

В настоящей работе описан алгоритм по моделированию поликристаллических веществ в комплексе МД (Молекулярная Динамика), являющийся развитием программы МДП [1], а также представлены результаты численных расчетов пробития и прохождения ударной волны в моно- и поли- кристаллах.

### Внутреннее строение кристаллических веществ

Для описания внутреннего строения кристаллов используется понятие *кристаллическая решетка* – пространственная сетка, в узлах которой расположены частицы (атомы, ионы или молекулы) [2]. Кристаллическая решетка является математической абстракцией. В основе кристаллической решетки лежит элементарная ячейка, представляющая собой параллелепипед, простым перемещением которого в трех направлениях (вдоль трансляций) может быть построена пространственная кристаллическая решетка. Длины ребер параллелепипеда  $a$ ,  $b$ ,  $c$  и значения углов между его гранями  $\alpha_0$ ,  $\beta_0$ ,  $\gamma_0$  (рис. 1) характеризуют кристаллическую решетку кристалла.

В зависимости от величины и взаимной ориентации ребер элементарной ячейки возможно существование 14 типов кристаллических решеток (решетки Бравэ).

Наиболее типичные и реализованные в комплексе МД являются объемно-центрированные (ОЦК) и гранецентрированные кубические кристаллические решетки, гексагональная плотноупакованная (ГПУ) кристаллическая решетка (рис. 2). Для ОЦК и ГЦК  $a = b = c = a_0$ ,  $\alpha_0 = \beta_0 = \gamma_0 = 90^\circ$ . ГПУ структура состоит из двух взаимопроникающих простых гексагональных решеток Бравэ ( $a = b = a_0$ ,  $c = c_0$ ,  $\alpha_0 = \beta_0 = 90^\circ$ ,  $\gamma_0 = 120^\circ$ ), смещенных друг относительно друга следующим образом: по оси  $x$  – на  $a_0/2$ , по оси  $y$  – на  $a_0/3$ , по оси  $z$  – на  $c_0/2$ .

Расчеты по комплексу МД до недавнего времени в основном велись для веществ с идеальными кристаллическими решетками (монокристаллами). Однако в реальности инженеры имеют дело не с идеальными кристаллическими решетками, а с поликристаллическими конструкционными материалами. Поликристаллы представляют собой неидеальную упаковку частиц (рис. 3, 4), то есть произвольный набор случайно ориентированных монокристаллов. Каждое такое монокристаллическое зерно содержит в себе, по крайней мере, сотни частиц.

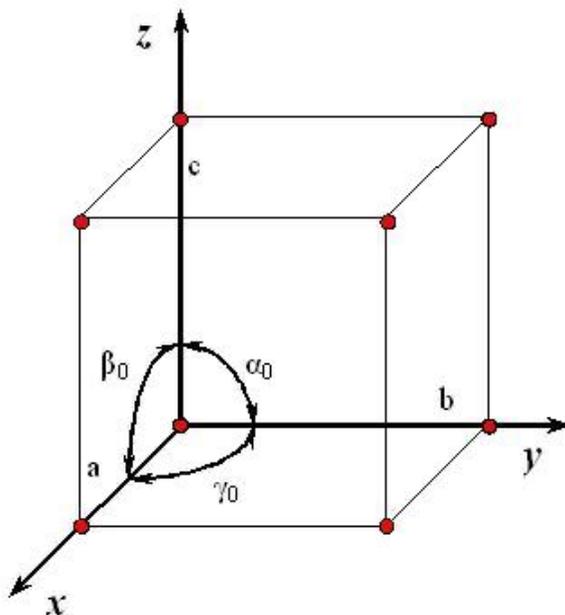


Рис. 1. Схематическое изображение кристаллической решетки

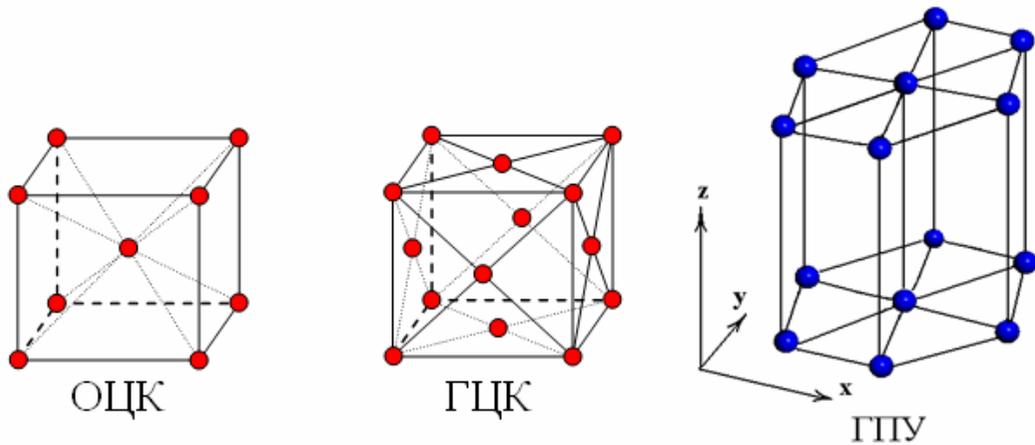


Рис. 2. Типы кристаллических решеток наиболее используемых в комплексе МД

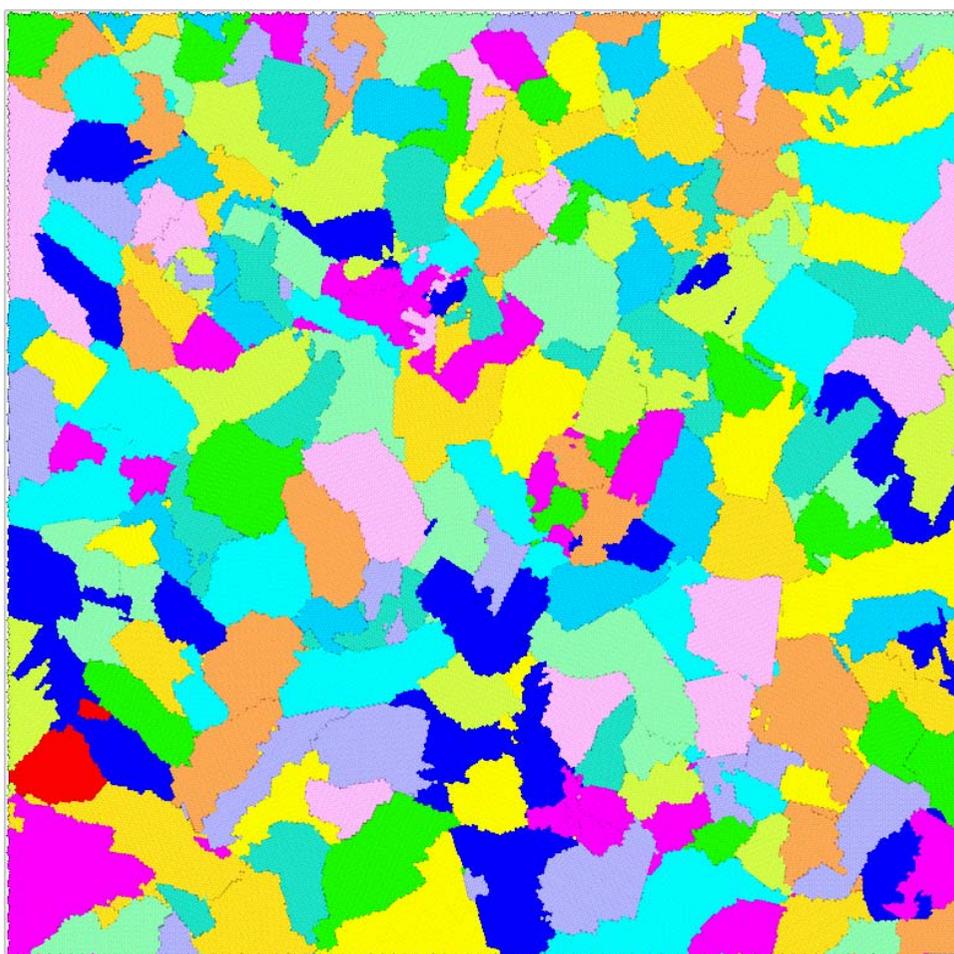


Рис. 3. Пример двухмерного поликристалла, каждому цвету соответствует отдельное монокристаллическое зерно

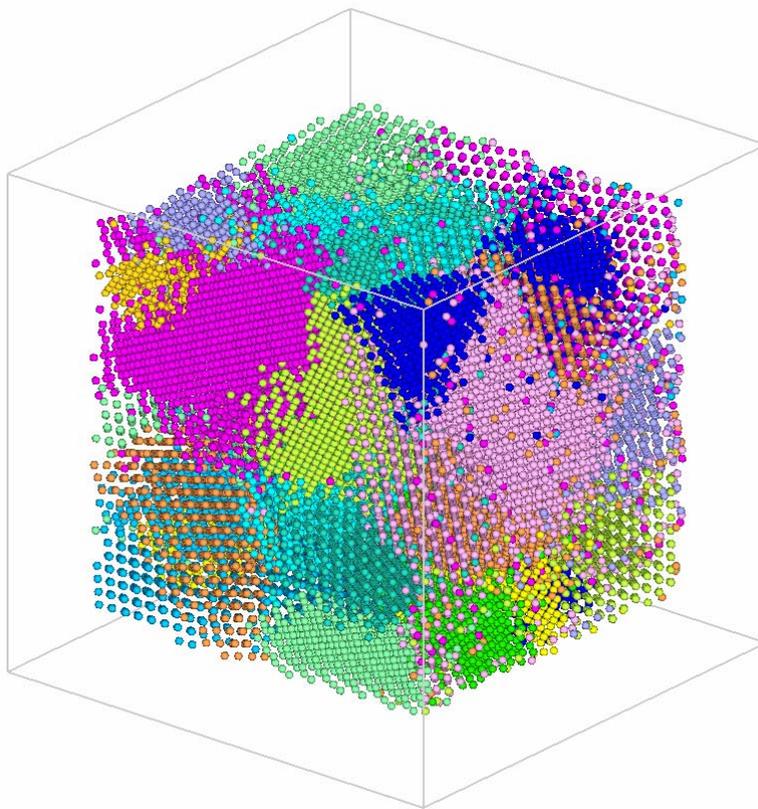


Рис. 4. Пример трехмерного поликристалла, каждому цвету соответствует отдельное монокристаллическое зерно

## Поликристаллические вещества и их построение

При моделировании макроскопического поведения твердых тел основная возникающая проблема, состоит в том, что регулярные упаковки частиц приводят к анизотропным моделям и свойствам материалов, которая заключается в том, что механические и физические характеристики в каждой точке тела являются функциями параметров направления. Подход в конструировании поликристаллических упаковок со случайным распределением ориентации монокристаллов позволяет решить эту проблему. Данный метод построения поликристаллов позволяет создать изотропные модели материалов, удовлетворяющих широкому спектру механических, термодинамических и физических свойств.

Существует много способов построения поликристаллических веществ: методом многогранников Вороного, методом последовательных релаксаций, метод роста монокристаллических зерен, метод свободной ячейки и т. д.

В комплексе МД имеется алгоритм построения поликристаллов методом многогранников Вороного. Суть этого метода в следующем: задается множество точек, являющихся центрами зерен, для которых строятся многогранники Вороного, где каждый многогранник рассматривается как монокристаллическое зерно. Далее происходит заполнение образованных зерен частицами идеальной кристаллической решетки,

которая повернута на произвольный угол. Многогранники Вороного – это выпуклые многогранники, по форме приближающиеся к сфере, но при этом имеющие разнообразную форму, объем и число граней. Зерна поликристаллов будут иметь всегда форму выпуклых многогранников в методе Вороного, в отличие от зерен, получаемых методом роста монокристаллических зерен, где монокристаллические зерна получают всевозможно различной формы и объема.

Для ускорения счета в комплексе МД используется сеточный подход и список связанных атомов. Размер ячейки сетки фиксированный и связан с радиусом обрезания потенциала. Для случая идеальной кристаллической решетки, каждая ячейка сетки заполняется частицами по отдельности. В параллельном режиме каждый процессор отвечает за свой набор ячеек, распределение ведется в соответствии с геометрической декомпозицией. Такой способ заполнения ячеек частицами используется и в методе многогранников Вороного, где добавляется проверка на попадание частицы в зерно. Но для построения поликристалла методом роста монокристаллических зерен было решено использовать другой подход к заполнению ячеек, потому что заполнение происходит нестандартно (случайным образом) и необходимо правильно сформировать список связанных частиц.

Таким образом, в комплексе МД был разработан и реализован алгоритм построения поликристалла методом роста монокристаллических зерен. Суть метода заключается в следующем:

1. в каждой из областей, где задается поликристаллическая структура, случайным образом задаются координаты центров зерен;

2. для каждого зерна выбирается произвольный угол поворота идеальной кристаллической решетки;

3. на каждой итерации выбирается произвольное зерно, для которого выбирается случайное направление роста, с учетом угла поворота, идеальной кристаллической решетки;

4. в направлении роста ставятся частицы, при этом для каждой частицы:

4.1. проверяется, попадает ли частица в область с поликристаллическим заполнением (в случае многообластной задачи):

4.1.1. если попадает, то определяется номер локальной ячейки по координатам частицы,

4.1.2. проверяется, нет ли рядом близко стоящих частиц, то есть расстояние, до которых меньше чем  $a_0/2$ . Для этого вычисляем расстояние до всех остальных частиц в ячейке, если расстояние получилось меньше  $a_0/2$ , то частицу не ставим. При этом также рассматриваются частицы из ближайших 8 или 26 соседних ячеек для двух- и трех- мерного случая соответственно,

4.1.3. если вышеперечисленные условия выполнены, то начинается формирование информации

о частице и ячейке: координаты частицы, тип частицы, количество частиц в ячейке, указатель на первую и последнюю частицу в ячейке, а так же формируется список связанных частиц;

5. итерации продолжаются до тех пор, пока не будет заполнена счетная область с поликристаллом.

Центры зерен поликристалла распределяются равномерно, так как датчик псевдослучайных чисел языка программирования Фортран имеет равномерное распределение. Также проводимые тесты показали, что распределение размеров зерен в поликристалле равномерное. Равномерное распределение показано на рис. 5.

### Результаты сравнения времени построения поликристаллических веществ методом Вороного и методом роста монокристаллических зерен

В кластере меди размером  $50 a_0 \times 50 a_0 \times 50 a_0$  задается 600 зерен, тип решетки ГЦК. Количество частиц в кластере  $\approx 450000$ . В таблице приводятся времена заполнения кластера.

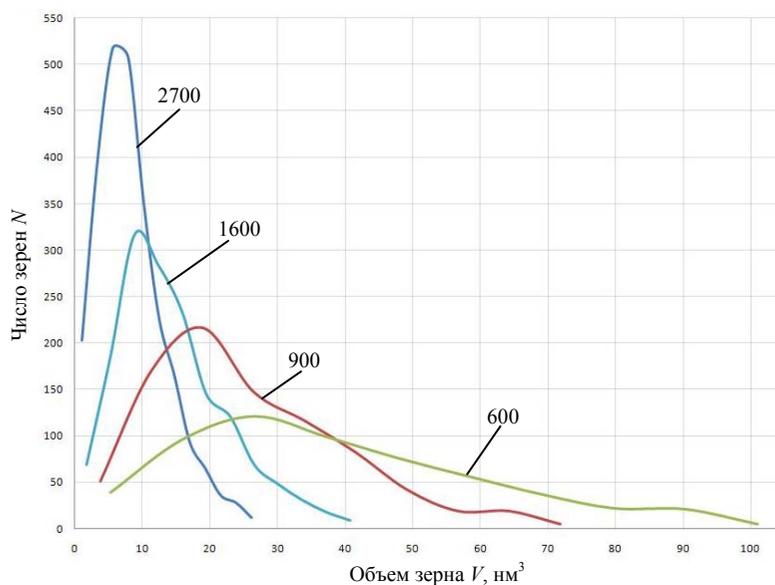


Рис. 5. Распределение размеров зерен в поликристаллическом образце размером  $50 a_0 \times 50 a_0 \times 50 a_0$

Таблица 1

Время заполнения поликристаллического образца методами Вороного и монокристаллическим ростом

Число процессоров	Время заполнения методом Вороного, с	Время заполнения методом роста монокристаллических зерен, с
1	200671,7	38,9
8	24510,7	84,8
16	13647,4	103,6
32	11072,3	144,1
64	6210,4	185,8
128	2586,9	171,2

Из приведенной таблицы видно, что время, требуемое на заполнение кластера меди методом роста монокристаллических зерен гораздо меньше чем методом Вороного.

### Двухмерные расчеты по прохождению ударной волны в моно- и поликристаллах с гексагональной упаковкой частиц

В образце меди (Cu), масса атома 63,546 АЕМ, с размерами  $400 \times 100$  элементарных ячеек,  $a_0 = 10 \text{ \AA}$ , используется потенциал Морзе с параметрами  $U_0 = 1,361 \text{ Эв}$ ,  $r_0 = 10 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 0,5233 \frac{1}{\text{А}}$ . Направление ударной волны показано на рис. 6.

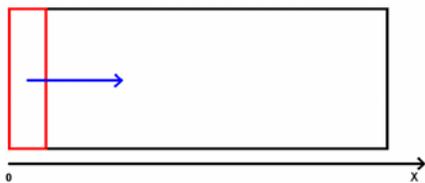


Рис. 6. Направление ударной волны

После этапа релаксации, запускается ударная волна. Двум слоям частиц навязывается скорость ударника 0,5 км/с. По направлению ОУ действуют

периодические граничные условия, по направлению ОХ свободная граница.

Из рис. 7 видно, что фронт ударной волны в монокристалле распространяется быстрее, а анализ результатов расчетов показал, что скорость ударной волны в поликристаллическом образце приблизительно на 20 % меньше, что свидетельствует о влиянии межзеренных границ на скорость распространения ударной волны.

### Моделирование высокоскоростного осколочного воздействия на многослойную преграду

Физическая картина моделирования пробивания преграды представлена на рис. 8, где  $V_0 = 4,2 \text{ км/с}$ .

Для задачи пробития двухслойной преграды в файле начальных данных комплекса МД задаются три трехмерные области: куб (из которого вырезается шар) и две пластины ( $40 \text{ см} \times 40 \text{ см}$ ). Размер частицы  $r_0 = 500 \text{ мкм}$ , для ударника упаковка частиц – ГЦК (постоянная решетки  $a_0 = 707,1 \text{ мкм}$ ), а для материалов преград – поликристалл, состоящий из ГЦК зерен ( $a_0 = 707,1 \text{ мкм}$ ). Линейный размер одного зерна был выбран  $\sim 3 \text{ мм}$ , и соответственно, в слое текстолита было задано 35000 зерен, а в слое алюминия 18000 зерен.

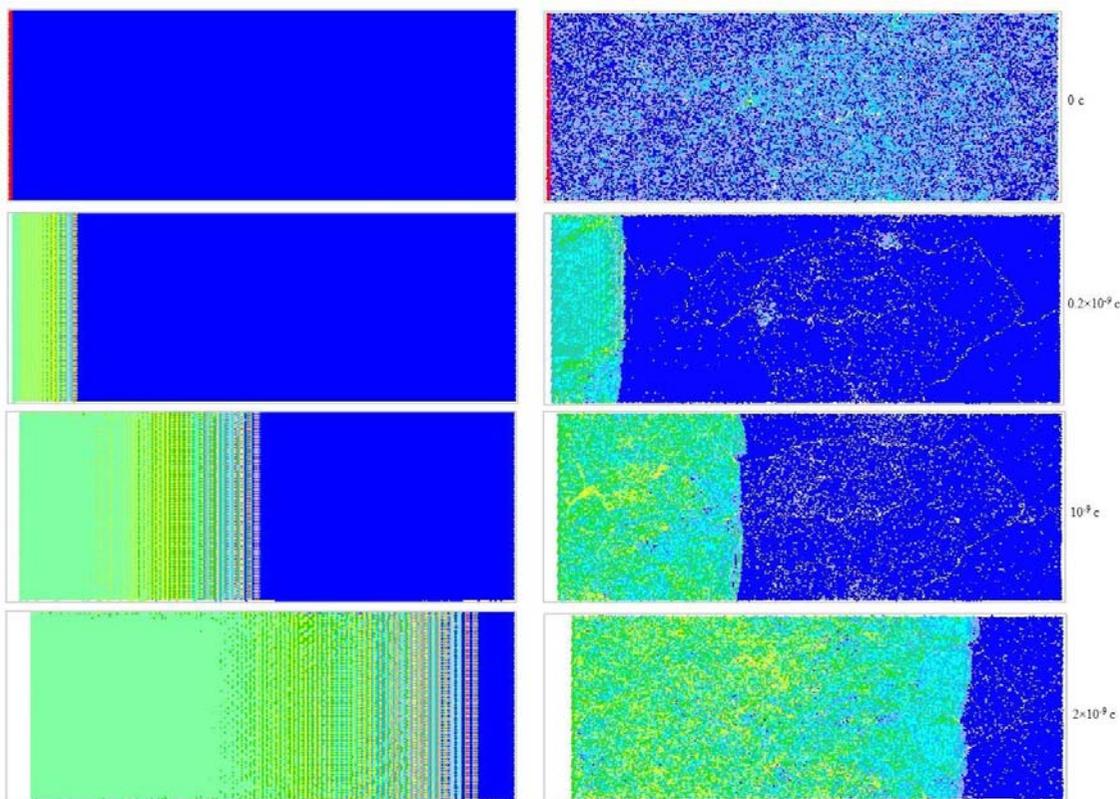


Рис. 7. Этапы прохождения ударной волны в поликристаллическом и монокристаллическом образцах

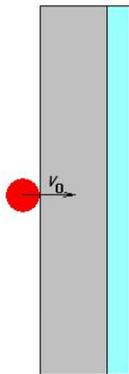


Рис. 8. Начальная геометрия задачи пробития

Результаты полей плотностей для задачи пробития преград с различными внутренними структурами представлены на рис. 9 и 10. На рис. 9 видна анизотропия материала, которая приводит к отверстию не круглой формы, как в эксперименте.

На основании полученных численных результатов задачи с высокоскоростным воздействием на многослойную преграду видно, что использование поликристалла позволило получить изотропную модель вещества, которое привело к более качественному определению формы и размера полученного отверстия и лучшему согласию с экспериментальными значениями.

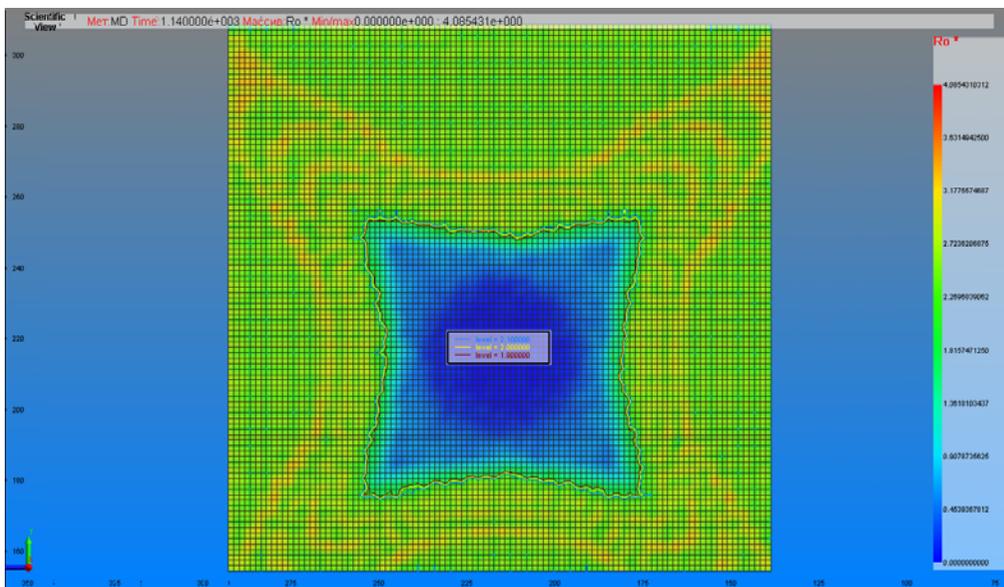


Рис. 9. Поле плотности в сечении плоскостью YZ алюминия с монокристаллическим заполнением, с изолиниями уровня плотности, на конечный момент времени

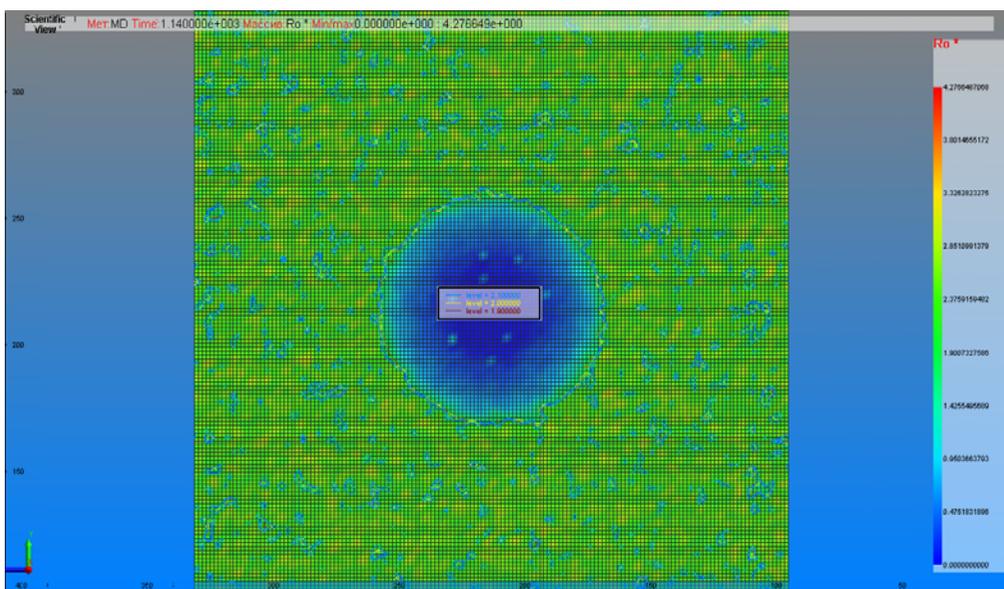


Рис. 10. Поле плотности в сечении плоскостью YZ алюминия с поликристаллическим заполнением, с изолиниями уровня плотности, на конечный момент времени

## Заключение

Процессы релаксации полученных структур проводились на гибридных вычислительных системах с применением арифметических ускорителей, что позволило значительно сократить длительность вычислений.

Задание начальных данных в виде поликристаллов позволяет моделировать изотропные материалы, которые дают качественное согласие с результатами экспериментов, исключая влияние анизотропии материала, являющейся следствием идеальной упаковки частиц.

Хотя и алгоритм плохо распараллеливается, но он позволяет заполнять область быстрее, чем имеющимся в комплексе МД с использованием ячеек Вороного.

Несомненной ценностью данного алгоритма является построение более реалистичной модели поликристалла, так как зерна в нем получаются самой разнообразной формы и объема.

## Литература

1. Барабанов Р. А., Бутнев О. И., Воронин Б. Л. и др. Программа МДП-СОВЦ решения задач молекулярной динамики на параллельных ЭВМ с распределенной памятью // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 2001. Вып. 1. С. 1–16.
2. Кормилицын О. П., Шукейло Ю. А. Механика материалов и структур нано- и микротехники. М.: Академия, 2008.