

Семинар «Моделирование в материаловедении»

# Многомасштабное моделирование

Александр Шапеев, Сколтех



Homo ·  
Science

РОСАТОМ

ГОД НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ В РОССИИ



Homo  
Science  
РОСАТОМ

# Моя область экспертизы



НАУКА  
И ИННОВАЦИИ  
РОСАТОМ

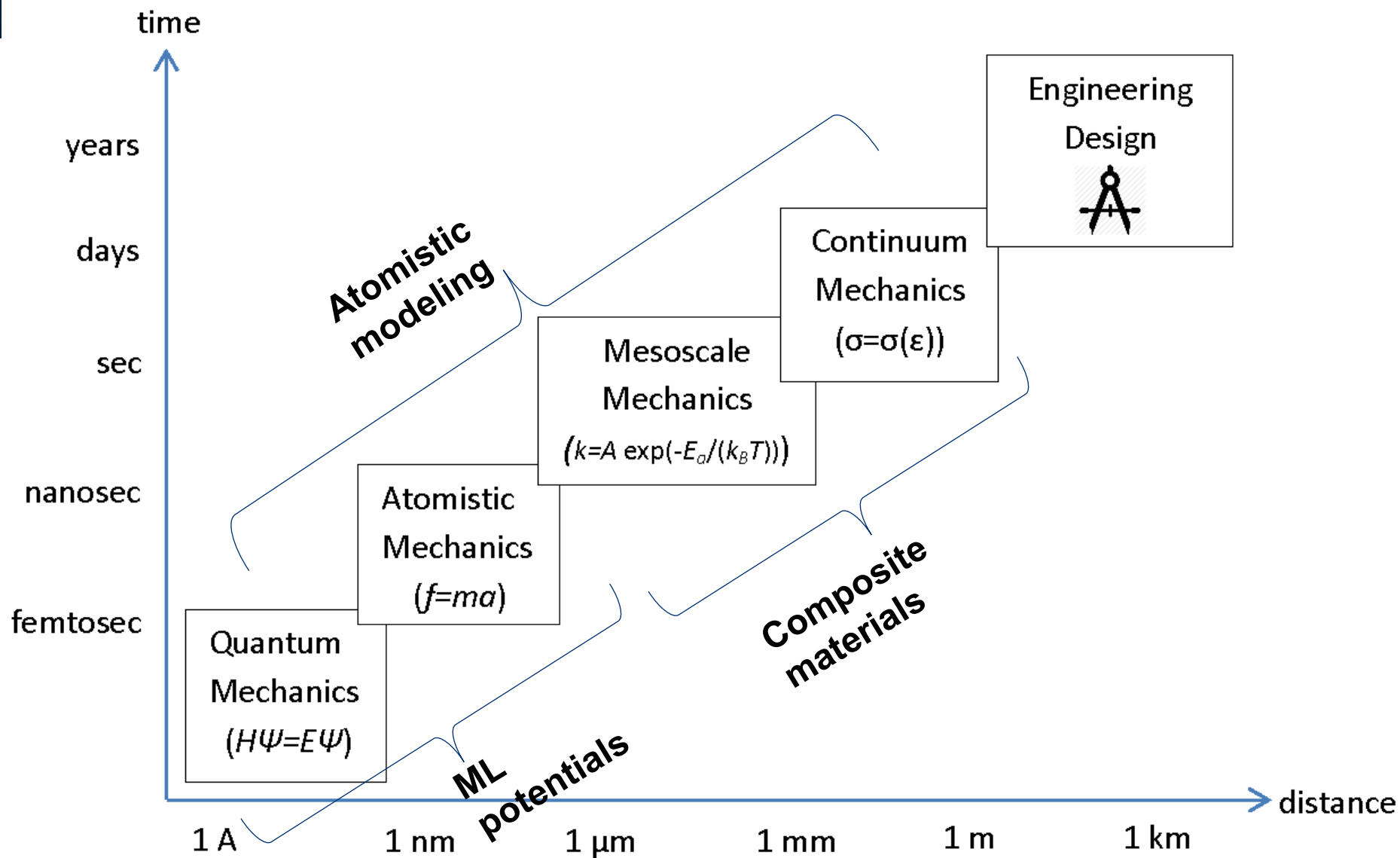
- 2009: PhD, к.ф.-м.н.: численные методы гидродинамики (математика)
- 2009-2011: Многомасштабные методы типа континуум-континуум (математика)
- 2011-2014: Сопряжение атомистической и континуальной моделей кристаллов (математика)
- 2014-наст.вр.: Применение идей машинного обучения для построения машинно-обучаемых потенциалов

Вопрос на который я отвечаю:

- Какие модели/уровни/... **можно**(не сложно) разработать

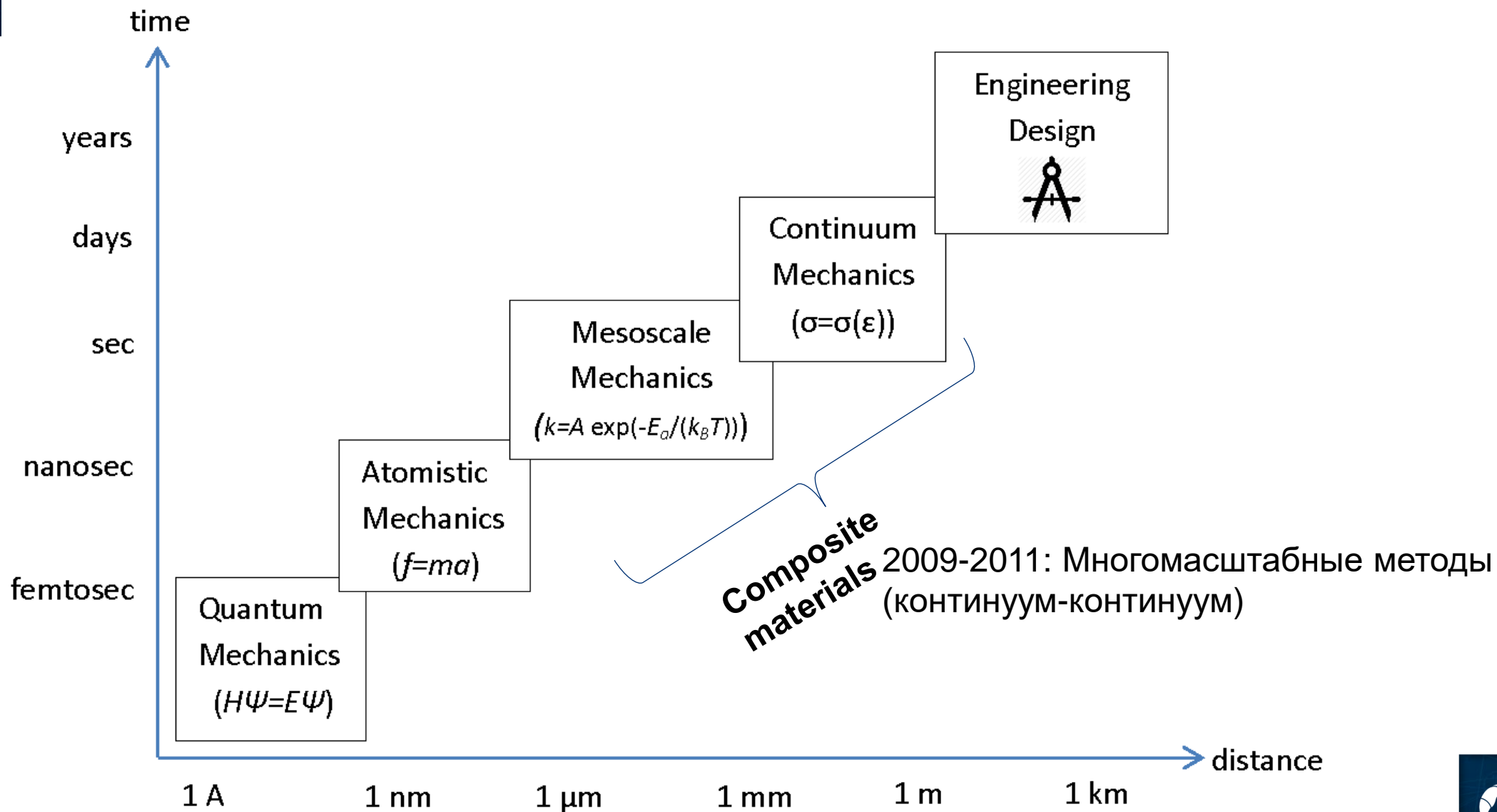


# Лестница масштабов





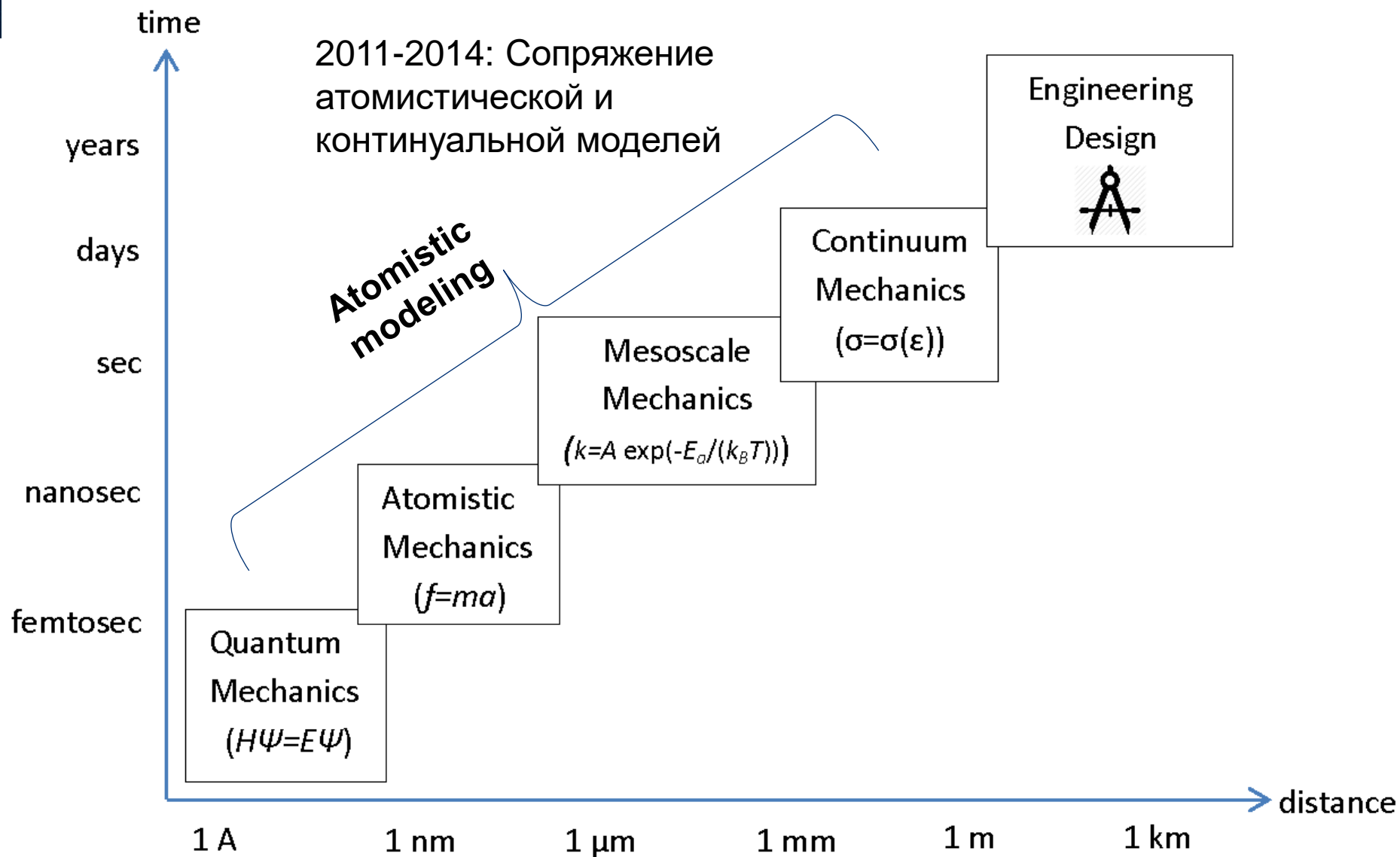
# Лестница масштабов





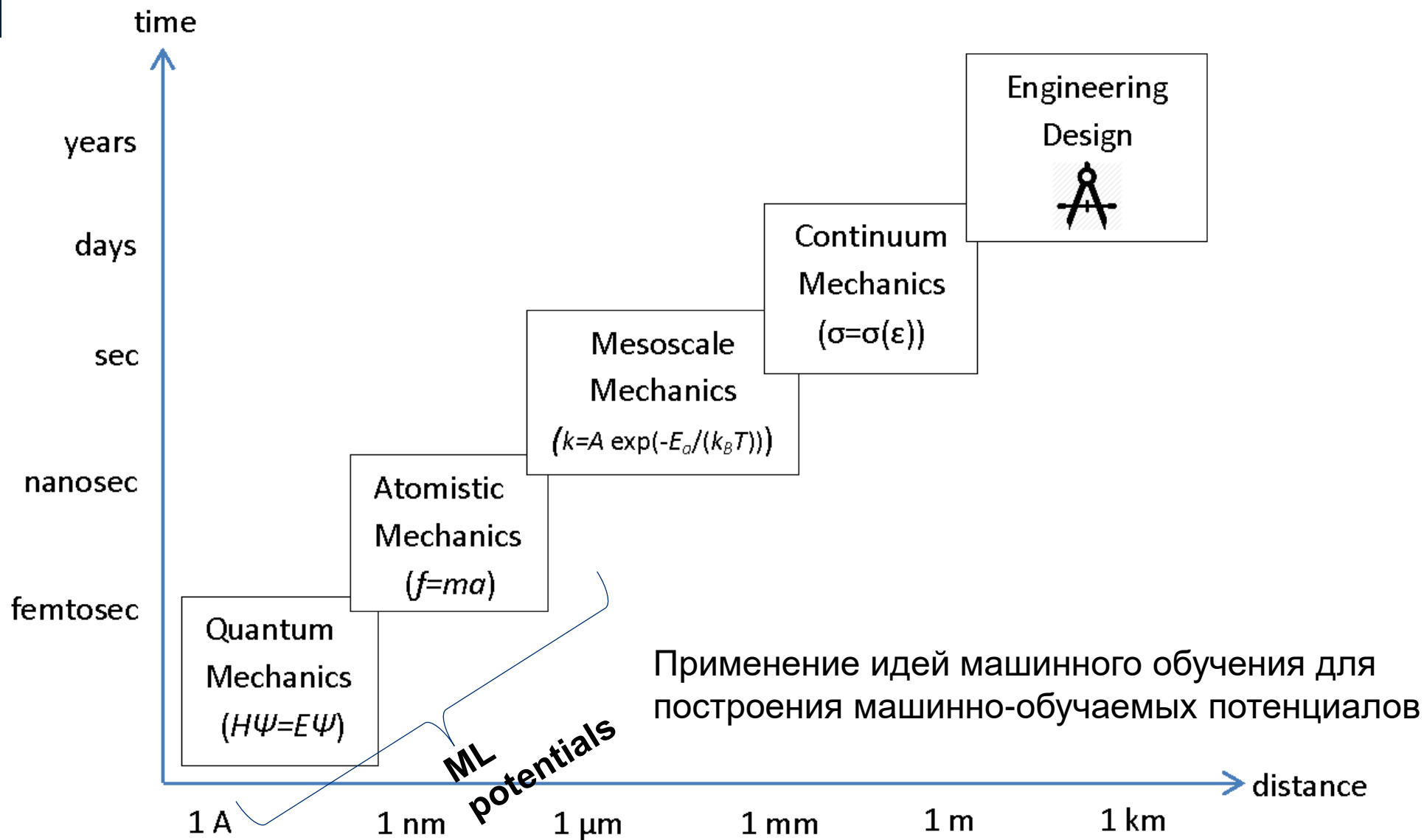


# Лестница масштабов





# Лестница масштабов





Homo  
Science  
РОСАТОМ

# Пути консолидации научных групп



НАУКА  
И ИННОВАЦИИ  
РОСАТОМ

## 3. Возможные пути консолидации работы научных групп в России в рамках развития масштабного многоуровневого моделирования в материаловедении.



# Пути консолидации научных групп

## 1. Обмен кодами (пакетами программ)

Использование кода MLIP (А. Шапеев) группами И. Абрикосова, А. Оганова, А. Янилкина, И. Круглова (?), В. Стегайлова (?)

Интерфейс кодов: USPEX (А. Оганов) + MLIP (А. Шапеев)

## 2. Финансирование

Финансируются научные исследования, а не создания кода (как и в США, исключение - ЕС)

## 3. Для Росатома: гибкий подход к интеллектуальной собственности

Простая (неисключительная лицензия) для некритического софта



Спасибо



Homo ·  
Science  
РОСАТОМ

ГОД НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ В РОССИИ