

УДК 621.9

А.М. Кузьмишина¹, О.В. Кретинин¹, Е.Е. Власов¹, С.В. Серый²**ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ БИНАРНЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ
«ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ» НА ОСНОВЕ
КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ CUDA**Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексева¹,
Комсомольский-на-Амуре государственный технический университет²

Изложен эффективный и быстрый способ математического моделирования наноструктур «из первых принципов» (ab-initio), в частности, свойств наноструктур. Приведены некоторые результаты исследований прочностных свойств нескольких стабильных бинарных соединений и тугоплавких соединений путем квантово-механических расчетов с использованием технологии CUDA. Произведена оценка увеличения коэффициента производительности для метода GPU-вычислений на основе CUDA-технологии. Показано, что использование технологии CUDA позволяет существенно снизить производительность вычислений.

Ключевые слова: интерметаллиды, квантово-механические расчеты, технология CUDA.

Бинарные структуры являются комбинациями Al, Si, Mg, Cu, Fev пространственных конфигурациях типа FCC, NaCl, Cu₂Mg, ZnS, CaF₂, CsCl, AlFe₃ и др. (B1, B2, B3, C1, C15, A15, D03, L12, ...). Были рассчитаны равновесные состояния систем, модули упругости и полная энергия на атом для данных соединений и сравнение результатов такого квантово-механического моделирования с известными экспериментальными данными. Все расчеты выполнялись на программном обеспечении (ПО) QuantumEspresso и Abinit. Данное ПО основано на теории функционала плотности (ТФП), для расчетов применялись GPU-версии ПО.

Алюминий, магний, медь, железо и их сплавы являются распространенными компонентами для разработки интерметаллидов, обладающими новыми, выдающимися свойствами. Большая популярность этих сплавов (интерметаллидов) обусловлена набором их общих функциональных свойств, механических свойств, плотностью, коррозионной стойкостью, обрабатываемостью и т.п. Легкие металлические сплавы, такие как магниевые и алюминиевые сплавы, в настоящее время все более необходимы для применения в автомобильной и авиационной промышленности. Они особенно выгодны для существенного уменьшения операционных расходов на производство высокотехнологичной продукции, и продукция отличается высокими эксплуатационными характеристиками. Эти сплавы обычно содержат незначительные присадки некоторых других элементов (кремний, никель, марганец), которые, как известно, улучшают свойства материалов, но имеют более сложные фазовые диаграммы. Оценка таких сложных систем – очень непростая задача, так как различные составные элементы в различных пропорциях могут образовывать различные фазы, и выбор состава интерметаллида, оптимального по свойствам, зависит от соотношения между его составляющими, которое сложно подобрать эмпирически, но можно рассчитать путем квантово-механического математического моделирования [1].

Предполагается, что таким образом будут разработаны новые квазикристаллические наноматериалы с уникальным сочетанием прочности, низким коэффициентом трения и высокой термической стабильностью, что делает их перспективными для использования в машиностроении и других областях.

Ab-initio calculations. Расчеты из первых принципов в этой работе были основаны на теории функционала плотности (ТФП), в базисе «плоских волн» (PAW), реализованном в ПО QuantumEspresso и Abinit [2, 3]. Расчеты объемных материалов проведены с использованием

зоны Бриллюэна (Brillouinzone) на основе центрированной схемы Монхорста-Пака (Γ -centered Monkhorst-Pack) [4] с размером суперячейки, постепенно увеличивающимся до $6 \times 6 \times 6$.

Объемный модуль упругости был получен на основе анализа значений кривой энергетических состояний по методу Бирча-Мурнагана (Birch-Murnaghan) [5], и которые вычислялись без релаксации атомных позиций (табл. 1).

Таблица 1

Расчет свойств интерметаллидов AlCu, AlFe, AlMg, AlSi, CuFe

	AlCu - a(A), E(eV), B(GPa)	AlFe - a(A), E(eV), B(GPa)	AlMg - a(A), E(eV), B(GPa)	AlSi - a(A), E(eV), B(GPa)	CuFe - a(A), E(eV), B(GPa)
'nacl'	a=5.07 E=-3.58 B=83.41	a=4.94 E=-5.84 B=376.6	a=5.75 E=-2.16 B=36.42	a=5.24 E=-3.71 B=76.36	a=4.84 E=-3.28 B=111.8
'cu2mg'	-	a=6.63 E=-7.33 B=177.3	-	-	-
'f2ca'	a=5.83 E=-4.00 B=85.45	a=5.82 E=-5.59 B=104.6	-	a=6.13 E=-3.62 B=73.59	-
'alfe3'	a=5.96 E=-4.13 B=116.8	a=5.67 E=-7.81 B=181.0	-	-	a=5.7 E=-3.44 B=134.0
'al3fe'	-	a=6.11 E=-5.14 B=704.9	-	-	-
'aucu3'	a=3.94 E=-3.79 B=85.93	a=3.57 E=-7.62 B=204.7	a=4.15 E=-3.16 B=64.64	a=4.055 E=-3.56 B=96.74	a=3.61 E=-3.83 B=172.6
'au3cu'	a=3.71 E=-3.92 B=142.9	a=3.80 E=-5.18 B=129.7	a=4.4 E=-2.04 B=65.00	a=4.00 E=-4.04 B=74.88	a=3.64 E=-3.49 B=153.2
'cr3si'	-	a=4.82 E=-5.22 B=118.7	-	-	-
'sicr3'	a=4.68 E=-3.9 B=105.5	a=4.50 E=-7.62 B=227.2	-	-	a=4.62 E=-3.97 B=192.3
'cscl'	a=3.01 E=-3.88 B=122.8	a=2.88 E=-6.70 B=168.8	a=3.41 E=-2.51 B=45.57	a=3.19 E=-3.84 B=102.1	a=2.89 E=-3.69 B=161.7

Чтобы проверить эффективность применения GPU для наиболее трудоемких BLAS подпрограмм (подпрограммы линейной алгебры, используемые в любом квантово-механическом ПО) была произведена замена на аналогичные подпрограммы, но выполняемые на GPU, а не на CPU.

Это было достигнуто путем линковки ПО QuantumEspresso и Abinit с библиотекой CuBLAS (аналогом библиотеки BLAS), но реализованной на основе CUDA-технологии и выполняемой на GPU.

Таким образом, были заменены основные процедуры библиотеки BLAS: DGEMM, Dsyr2k и Dsyrk на аналогичные, но выполняемые на GPU. В итоге было получено в среднем 40-50% ускорения вычислений по времени.

Следует добавить, что с увеличением масштаба системы (числа атомов), число вызо-

вов процедур BLAS будет уменьшаться с O(N³) до O(N²). Таким образом, в больших системах относительная часть вызовов BLAS-процедур увеличивается и эффективность применения GPU должна увеличиться, т.е. возможно существенно большее увеличение быстродействия. С другой стороны, для больших систем требования к объему памяти также быстро увеличивается, и моделирование больших систем должно испытывать сложности с нехваткой памяти на GPU. Но проблема может быть решена путем параллельных вычислений на нескольких GPU и нескольких вычислительных узлах, чтобы тем самым увеличить общий объем суммированной оперативной памяти (табл. 2).

Таблица 2

Расчет свойств интерметаллидов MgCu, MgFe, SiCu, SiFe, SiMg

	MgCu- a(A), E(eV), B(GPa)	MgFe - a(A), E(eV), B(GPa)	SiCu - a(A), E(eV), B(GPa)	SiFe - a(A), E(eV), B(GPa)	SiMg - a(A), E(eV), B(GPa)
'nacl'	a=5.26 E=-2.29 B=49,59	a=5.22 E=-2.29 B=56.51	a=4.98 E=-4.25 B=100.2	a=4.78 E=-7.1 B=124.2	a=5.52 E=-3.00 B=52.86
'mgcu2'	a=7.03 E=-3.00 B=104.7	a=7.08 E=-2.89 B=95.81	-	-	-
'caf2'	-	-	a=5.61 E=-4.37 B=102.8	-	a=6.37 E=-2.94 B=55.06
'alfe3'	a=5.99 E=-2.93 B=95.65	-	-	a=5.56 E=-8.32 B=189.8	-
'aucu3'	a=3.81 E=-3.06 B=103.9	a=3.79 E=-3.34 B=116.4	a=3.67 E=-4.22 B=157.4	-	-
'au3cu'	-	a=4.24 E=-1.95 B=54.48	-	-	-
'sirc3'	-	-	-	-	a=5.45 E=-2.37 B=44.89
'cscl'	a=3.15 E=-2.55 B=73.62	a=3.16 E=-2.66 B=86.43	-	a=2.77 E=-7.7 B=212.9	-

При расчетах влияния упрочняющих примесей на карбид и нитрид титана нами использовались элементарные ячейки размером 4x4x4 достаточного размера для изучения влияния примесей переходных металлов (Nb, V, Mo, Mg, Ta, Zr) на свойства TiC и TiN в массиве (примесь составила около 1,5%).

Далее представлены энергетические зависимости влияния примесей на основе квантово-механических расчетах. Нитриды и карбиды титана были первыми тугоплавкими соединениями, использующиеся в качестве износостойких покрытий для режущего инструмента. Предлагается добиться упрочнения покрытий из нитрида и карбида титана введением примесей порядка 1-2 % из различных элементов.

При осаждении карбидных и нитридных покрытий термическая стабильность поверхностных слоев твердосплавных пластин и сопротивляемость пластическому разрушению

возрастают, кроме того, образуется сплошной карбидный каркас, что, наряду с высокой твердостью, повышает сопротивляемость пластическому разрушению твердосплавной основы.

В этой связи упрочнение карбидных и нитридных покрытий для повышения работоспособности режущего инструмента представляет особый интерес. Квантово-механическое моделирование с целью получения новых составов покрытий, обладающих более высокой износостойкостью, с использованием технологий CUDA позволяет существенно уменьшить объем вычислительных процедур.

На рис. 1 приведена схема при проведении квантово-механических расчетов.

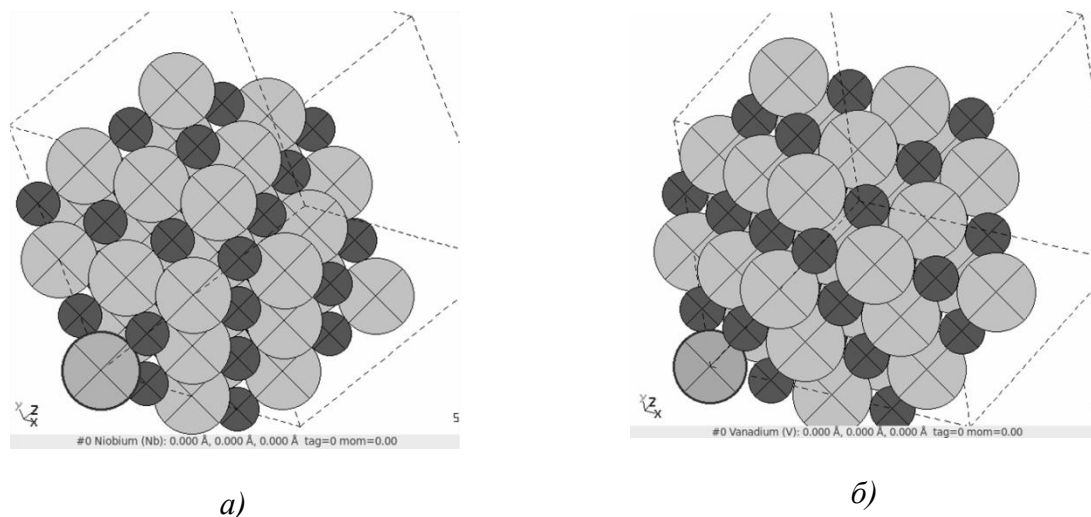


Рис. 1. Введение атома примеси:
а – ниобия; *б* – ванадия в супер-ячейку массива нитрида титана

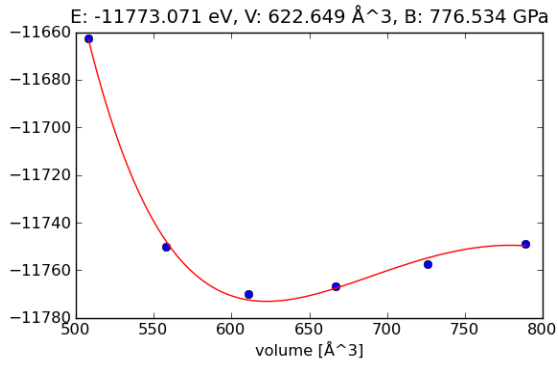
На рис. 2 и рис. 3 приведены результаты расчетов. В табл. 3 показаны расчетные характеристики новых составов тугоплавких соединений.

Таблица 3

Параметр решетки *a*, объемный модуль *B*, полная энергия E_{tot} для TiN и TiC с примесями V, Nb, Ta, Cr, Mo, Zr

Нано-структура	<i>a</i> (Å)	<i>B</i> (GPa)	E_{tot} (eV/atom)	Нано-структура	<i>a</i> (Å)	<i>B</i> (GPa)	E_{tot} (eV/atom)
TiN	4,22	650	-184,12	TiC	4,33	400	-126,14
TiN (V)	4,83	799	-185,20	TiC (V)	4,29	687	-126,72
TiN (Nb)	-	793	-184,86	TiC (Nb)	4,34	696	-126,36
TiN (Ta)	4,99	800	-184,79	TiC (Ta)	4,38	702	-126,31
TiN (Cr)	4,82	772	-186,68	TiC (Cr)	4,28	686	-128,17
TiN (Mg)	4,69	752	-183,27	TiC (Mg)	4,12	661	-124,71
TiN (Zr)	4,85	777	-183,95	TiC (Zr)	4,26	682	-125,44

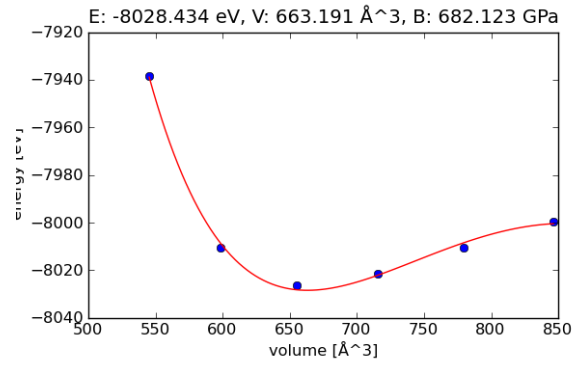
Примесь Zr в нитрид титана (один атом примеси на ячейку 4x4x4 атомов TiN)



Модуль упругости – **776 ГПа**

a)

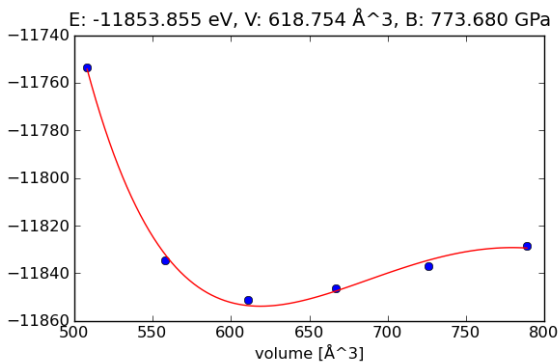
Примесь Zr в карбид титана (один атом примеси на ячейку 4x4x4 атомов TiC)



Модуль упругости – **682 ГПа**

б)

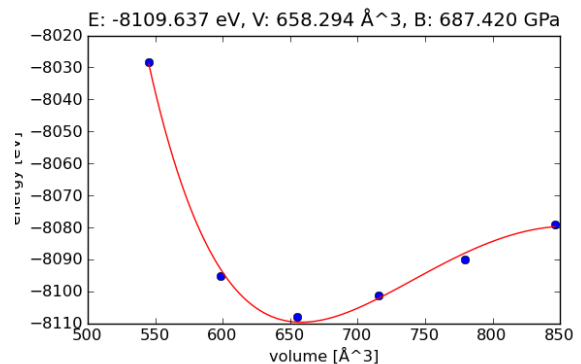
Примесь V в нитрид титана



Модуль упругости – **774 ГПа**

в)

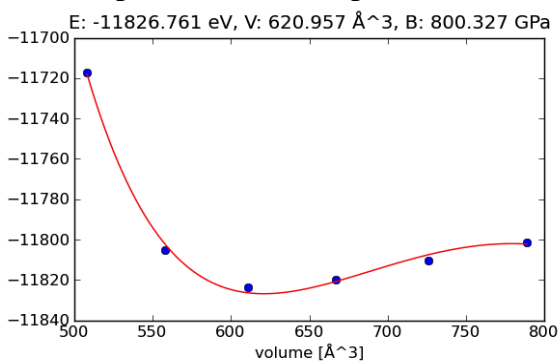
Примесь V в карбид титана



Модуль упругости – **687 ГПа**

г)

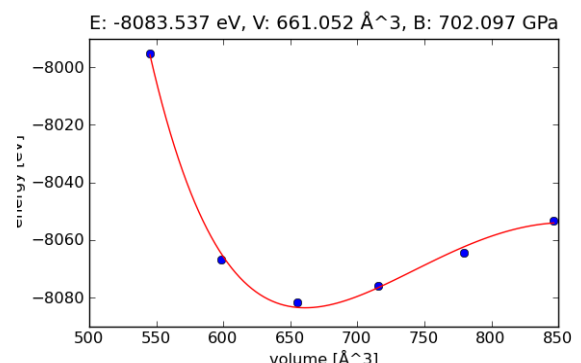
Примесь Ta в нитрид титана



Модуль упругости – **800 ГПа**

д)

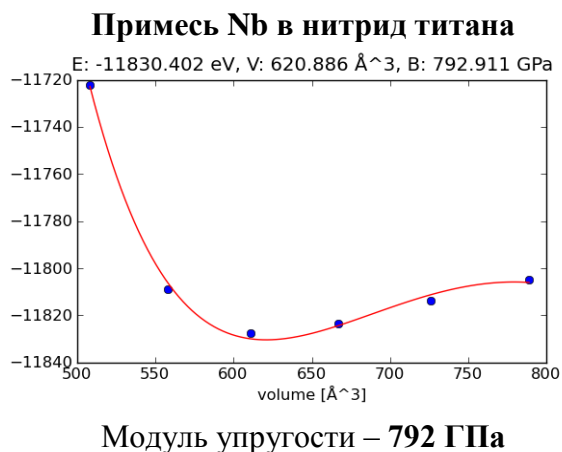
Примесь Ta в карбид титана



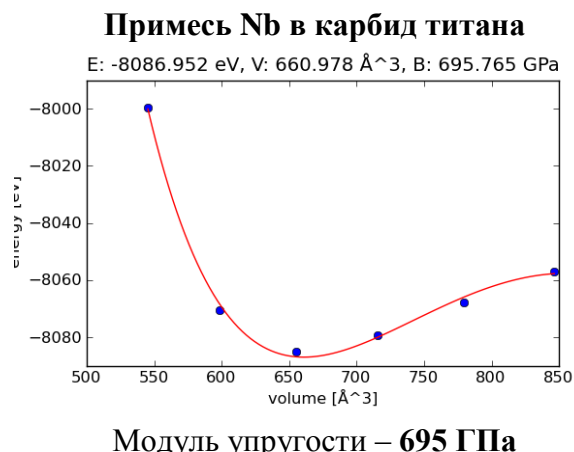
Модуль упругости – **702 ГПа**

е)

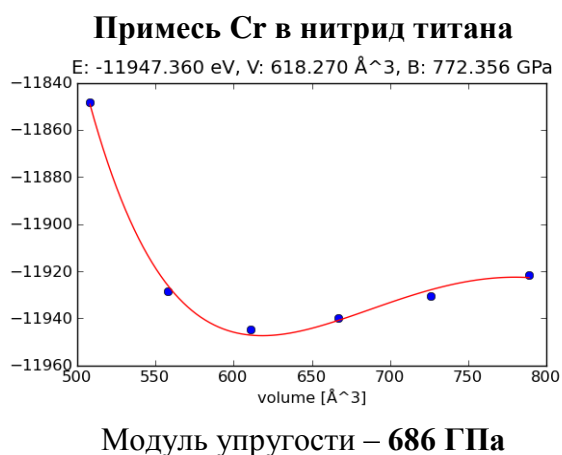
Рис. 2. Построение энергетических зависимостей суперячеек нитрида и карбида титана для нахождения модуля упругости по методу Бирч-Мурнагана (примеси Zr, V, Ta)



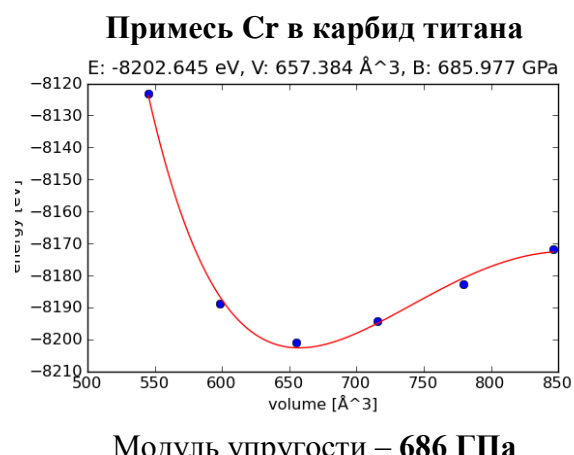
a)



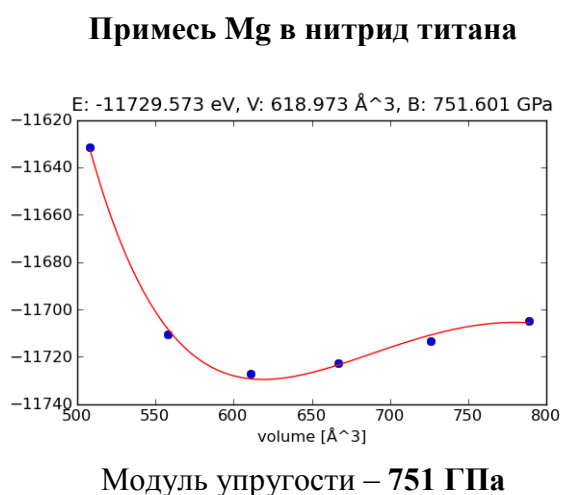
б)



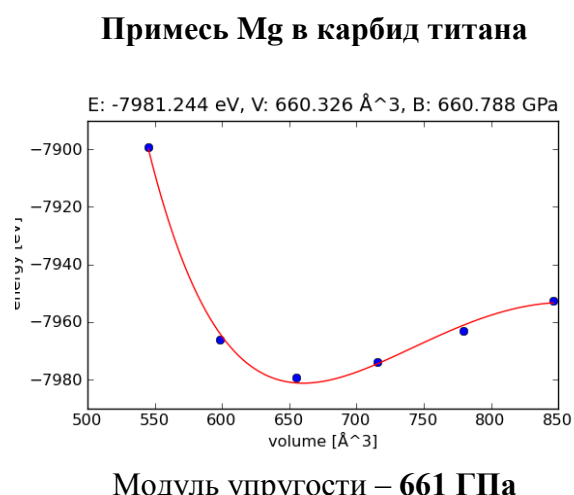
в)



г)



д)



е)

Рис. 3. Построение энергетических зависимостей суперячеек объемного нитрида (слева) и карбида титана (справа) для нахождения модуля упругости по методу Бирч-Мурнагана (примеси Nb, Cr, Ta, V)

Математическое моделирование упрочнения примесями переходных металлов показало достаточно высокую эффективность, в особенности танталом Ta (прочность возросла на

29% для TiN и на 42% для TiC) и ниобием Nb (прочность возросла на 28% для TiN и на 41% для TiC).

Библиографический список

1. **Jelinek, B. S. Groh, Horstemeyer, M. F.** MEAM potentials for Al, Si, Mg, Cu, and Fe alloys. [Электронный ресурс] http://www.hpc.msstate.edu/publications/docs/2011/06/9102Baske_s_NIST_2011.pdf
2. Quantum Espresso. [Электронный ресурс] www.quantum-espresso.org
3. Abinit. [Электронный ресурс] www.abinit.org
4. **Monkhorst H.J., Pack, J. D.** // Phys. Rev. B 13. 5188. 1976.
5. **Birch F., Geophys J.** // Res. 83. 1257. 1978.
6. <http://www.csc.fi/blogit/atcsc-arkisto/2008/4/general-purpose-gpu-2013-the-next-revolution-in-scientific-computing>.

Дата поступления
в редакцию 09.12.2013

A.M. Kuzmishina¹, O.V. Kretinin¹, E.E. Vlasov¹, S.V. Sery²

STUDY ON PROPERTIES OF BINARY INTERMETALLICS «FROM FIRST PRINCIPLES» BASED ON QUANTUM-MECHANICAL CALCULATIONS USING CUDA

Nizhny Novgorod state technical university n.a. R.E. Alekseev¹,
Komsomolsk-on-Amur state technical university²

Purpose: Develop an effective and fast way of mathematical modeling of nanostructures "from first principles" and their properties.

Methodology: Calculation of stable binary compounds by quantum mechanical calculations using CUDA technology.

Findings: The estimation of increasing the coefficient of performance for GPU-computing method based on CUDA-technology. It is shown that the use of CUDA technology can significantly reduce the performance of computing.

Key words: intermetallics, quantum-mechanical calculations, CUDA technology.