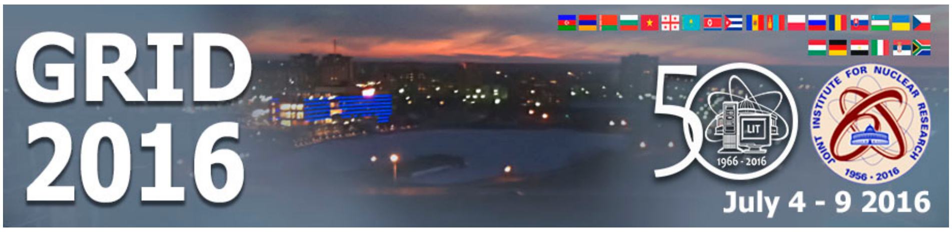
The 7th International Conference "Distributed Computing and Grid-technologies in Science and Education" (GRID 2016)



Contribution ID: **145** Type: **Sectional reports**

НЕПРЕРЫВНО-АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ С МЕТАЛЛАМИ

Friday 8 July 2016 14:00 (15 minutes)

Исследования в области облучения материалов тяжелыми ионами высоких энергий (ТИВЭ) проводятся на протяжении нескольких десятилетий. Проведение экспериментальных исследований в этих областях трудоемко и дорого, поэтому актуальным становится математическое моделирование, которое требует разработки новых и развитие существующих моделей на основе новых экспериментальных данных взаимодействия ТИВЭ с материалами.
В работе предлагается непрерывно-атомистический подход[1,2] для моделирования взаимодействия ТИВЭ с конденсированными средами. Непрерывно-атомистическая модель представляет собой два разных класса задач, а именно непрерывные уравнения теплопроводности модели термического пика[3] и уравнения движения материальных точек метода молекулярной динамики[4].
Использование высокопроизводительных систем для непрерывно-атомистического моделирования требует разработки новых вычислительных схем и параллельных алгоритмов. В работе для решения уравнений непрерывно-атомистической модели разработан алгоритм и вычислительная схема с возможностью использования в многопроцессорных системах. Исследована эффективность вычислительных схем и параллельных алгоритмов. Получены результаты исследований на примере металлических мишеней при облучении тяжелыми ионами.

[1] D. Ivanov and L. Zhigilei. Combined atomistic-continuum modeling of short-pulse laser melting and disintegration of metal films // Physical Review B 68. 064114 (2003).
[2] Norman G.E., Starikov S.V., Stegailov V.V., Saitov I.M., Zhilyaev P.A. Atomistic modeling of warm dense matter in the two-temperature state // Contrib. Plasma Phys. 2013. V. 53. P. 129-139.
[3] М.И. Каганов, И.М. Лифшиц, Л.В. Танатаров. Релаксация между электронами и решеткой // ЖЭТФ. 1956. N.31. № 2(8). С.232-237.
[4] Х.Т. Холмуродов, М.В. Алтайский, И.В. Пузынин и др. Методы молекулярной динамики для моделирования физических и биологических процессов // ЭЧАЯ. 2003. Т. 34. Вып. 2. С. 472-515.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ № 15-01-06055-а и гранта Полномочного представителя Республики Болгария в ОИЯИ.

Authors: Dr HRISTOVA, Radoslava (University of Sofia / JINR); TUKHLIEV, Zafar (JOINT INSTITUTE FOR NUCLEAR RESEARCH); SHARIPOV, Zarif (JINR)

Session Classification: 4. Scientific, Industry and Business Applications in Distributed Computing System

Track Classification: 4. Scientific, industry and business applications in distributed computing systems