

# Моделирование гомогенной нуклеации на гибридных суперкомпьютерах\*

А.О. Типеев, К.С. Бобров, В.Г. Байдаков  
ФГБУН Институт теплофизики УрО РАН

На суперкомпьютерах гибридного типа с использованием методов молекулярной динамики и Монте-Карло смоделированы процессы кристаллизации, плавления и кавитации леннард-джонсовского вещества. Расчеты велись в свободно распространяемых распараллеленных программных комплексах LAMMPS [1] и HOOMD [2], модифицированных под конкретную архитектуру суперкомпьютера.

Исследовалась начальная стадия фазовых переходов – процесс зародышеобразования (нуклеации) – в системах, содержащих до 10 миллионов леннард-джонсовских частиц. Использование суперкомпьютеров значительно ускоряет процесс интегрирования уравнений их движения. Нами использовалось до 512 CPU и 8 GPU.

Применялись методы transition interface sampling [3], среднего времени жизни [4], среднего времени первого перехода [5] в компьютерном эксперименте. Совокупность данных методов позволила изучить процесс нуклеации в интервале частот зародышеобразования от  $10^{20}$  до  $10^{35}$   $\text{м}^{-3}\text{с}^{-1}$ , достигнув значений, фиксируемых в натуральных экспериментах. Расчеты проведены по десяти изотермам в областях положительного и отрицательного давлений. Смоделировано более 10000 событий нуклеации. Показано, что их временное распределение при фиксированных термодинамических параметрах системы хорошо описывается законом Пуассона.

Результаты моделирования кинетики фазовых переходов сопоставлялись с расчетами по классической теории гомогенной нуклеации. Оценена поверхностная свободная энергия на искривленной границе критический зародыш–материнская фаза и ее температурная зависимость при кристаллизации и кавитации метастабильной жидкости. Определены характерные параметры критических зародышей.

Обнаружены термодинамические состояния растянутой жидкости, в которых события кристаллизации и кавитации реализуются с равной вероятностью.

Процессы нуклеации визуализированы. Для этого разработаны модули идентификации принадлежности частиц к той или иной фазе.

## Литература

1. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comput. Phys. March 1995. Vol. 117, No 1. P. 1-19. (URL: <http://lammps.sandia.gov>)
2. URL: <http://codeblue.umich.edu/hoomd-blue>
3. van Erp T. Moroni D., Bolhuis P. A novel path sampling method for the calculation of rate constants // J. Chem. Phys. January 2003. Vol. 118, No. 17. P. 7762(13).
4. Скрипов В.П. Метастабильная жидкость. — М.: Наука, 1972. — 312 с.
5. Wedekind J., Strey R., Reguera D. New method to analyze simulations of activated processes // J. Chem. Phys. April 2007. Vol. 126, No. 13. P. 134103(7).

---

\* Работа выполнена в рамках программы Президиума РАН № 18 "Алгоритмы и математическое обеспечение для вычислительных систем сверхвысокой производительности" при поддержке УрО РАН (проект 12-П-2-1049).