COMPUTATIONAL MECHANICS 2005
21st conference with international participation
Hrad Nečtiny
November 7 - 9, 2005

SIMULACE ŠÍŘENÍ NAPĚŤOVÝCH VLN METODAMI MOLEKULÁRNÍ DYNAMIKY

Vladimír PELIKÁN [1], **Petr HORA** [2], **Anna MACHOVÁ** [3]

Abstract: *WAVE PROPAGATION SIMULATIONS BY MOLECULAR DYNAMICS METHODS. We present large-scale molecular dynamic simulations of wave propagation in α-iron based on an N-body potential model which gives a good description of anisotropic elasticity. We show that the basic behavior of the simulations is in agreement with the predictions of continuum models.*

Keywords: *molecular dynamics, wave propagation, elastic wave, bcc iron*

1. ÚVOD

Neustálý technologický rozvoj s sebou přináší tak výrazné zvýšení výpočetních kapacit, že dnes je již možno reálně přistupovat i k řešení úloh, které by byly ještě před několika lety téměř nemyslitelné. Jednou z takovýchto úloh je i simulace šíření napěťových vln v diskrétních modelech molekulární dynamiky. Úlohy tohoto typu mají fyzikální smysl pouze tehdy, nejsou-li znehodnocovány odrazy napěťových vln od volných povrchů zkoumaného vzorku. Vlastní modely musí proto být značně rozsáhlé a simulace na takovýchto modelech jsou potom realizovatelné pouze za masivního nasazení paralelních programovacích technik.

Náš příspěvek navazuje na práce Pelikán et al. (2003) a (2004) a zabývá se rozsáhlými 3D simulacemi šíření elastických vln v α-železe, založenými na metodách molekulární dynamiky (MD). Vyšetřovali jsme chování napěťových vln jak při povrchovém, tak i při vnitřním buzení. Při našich simulacích byl použit vícečásticový potenciál pro α-železo, jak uvádějí Ackland et al. (1997) a Finnis-Sinclair (1984).

2. TYPY MD-SIMULACÍ

Veškeré naše MD-simulace byly provedeny na dvou typech vzorků (viz obr.1):

a) krychle o hraně 400 atomů (tj. celkem 127521199 atomů),

b) nekonečná deska o tloušťce 200 atomů ve směru *Y*. Ve zbývajících dvou směrech bylo „nekonečnosti“ dosaženo replikací čtvercového vzorku o hraně 600 atomů (tj. celkem 143640000 atomů).

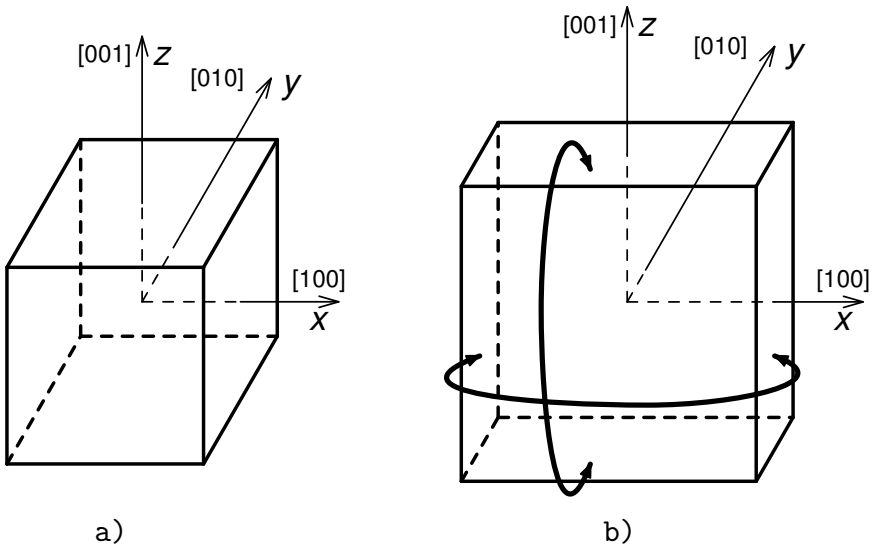
V obou případech se jednalo o zcela homogenní, ideálně povrchově zrelaxovaný *bcc* krystal α-železa s mřížkovou konstantou $a_0 = 2,8665$ Å o teplotě 0 K.

Na těchto vzorcích byly postupně provedeny čtyři zcela odlišné testy, každý o čtyřech modifikacích. Velikost simulačního kroku byla ve všech případech 10^{-14} s a testy probíhaly vždy od kroku 0 do kroku 1000 u vzorku a) a od kroku 0 do kroku 600 u vzorku b).

[1]Mgr. Vladimír Pelikán, CDM ÚT AV ČR, Veleslavínova 11, 301 14 Plzeň, tel.: +420 377236415, e-mail: pelikan@cdm.it.cas.cz

[2]Ing. Petr Hora, CSc., CDM ÚT AV ČR, Veleslavínova 11, 301 14 Plzeň, tel.: +420 377236415, e-mail: hora@cdm.it.cas.cz

[3]Ing. Anna Machová, CSc., ÚT AV ČR, Dolejškova 5, 182 00 Praha 8, tel.: +420 266053023, e-mail: machova@it.cas.cz



Obr. 1. Geometrie použitých vzorků

V každém simulačním kroku byla monitorována jednak celková energetická bilance (kinetická energie, potenciální energie a práce vnějších sil) a dále celkový počet interakcí jednotlivých atomů, který v průběhu všech testů nabýval vždy konstantních hodnot (889775586 v prvém případě a 1003320000 v případě druhém). Ve všech pokusech se tedy jednalo výhradně o *elastické deformace*.

Druhy testů:

1. celoplošné buzení ve směru osy Y na vnějších stěnách, kolmých na osu Y,
2. lokální buzení ve směru osy Y uprostřed vnějších stěn, kolmých na osu Y,
3. celoplošné buzení ve směru osy Y v centrální rovině, kolmé na osu Y,
4. všesměrové lokální buzení osmi centrálních atomů vzorku.

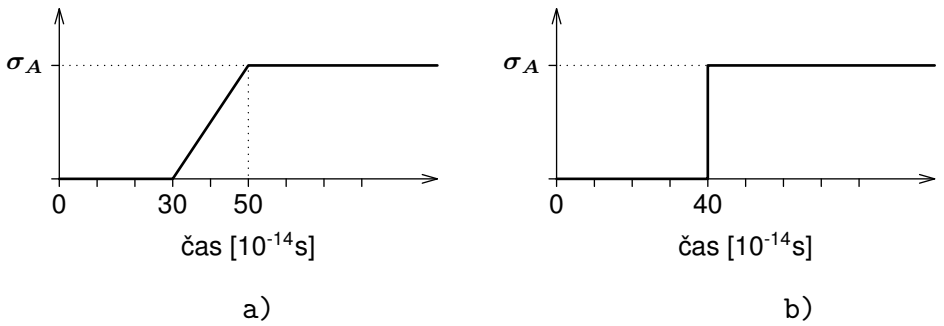
V každém testu byly uvažovány dva časové průběhy buzení:

- rychlý, viz obr.2a),
- rázový, viz obr.2b),

a dále pak dva typy orientace buzení:

- tah (exploze),
- tlak (imploze).

U všech testů bylo použito stejného budícího napětí $\sigma_A = 1,35$ GPa.



Obr. 2. Časové průběhy buzení

3. VÝSLEDKY A DISKUZE

Jelikož *bcc* krystal železa má kubickou anizotropii, prvním testem správného chování simulace bylo stanovení rychlostí napěťových vln. Potřebné konstanty pro výpočet těchto rychlostí jsou uvedeny v tabulce 1, převzato z Machová a Ackland (1998).

c_{11} [GPa]	c_{12} [GPa]	c_{44} [GPa]	ρ [kg m^{-3}]
243.3	145.0	116.0	7900

Tab. 1. Elastické konstanty a hustota železa při teplotě 0 K

Pro napěťové vlny kubického krystalu platí, viz Hearmon, R.F.S. (1965):

Šíření ve směru $\langle 100 \rangle$:

$$\rho c_L^2 = c_{11}, \quad \rho c_T^2 = \rho c_t^2 = c_{44}.$$

Šíření podél stěnové úhlopříčky $\langle 110 \rangle$:

$$\rho c_L^2 = \frac{1}{2}(c_{11} + c_{12}) + c_{44}, \quad \rho c_T^2 = \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12}), \quad \rho c_t^2 = c_{44}.$$

Šíření podél tělesové úhlopříčky $\langle 111 \rangle$:

$$\rho c_L^2 = \frac{1}{3}(c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44}), \quad \rho c_T^2 = \rho c_t^2 = \frac{1}{3}(c_{11} - c_{12} + c_{44}).$$

Odtud po dosazení dostaneme:

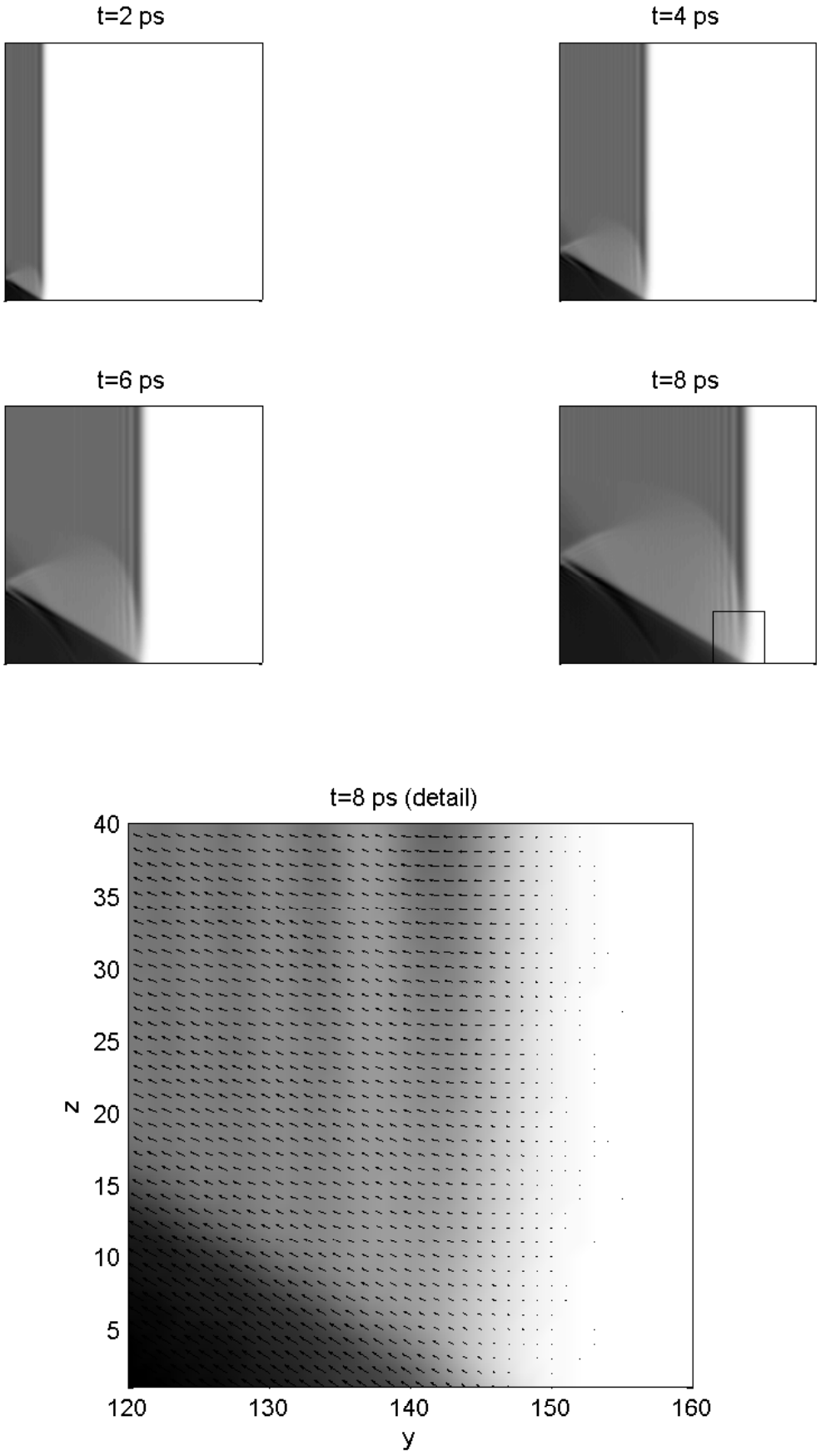
Rychlost	$\langle 100 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 111 \rangle$
c_L	5550	6266	6487
c_T	3832	2494	3007
c_t	3832	3832	3007

Tab. 2. Rychlosti šíření napěťových vln v m s^{-1} ve význačných směrech

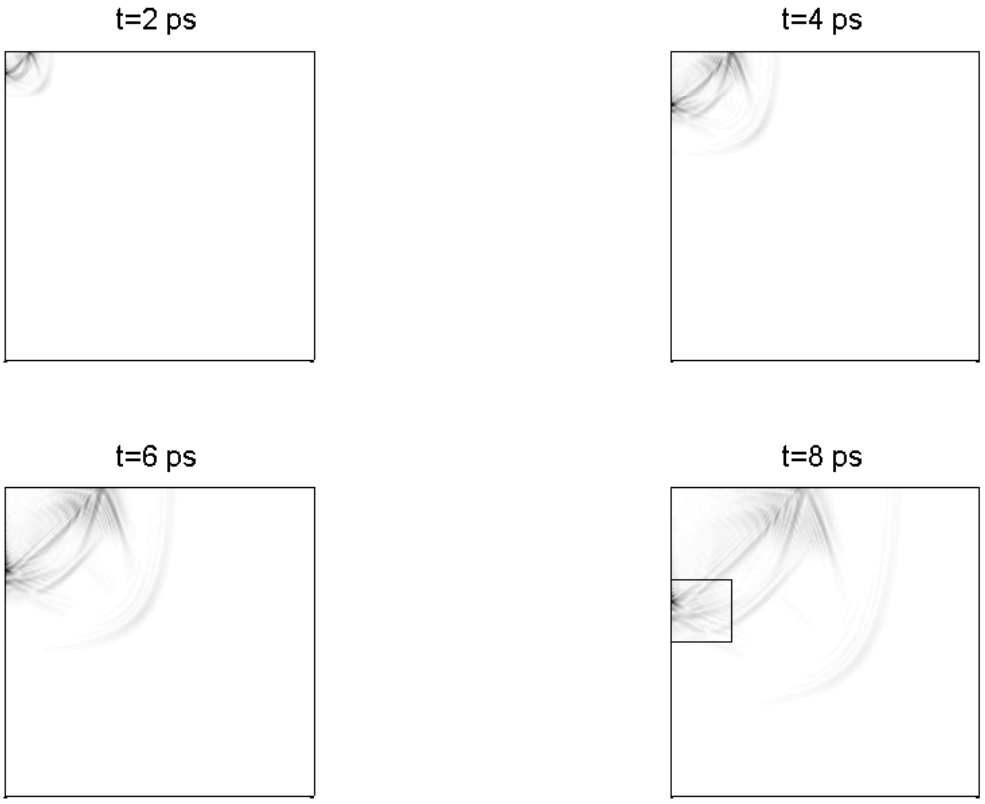
Tyto vypočtené rychlosti byly během našich simulačních výpočtů zcela uspokojivě ověřeny.

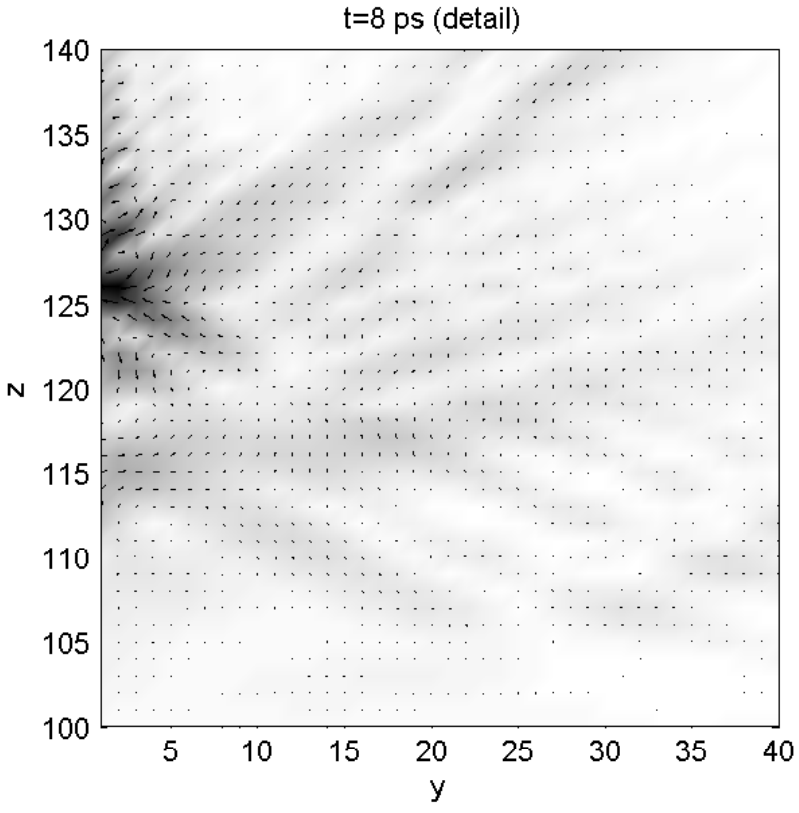
Pro ilustraci dosažených výsledků je na následujících obrázcích znázorněno rozložení absolutní velikosti rychlosti (jinak též kinetické energie) pro některé vybrané druhy testů v časech: 2, 4, 6 a 8 ps od počátku simulace (tj. v simulačních krocích 200, 400, 600 a 800). Na všech obrázcích je vždy zachycen levý dolní kvadrant centrální vrstvy atomů krychlového vzorku 1a) podél hlavního směru šíření napěťové vlny. V obrázcích pro t=8 ps je vždy zakreslen výřez, jehož detail je pak společně s polarizací vln zobrazen v dolní části příslušné stránky. Údaje uvedené podél os těchto detailů udávají pro snazší orientaci pořadí atomární vrstvy krystalu a odpovídající kartézské souřadnice z nich lze získat vynásobením mřížkovou konstantou ($a_0 = 2,8665$ Å). Časový průběh buzení použitý ve zde zmíněných testech odpovídal průběhu uvedeném na obr.2a) a ve všech případech se jednalo o buzení tahem.

Na obrázku 3 a 5 je možné sledovat hlavní čelo postupující podélné vlny, od dolní stěny se vytvářející čelo příčné vlny a čelo vlny kónické. Na obrázku 4 je v detailu možno sledovat patrně vznik povrchové (Rayleighovy) vlny. Poznamenejme ještě, že testy zachycené na obrázcích 4 a 6 probíhaly dle očekávání na obou typech vzorů zcela shodně.

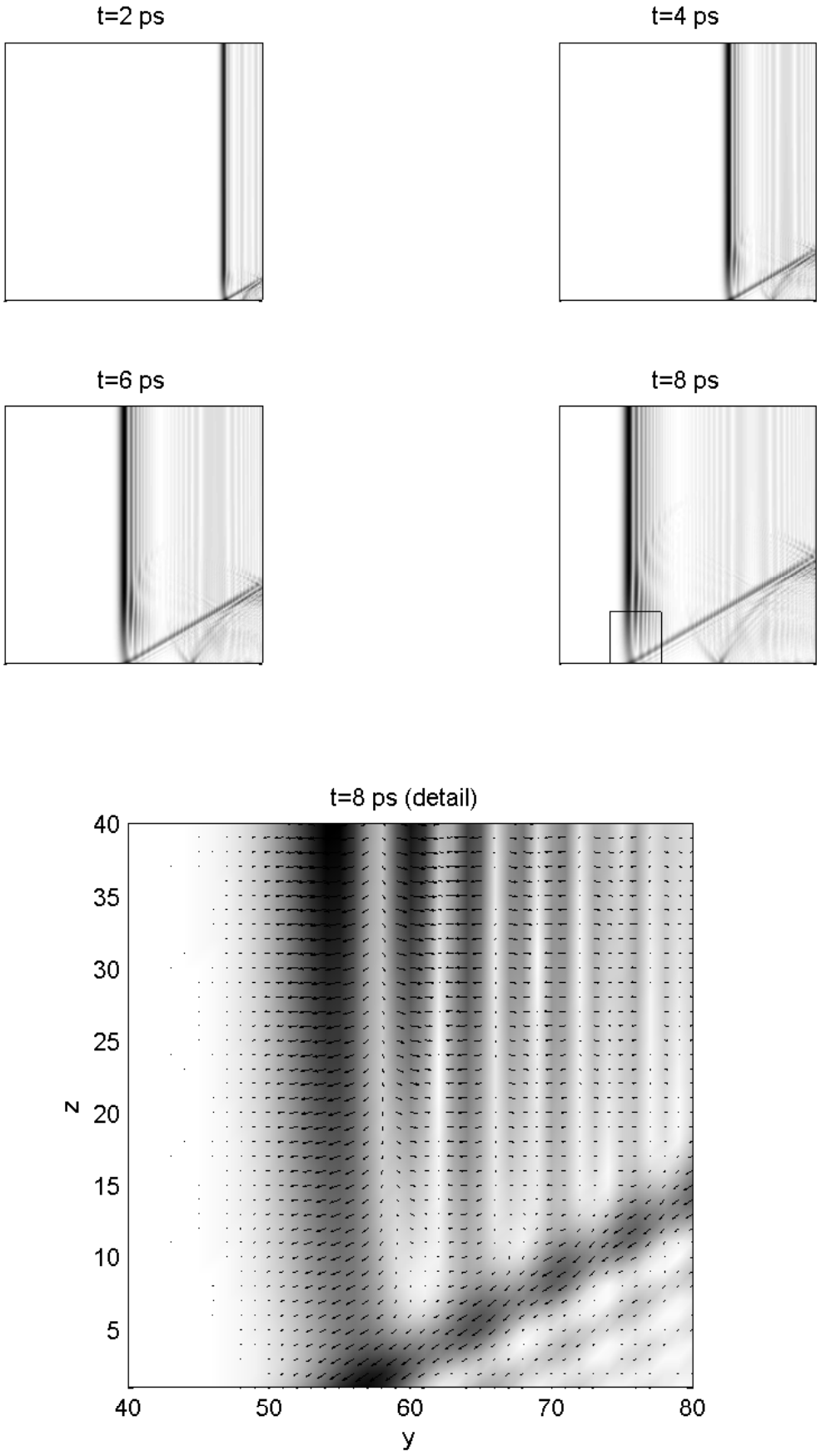


Obr. 3. Rychlý, celoplošný tah na vnější stěně krychlového vzorku

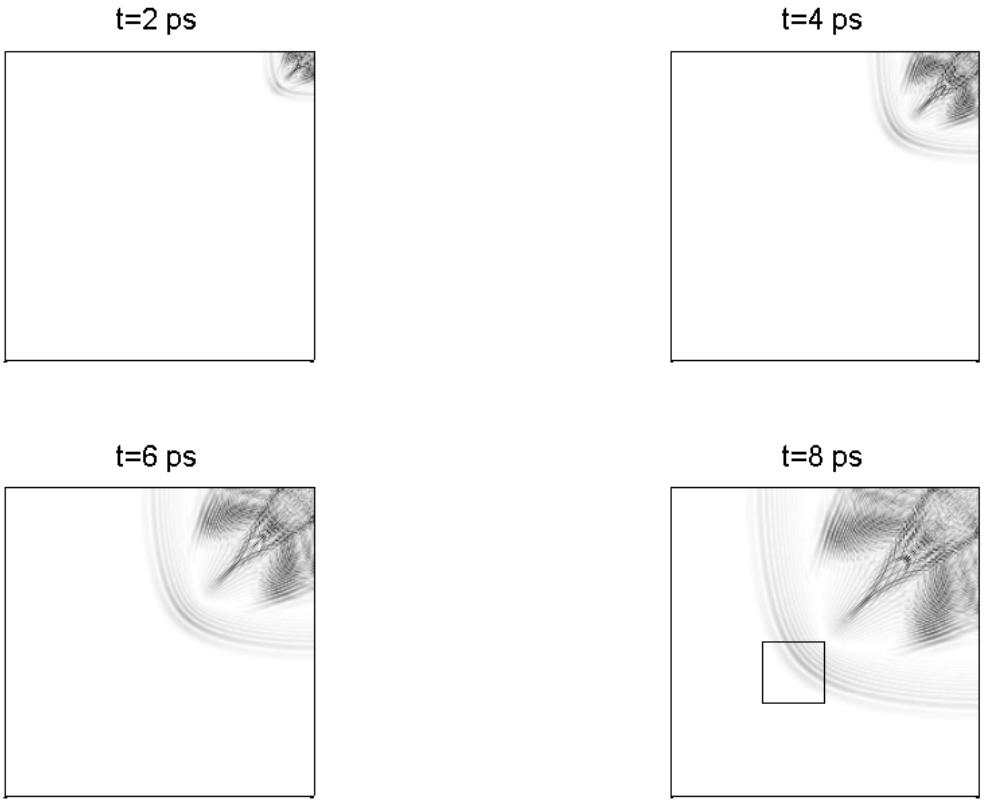


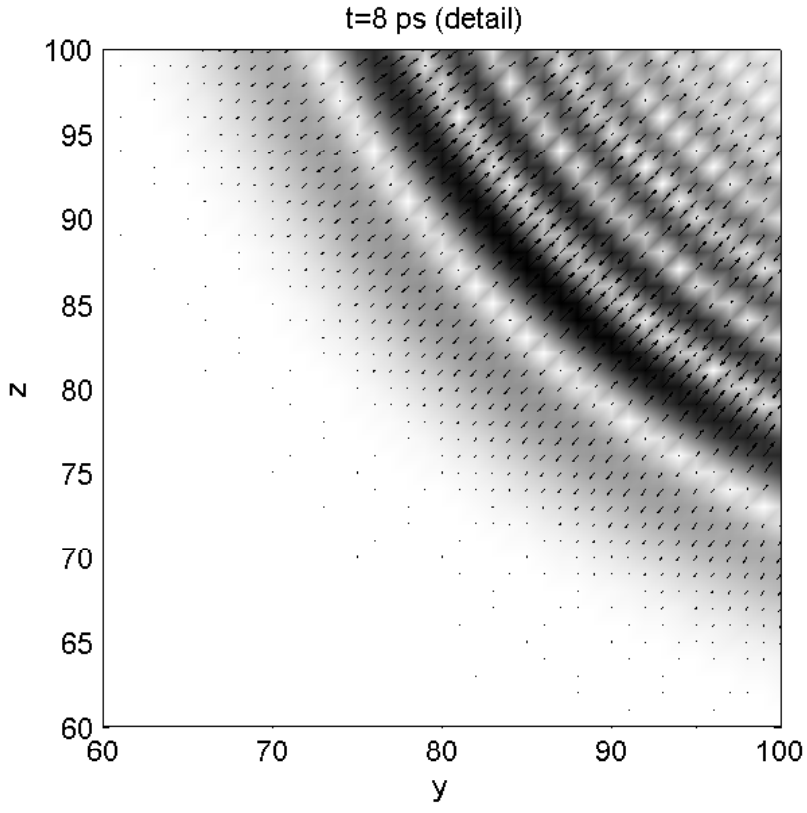


Obr. 4. Rychlý, lokální tah uprostřed vnější stěny vzorku



Obr. 5. Rychlá, celoplošná exploze v centrální rovině krychlového vzorku





Obr. 6. Rychlá exploze ve středu vzorku

4. ZÁVĚR

Veškeré simulační výpočty byly provedeny původními MPI-paralelními aplikacemi vytvořenými v jazyce *Fortran 90* pod systémem Debian GNU/Linux na *výpočetním clusteru MINOS* Západočeské univerzity v Plzni (16 uzlů, každý o dvou procesorech AMD Athlon MP, 1600 MHz, 1 Gbyte operační paměti), přičemž výpočet jednoho simulačního kroku trval v průměru 54 sekund v prvém případě a 78 sekund v případě druhém.

Z dosažených výsledků je patrné, že námi použitý vícečásticový potenciál pro α-železo je pro simulaci šíření napěťových vln vhodný a zaručuje dobrou shodu s teorií kontinua.

Cílem budoucího výzkumu bude vyšetřování chování napěťových vln při postupu přes materiálovou trhlinu a studium vlivu velikosti buzení na nelineární chování modelu.

Poděkování: Příspěvek vznikl na základě podpory grantu GA AV ČR A2076201 a dále AV0Z20760514.

LITERATURA

Ackland, G. J., Bacon, D. J., Calder, A. F., Harry, T., 1997. Computer simulations of point defect propetries in dilute Fe-Cu alloy using a many-body inetratomic potential. *Phil. Mag. A*, Vol. 75. pp 713-732.

Finnis, M. W., Sinclair, J. E., 1984. A simple empirical N-body potential for transiton metals. *Phil. Mag. A*, Vol. 50. pp. 45-55.

Hearmon, R.F.S., 1965. *Úvod do teorie pružnosti anizotropních látek*. SNTL, Praha.

Machová, A., and Ackland, G. J., 1998. Dynamic overshoot in α-iron by atomistic simulations. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, Vol. 6. pp. 521-542.

Pelikán, V., Hora, P., Machová, A., 2003. Paralelní programování v úlohách molekulární dynamiky. *Proceedings, 19th Conference Computational mechanics 2003*.

Pelikán, V., Hora, P., Machová, A., 2004. Simulace na rozsáhlých modelech v úlohách molekulární dynamiky. *Proceedings, 20th Conference Computational mechanics 2004*.