

Prof. dr hab. inż. Paweł Dłużewski

Pracownia Metod Komputerowych Inżynierii Materiałowej

Zakład Metod Komputerowych

<http://www.ippt.gov.pl/~pdluzew>

temat interdyscyplinarny: informatyka/mechanika/inżynierii materiałowa

Wizualizacja map pól tensorowych i rekonstrukcja geometryczna zdefektowanej struktury kryształów

Temat dotyczy rozwoju algorytmów komputerowych do rekonstrukcji przestrzennej układów dyslokacji, rekonstrukcji zmieniającego się składu chemicznego sieci krystalicznej, granic międzyfazowych, defektów punktowych sieci, itp. Wymagane są predyspozycje do samodzielnego programowania i debuggowania kodu, wymagana jest znajomość podstaw rachunku tensorowego, głównym środowiskiem pracy będzie system GNU Linux. Algorytmy będą implementowane w projekcie The Visual Editor of Crystal Defects (VECD), <http://sourceforge.net/projects/vecds/>. W chwili obecnej nie ma ścisłego ograniczenia co do wyboru pakietu graficznego, przewiduje się, że główna scena będzie nadal programowana w OpenGL. Metody atomistyczne pozwalają obecnie przeprowadzać coraz dokładniejsze symulacje rozkładów sił atomowych w strukturach składających się z coraz większej liczby atomów. Niemniej, pomiędzy tym co proponują metody obliczeniowe, a tym co dostarczają metody mikroskopowej analizy obrazów HRTEM istnieje luka. Rzeczywiste struktury są silnie zdefektowane podczas, gdy symulacje przeprowadza się zazwyczaj na idealnych strukturach, do których wprowadza się zwykle tylko kilka defektów o bardzo prostej geometrii, bądź też przeprowadza się symulacje na losowo zdefektowanych strukturach. Oczywiście, nie byłoby problemu z przeprowadzeniem komputerowych symulacji zdefektowanych struktur widocznych na obrazach mikroskopowych, o ile byłaby możliwość zrekonstruowania metodami deterministycznymi przestrzennych struktur krystalicznych widocznym na obrazach, np. zrekonstruowanie atomistyczne obserwowanego układu 3D: dyslokacji, granic ziaren, błędów ułożenia itp.

Z punktu widzenia komputerowych metod modelowania, praca dotyczy preprocessingu danych wejściowych do atomistycznych i kwantowych metod modelowania, takich jak ab-initio, MD, MS, MC. Obejmuje również przygotowanie danych do obliczeń wieloskalowych z wykorzystaniem elementów skończonych (FEM) w których zanurzone są struktury atomów. Używając analogii do FEM, program VECD ma za zadanie pełnić analogiczną rolę w metodach atomistycznych do tej, jaką pełnią programy służące do przygotowywania siatek w FEM, są to np. takie programy jak PATRAN czy GiD. Warto dodać, że w metodzie elementów skończonych przygotowanie złożonych geometrycznie siatek elementów skończonych wysokiego rzędu jest poważnym problemem, czego wyrazem są ceny licencji programów do preprocessingu przewyższające często ceny programów, którymi przeprowadza się właściwe obliczenia metodą elementów skończonych. W metodach atomistycznych jak dotąd nie ma analogicznych narzędzi.