

Обзор тенденций и достижений в области компьютерного материаловедения

Алексей Янилкин

Начальник отдела Компьютерного
материаловедения ФГУП ВНИИА

ГОД НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ В РОССИИ



**Homo ·
Science**
РОСАТОМ



Homo
Science
POCATOM

Вычислительные ресурсы в мире



НАУКА
И ИННОВАЦИИ
РОСАТОМ



- Innovative and Novel Computational Impact on Theory and Experiment (INCITE) программа является основным способом для научного сообщества получить доступ к наиболее мощным национальным суперкомпьютерам США.
- Целью программы - ускорение научных и инновационных исследований посредством выделения вычислительного времени для ресурсоемких проектов, которые нацелены на решение сложных задач в науке и технологиях.
- Программа находится под ведением Департамента энергетики США (US Department of Energy – DOE, Office of Science).
- 2021 год - объем вычислительных ресурсов, доступных программе, составляет **220 PF**, что примерно в **40 раз больше Ломоносов 2**.
- 2023 год - предполагается **кратное увеличение** вычислительных ресурсов этой программы **> 2 EF**

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ РЕСУРСОВ ПО НАПРАВЛЕНИЯМ

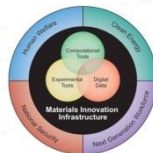


- Число проектов по материаловедению и химии – 15.
- Средняя ресурсоемкость проекта – **50-100 млн. ядер часов**.
- Стоимость выделяемых ресурсов на проекты по материаловедению и химии – **около 5 млрд. руб./год.**



Международные и национальные программы

1) Materials Genome Initiative



2) The Materials Project



3) AFLOW



4) ICAMS



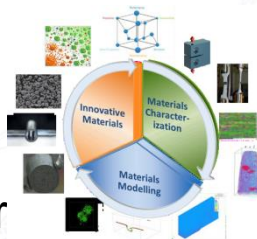
5) NOMAD



6) MARVEL



7) PERFORM 60, PERFECT



8) EERA JP on Nuclear Mater

9) Materials Genome Engineering

Стратегические проекты по
разработке новых материалов
(США)

Развивающиеся центры по
разработке новых материалов
(Евросоюз)

Программы по радиационному
материаловедению
(Евросоюз)

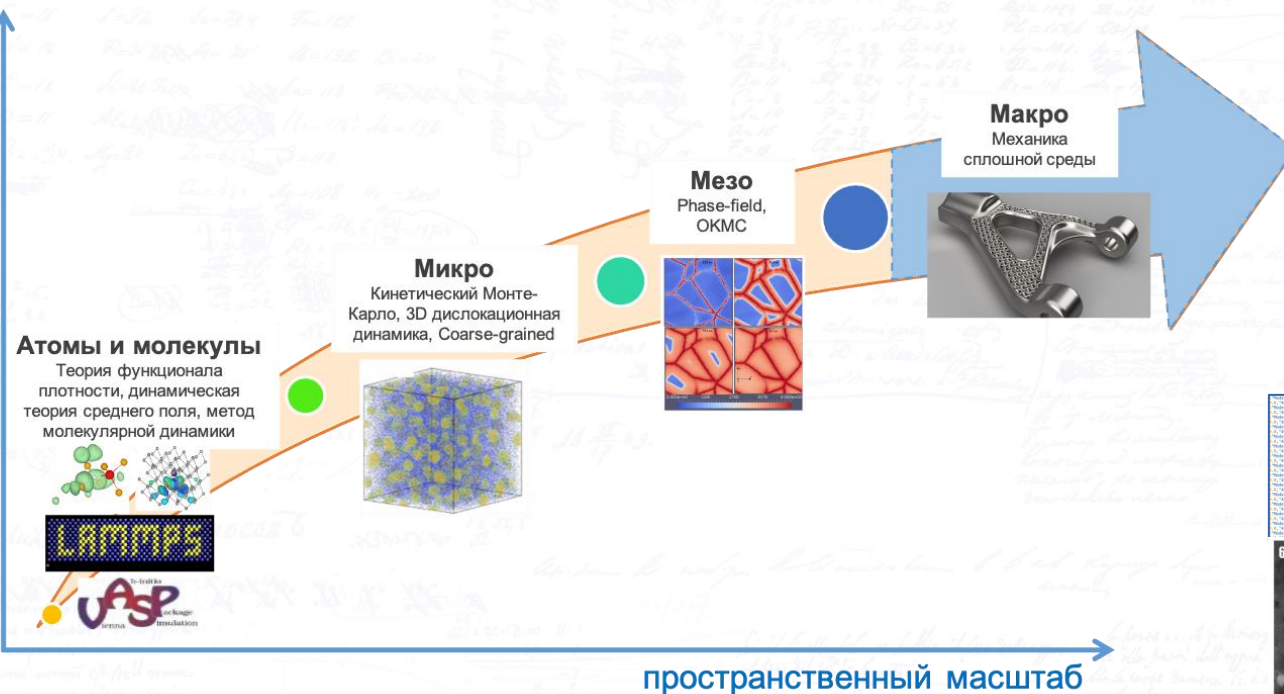
Развитие методов моделирования
(Китай)

Идеологии моделирования материалов

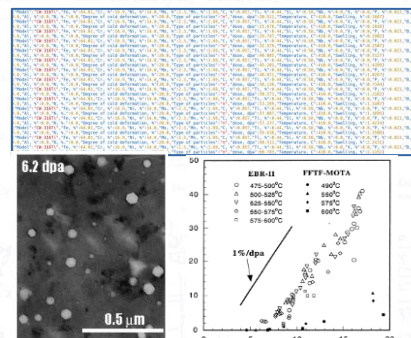
Многомасштабное моделирование

Информатика материалов

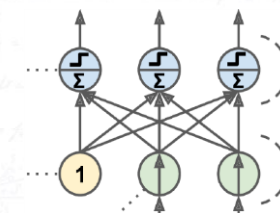
масштаб времени



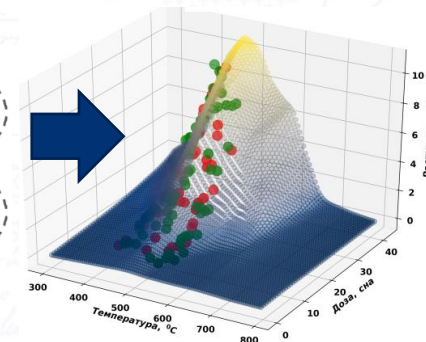
Данные



Модель



Целевые свойства



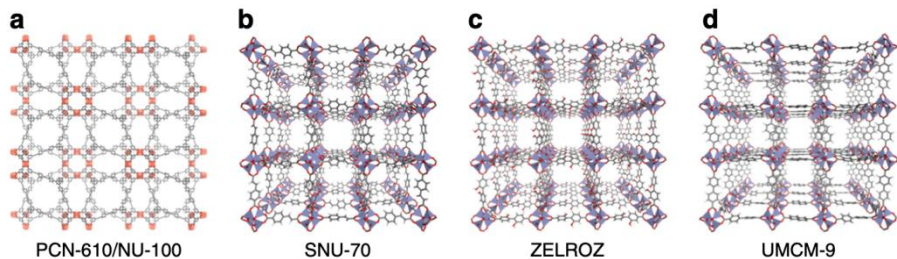


Homo
Science
POCATOM

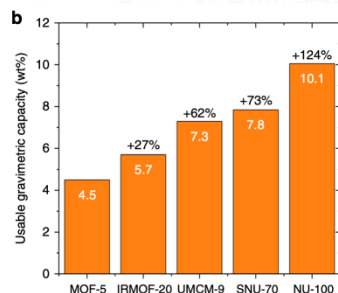
Примеры успешного поиска новых материалов в мире



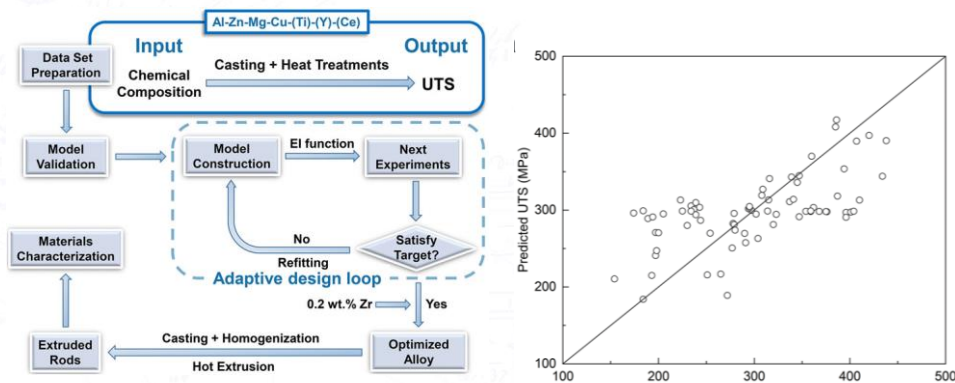
НАУКА
И ИННОВАЦИИ
POCATOM



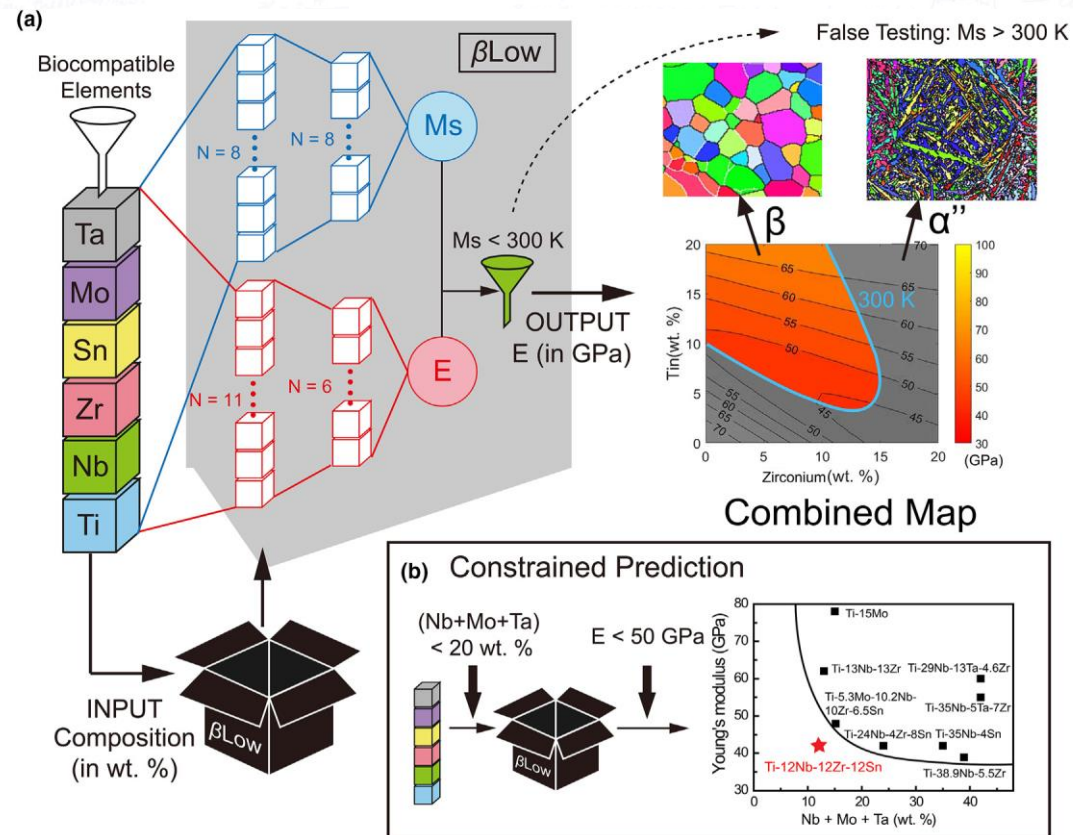
Материалы для хранения водорода -
Nature Communications
2019



Высокопрочные алюминиевые сплавы
Communications Materials 2020



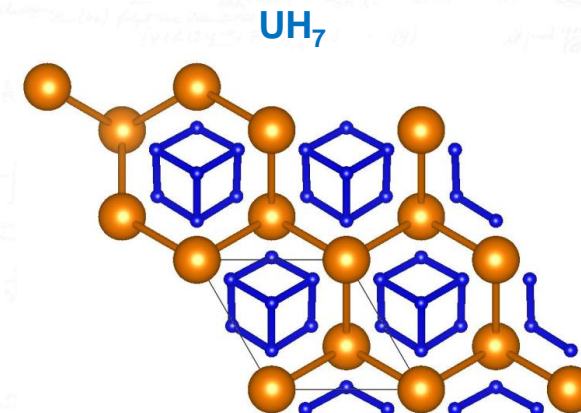
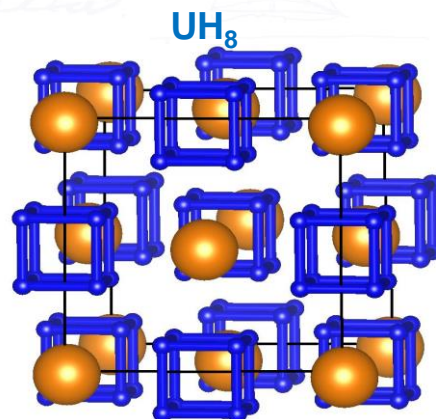
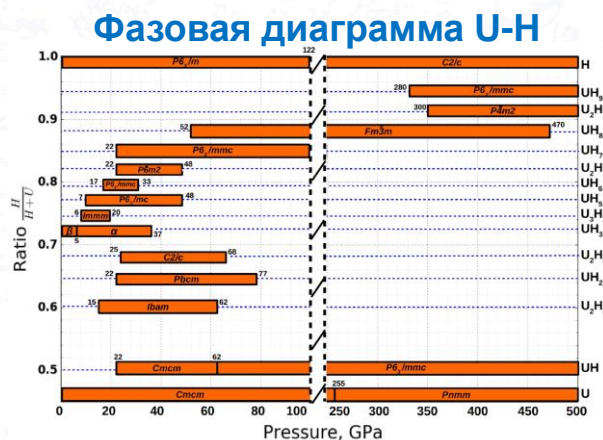
Титановые сплавы для медицинских применений –
Materials Today 2020



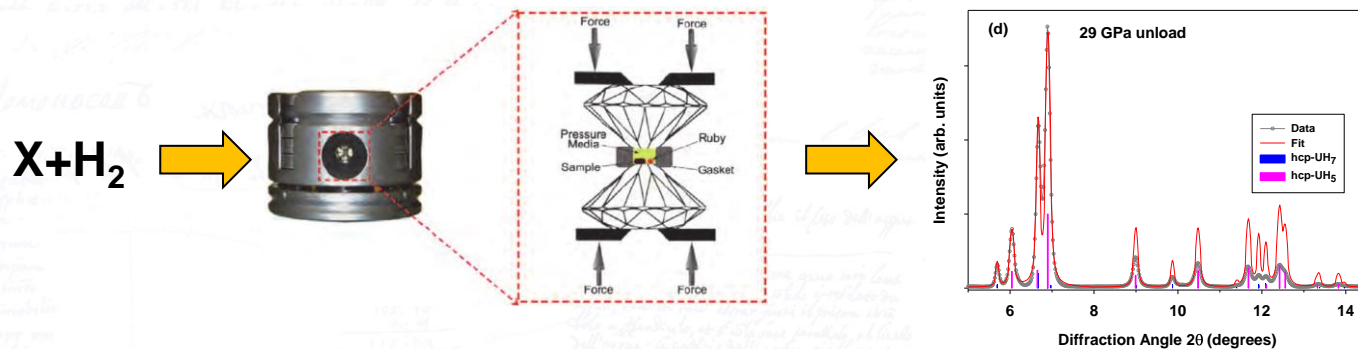


Примеры успешного поиска новых материалов

1. С помощью эволюционного алгоритма USPEX предсказаны новые полигидриды La, Ce, U, Th, Ac и др. элементов, а также построены их фазовые диаграммы и рассчитаны сверхпроводящие свойства.



2. Существование предсказанных полигидридов было подтверждено экспериментальным синтезом в алмазных наковальнях под давлением.

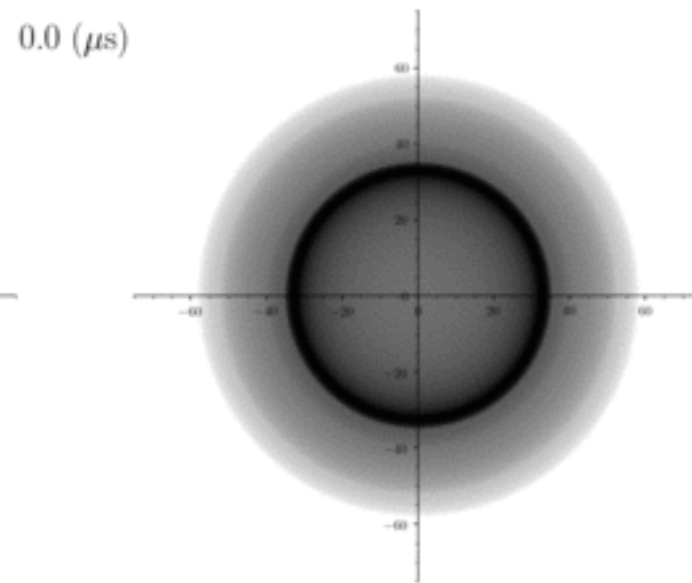
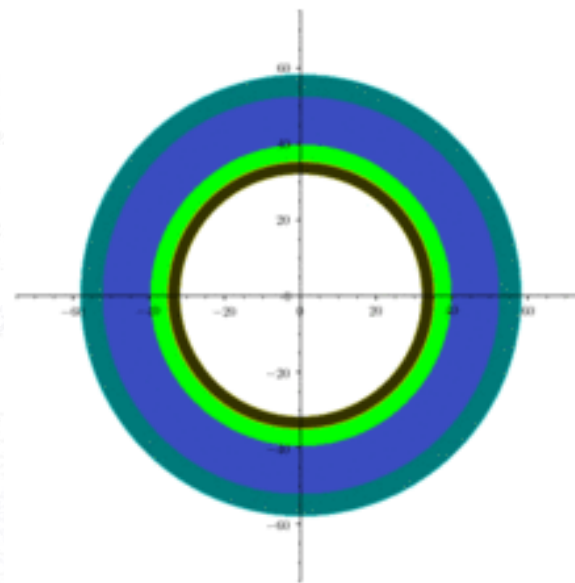
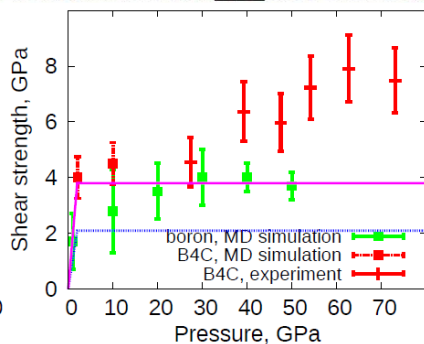
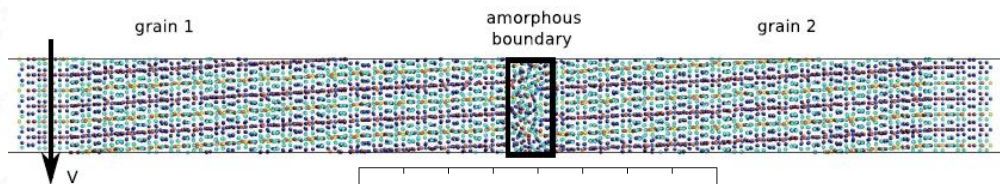
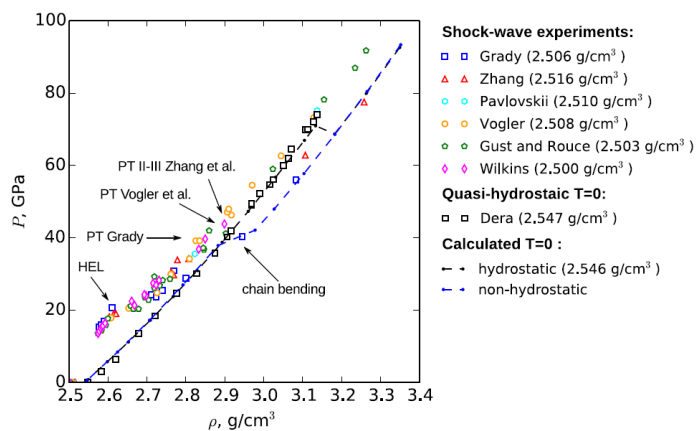
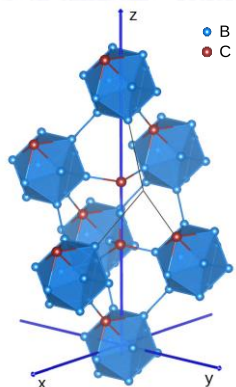


[Kruglov et al, Science Advances, 2018]
[N. Salke, I. Kruglov et al, Nature Comm, 2019]
[Kruglov, I.A., Semenov et al, Physical Review B, 2020]
[Salke, N.P., Davari Esfahan et al, Inorganic Chemistry, 2020]
[Semenov, D.V., Kruglov et al, Current Opinion in Solid State and Materials Science, 2020]
[Semenov, D.V., Zhou, D. et al. Journal of Physical Chemistry Letters 2020]
[Semenov, D.V., Troyan et al. Materials Today ,2021]



Пример применения многомасштабного подхода

Взрывном обжати оболочек из карбида бора и свинца при однотоочечном подрыве



[Korotaev, P., Pokatashkin, P., Yanilkin, A Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2015.]
[Pokatashkin P., Kuksin A. and Yanilkin A. Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2015.]
[P. Korotaev, P. Pokatashkin, A. Yanilkin Computational Materials Science 2016]
[P. Pokatashkin, P. Korotaev, A. Yanilkin Phys Rev B 95 2017]
[A. V. Andriyash, V. A. Arinin, S. A. Dyachkov et al, J. of Applied Physics 2019]



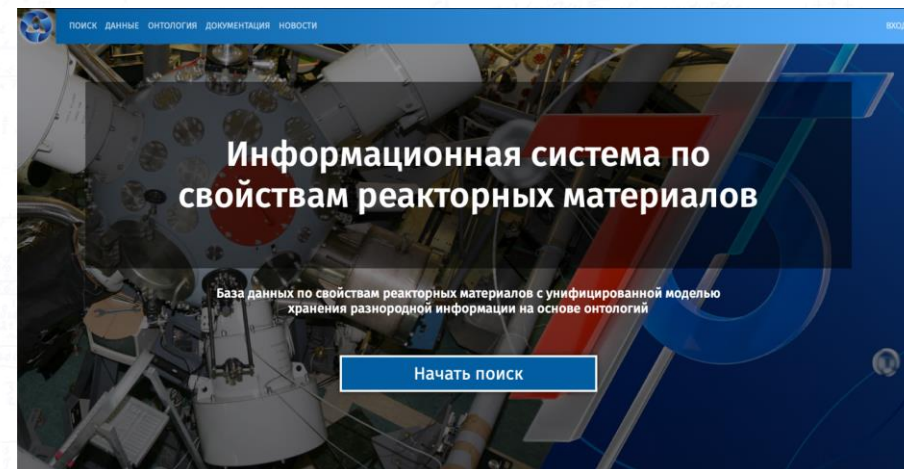
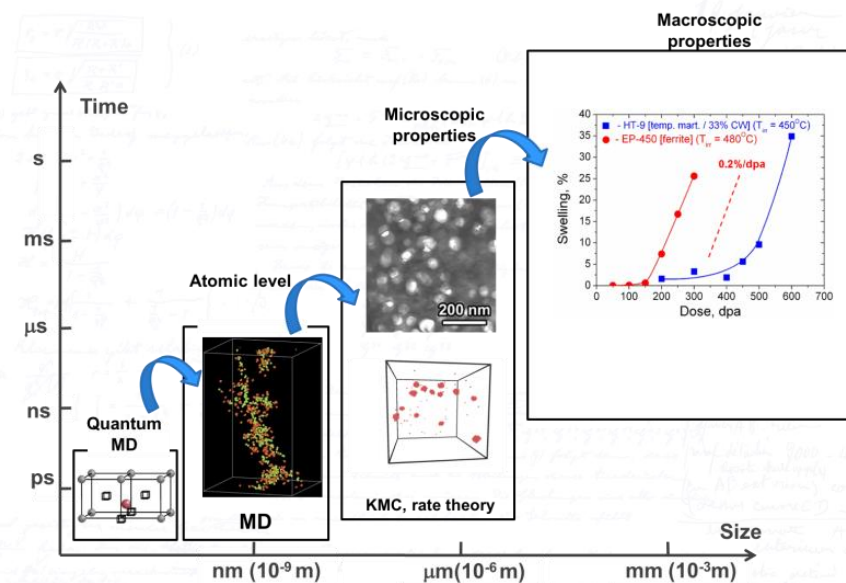
Homo
Science
РОСАТОМ

Моделирование в реакторном материаловедении (ЕОТП, РТТН)



НАУКА
И ИННОВАЦИИ
РОСАТОМ

1. Разработка моделей и программ для прогноза распухания сталей.
2. Разработка модели и программ для прогноза фазовой стабильности и радиационного упрочнения сталей.
3. Информатика материалов для конструкционных материалов.
4. Информационная система по свойствам материалов с анализом на основе методов машинного обучения.





Homo
Science
РОСАТОМ

Кооперация ФГУП ВНИИА



НАУКА
И ИННОВАЦИИ
РОСАТОМ

Методы моделирования материалов



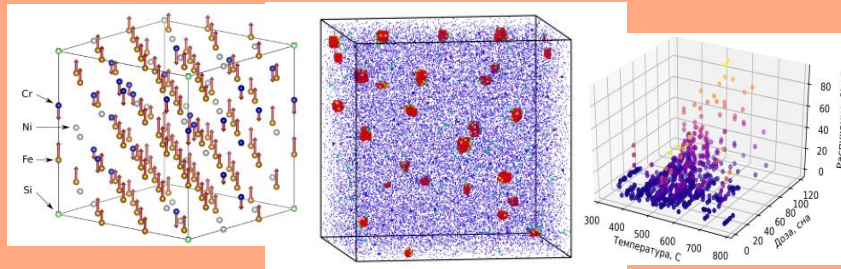
Skoltech
Сколковский институт науки и технологий



НАЦИОНАЛЬНЫЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»



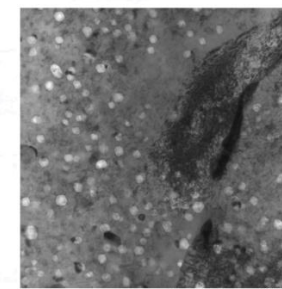
Разработка моделей и расчетных программ
Высокопроизводительные вычисления
Методы машинного обучения в материаловедении



Разработка и исследование материалов



Реакторные исследования



Материалы оболочек
ТВЭЛОВ



ВНИИНМ
РОСАТОМ



ИТЭФ
НИЦ КИ



Атомно-зондовая томография



Материалы
ЖСР

Уральский
федеральный
университет
имени первого Президента
России Б.Н.Ельцина



Заключение



Ключевые элементы успешного применения моделирования материалов:

- Коллаборация с материаловедцами, экспериментаторами, технологами, конструкторами
- Коллаборация различных идеологий и методов моделирования
- Создание баз данных по свойствам материалов
- Развитие методов компьютерного материаловедения

Спасибо

Алексей Янилкин
email: yanilkin@vniia.ru
aleyanilkin@gmail.com



**Homo ·
Science**
РОСАТОМ

ГОД НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ В РОССИИ