

Wykonawca: Rustam Akhunov

Temat projektu: Generacja realistycznej struktury polikryształów

W ramach projektu opracowane zostaną metody obliczeniowe służące do generacji układów atomowych będących polikryształami. Oprogramowanie to ma służyć do generacji konfiguracji początkowych dla symulacji prowadzonych metodą dynamiki molekularnej. Użytkownik będzie miał możliwość określenia:

- a) rozmiarów generowanego polikryształu oraz jego struktury krystalicznej,
- b) liczby ziaren krystalicznych składających się na polikryształ,
- c) rozkładów parametrów charakteryzujących strukturę polikrystaliczną (rozkład rozmiarów ziaren, rozkład względnej orientacji ziaren).

W generacji układów zastosowane zostaną:

- a) tessellacja Woronoja – jako model struktury polikrystalicznej,
- b) algorytmy genetyczne – jako metody optymalizacji globalnej, służące do utworzenia struktury o zadanych parametrach (opisanych rozkładami),
- c) klasyczne (gradientowe) metody optymalizacji lokalnej – jako metody służące do relaksacji powstałych struktur pod kątem energii (relaksacja granic międzyziarnowych).

Powstały program zostanie napisany w języku C++. W obliczeniach wykorzystane zostaną:

- a) program LAMMPS – jako program służący do obliczania energii struktur polikrystalicznych,
- b) biblioteka Voro++ – jako biblioteka umożliwiająca wyznaczenie tessellacji Woronoja.

Rozpatrywane zagadnienie, jako że stanowi złożony problem optymalizacyjny, wymaga zaangażowania dużych mocy obliczeniowych. Wyniki badań zostaną przedstawione w pracy magisterskiej przygotowanej w ramach projektu Erasmus Mundus MathMods. Praca realizowana jest na Wydziale Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej Politechniki Gdańskiej, pod opieką dr inż. Szymon Winczewskiego (w zespole prof. dr hab. inż. Jarosława Rybickiego).