SIMULACE ŠÍŘENÍ NAPĚŤOVÝCH VLN METODAMI MOLEKULÁRNÍ DYNAMIKY

V. Pelikán, P. Hora, A. Machová
Ústav termomechaniky AV ČR

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

VÝPOČTOVÁ MECHANIKA 2005 / 7. - 9. listopadu 2005

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.

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 naše práce z předchozích let a tentokrát se zabývá 3D simulacemi šíření elastických vln v α-železe, založenými na metodách molekulární dynamiky.

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 naše práce z předchozích let a tentokrát se zabývá 3D simulacemi šíření elastických vln v α-železe, založenými na metodách molekulární dynamiky.

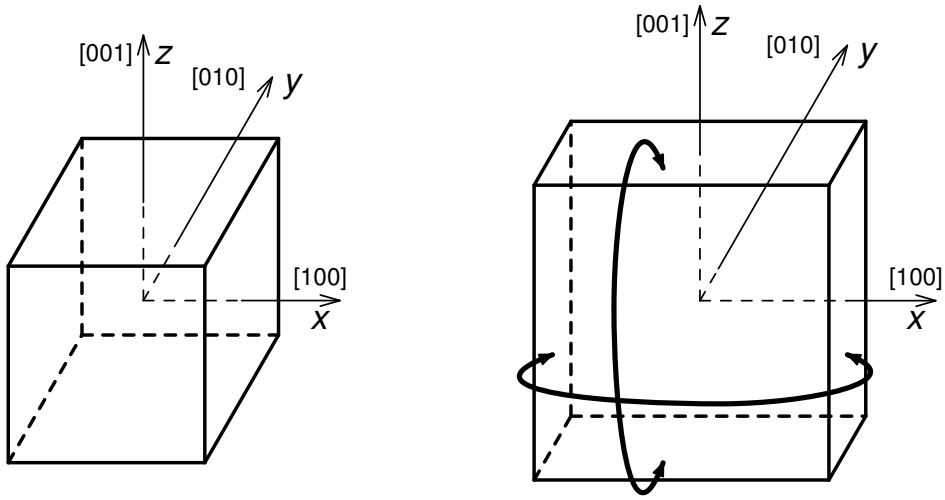
Vyšetřovali jsme chování napěťových vln jak při povrchovém, tak i při vnitřním buzení a při našich simulacích jsme použili vícečásticový potenciál pro α-železo.

Typy MD-simulací

Veškeré naše MD-simulace byly provedeny na dvou typech vzorků:

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).



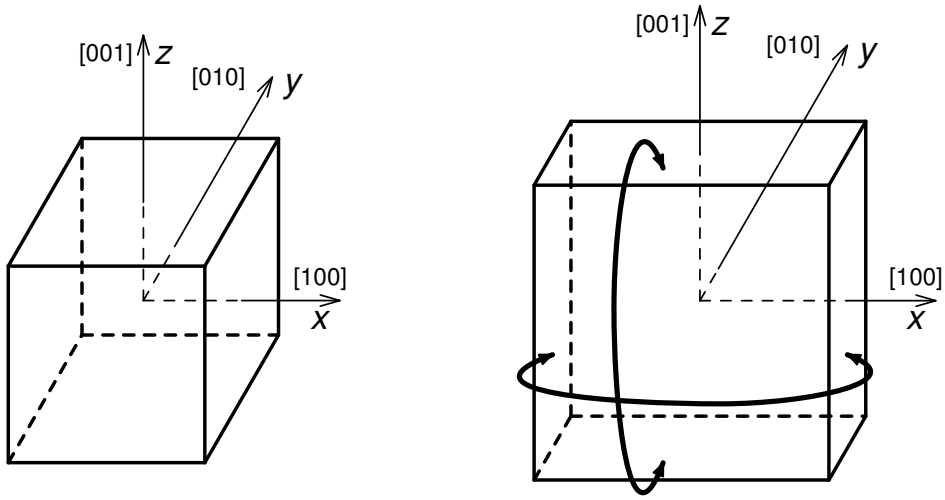
Geometrie použitých vzorků

Typy MD-simulací

Veškeré naše MD-simulace byly provedeny na dvou typech vzorků:

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).



Geometrie použitých vzorků

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.

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

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

Velikost simulačního kroku byla ve všech případech 10^{-14} s a testy probíhaly vždy od kroku 0 do kroku 1000 u vzorku a) a do kroku 600 u vzorku b).

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

Velikost simulačního kroku byla ve všech případech 10^{-14} s a testy probíhaly vždy od kroku 0 do kroku 1000 u vzorku a) a do kroku 600 u vzorku b).

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).

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

Velikost simulačního kroku byla ve všech případech 10^{-14} s a testy probíhaly vždy od kroku 0 do kroku 1000 u vzorku a) a do kroku 600 u vzorku b).

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).

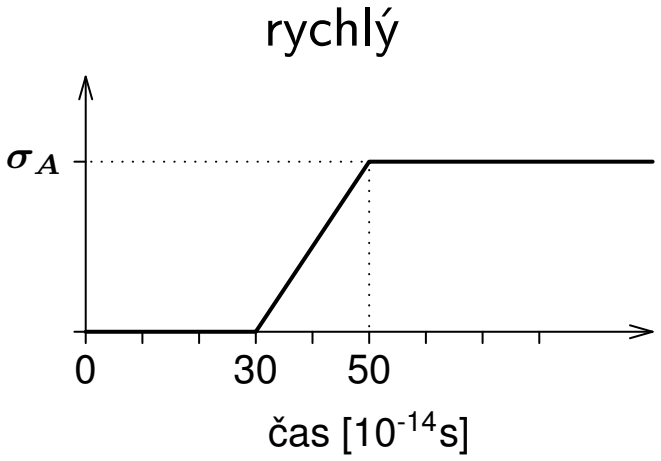
Ve všech pokusech se tudíž jednalo výhradně o *elastické deformace*.

Typy buzení

V každém testu byly uvažovány dva časové průběhy buzení:

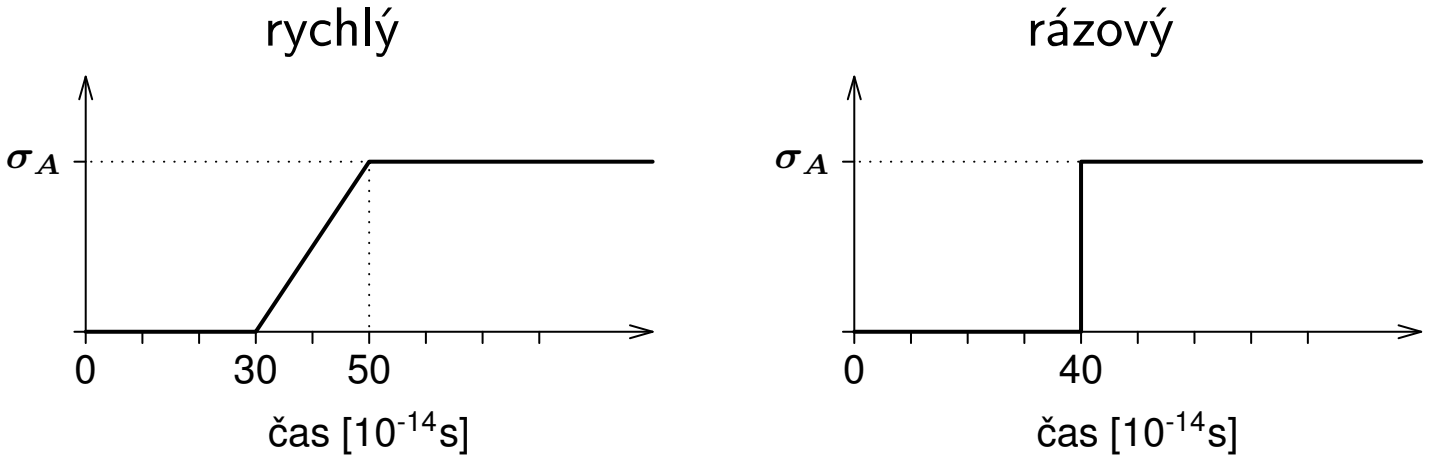
Typy buzení

V každém testu byly uvažovány dva časové průběhy buzení:



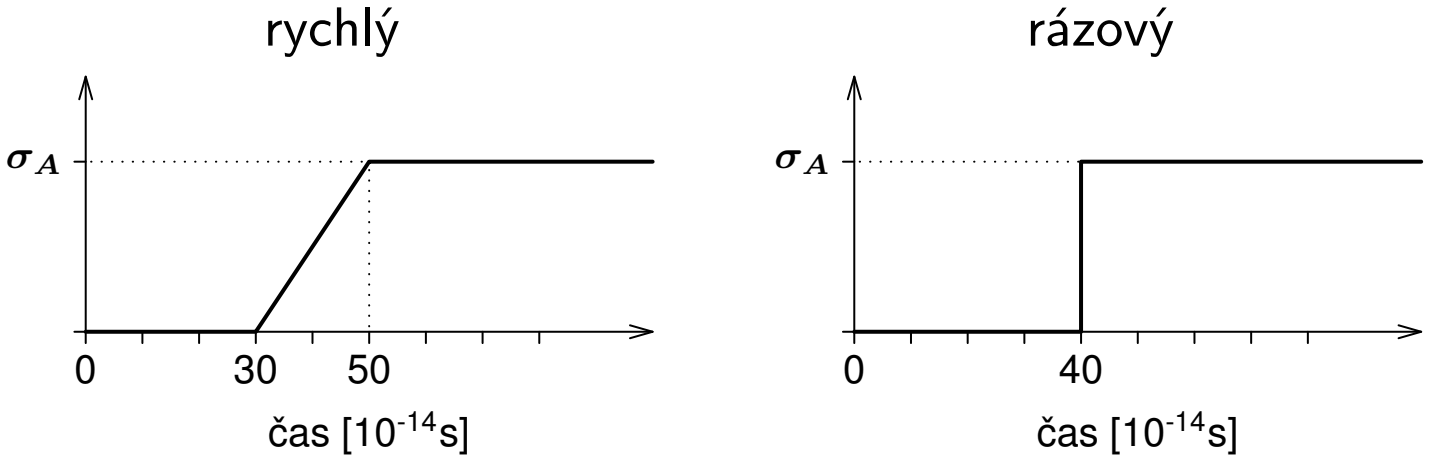
Typy buzení

V každém testu byly uvažovány dva časové průběhy buzení:



Typy buzení

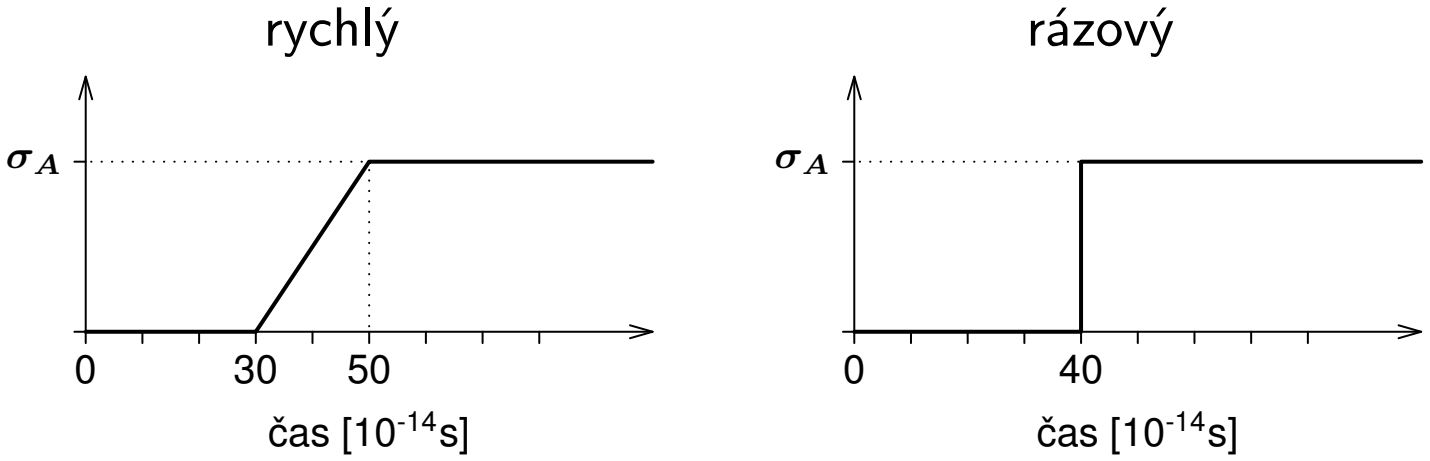
V každém testu byly uvažovány dva časové průběhy buzení:



a dále pak dva typy orientace buzení:

Typy buzení

V každém testu byly uvažovány dva časové průběhy buzení:

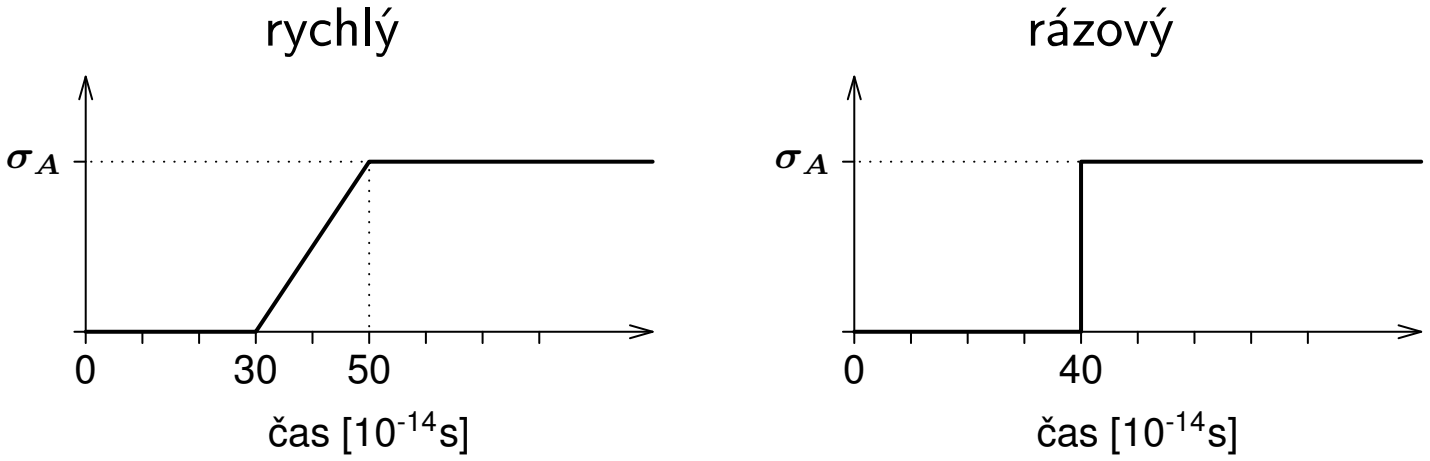


a dále pak dva typy orientace buzení:

- tah (exploze)

Typy buzení

V každém testu byly uvažovány dva časové průběhy buzení:

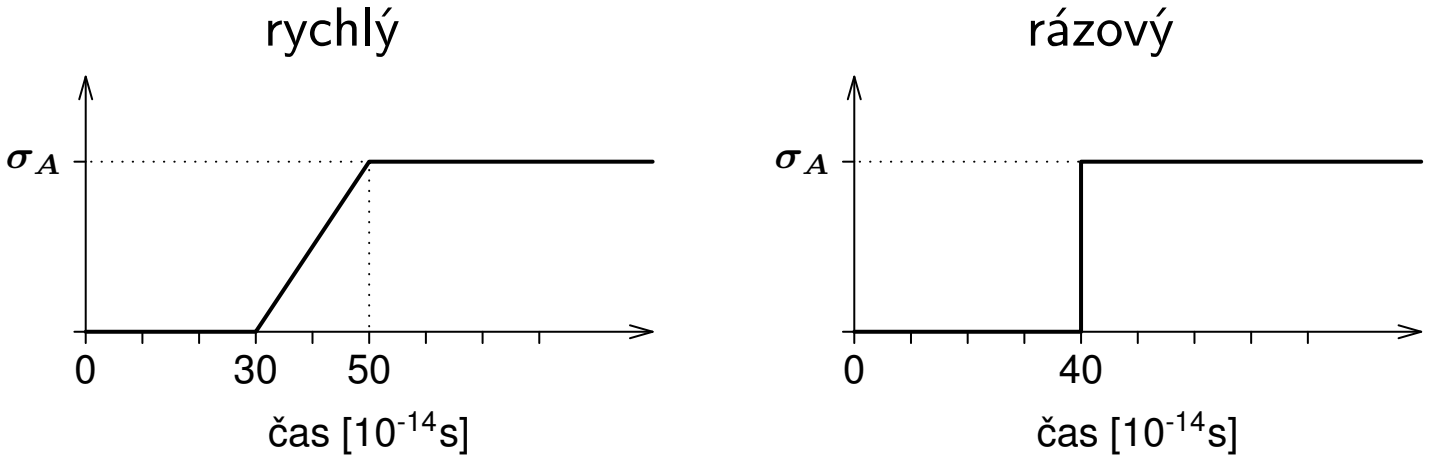


a dále pak dva typy orientace buzení:

- tah (exploze)
- tlak (imploze)

Typy buzení

V každém testu byly uvažovány dva časové průběhy buzení:



a dále pak dva typy orientace buzení:

- tah (exploze)
- tlak (imploze)

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

Šíření napěťových vln v kubickém anizotropním prostředí

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 $\langle 110 \rangle$:

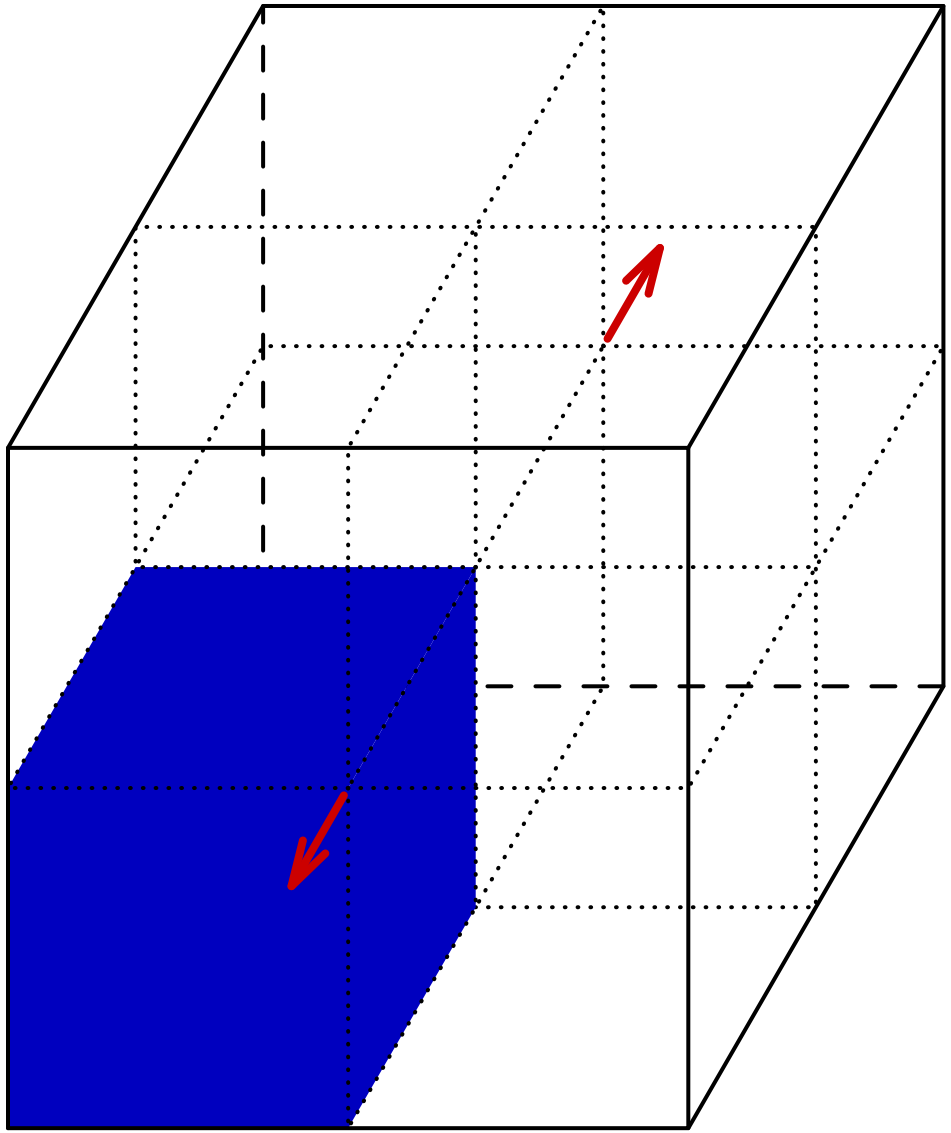
$$\rho c_L^2 = \frac{1}{2}(c_{11} + c_{12}) + c_{44}, \quad \rho c_T^2 = \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12}), \quad \rho c_t^2 = c_{44}.$$

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

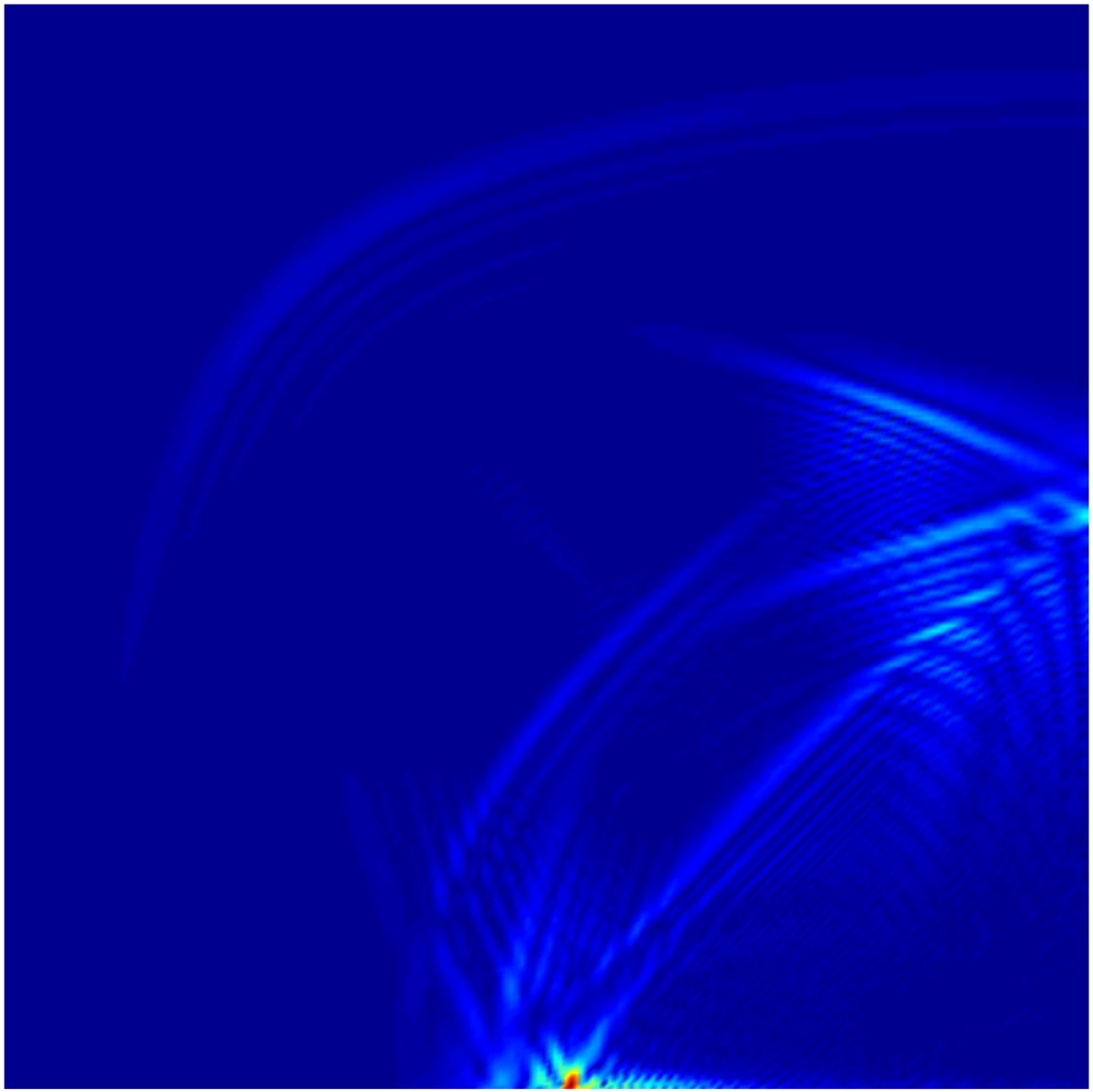
$$\rho c_L^2 = \frac{1}{3}(c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44}), \quad \rho c_T^2 = \rho c_t^2 = \frac{1}{3}(c_{11} - c_{12} + c_{44}).$$

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

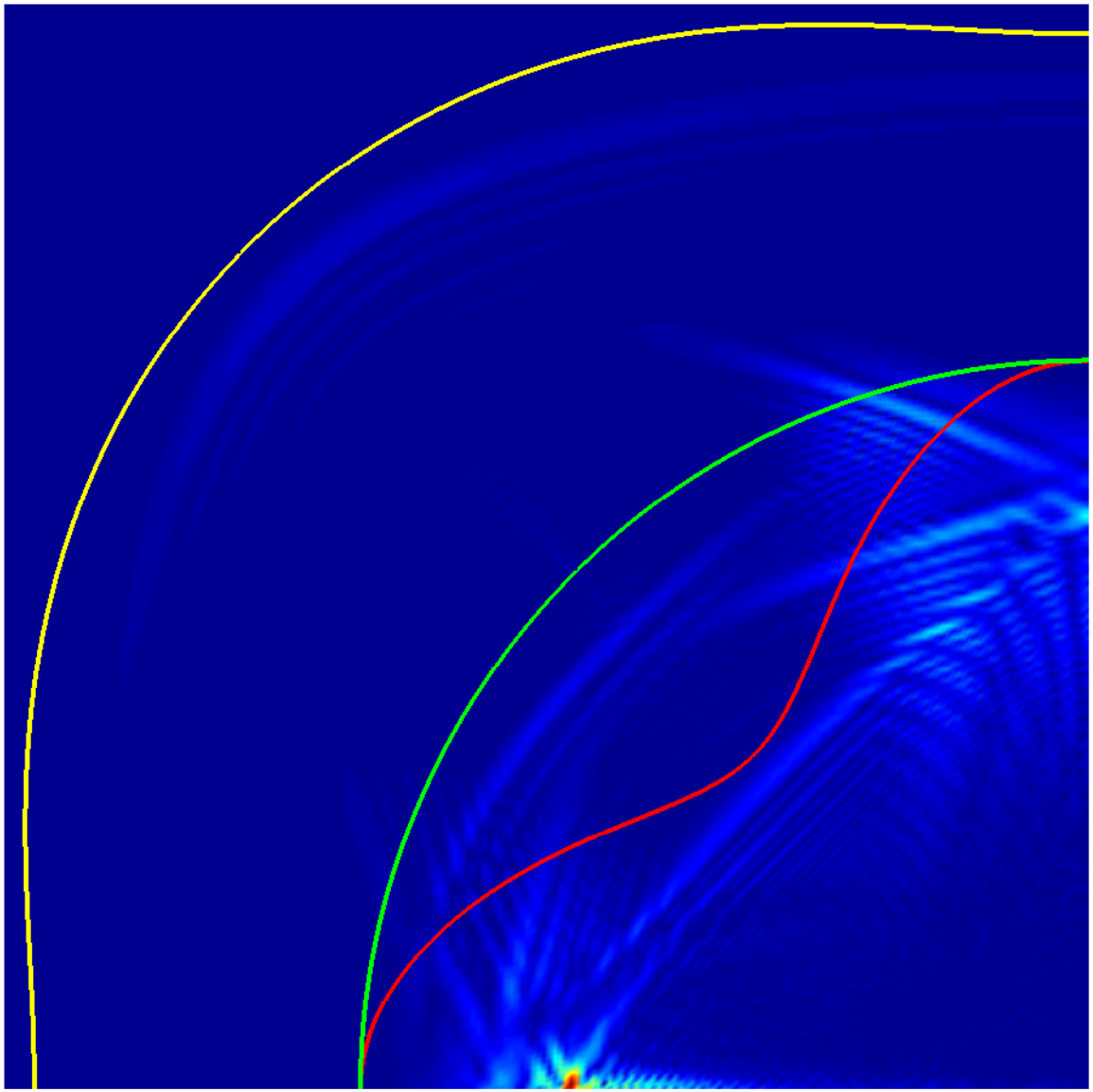
Rychlosti šíření napěťových vln v m s^{-1} ve význačných směrech



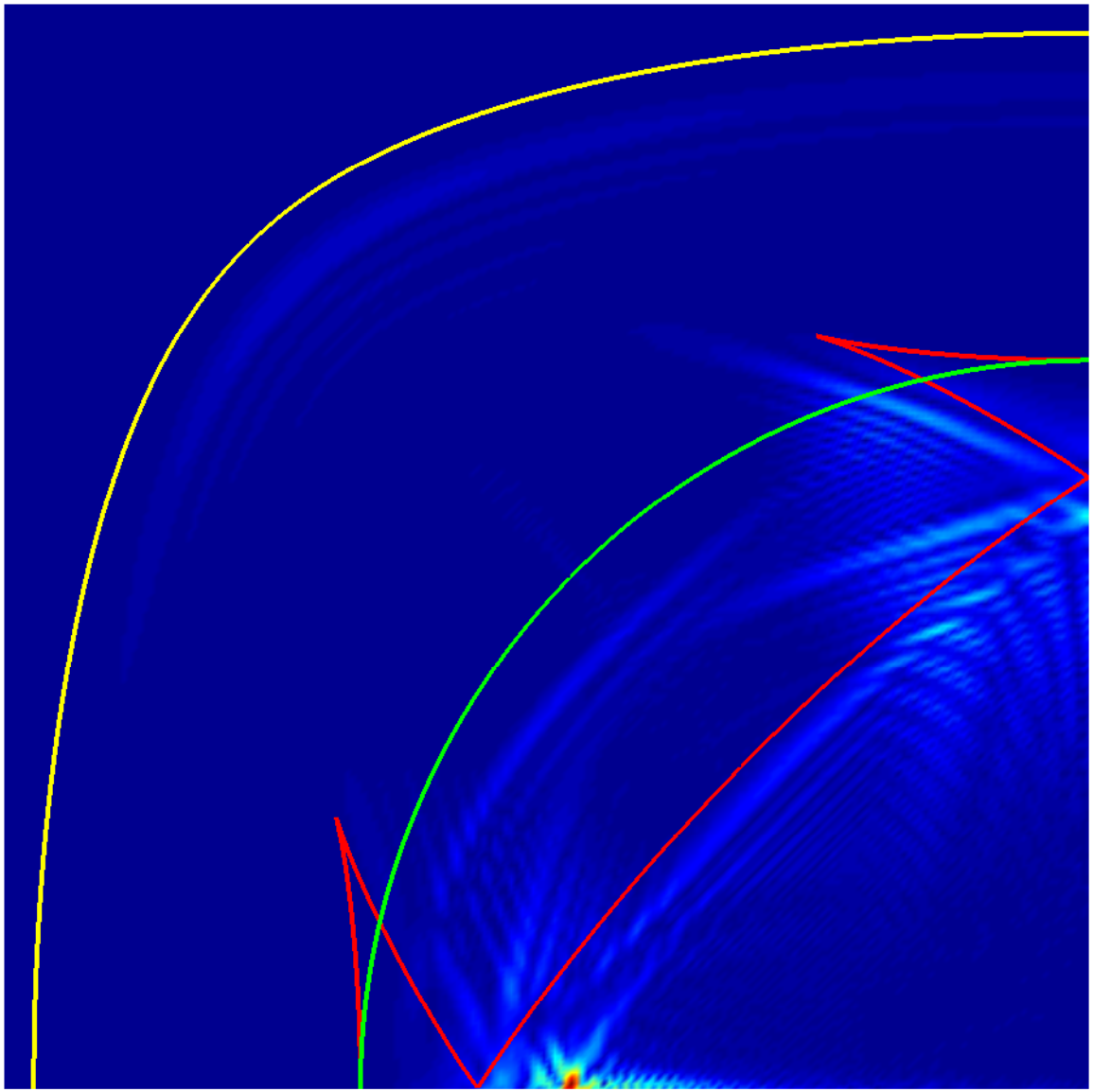
Lokální tah uprostřed vnější stěny - „střecha“



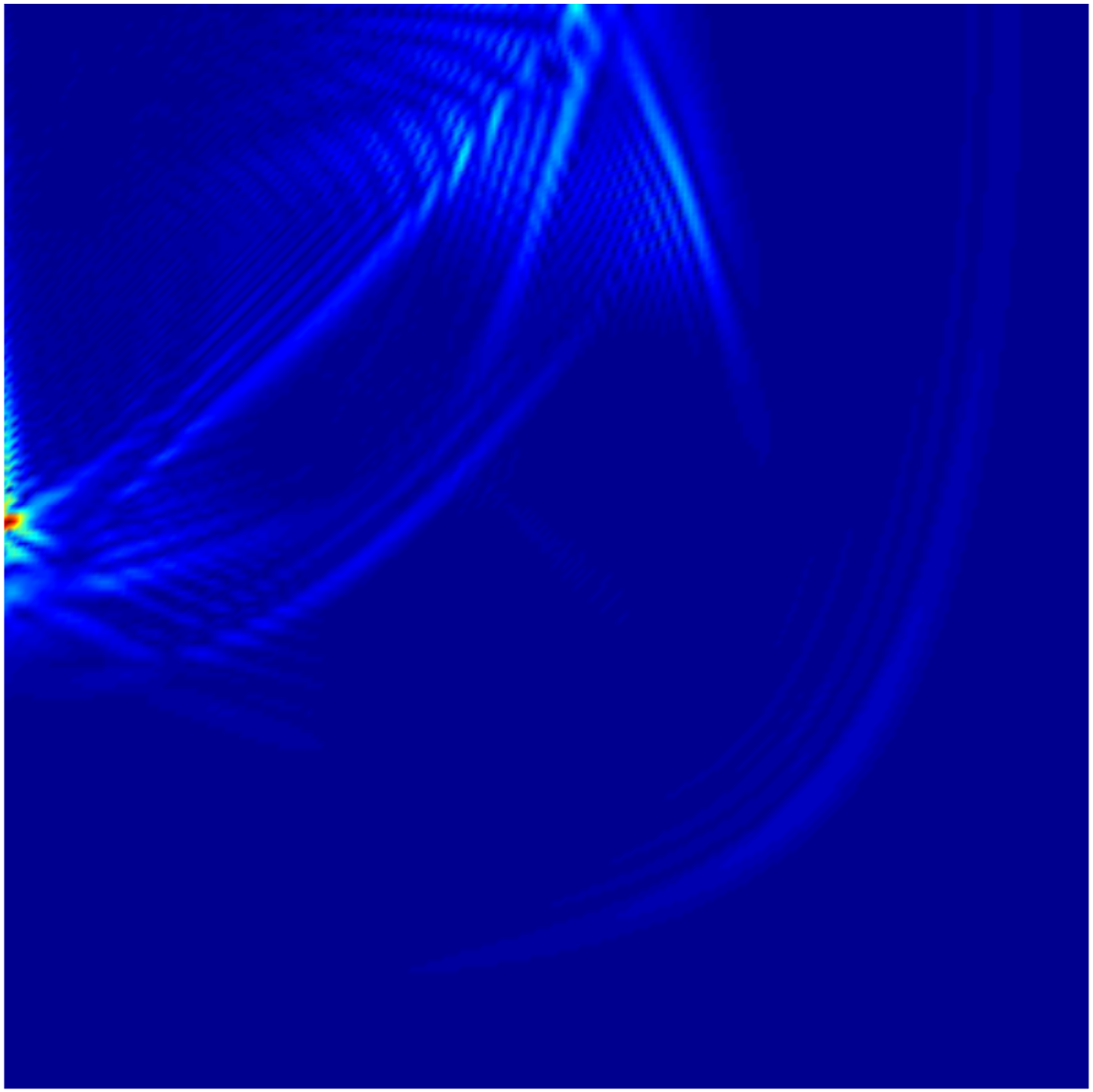
Lokální tah uprostřed vnější stěny - „střecha“



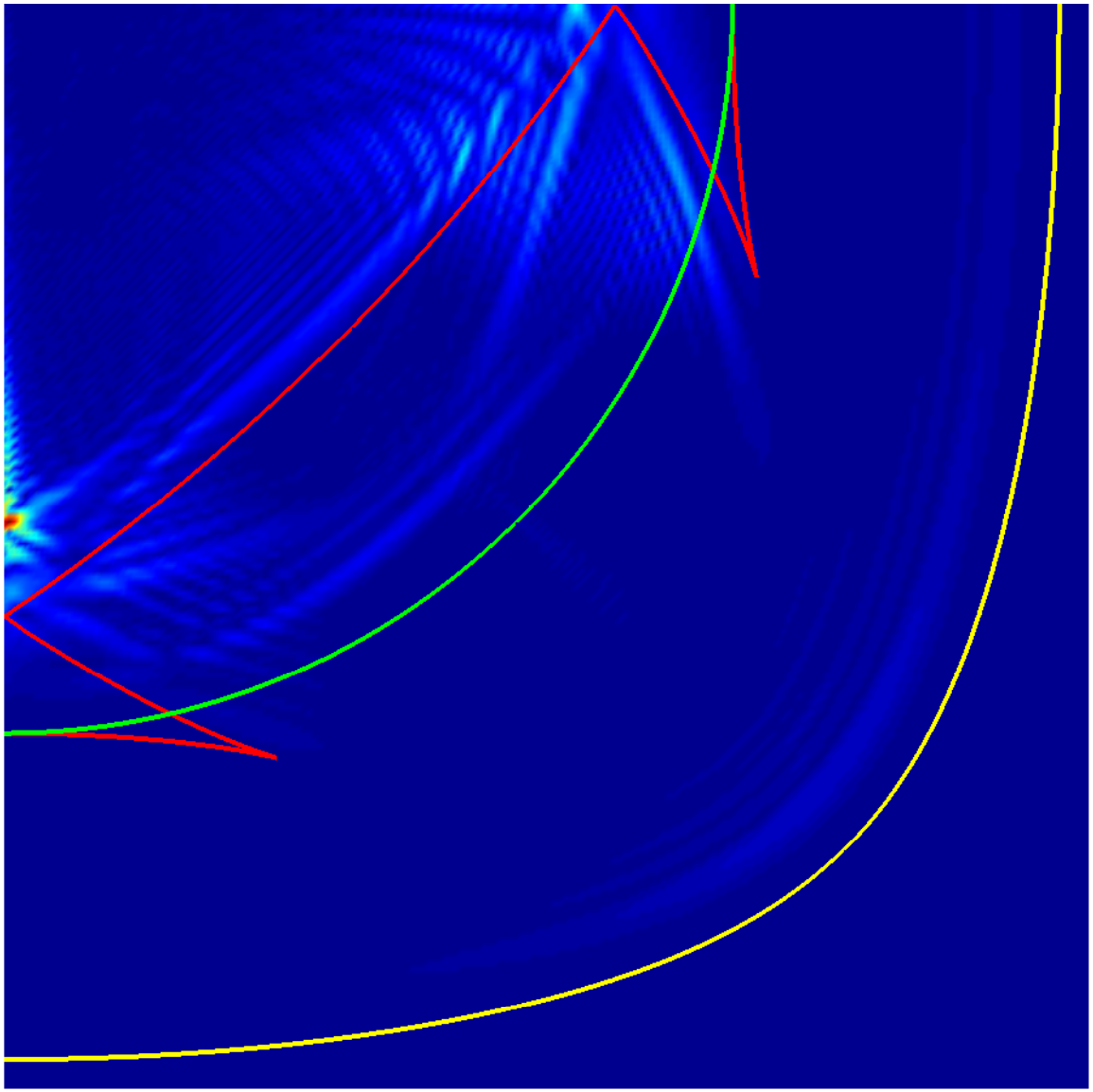
Lokální tah uprostřed vnější stěny - „střecha“



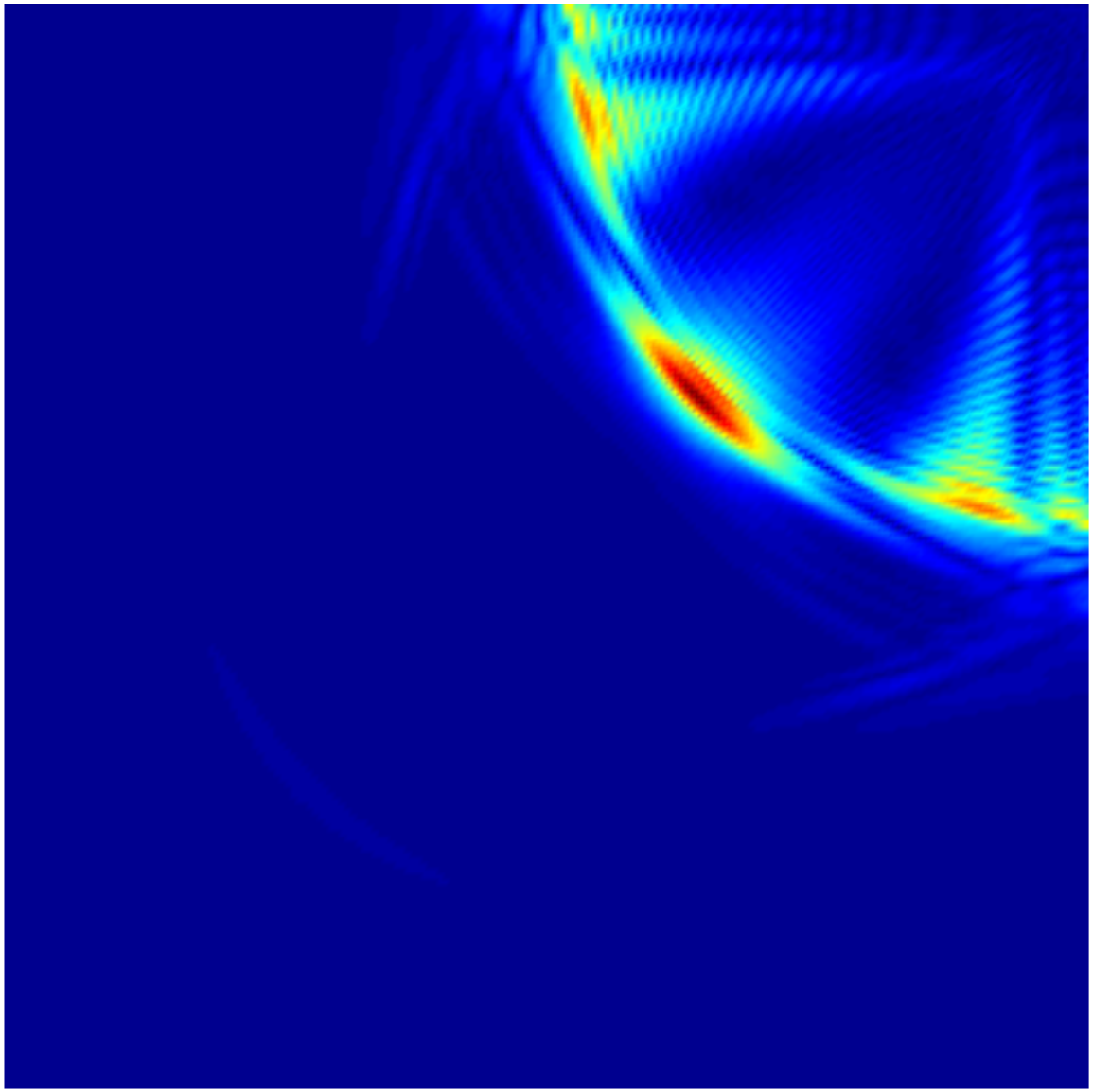
Lokální tah uprostřed vnější stěny - „bok“



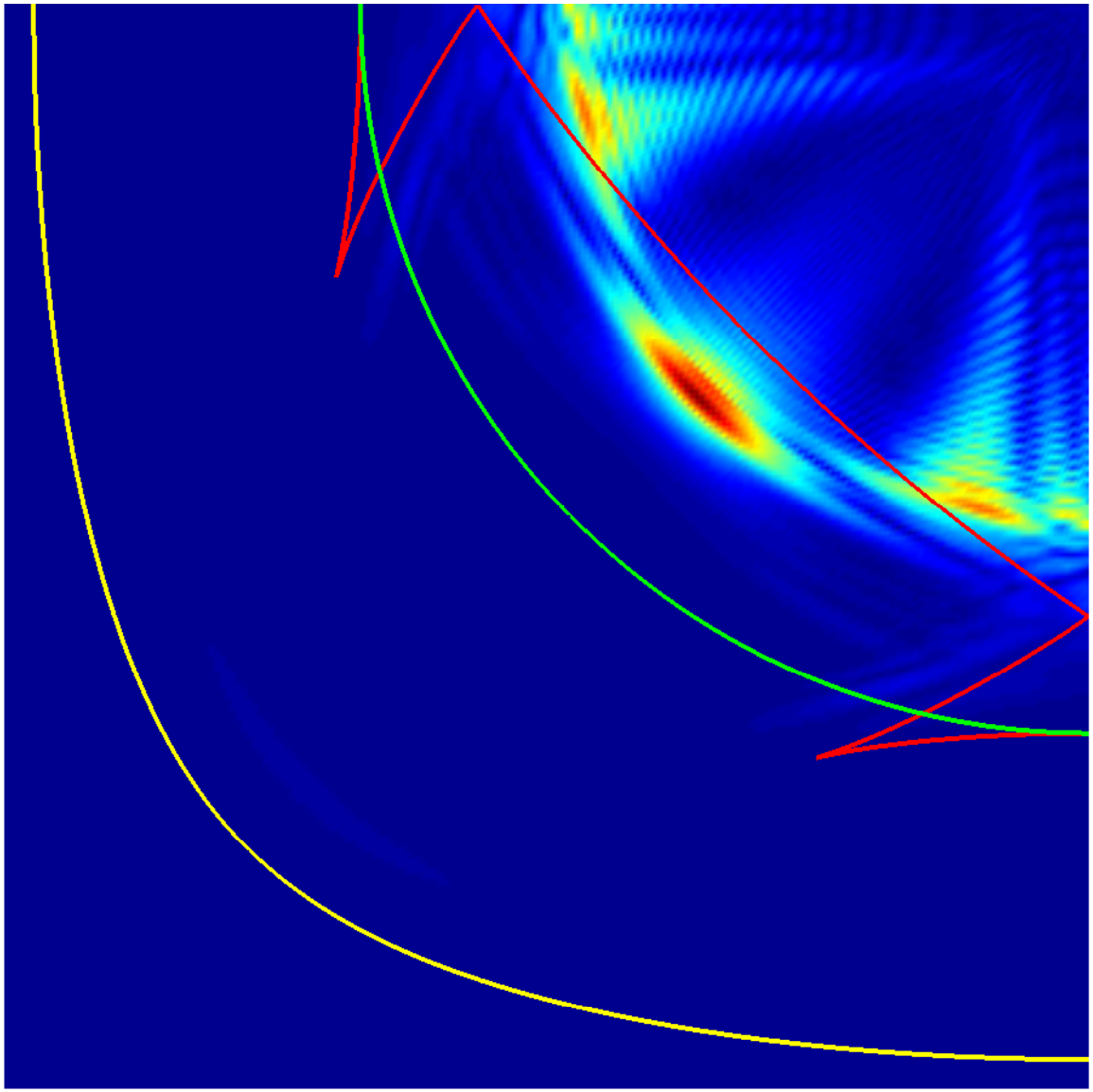
Lokální tah uprostřed vnější stěny - „bok“



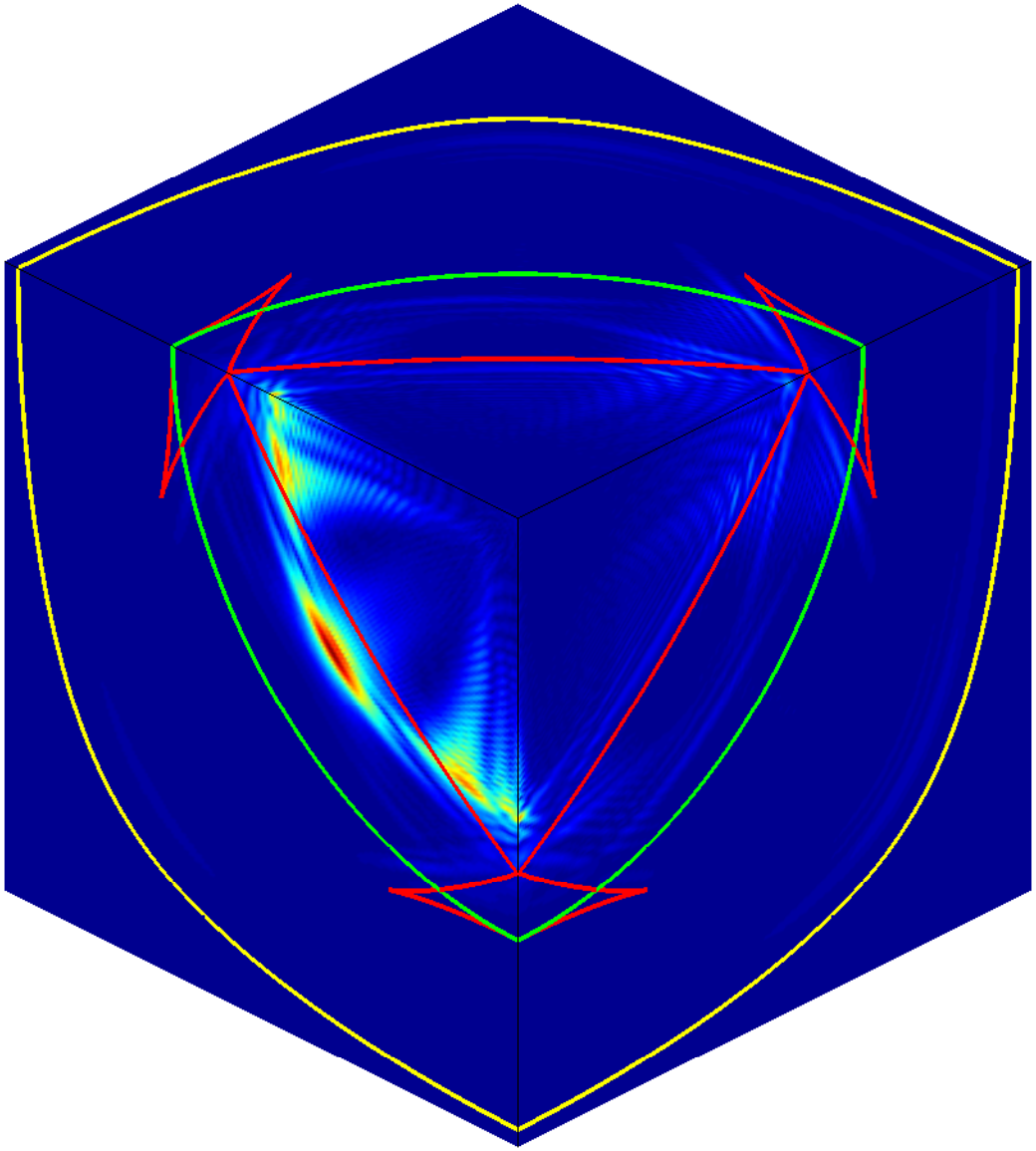
Lokální tah uprostřed vnější stěny - „čelo“

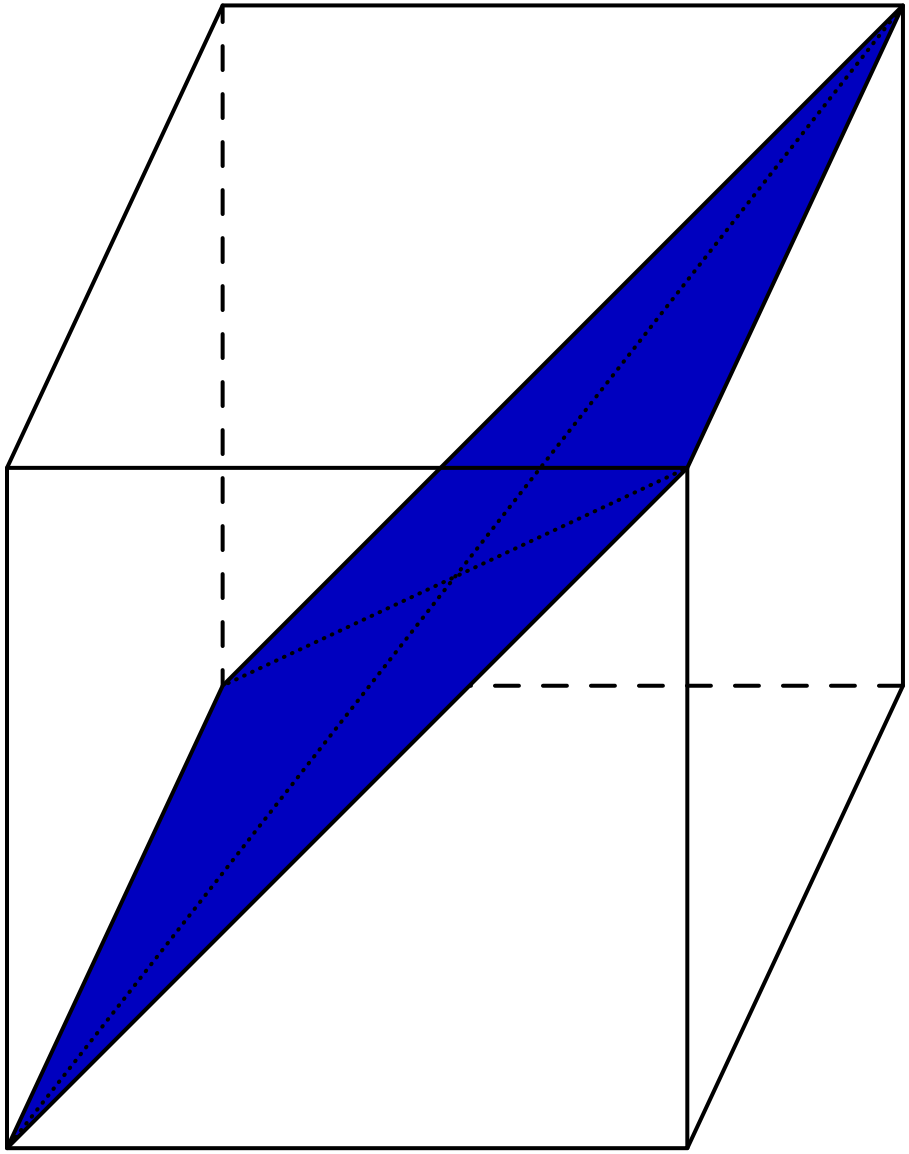


Lokální tah uprostřed vnější stěny - „čelo“

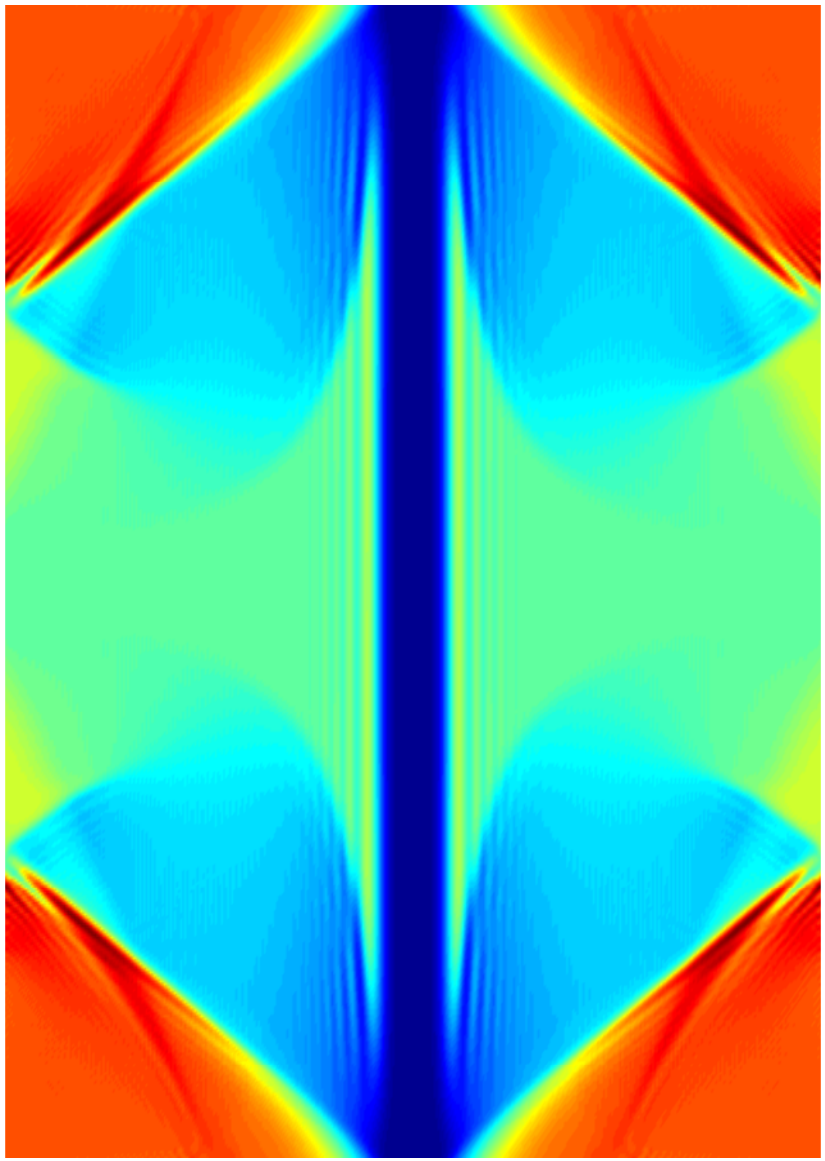


Lokální tah uprostřed vnější stěny v čase 10 ps

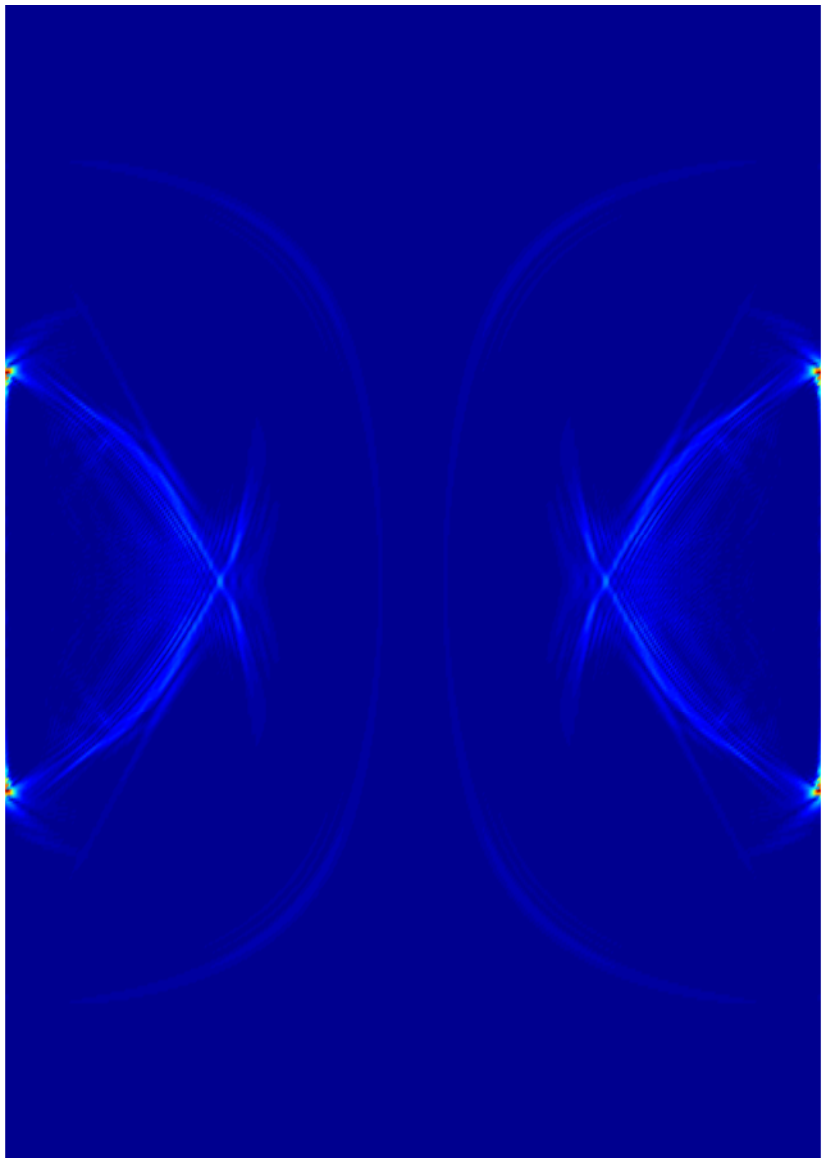




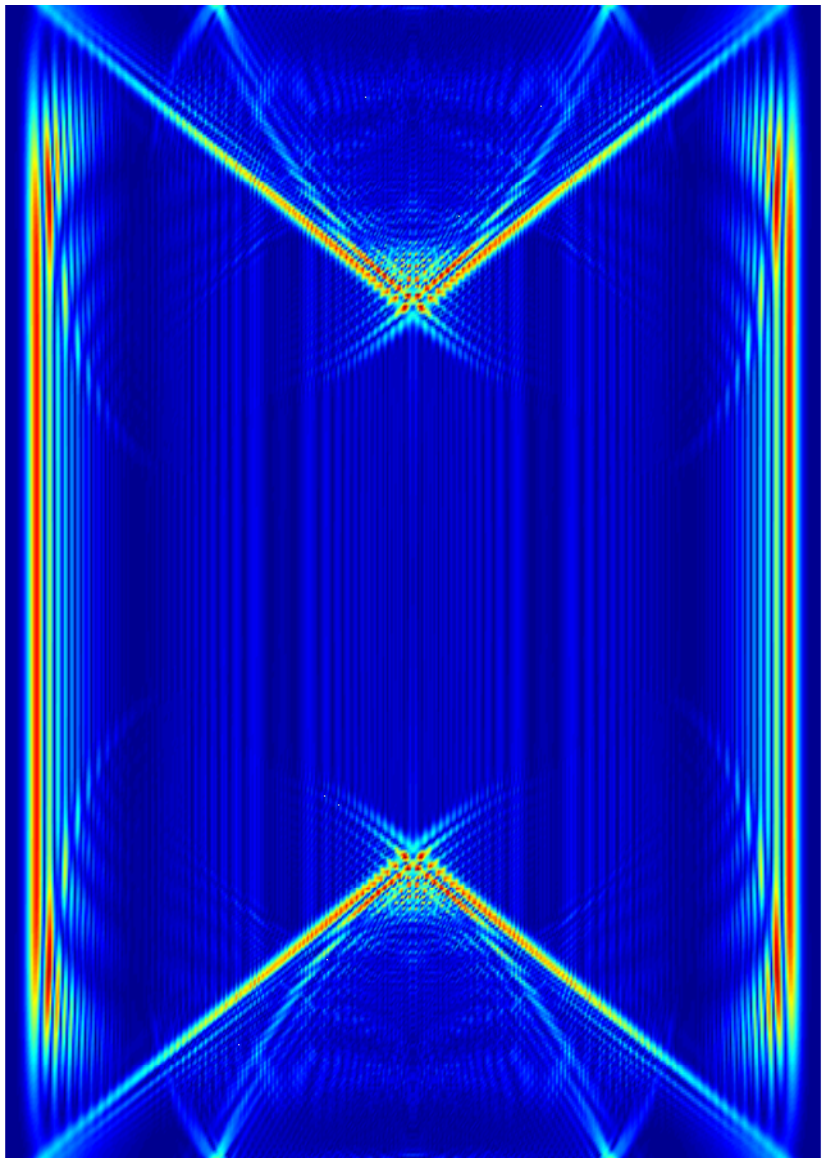
Celoplošný tah na vnějších stěnách krychle
Krok: 1000



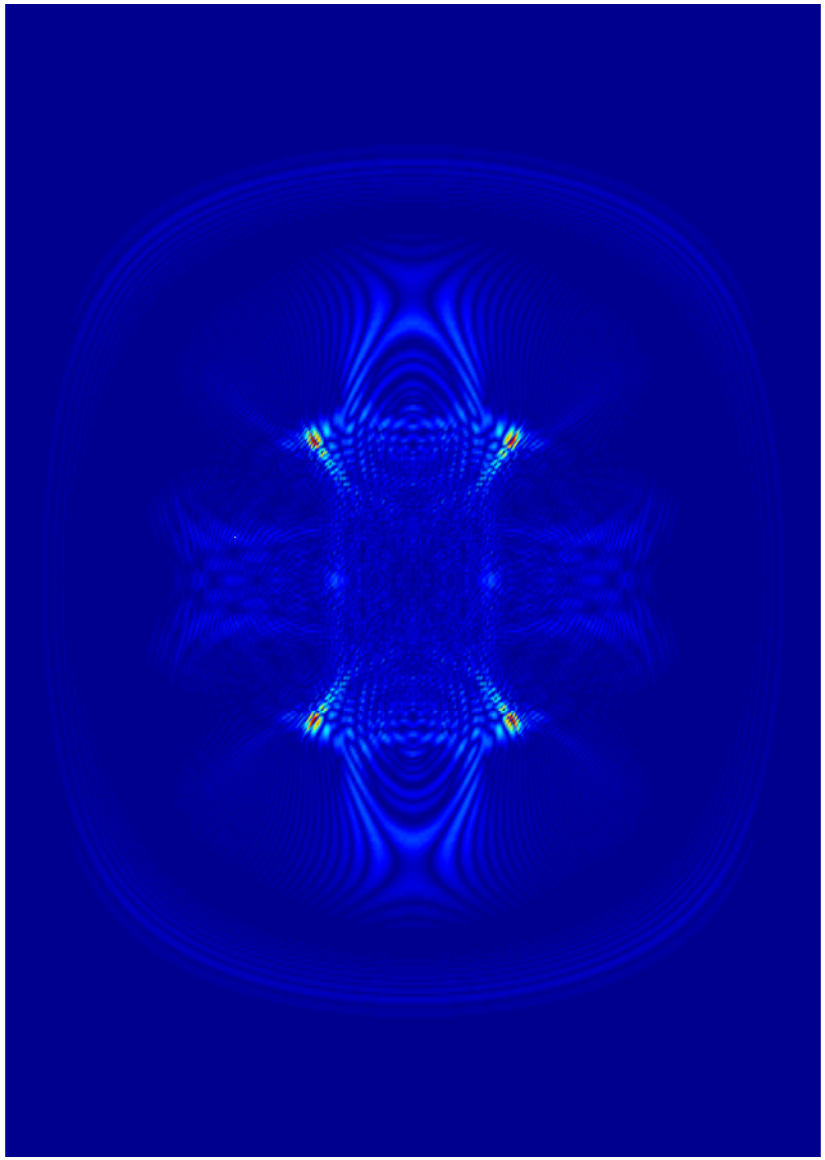
Lokální tah uprostřed vnějších stěn krychle
Krok: 1000

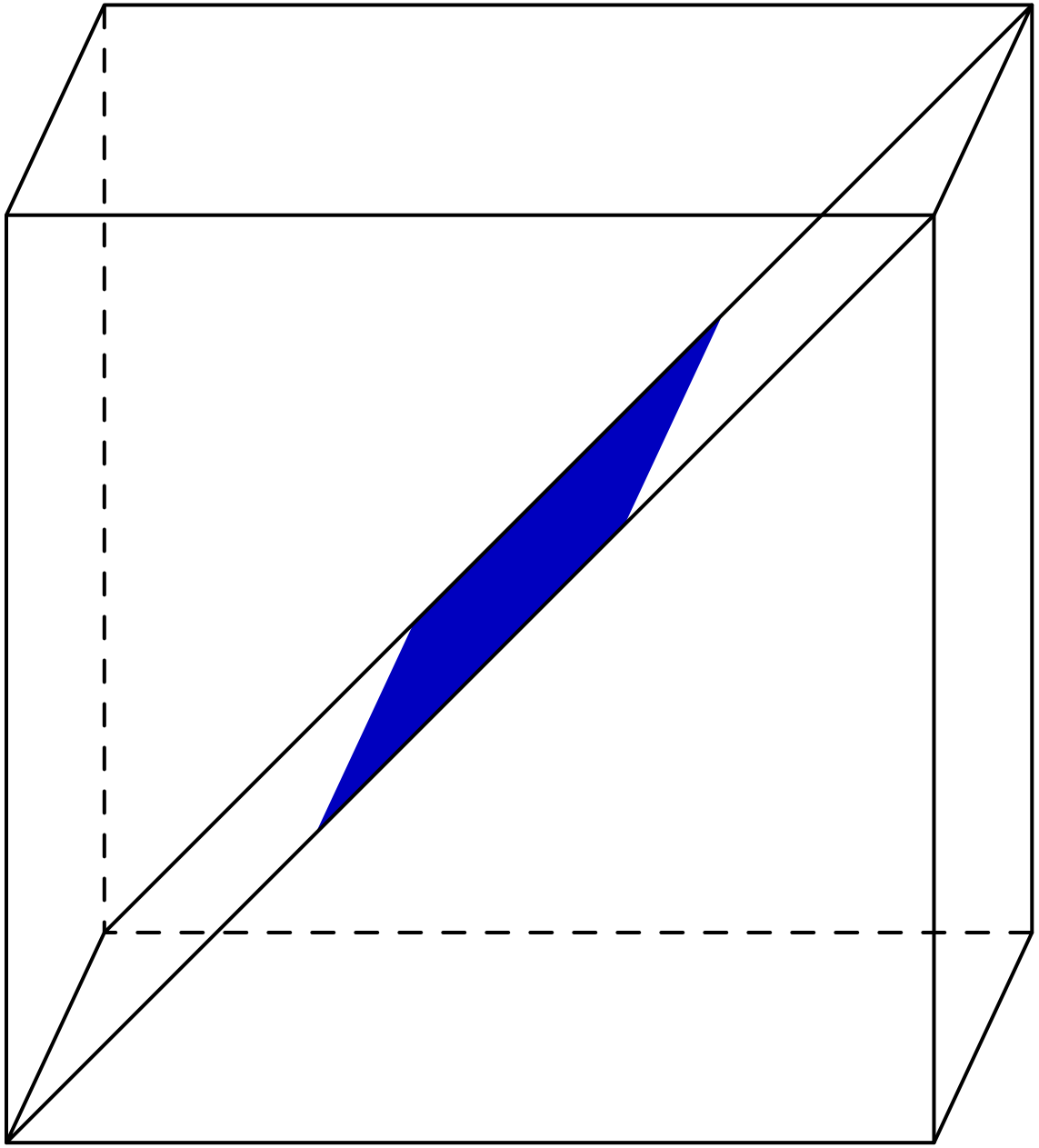


Celoplošná exploze v centrální rovině krychle
Krok: 1000



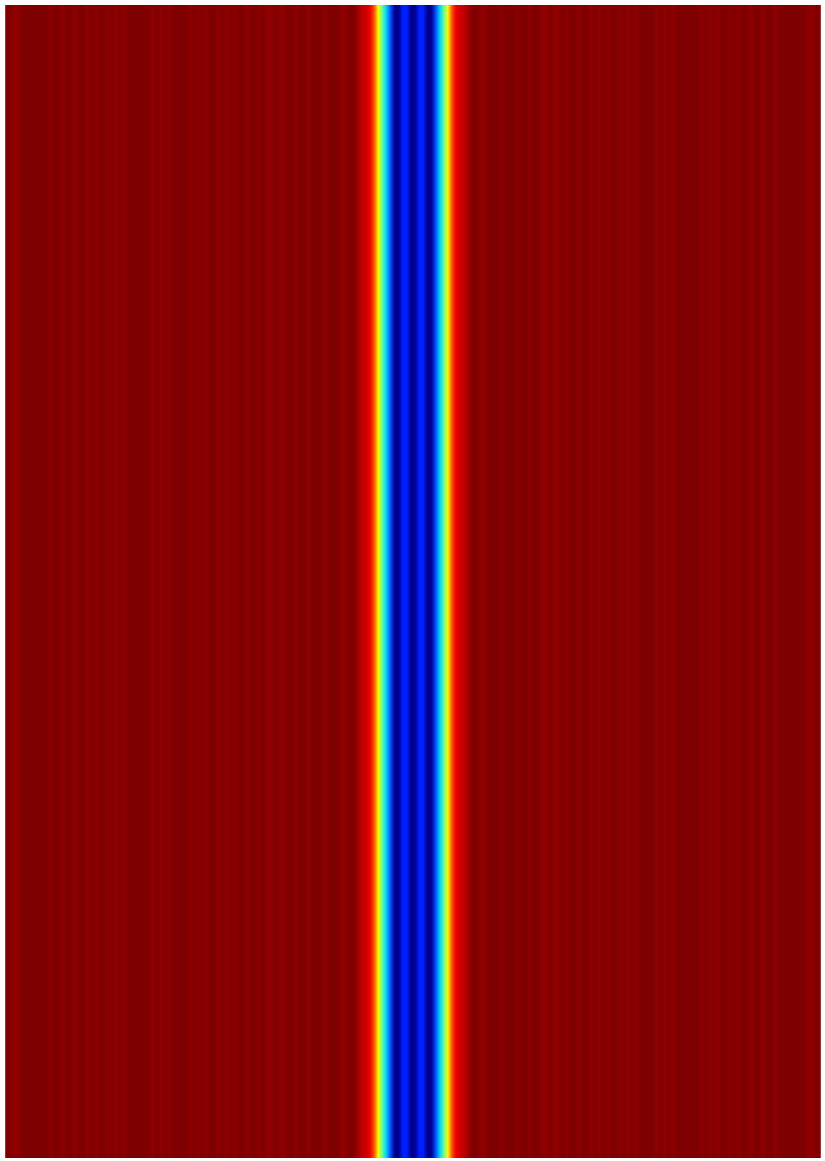
Exploze ve středu krychle
Krok: 1000



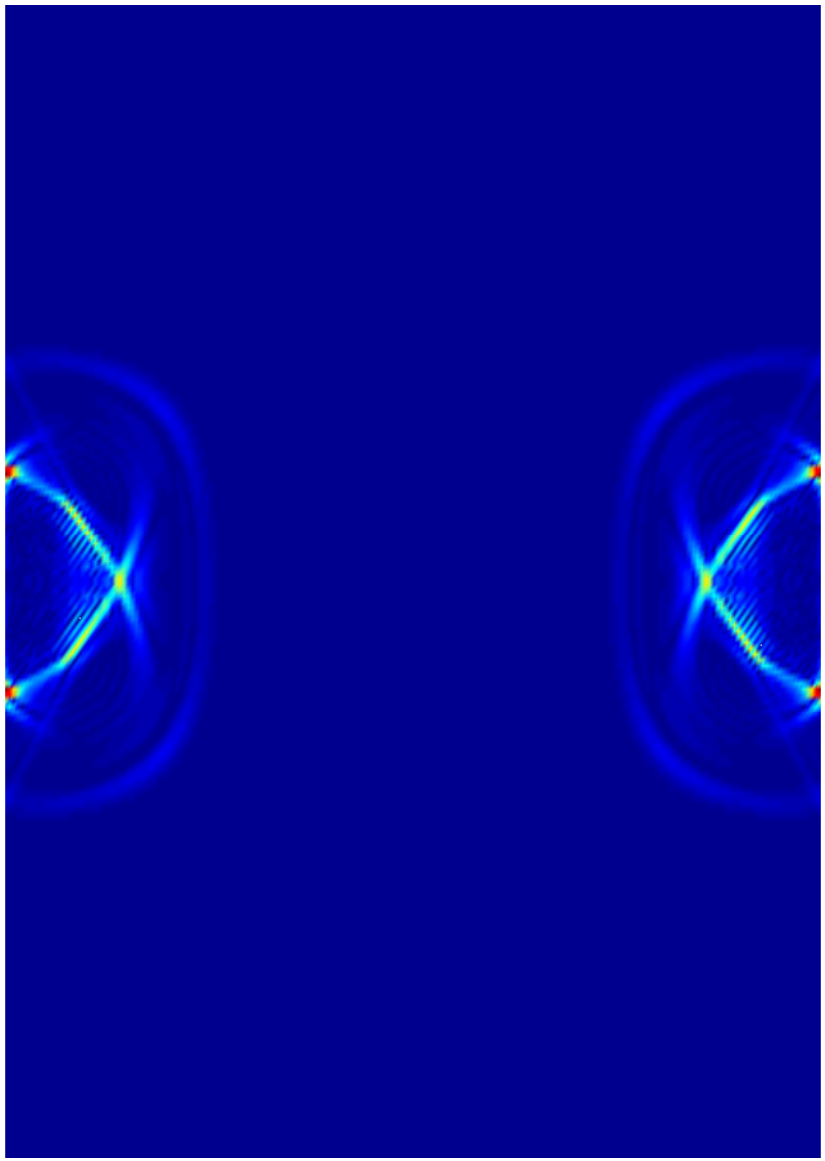


Celoplošný tah na vnějších stěnách nekonečné desky
Krok: 300

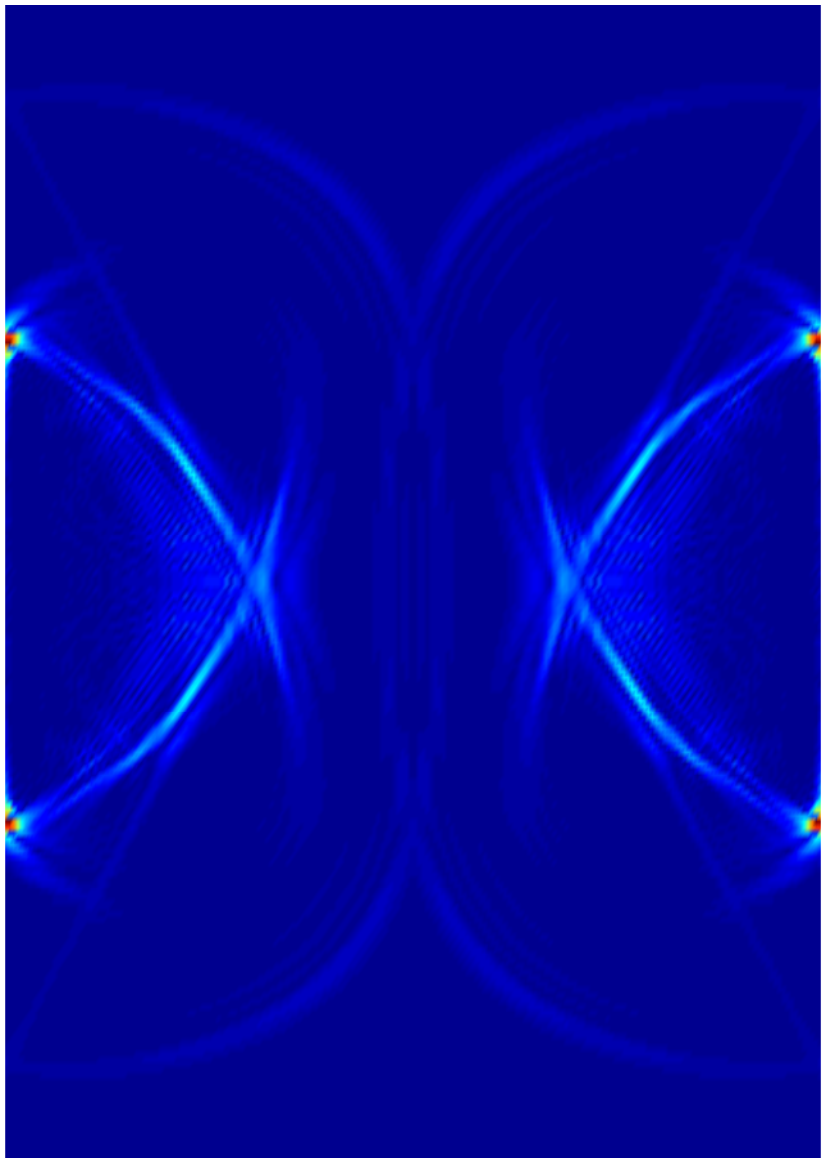
Celoplošný tah na vnějších stěnách nekonečné desky
Krok: 600



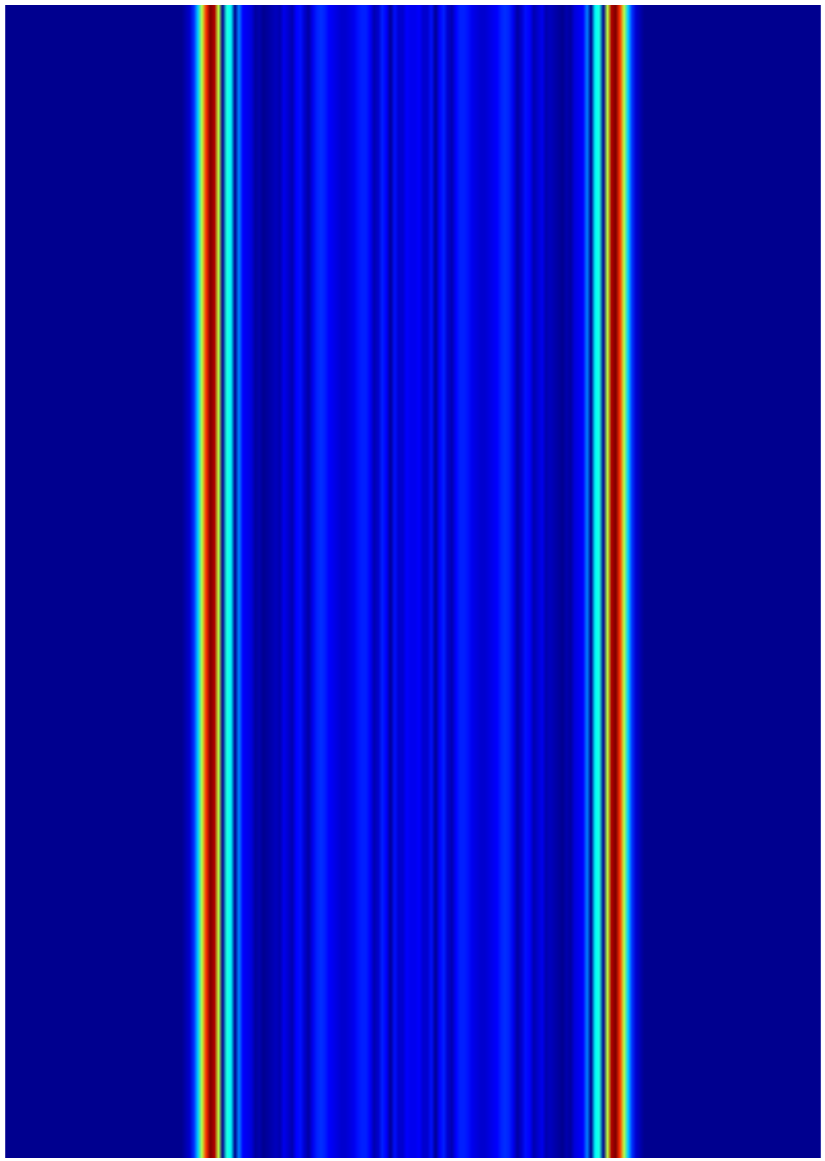
Lokální tah na vnějších stěnách nekonečné desky
Krok: 300



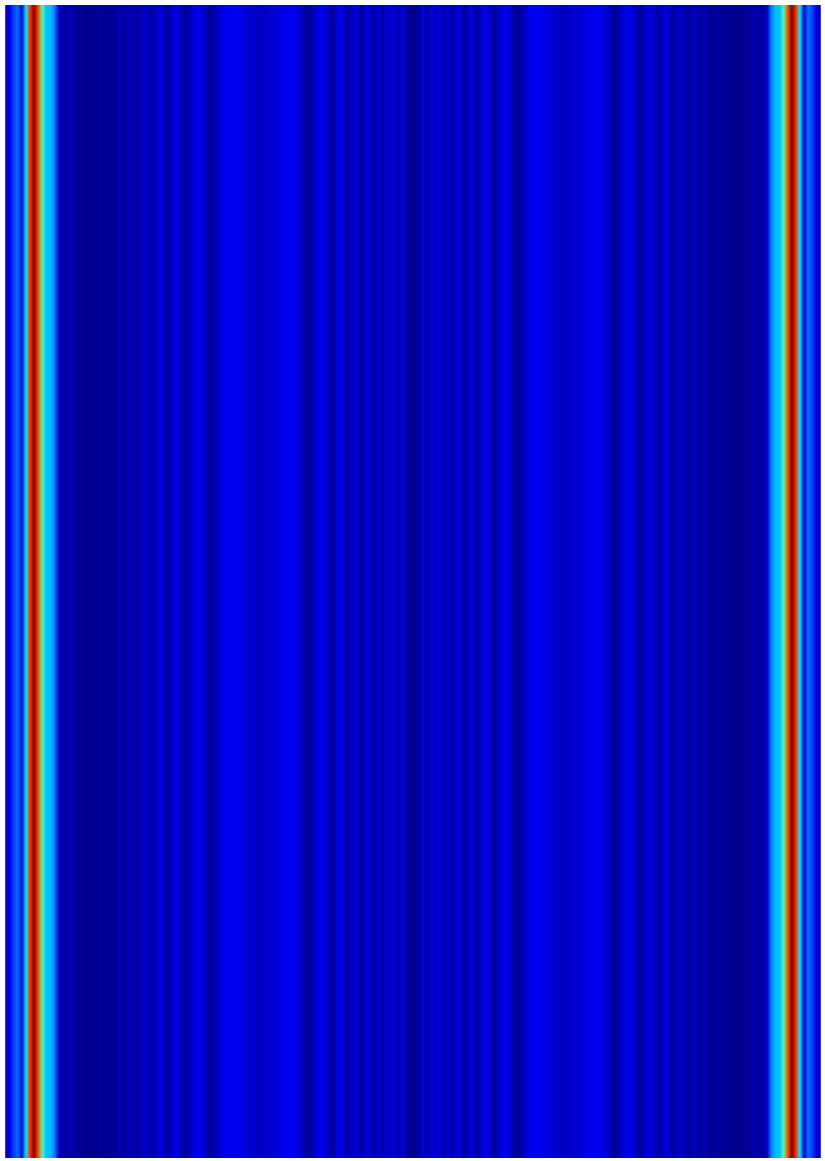
Lokální tah na vnějších stěnách nekonečné desky
Krok: 600



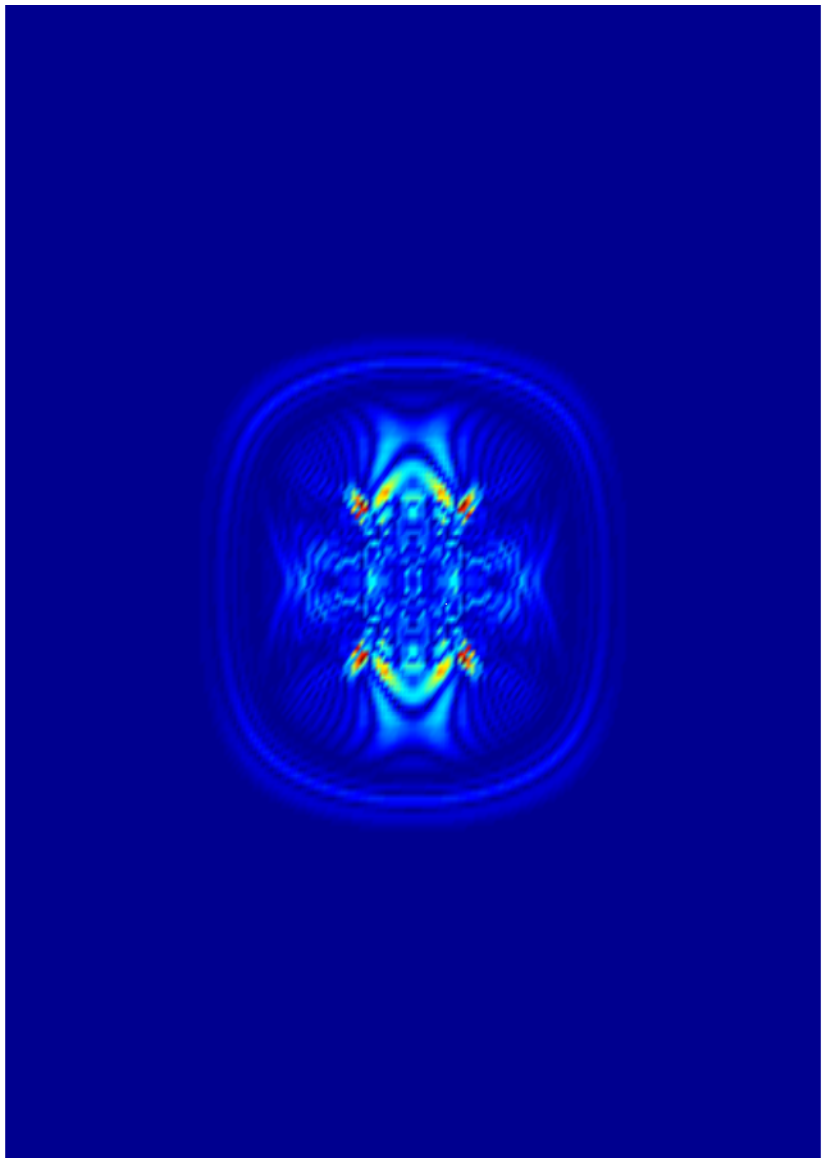
Celoplošná exploze v centrální rovině nekonečné desky
Krok: 300



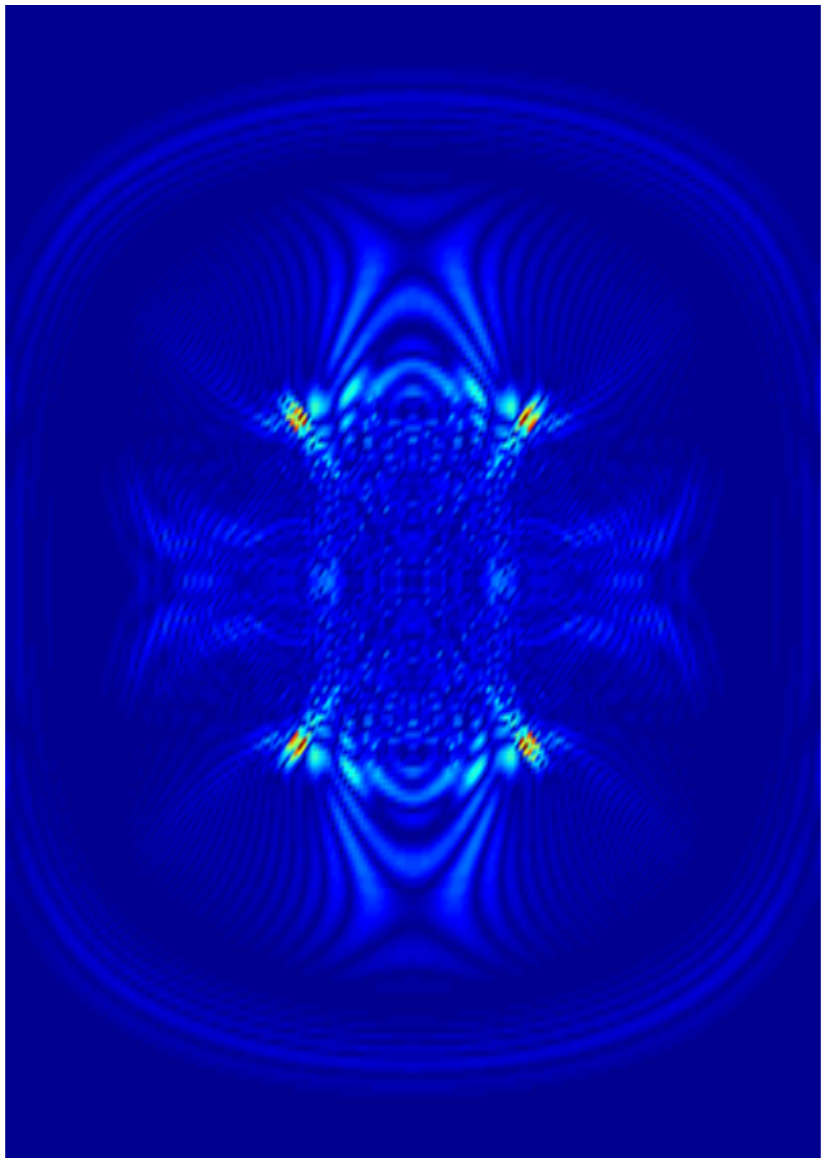
Celoplošná exploze v centrální rovině nekonečné desky
Krok: 600



Exploze ve středu nekonečné desky
Krok: 300



Exploze ve středu nekonečné desky
Krok: 600



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.

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.

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.

OBSAH

Úvod

Typy MD-simulací

Druhy testů

Typy buzení

Šíření napěťových vln v anizotropním prostředí

Ověření rychlosti šíření napěťových vln

Krychle

Nekonečná deska

Závěr