材料初级辐照损伤模拟软件IM3D的自主开发及并行化

李永钢

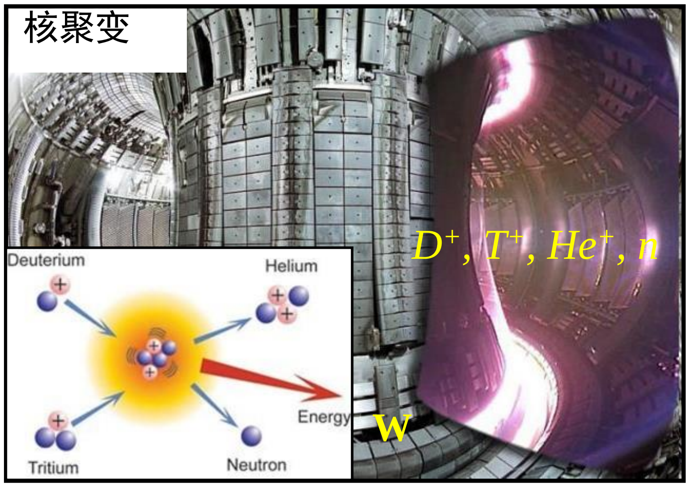
中国科学院固体物理研究所
计算物理与量子材料研究部

2023年11月30日

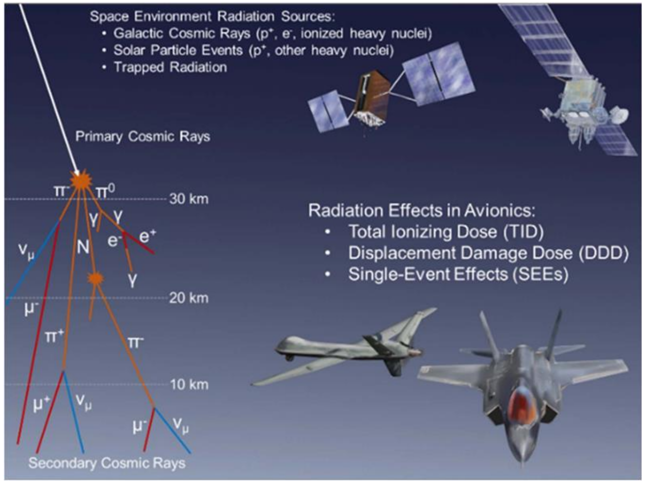
目 录

IM3D软件发展背景

- 材料辐照效应



核能金属结构材料辐照损伤

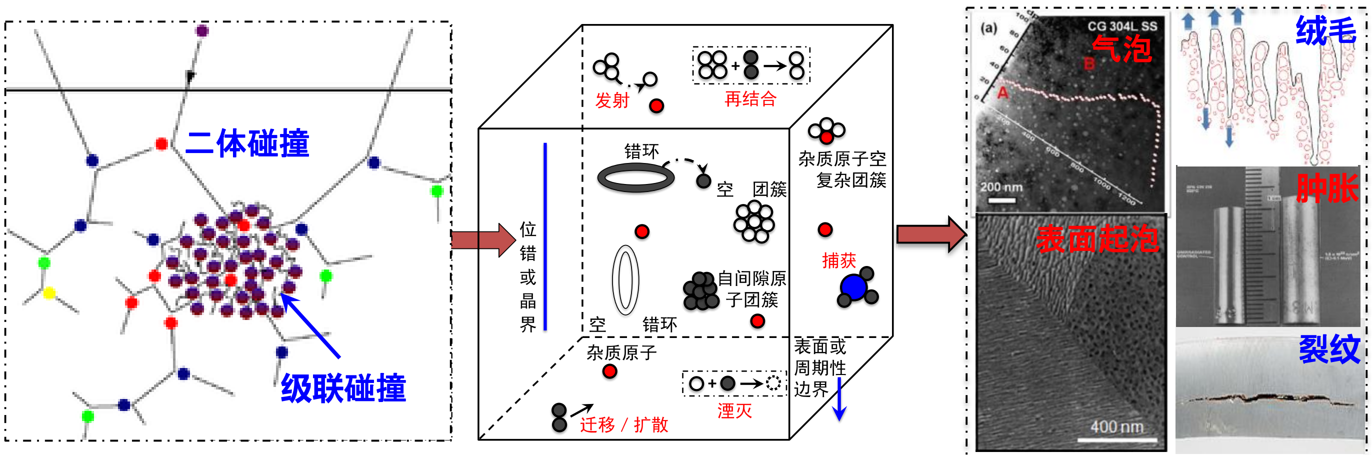


宇航半导体器件辐照失效

高能粒子作用下金属/半导体辐射效应的微观机理分析需求

• 初级辐照损伤

- **材料辐照效应：**长时间（飞秒～年）、跨空间尺度（纳米～米）、多种微观机制耦合
- 初级辐照损伤：高能粒子级联的局域缺陷产生（弹道+热峰）和退火过程；空间 ~ 纳米 & 时间 ~ 皮秒 Nordlund et al., *J. Comput. Electron.* 13 (2014) 122.



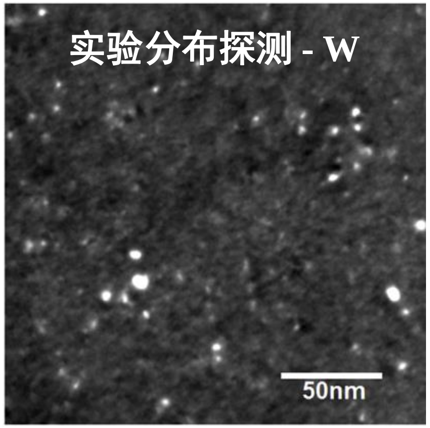
缺陷产生　　缺陷演化　　宏观损伤

fs, nm → year, m

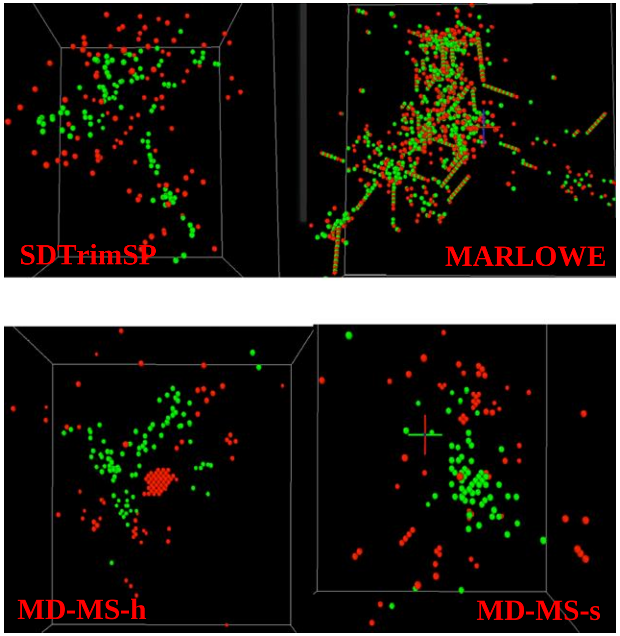
对任何辐射效应的科学理解都是从初级损伤开始的

• 初级辐照损伤的理论与实验研究挑战

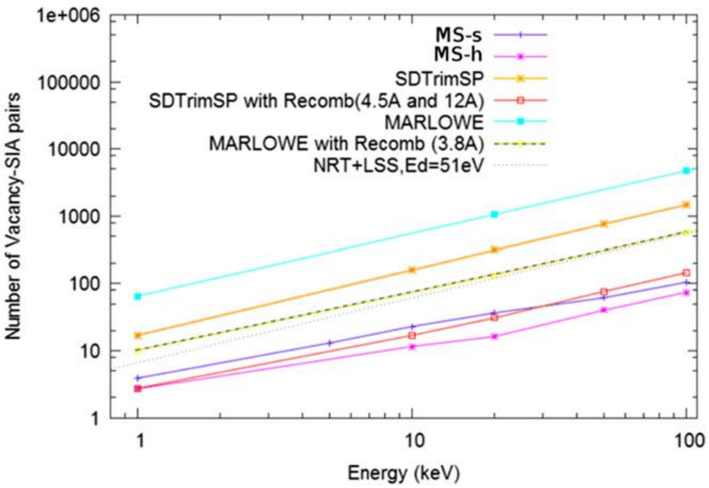
- 实际物理尺度（fs - ps，单缺陷 - nm）
  v.s. 实验探测局限 （~ s，> 2 nm）
- 理论模拟的必要性：NRT, MD/MC



Mason et al., *Acta Mater.* 144 (2018) 905.



Backer et al, *Phys. Scr.* T167 (2016) 014018.



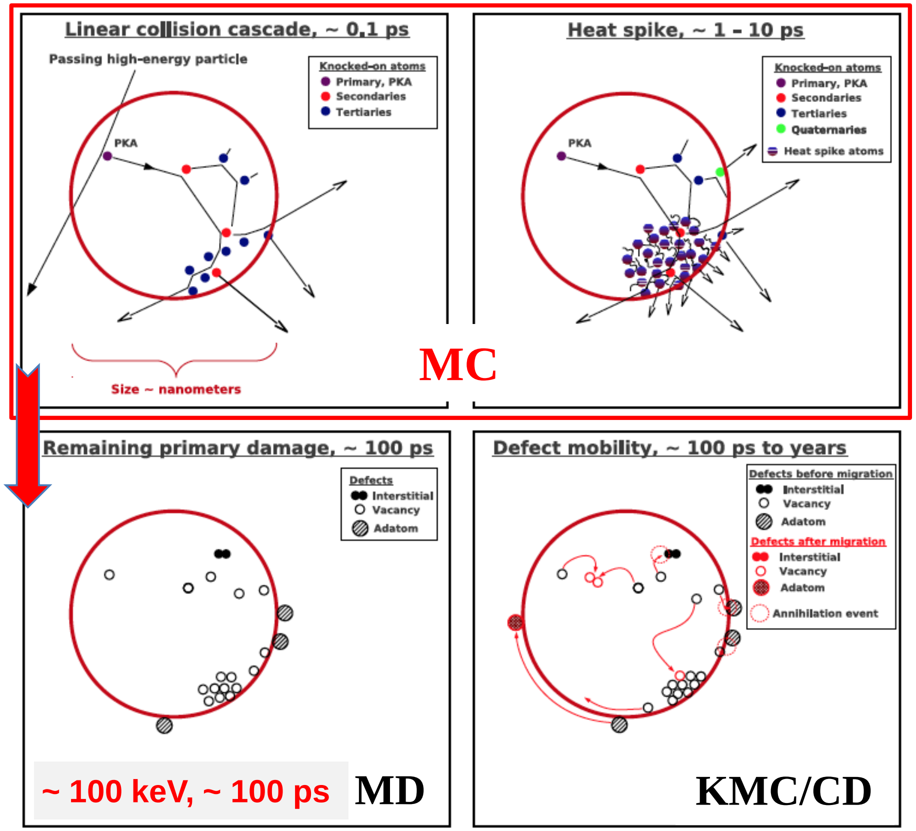
不同理论模型和经验势计算偏差高达 **2** 个数量级

• 初级辐照损伤的Monte Carlo（MC）方法优势及局限

基于二体碰撞近似的MC方法

优势：MC *v.s.* MD

- 简单、高效
- 任意 1D/3D 结构体系
- 自然计及电子能量损失和多次、多重散射
- 不受结构尺寸、粒子能量和经验原子间势的限制



Nordlund et al., *J. Comput. Electron.* 13 (2014) 122.

目前用于初级辐射损伤模拟的MC软件在描述3D几何形状、
退火过程和计算效率上始终存在局限

IM3D软件开发及优势

材料初级辐照损伤模拟软件IM3D（Irradiation of Materials in 3D）

- 极大地突破了原有初级辐照损伤计算方法对复杂三维结构体系和同步级联退火物理过程的模拟能力和效率
- 可快速模拟高能离子/中子（能谱）辐照下任意复杂结构材料中与能量损失相关的各种动力学现象（离位损伤、表面溅射、无定型化和电子/声子能量沉积等）
- 给出初级缺陷（离子、间隙/替位/溅射原子和空位等）的三维空间分布

主要开发者：

- IM3D内核：李永钢、李巨、曾雉
- 数据库：程凡、李永钢、周浩
- CPU/DCU并行：李永钢、张传国
- GUI：周浩、李永钢
- SaaS云平台：迈高、李永钢、程凡

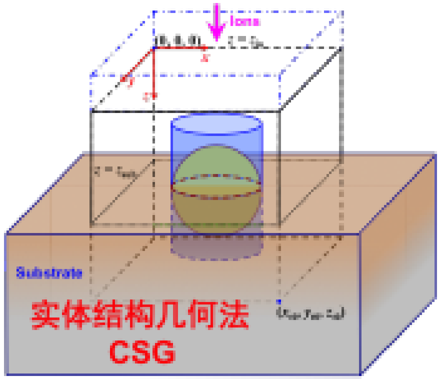
李永钢

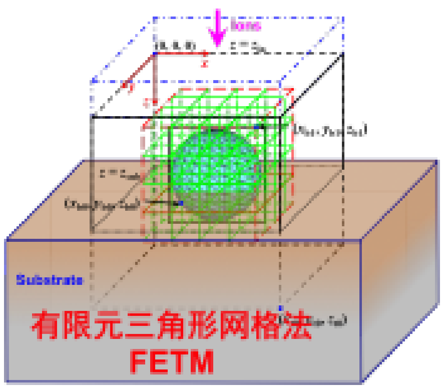
http://theory.issp.ac.cn/IM3D

ygli@theory.issp.ac.cn

版权： ISSP，2013 - 2023

• IM3D整体模型架构





任意复杂3D结构

三维/并行/开源

准确的电子能损**数据库**

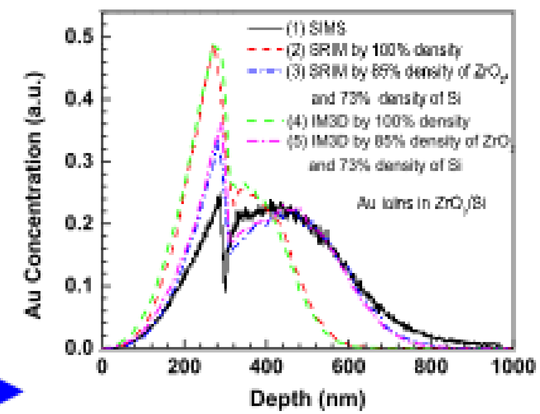
同步级联—**退火**模型

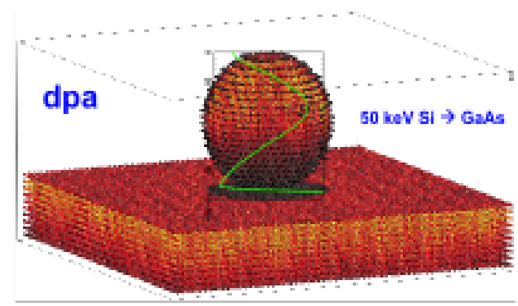
快速数据库索引技术

CPU/GPU并行加速

C & MPI

计算效率至少高 **4** 个数量级





保持与SRIM**相同精度**

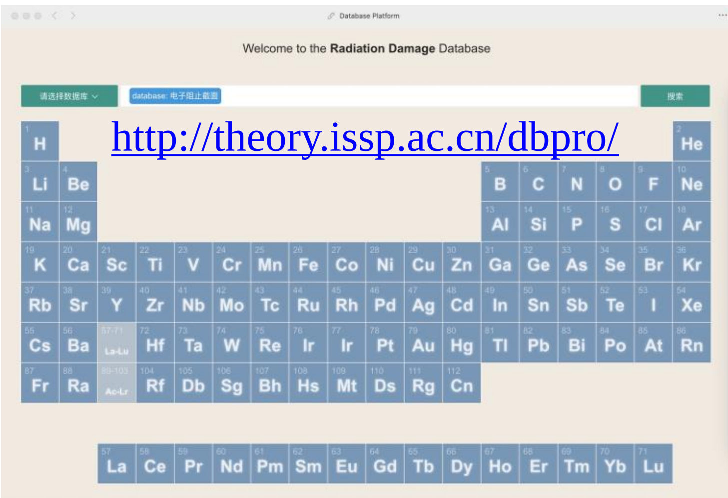
更加**通用**和**高效**

Y.G. Li & Z. Zeng et al., *Sci. Rep.* 5 (2015) 18130; Y.G. Li & Z. Zeng et al., *Nucl. Fusion* 57 (2017) 016038; Y. Yang & Y.G. Li et al., *Nanoscale* 10 (2018) 1598.

http://theory.issp.ac.cn/IM3D

创新I. 更准确、普适的物理模型：机器学习的电子阻止截面数据库

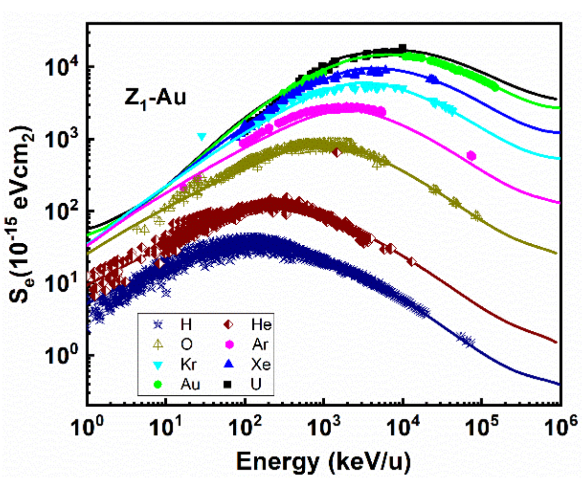
IM3D-ESDB：电子能量损失截面数据库

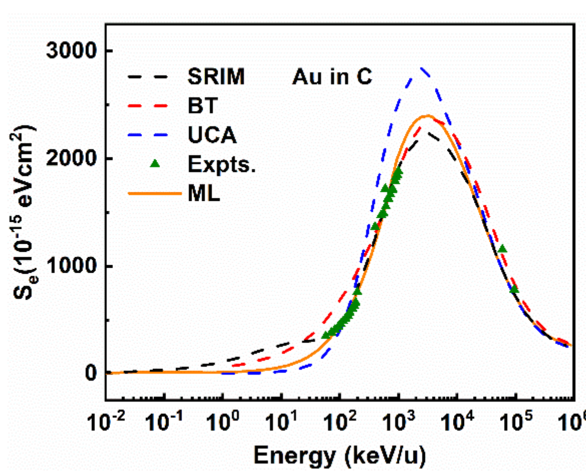


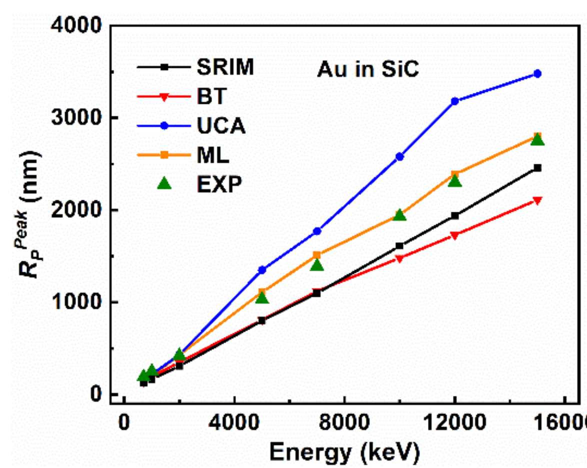
http://theory.issp.ac.cn/dbpro/

- 标准的SRIM数据库
- 用户数据库: BT/UCA/TDDFT/Expt …
- 自主机器学习数据库

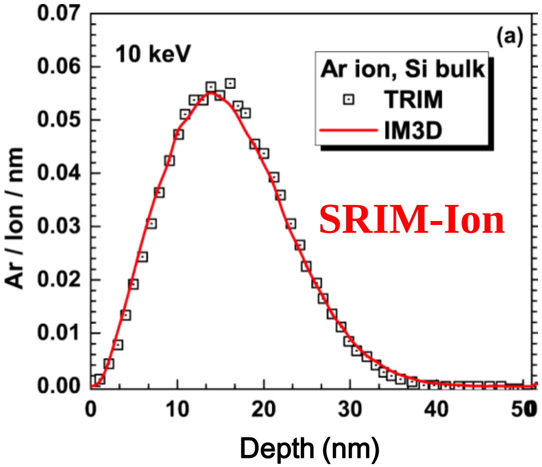
SRIM website, *http://www.srim.org*.
Grande et al., Phys. Rev. A 58 (1998) 5.
Sigmund et al., Eur. Phys. J. D 12 (2000) 425.
Sand et al., npj Comput. Mater 5 (2019) 43.
https://scikit-learn.org/stable/.
F. Cheng & Y.G. Li et al., *Radiat. Phys. Chem.* 204 (2023) 110681.

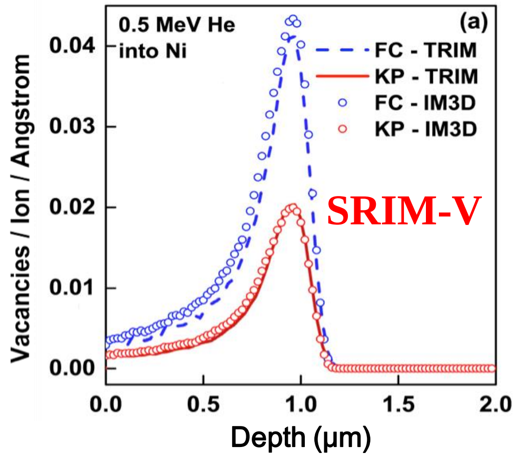


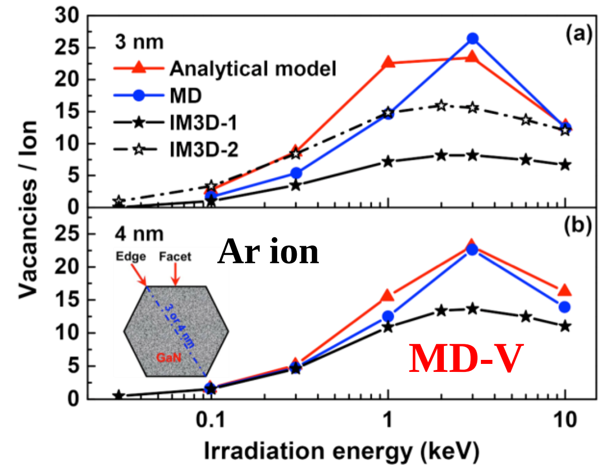




IM3D模型验证

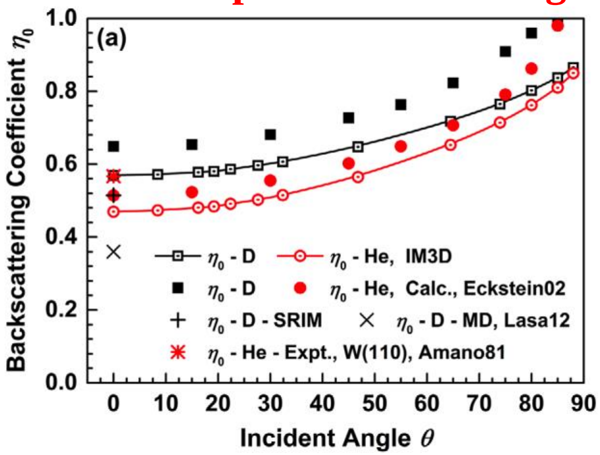




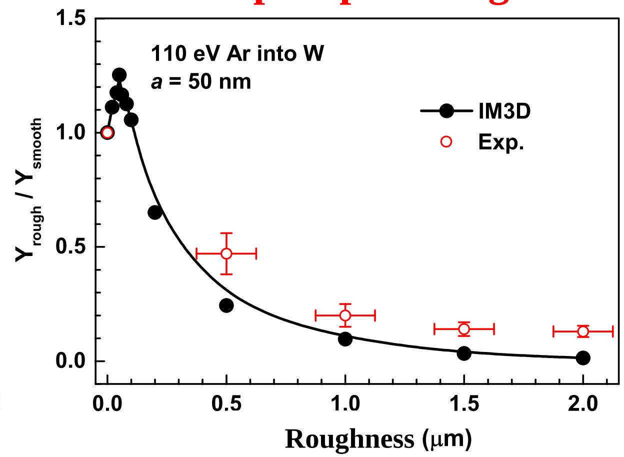


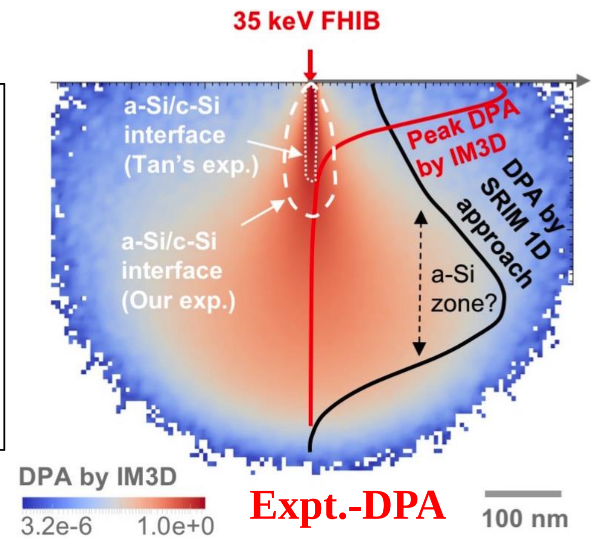
Y.G. Li & Z. Zeng et al., *Sci. Rep.* 5 (2015) 18130.

MC/Expt.-Backscattering



Expt.-Sputtering





Y.G. Li & Z. Zeng et al., *Nucl. Fusion* 57 (2017) 016038. Y. Yang & Y.G. Li et al., *Nanoscale* 10 (2018) 1598.

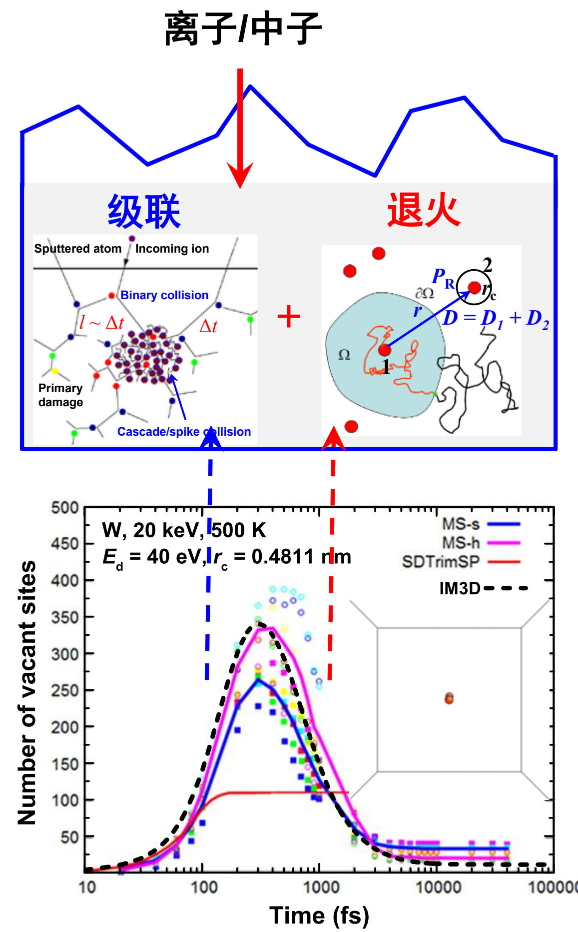
创新I. 更准确、普适的物理模型：同步级联—退火模型（CCA）发展

级联 → 级联 + 退火

- **级联：** 高能下多体相互作用 → 二体碰撞近似 + 全级联局域规则
- **退火：** 缺陷的多体随机行走 → 二体准自由扩散近似 + 异步事件驱动动力学蒙特卡洛算法（EKMC）

利用可轻松获得的缺陷性能参数描述缺陷间相互作用，可获得与MD一致的结果

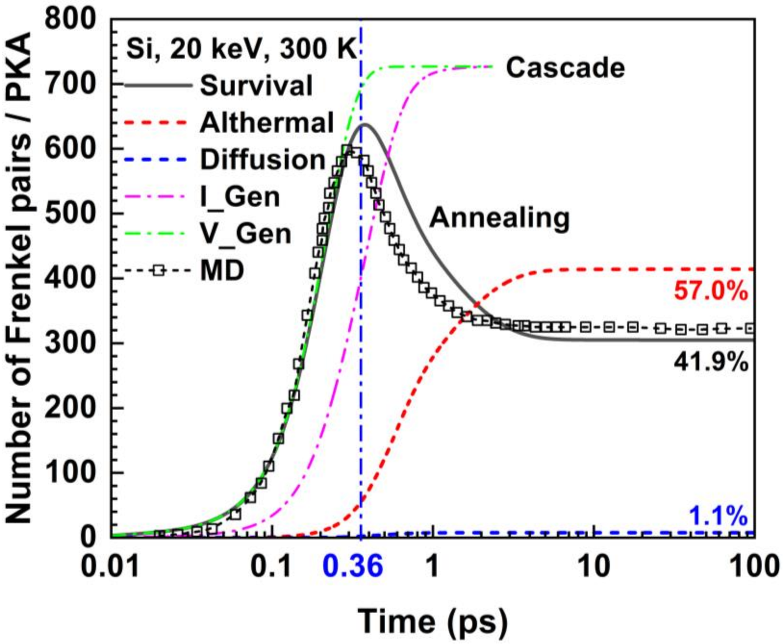
$r_C, E_m^I, E_m^V, E_b^{I_2}, E_b^{V_2}, E_f^I, E_f^V$

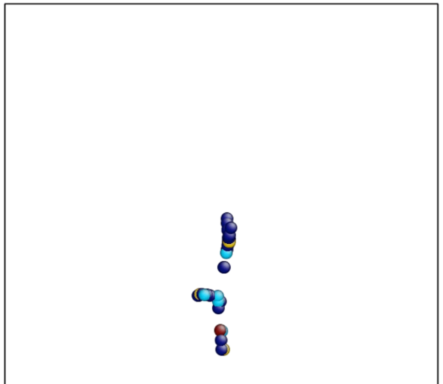


Backer et al, *Phys. Scr.* T167 (2016) 014018.

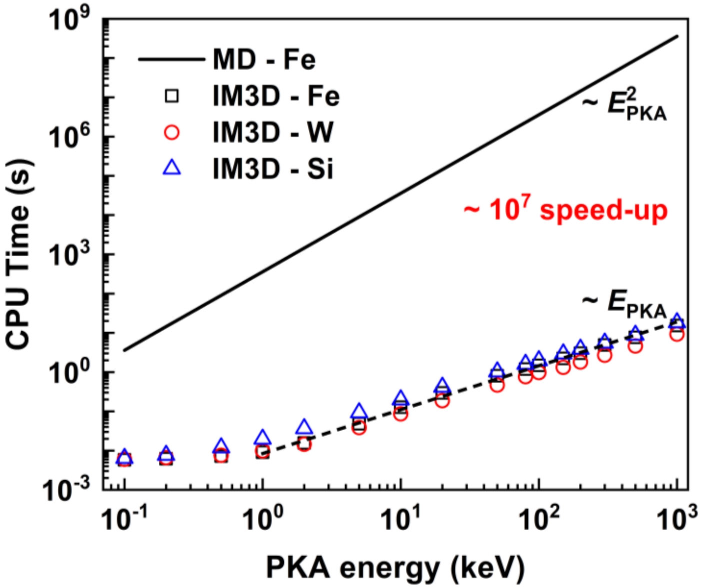
Simpson et al., *Rad. Eff.* 3 (1970) 1; Torre et al., *Philos. Mag.* 85 (2005) 549.

IM3D-CCA的优势



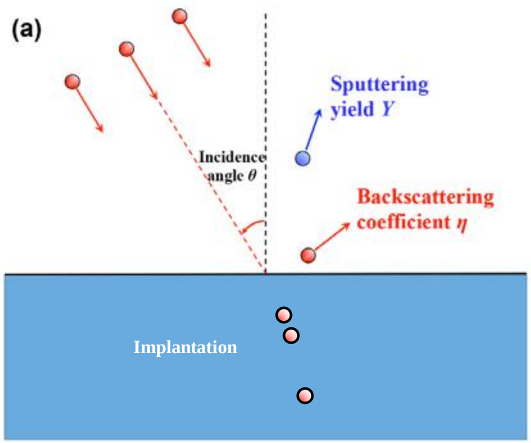


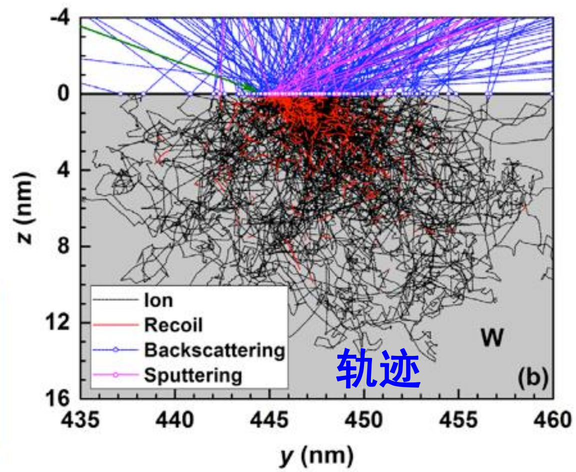
IM3D, Si, 50 keV, 0-10 ps

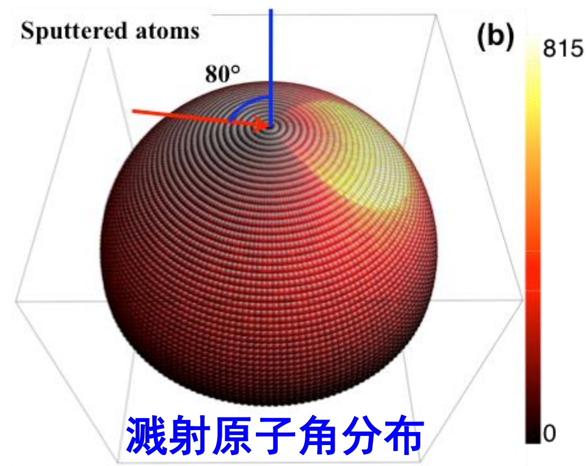


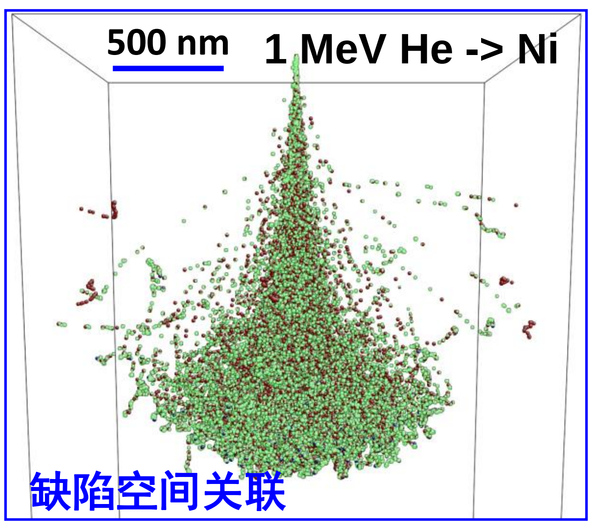
- 级联 + 退火
- 非热 & 热扩散复合
- 精度 ⟶ MD
- 效率提升 >10^4

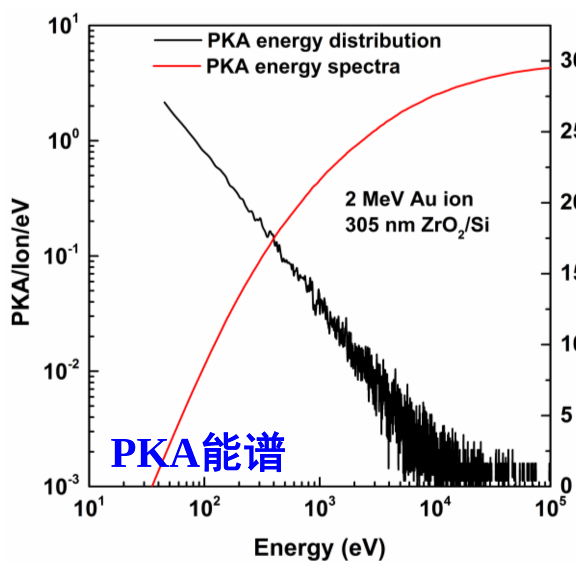
创新I. 更准确、普适的物理模型：离子注入/中子辐照

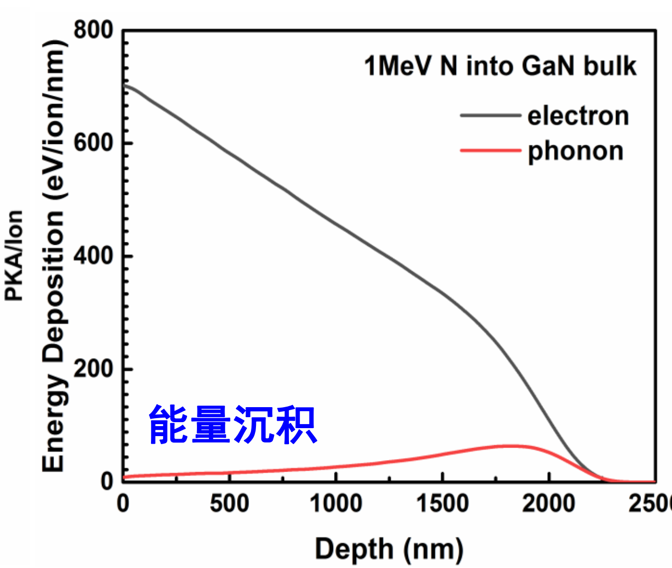




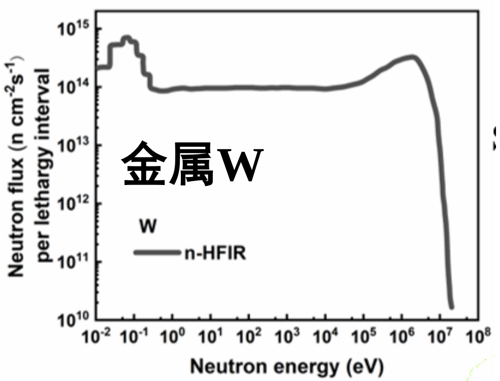


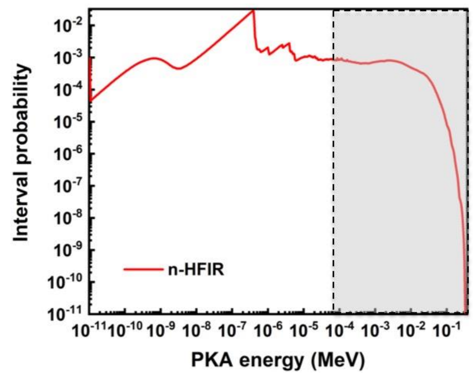


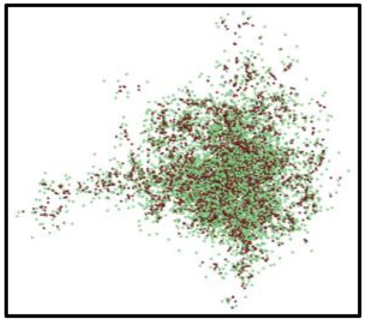




中子PKA嵌入模块（IM3D-PKA）



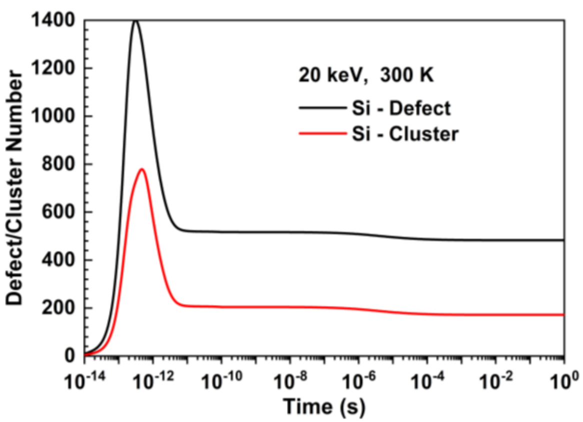


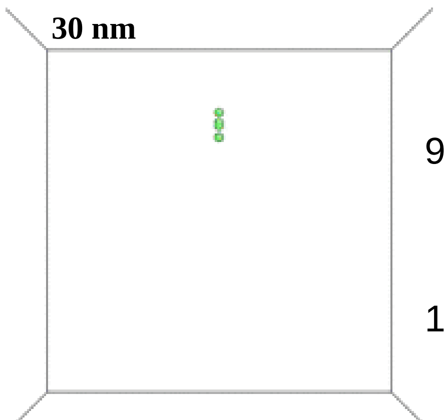


中子能谱 → SPECTRA-PKA → PKA 能谱 → 缺陷级联

IM3D-CCA

缺陷退火



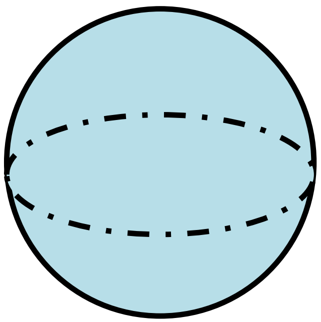


https://geant4.web.cern.ch; Gilbert et al., *J. Nucl. Mater.* 467 (2015) 121; http://theory.issp.ac.cn/IM3D.

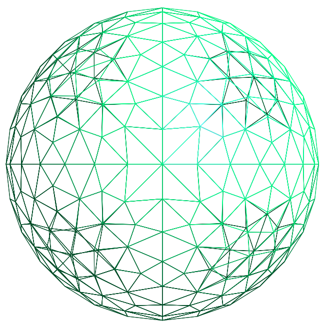
创新II. 任意复杂三维结构体系

@ Z.J. Ding, H.M. Li and H.Y. Wang

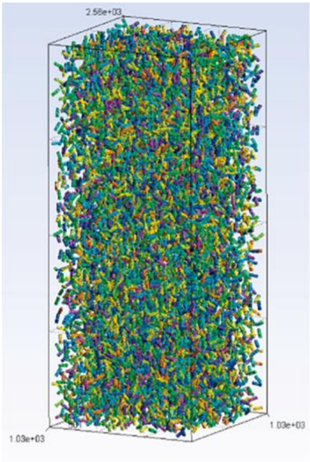
- **3D 结构算法：**实体结构几何法（CSG），有限元三角形网格法（FETM）

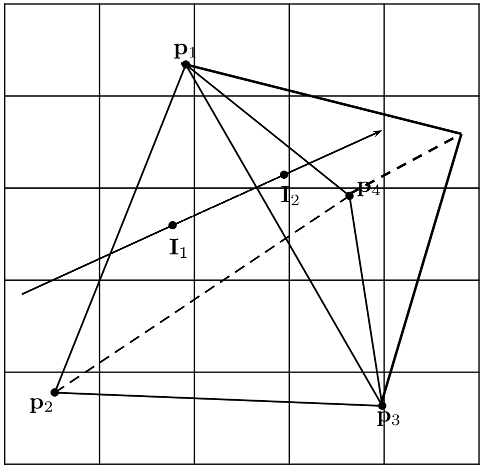


(CSG)



(FETM)





Y.G. Li & Z.J. Ding et al., J. Appl. Phys. 104 (2008) 064001;
Z.C. Yang & Y.G. Li et al., *NIMB* 455 (2019) 119.

空间网格化 & 光线追踪 & 求交

O(n) —> O(n^{1/3})

- **几何结构：** GMSH, …
  .txt, .ply2 and .ir3 formats

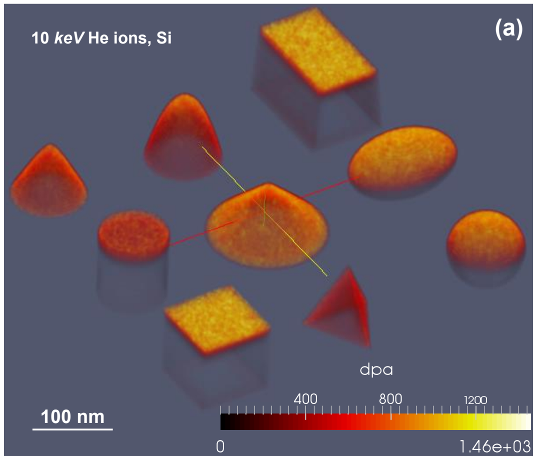
- **后处理显示:** GMSH, AtomEye, paraview,…
  .dat, .cfg, .msh and .vtk formats

Gmsh http://www.geuz.org/gmsh/

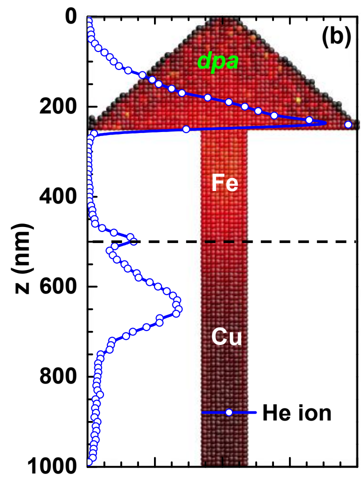
AtomEye: atomistic configuration viewer
http://li.mit.edu/Archive/Graphics/A/

ParaView http://www.paraview.org/

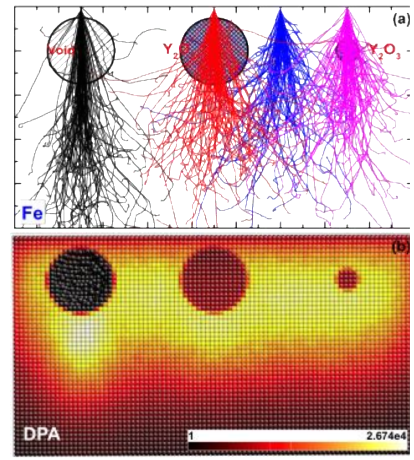
基于CSG/FETM的任意复杂结构中的初级缺陷3D分布



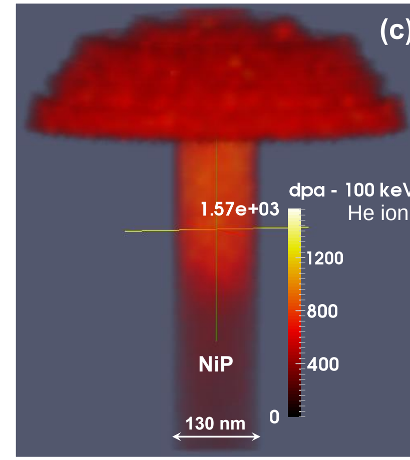
CSG -dpa



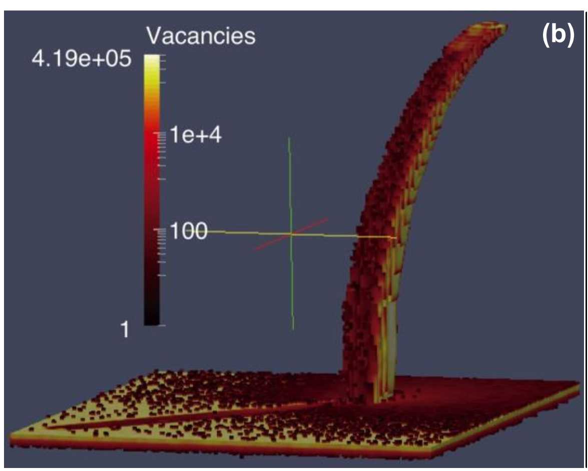
CSG – He/DPA



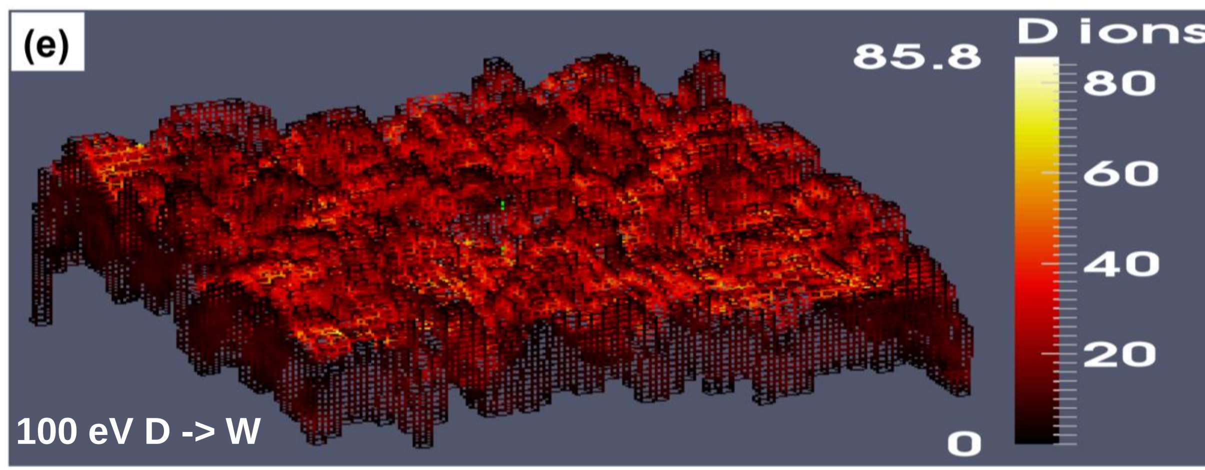
CSG - dpa



FETM - dpa



FETM - V



Roughness - FETM - H/Sputtering

创新III. 更优的计算效率和可移植性：快速数据库索引技术

- **基于快速数据库索引技术实现抽样加速：**利用位运算建立整型索引与32位单精度浮点值的唯一对应

Integer

exponent bits
+
a few mantissa bits (4)

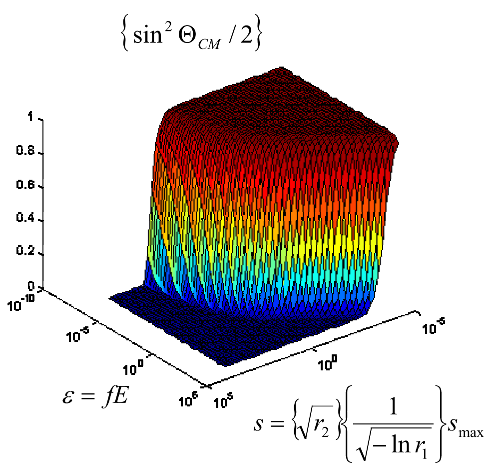
Bit operation

O(1)

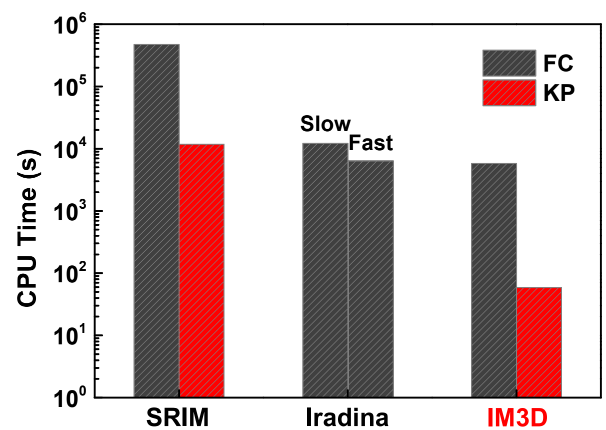
Float

0 10010110 01111000110000100000000

sign **exponent base 2** **mantissa**



Schiettekatte, *NIMPRB* 266 (2008) 1880.
Yuan et al., *NIMPRB* 83 (1993) 413.



单机单核加速 2-3 个量级
单机多线程 40% 加速效率

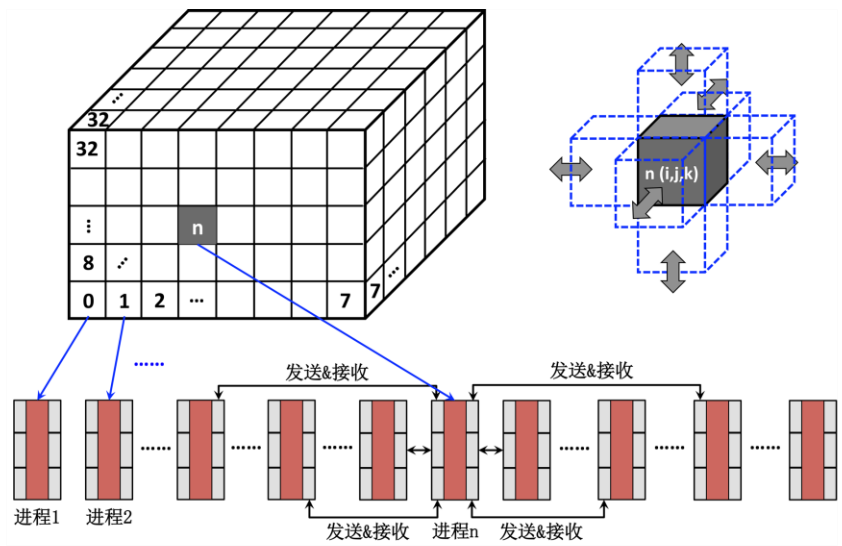
创新III. 更优的计算效率和可移植性：CPU/DCU并行化

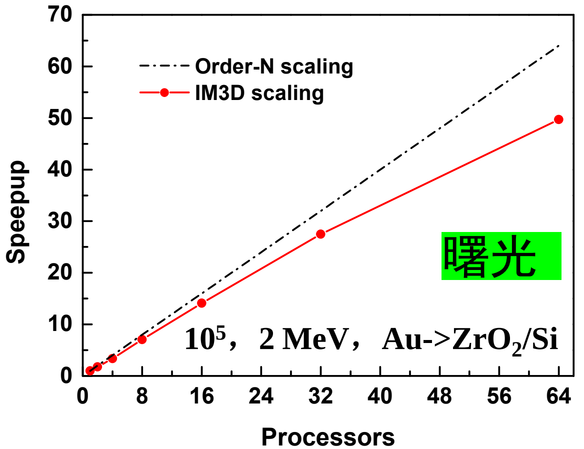
<u>并行算法架构</u>

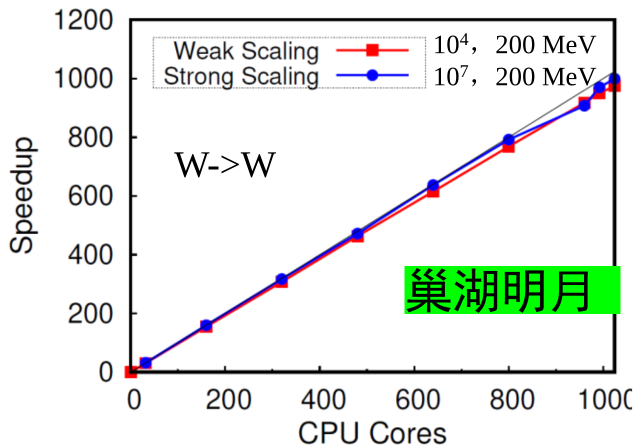
基于独立粒子数分解的主从模式

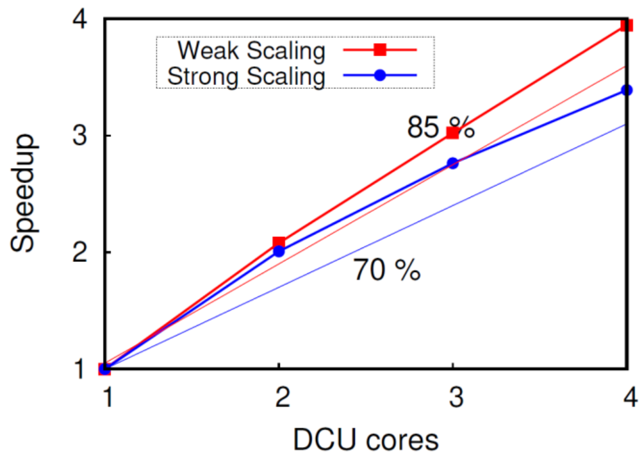
+

基于空间区域分解的对等模式







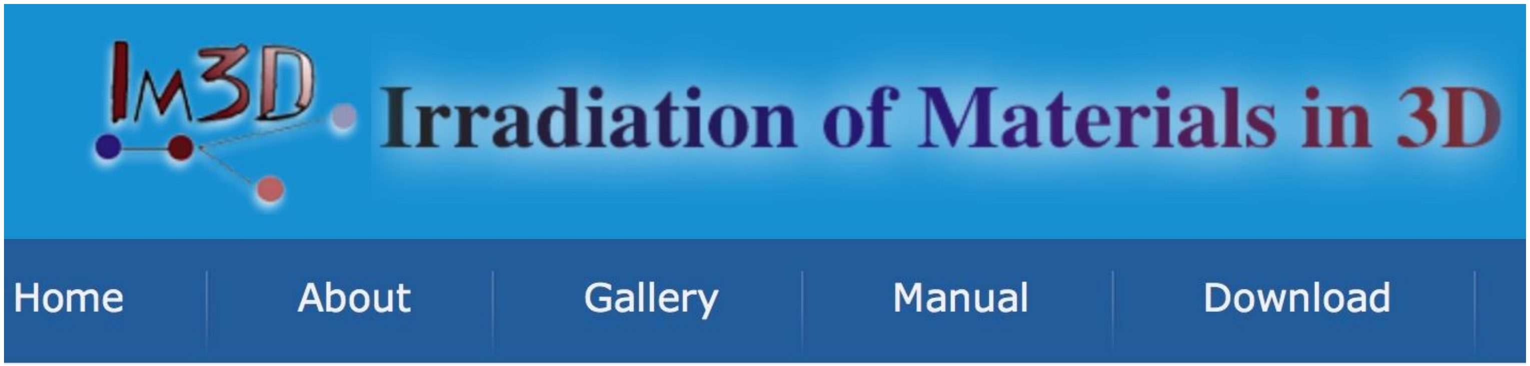


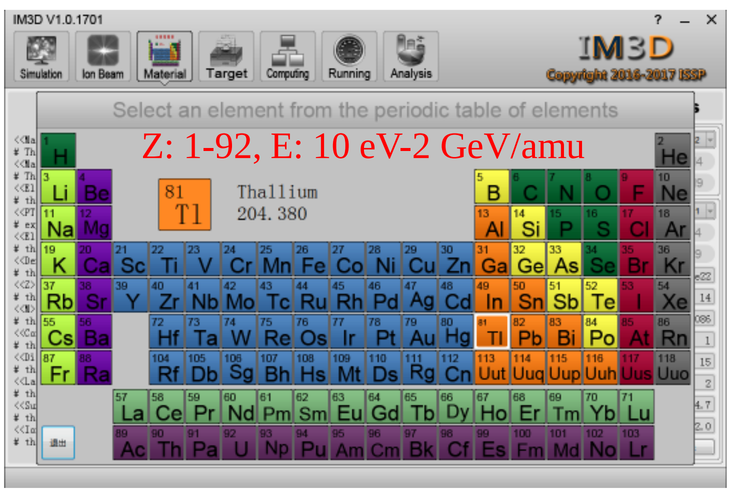
CPU近线性加速比达95%

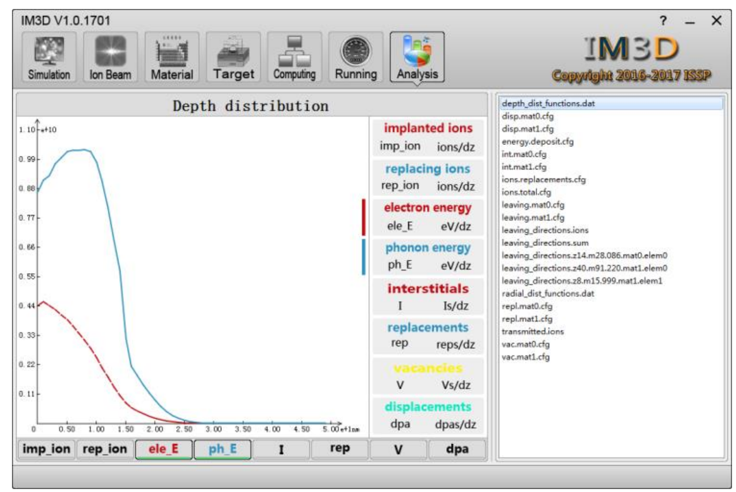
DCU强/弱扩展性达80%以上

创新IV. 更好的易用性：IM3D开源网站 & 图形化用户界面

IM3D_Website（开源）　　http://theory.issp.ac.cn/IM3D, ISSP



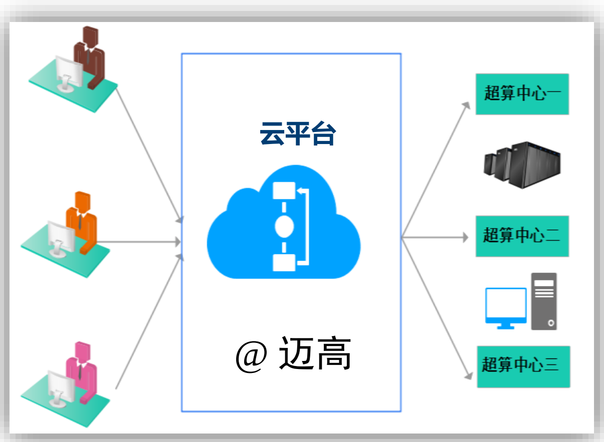




IM3D_GUI

创新IV. 更好的易用性：IM3D_SaaS云平台（浏览器—服务器架构）

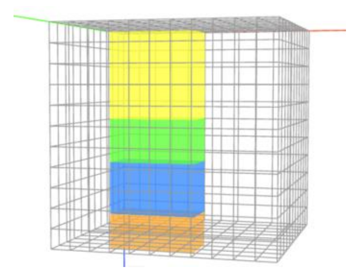
不需安装，只需三步，完成图形化、高通量、全自动的辐射损伤模拟



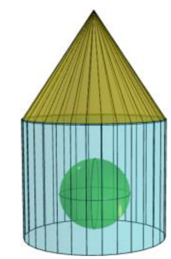
第 1 步 三维可视化设计结构

- 导入多个不同类型结构
- 支持高通量的结构成分设计

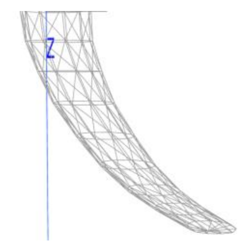
多类型结构模型



块体/多层膜



CSG

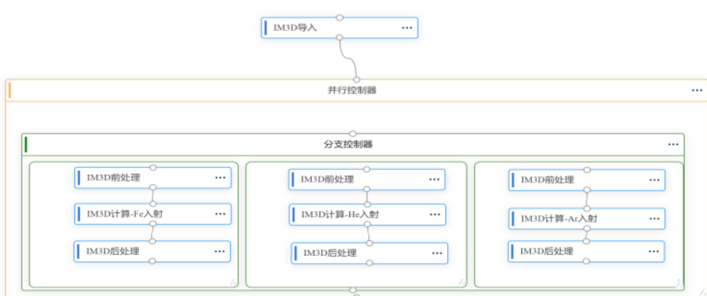


FETM

第 2 步 搭建辐照模拟工作流

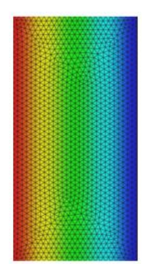
- 拖拽组件+并行控制器+分支控制实现高通量+全自动计算

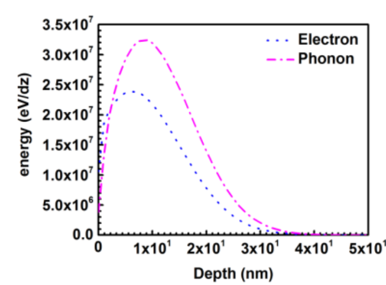
多结构
多任务
自动化



第 3 步 提交计算、结果报告

- 自动化后处理，智能汇总报表
- 模拟结果自动入库





总结及展望

IM3D: 材料离子/中子初级辐照损伤的三维蒙特卡洛开源软件（2009 -）

模型创新：

- MC+EKMC耦合物理模型
- CSG/FETM三维结构算法
- 快速数据库索引技术 + CPU/GPU并行

Y.G. Li et al., *Sci. Rep.* **5**, 18130 (2015); *Nucl. Fusion* **57**, 016038 (2017); *Nanoscale* **10**, 1598 (2018); *NIMB* 455 (2019) 118; *npj Comput. Mater.* 6 (2020) 189; *Rad. Phys. Chem.* 204 (2023) 110681.

软件优势：

✓ 缺陷级联—退火完整过程的同步模拟

✓ 任意复杂材料中初级缺陷空间/尺寸分布的快速计算

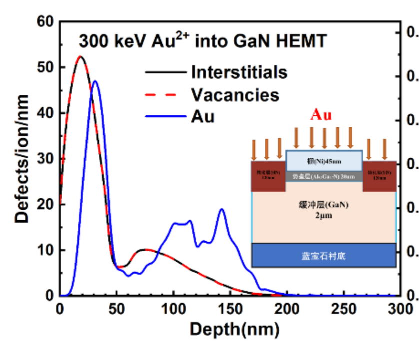
✓ 精度与经典MC和MD一致，效率>10^4加速，且不受原子间作用势的限制

应用领域：

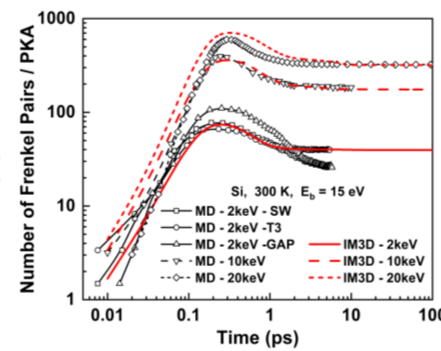
核能材料辐照损伤、宇航器件辐射失效、离子注入、半导体掺杂、表面改性、聚焦离子束溅射、微纳加工、辐射防护和重离子医疗等

140 家研究机构下载使用，1 ISO国际标准

离子注入



中子辐照



致 谢

- 美国麻省理工学院（MIT）

  Ju Li, Yang Yang, Michal P. Short

- 中国科学技术大学（USTC）

  丁泽军、李会民、毛世峰、王昊彦

- 日本国立材料科学研究所（NIMS）

  Da Bo, Xun Liu

资助项目：

国家自然科学基金（1235277, 11975018, 11775254, 11605231, 11534012, 11475215）

国家重点研发项目（2018YFE0308100）、中国科学院青促会（Y202087, 2016386）

安徽省杰出青年基金（2308085J04）、核科学挑战计划（TZ2018004）

基础加强计划重点项目（2017-JCJQ-ZD-030）、光和基金（ghfund202202012711 ）

谢谢大家！

敬请关注！

李永钢，ygli@theory.issp.ac.cn
http://theory.issp.ac.cn/IM3D