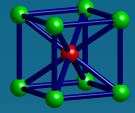


MOLEKULÁRNÍ DYNAMIKA V MATERIÁLOVÉM VÝZKUMU

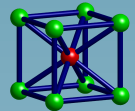
Petr Hora
Ústav termomechaniky AV ČR

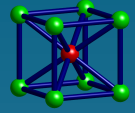
Habilitační přednáška



Molekulární dynamika - co to je?

- technika počítačové simulace, kde je časový vývoj množiny interagujících atomů popsán integrací jejich pohybových rovnic.
- vychází ze zákonů klasické mechaniky, především Newtonových pohybových rovnic.
- jedná se o deterministickou techniku (rozdíl oproti metodě Monte Carlo). Počáteční množina pozic a rychlostí zcela určuje následný časový vývoj.
- jedna z metod statistické mechaniky.





Historie molekulární dynamiky

1957 Alder a Wainwright

První článek referující o MD-simulaci.
Fázový diagram systému tuhých koulí.
Počítač UNIVAC a IBM 704.

1960 Gibson, Goland, Milgram a Vineyard

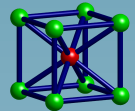
První použití spojitého potenciálu
a časové integrační metody konečných diferencí.
Počítač IBM 704, 500 atomů, jeden časový krok trval asi minutu.

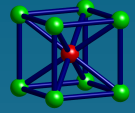
1964 Rahman

Vlastnosti tekutého argonu s použitím Lennardova-Jonesova potenciálu.
Počítač CDC 3600, 864 atomů.

1967 Verlet

Fázový diagram argonu s pomocí Lennardovo-Jonesova potenciálu.
Poprvé uveden *Verletův seznam sousedů*.
Mimoto byl použit *Verletův časový integrační algoritmus*.





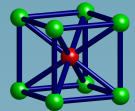
Aplikace molekulární dynamiky

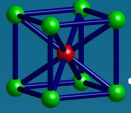
Tekutiny. Dostupnost nových realistických interakčních modelů umožňuje studovat nové systémy, elementární i vícesložkové. Pomocí nerovnovážných technik jsou vyšetřovány transportní jevy (např. viskóznost) a tepelné toky.

Defekty. Pozornost se přesouvá z bodových defektů (vakance, intersticiální porucha) k lineárním (dislokace) a plošným defektům (hranice zrn, vrstevné chyby). Reálnějších modelů je dosaženo díky lepším potenciálům.

Lomy. Lomový proces může v závislosti na příslušných parametrech nastat různými způsoby a probíhat různou rychlostí. Technická závažnost je zřejmá a simulace poskytuje proniknutí k podstatě.

Povrchy. Simulace stále hraje velkou roli při pochopení jevů jako např. rekonstrukce povrchu, povrchové tavení, fazetový růst, povrchová difúze, zdrsňování, atd. Tyto simulace často vyžadují rozsáhlé vzorky a dlouhé simulační časy.



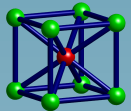


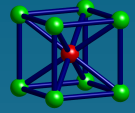
Tření. Vývoj atomového silového mikroskopu (AFM) podnítil výzkumy adheze a tření mezi dvěma pevnými látkami. Souhrn *makroskopických* znalostí je korigován a rozšiřován o mikroskopické základy.

Klastry. Klastry, tj. konglomeráty mnoha atomů, představují most mezi molekulárními systémy a pevnou fází a vykazují pozoruhodné vlastnosti. Klastry kovů jsou díky své úloze katalyzátoru v důležitých chemických reakcích (např. katalyzátory v automobilech) zvláště důležité z technologického hlediska.

Biomolekuly. Molekulární dynamika umožňuje studovat dynamiku rozsáhlých makromolekul, včetně biologických systémů jako např. proteiny, nukleové kyseliny (DNA, RNA) a membrány. Dynamické jevy mohou hrát klíčovou úlohu při regulačních procesech, které ovlivňují funkční vlastnosti biomolekul. Simulace léků je běžně používána ve farmaceutickém průmyslu.

Elektronové vlastnosti a dynamika. Vývoj Carovy-Parrinellovy metody, při které jsou síly působící na atomy získány řešením problému elektronové struktury místo meziatomového potenciálu, umožňuje plně studovat vlastnosti materiálů včetně jejich dynamiky (a tedy fázových přechodů a jiných teplotně závislých jevů).





Základní aparát molekulární dynamiky

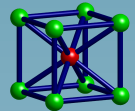
- Hlavní součástí simulace je model fyzikálního systému.
- Pro simulace MD to znamená volbu potenciálu.

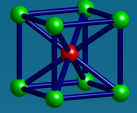
Potenciál: Funkce pozic atomů $V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$, která představuje potenciální energii systému atomů uspořádaných v dané konfiguraci. Nejjednodušší tvar pro V je součet párových interakcí:

$$V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_i \sum_{j>i} \phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|).$$

- Síly jsou odvozeny jako gradienty potenciálu vzhledem k výchylkám atomů:

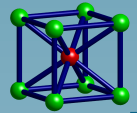
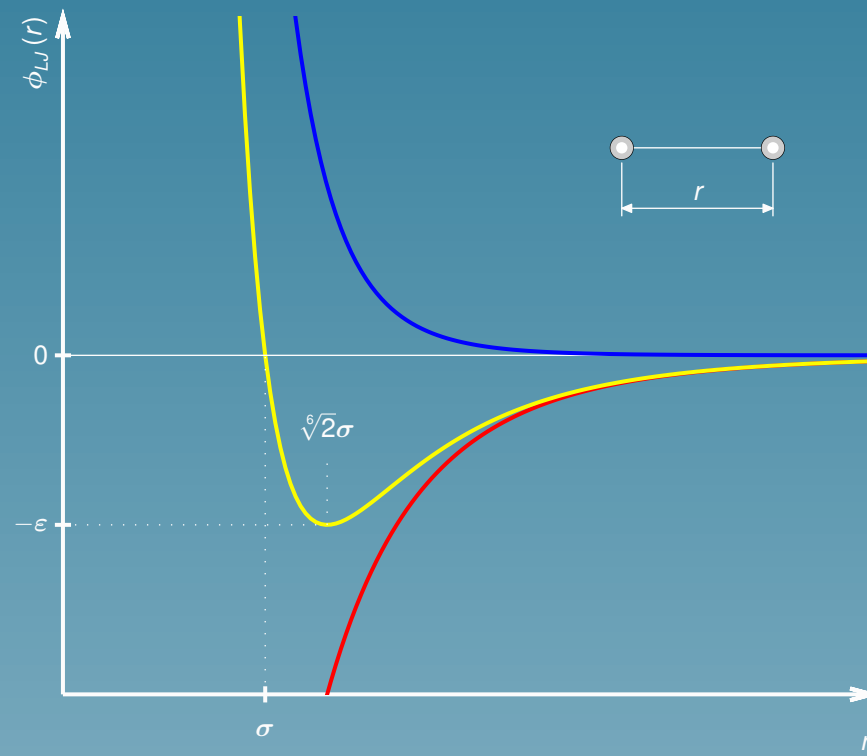
$$\mathbf{F}_i = -\nabla_{\mathbf{r}_i} V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N).$$

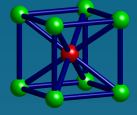




Lennardův-Jonesův potenciál 12-6

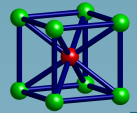
$$\phi_{LJ}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

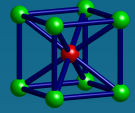




Postup simulace

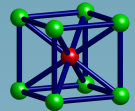
1. Zahájení simulace
2. Řízení simulace
3. Získání výsledků ze simulace

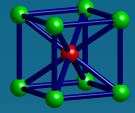




1. Zahájení simulace

1. Definovat pomyslný prostor, ve kterém bude simulace probíhat.
2. Přiřadit částicím počáteční pozice a rychlosti.
 - Vytvořit zcela novou množinu počátečních pozic a rychlostí.
 - Převzít konečné pozice a rychlosti z předchozího běhu MD simulace.





2. Řízení simulace

Jak lze přivést systém do požadovaného stavu?

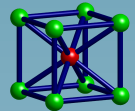
- Hustota se řídí volbou objemu V simulačního boxu.
- Teplotních změn je obvykle dosaženo přeškálováním rychlostí.
- V pokročilejších simulacích se volí tlak a měří se objem boxu.

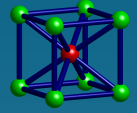
Indikátory stavu systému:

- stacionární, tj. kolísající okolo fixní hodnoty,
- relaxující, tj. kolísající okolo hodnoty, která se pomalu mění.

Stavová změna může být:

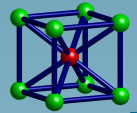
- vyvolána uměle, např. dojde-li k přenastavení parametrů simulace,
- samovolná, např. systém prochází fázovou transformací.

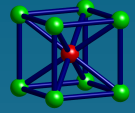




3. Získání výsledků ze simulace

- prostá inspekce pozic atomů,
- jednoduché statistické veličiny,
- měření teploty tavení,
- prostorové korelace,
- dynamická analýza atd.





Potenciál Finnisova–Sinclairova typu

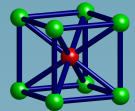
Celková potenciální energie E soustavy N atomů:

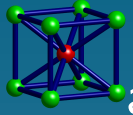
$$E = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N V(r_{ij}) - \sum_{i=1}^N \left(\sum_{j \neq i=1}^N \phi(r_{ij}) \right)^{1/2},$$

kde pro Fe a Cu

$$V(r) = \begin{cases} \frac{1}{r} \sum_{k=1}^4 c_k \cdot \exp(d_k r), & \text{pro } r < x_1, \\ \exp(B_0 + B_1 r + B_2 r^2 + B_3 r^3), & \text{pro } x_1 \leq r < x_2, \\ \sum_{k=1}^6 a_k \cdot H(r_k - r) (r_k - r)^3, & \text{pro } x_2 \leq r, \end{cases}$$

$$\phi(r) = \sum_{k=1}^2 A_k \cdot H(R_k - r) (R_k - r)^3,$$





a kde pro Ag, Au a Ni

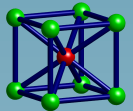
$$V(r) = \sum_{k=1}^6 a_k \cdot H(r_k - r) (r_k - r)^3,$$

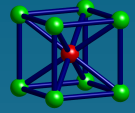
$$\phi(r) = \sum_{k=1}^2 A_k \cdot H(R_k - r) (R_k - r)^3,$$

r_{ij} je vzdálenost mezi i -tým a j -tým atomem, $a_k, r_k, A_k, R_k, B_0, B_1, B_2, B_3, c_k, d_k, x_1, x_2$ jsou tabelované konstanty, které jsou dány ve třech kolekcích v závislosti na typu vazby mezi i -tým a j -tým atomem a H je Heavisideova funkce.

Odtud plyne vztah pro potenciální energii n -tého atomu:

$$E_n = \frac{1}{2} \sum_{i \neq n=1} V(r_{in}) - \sqrt{\sum_{i \neq n=1} \phi(r_{in})}.$$





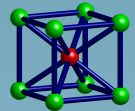
Pohybové rovnice

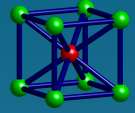
Pro každý atom jsou definovány 3 pohybové rovnice:

$$m_n \frac{d^2 s_n}{dt^2} + C \frac{ds_n}{dt} + R_{sn} = F_{sn}, \quad \text{pro } s = x, y, z$$

kde t je čas, m_n je hmotnost n -tého atomu, C je koeficient útlumu, R_{sn} jsou složky gradientu potenciálu a F_{sn} jsou složky vnější síly působící na n -tý atom.

Koeficient útlumu je různý od nuly pouze v případě relaxace.





Metoda centrálních diferencí

$$\left. \frac{ds_n}{dt} \right|_{t=t_i} \cong \frac{1}{2\Delta t} (s_n(i+1) - s_n(i-1))$$

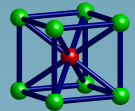
$$\left. \frac{d^2s_n}{dt^2} \right|_{t=t_i} \cong \frac{1}{\Delta t^2} (s_n(i+1) - 2s_n(i) + s_n(i-1))$$

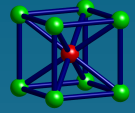
Dosazením této rovnice do pohybových rovnic dostaneme:

$$s_n(i+1) = s_n(i-1) + \frac{2}{A_n} (s_n(i) - s_n(i-1)) + \frac{\Delta t^2}{A_n m_n} (F_{sn} - R_{sn}),$$

kde

$$A_n = 1 + \frac{C\Delta t}{2m_n}.$$



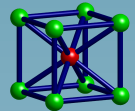
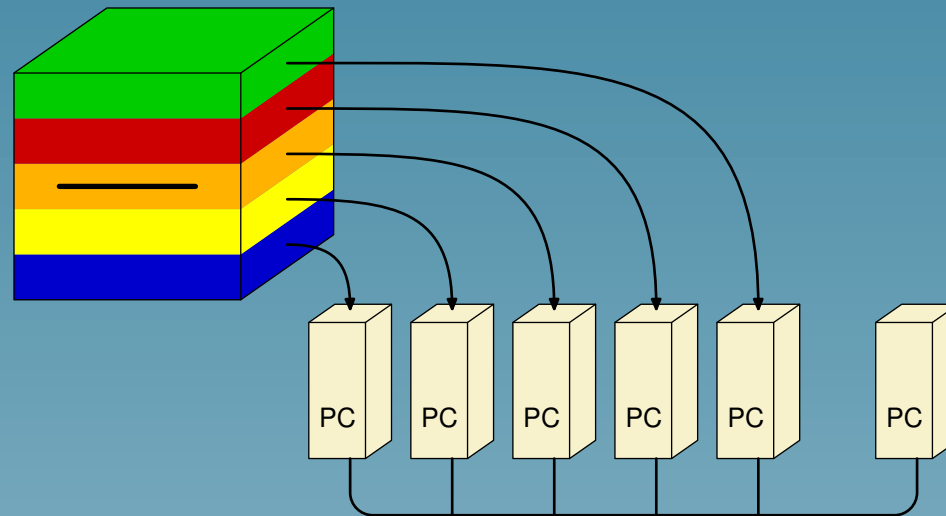


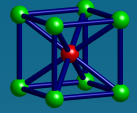
Popis paralelní úlohy

Úlohy molekulární dynamiky jsou postaveny na neustálém, ale především mnohonásobném vyčíslování relativně jednoduché rekurentní formule, do které vstupují pouze údaje z nejbližšího okolí právě zpracovávaného atomu.

- U bcc železa se jedná např. pouze o 14 nejbližších sousedních atomů.

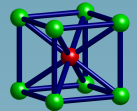
→ Takovéto úlohy jsou přímo předurčeny k paralelnímu zpracování.

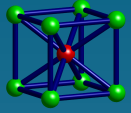




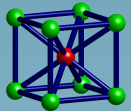
Paralelní program

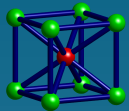
- Zdrojová verze programu je napsána v jazyce Fortran 90.
- Programový kód využívá systém MPI.
- Hašovací funkce: metoda indexace buněk (cell index method).
- Požadavky na paměť.
- Požadavky na diskový prostor.





Kde se počítalo?

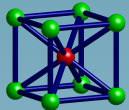


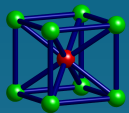


Kde se počítalo?



MINOS
32 CPU's
Dual Athlon MP1900+
1,6 GHz
512 MB/CPU
16 x 40 GB
Gigabit



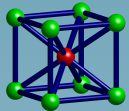


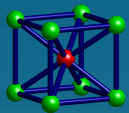
Kde se počítalo?



MINOS
32 CPU's
Dual Athlon MP1900+
1,6 GHz
512 MB/CPU
16 x 40 GB
Gigabit

SKURUT
32 CPU's
Dual Pentium III
700 MHz
512 MB/CPU
16 x 9 GB
Fast Ethernet





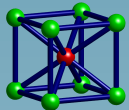
Kde se počítalo?

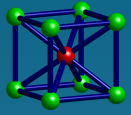


MINOS
32 CPU's
Dual Athlon MP1900+
1,6 GHz
512 MB/CPU
16 x 40 GB
Gigabit

SKURUT
32 CPU's
Dual Pentium III
700 MHz
512 MB/CPU
16 x 9 GB
Fast Ethernet

SKIRIT
32 CPU's
Dual Pentium III/XEON
1 GHz
512 MB/CPU
16 x 18 GB
Fast Ethernet, Myrinet





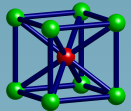
Kde se počítalo?

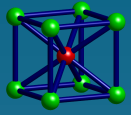


MINOS
32 CPU's
Dual Athlon MP1900+
1,6 GHz
512 MB/CPU
16 x 40 GB
Gigabit

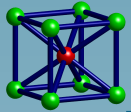
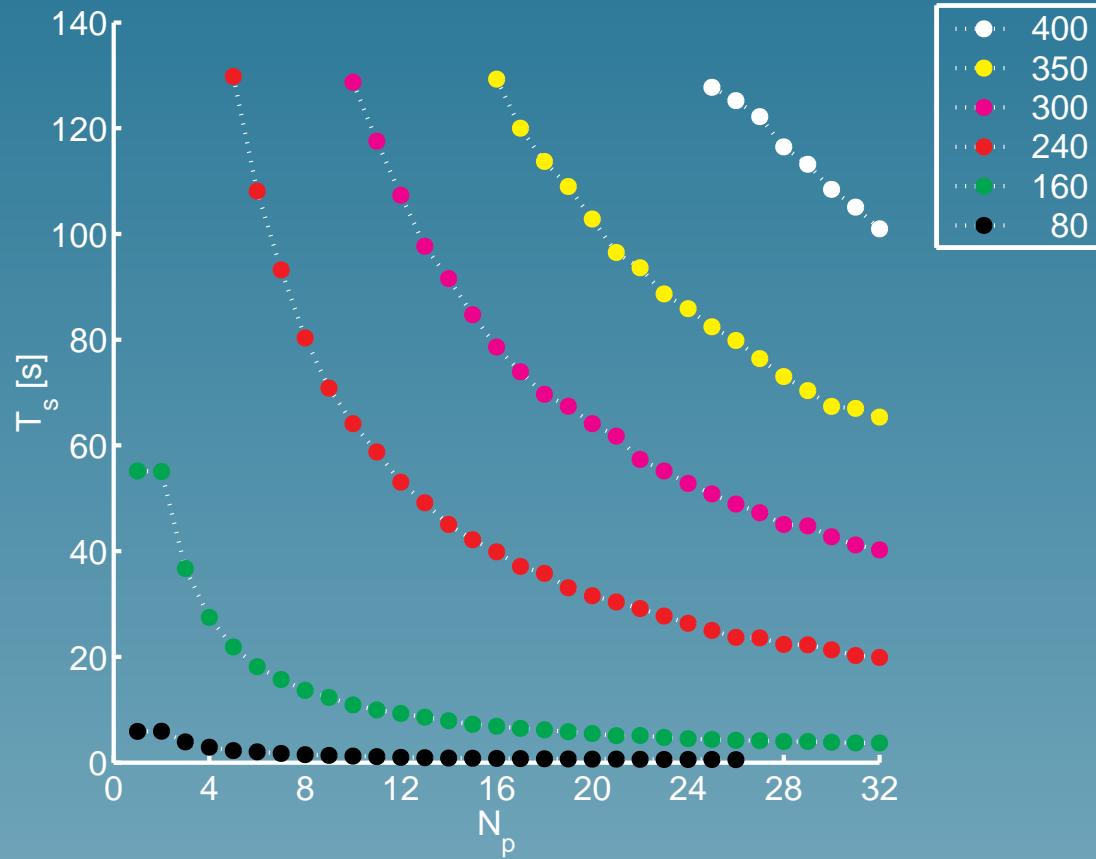
SKURUT
32 CPU's
Dual Pentium III
700 MHz
512 MB/CPU
16 x 9 GB
Fast Ethernet

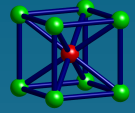
SKIRIT
32 CPU's
Dual Pentium III/XEON
1 GHz
512 MB/CPU
16 x 18 GB
Fast Ethernet, Myrinet





Závislost doby výpočtu na velikosti vzorku a na počtu procesorů





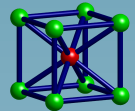
Vizualizace výsledků

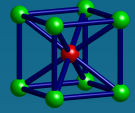
Vlastní nástroj pro vizualizaci v MATLABu. Proč?

- Existující programy jsou zbytečně složité.
- Výstupy našich programů mají specifický formát.
- Cizí program je cizí program.

Nejdůležitější možnosti vizualizačního programu:

- stanovení výřezu,
- stanovení pohledu,
- volba uvažované mřížky (základní, centrální nebo obě),
- volba konkrétního kroku simulace,
- filtrace atomů podle energie.





Testovací úlohy

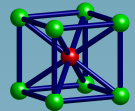
Klasický experiment → test přesnosti přístrojů

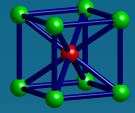
Počítačový experiment → test správnosti a přesnosti algoritmů a programů

Testování paralelního programu pro MD simulaci ve 3D bylo prováděno na krystalu α -železa.

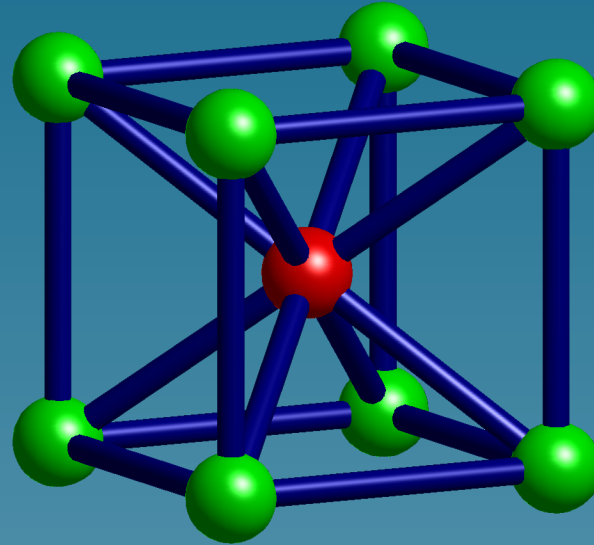
Šlo o následující typy ověřovacích experimentů:

- povrchová relaxace,
- teplotní roztažnost,
- Hookeův zákon.





MD simulace trhlin ve 3D



$$1000 \times 50 \times 1000 + 999 \times 49 \times 999$$

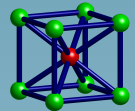


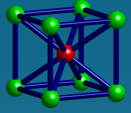
99 miliónů atomů

Použitý potenciál: vícečasticový potenciál Finnisova–Sinclairova typu

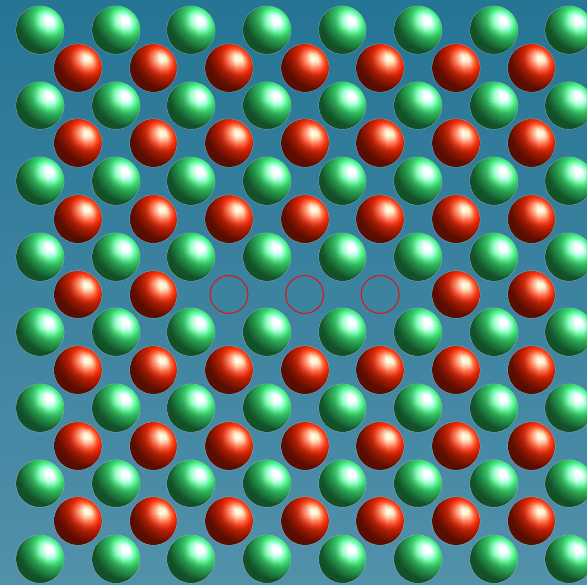
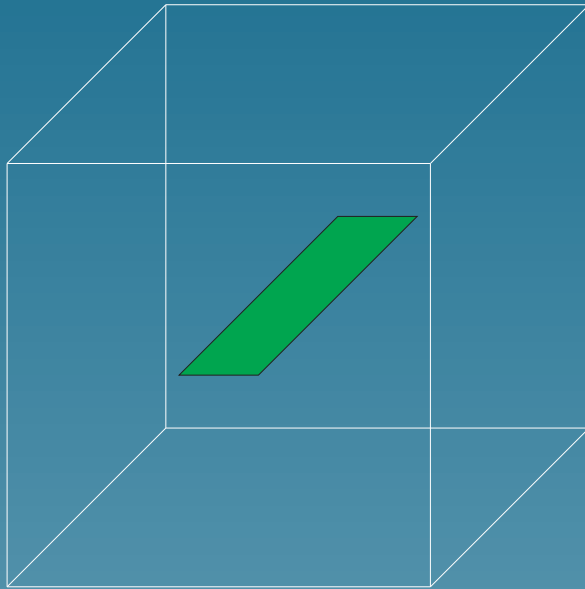
Integrace pohybových rovnic: metoda centrálních diferencí

Integrační krok: 1×10^{-14} s





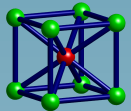
Popis trhliny

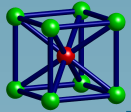
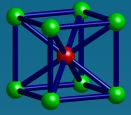


Velikost: $199 \times 49 \times 1$

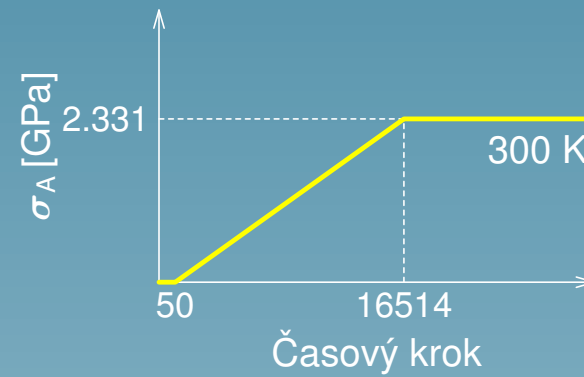
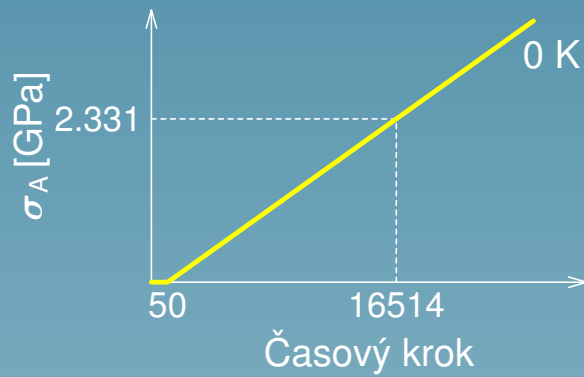
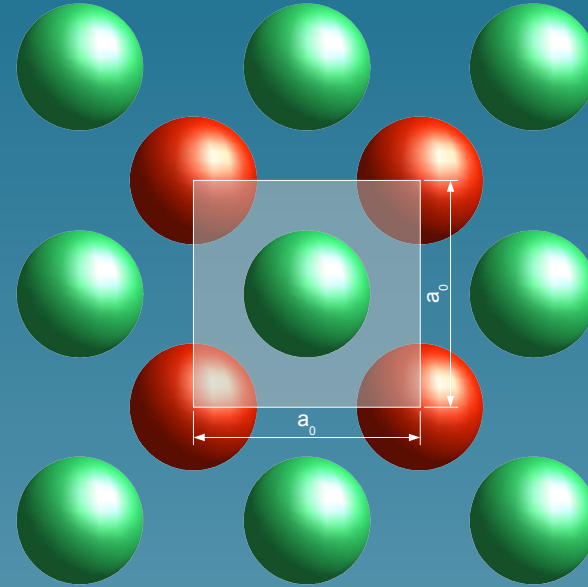
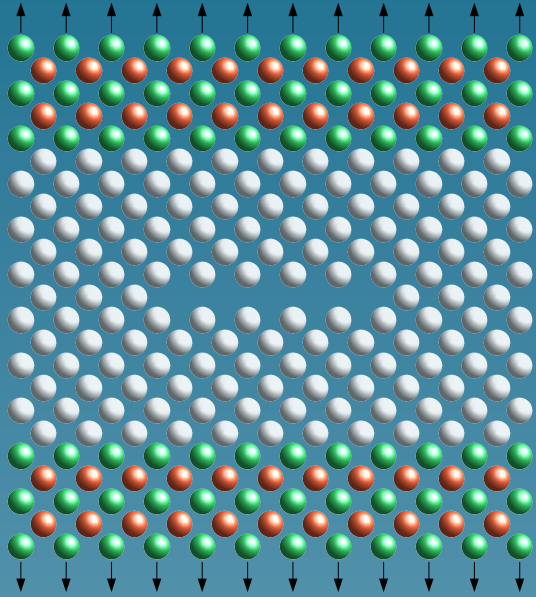
Metoda: vyjmutí centrálních atomů

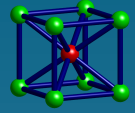
Realizace: interakce přes počáteční rovinu trhliny jsou zakázány





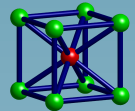
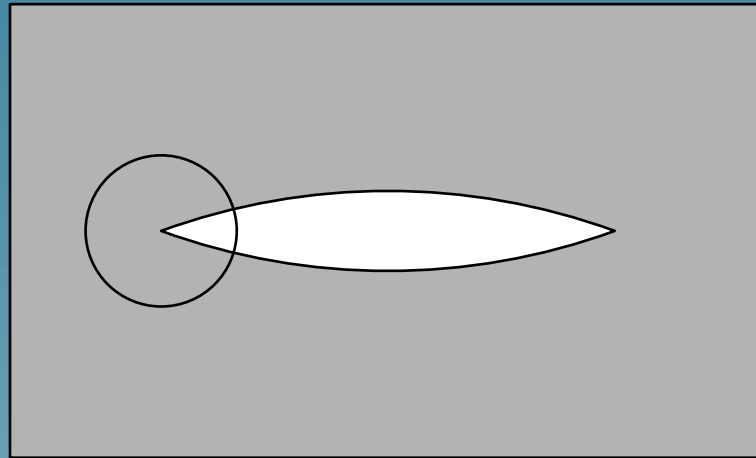
Zatěžování

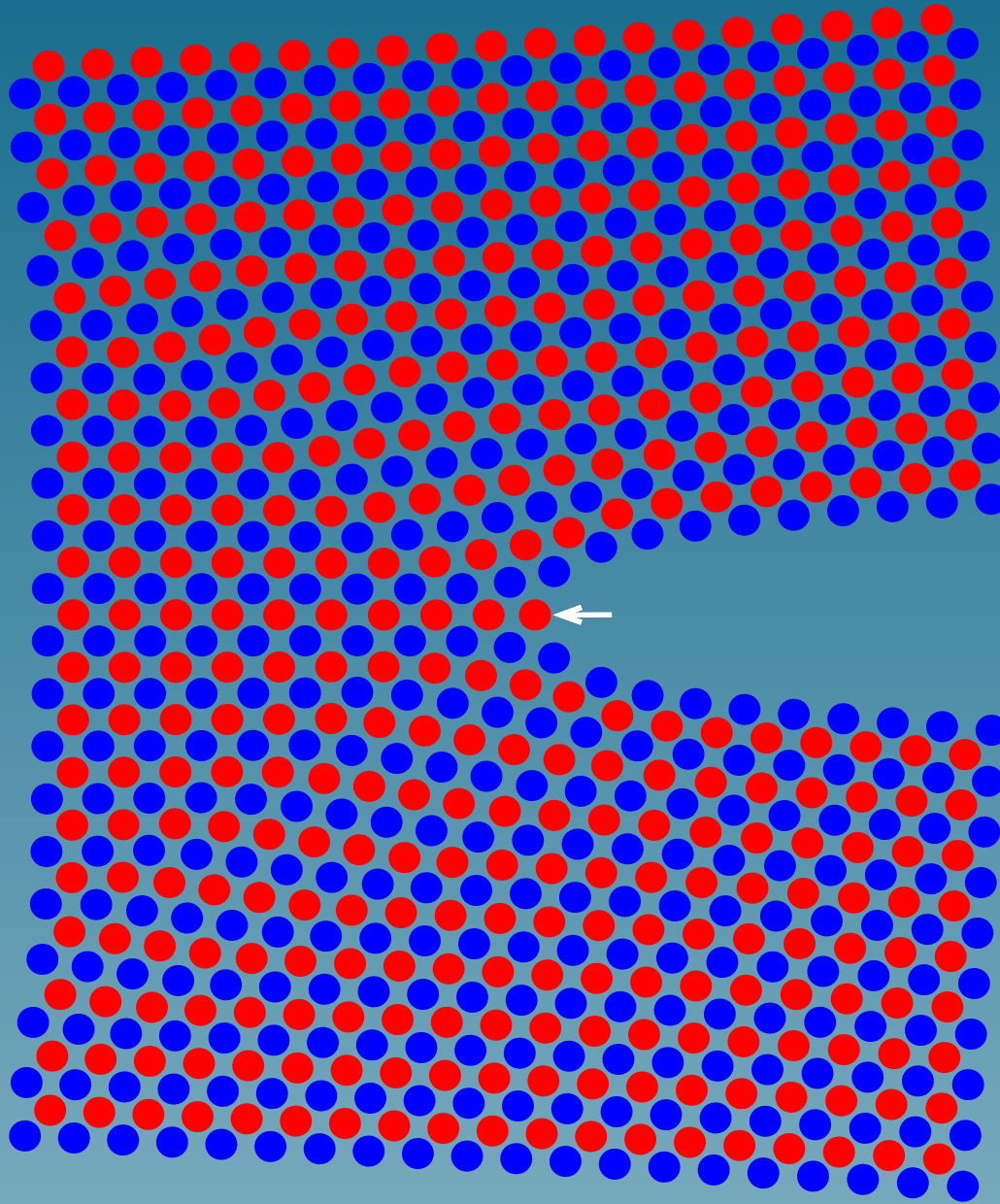
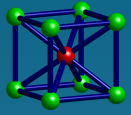




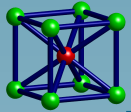
Příklad iniciace křehké trhliny při 0 K

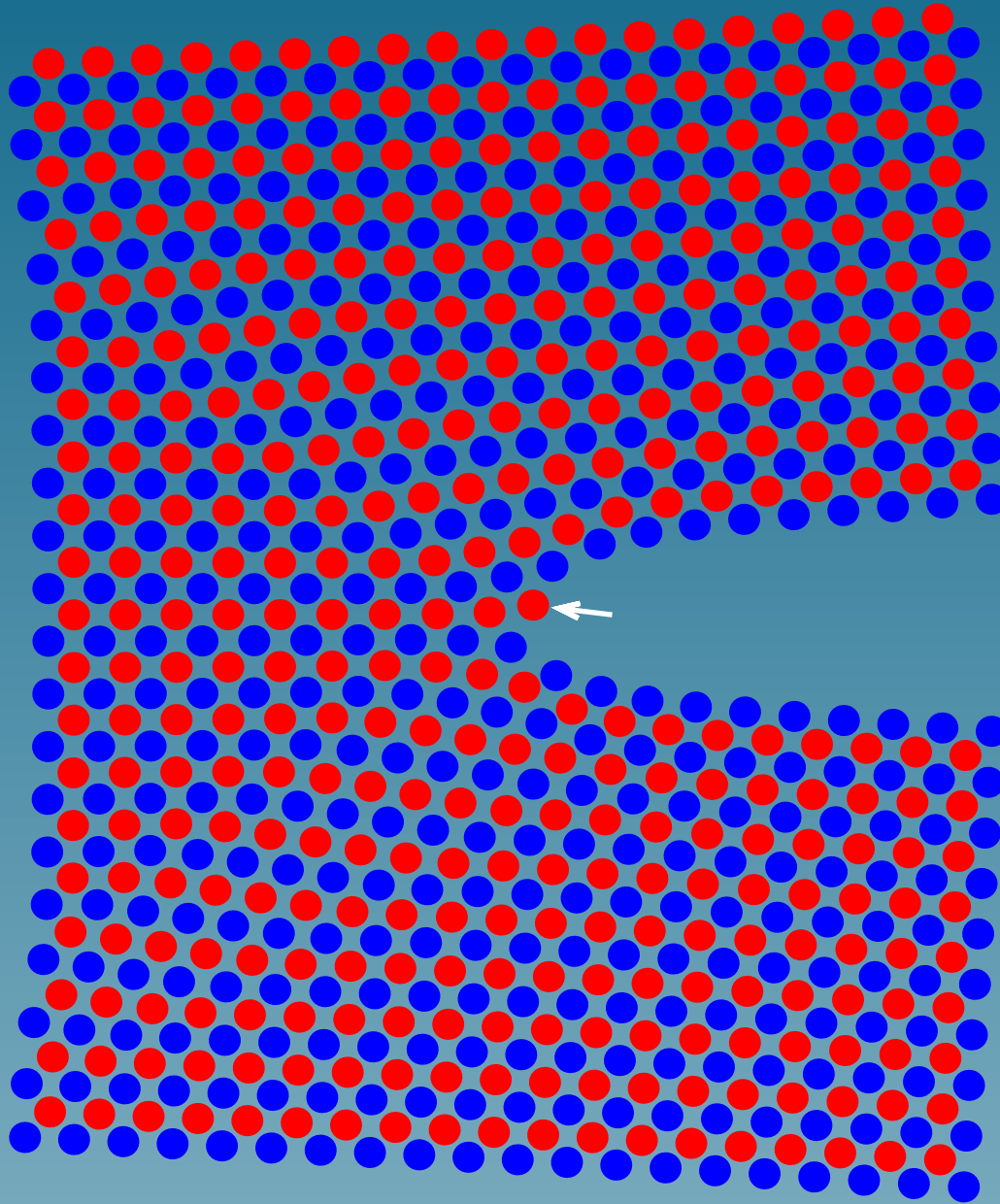
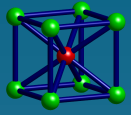
- iniciace v časovém kroku 23 340
- ve střední rovině krystalu



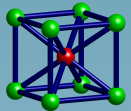


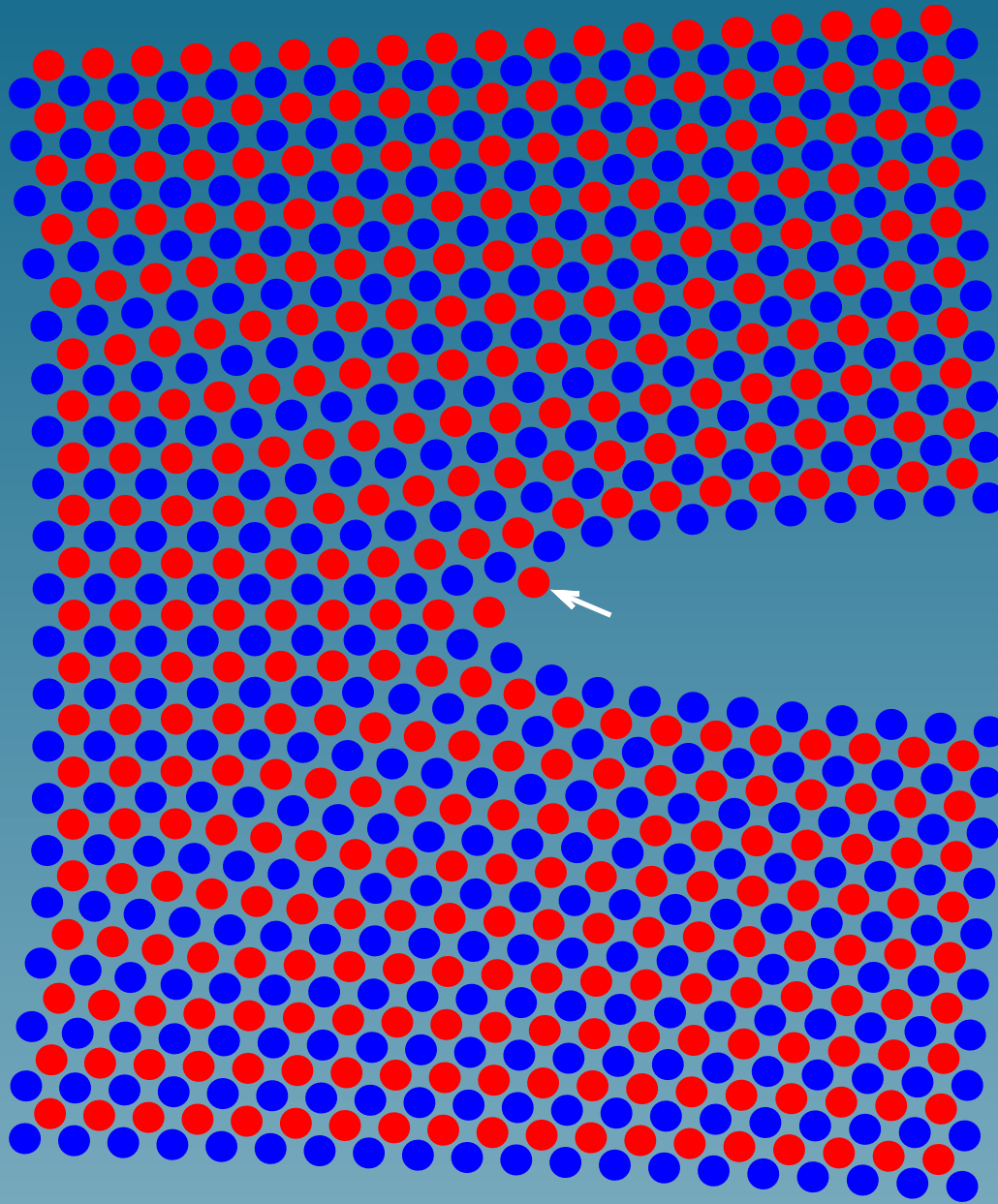
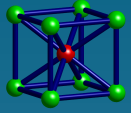
Časový krok:
23300



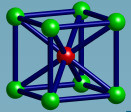


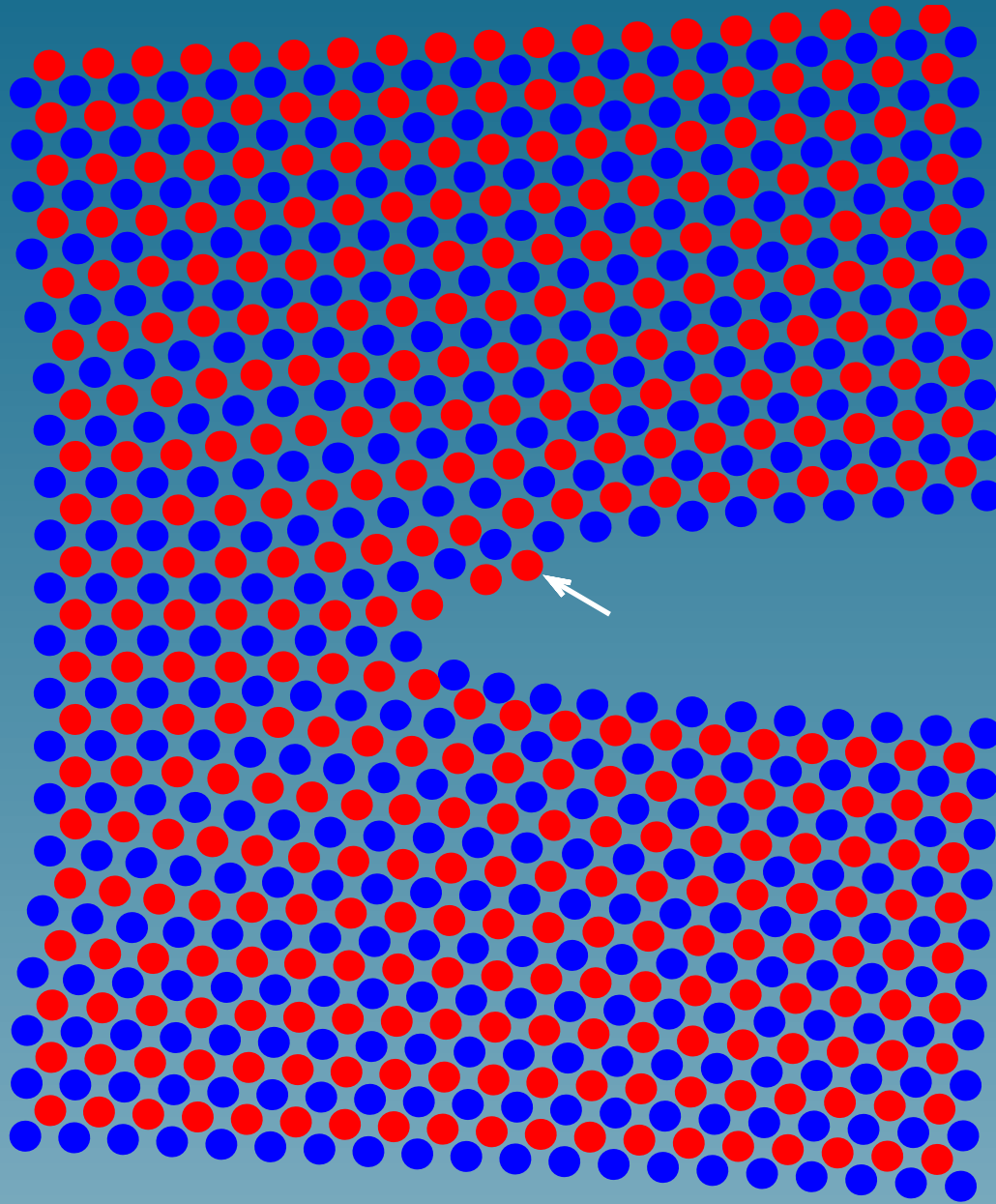
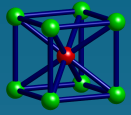
Časový krok:
23350



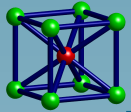


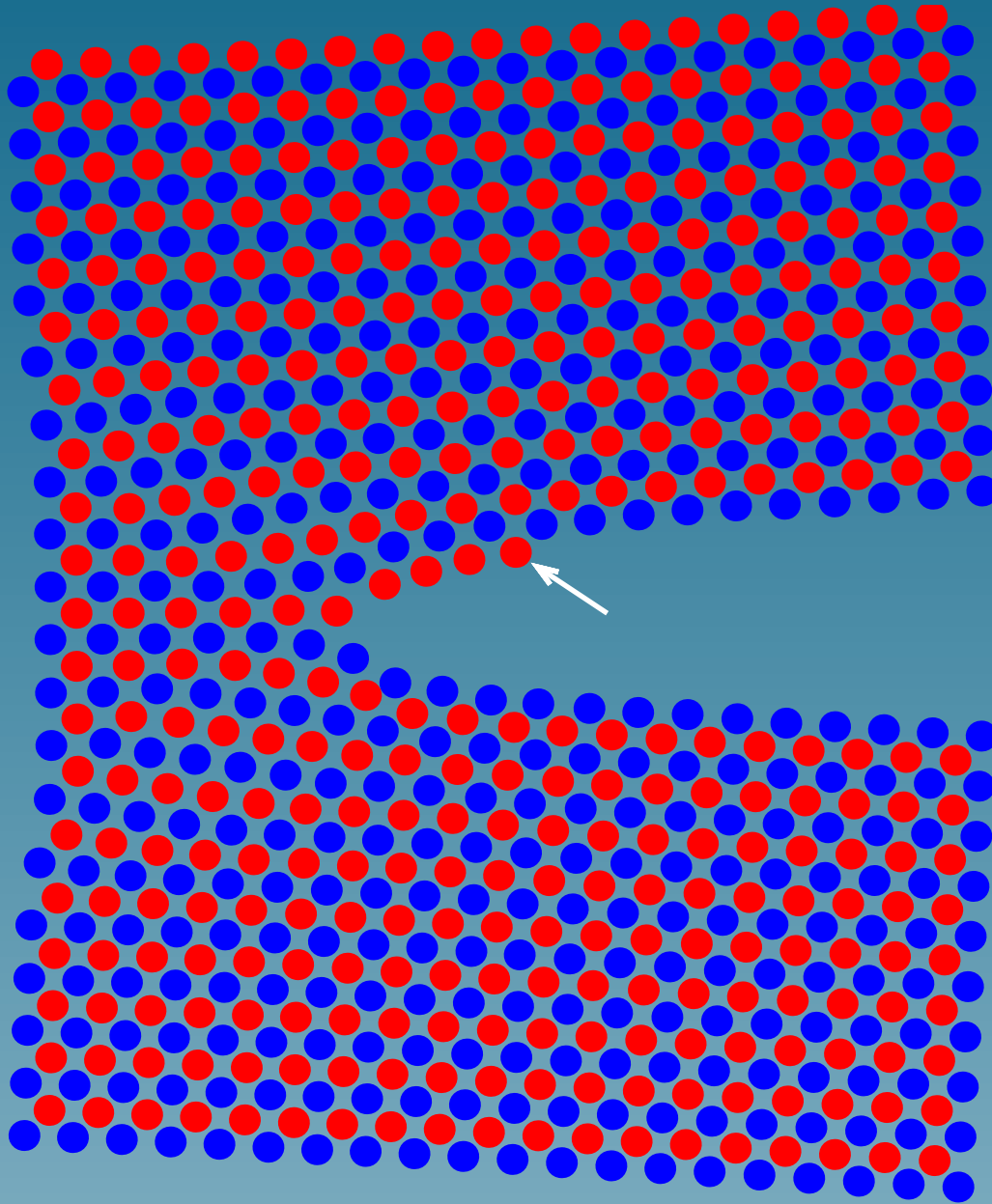
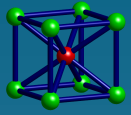
Časový krok:
23400



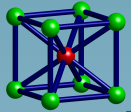


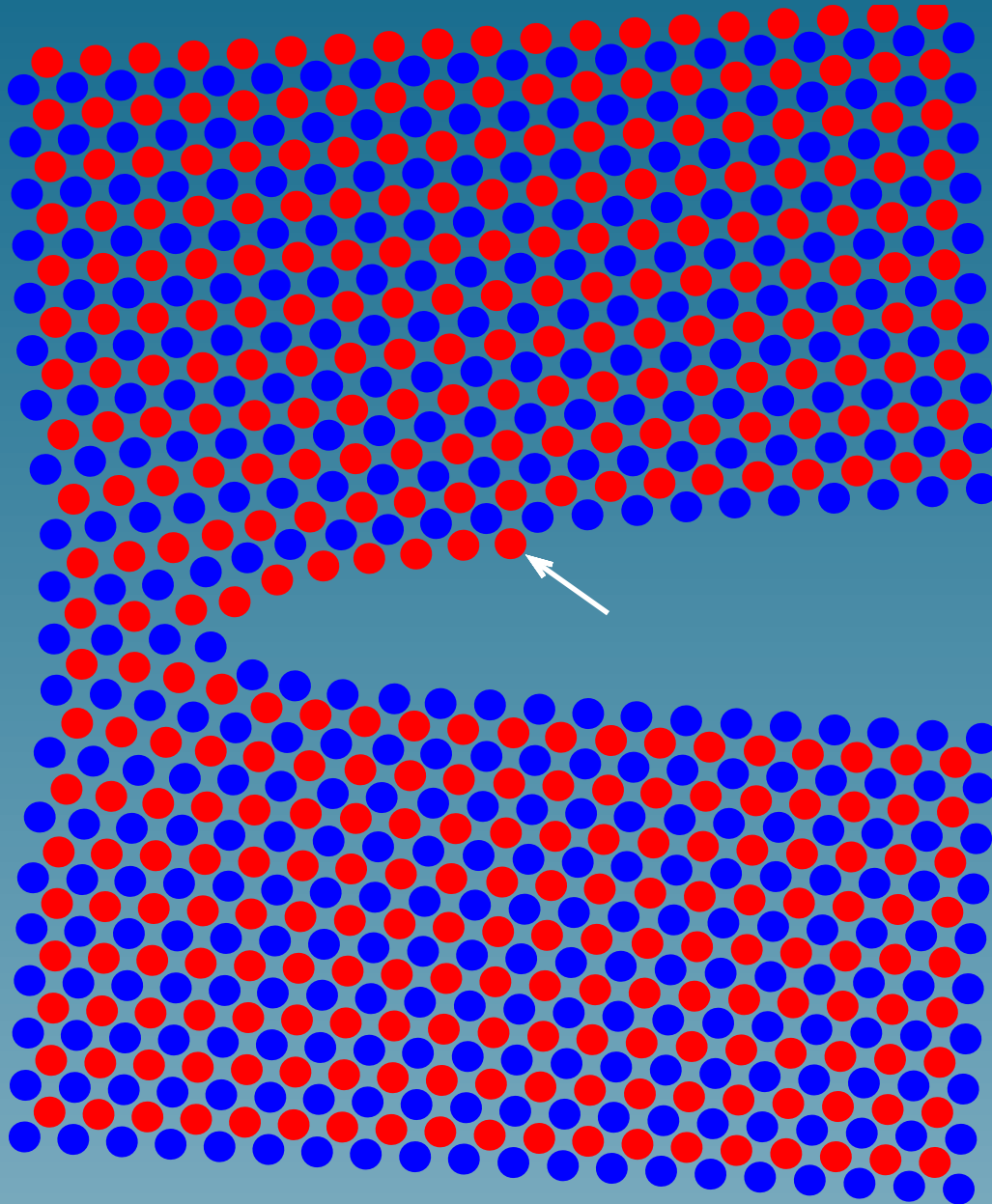
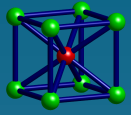
Časový krok:
23450



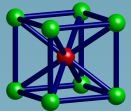


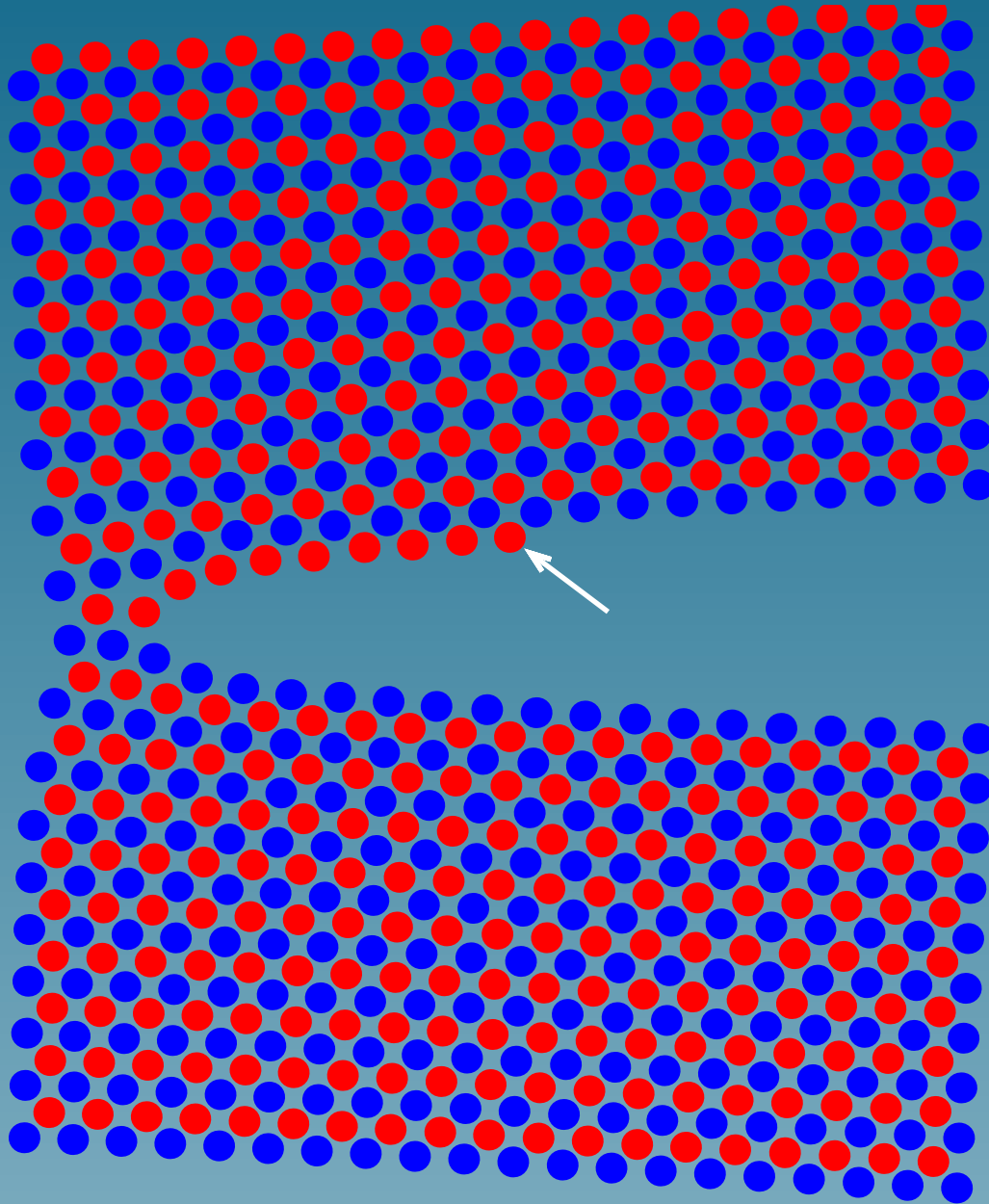
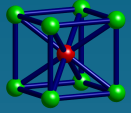
Časový krok:
23500



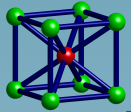


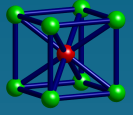
Časový krok:
23550



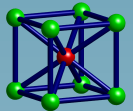
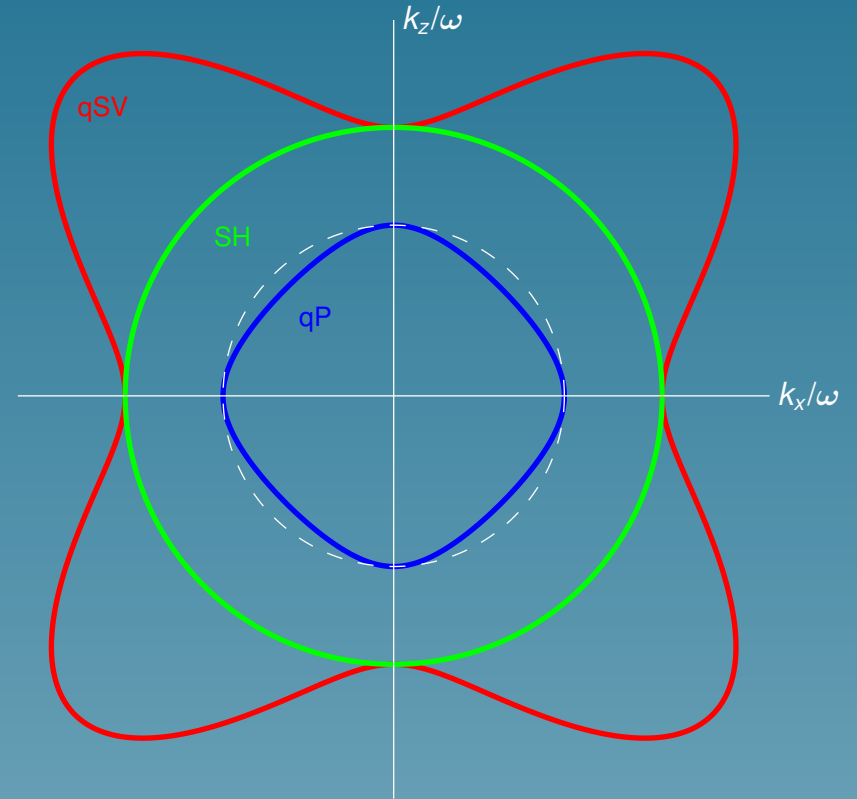
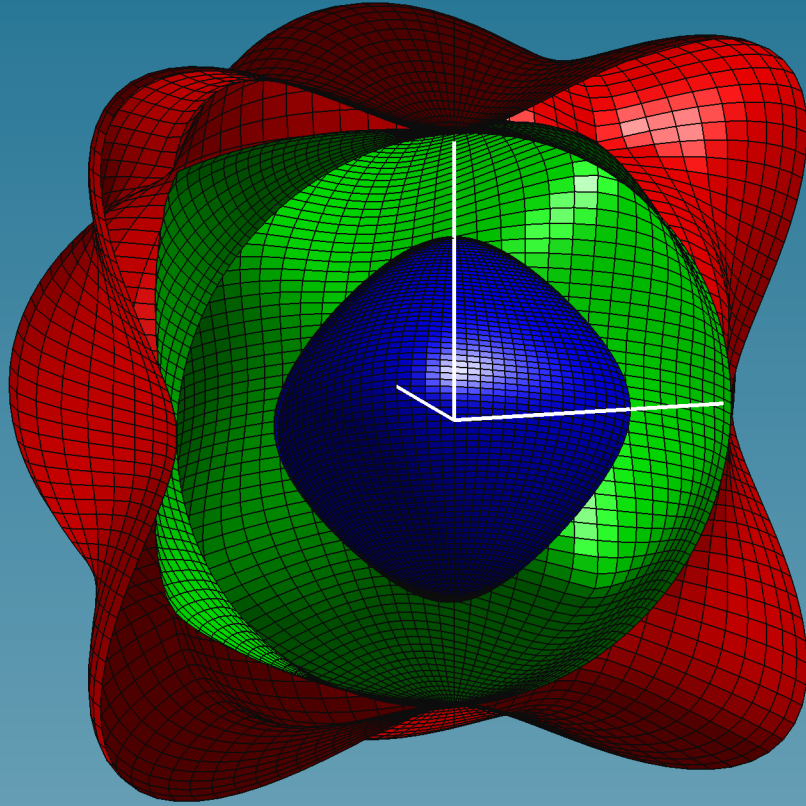


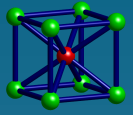
Časový krok:
23600





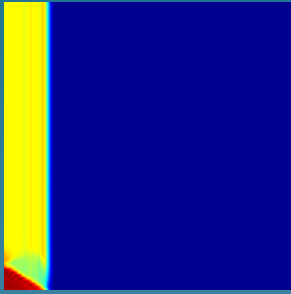
Šíření vln v krystalu bcc železa



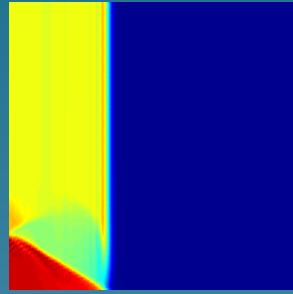


Rychlý celoplošný tah na vnější stěně krychlového vzorku

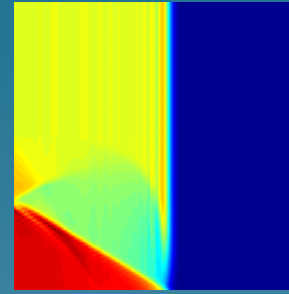
$t = 2 \text{ ps}$



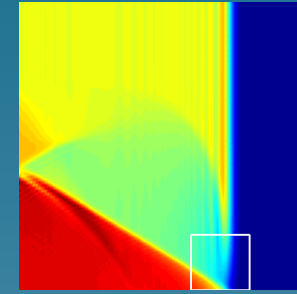
$t = 4 \text{ ps}$



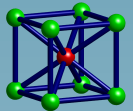
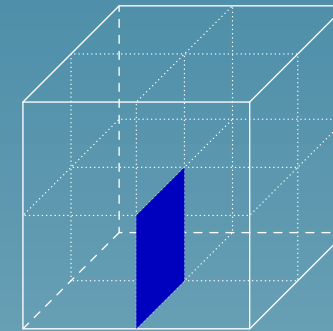
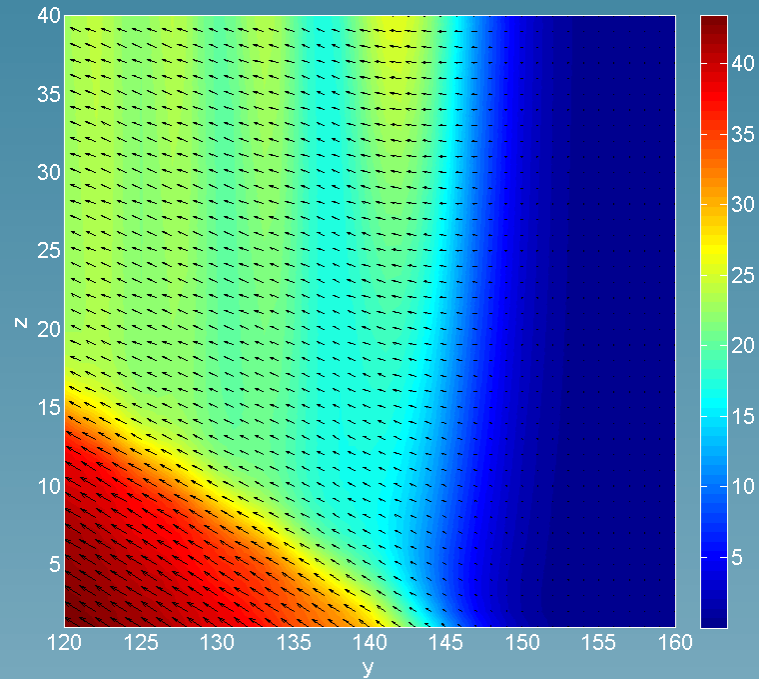
$t = 6 \text{ ps}$



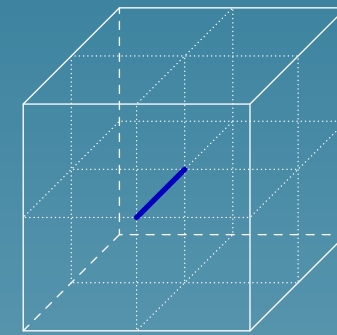
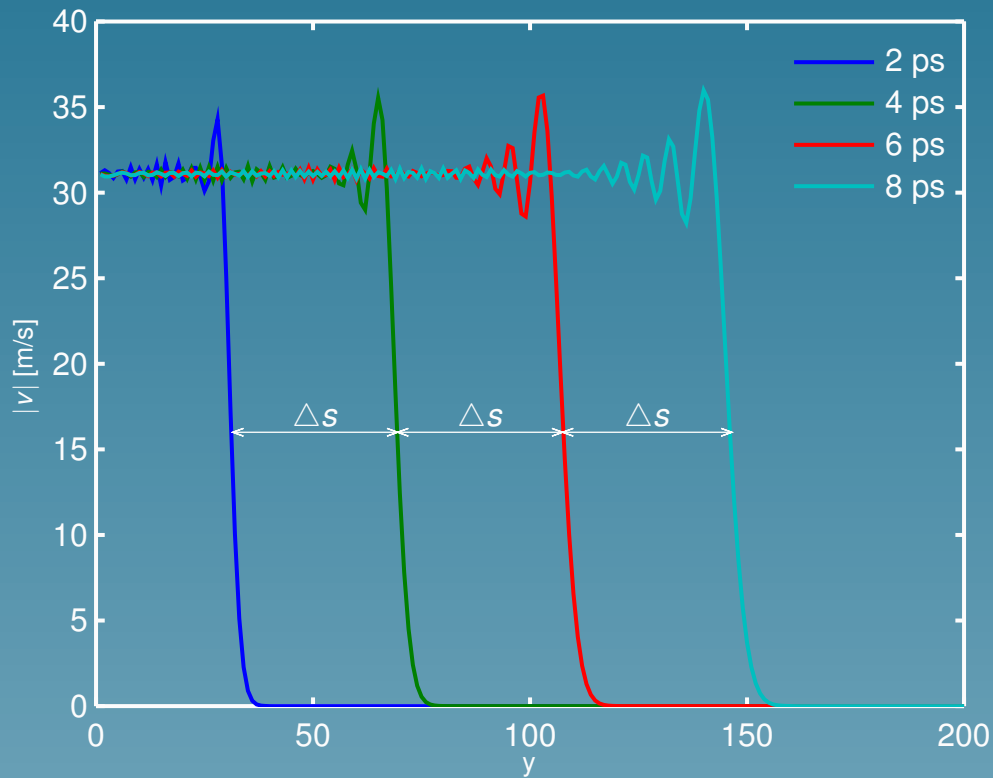
$t = 8 \text{ ps}$

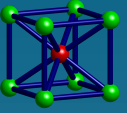


$t = 8 \text{ ps}$ (detail)



Moduly rychlostí jednotlivých atomů na ose y v simulačních časech 2, 4, 6 a 8 ps



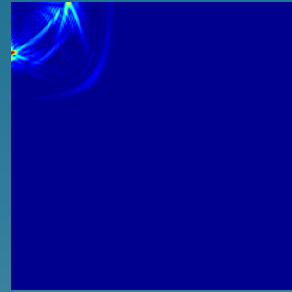


Rychlý lokální tah uprostřed vnější stěny vzorku

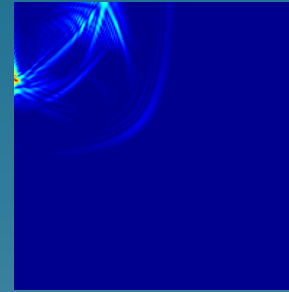
$t = 2$ ps



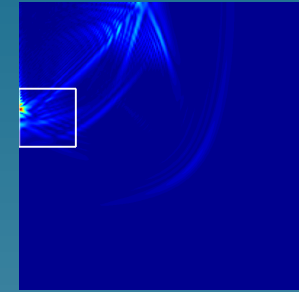
$t = 4$ ps



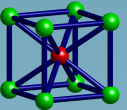
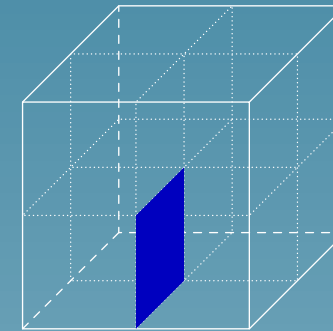
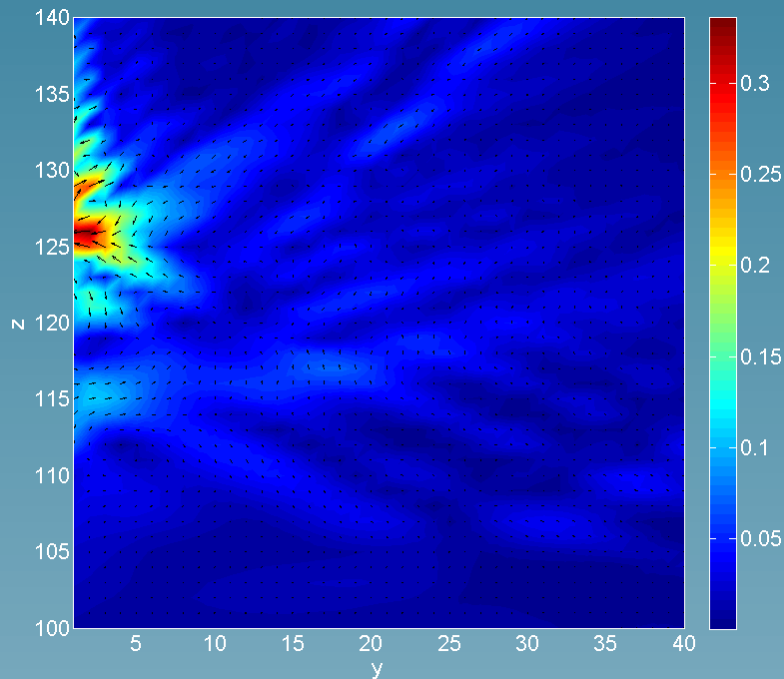
$t = 6$ ps



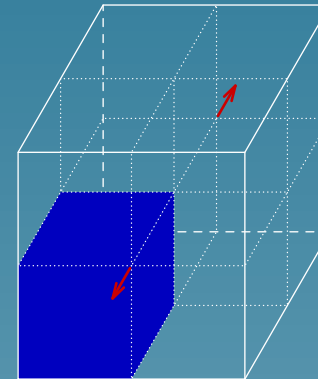
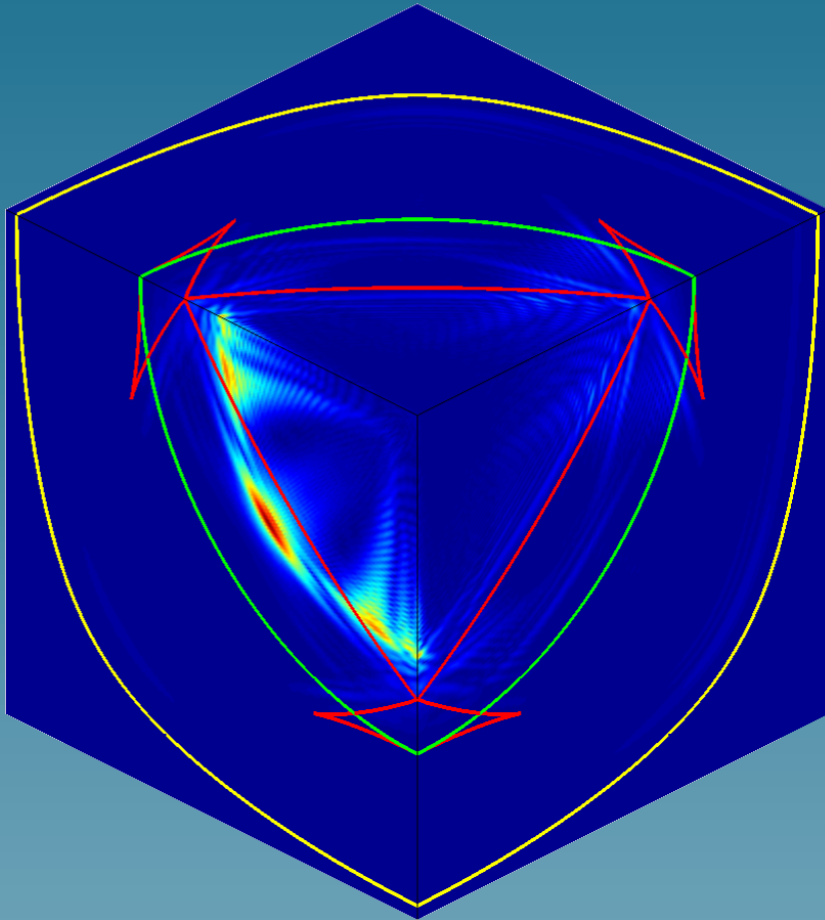
$t = 8$ ps

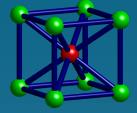


$t = 8$ ps (detail)

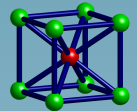
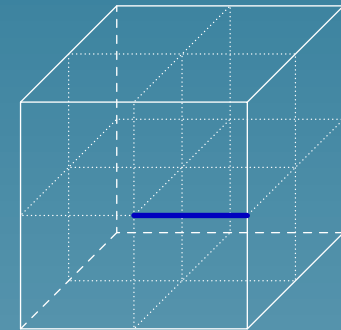
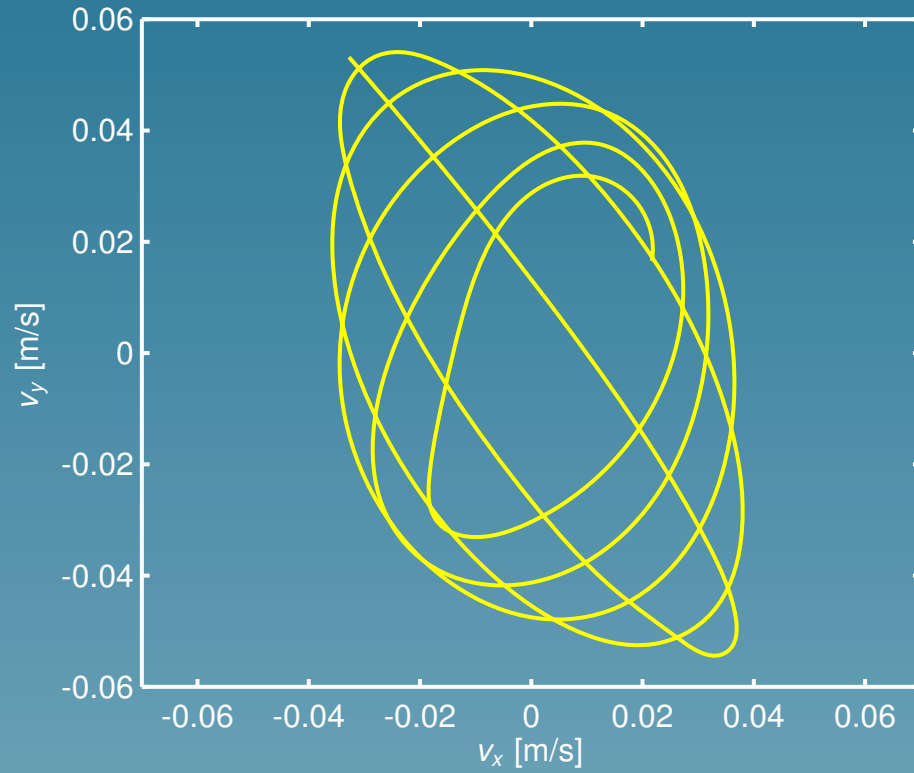


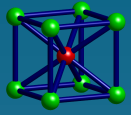
Lokální tah uprostřed vnější stěny v čase 10 ps





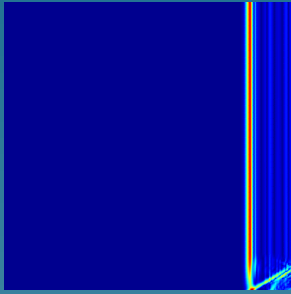
Průběh v_x vers. v_y atomu na povrchu vzorku



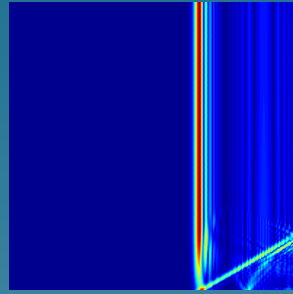


Rychlá celoplošná exploze v centrální rovině vzorku

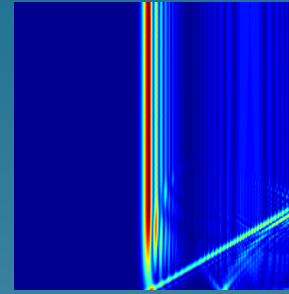
$t = 2$ ps



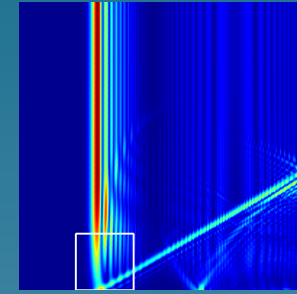
$t = 4$ ps



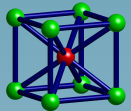
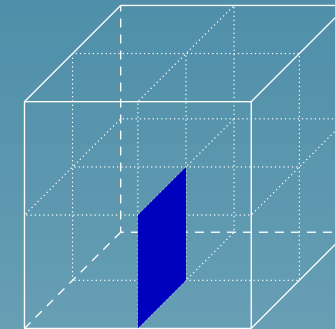
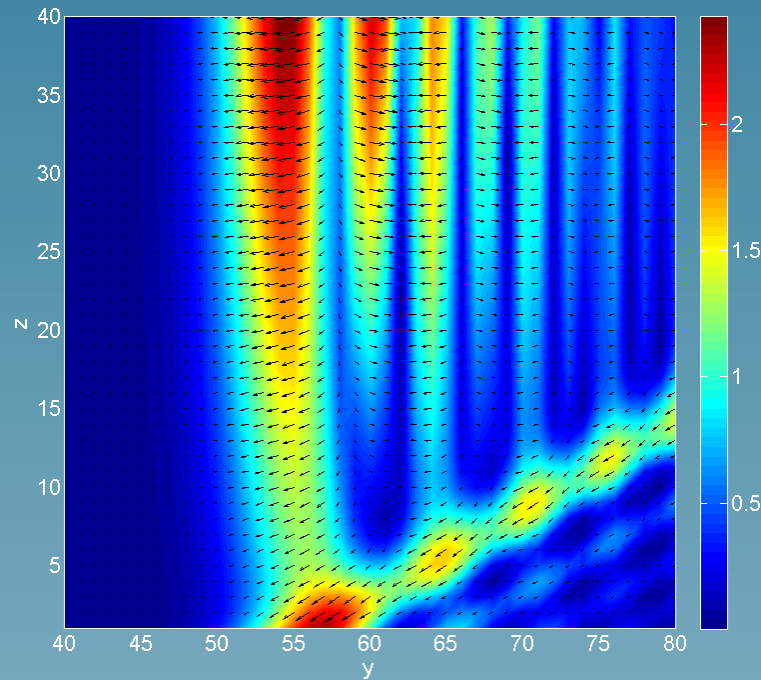
$t = 6$ ps

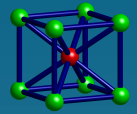


$t = 8$ ps



$t = 8$ ps (detail)

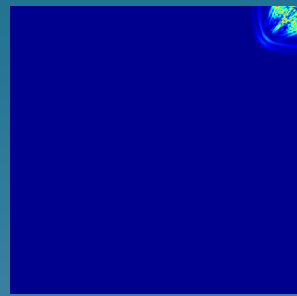




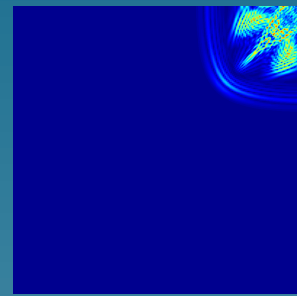
Rychlá exploze ve středu krychlového vzorku

Molekulární dynamika v materiálovém výzkumu

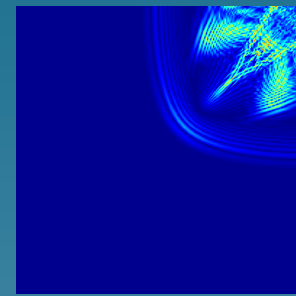
$t = 2 \text{ ps}$



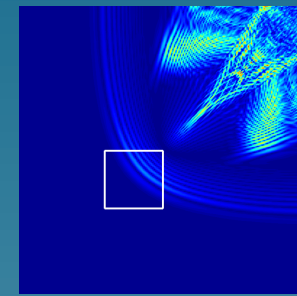
$t = 4 \text{ ps}$



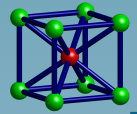
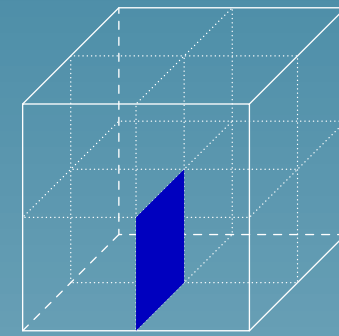
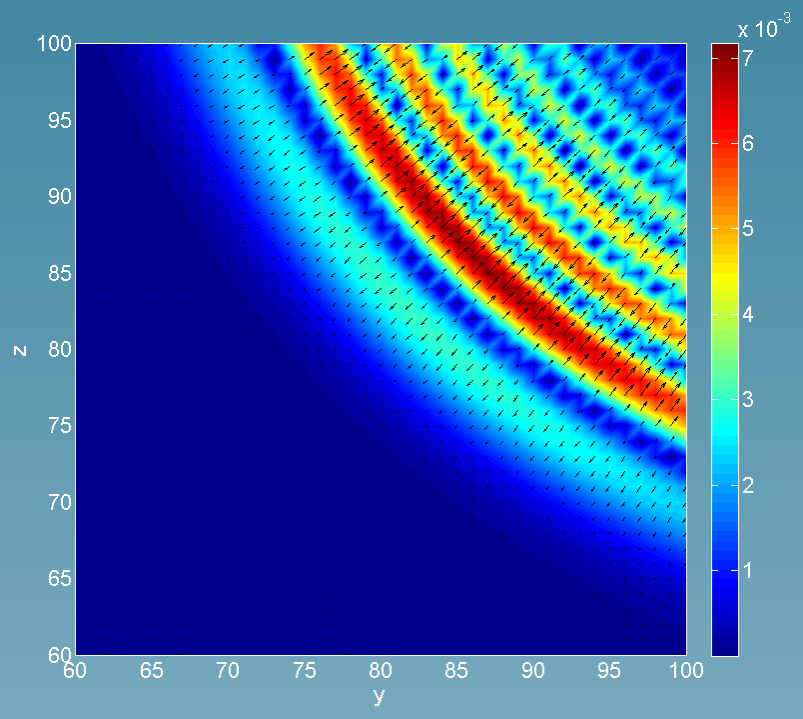
$t = 6 \text{ ps}$

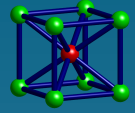


$t = 8 \text{ ps}$



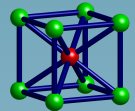
$t = 8 \text{ ps}$ (detail)

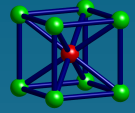




Co nás čeká?

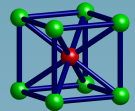
- porovnání rozptylu vln napětí v perfektních krystalech a v krystalech s defekty,
- zjištění možnosti detekce pre-existujících kavit a precipitátů nanoskopických rozměrů,
- použití těchto informací pro akustickou nedestruktivní detekci defektů v nano-strukturovaných materiálech,
- MD-studie vlivu Cu-nanočástic na stabilitu trhlin a nanokavit v 3D krystalech α -železa,
- výzkum tzv. měděného křehnutí konstrukčních feritických ocelí, včetně starších reaktorových ocelí.

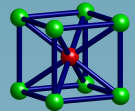
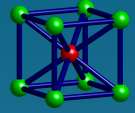




Možnosti ve výuce

- akreditace nového předmětu, který by se zabýval MD,
- vedení diplomových a doktorských prací,
- větší zapojení studentů strojní fakulty do předmětu TDK/FAV.





OBSAH

Co to je?

Historie

Aplikace

Místo

Aparát

Lenardův–Jonesův potenciál

Simulace – kroky

Finnisův–Sinclairův potenciál

Pohybové rovnice

Metoda centrálních diferencí

Paralelní úloha

Paralelní program

Kde se počítalo

Vizualizace

Testovací úlohy

T R H L I N Y V L N Y

Co nás čeká?

Možnosti ve výuce