W mojej pracy doktorskiej zamierzam zrobić badania nad trójwymiarowymi polikrystalicznymi modelami kryształów FCC z logarytmicznym rozkładem wielkości ziaren. Struktura ta jest konstruowana przez ograniczoną tesselację Voronoi i przy użyciu biblioteki Voro++ dla języka programowania C++. W celu uzyskania wymaganego rozkładu wielkości i orientacji ziaren wykorzystaliśmy algorytm genetyczny oparty na metodzie najmniejszych kwadratów. Do przeprowadzenia relaksacji utworzonych struktuch polikrystalicznych wykorzystano oprogramowanie LAMMPS służące do obliczeń na drodze dynamiki molekularnej. Do symulacji oddziaływań między atomami w układzie wykorzystano potencjał wielociałowy.

W celu uzyskania wiarygodnych wyników, zamierza się wykonać generację polikryształów z wykorzystaniem co najmniej 1000 wielobokow w tesselacji Voronoia, zapełnionych dziesiątkami tysięcy atomów. Operacje te są wiążą się z dużym zapotrzebowaniem obliczeniowym.

Ponadto, w celu uzyskania odpowiedniej statystyki danych, wymagane jest przeprowadzenie szeregu niezależnych względem siebie obliczeń pod kątem warunków początkowych tj. dla dużej ilości wygenerowanych układów. W związku z tym, zachodzi potrzeba przechowywania znaczącej ilości danych, które w końcowym etapie badań zostaną poddane odpowiedniemu post-processingowi.

Prosiłbym o pozowolenien na skorzystanie z posiadanych przez Państwa zasobów obliczeniowych tj. komputerów dużej mocy w celu przeprowadzenia stosownych obliczeń do mojej pracy dyplomowej. Swoją prośbę argumentuje wyżej wymienionymi powodami.