большему числу вычислительных ядер и на теоретической оценке размеров системы, требуемых для рассмотрения физической задачи. Развиваемый подход позволяет установить перспективу нарастания сложности задач, принадлежащих к одной области физики, возможность решения которых будет открываться с прогрессом развития суперкомпьютеров.

Приведены примеры из области атомистического моделирования и вычислений методом молекулярной динамики. Показано, что подход имеет более широкую область применения, в частности, в механике сплошных сред.

Подчеркивается, что успех применения суперкомпьютеров равной производительности к решению одной и той же физической задачи может сильно зависеть от архитектуры суперкомпьютера.

Благодарности. Работа частично поддержана грантом РФФИ 13-01-12070-офи_м, отдельные разделы работы частично поддержаны грантами РФФИ 13-08-01022-а (Ланкин А. В., Норман Г. Э.), 13-08-01428-а (Куксин А. Ю., Смирнов Г. С., Стегайлов В. В.), 12-08-00666-а (Орехов Н. Д., Стариков С. А.), 12-08-33140-мол-а_вед (Куксин А. Ю., Писарев В. В., Стариков С. А.), 12-02-33170 мол-а_вед (Ланкин А. В., Морозов И. В.), 12-02-31783-мол-а (Морозов И. В.) 12-08-31461-мол_а (Тимофеев А. В.) Расчеты выполнены в МСЦ РАН, на кластерах МФТИ-60 кафедры информатики МФТИ, К-100 ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, «Ломоносов» МГУ им. М. В. Ломоносова. Использовались пакеты LAMMPS, VASP, CPMD, CP2K и собственные разработки, о которых сказано в тексте.

Список литературы

- [1] INCITE program. URL: <http://www.doeleadershipcomputing.org/>
- [2] IBM Journal of Research and Development. 2005. V. 49. N. 2/3. URL: <http://www.research.ibm.com/journal/rd49-23.html>
- [3] Янилкин А. В., Жилияев П. А., Куксин А. Ю., Норман Г. Э., Писарев В. В., Стегайлов В. В. Применение суперкомпьютеров для молекулярно-динамического моделирования процессов в конденсированных средах // Вычислительные методы и программирование. 2010. Т. 11, с. 111–116.
- [4] Норман Г. Э., Стегайлов В. В. Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // Математическое моделирование. 2012. Т. 24, № 6, с. 3–44.
- [5] Insepov Z., Rest J., Yacout A. M., Kuksin A. Yu., Norman G. E., Stegailov V. V., Starikov S. V., Yanilkin A. V. Derivation of kinetic coefficients by atomistic methods for studying defect behavior in Mo // J. Nuclear Materials. 2012. Vol. 425, № 1–3, p. 41–47.
- [6] Veshhunov M. S., Boldyrev A. V., Ozrin V. D., Shestak V. E., Tarasov V. I., Norman G. E., Kuksin A. Yu., Pisarev V. V., Smirnova D. E., Starikov S. V., Stegailov V. V., Yanilkin A. V. Development of the mechanistic fuel performance and safety code SFPR using the multi-sale approach // TMS-2013 Supplemental Proceedings, 2013, P. 657.
- [7] Starikov S. V., Insepov Z., Rest J., Kuksin A. Yu., Norman G. E., Stegailov V. V., Yanilkin A. V. Radiation-induced damage and evolution of defects in Mo // Physical Review B. 2011. Vol. 84, № 10, p. 104109.
- [8] Smirnova D. E., Starikov S. V., Stegailov V. V. Interatomic potential for uranium in a wide range of pressure and temperatures // J. Phys.: Condensed Matter. 2012. Vol. 24, № 1, p. 015702.
- [9] Smirnova D. E., Kuksin A. Yu., Starikov S. V., Stegailov V. V., Insepov Z., Rest J., Yacout A. M. A ternary EAM interatomic potential for U–Mo alloys with xenon // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2013. Vol. 21, p. 035011.
- [10] Куксин А. Ю., Рохманенков А. С., Стегайлов В. В. Положения атомов и пути диффузии Н и Не в решетке alpha-Ti // Физика твердого тела. 2013. Т. 55, № 2, с. 326–331.
- [11] Стариков С. В., Стегайлов В. В., Норман Г. Э., Фортов В. Е., Ишино М., Танака М., Хасегава Н., Нишикино М., Охба Т., Каихори Т., Очи Е., Имазоно Т., Кавачи Т., Тамотсу С., Пи-

- куз Т. А., Скобелев И. Ю., Фаенов А. Я. Лазерная абляция золота: эксперимент и атомистическое моделирование // Письма в ЖЭТФ. 2011. Т. 93, № 11, с. 719–725.
- [12] Норман Г. Э., Стариков С. В., Стегайлов В. В. Атомистическое моделирование лазерной абляции золота: эффект релаксации давления // ЖЭТФ. 2012. Т. 141, № 5, с. 910-918.
- [13] Norman G. E., Starikov S. V., Stegailov V. V., Fortov V. E. et al. Nanomodification of gold surface by picosecond soft X-ray laser pulse // Journal of Applied Physics. 2012. Vol. 112, p. 013104.
- [14] Norman G. E., Starikov S. V., Stegailov V. V., Saitov I. M., Zhilyaev P. A. Atomistic modeling of warm dense matter in the two-temperature state // Contributions to Plasma Physics. 2013. Vol. 53, № 2, p. 129–139.
- [15] Kuksin A. Yu., Norman G. E., Pisarev V. V., Stegailov V. V., Yanilkin A. V. Theory and molecular dynamics modeling of spall fracture in liquids // Phys. Rev. B. 2010. Vol. 82, № 17, p. 174101.
- [16] Норман Г.Э., Писарев В.В. Молекулярно-динамический анализ кристаллизации переохлажденного расплава алюминия // Журнал физической химии. 2012. Т. 86. № 9, p. 1578-1583.
- [17] Писарев В. В. Определение свободной энергии поверхности кристалл-расплав // Теплофизика высоких температур. 2012. Т. 50, № 6, с. 769–774.
- [18] Kuksin A. Yu., Levashov P. R., Pisarev V. V., Povarnitsyn M. E., Yanilkin A. V., Zakharenkov A. S. Model of fracture of liquid aluminum based on atomistic simulations // in Physics of Extreme States of Matter. Chernogolovka, 2011. p. 57.
- [19] Smirnov G. S., Stegailov V. V. Melting and superheating of sI methane hydrate: molecular dynamics study // Journal of Chemical Physics. 2012. Vol. 136, № 4, p. 044523.
- [20] Smirnov G. S., Stegailov V. V. Toward determination of the new hydrogen hydrate clathrate structures // Journal of Physical Chemistry Letters. 2013. Vol. 4, p. 3560–3564.
- [21] Норман Г. Э., Тимофеев А. В. Применение понятия «температура» для описания динамики пылевых частиц в плазме газового разряда // Докл. Академии Наук. 2012. Т. 446, № 4, с. 1–5.
- [22] Норман Г. Э., Стегайлов В. В., Тимофеев А. В. Аномальная кинетическая энергия системы пылевых частиц в плазме газового разряда // ЖЭТФ. 2011. Т. 140, № 5, с. 1017–1032.

- [23] Norman G. E., Timofeev A. V. Kinetic temperature of dust particle motion in gas-discharge plasma // *Physical Review E*. 2011. Т. 84, № 5, p. 056401.
- [24] Ланкин А. В. Столкновительная рекомбинация в неидеальной плазме // *ЖЭТФ*. 2008. Т. 134, № 5, с. 1013–1023.
- [25] Lankin A. V., Norman G. E. Collisional recombination in strongly coupled plasmas // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 2009. Vol. 42, № 21, p. 214042.
- [26] Lankin A., Norman G. Density and nonideality effects in plasmas // *Contrib. Plasma Physics*. 2009. Vol. 49, № 10, p. 723–731.
- [27] Lankin A., Norman G. Recombination in dense ion plasmas // *Contributions to Plasma Physics*. 2013. Vol. 53, № 10.
- [28] Ланкин А. В., Норман Г. Э., Стегайлов В. В. Атомистическое моделирование взаимодействия электролита с графитовыми наноструктурами в перспективных суперконденсаторах // *Теплофизика высоких температур*. 2010. Т. 48, № 6, с. 877–885.
- [29] Морозов И. В. Моделирование кластерной наноплазмы методом МД // *Наноструктуры. Математическая физика и моделирование*. 2011. Т. 5, № 1/2, с. 39–56.
- [30] Raitza T., Röpke G., Reinholz H., Morozov I. Spatially resolved dynamic structure factor of finite systems from molecular dynamics simulations // *Physical Review E*. 2011. Vol. 84, p. 036406.
- [31] Morozov I. V., Valuev I. A.. Automatic distributed workflow generation with GridMD library // *Computer Physics Communications*. 2011. Vol. 182, p. 2052–2058.
- [32] Morozov I. V., Kazennov A. M., Bystryi R. G., Norman G. E., Pisarev V. V., Stegailov V. V. Molecular dynamics simulations of the relaxation processes in the condensed matter on GPUs // *Computer Physics Communications*. 2011. Vol. 182, p. 1974–1978.
- [33] Жилияев П. А., Стегайлов В. В. Ab initio молекулярная динамика: перспективы использования многопроцессорных и гибридных суперЭВМ // *Вычислительные методы и программирование*. 2012. Т. 13. С. 37–45.
- [34] Bethune I, Carter A, Guo X, Korosoglou P. Million Atom KS-DFT with CP2K // *PRACE White Paper*. 2011.
- [35] Insepov Z. A., Karataev E. M., Norman G. E., The kinetics of condensation behind the shock front // *Zeitschrift fur Physik D: Atoms, Molecules and Clusters*. 1991. Vol. 20, № 1-4, p. 449–451.
- [36] Bhatele A., Kale L. V., Kumar S. Dynamic topology aware load balancing algorithms for molecular dynamics applications // *Pro-*

- ceedings of the 23rd International Conference on Supercomputing. P. 110-116. URL: <http://dx.doi.org/10.1145/1542275.1542295>
- [37] Ayala O., Wang L.-P. Parallel implementation and scalability analysis of 3D Fast Fourier Transform using 2D domain decomposition // Parallel Computing. 2013. V. 39. P. 58-77.
- [38] Hoefer T., Snir M. Generic topology mapping strategies for large-scale parallel architectures // Proceedings of the 2011 ACM International Conference on Supercomputing. P. 75-85. URL: <http://dx.doi.org/10.1145/1995896.1995909>
- [39] Kogge P. et al. ExaScale computing study: technology challenges in achieving exascale systems. DARPA Inf. Processing Techn. Office. 2008. URL: <http://www.cse.nd.edu/Reports/2008/TR-2008-13.pdf>

Об авторах:



Алексей Юрьевич Куксин

Кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Объединенного института высоких температур РАН, доцент кафедры молекулярной физики Московского физико-технического института, лауреат гранта Президента РФ для молодых ученых-кандидатов наук 2011 г.

e-mail:

alexey.kuskhin@gmail.com



Александр Валерьевич Ланкин

Кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник ОИВТ РАН, ассистент кафедры общей физики МФТИ, лауреат медали РАН с премией для студентов вузов России 2007 г.

e-mail:

alex198508@yandex.ru

**Игорь Владимирович Морозов**

Кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией ОИВТ РАН, доцент кафедры информатики МФТИ, доцент кафедры прикладной математики Высшей школы экономики, лауреат медали РАН с премией для молодых учёных России 2004 г., лауреат гранта Президента РФ для молодых ученых–кандидатов наук 2010 г.

e-mail: morozov@ihed.ras.ru

**Генри Эдгарович Норман**

Доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник ОИВТ РАН, профессор кафедры молекулярной физики МФТИ, Соросовский профессор 1997 и 1998 г.

e-mail: genri.norman@gmail.com

**Никита Дмитриевич Орехов**

Стажер-исследователь ОИВТ РАН, студент МФТИ.

e-mail: nikita.orekhov@gmail.com

**Василий Вячеславович Писарев**

Кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник ОИВТ РАН, ассистент кафедры молекулярной физики МФТИ, лауреат медали РАН с премией для студентов вузов России 2012 г.

e-mail: pisarevvv@gmail.com

**Григорий Сергеевич Смирнов**

Младший научный сотрудник ОИВТ РАН, аспирант МФТИ.

e-mail: grsmirnov@gmail.com

**Сергей Валерьевич Стариков**

Кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией ОИВТ РАН, ассистент кафедры общей физики МФТИ, лауреат гранта Президента РФ для молодых ученых–кандидатов наук 2012 г.

e-mail: redshuhart@yandex.ru

**Владимир Владимирович Стегайлов**

Доктор физико-математических наук, заведующий отделом ОИВТ РАН, доцент кафедры молекулярной физики МФТИ, лауреат медали РАН с премией для студентов вузов России 2004 г., лауреат гранта Президента РФ для молодых ученых–кандидатов наук 2007 и 2010 гг.

e-mail: stegailov@gmail.com

**Алексей Владимирович Тимофеев**

Кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией ОИВТ РАН, доцент кафедры прикладной математики ВШЭ, ассистент кафедры общей физики МФТИ, лауреат медали РАН с премией для студентов вузов России 2011 г.

e-mail: timofeevalv1@gmail.com

A. Yu. Kuksin, A. V. Lankin, I. V. Morozov, G. E. Norman, N. D. Orekhov, V. V. Pisarev, G. S. Smirnov, S. V. Starikov, V. V. Stegailov, A. V. Timofeev. Predictive modeling & simulation of properties and multi-scale processes in materials science. Tasks for Exaflops-era supercomputers.

ABSTRACT. Methods and approaches are developed for the predictive multiscale atomistic modeling & simulation. Quantum density functional theory is applied to study electron subsystems at the nano (pico) space scale. Systems of moving atoms are treated with the classical molecular dynamics up to the microscale. Kinetic theory and continuum mechanics allow of consideration at macroscale. Particular attention is paid to the data exchange between different scales, that is to the integrated treating of the system from nano- to macroscale.

The approach developed allows to extend the area of the applicability with the supercomputer progress: 1) radiation-induced structure deformation of fuels of the new generation fast neutrons reactors, 2) metals surface modification at irradiation with subpicosecond laser pulses, 3) phase transition kinetics in metastable liquids, 4) prediction of methane and hydrogen gas hydrates structure and their properties, 5) multiscale polymers models, 6) dusty plasmas, 7) ion recombination in liquid and dense-gas electronegative dielectrics after the breakdown, 8) electric double layer formation at the border of a carbon electrode and various electrolytes. Scalability and description of the extension with the increase of computational cores number available are considered for each task. Supercomputer technology development needed is discussed for the atomistic modeling & simulation GPU hybrid systems included.

Key Words and Phrases: atomistic modeling, electronic structure, molecular dynamics, multiscale modelling, radiation aging, laser ablation, nucleation, hydrates, polymers, dusty plasma, electrochemistry, parallel efficiency.