

ANYAGTUDOMÁNY SZÁMÍTÓGÉPPEL – 1. rész

Pusztai Tamás

Wigner Fizikai Kutatóközpont, SZFI Kísérleti Szilárdtestfizikai Osztály

A mostani és a következő számban megjelenő kétrészes cikk témája a számítógépes anyagtudomány. Itt, az első részben általános áttekintést szeretnék adni az anyagtudomány helyzetéről, különösen az új anyagok minél gyorsabb kifejlesztésének igénye kapcsán felmerülő kihívásokról és kezdeményezésekről, amelyben a számítógépes anyagtudománynak fontos szerepe van. A második részben pedig bemutatok néhány olyan, csoportunk által végzett munkát, amelyek azt illusztrálják, hogy a számítógépekkel végzett szimulációk miként segíthetik az anyagtudományi folyamatok megértését és miként kapcsolódhatnak valós, gyakorlati problémák megoldásához.

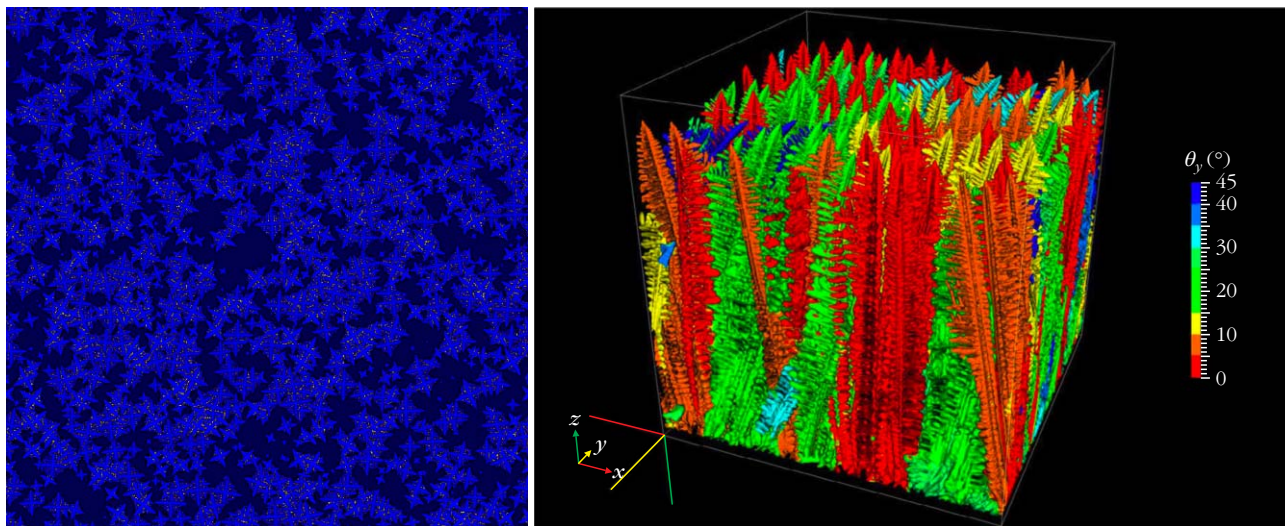
Az MTA Fizikai Osztálya 2018. május 10-i tudományos ülésén azonos címmel elhangzott előadás bővített, írott változata.



Pusztai Tamás (45) az MTA doktora, az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont tudományos tanácsadója. Kutatásait a számítógépes anyagtudomány területén végzi, azon belül is elsősorban a megszilárdulás során kialakuló növekedési formák fázismezőmóddal történő leírásával foglalkozik.

Az anyagtudomány fejlődése

Történelme során az emberiség egyre több tárggyal és eszközzel vette és veszi körbe magát. Ezeket túlnyomó részt speciálisan valamilyen feladatra – például saját védelmére, élelmének megszerzésére vagy előállítására, helyváltoztatásának elősegítésére stb. – készíteti. A múlt század derekáig úgy gondolták, hogy az emberi fajt éppen ez a céltudatos eszközkészítésre való képessége emeli ki az állatvilágból. Ezt a széles körben elfogadott vélekedést borította fel *Jane Godall* 1960-ban tett megfigyelése, aki a tanzániai Gombe Nemzeti Parkban – lényegében a csimpánzok közé költözve – közvetlen közélről tanulmányozta egy csoport életét. Az egyik megfigyelt példány nem csak egy fűszálat természetvárbá dugva majd azt lenyalogatva „horgászott” természeteket, hanem vékonyabb ágakat letörve, a rajta levő leveleket letépvé e feladatra készített célszerszámot [1]. A megfigyelésre érkezett *Louis Leakey*-től, a kor egyik vezető paleoantropológusától a következő, híressé vált mondat: „Mostantól vagy újra kell definiálnunk az eszköz fogalmát, vagy az ember fogalmát, vagy embernek kell elfogadnunk a csimpánzt.” [1]. Az azóta eltelt időben más fajokról is kimutatták, hogy képesek eszközöket előállítani. Nem közismert, hogy ilyen téren egyes madarak, például a varjak is meglehetősen intelligensnek számítanak.



1. *ábra*. Polidendrites megszilárdulás fázismező-szimulációja, balra 7000×7000 cella, 10 nap futásidő 20 hagyományos processzoron, MTA SZFKI, Budapest, 2002 [3]; jobbra 4096×4104×4096 cella, 12 nap futásidő 768 grafikus kártyán, Institute of Technology, Tokyo, 2013 [4]. Mindkét ábra korának legnagyobb méretű ilyen típusú szimulációját mutatja. Az alig több, mint 10 év különbség lehetővé tette a lineáris méretben majdnem ugyanakkora, de már háromdimenziós szimuláció végrehajtását. A különbség elsősorban a rendelkezésre álló számítógépes kapacitás növekedésének köszönhető.

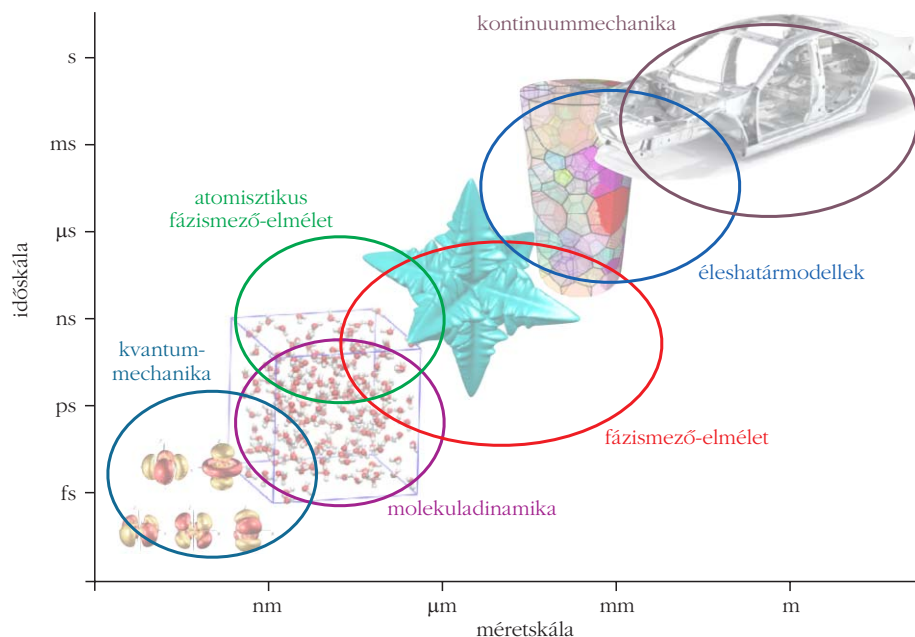
Megfigyelték, hogy az új-kaledóniai varjú szabadon élő példányai pálmalevelek fogazott széleiből formázott csíkokat csipkedve lándzsát készítenek, amivel azután fák kérgének repedéseiben, lyukaiban megbúvó rovarokra, férgekre vadásznak [2].

Az eszközök készítése terén a következő, még több intelligenciát igénylő fokozat – amelyben tudásom szerint továbbra is egyedülálló az emberi faj – az eszközök céljára legmegfelelőbb anyag elkészítése, azaz a *tudatos anyagelőállítás*. Ez a képesség még az emberek között is meglehetősen újnak tekinthető, amennyiben az időt az emberiség teljes történetéhez viszonyítjuk. Az őskor kezdeti, több millió évig tartó időszakában mi is csak a természetben talált anyagok felhasználásával, megmunkálásával voltunk képesek eszközöket készíteni. A változás csak néhány ezer éve, az első réz-, majd bronzszerszámok elkészítésével következett be. Ezen új anyagok megjelenésének fontosságát mi sem bizonyítja jobban, mint hogy egész történelmi korszakokat neveztek el róluk: réz-, bronz- és vaskor. Azóta azonban a fejlődés rohamosan felgyorsult. Eszközünket egyre többféle anyag felhasználásával lettünk képesek előállítani. Az anyagokkal kapcsolatos ismeretek bővülése azonban e pár ezer éves időszak legnagyobb részében is még mindig szigorúan tapasztalati úton történt. Kovácsok generációi sok száz éven keresztül éltek abból a tapasztalathoz, hogy a vasat kis mennyiségű szénrel ötvözve erősebb anyagot kapnak anélkül, hogy értették volna miértjét. Az anyagtudományi folyamatok megértése, és ezzel egy magasabb szintű, tudatos anyagtervezés csak körülbelül az 1800-as évektől, a termodinamika és a statisztikus fizika megjelenésével kezdődhetett meg. A fejlődés ezen a téren is szédületesen felgyorsult. A kísérleti módszerek 20. századi gyors fejlődése, az újabb elméletek és modellek megjelenése és az utóbbi évtizedekben a számítási kapacitások rohamos növekedése (1. *ábra*) az anyagtudományi folyamatok egyre pontosabb leírását

tették lehetővé, ami az egyre újabb, egzotikusabb, és az adott célra speciálisan kifejlesztett anyagok megjelenéséhez vezetett. Figyelembe véve a modern ember igényeit, ez a fejlődés azonban még mindig nem elég gyors. Számos ötletünk, igényünk lenne adott tulajdonsággal bíró eszközök és így meghatározott tulajdonsággal rendelkező anyagok felhasználására – lehetőleg már holnap. Általánosságban elmondható, hogy az új eszközök kifejlesztése rövidebb időt vesz igénybe, mint az új anyagoké, ezért technikai fejlődésünk további gyorsításának egyik kulcsa az új anyagok kifejlesztésének gyorsítása. Ebben várhatóan nagy szerepet fognak játszani a számítógépes modellek, a számítógépes anyagtudomány.

Modellek

Az anyagtudományban használatos modelleket áttekinthetjük a leírni kívánt jelenség méret- és időskálája szerint (2. *ábra*). Ha például a molekulák belső szerkezetét kívánjuk tanulmányozni, a kvantummechanikai, kvantumkémiai programokhoz nyúlunk. Ha az anyagot alkotó egyes atomok vagy molekulák – kölcsönhatásuk következtében fellépő – mozgására, rendeződésére vagyunk kíváncsiak, akkor molekuladynamikai szimulációkat végzünk. Ha a vizsgált folyamat szempontjából már nem fontos az anyag atomos szerkezete, kontinuum-modelleket használhatunk. Itt külön kiemelném a fázismezőmodelleket, egyrészt mert ezek a megszilárdulás során kialakuló mikroszerkezetek leírásának egyik leghatékonyabb eszközei, másrészt mert a Wigner Fizikai Kutatóközpontban működő csoportunk már körülbelül 15 éve foglalkozik velük. Legjelentősebb eredményeink, köztük a jelen cikk következő részében bemutatásra kerülő munkáink is, a fázismezőmodellek fejlesztéséből és alkalmazásából származnak. Amennyiben még nagyobb méretskálákra



2. ábra. Az anyagtudományban használatos néhány fontosabb modell méret- és időskála szerinti áttekintése.

megyünk, a vizsgált anyag fázisainak határát már matematikailag élesnek kell tekintenünk. Egy makroszkopikus méretű tárgy öntésének leírásához már valamilyen éleshatármodellt, valamint kontinuummechanikai, hidrodinamikai egyenleteket kell használnunk.

A modellezés problémái

Egy új anyag kifejlesztésekor – általában – több méretskálán is felmerülnek modellezési feladatok. Ideális esetben ezeket a feladatokat egy integrált programmal lehetne megoldani, amelynek egymásra épülő részei lennének a fentebb felsorolt (és egyéb) anyagtudományi modellek, és az egyes részek, mint modulok, igény szerint kerülnének meghívásra. A kisebb skálán működő modellek kiálthatnának a nagyobb méretskálán dolgozó modellek számára (ahogy például a fázismezőmodellek számára szükséges, mérésekből nehezen meghatározható felületi szabadenergia-értékeket gyakran molekuladinamikai szimulációkból szerezzük), illetve a nagyobb méretskálán dolgozó modellek megadhatják a finomabb skálájú modellek kezdeti vagy peremértékeit (ahogy például egy makroskálájú hőterjedési modell meghatározhatja egy mikroszerkezeti szimulációban használandó hőmérséklet-gradiens értékét).

Ez az integrált, több skálán dolgozó megközelítés még nem terjedt el a gyakorlatban. Az egyes kutatócsoportok általában egy-egy modellre specializálódtak. Sok esetben még az azonos modellekkel dolgozó kutatócsoportok is különféle, saját maguk által írt kódokat használnak. Mivel a tudományos életben egy modell számítógépes implementálása nem közvetlen érték, a közösség csak a kóddal előállított eredményeket díjazza, ezeket az egyedi kódokat általában nem

teszik közzé. Ez lehetetlenné teszi a meglévő kódok más csoportok általi használatát és továbbfejlesztését, ami felesleges, párhuzamos fejlesztéseket indukál. Az egyedi számítógépes kódok ellenőrzése és validálása valószínűleg kevésbé történik meg, mint a szélesebb körben használtaké. Ha a kódokkal minden rendben is van, a szimulációkhoz felhasznált adatokkal is lehetnek problémák. Sok adat nehezen hozzáférhető, mert ezek általában nincsenek összegyűjtve, szabványosítva, kereshetővé téve. A számítógépes kódokkal együtt a publikációkban fel nem használt eredmények sem hozzáférhetők mások számára, pedig akár azok között is lehetnének értékes

eredmények. Ha mindezt megpróbáljuk nem az egyes kutatócsoportok szemszögéből, hanem valamivel magasabb szintről nézni, és ezeket a kutatócsoportokat egy olyan nagy csapat tagjainak tekintjük, amelynek célja az anyagtudományi ismeretek bővítése és új anyagok kifejlesztése, azt láthatjuk, hogy ez a fajta munkaszervezés nem optimális.

Kezdeményezések

Ezen problémákat természetesen több helyen is felismerték és megfogalmazták, sőt, különböző kezdeményezések formájában megpróbálták változásokat is eszközölni. A nyílt hozzáférésű, vagy akár nyílt forráskódú szoftverek használata az anyagtudományban is terjed. Megjelennek olyan weboldalak is, amelyek a kódok helyes működésének ellenőrzését hivatottak segíteni, jól megválasztott standard tesztek, azok részletes kezdeti körülményeinek és végeredményének közzétételével [5–7]. Az ICME (Integrated Computational Materials Engineering) [8, 9] célja a fentebb említett integrált, azaz egyszerre minden méretskálát kezelő szimulációs programok előállítása, illetve ezen megközelítés elterjesztése. Egyik legfontosabb feladatuk az egyes modellek közötti adatcsere szabványosítása. A NOMAD (Novel Materials Discovery) [10] kezdeményezés az adatokra fókuszál. Céljuk az anyagtudományban hasznosítható adatok begyűjtése, egységes formátumra hozása és archiválása (NOMAD archívum). Természetesen ez csak akkor igazán értékes, ha az adatokat lekérdezhetővé és kereshetővé teszik. Egy hagyományos archívumon túlmutatóan a begyűjtött egyre nagyobb mennyiségű adatot *mesterséges intelligencia* segítségével is tervezik feldolgozni. Ez a kombináció (a máshol is sokat emlegetett Big Data és AI) új típusú információk kinyerését teszi lehetővé.

A fenti problémák megoldására, az új anyagok kifejlesztési idejének jelentős mértékű csökkentése érdekében tett talán legkomolyabb, de mindenképpen legnagyobb erővel támogatott kezdeményezés az Egyesült Államok kormánya által indítványozott, *Barack Obama* elnök által 2011-ben bejelentett Materials Genome Initiative (MGI) [11, 12], amit talán az Anyagok Genomja Kezdeményezésként lehetne fordítani. De mi is az az anyagok genomja? Biológiai rendszerekben genomnak valamilyen szervezet teljes örökítő információját hívjuk. Ezt az információt a szervezet (majdnem) minden sejtje kromoszómák, gének formájában tárolja. Egy adott egyed genomja, amely általában a szülei által örökített genomok valamilyen kombinációjaként áll elő, minden információt tartalmaz arról, ami az adott egyed „előállításához” szükséges. E kép általánosításával érzékelhetjük, mit jelenthet az anyagok genomja kifejezés. Egy anyag genomja azon információk összessége, amelyek az adott anyagot jellemzik, és amelyek az előállításához szükségesek. Ez magába foglalná az összetevő komponensek, fázisok termodinamikai, szerkezeti tulajdonságait, az előállítási módok pontos leírását stb., mindezt persze valamilyen alkalmas, digitális kódolásban. Az anyagok ilyen, mindenre kiterjedő leírása egyelőre meglehetősen utópisztikusnak tűnik, de egy kívánatos irányt jelöl ki az anyagtudományi kutatások számára.

Az MGI a fő hangsúlyt a modellezésre teszi. A modelleknek egyre jobbakká, jóslataiknak sokkal megbízhatóbbakká kell válniuk, hogy képesek legyenek egyes kísérletek, felesleges próbálkozások kiváltására. Ez jelentősen gyorsíthatná az anyagfejlesztés ütemét és csökkenthetné költségeit. A mostani számítógépes kódok, részben a fentebb említett problémák miatt, még nem tartanak itt. Jól kontrollált kísérletekre természetesen továbbra is szükség van, hiszen a megbízható jóslatokhoz a jó modelleken kívül megbízható bemenő adatokra is szükség van. A kísérleti és szimulációs eredményeket széles körben hozzáférhető adatbázisokba kell gyűjteni. Az adatok kezelését is jelentősen javítani kell. A hatékonyság növelése érdekében meg kell oldani az adatok szabványosítását, kereshetővé tételét, és az egyes kutatócsoportok közötti megosztását. Végül, mint minden újdonságot, ezt az újfajta megközelítést is népszerűsíteni és tanítani kell, hogy a következő generációk kutatóinak mindez már természetes legyen. Az MGI az anyagfejlesztésben részt vevő közösséget inkább együttműködő, mint egymással versengő csoportok összességéként képzelel el.

Egy sikeres példa: a CALPHAD-módszer

Legtöbbünk számára valószínűleg még nem világos, hogy az MGI víziója az anyagok genomjáról, vagy például az MGI és az ICME törekvése a modellek közötti adatcsere szabványosítására miképpen fog megvalósulni. Szeretném azonban egy múlt század közepéből való példán keresztül megmutatni, hogy egy, a maga korában hasonlóan újszerű kezdeményezés

végül sikerrel járt, és mára az anyagtudomány egyik széles körben elterjedt eszközévé vált. Ez a példa a CALPHAD, teljes nevén Calculation of Phase Diagrams [13, 14], vagy magyarra fordítva Fázisdiagramok Számítása módszer. Az alapötlet a következő volt. Amennyiben ismert lenne az anyagot alkotó fázisok $G(p, T, x_1, \dots, x_n, \xi_1, \dots, \xi_n)$ Gibbs-szabadenergiája, mint a p nyomás, T hőmérséklet, az alkotók x_i koncentrációi, valamint a ξ_i egyéb fizikai paraméterek függvénye, akkor abból számos fontos információ, például a fázisátalakulások hőmérsékletei, a fázisok közötti egyensúlyok feltételei, azaz például a fázisdiagramok, valamint az egyes átalakulások hajtóerejei is származtathatók lennének. A G függvény meghatározása azonban kísérletekből direkt módon nem lehetséges, ezért erre egy illesztési eljárást javasoltak. Felteletelték, hogy a G függvény alakja megfelel egy valamilyen általános modellel alátámasztott formának. Ilyen volt eleinte az egyszerű regulárisoldat-modellnek megfelelő függvényalak, ehhez jöttek egy magasabb rendű sorfejtésnek tekinthető Redlich–Kisterpolinomok, majd az 1970-es évektől az alrácsmodellek. Az illesztési eljárás az ezen függvényekben megjelenő tagok (hőmérsékletfüggő) együtthatóinak meghatározását célozta meg, úgy, hogy a kapott G függvényből származtatott egyensúlyi és nemegyensúlyi tulajdonságok minél nagyobb összhangban legyenek az illesztési eljáráshoz kiválasztott kísérleti eredményekkel. Ez a módszer meglehetősen fáradságos, a kapott eredmény függ attól, hogy például milyen koncentrációtartományt tekintünk hangsúlyosnak és milyen kísérleteket tekintünk referenciának. Az illesztés eredménye, különösen a komplexebb, például sokalkotós esetekben, gyakran fizetős adatbázisokba kerül, az egyszerűbb rendszerek, például tiszta anyagok, binér és ternér fémötvözetek adatai azonban mindenki számára hozzáférhetők.

Mint a legtöbb új dolog, a CALPHAD-módszer indulása sem volt zökkenőmentes. Kísérleti oldalról azért támadták, mert véleményük szerint az eredmények megkérdőjelezhető adatokon alapultak, elméleti oldalról pedig az volt a kifogás, hogy az illesztésekhez túlságosan leegyszerűsített modelleket használtak. Ennek ellenére a módszer elfogadottsága folyamatosan nőtt, az adatbázisok gyarapodtak, és több termodinamikai szoftvert is kifejlesztettek, amelyek CALPHAD-adatbázisokra épülnek. Az 1970-es évektől, amikortól a CALPHAD-módszer második generációját számítják, hasonló megközelítésen alapulva már az anyagok diffúziós adatai is megjelentek az adatbázisokban, lehetővé téve dinamikus jelenségek kezelését is. Így a CALPHAD-adatbázisok már genom-szerűnek tekinthetők, ezért többen az MGI kezdetének, alapjának tekintik [14].

Irodalom

1. Jane Goodall: Essays on science and society: Learning from the chimpanzees: A message humans can understand. *Science* 282/5397 (1998) 2184–2185.
2. Richard Seed, Amanda amd Byrne: Animal tool-use. *Current Biology* 20 (2010) R1032–R1039.

3. László Gránásy, Tamás Börzsönyi, Tamás Pusztai: Nucleation and Bulk Crystallization in Binary Phase Field Theory. *Physical Review Letters* 88/20 (May 2002) 206105.
4. Tomohiro Takaki, Takashi Shimokawabe, Munekazu Ohno, Akinori Yamanaka, Takayuki Aoki: Unexpected selection of growing dendrites by very-large-scale phase-field simulation. *Journal of Crystal Growth* 382 (Nov. 2013) 21–25.
5. NIST. Pfhub: Phase field community hub. <https://pages.nist.gov/pfhub/>
6. A. M. Jokisaari, P. W. Voorhees, J. E. Guyer, James A. Warren, O. G. Heinonen: Benchmark problems for numerical implementations of phase field models. *Computational Materials Science* 126 (Jan. 2017) 139–151.
7. NIST. Additive manufacturing benchmarks 2018. <https://www.nist.gov/ambench>
8. Nitin Chopra: Integrated computational materials engineering: A multiscale approach. *JOM* 67/1 (Jan. 2015) 118–119.
9. Integrated computational materials engineering expert group. <http://www.icmeg.euproject.info>
10. The nomad laboratory. <https://www.nomad-coe.eu>
11. Materials genome initiative (mgi). <https://www.mgi.gov>, <https://mgi.nist.gov>
12. Materials genome initiative for global competitiveness. https://www.mgi.gov/sites/default/files/documents/materials_genome_initiative-final.pdf, 2017.
13. Calculation of phase diagrams (calphad). <http://www.calphad.org>
14. Larry Kaufman, John Ågren: CALPHAD, first and second generation – Birth of the materials genome. *Scripta Materialia*, 70/1 (Jan. 2014) 3–6.