

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРЕХМЕРНОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ ДИОКСИДА УРАНА

Костарев Г.К.¹, Бормотова О.В.¹, Некрасов К.А.¹

¹ Уральский Федеральный Университет, Екатеринбург, Россия
E-mail: football7fkural98@ya.ru

SIMULATION OF A THREE-DIMENSIONAL CRYSTAL LATTICE OF URANIUM DIOXIDE

Kostarev G.K.¹, Bormotova O.V.¹, Nekrasov K.A.¹

¹ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The work includes a study of the behavior of the uranium dioxide crystal lattice near a vacancy. The main properties of the material and various types of deformations are considered.

Графические процессоры (GPU) на сегодняшний день являются более перспективными и оптимальными, чем центральные процессоры (CPU), с точки зрения расчетов, не связанных с построением видеографических материалов. Быстрое развитие технологий ведет за собой увеличение сложности и объемов решаемых задач, с которыми CPU справляется все менее эффективно, ведь количество ядер в процессоре и его частота изменяются в достаточно малом диапазоне значений. Метод использования GPU в качестве «расчетного конвейера» называется GPGPU (General-purpose computing on graphics processing units) и активно поддерживается основными производителями видеоадаптеров (NVIDIA, AMD).

Целью научно-исследовательской работы является моделирование трехмерной кристаллической решетки диоксида урана с последующей её релаксацией после удаления одного из атомов решетки – возникновения вакансии.

Данная работа является довольно актуальной на момент исследования, так как может быть использована в контексте топлива для атомных электростанций.

Программный код написан в приложении Microsoft Visual Studio на языке программирования C++ с использованием технологии CUDA, позволяющей применять при расчетах графический ускоритель. Так как используемая видеокарта имеет большое количество параллельных потоков, то проводимый расчет происходит гораздо быстрее, чем при последовательных алгоритмах.

1. Берилло А. А. Nvidia cuda — неграфические вычисления на графических процессорах, (2008).