

Семинар «Моделирование в материаловедении»  
25 марта 2021

# Многомасштабное моделирование материалов: процессы и микроскопические механизмы

Стегайлов Владимир Владимирович, д.ф.-м.н.

Заведующий отделом многомасштабного суперкомпьютерного  
моделирования ОИВТ РАН

Профессор МФТИ (НИУ) и НИУ ВШЭ

ГОД НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ В РОССИИ



Homo ·  
Science  
РОСАТОМ



Homo  
Science  
РОСАТОМ

# Многомасштабные модели:

## 1. Выход продуктов деления из ядерных топлив

Задача: Определение микроскопических механизмов диффузии и расчет их скоростей

Связь масштабов: кинетическая модель ИБРАЭ РАН

Эксперимент: данные ИБРАЭ РАН, публикации СЕА

## 2. Формирование защитных оксидных при контакте стали и свинцового теплоносителя

Задача: определение влияния состава теплоносителя и микроструктуры стали, определение ключевых механизмов роста и разрушения оксидных пленок

Связь масштабов: гидродинамическое описание НИКИЭТ  
кинетическая модель НИКИЭТ/ИБРАЭ РАН

Эксперимент: НИКИЭТ/ФЭИ/Прометей

## 3. Самосборка органических покрытий

Задача: механизмы нуклеации и роста кристаллической фазы в жидкостях/гелях

Связь масштабов: кинетические и континуальные модели МФТИ/ИТМО

Эксперимент: ИТМО



НАУКА  
И ИННОВАЦИИ  
РОСАТОМ



Homo  
Science  
РОСАТОМ

# Ответы на вопросы семинара

## 1. Методы и инструменты (направления наших работ)

Ускорение атомистических расчетов на гибридных высокопроизводительных системах

Эффективные суперкомпьютерные архитектуры для расчета электронной структуры

<<<<<

## 2. Связь, соответствие, перенос моделируемых характеристик

Атомистические модели ->

-> Кинетические/континуальные модели ->

-> Эксперимент

Сложная микроструктура, диффузия, радиационные повреждения, электрохимия, органические и полимерные материалы

## 3. Консолидация работы

Коллаборации с участием экспериментаторов и конструкторов



НАУКА  
И ИННОВАЦИИ  
РОСАТОМ