



**ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ**  
**ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ**  
**ΤΟΜΕΑΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΤΩΝ ΚΑΤΕΡΓΑΣΙΩΝ**

**ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ:**

*Η μέθοδος της Μοριακής Δυναμικής και οι εφαρμογές της σε  
κατεργασίες νανοκλίμακας*

Διπλωματική εργασία του φοιτητή Επαμεινώνδα Δουρίδα

Επιβλέπων: Καθ. Δ.Ε. Μανωλάκος



## Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά όλους τους Καθηγητές μου κατά τη διάρκεια της φοίτησής μου στο Ε.Μ.Π. για τις γνώσεις που μοιράστηκαν, την προσοχή τους, την υποστήριξή τους και για το έργο που προσφέρουν όλα αυτά τα χρόνια.

Ιδιαίτερες ευχαριστίες στον Καθηγητή μου κύριο Δημήτρη Μανωλάκο για τη στήριξη και την καθοδήγηση που μου παρείχε όλα αυτά τα χρόνια εντός και εκτός αμφιθεάτρων, καθώς και για την εμπιστοσύνη που μου έδειξε αναθέτοντάς μου αυτό το θέμα στα πλαίσια της διπλωματικής μου εργασίας.

Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω το διδακτορικό ερευνητή Νίκο Κάρκαλο, για τη βοήθεια και την καθοδήγησή του κατά την εκπόνηση αυτής της εργασίας, η συμβολή του οποίου έπαιξε καθοριστικό ρόλο.

Τέλος, ένα τεράστιο ευχαριστώ στους γονείς μου και στα αδέρφια μου για την ατέρμονη υποστήριξή τους, την αγάπη τους και την εμπιστοσύνη τους στο πρόσωπό μου.

Νώντας Δουρίδας  
Αθήνα, Οκτώβριος 2016

## Περίληψη

Πραγματοποιούμε προσομοιώσεις σε ηλεκτρονικό υπολογιστή, με την ελπίδα για την κατανόηση των ιδιοτήτων των συγκροτημάτων των μορίων όσον αφορά τη δομή τους και τις μικροσκοπικές αλληλεπιδράσεις μεταξύ τους. Αυτό χρησιμεύει ως συμπλήρωμα των συμβατικών πειραμάτων, δίνοντάς μας τη δυνατότητα να μάθουμε κάτι νέο, κάτι που δεν μπορεί να βρεθεί με άλλους τρόπους. Οι δύο κύριες οικογένειες της τεχνικής προσομοίωσης είναι αυτές της μοριακής δυναμικής (MD, από την αγγλική ορολογία Molecular Dynamics) και του Μόντε Κάρλο (MC, Monte Carlo κατά αντιστοιχία με τα προηγούμενα). Επιπλέον, υπάρχει μια ολόκληρη γκάμα υβριδικών τεχνικών που συνδυάζουν χαρακτηριστικά και από τις δύο αυτές τεχνικές. Η παρούσα διπλωματική εργασία θα επικεντρωθεί στην τεχνική προσομοίωσης Molecular Dynamics (MD). Το προφανές πλεονέκτημα της MD απέναντι στην MC είναι ότι δίνει μια άποψη για τις δυναμικές ιδιότητες του συστήματος, τους συντελεστές μεταφοράς, τις εξαρτώμενες από τον χρόνο αποκρίσεις σε διαταραχές και τις ρεολογικές ιδιότητες .

Η προσομοίωση στον υπολογιστή ενεργεί ως γέφυρα μεταξύ της μικροσκοπικής κλίμακας μήκους και χρόνου και του μακροσκοπικού κόσμου του εργαστηρίου. Παρέχει μια καλή πρόβλεψη στις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των μορίων, και σχετικά «ακριβείς» εικασίες γενικών ιδιοτήτων. Οι προβλέψεις είναι «ακριβείς», υπό την έννοια ότι μπορούν να γίνουν τόσο ακριβείς όσο θα θέλαμε, με την επιφύλαξη των περιορισμών που επιβάλλονται από το κόστος του υπολογιστή μας. Ταυτόχρονα, η κρυμμένη λεπτομέρεια πίσω από τις χονδρικές μετρήσεις μπορεί να αποκαλυφθεί. Ένα παράδειγμα είναι η σύνδεση μεταξύ του συντελεστή διάχυσης και της εξίσωσης αυτοσυσχέτισης της ταχύτητας (το πρώτο είναι εύκολο να μετρηθεί πειραματικά, το τελευταίο πολύ πιο δύσκολο). Η προσομοίωση λειτουργεί ως γέφυρα και με μια άλλη έννοια, μεταξύ θεωρίας και πειράματος. Μπορούμε να δοκιμάσουμε μια θεωρία με τη διεξαγωγή μιας προσομοίωσης, χρησιμοποιώντας το ίδιο μοντέλο. Μπορούμε να δοκιμάσουμε το μοντέλο σε σύγκριση με τα πειραματικά αποτελέσματα. Μπορούμε επίσης να πραγματοποιήσουμε προσομοιώσεις με τον υπολογιστή που είναι δύσκολο ή αδύνατο στο εργαστήριο (για παράδειγμα, πειράματα και δοκιμές που απαιτούν ακραίες θερμοκρασίες ή πιέσεις).

Τελικά μπορεί να θέλουμε να κάνουμε άμεσες συγκρίσεις με πειραματικές μετρήσεις πάνω σε συγκεκριμένα υλικά, όπου στη συγκεκριμένη περίπτωση ένα καλό μοντέλο των μοριακών αλληλεπιδράσεων να κρίνεται απαραίτητο. Ο στόχος λοιπόν της μοριακής δυναμικής είναι να μειώσει στο ελάχιστο το ποσοστό της εικασίας στη διαδικασία αυτή.

## Abstract

We carry out computer simulations in the hope of understanding the properties of assemblies of molecules in terms of their structure and the microscopic interactions between them. This serves as a complement to conventional experiments, enabling us to learn something new, something that cannot be found out in other ways. The two main families of simulation technique are molecular dynamics (MD) and Monte Carlo (MC); additionally, there is a whole range of hybrid techniques which combine features from both. In this lecture we shall concentrate on MD. The obvious advantage of MD over MC is that it gives a route to dynamical properties of the system: transport coefficients, time-dependent responses to perturbations, rheological properties and spectra.

Computer simulations act as a bridge (see Fig. 1) between microscopic length and time scales and the macroscopic world of the laboratory: we provide a guess at the interactions between molecules, and obtain 'exact' predictions of bulk properties. The predictions are 'exact' in the sense that they can be made as accurate as we like, subject to the limitations imposed by our computer budget. At the same time, the hidden detail behind bulk measurements can be revealed. An example is the link between the diffusion coefficient and velocity autocorrelation function (the former easy to measure experimentally, the latter much harder). Simulations act as a bridge in another sense: between theory and experiment. We may test a theory by conducting a simulation using the same model. We may test the model by comparing with experimental results. We may also carry out simulations on the computer that are difficult or impossible in the laboratory (for example, working at extremes of temperature or pressure).

Ultimately we may want to make direct comparisons with experimental measurements made on specific materials, in which case a good model of molecular interactions is essential. The aim of so-called *ab initio* molecular dynamics is to reduce the amount of fitting and guesswork in this process to a minimum. On the other hand, we may be interested in phenomena of a rather generic nature, or we may simply want to discriminate between good and bad theories. When it comes to aims of this kind, it is not necessary to have a perfectly realistic molecular model; one that contains the essential physics may be quite suitable.

## Πίνακας Περιεχομένων

<b>Ευχαριστίες</b> .....	<b>3</b>
<b>Περίληψη</b> .....	<b>4</b>
<b>Πίνακας Περιεχομένων</b> .....	<b>6</b>
<b>Κεφάλαιο 1</b> .....	<b>9</b>
<b>Ο ρόλος των πειραμάτων με υπολογιστή</b> .....	<b>9</b>
1.1 Τι είναι όμως η μοριακή δυναμική; .....	11
1.2 Σύντομη ιστορική αναδρομή .....	13
1.3 Περιορισμοί.....	15
1.3.1 Η χρήση των κλασικών δυνάμεων .....	15
1.3.2 Η ρεαλιστική περιγραφή των δυνάμεων .....	16
1.3.3 Χρονικοί και χωρικοί περιορισμοί .....	17
<b>Κεφάλαιο 2</b> .....	<b>19</b>
<b>Η βασική διαδικασία της προσομοίωσης με τη μέθοδο Μοριακής δυναμικής</b> .....	<b>19</b>
2.1 Η μοντελοποίηση ενός φυσικού συστήματος .....	19
2.2 Συναρτήσεις Δυναμικού .....	20
2.2.1 Δυναμικό Born-Meyer.....	20
2.2.2 Δυναμικό Morse .....	20
2.2.3 Δυναμικό πολλών ατόμων (Embedded-atom potential) .....	21
2.2.4 Δυναμικό Bolding-Anderson .....	22
2.2.5 Το δυναμικό Lennard-Jones.....	22
2.2.6 Αποκοπή δυναμικού και διορθώσεις .....	24
2.3 Οριακές συνθήκες .....	25
2.3.1 Περιοδικές οριακές συνθήκες .....	25
2.3.2 Το κριτήριο της πλησιέστερης εικόνας.....	28
2.4 Αλγόριθμοι χρονικής ολοκλήρωσης .....	29
2.4.1 Ο αλγόριθμος του Verlet .....	29
2.4.2 Ο αλγόριθμος της ταχύτητας του Verlet .....	30
2.4.3 Ο αλγόριθμος leap-frog .....	31
2.4.4 Όροι σφάλματος.....	32

2.5 Απλές στατιστικές ποσότητες .....	34
2.5.1 Δυναμική ενέργεια .....	35
2.5.2 Κινητική ενέργεια .....	36
2.5.3 Ολική ενέργεια.....	36
2.5.4 Θερμοκρασία.....	37
2.5.5 Συνάρτηση ακτινικής κατανομής .....	37
2.5.6 Μέση τετραγωνική μετατόπιση και συνάρτηση αυτοσυσχέτισης της ταχύτητας .....	37
2.5.7 Πίεση.....	38
2.6 Άλλες υπολογιστικές πτυχές των μοντέλων .....	40
2.6.1 Αδιάστατες μονάδες μέτρησης .....	40
2.6.3 Παράμετροι προσομοίωσης .....	42
<b>Κεφάλαιο 3 .....</b>	<b>45</b>
<b>Υπολογιστικά μοντέλα της Μοριακής Δυναμικής .....</b>	<b>45</b>
3.1 Αλγόριθμοι Μοριακής Δυναμικής .....	45
3.2 Μοντέλα δύναμης μακράς και μικρής εμβέλειας.....	47
3.3 Η λίστα γειτόνων και η μέθοδος link-cell .....	48
3.4 Παράλληλοι αλγόριθμοι.....	50
3.5 Ο αλγόριθμος «ατομικής αποσύνθεσης»: Atom- decomposition algorithm.....	51
3.5.1 Διαδικασίες ανάπτυξης και αναδίπλωσης.....	52
3.5.2 Ο απλούστερος αλγόριθμος .....	54
3.5.3 Εκμεταλλευόμενοι τον 3ο νόμο του Νεύτωνα .....	55
3.5.4 Ισορροπία φορτίου .....	57
3.6 Αλγόριθμος χωρικής «αποσύνθεσης»: Spatial-decomposition algorithm.....	58
3.6.1 Το σύστημα επικοινωνίας.....	58
3.6.2 Ο απλούστερος αλγόριθμος .....	61
3.6.3 Εκμεταλλευόμενοι τον 3 <sup>ο</sup> Νόμο του Νεύτωνα.....	65
3.6.4 Ισορροπία φορτίου .....	66
<b>Κεφάλαιο 4 .....</b>	<b>67</b>

<b>Παραδείγματα Προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής σε Νάνο-Κατεργασίες .....</b>	<b>67</b>
4.1 Προσομοίωση με Μοριακή Δυναμική για Λειαντικές Κατεργασίες.....	68
4.2 Μελέτη σκοπιμότητας των κατεργασιών απόλυτης ακρίβειας με τη Μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής.....	72
4.3 Σύγκριση των αποτελεσμάτων Μοριακής Δυναμικής Ανάλυσης με Πειραματικά αποτελέσματα Νανο-κατεργασιών.....	81
4.4 Πρόβλεψη κοπτικών δυνάμεων κατά την κατεργασία πυριτίου με τη χρήση ‘hybrid molecular dynamic – finite element analysis’ μοντέλου.....	87
4.4.1 Το μοντέλο της Μοριακής Δυναμικής Προσομοίωσης .....	88
4.4.2 Το μοντέλο των πεπερασμένων στοιχείων.....	99
4.4.3 Πειραματική διάταξη .....	104
4.4.4 Αποτελέσματα .....	105
<b>Κεφάλαιο 5 .....</b>	<b>107</b>
<b>Συμπεράσματα.....</b>	<b>107</b>
<b>Βιβλιογραφία.....</b>	<b>109</b>



## Κεφάλαιο 1

### Ο ρόλος των πειραμάτων με υπολογιστή

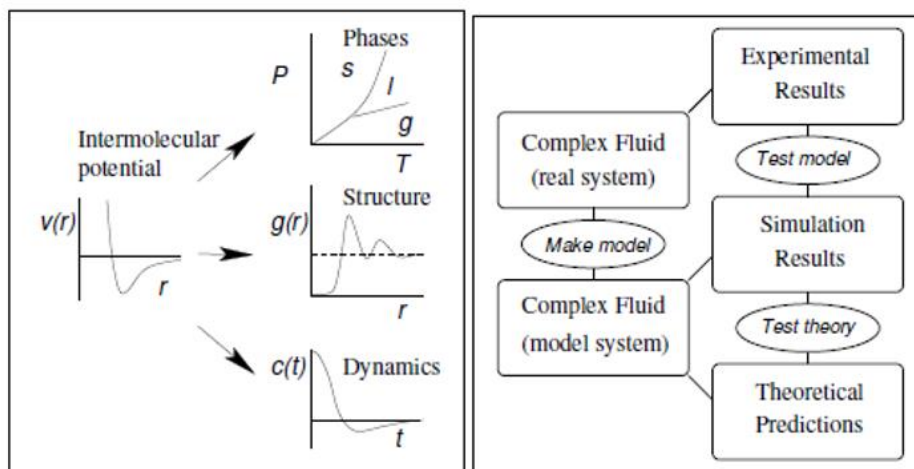
Τα πειράματα με τη χρήση ηλεκτρονικού υπολογιστή παίζουν έναν πολύ σημαντικό ρόλο στην επιστήμη σήμερα. Στο παρελθόν οι φυσικές επιστήμες χαρακτηρίζονταν από μία αλληλεπίδραση μεταξύ του πειράματος και της θεωρίας. Στο πείραμα, ένα σύστημα υποβάλλεται σε μετρήσεις και λαμβάνονται τα αποτελέσματα, που εκφράζονται σε αριθμητική μορφή. Θεωρητικά, ένα μοντέλο του συστήματος κατασκευάζεται συνήθως με τη μορφή ενός συνόλου μαθηματικών εξισώσεων. Το μοντέλο στη συνέχεια αξιολογείται από την ικανότητά του να περιγράψει τη συμπεριφορά του συστήματος στις συγκεκριμένες επιλεγμένες περιπτώσεις. Πρέπει να είναι αρκούντως απλό ώστε να επιτρέψει την εξαγωγή αποτελεσμάτων από την επίλυση των εξισώσεων. Σε πολλές περιπτώσεις, αυτό συνεπάγεται σε ένα σημαντικό ποσό την απλοποίηση του προβλήματος που τίθεται προς επίλυση προκειμένου να εξαιρεθούν όλες οι πολυπλοκότητες που είναι συνυφασμένες με τον πραγματικό κόσμο, και να καταστεί τελικά το πρόβλημα επιλύσιμο.

Στο παρελθόν, τα θεωρητικά μοντέλα θα μπορούσαν να δοκιμαστούν εύκολα μόνο με λίγες απλές ειδικές περιπτώσεις. Έτσι, για παράδειγμα, στη φυσική στερεάς ύλης ένα μοντέλο διαμοριακών δυνάμεων σε ένα συγκεκριμένο υλικό θα μπορούσε να επαληθευτεί με ένα διατομικό μόριο, ή με ένα τέλειο, άπειρο κρύσταλλο. Ακόμη και σε αυτή την περίπτωση, συχνά απαιτείται από τον ερευνητή να κάνει διάφορες απλοποιήσεις για να πραγματοποιηθεί ο υπολογισμός. Δυστυχώς, πολλές φορές προβλήματα με ιδιαίτερο ενδιαφέρον (τόσο σε ακαδημαϊκό όσο και σε πρακτικό επίπεδο) δεν εμπίπτουν στη σφαίρα των εν λόγω "Ειδικών περιστάσεων". Μεταξύ αυτών, θα μπορούσε κανείς να αναφέρει τη φυσική και τη χημεία των οργανικών μορίων, που περιλαμβάνουν ένα μεγάλο αριθμό βαθμών ελευθερίας.

Η έλευση των ηλεκτρονικών υπολογιστών υψηλής ταχύτητας που άρχισε να χρησιμοποιείται στη δεκαετία του '50, έχει αλλάξει το σκηνικό, εισάγοντας ένα νέο στοιχείο ακριβώς ανάμεσα στο πείραμα και τη θεωρία. Το στοιχείο αυτό, είναι το πείραμα που θα διεξαχθεί στον ηλεκτρονικό υπολογιστή. Σε ένα πείραμα ηλεκτρονικού υπολογιστή, ένα μοντέλο εξακολουθεί να παρέχεται από τους θεωρητικούς που ερευνούν το εκάστοτε πρόβλημα, αλλά οι υπολογισμοί επαφίονται πλέον στο μηχάνημα, ακολουθώντας μια συγκεκριμένη και αυστηρά καθορισμένη διαδικασία (τον αλγόριθμο, που υλοποιείται σε ένα κατάλληλο προγραμματιστικό περιβάλλον). Με αυτόν τον τρόπο, μπορεί να ερευνηθεί ένα πιο ρεαλιστικό σύστημα στο οποίο θα εισαχθεί πλέον ένα μεγάλο μέρος πολυπλοκότητας, από αυτή που πριν είχε παραληφθεί, ανοίγοντας έτσι ένα δρόμο προς την καλύτερη κατανόηση των πραγματικών πειραμάτων.

Η προσομοίωση είναι πλέον ένα ισχυρό εργαλείο, που επιτρέπει στον ερευνητή να μελετήσει με άνεση και σχετικά μικρό κόστος τη συμπεριφορά μίας διεργασίας με τη μεταβολή των παραμέτρων, των μεταβλητών λειτουργίας και των μεγεθών παρεμβολής εξωτερικών παραγόντων. Γενικά, τα δεδομένα εισόδου μίας προσομοίωσης είναι μεταβλητές απόφασης που καθορίζουν το σχεδιασμό της διαδικασίας, δηλαδή παράμετροι όπως λόγου χάρη η πρόωση και η ταχύτητα κοπής και τα αποτελέσματα εξόδου είναι δείκτες αποφάσεων, δηλαδή μεταβλητές της διαδικασίας όπως ο ρυθμός αφαίρεσης υλικού [1].

Περιττό να πούμε βέβαια ότι, η ανάπτυξη των πειραμάτων στον υπολογιστή έχει μεταβάλει ουσιαστικά την παραδοσιακή σχέση μεταξύ θεωρίας και πειράματος. Από τη μια πλευρά, οι προσομοιώσεις υπολογιστών αυξήσανε τη ζήτηση για ακρίβεια των μοντέλων. Για παράδειγμα, μια προσομοίωση μοριακής δυναμικής μας επιτρέπει να αξιολογηθεί η θερμοκρασία τήξης ενός υλικού, κατά το πρότυπο ενός ορισμένου νόμου αλληλεπίδρασης. Αυτή είναι μια δύσκολη δοκιμασία για το θεωρητικό μοντέλο, και αποτελεί μια δοκιμασία που δεν ήταν διαθέσιμη στο παρελθόν. Ως εκ τούτου, η προσομοίωση "ζωντανεύει" τα μοντέλα, αποκαλύπτοντας κρίσιμες περιοχές και παρέχοντας προτάσεις για τη βελτίωσή τους.



Εικόνα 1: Οι προσομοιώσεις είναι η γέφυρα μεταξύ

α) μικροσκοπικού και μακροσκοπικού

β) θεωρίας και πειράματος

Από την άλλη πλευρά, μια προσομοίωση μπορεί συχνά να έρχεται πολύ κοντά σε πειραματικές συνθήκες, στον βαθμό εκείνο που τα αποτελέσματα του υπολογιστή να μπορούν μερικές φορές να συγκριθούν άμεσα με τα πειραματικά αποτελέσματα. Όταν συμβαίνει αυτό, η προσομοίωση γίνεται ένα εξαιρετικά

ισχυρό εργαλείο, όχι μόνο για να κατανοηθούν και να ερμηνευθούν τα πειράματα σε μικροσκοπικό επίπεδο, αλλά και για τη μελέτη περιοχών οι οποίες δεν είναι προσβάσιμες πειραματικά, ή που θα απαιτούνταν πολύ ακριβά πειράματα, όπως για παράδειγμα σε δοκιμές που διεξάγονται κάτω από εξαιρετικά υψηλή πίεση.

Ως μηχανικοί, μπορούσαμε να εφεύρουμε πολλούς ορισμούς για την προσομοίωση. Όλοι όμως αυτοί οι ορισμοί συγκλίνουν στο γεγονός πως η προσομοίωση αφορά τεχνικές που επιτρέπουν τη δυναμική μελέτη των μηχανισμών κίνησης των σωματιδίων ενός συστήματος σε μικροσκοπική λεπτομέρεια και τον προσδιορισμό μακροσκοπικών ποσοτήτων από τους μηχανισμούς αυτούς [2]-[4]. Λύνοντας για παράδειγμα τις εξισώσεις κίνησης του Νεύτωνα σε μικροσκοπική κλίμακα μπορούμε να αντιληφθούμε και να κατανοήσουμε την μακροσκοπική συμπεριφορά ενός συστήματος [5]. Γενικότερα μέσω της προσομοίωσης μπορεί:

- α) Να περιγραφεί η συμπεριφορά ενός συστήματος
- β) Να διευρυνθούν οι ιδιότητες ενός υποθετικού συστήματος και
- γ) Να σχεδιαστεί ένα καλύτερο σύστημα από το ήδη υπάρχον.

Τελευταίο και ιδιαίτερα σημαντικό είναι ότι οι προσομοιώσεις σε υπολογιστή μας επιτρέπουν να πραγματοποιούμε «πειράματα σκέψης», πειράματα που είναι απλά αδύνατο να κάνουμε στην πραγματικότητα, αλλά το αποτέλεσμα των οποίων αυξάνει σημαντικά την κατανόησή μας για τα ποικίλα φαινόμενα. Η φαντασία και η δημιουργικότητα αποτελούν σημαντικές ιδιότητες για την προσομοίωση σε υπολογιστή [6], [7].

### **1.1 Τι είναι όμως η μοριακή δυναμική;**

Καλούμε Μοριακή Δυναμική (ΜΔ) μια τεχνική προσομοίωσης υπολογιστή όπου η εξέλιξη του χρόνου ενός συνόλου από αλληλοεπιδρώντα άτομα ακολουθείται από την ολοκλήρωση της εξίσωσης της κίνησης. Στη μοριακή δυναμική ακολουθούμε τους νόμους της κλασικής μηχανικής, και κυρίως το 2ο νόμο του Νεύτωνα:

$$F_i = m_i a_i$$

*Εξίσωση 1.1*

για κάθε άτομο  $i$  που απαρτίζει ένα σύστημα πλήθους  $N$  ατόμων.

Όπου:

$m_i$  , η μάζα του ατόμου

$a_i = \frac{d^2 r_i}{dt^2}$  , η επιτάχυνσή του και

$F_i$  , η δύναμη που του ασκείται λόγω αλληλεπίδρασης με τα υπόλοιπα άτομα

Επομένως, η μοριακή δυναμική είναι μια ντετερμινιστική τεχνική, όπου δίνεται ένα αρχικό σύνολο των θέσεων και των ταχυτήτων και η μετέπειτα εξέλιξη συναρτήσει του χρόνου είναι απολύτως καθορισμένη. Στην πράξη βέβαια, το πεπερασμένο βήμα της χρονικής ολοκλήρωσης και τα αριθμητικά σφάλματα στρογγυλοποίησης θα προκαλέσουν τελικά την απόκλιση της υπολογισθείσας τροχιάς από την πραγματική.

Ο υπολογιστής υπολογίζει μια τροχιά σε ένα χώρο 6-N διαστάσεων (3N θέσεις και 3N ορμές). Ωστόσο, μια τέτοια τροχιά δεν είναι συνήθως ιδιαίτερα σημαντική από μόνη της. Η Μοριακή Δυναμική είναι μια μέθοδος στατιστικής μηχανικής, είναι δηλαδή ένας τρόπος για να βρούμε μια σειρά από ιδιότητες που διανέμονται σύμφωνα με κάποια συνάρτηση στατιστικής κατανομής. Σύμφωνα με τη στατιστική φυσική, οι φυσικές ποσότητες αναπαριστώνται ως μέσοι όροι που διανέμονται σύμφωνα με ένα συγκεκριμένο στατιστικό σύνολο. Μια τροχιά που λαμβάνεται με Μοριακή Δυναμική παρέχει ένα τέτοιο σύνολο ιδιοτήτων. Ως εκ τούτου, μια μέτρηση ενός φυσικού μεγέθους μέσω προσομοίωσης λαμβάνεται απλά ως ο αριθμητικός μέσος όρος των διαφόρων στιγμιαίων τιμών που έλαβε η εν λόγω ποσότητα κατά την εκτέλεση της ΜΔ.

Η στατιστική φυσική είναι η γέφυρα μεταξύ της μικροσκοπικής συμπεριφοράς και της θερμοδυναμικής ενός σώματος. Στο όριο των πολύ μεγάλων χρόνων προσομοίωσης, θα μπορούσε κανείς να αναμένει πως το σύνολο των μέσων όρων των φυσικών ιδιοτήτων που έχουν ληφθεί, θα συγκλίνει στις θερμοδυναμικές ιδιότητες του προς εξέταση μοντέλου. Στην πράξη, ο χρόνος προσομοίωσης είναι πάντα πεπερασμένος και πρέπει κανείς να δώσει μεγάλη προσοχή στο πότε η δειγματοληψία έχει επαρκές μέγεθος ή όχι (σύστημα σε ισορροπία ή όχι). Με τον τρόπο αυτό, οι προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής μπορεί να χρησιμοποιηθούν για τη μέτρηση θερμοδυναμικών ιδιοτήτων.

## **1.2 Σύντομη ιστορική αναδρομή**

Η Μοριακή Δυναμική ασχολείται με την προσομοίωση της κίνησης των μορίων για να αποκτήσουμε μια βαθύτερη κατανόηση των διαφόρων φυσικών φαινομένων που προκύπτουν από τις μοριακές αλληλεπιδράσεις. Αυτές οι μελέτες περιλαμβάνουν όχι μόνο την κίνηση των μορίων όπως σε ένα υγρό, αλλά και την κίνηση ενός ενιαίου μεγάλου μορίου που αποτελείται από εκατοντάδες ή χιλιάδες άτομα, όπως για παράδειγμα σε μία πρωτεΐνη.

Οι υπολογιστές είναι ένα πολύ σημαντικό εργαλείο για τις μελέτες αυτές, επειδή απλά δεν υπάρχει καμία άλλη μέθοδος για τον εντοπισμό της κίνησης ενός μεγάλου αριθμού αλληλοεπιδρώντων σωματιδίων. Οι παλιότεροι από αυτούς τους υπολογισμούς διεξήχθησαν το 1950 από τον Berni Alder και τον Tom Wainwright στο Εθνικό Εργαστήριο του Lawrence Livermore [7]. Εκεί μελετούσαν την κατανομή των μορίων σε ένα υγρό, χρησιμοποιώντας ένα μοντέλο στο οποίο τα μόρια παριστάνονταν σαν σκληρά σφαιρίδια που αλληλοεπιδρούσαν σαν μπάλες μπιλιάρδου. Χρησιμοποιώντας τους ταχύτερους για την εποχή εκείνη υπολογιστές, τους IBM 704, ήταν σε θέση να προσομοιώνουν τις κινήσεις 32 και 108 μορίων σε υπολογισμούς που απαιτούσαν 10 έως 30 ώρες. Τώρα είναι δυνατό να εκτελέσει κανείς υπολογισμούς με το μοντέλο της σκληρής σφαίρας για συστήματα με πάνω από ένα δισεκατομμύριο σωματίδια.

Μια άλλη κρίσιμη θεωρία εμφανίστηκε το 1967 [8]. Ο φυσικός Loup Verlet εισήγαγε την έννοια της «λίστας του Verlet» (ή λίστας γειτόνων, μια δομή δεδομένων που παρακολουθεί τον άμεσο γείτονα του κάθε μορίου, προκειμένου να επιταχύνει τους υπολογισμούς του υπολογιστή στις αλληλοεπιδράσεις μορίου προς μόριο) καθώς και τον αλγόριθμο της χρονικής ολοκλήρωσης Verlet (μια μέθοδος για την αριθμητική ολοκλήρωση των εξισώσεων κίνησης), για τον υπολογισμό του διαγράμματος φάσης του αργού και τον υπολογισμό των εξισώσεων συσχέτισης για να εξετασθούν οι θεωρίες της υγρής κατάστασης. Ο Verlet μελέτησε ένα μοριακό μοντέλο πιο ρεαλιστικό από της σκληρή σφαίρα, που είναι γνωστό ως μοντέλο Lennard-Jones.

Το μοντέλο Lennard-Jones δούλεψε επίσης ο Lawrence Hannon, George Lie, και ο Enrico Clementi το 1986 στην IBM Kingston για τη μελέτη της ροής των ρευστών [9]. Σε αυτούς τους υπολογισμούς το ρευστό εκπροσωπήθηκε από περίπου  $10^4$  αλληλοεπιδρώντα μόρια. Ακόμα κι αν αυτή η ποσότητα είναι πολύ μικρή σε σύγκριση με τον αριθμό των μορίων σε ένα γραμμάριο του νερού, η συμπεριφορά της ροής ήταν όπως σε ένα πραγματικό υγρό.

Μία άλλη κατηγορία υπολογισμών Μοριακής Δυναμικής ασχολείται με την εσωτερική κίνηση των μορίων, ειδικά για πρωτεΐνες και νουκλεϊκά οξέα, ζωτικής

σημασίας συστατικά των βιολογικών συστημάτων. Ο στόχος στην περίπτωση αυτή είναι να αποκτήσουν οι ερευνητές μια καλύτερη κατανόηση της λειτουργίας αυτών των μορίων σε βιοχημικές αντιδράσεις. Είναι ενδιαφέρον το γεγονός ότι έχει βρεθεί πως τα κβαντικά αποτελέσματα δεν έχουν μεγάλη επιρροή επί της συνολικής δυναμικής των πρωτεϊνών εκτός από συνθήκες με χαμηλές θερμοκρασίες. Έτσι, η κλασική μηχανική είναι αρκετή για να καταγράψει τις κινήσεις, αλλά εξακολουθεί να απαιτεί τεράστια υπολογιστική ισχύ για την παρακολούθηση της κίνησης ενός μεγάλου μορίου. Για παράδειγμα, προσομοιώνοντας την κίνηση ενός μορίου 1.500 ατόμων, μια μικρή πρωτεΐνη, για ένα χρονικό διάστημα 107 δευτερολέπτων απαιτούνται 6 ώρες υπολογισμού σε ένα σύγχρονο επεξεργαστή Intel Xeon QuadCore.

Ο Martin Karplus και ο Andrew McCammon, σε ένα ενδιαφέρον άρθρο "The Molecular Dynamics of Proteins" [10] περιγράφουν μια ανακάλυψη σχετικά με την μυσφαιρίνη, μόριο που θα μπορούσε να έχει προκύψει μόνο από παρακολούθηση μέσω μοριακής δυναμικής. Το ενδιαφέρον για την μυσφαιρίνη έρχεται περίπου επειδή αποθηκεύει οξυγόνο σε βιολογικά συστήματα. Φάλαινες, για παράδειγμα, είναι σε θέση να παραμείνουν κάτω από το νερό για μεγάλο χρονικό διάστημα, λόγω της μεγάλης ποσότητας μυσφαιρίνης στο σώμα τους. Ήταν γνωστό ότι το μόριο του οξυγόνου δεσμεύεται σε μία συγκεκριμένη θέση στο μόριο της μυσφαιρίνης, αλλά δεν έγινε κατανοητό το πώς η δέσμευση αυτή θα μπορούσε να πραγματοποιηθεί. Η κρυσταλλογραφία ακτίνων Χ δείχνει ότι τα μεγάλα μόρια πρωτεΐνης τείνουν να διπλωθούν επάνω σε συμπαγείς τρισδιάστατες δομές, και στην περίπτωση της μυσφαιρίνης το οξυγόνο λαμβάνει θέσεις που κείνται στο εσωτερικό μιας τέτοιας δομής. Εκεί δεν φαίνεται με ποιο τρόπο ένα άτομο οξυγόνου θα μπορούσε να διεισδύσει στη δομή για να φτάσει τη θέση σύνδεσης. Η Μοριακή Δυναμική όμως έρχεται να δώσει την απάντηση σε αυτό το γρίφο. Η εικόνα ενός μορίου που παρέχεται από κρυσταλλογραφία ακτίνων Χ δείχνει τις μέσες θέσεις των ατόμων στο μόριο. Στην πραγματικότητα αυτά τα άτομα βρίσκονται σε συνεχή κίνηση, ταλαντευόμενα περί τις θέσεις ισορροπίας. Η Μοριακή Δυναμική προσομοίωση της εσωτερικής κίνησης του μορίου έδειξε ότι η πορεία προς την τοποθεσία αυτή, θα μπορούσε να ανοιχτεί για ένα σύντομο χρονικό διάστημα.

Η επιστημονική απεικόνιση είναι ιδιαίτερα σημαντική για την κατανόηση των αποτελεσμάτων ενός μοριακής δυναμικής προσομοίωσης. Τα εκατομμύρια των αριθμών που αντιπροσωπεύουν το ιστορικό των θέσεων και των ταχυτήτων των σωματιδίων δεν είναι πολύ αποκαλυπτική εικόνα της κίνησης. Πώς μπορεί λοιπόν κάποιος να αναγνωρίσει λόγου χάρη το σχηματισμό μιας δίνης σε αυτή τη μάζα των δεδομένων ή τη φύση της κάμψης και της διάταξης ενός μεγάλου μορίου; Πώς μπορεί κάποιος να αποκτήσει νέες γνώσεις; Εικόνες και κινούμενα

σχέδια επιτρέπουν στον επιστήμονα κυριολεκτικά να δει το σχηματισμό δινών ή την κάμψη μιας πρωτεΐνης και έτσι να αποκτήσει νέες γνώσεις σχετικά με τις λεπτομέρειες αυτών των φαινομένων.

Υπολογισμοί που περιλαμβάνουν την κίνηση ενός μεγάλου αριθμού σωματιδίων που αλληλοεπιδρούν, είτε τα σωματίδια είναι άτομα σε ένα μόριο, είτε μόρια από ένα υγρό ή στερεό είτε ακόμη και σωματίδια σε ένα διακριτό μοντέλο μιας ταλαντευόμενης χορδής είτε μια μεμβράνη, πραγματοποιούνται με τον ίδιο ακριβώς τρόπο. Αυτοί περιλαμβάνουν μια μακρά σειρά από βήματα χρόνου, σε κάθε ένα από τα οποία είναι οι νόμοι του Νεύτωνα που χρησιμοποιούνται για τον προσδιορισμό της νέας θέσης και της ταχύτητας από τα παλιά θέση και ταχύτητα. Οι υπολογισμοί είναι αρκετά απλοί, αλλά ο αριθμός τους είναι πολύ μεγάλος. Για να επιτευχθεί η ακρίβεια, τα βήματα του χρόνου πρέπει να είναι αρκετά μικρά, και ως εκ τούτου, πολλοί είναι υποχρεωμένοι να διεξάγουν την προσομοίωση σε ένα μεγάλο χρονικό διάστημα του πραγματικού χρόνου. Στην υπολογιστική χημεία το χρονικό βήμα είναι συνήθως περίπου ένα femtosecond ( $10^{-15}$  δευτερόλεπτα), και ο συνολικός υπολογισμός μπορεί να αντιπροσωπεύεται σε  $10^{-8}$  δευτερόλεπτα, που θα μπορούσε να κοστίζει σε πραγματικό χρόνο περίπου 100 ώρες λειτουργίας του υπολογιστή. Το ποσό των υπολογισμών σε κάθε βήμα μπορεί να είναι αρκετά εκτεταμένο. Σε ένα σύστημα που αποτελείται από  $N$  σωματίδια οι υπολογισμοί της δύναμης σε κάθε βήμα μπορεί να περιλαμβάνει  $O(N^2)$  πράξεις. Έτσι, είναι εύκολο να δει κανείς ότι αυτοί οι υπολογισμοί μπορεί να χρειαστούν ένα μεγάλο αριθμό κύκλων μηχανής. Επιπλέον, οι απεικονίσεις της κίνησης του συστήματος μπορεί να επιφέρουν μεγάλες απαιτήσεις σε μνήμη.

### **1.3 Περιορισμοί**

Η Μοριακή Δυναμική είναι μια πολύ ισχυρή τεχνική, αλλά έχει φυσικά περιορισμούς. Μπορούμε γρήγορα να εξετάσουμε τους πιο σημαντικούς από αυτούς.

#### **1.3.1 Η χρήση των κλασικών δυνάμεων**

Κάποιος θα μπορούσε αμέσως να ρωτήσει, πώς μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε το νόμο του Νεύτωνα για να μετακινήσουμε άτομα, όταν όλοι γνωρίζουμε ότι τα συστήματα στο ατομιστικό επίπεδο υπακούουν στους κβαντικούς νόμους και όχι στους κλασικούς νόμους, και ότι η εξίσωση του Schrödinger είναι εκείνη που πρέπει να ακολουθηθεί;

Μια απλή εξέταση της εγκυρότητας της κλασικής προσέγγισης βασίζεται στο θερμικό μήκος κύματος του de Broglie [11] και ορίζεται ως:

$$\Lambda = \sqrt{\frac{2\pi h^2}{Mk_B T}} \quad \text{Εξίσωση 1.2}$$

Όπου με  $M$  συμβολίζεται η ατομική μάζα και με  $T$  η θερμοκρασία. Η κλασική προσέγγιση επαληθεύεται όταν  $\Lambda \ll a$ , όπου  $a$  είναι η ελάχιστη απόσταση αποχωρισμού ενός μορίου από το γειτονικό του. Αν σκεφτεί κανείς, για παράδειγμα, τα υγρά σε τριπλό σημείο, το  $\Lambda / a$  είναι της τάξης των 0,1 για τα ελαφρά στοιχεία, όπως λίθιο (Li) και αργό (Ar), μειούμενο περαιτέρω για βαρύτερα στοιχεία. Η κλασική προσέγγιση είναι κακή για πολύ ελαφριά συστήματα όπως υδρογόνο ( $H_2$ ), ήλιο (He), νέο (Ne).

Επιπλέον, τα κβαντικά φαινόμενα γίνονται σημαντικά σε κάθε σύστημα όταν το  $T$  είναι αρκετά χαμηλό. Η πτώση της ειδικής θερμότητας των κρυστάλλων κάτω από τη θερμοκρασία Debye [12] ή η ανώμαλη συμπεριφορά του συντελεστή θερμικής διαστολής, είναι πολύ γνωστά παραδείγματα των μετρήσιμων κβαντικών φαινομένων σε στερεά.

Τα αποτελέσματα της μοριακής δυναμικής πρέπει να ερμηνεύονται με προσοχή σε αυτές τις περιοχές.

### 1.3.2 Η ρεαλιστική περιγραφή των δυνάμεων

*Πόσο ρεαλιστική είναι η προσομοίωση της μοριακής δυναμικής;*

Στη μοριακή δυναμική, τα άτομα αλληλοεπιδρούν μεταξύ τους. Αυτές οι αλληλεπιδράσεις προέρχονται από δυνάμεις που ενεργούν επάνω σε άτομα, και τα άτομα κινούνται κάτω από τη δράση αυτών των στιγμιαίων δυνάμεων. Καθώς τα άτομα κινούνται, οι σχετικές θέσεις τους αλλάζουν και οι δυνάμεις αλλάζουν επίσης.

Το βασικό συστατικό που περιέχει η φυσική συνίσταται επομένως από τις δυνάμεις. Μία προσομοίωση είναι ρεαλιστική, δηλαδή μιμείται τη συμπεριφορά του πραγματικού συστήματος, μόνο στο βαθμό που οι διατομικές δυνάμεις είναι παρόμοιες με εκείνες που πραγματικά τα άτομα (ή, ακριβέστερα, οι πυρήνες των ατόμων) θα αντιμετώπιζαν όταν διατάσσονταν στον ίδιο σχηματισμό.

Οι δυνάμεις συνήθως λαμβάνονται ως η κλίση του δυναμικού της ενέργειας λειτουργίας, ανάλογα με τις θέσεις των σωματιδίων. Ο ρεαλισμός της προσομοίωσης ως εκ τούτου, εξαρτάται από την ικανότητα του δυναμικού που



έχει επιλεγεί για την αναπαραγωγή της συμπεριφοράς του υλικού κάτω από τις συνθήκες υπό τις οποίες εκτελείται η προσομοίωση.

Το πρόβλημα της επιλογής ή της κατασκευής, δυναμικών (το λεγόμενο πρόβλημα δύναμης-πεδίου) είναι ακόμη υπό μελέτη από την επιστημονική κοινότητα και είναι πέρα από το πεδίο εφαρμογής αυτής της διπλωματικής εργασίας.

### 1.3.3 Χρονικοί και χωρικοί περιορισμοί

Οι προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής σήμερα μπορούν να πραγματοποιηθούν σε συστήματα με εκατοντάδες χιλιάδες ή εκατομμύρια άτομα και να τρέχουν για χρόνους προσομοίωσης σε ένα εύρος από μερικά nanoseconds μέχρι και πλέον από ένα microsecond. Καθώς αυτά τα νούμερα είναι σαφώς υπολογίσιμα, μπορεί να καταλήξει ολόκληρη η προσομοίωση να περιορίζεται από χρονικούς και/ή χωρικούς περιορισμούς.

Μια προσομοίωση είναι "ασφαλής" από την άποψη της διάρκειάς της, όταν ο χρόνος προσομοίωσης είναι πολύ μεγαλύτερος από το χρόνο που χρειάζεται η ποσότητα που μας ενδιαφέρει για να πάρει την τελική της τιμή (συχνά αναφέρεται και ως χρόνος χαλάρωσης). Ωστόσο, διαφορετικές ιδιότητες έχουν διαφορετικούς χρόνους χαλάρωσης. Ειδικότερα, τα συστήματα τείνουν να γίνουν αργά και υποτονικά στην εγγύτητα των φάσεων μετάβασης και δεν είναι ασυνήθιστο να βρεθούν περιπτώσεις όπου ο χρόνος χαλάρωσης της φυσικής ιδιότητας να είναι τάξης μεγέθους μεγαλύτερος από το χρόνο της προσομοίωσης.

Ένα περιορισμένου μεγέθους σύστημα μπορεί επίσης να αποτελέσει πρόβλημα. Στην περίπτωση αυτή πρέπει κανείς να συγκρίνει το μέγεθος του «κυττάρου» της ΜΔ προσομοίωσης με τα μήκη συσχέτισης της χωρικής συνάρτησης που τον ενδιαφέρει. Και πάλι, τα μήκη συσχέτισης μπορεί να αυξηθούν ή ακόμη και να αποκλίνουν καθώς το φαινόμενο εξελίσσεται προς τη φάση μετάβασης, όπου τότε τα αποτελέσματα δεν είναι πλέον αξιόπιστα και χαρακτηριστικό αυτής της κατάστασης είναι ότι τα μήκη συσχέτισης έχουν γίνει συγκρίσιμα με τα μήκη προσομοίωσης.

Αυτό το πρόβλημα μπορεί να μετριαστεί μερικώς με μια μέθοδο γνωστή ως *finite size scaling*. Αυτή αποτελείται από τον υπολογισμό μιας φυσικής ποσότητας  $A$  χρησιμοποιώντας μήκη προσομοίωσης με διαφορετικά μεγέθη  $L$  σύμφωνα με την ακόλουθη σχέση:

$$A(L) = A_0 + \frac{c}{L^n}$$

Εξίσωση 1.3

Χρησιμοποιώντας τα  $A_0, c$ , ως παραμέτρους για τον υπολογισμό της καμπύλης και  $n$  το πλήθος του  $L$ . Το  $A_0$  αντιστοιχεί στο όριο  $\lim_{L \rightarrow \infty} A(L)$  και θα πρέπει ως εκ τούτου να θεωρείται ως η πιο αξιόπιστη εκτίμηση του πραγματικού φυσικού μεγέθους.

## Κεφάλαιο 2

### Η βασική διαδικασία της προσομοίωσης με τη μέθοδο Μοριακής δυναμικής

#### 2.1 Η μοντελοποίηση ενός φυσικού συστήματος

Το κύριο συστατικό της προσομοίωσης είναι ένα μοντέλο για το φυσικό σύστημα. Για μια προσομοίωση μοριακής δυναμικής αυτό ισοδυναμεί με την επιλογή του δυναμικού, μια συνάρτηση  $U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)$  των θέσεων των πυρήνων, που αντιπροσωπεύει τη δυναμική ενέργεια του συστήματος, όταν τα άτομα διατάσσονται με ένα συγκεκριμένο τρόπο. Αυτή η συνάρτηση είναι αμετάβλητη κατά τις μετατοπίσεις και τις περιστροφές και είναι συνήθως δομημένη από τις σχετικές θέσεις των ατόμων μεταξύ τους και όχι από τις απόλυτες θέσεις.

Οι δυνάμεις προκύπτουν ως οι κλίσεις του δυναμικού σε σχέση με τις θέσεις-μετατοπίσεις των μορίων :

$$F_i = \nabla_{\mathbf{r}_i} U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \quad \text{Εξίσωση 2.1}$$

Αυτή η μορφή προϋποθέτει την παρουσία ενός νόμου διατήρησης της συνολικής ενέργειας  $E = K + U$  όπου το  $K$  είναι η στιγμιαία κινητική ενέργεια:

$$K = \sum_i \frac{1}{2} m_i v_i^2 \quad \text{Εξίσωση 2.2}$$

Όπου με  $v_i$  συμβολίζεται η ταχύτητα του εκάστοτε σωματιδίου  $i$ .

Η απλούστερη επιλογή για το δυναμικό  $U$  είναι να το γραφτεί ως άθροισμα από ζεύγη αλληλοεπιδράσεων:

$$U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_i \sum_{j>i} \varphi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad \text{Εξίσωση 2.3}$$

Η ανισότητα  $j > i$  στη δεύτερη άθροιση έχει ως σκοπό την εξέταση κάθε ζευγαριού ατόμων μόνο μια φορά. Στο παρελθόν τα δυναμικά αποτελούνταν από ζεύγη αλληλεπιδράσεων, αλλά αυτό δεν είναι πλέον σε χρήση. Έχει αναγνωρισθεί ότι η προσέγγιση των δύο σωμάτων είναι ακατάλληλη για πολλά σχετικά συστήματα, όπως τα μέταλλα και οι ημιαγωγοί. Για χρήση σε προσομοίωση συμπυκνωμένης ύλης προτιμώνται διάφορα είδη δυναμικών πολλών σωμάτων.

## **2.2 Συναρτήσεις Δυναμικού**

### **2.2.1 Δυναμικό Born-Meyer**

Το δυναμικό Born-Meyer δημιουργήθηκε ώστε να λαμβάνεται υπόψη μόνο η απωστική αλληλεπίδραση, σε μικρές αποστάσεις. Η ανάπτυξη του δυναμικού αυτού πραγματοποιήθηκε για δύο λόγους. Πρώτον, μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε περιπτώσεις όπου η ελκτική συνιστώσα παίζει δευτερεύοντα ή ασήμαντο ρόλο. Δεύτερον, η ελκτική συνιστώσα σε μεγάλη απόσταση, μπορεί να περιγραφεί από μια άλλη κατάλληλη συνάρτηση. Το δυναμικό Born-Meyer αναπαριστά την απώθηση των ιοντικών κρυστάλλων που βρίσκονται κοντά στο κέλυφος, και δίνεται από τη συνάρτηση:

$$V_{ij} = A \{ \exp[-2a(r_{ij} - r_0)] \} \quad \text{Εξίσωση 2.4}$$

όπου τα  $A$  και  $r_0$  είναι σταθερές που προσδιορίζονται από τις φυσικές ιδιότητες του υλικού. Η απωστική δύναμη εξασθενεί ομαλά καθώς η απόσταση  $r_{ij}$  αυξάνεται. Το δυναμικό αυτό εφαρμόζεται ειδικά στα κεραμικά υλικά [45,59] [69].

### **2.2.2 Δυναμικό Morse**

Το Δυναμικό Morse είναι ένα δυναμικό ζεύγους κατάλληλο για τη μοντελοποίηση μετάλλων κυβικής δομής. Το δυναμικό αυτό παράγει απωστικές δυνάμεις σε μικρά εύρη, ελκτικές σε μεσαία και εξασθενεί ομαλά στο μηδέν σε μεγάλα εύρη. Χρησιμοποιεί μια μορφή δυναμικού που περιέχει μια σχέση που εξαρτάται από τον εκθέτη αντί για ένα νόμο που εξαρτάται από την ισχύ. Η έκφραση του δυναμικού Morse δίνεται από τη σχέση:

$$V_{ij} = D \{ \exp[-2a(r_{ij} - r_e)] - 2 \exp[-a(r_{ij} - r_e)] \} \quad \text{Εξίσωση 2.5}$$

Όπου:

$D$  και  $a$  = σταθερές που προσδιορίζονται βάσει των φυσικών ιδιοτήτων του υλικού και

$r_e$  και  $r_{ij}$  = απόσταση ισορροπίας και στιγμιαία απόσταση μεταξύ των ατόμων  $i$  και  $j$

Οι Girifalco και Weizer [68] υπολόγισαν τις παραμέτρους Morse με χρήση πειραματικών τιμών για την ενέργεια ατμοποίησης, τις σταθερές πλέγματος και τη συμπιεστότητα. Η εξίσωση φάσης, οι ελαστικές σταθερές και οι συνθήκες σταθερότητας υπολογίστηκαν με χρήση των παραμέτρων Morse για μέταλλα με κυβική δομή, και βρέθηκε ότι τα αποτελέσματα συμφωνούσαν με τα πειραματικά [69].

Metal	$\alpha a_0$	$\beta$	$L \times 10^{-22}$ (eV)	$\alpha$ (Å <sup>-1</sup> )	$r_0$ (Å)	$D$ (eV)
Pb	2.921	83.02	7.073	1.1836	3.733	0.2348
Ag	2.788	71.17	10.012	1.3690	3.115	0.3323
Ni	2.500	51.78	12.667	1.4199	2.780	0.4205
Cu	2.450	49.11	10.330	1.3588	2.866	0.3429
Al	2.347	44.17	8.144	1.1646	3.253	0.2703
Ca	2.238	39.63	4.888	0.80535	4.569	0.1623
Sr	2.238	39.63	4.557	0.73776	4.988	0.1513
Mo	2.368	88.91	24.197	1.5079	2.976	0.8032
W	2.225	72.19	29.843	1.4116	3.032	0.9906
Cr	2.260	75.92	13.297	1.5721	2.754	0.4414
Fe	1.988	51.97	12.573	1.3885	2.845	0.4174
Ba	1.650	34.12	4.266	0.65698	5.373	0.1416
K	1.293	23.80	1.634	0.49767	6.369	0.05424
Na	1.267	23.28	1.908	0.58993	5.336	0.06334
Cs	1.260	23.14	1.351	0.41569	7.557	0.04485
Rb	1.206	22.15	1.399	0.42981	7.207	0.04644

Πίνακας 1: Παράμετροι του Δυναμικού Morse για 16 μέταλλα (κατά Girifalco και Weizer [68])

### 2.2.3 Δυναμικό πολλών ατόμων (Embedded-atom potential)

Τα δυναμικά πολλών ατόμων για μέταλλα με κυβική δομή αναπτύχθηκαν πρόσφατα, για να περιγράψουν το μεταλλικό δεσμικό χαρακτήρα με μεγαλύτερη ακρίβεια σε σχέση με αυτή που είναι εφικτή με το δυναμικό δύο ατόμων. Το δυναμικό αυτό αποτελεί μια επέκταση του δυναμικού δύο ατόμων για τα μέταλλα και λαμβάνει υπόψη του την επίδραση των ελεύθερων ηλεκτρονίων που περιβάλλουν τα άτομα. Είναι μια πιο ρεαλιστική συνάρτηση δυναμικού, που μπορεί να μοντελοποιήσει με ακρίβεια τη μεταβολή των ιδιοτήτων του μετάλλου κοντά σε μια ελεύθερη επιφάνεια. Η ολική ενέργεια του συστήματος αναπαρίσταται από μια έκφραση της μορφής:

$$E = \frac{1}{2} [\sum \phi_{ij}(r_{ij})] + \sum \phi_j [\sum \phi_i(r_{ij})] \quad \text{Εξίσωση 2.6}$$

όπου τα  $i$  και  $j$  αναφέρονται στα άτομα,  $r_{ij}$  είναι η διατομική απόσταση μεταξύ των ατόμων και τα  $\phi_{ij}$  και  $\phi_j$  εξαρτώνται από τα εμπλεκόμενα είδη, καθώς και από τα ορίσματά τους. Ο πρώτος όρος χαρακτηρίζει το συμβατικό δυναμικό ζεύγους, και ο δεύτερος όρος είναι η ενέργεια που απαιτείται, ώστε να ενσωματωθεί ένα άτομο  $i$  σε ένα νέφος ηλεκτρονίων. Έτσι, στο δυναμικό αυτό, το δυναμικό ζεύγους αυξάνεται κατά ένα πρόσθετο άθροισμα ζευγών. Κατά συνέπεια, η μέθοδος αυτή, μπορεί να ενσωματώσει την εξάρτηση των αλληλεπιδράσεων από τις συντεταγμένες. Ένας σημαντικός περιορισμός είναι το εύρος των μεταλλικών συστημάτων, στα οποία η μέθοδος αυτή είναι ακριβής. Σύμφωνα με το τροποποιημένο μοντέλο δυναμικού πολλών ατόμων, υπάρχουν έντεκα παράμετροι που το επηρεάζουν, από τις οποίες οι τρεις μπορούν να ορισθούν στις ονομαστικές τους τιμές. Κάθε μία από τις εναπομείνουσες οκτώ παραμέτρους συνδέεται άμεσα με μια φυσική ποσότητα, δηλαδή, την ενέργεια εξάχνωσης, τη σταθερά του πλέγματος, το μέτρο διόγκωσης, δύο διατμητικές σταθερές, δύο δομικές ενεργειακές διαφορές και την ενέργεια σχηματισμού κενού χώρου [69].

## 2.2.4 Δυναμικό Bolding-Anderson

Για την περίπτωση των ημιαγωγίμων υλικών, όπως είναι το πυρίτιο, το γερμάνιο και το διαμάντι, τα οποία είναι μέταλλα τα οποία έχουν ομοιοπολικούς δεσμούς, τα δυναμικά δύο σωμάτων Morse ή Lennard-Jones δεν είναι αποδεκτά. Για τη μελέτη της κοπής σε πυρίτιο ή διαμάντι, είναι προτιμότερο να χρησιμοποιηθεί το δυναμικό Bolding-Anderson, το οποίο είναι μια σύνθετη συνάρτηση πολλών σωμάτων, η οποία μπορεί να αναπαράξει όλα τα απαραίτητα χαρακτηριστικά των συστημάτων του πυριτίου ή του διαμαντιού. Τα δυναμικά πολλών σωμάτων επινοήθηκαν, για να περιγράψουν τον ομοιοπολικό δεσμό με χαρακτηριστικά κατεύθυνσης. Καθώς τα άτομα του άνθρακα στο πλέγμα του διαμαντιού έχουν μεταξύ τους ομοιοπολικούς δεσμούς και εξαρτώνται από τον τύπο υβριδισμού, η φύση του δεσμού είναι πολύ σημαντική. Για το διαμάντι, το εμπειρικό δυναμικό που αναπτύχθηκε είναι το εξής:

$$V_{ij} = VR(r_{ij}) - B_{ij}VA(r_{ij}) \quad \text{Εξίσωση 2.7}$$

όπου  $VR(r_{ij})$  και  $VA(r_{ij})$  είναι τα δυναμικά μεταξύ των ατόμων  $i$  και  $j$  λόγω των απωστικών και των ελκτικών δυνάμεων. Το μέγεθος  $B_{ij}$  λαμβάνει υπόψη του την κατεύθυνση και το μήκος του δεσμού [69].

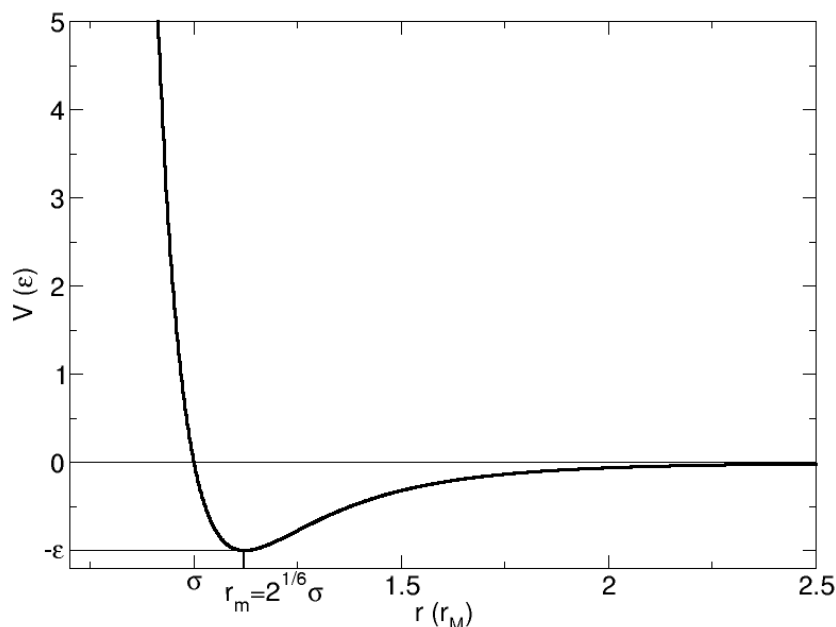
## 2.2.5 Το δυναμικό Lennard-Jones

Το δυναμικό Lennard-Jones (που αναφέρεται επίσης και ως το δυναμικό L-J, δυναμικό 6-12, ή δυναμικό 12-6) είναι ένα μαθηματικά απλό μοντέλο που προσεγγίζει την αλληλεπίδραση μεταξύ ενός ζεύγους ουδέτερων ατόμων ή μορίων. Μια μορφή αυτού του δυναμικού μεταξύ μορίων προτάθηκε για πρώτη φορά το 1924 από τον John Lennard-Jones. Οι πιο κοινές εκφράσεις του δυναμικού L-J είναι :

$$U_{LJ}(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] = \varepsilon \left[ \left( \frac{r_m}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_m}{r} \right)^6 \right] \quad \text{Εξίσωση 2.8}$$

όπου  $\varepsilon$  είναι το βάθος μιας κοιλάδας δυναμικού,  $\sigma$  είναι η πεπερασμένη απόσταση στην οποία το δυναμικό μεταξύ των σωματιδίων είναι μηδέν, το  $r$  είναι η απόσταση μεταξύ των σωματιδίων, και  $r_m$  είναι η απόσταση στην οποία το δυναμικό παρουσιάζει ελάχιστο. Στο  $r_m$ , η συνάρτηση δυναμικού έχει τιμή  $-\varepsilon$ . Οι αποστάσεις σχετίζονται ως  $r_m = 2^{1/6}\sigma \approx 1.122\sigma$ . Αυτές οι παράμετροι μπορεί να χρησιμοποιηθούν για την αναπαραγωγή πειραματικών δεδομένων ή υπολογισμών ακριβείας της κβαντικής χημείας. Λόγω της υπολογιστικής απλότητάς του, το δυναμικό Lennard-Jones έχει χρησιμοποιηθεί εκτενώς σε

προσομοιώσεις σε υπολογιστή, ακόμη και αν υπάρχουν πιο ακριβείς δυνατότητες.



Εικόνα 2: Η συνάρτηση δυναμικού κατά μήκος του  $r$

Σύμφωνα με το παραπάνω σχήμα αλλά και τα όσα αναφέρθηκαν μέχρι στιγμής, το δυναμικό αυτό τείνει στο μηδέν από τα αρνητικά, όσο το  $r$  παίρνει μεγάλες τιμές και φθάνει στο ελάχιστον στο  $-\varepsilon$ . Η απόκριση με μικρότερη απόσταση είναι έντονα κρουστική, ενώ αυξάνεται απότομα καθώς το  $r$  αυξάνεται από το  $r_m$  και πλέον.

Ο όρος  $\sim 1/r^{12}$  κυριαρχεί σε μικρή απόσταση και αντιπροσωπεύει την άπωση μεταξύ των ατόμων, όταν αυτά φέρονται πολύ κοντά το ένα στο άλλο. Η φυσική προέλευσή του έχει σχέση με την αρχή του Pauli (όταν τα ηλεκτρονικά νέφη που περιβάλλουν τα άτομα αρχίζουν να επικαλύπτονται, η ενέργεια του συστήματος αυξάνει απότομα). Ο εκθέτης 12 επιλέχθηκε αποκλειστικά σε πρακτική βάση. Στην πραγματικότητα, στα πεδία της φυσικής μια εκθετική συμπεριφορά θα ήταν πιο κατάλληλη.

Ο όρος  $\sim 1/r^6$  κυριαρχεί σε μεγάλη απόσταση και αποτελεί το συνδεδετικό κομμάτι. Αυτός είναι ο όρος που δίνει συνοχή στο σύστημα. Μια έλξη  $1/r^6$  οφείλεται στις δυνάμεις van der Waals και προέρχεται από τις αλληλεπιδράσεις διπόλου-διπόλου όπου με τη σειρά τους οφείλονται στα κυμαινόμενα δίπολα. Ως εκ

τούτου, αυτά είναι τα υλικά που ένα δυναμικό LJ μπορούσε να μιμηθεί αρκετά καλά. Οι παράμετροι  $\epsilon$  και  $\sigma$  επιλέγονται για να ταιριάζουν με τις φυσικές ιδιότητες του υλικού.

Από την άλλη πλευρά, ένα δυναμικό LJ δεν είναι καθόλου κατάλληλο για τη μοντελοποίηση καταστάσεων σε ανοιχτά συστήματα, όπου μπορούν να δημιουργηθούν ισχυροί τοπικοί δεσμοί (όπως σε ομοιοπολικά συστήματα), ή όπου υπάρχει μετατόπιση πλήθους ηλεκτρονίων στη θέση των ιόντων (όπως στα μέταλλα). Σε αυτές τις περιπτώσεις οι αλληλεπιδράσεις των δύο σωμάτων στο ίδιο σύστημα αποτυγχάνει πολύ άσχημα.

Ωστόσο, ανεξάρτητα από το πόσο καλά θα είναι σε θέση να μοντελοποιήσει το πραγματικό φυσικό σύστημα, το δυναμικό LJ 12-6 αποτελεί σήμερα ένα εξαιρετικά σημαντικό «πρότυπο σύστημα». Η συμπεριφορά των ατόμων που αλληλοεπιδρούν μέσω LJ έχει μελετηθεί εκτεταμένα για μεγάλο πλήθος γεωμετριών (στερεά, υγρά, επιφάνειες, συμπλέγματα, διδιάστατα συστήματα, κλπ). Θα μπορούσε κανείς να πει ότι το δυναμικό LJ είναι το πρότυπο δυναμικό που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για όλες τις έρευνες, οι οποίες εστιάζουν σε θεμελιώδη θέματα, αντί για έρευνες που μελετούν τις ιδιότητες ενός συγκεκριμένου υλικού. Η προσομοίωση που γίνεται σε LJ συστήματα βοήθησε τους ερευνητές (και εξακολουθεί ακόμα) να κατανοήσουν βασικά σημεία σε πολλές περιοχές της φυσικής συμπυκνωμένης ύλης και κατά συνέπεια της βιοφυσικής και για το λόγο αυτό η σημασία του LJ δεν μπορεί να υποτιμηθεί σε καμία περίπτωση.

Η διπλωματική αυτή εργασία, θα λάβει υπόψη μόνο τα πιο συχνά χρησιμοποιούμενα μοντέλα αλληλοεπίδρασης ζευγαριών όπως το μοντέλο Lennard-Jones, το οποίο έχει αποδειχθεί σωστό για την περιγραφή μονοατομικών υγρών συστημάτων, όπως για παράδειγμα το υγρό αργό, όπως θα δούμε στην επόμενη ενότητα.

### 2.2.6 Αποκοπή δυναμικού και διορθώσεις

Το δυναμικό της εξίσωσης 2.8 έχει ένα άπειρο εύρος. Σε πρακτικές εφαρμογές, είναι σύνηθες να καθοριστεί μια ακτίνα αποκοπής  $R_c$  και να αγνοούμε τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων που απέχουν περισσότερο από  $R_c$ . Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα να οδηγεί σε απλούστερα προγράμματα και σε τεράστια εξοικονόμηση υπολογιστικών πόρων, επειδή ο αριθμός των ζευγαριών των ατόμων που χωρίζονται από μια απόσταση  $r$  μεγαλώνει μέχρι το  $r^2$  και γρήγορα γίνεται τεράστιος.

Μια απλή περικοπή του δυναμικού δημιουργεί ένα νέο πρόβλημα όμως: κάθε φορά που ένα ζεύγος σωματιδίων ξεπερνά την απόσταση αποκοπής, η



ενέργειά του κάνει ένα μικρό άλμα. Ένας μεγάλος αριθμός αυτών των γεγονότων ενδέχεται να μειώσουν τη διατήρηση ενέργειας σε μια προσομοίωση. Για να αποφευχθεί αυτό το πρόβλημα, το δυναμικό συχνά μετατοπίζεται έτσι ώστε να μηδενίζεται όταν ξεπερνά την ακτίνα αποκοπής:

$$U(r) = \begin{cases} U_{LJ}(r) - U_{LJ}(R_c), & \text{if } r \leq R_c \\ 0, & \text{if } r > R_c \end{cases} \quad \text{Εξίσωση 2.9}$$

Οι φυσικές ποσότητες επηρεάζονται φυσικά από το δυναμικό αποκοπής. Τα αποτελέσματα της περικοπής ενός πλήρους δυναμικού μπορούν να εκτιμηθούν περίπου με αντιμετώπιση του συστήματος ως ένα ενιαίο (σταθερής πυκνότητας) συνεχές σύστημα πέρα από την ακτίνα  $R_c$ . Για ένα μεγαλύτερο σύστημα (με περιοδικές οριακές συνθήκες κατά μήκος κάθε κατεύθυνσης) αυτό συνήθως ισοδυναμεί με μια σταθερή πρόσθετη διόρθωση. Για παράδειγμα, το δυναμικό που τείνει ασυμπτωτικά στο μηδέν από κάτω φέρνει μια μικρή επιπλέον συνεισφορά στη συνεκτική ενέργεια, και στη συνολική πίεση.

Οι ακτίνες αποκοπής που επιλέγονται για το δυναμικό LJ έχουν με μέτρο ίσο προς 2,5σ και 3,2σ. Θα πρέπει να αναφερθεί εδώ ότι αυτά τα «περικομμένα» μοντέλα Lennard-Jones είναι τόσο δημοφιλή ώστε να αποκτήσουν τόση αξία που να λογίζονται ως πρότυπα αναφοράς για γενικά συστήματα δύο σωμάτων. Σε πολλές περιπτώσεις, δεν υπάρχει νόημα για την αξιολόγηση των διορθώσεων περικοπής επειδή το ίδιο το μοντέλο περικοπής αποτελεί το αντικείμενο της έρευνας.

## **2.3 Οριακές συνθήκες**

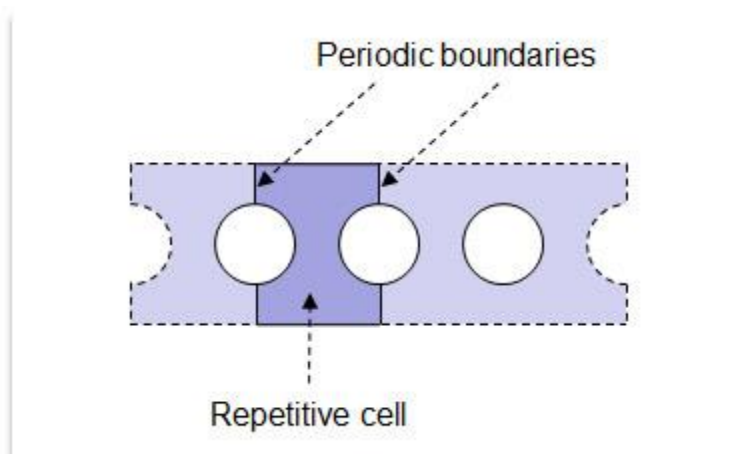
### **2.3.1 Περιοδικές οριακές συνθήκες**

Τι πρέπει να κάνουμε στα σύνορα του συστήματος προς προσομοίωση; Μια πιθανότητα είναι να μην κάνουμε τίποτα ειδικό. Το σύστημα απλώς τερματίζει, και άτομα κοντά στο όριο θα έχουν λιγότερους γείτονες από τα άτομα στο εσωτερικό. Με άλλα λόγια, δεν πραγματοποιούμε υπολογισμούς πέρα από την περιοχή ενδιαφέροντος του δείγματος και οριοθετούμε την περιοχή αυτή με νοητές επιφάνειες.

Στην περίπτωση που θέλουμε να προσομοιώσουμε ένα σύμπλεγμα ατόμων, η κατάσταση αυτή δεν είναι καθόλου ρεαλιστική. Το πόσο μεγάλο είναι το σύστημα προς προσομοίωση δεν παίζει ιδιαίτερο ρόλο, καθώς ο αριθμός των ατόμων  $N$  θα είναι αμελητέος σε σύγκριση με τον αριθμό των ατόμων που περιέχονται σε ένα μακροσκοπικό κομμάτι της ύλης (της τάξης του  $10^{23}$ ) και η

αναλογία μεταξύ του αριθμού των ατόμων επιφάνειας και του συνολικού αριθμού των ατόμων θα ήταν πολύ μεγαλύτερη από ότι στην πραγματικότητα, προκαλώντας έτσι οι επιδράσεις επιφάνειας να είναι πολύ πιο σημαντικές από ότι θα έπρεπε.

Μια λύση στο πρόβλημα αυτό είναι η χρήση περιοδικών οριακών συνθηκών (periodic boundary conditions PBC). Κατά τη χρήση PBC, τα σωματίδια εμπεριέχονται μέσα σε ένα κύτταρο προσομοίωσης (μια δομική μονάδα προσομοίωσης) και μπορούμε να φανταστούμε ότι αυτό το κύτταρο μπορεί να αναπαραχθεί στο άπειρο με επανάληψη σε όλες τις τρεις καρτεσιανές κατευθύνσεις, γεμίζοντας εντελώς το χώρο (Εικόνα 3).

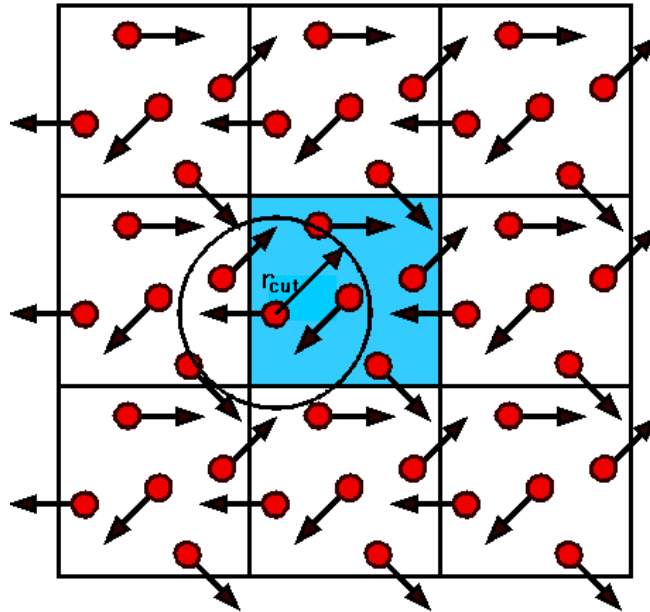


Εικόνα 3: Οι περιοδικές οριακές συνθήκες

$$\mathbf{r} + l\mathbf{a} + m\mathbf{b} + n\mathbf{c}, \quad (l, m, n = -\infty, \infty)$$

Εξίσωση 2.10

Όπου  $l, m, n$  είναι ακέραιοι αριθμοί και έχουμε συμβολίσει με  $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$  τα διανύσματα σύμφωνα με τις ακμές του κυττάρου. Στην πράξη όλα αυτά τα σωματίδια κινούνται μαζί αλλά για τους υπολογισμούς μας είναι αρκετό να προσομοιωθεί μόνο ένα.



Εικόνα 4: Οι αλληλεπιδράσεις των σωματιδίων στο κύτταρο και η ακτίνα αποκοπής

Το βασικό σημείο είναι ότι τώρα κάθε σωματίδιο  $i$  στο κύτταρο θα πρέπει να αντιμετωπιστεί ως αλληλοεπιδρών όχι μόνο με άλλα σωματίδια  $j$  στο κύτταρο, αλλά και με τις επαναλήψεις των ιδίων στο χώρο. Δηλαδή, οι αλληλεπιδράσεις μπορεί να "περάσουν" τα σύνορα του κυττάρου. Στην πραγματικότητα, μπορεί κανείς να δει εύκολα ότι (Εικόνα 4):

1. Έχουμε σχεδόν εξαλείψει τις επιδράσεις επιφανείας από το σύστημά μας, και
2. Η θέση των συνόρων του κυττάρου δεν έχει καμία επίδραση

(δηλαδή μια επανάληψη του κυττάρου στο χώρο σε σχέση με τα σωματίδια αφήνει τις δυνάμεις να παραμένουν αμετάβλητες).

Προφανώς, ο αριθμός των αλληλοεπιδρώντων ζευγών αυξάνει σε τεράστιο βαθμό ως αποτέλεσμα της PBC. Στην πράξη, αυτό δεν είναι αλήθεια, διότι δυναμικά, όπως το LJ, έχουν συνήθως ένα μικρό εύρος αλληλεπίδρασης. Το κριτήριο της πλησιέστερης εικόνας που θα συζητηθεί στη συνέχεια απλοποιεί τα πράγματα περαιτέρω, μειώνοντας στο ελάχιστο το επίπεδο της πρόσθετης πολυπλοκότητας που εισάγεται σε ένα πρόγραμμα με τη χρήση PBC.

Τέλος, ίσως να αξίζει να επισημάνουμε ότι ακόμη και αν οι περιοδικές οριακές συνθήκες μας επιτρέπουν να περιγράψουμε ένα άπειρο σύστημα σωματιδίων που προσεγγίζει όλο και περισσότερο ένα πραγματικό σύστημα, το σύστημα με τις οριακές αυτές συνθήκες εξακολουθεί να μην είναι μια ακριβής αναπαράσταση της πραγματικότητας. Στην πραγματικότητα, οι PBC εισάγουν

μια τεχνητή συμμετρία και την αναλλοίωτη επανάληψη του δομικού κυττάρου, οι οποίες δεν υπάρχουν στο πραγματικό σύστημα [12].

### 2.3.2 Το κριτήριο της πλησιέστερης εικόνας

Ας υποθέσουμε ότι χρησιμοποιούμε ένα δυναμικό με ένα πεπερασμένο εύρος, όπως το LJ. Όταν διαχωρίζονται δύο σωματίδια από απόσταση ίση ή μεγαλύτερη από μία απόσταση αποκοπής  $R_c$  δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους. Ας υποθέσουμε τώρα ότι είμαστε με ένα κύτταρο του οποίου το μέγεθος είναι μεγαλύτερο από  $2R_c$  κατά το μήκος κάθε καρτεσιανής κατεύθυνσης.

Όταν πληρούνται αυτές οι προϋποθέσεις, είναι προφανές ότι το πολύ ένα μεταξύ όλων των ζευγών που σχηματίζονται από  $i$  σωματίδια στο κύτταρο και το σύνολο όλων των περιοδικών εικόνων από ένα άλλο σωματίδιο  $j$  θα αλληλοεπιδρούν.

Για να αποδειχθεί αυτό, ας υποθέσουμε ότι το  $i$  αλληλοεπιδρά με δύο εικόνες  $j_1$  και  $j_2$  του  $j$ . Οι δύο εικόνες πρέπει να διαχωρίζονται από το φορέα της διεύθυνσης επανάληψης φέρνοντας ένα κουτί σε ένα άλλο και των οποίων το μήκος είναι υποθετικά τουλάχιστον  $2R_c$ . Για να αλληλοεπιδρά τόσο με το  $j_1$  αλλά και με το  $j_2$ , το  $i$  θα πρέπει να είναι μέσα σε μια απόσταση  $R_c$  από κάθε ένα από αυτά, το οποίο είναι αδύνατο αφού αυτά σύμφωνα με την υπόθεση έχουν απόσταση περισσότερο από  $2R_c$ .

Όταν είμαστε σε αυτές τις συνθήκες, μπορούμε με ασφάλεια να χρησιμοποιήσουμε το κριτήριο της πλησιέστερης εικόνας. Σύμφωνα με αυτό μεταξύ όλων των πιθανών εικόνων ενός σωματιδίου  $j$ , επιλέγεται το πλησιέστερο, και απομακρύνονται όλα τα άλλα. Στην πραγματικότητα, μόνο το πιο κοντινό είναι υποψήφιο για να αλληλοεπιδράσει, μιας και όλα τα άλλα σίγουρα δεν το κάνουν.

Αυτές οι συνθήκες απλοποιούν σε μεγάλο βαθμό το στήσιμο ενός προγράμματος Μοριακής Δυναμικής και είναι συνήθως κοινά αποδεκτές προς χρήση. Φυσικά, κάποιος πρέπει πάντα να βεβαιωθεί ότι το μέγεθος του κυττάρου είναι τουλάχιστον  $2R_c$  κατά μήκος όλων των διευθύνσεων, όπου οι περιοδικές οριακές συνθήκες είναι σε ισχύ [12].

## **2.4 Αλγόριθμοι χρονικής ολοκλήρωσης**

Η κινητήρια δύναμη μιας μοριακής δυναμικής προσομοίωσης είναι ο αλγόριθμος ολοκλήρωσης του χρόνου που απαιτείται για την ολοκλήρωση της εξίσωσης της κίνησης των αλληλοεπιδρώντων σωματιδίων και την παρακολούθηση της τροχιάς τους. Οι αλγόριθμοι του χρόνου ολοκλήρωσης βασίζονται σε μεθόδους πεπερασμένων διαφορών, όπου ο χρόνος διακριτοποιείται σε ένα πεπερασμένο πλέγμα, όπου το χρονικό βήμα  $\Delta t$  είναι η απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών σημείων επάνω στο πλέγμα. Γνωρίζοντας τις θέσεις και λίγο από το χρόνο των παραγωγών τους σε χρόνο  $t$  (οι ακριβείς λεπτομέρειες εξαρτώνται από τον τύπο του αλγορίθμου), το σχήμα ολοκλήρωσης δίνει τις ίδιες ποσότητες σε μεταγενέστερο χρόνο  $t + \Delta t$ . Επαναλαμβάνοντας τη διαδικασία η χρονική εξέλιξη του συστήματος μπορεί να ακολουθηθεί για μεγάλο χρόνο.

Φυσικά, αυτά τα συστήματα ολοκλήρωσης είναι κατά προσέγγιση και υπάρχουν σφάλματα που συνδέονται με αυτά. Πιο συγκεκριμένα, μπορεί κανείς να διακρίνει μεταξύ :

- Σφάλματα αποκοπής, που σχετίζονται με την ακρίβεια της μεθόδου πεπερασμένων διαφορών σε σχέση με την πραγματική λύση. Οι μέθοδοι πεπερασμένων διαφορών βασίζονται συνήθως σε ένα ανάπτυγμα Taylor το οποίο είναι περικομμένο κατά κάποιο όρο, εξ'ού και η ονομασία. Τα σφάλματα αυτά δεν εξαρτώνται από την εφαρμογή, αλλά είναι εγγενή στον αλγόριθμο.
- Σφάλματα στρογγυλοποίησης, που σχετίζονται με σφάλματα που έχουν να κάνουν με μια συγκεκριμένη υλοποίηση του αλγορίθμου. Για παράδειγμα, στον πεπερασμένο αριθμό ψηφίων που χρησιμοποιούνται στον αριθμητικό υπολογιστή.

Αμφότερα τα λάθη μπορούν να μειωθούν με τη μείωση του χρόνου  $\Delta t$ . Για τα μεγάλα  $\Delta t$  κυριαρχούν τα σφάλματα αποκοπής, αλλά μειώνονται γρήγορα όσο το  $\Delta t$  μειώνεται. Για παράδειγμα, ο αλγόριθμος Verlet που θα αναλυθεί στην επόμενη ενότητα έχει ένα σφάλμα αποκοπής ανάλογη με το  $\Delta t^4$  για κάθε χρονικό βήμα ολοκλήρωσης. Τα σφάλματα στρογγυλοποίησης μειώνονται πιο αργά με τη μείωση του  $\Delta t$ , και κυριαρχούν σε μικρά  $\Delta t$ . Η επιλογή ακρίβειας 64-bit (που αντιστοιχεί σε «διπλή ακρίβεια» για την πλειοψηφία των σημερινών σταθμών εργασίας) βοηθά στην ελαχιστοποίηση των σφαλμάτων στρογγυλοποίησης [13][14].

### **2.4.1 Ο αλγόριθμος του Verlet**

Στη μοριακή δυναμική, ο πιο συχνά χρησιμοποιούμενος αλγόριθμος ολοκλήρωσης είναι πιθανώς ο λεγόμενος αλγόριθμος Verlet [8]. Η βασική ιδέα

είναι να γραφτούν δύο αναπτύγματα Taylor τρίτης τάξης για τις θέσεις  $r(t)$ , το ένα εμπρός και το άλλο πίσω στο χρόνο. Ονομάζοντας με  $v$  τις ταχύτητες, με  $a$  τις επιταχύνσεις, και  $b$  την τρίτη παράγωγο του  $r$  ως προς το  $t$ , τότε έχουμε:

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{1}{2}a(t)\Delta t^2 + \frac{1}{6}b(t)\Delta t^3 + O(\Delta t^4) \quad \text{Εξίσωση 2.11}$$

$$r(t - \Delta t) = r(t) - v(t)\Delta t + \frac{1}{2}a(t)\Delta t^2 - \frac{1}{6}b(t)\Delta t^3 + O(\Delta t^4) \quad \text{Εξίσωση 2.12}$$

Προσθέτοντας τις δύο αυτές εξισώσεις, παίρνουμε :

$$r(t + \Delta t) = 2r(t) - r(t - \Delta t) + a(t)\Delta t^2 + O(\Delta t^4) \quad \text{Εξίσωση 2.13}$$

Αυτή είναι η βασική μορφή του αλγόριθμου του Verlet. Από τη στιγμή που θα ολοκληρώσουμε τις εξισώσεις του Newton, η επιτάχυνση  $a(t)$  είναι απλώς η δύναμη διαιρεμένη προς τη μάζα και η δύναμη με τη σειρά της, είναι μια έκφραση των θέσεων  $r(t)$ .

$$a(t) = -\frac{1}{m}\nabla U(r(t)) \quad \text{Εξίσωση 2.14}$$

Όπως θα μπορούσε κανείς να διαπιστώσει από την πρώτη ματιά, ένα λάθος αποκοπής του αλγορίθμου εμφανίζεται σε κάθε εξέλιξη του συστήματος για χρονικό βήμα  $\Delta t$  και μάλιστα τέταρτης τάξης  $\Delta t^4$ , ακόμα και αν η τρίτη παράγωγος δεν εμφανίζεται πλήρως. Την ίδια στιγμή όμως ο αλγόριθμος καθίσταται απλός στην υλοποίηση, ακριβής και σταθερός, πράγμα που εξηγεί την μεγάλη απήχηση που έχει σε σχέση με όλες τις μεθόδους μοριακής δυναμικής προσομοίωσης.

#### 2.4.2 Ο αλγόριθμος της ταχύτητας του Verlet

Ένα πρόβλημα με αυτή την έκδοση του αλγορίθμου του Verlet είναι ότι οι ταχύτητες δεν παράγονται άμεσα. Αν και δεν είναι απαραίτητες για την εξέλιξη του χρόνου, η γνώση τους είναι μερικές φορές απαραίτητη. Επιπλέον, οφείλουμε να υπολογίσουμε την κινητική ενέργεια  $K$ , της οποίας η αξιολόγηση είναι απαραίτητη για να ελέγξουμε τη διατήρηση της συνολικής ενέργειας  $E=K+U$ . Αυτό είναι μια από τις πιο σημαντικές δοκιμές για να βεβαιωθούμε ότι μια προσομοίωση ΜΔ προχωρά σωστά. Θα μπορούσε κανείς να υπολογίσει τις ταχύτητες από τις θέσεις χρησιμοποιώντας

$$v(t) = \frac{r(t+\Delta t) - r(t-\Delta t)}{2\Delta t} \quad \text{Εξίσωση 2.15}$$

Ωστόσο το σφάλμα που σχετίζεται με αυτό τον υπολογισμό είναι  $\Delta t^2$  τάξης και όχι  $\Delta t^4$ . Στην πράξη όμως συνθέτοντας τις (2) και (3) έχουμε :

$$v(t) = \frac{r(t+\Delta t) - r(t-\Delta t)}{2\Delta t} + \frac{1}{6}b(t)\Delta t^2 + O(\Delta t^3) \quad \text{Εξίσωση 2.16}$$

Για να ξεπεραστεί αυτή η δυσκολία, έχουν αναπτυχθεί μερικές παραλλαγές του αλγορίθμου Verlet. Μπορούν να προκαλέσουν την ίδια ακριβώς τροχιά, και η διαφορά τους έγκειται στις μεταβλητές στη μνήμη θα αποθηκευτούν οι ταχύτητες και στις χρονικές στιγμές. Για παράδειγμα, μια ακόμα καλύτερη εφαρμογή του ίδιου βασικού αλγορίθμου είναι το λεγόμενο σύστημα ταχυτήτων Verlet, όπου οι θέσεις, οι ταχύτητες και επιταχύνσεις στο χρόνο  $t + \Delta t$  λαμβάνονται από τις ίδιες ποσότητες σε χρόνο  $t$  με τον ακόλουθο τρόπο :

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\mathbf{a}(t)\Delta t^2 \quad \text{Εξίσωση 2.17}$$

$$\mathbf{v}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = \mathbf{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\mathbf{a}(t)\Delta t^2 \quad \text{Εξίσωση 2.18}$$

$$\mathbf{a}(t + \Delta t) = -\frac{1}{m}\nabla U(\mathbf{r}(t + \Delta t)) \quad \text{Εξίσωση 2.19}$$

$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{1}{2}\mathbf{a}(t + \Delta t)\Delta t \quad \text{Εξίσωση 2.20}$$

Σημειώνουμε πως χρειαζόμαστε 9N θέσεις μνήμης για να αποθηκεύσουμε τις N θέσεις, ταχύτητες και επιταχύνσεις, αλλά ποτέ δε χρειάζεται να έχουμε ταυτόχρονα αποθηκευμένες τις τιμές σε δύο διαφορετικές χρονικές στιγμές για κάθε μία από αυτές τις ποσότητες. Πράγμα που σημαίνει πως μπορούμε να κάνουμε επαρκή διαχείριση των διαθέσιμων δυνατοτήτων όσο αναφορά τη φυσική μνήμη του συστήματος.

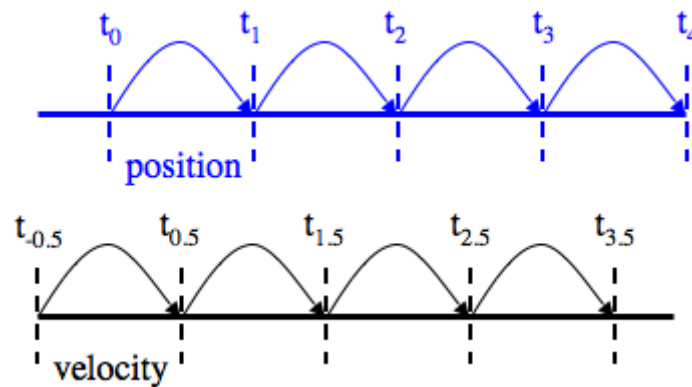
### 2.4.3 Ο αλγόριθμος leap-frog

Μια άλλη παραλλαγή του αλγορίθμου Verlet που χρησιμοποιείται, η οποία είναι παρόμοια με την προηγούμενη, είναι η λεγόμενη leap-frog (το άλμα του βάτραχου). Η ολοκλήρωση leap-frog είναι ισοδύναμη με τον υπολογισμό θέσεων και ταχυτήτων κατά τα ενδιάμεσα χρονικά σημεία που παρεμβάλλονται της αρχικής διακριτοποίησης, διαστρωμένα με τέτοιο τρόπο ώστε να «προσπερνούν» το ένα πάνω από το άλλο δημιουργώντας έτσι επικάλυψη. Για παράδειγμα, μια θέση είναι γνωστή κατά ακέραια χρονικά βήματα και μια ταχύτητα είναι γνωστή κατά το ίδιο ακέραιο χρονικό διάστημα συν το ήμισυ χρονικό βήμα. Οι εξισώσεις για τον αλγόριθμο leap-frog μπορούν να γραφτούν :

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right)\Delta t \quad \text{Εξίσωση 2.21}$$

$$\mathbf{v}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = \mathbf{v}\left(t - \frac{\Delta t}{2}\right) + \mathbf{a}(t)\Delta t \quad \text{Εξίσωση 2.22}$$

Σημειώνεται ότι κατά την έναρξη ( $t = 0$ ) της επανάληψης leap-frog, σε ένα πρώτο βήμα όπου  $t = \Delta T / 2$ , στο υπολογισμό του  $\mathbf{v}(t + \Delta t / 2)$ , είναι αναγκαία η ταχύτητα στο  $t = -\Delta t / 2$ . Εκ πρώτης όψεως, αυτό θα μπορούσε να προκαλέσει προβλήματα, διότι οι αρχικές συνθήκες είναι γνωστές μόνο στον αρχικό χρόνο ( $t = 0$ ). Συνήθως, η αρχική ταχύτητα χρησιμοποιείται στη θέση του όρου  $\mathbf{v}(-\Delta t)$ . Το σφάλμα τότε για το πρώτο χρονικό βήμα υπολογισμού είναι της τάξης του  $O(\Delta t^2)$ . Αυτό δε θεωρείται πρόβλημα, διότι σε μια προσομοίωση πάνω από ένα μεγάλο ποσό χρονικών βημάτων, το λάθος στο πρώτο βήμα χρόνου είναι ένα αμελητέο μικρό ποσό του συνολικού σφάλματος, το οποίο κατά το χρόνο  $t=n\Delta t$  είναι της τάξης του  $O(e^{Ln\Delta t}\Delta t^2)$ .



Εικόνα 5: Μια απεικόνιση του αλγορίθμου Leap-Frog

#### 2.4.4 Όροι σφάλματος

Το τοπικό σφάλμα στη θέση ολοκλήρωσης του αλγόριθμου Verlet είναι  $O(\Delta t^4)$  όπως περιεγράφηκε και παραπάνω, ενώ το τοπικό σφάλμα στην ταχύτητα είναι  $O(\Delta t^2)$ .

Σε αντίθεση με τα παραπάνω το καθολικό σφάλμα στη θέση ολοκλήρωσης είναι δεύτερης τάξης  $O(\Delta t^2)$ , όπως και το αντίστοιχο της ταχύτητας. Αυτό μπορεί να προκύψει ως εξής :

$$error(\mathbf{r}(t_0 + \Delta t)) = O(\Delta t^4)$$

Από την (2.13) :

$$\mathbf{r}(t_0 + 2\Delta t) = 2\mathbf{r}(t_0 + \Delta t) - \mathbf{r}(t_0) + \mathbf{a}(t_0 + \Delta t)\Delta t^2 + O(\Delta t^4)$$



Έτσι προκύπτει :

$$error(\mathbf{r}(t_0 + 2\Delta t)) = 2error(\mathbf{r}(t_0 + \Delta t)) + O(\Delta t^4) = 3O(\Delta t^4) \quad \text{Εξίσωση 2.23}$$

Κατά τον υπολογισμό της παραπάνω εξίσωσης, πρέπει να δώσουμε προσοχή στο ότι δεν πρέπει να αθροίζονται τα σφάλματα στο  $\mathbf{r}(t_0 + \Delta t)$  και στο  $\mathbf{r}(t_0)$ , όπως κάνει κανείς όταν ασχολείται με τα τυχαία σφάλματα, αλλά θα πρέπει να κρατήσουμε το αρνητικό σύμβολο δεδομένου ότι το σφάλμα του πρώτου όρου εξαρτάται από το σφάλμα του δεύτερου σύμφωνα με μια ακριβή σχέση, και κατά συνέπεια να πηγαίνει πάντα προς την ίδια κατεύθυνση. Ομοίως στον προηγούμενο υπολογισμό, έχουμε:

$$error(\mathbf{r}(t_0 + 3\Delta t)) = 6O(\Delta t^4)$$

$$error(\mathbf{r}(t_0 + 4\Delta t)) = 10O(\Delta t^4)$$

$$error(\mathbf{r}(t_0 + 5\Delta t)) = 15O(\Delta t^4)$$

Το οποίο μπορεί να γενικευτεί επαγωγικά σε :

$$error(\mathbf{r}(t_0 + n\Delta t)) = \frac{n(n+1)}{2}O(\Delta t^4) \quad \text{Εξίσωση 2.24}$$

Αν λάβουμε υπόψη μας το καθολικό σφάλμα μεταξύ  $\mathbf{r}(t)$  και  $\mathbf{r}(t+T)$  με  $T=n\Delta t$ , είναι προφανές ότι :

$$error(\mathbf{r}(t_0 + T)) = \left( \frac{T^2}{2\Delta t^2} + \frac{T}{2\Delta T} \right) O(\Delta t^4)$$

Και έτσι το συσσωρευμένο καθολικό σφάλμα σε ένα σταθερό χρονικό διάστημα δίνεται από τη σχέση :

$$error(\mathbf{r}(t_0 + T)) = O(\Delta t^2) \quad \text{Εξίσωση 2.25}$$

Επειδή η ταχύτητα προσδιορίζεται σε *μη συσσωρευμένη μορφή*<sup>1</sup> από τις θέσεις του αλγόριθμου ολοκλήρωσης Verlet, το καθολικό σφάλμα στην ταχύτητα είναι επίσης  $O(\Delta t^2)$ .

---

<sup>1</sup> Στον αλγόριθμο Verlet η ταχύτητα δεν παίζει κανένα ρόλο στην ολοκλήρωση των εξισώσεων κίνησης. Ωστόσο, οι ταχύτητες συχνά είναι απαραίτητες για τον υπολογισμό ορισμένων φυσικών ποσοτήτων όπως η κινητική ενέργεια. Αυτή η ανεπάρκεια μπορεί είτε να

Σε προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής, το καθολικό σφάλμα είναι συνήθως πολύ πιο σημαντικό από το τοπικό σφάλμα, και επομένως ο αλγόριθμος ολοκλήρωσης Verlet είναι γνωστός ως ολοκληρωτής δεύτερης τάξης.

## 2.5 Απλές στατιστικές ποσότητες

Μέτρηση ποσοτήτων στη μοριακή δυναμική συνήθως σημαίνει υπολογισμός χρονικών μέσων όρων των φυσικών ιδιοτήτων κατά τη διάρκεια της τροχιάς του συστήματος. Οι φυσικές ιδιότητες είναι συνήθως συνάρτηση των συντεταγμένων των σωματιδίων και των ταχυτήτων. Έτσι, για παράδειγμα, μπορεί κανείς να ορίσει τη στιγμιαία τιμή μιας γενικής φυσικής ιδιότητας  $A$  σε χρόνο  $t$  :

$$A(t) = f(\mathbf{r}_1(t), \dots, \mathbf{r}_N(t), \mathbf{v}_1(t), \dots, \mathbf{v}_N(t)) \quad \text{Εξίσωση 2.26}$$

Και στη συνέχεια να βρει το μέσο όρο :

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N_T} \sum_{t=1}^{N_T} A(t) \quad \text{Εξίσωση 2.27}$$

όπου το  $t$  είναι ένας δείκτης που τρέχει πάνω στα χρονικά βήματα από 1 έως το συνολικό αριθμό των βημάτων  $N_T$ . Υπάρχουν δύο ισοδύναμοι τρόποι να γίνει αυτό στην πράξη:

1. Η  $A(t)$  υπολογίζεται σε κάθε χρονικό βήμα από το πρόγραμμα της Μοριακής Δυναμικής, ενώ τρέχει. Το άθροισμα  $\sum_{t=1}^{N_T} A(t)$  επίσης ενημερώνεται σε κάθε βήμα. Στο τέλος του πειράματος, η μέση τιμή λαμβάνεται αμέσως διαιρώντας με τον αριθμό των βημάτων. Αυτή είναι η προτιμώμενη μέθοδος όταν η ποσότητα είναι απλό να υπολογιστεί ή/και η φυσική ιδιότητα αυτή είναι ιδιαίτερα σημαντική. Ένα παράδειγμα είναι η θερμοκρασία του συστήματος.
2. Οι θέσεις (και ενδεχομένως οι ταχύτητες) αποθηκεύονται περιοδικά σε ένα αρχείο τροχιάς, καθώς το πρόγραμμα εκτελείται. Ένα ξεχωριστό πρόγραμμα, το οποίο τρέχει μετά το πρόγραμμα προσομοίωσης, επεξεργάζεται την τροχιά και υπολογίζει τις επιθυμητές ποσότητες. Αυτή η προσέγγιση μπορεί να είναι πολύ απαιτητική από άποψη χώρου στο

---

αντιμετωπιστεί κάνοντας χρήση του αλγορίθμου της ταχύτητας Verlet (ή του Leap-Frog) είτε την εκτίμηση της ταχύτητας με τη χρήση των όρων θέσης από την εξίσωση (6), η οποία έχει τοπικό σφάλμα  $O(\Delta t^2)$ . Δεδομένου αυτού, η ταχύτητα εξαρτάται μόνο από τις θέσεις και όχι από τις ταχύτητες που υπολογίστηκαν σε προηγούμενες ολοκληρώσεις, η έκφραση της μη συσσωρευμένης μορφής χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό της ταχύτητας στον αλγόριθμο Verlet.

δίσκο: αποθέτοντας θέσεις και ταχύτητες χρησιμοποιώντας 64-bit ακρίβεια διαρκεί 48 bytes ανά βήμα και ανά σωματίδιο. Ωστόσο, συχνά χρησιμοποιείται όταν οι ποσότητες για τον υπολογισμό είναι περίπλοκες, ή συνδυάζουν διαφορετικούς χρόνους όπως σε δυναμικές συσχετίσεις, ή όταν εξαρτώνται από άλλες πρόσθετες παραμέτρους που μπορεί να είναι άγνωστες όταν το πρόγραμμα ΜΔ εκτελείται. Σε αυτές τις περιπτώσεις, η προσομοίωση εκτελείται μία φορά, αλλά η προκύπτουσα τροχιά μπορεί να υποστεί επεξεργασία ξανά και ξανά.

### 2.5.1 Δυναμική ενέργεια

Η μέση δυναμική ενέργεια  $U$  λαμβάνεται από το μέσο όρο των στιγμιαίων τιμών της, η οποία επιτυγχάνεται συνήθως ευθέως κατά τον ίδιο χρόνο όπου γίνεται ο υπολογισμός της δύναμης. Για παράδειγμα, στην περίπτωση των αλληλεπιδράσεων δυο σωμάτων

$$U(t) = \sum_i \sum_{j>i} \varphi(|\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_j(t)|) \quad \text{Εξίσωση 2.28}$$

Ακόμα κι αν δεν είναι απολύτως απαραίτητο να ολοκληρώσουμε ως προς το χρόνο (οι δυνάμεις είναι όλα όσα χρειάζεται κάποιος), η γνώση του  $U$  απαιτείται για την επαλήθευση της διατήρησης της ενέργειας. Αυτός είναι ένας σημαντικός υπολογισμός που θα πρέπει να γίνεται σε κάθε ΜΔ προσομοίωση.

Όπως αναφέρθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο, όταν κάποιος ασχολείται με τις αλληλεπιδράσεις μικρής εμβέλειας, το δυναμικό και η δύναμη συνήθως περικόπτονται σε κάποια απόσταση αποκοπής  $R_c$  για λόγους υπολογιστικής σκοπιμότητας. Κατά συνέπεια, το αποτελεσματικό δυναμικό στην περίπτωση μας θα είναι:

$$\varphi(r_{ij}) = \begin{cases} \varphi_{LJ}(r_{ij}) & \text{if } r_{ij} \leq R_c \\ 0 & \text{if } r_{ij} > R_c \end{cases} \quad \text{Εξίσωση 2.29}$$

Αυτή η περικοπή σημαίνει ότι ορισμένες φυσικές ποσότητες όπως η δυναμική ενέργεια και η πίεση πρέπει να διορθωθεί για να ληφθεί μία τιμή κοντά στην τιμή που θα έπαιρνε αν λαμβάναμε υπόψη το ακριβές δυναμικό [13][15]. Μια προσέγγιση της διόρθωσης μπορεί να επιτευχθεί με την παραδοχή ότι οι χωρικοί συσχετισμοί πέρα από την απόσταση αποκοπής είναι μοναδιαίοι. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι αυτό δεν είναι μια καλή υπόθεση σε ανομοιογενή υγρά. Θα χρησιμοποιήσουμε την ακόλουθη έκφραση για το μεγάλο εύρος διόρθωσης που πρέπει να εφαρμοστεί σε κάθε όρο του εξωτερικού αθροίσματος (2.28) :

$$\varphi_{LRC} = \frac{1}{2} 4\pi\rho \int_{R_c}^{\infty} dr_{ij} r_{ij}^2 \varphi_{LJ}(r_{ij}) = 8\pi\rho\epsilon\sigma^3 \left[ \frac{1}{9} \left(\frac{\sigma}{R_c}\right)^9 - \frac{1}{3} \left(\frac{\sigma}{R_c}\right)^3 \right] \quad \text{Εξίσωση 2.30}$$

Όπου  $\rho$  είναι ο αριθμός πυκνότητας  $N/V$ .

### 2.5.2 Κινητική ενέργεια

Η στιγμιαία κινητική ενέργεια, δίνεται ως γνωστών από τη σχέση :

$$K(t) = \frac{1}{2} \sum_i m_i [u_i(t)]^2 \quad \text{Εξίσωση 2.31}$$

Και επομένως είναι ιδιαίτερα εύκολο να υπολογιστεί. Κατά αντιστοιχία το ίδιο εύκολα υπολογίζεται και ο μέσος όρος της  $K$ .

### 2.5.3 Ολική ενέργεια

Η συνολική ενέργεια  $E = K + U$  είναι μια διατηρούμενη ποσότητα στη Νευτώνεια δυναμική. Ωστόσο, είναι κοινή πρακτική να την υπολογίσουμε σε κάθε χρονικό βήμα, προκειμένου να εξακριβωθεί εάν είναι πράγματι σταθερή και διατηρείται με το χρόνο. Με άλλα λόγια, κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης η ενέργεια μετατρέπεται από κινητική σε δυναμική και πίσω, προκαλώντας  $K(t)$  και  $U(t)$  να παρουσιάζουν διακυμάνσεις, ενώ το άθροισμά τους παραμένει σταθερό.

Στην πράξη, θα μπορούσαν να υπάρχουν μικρές διακυμάνσεις στη συνολική ενέργεια, σε ένα τυπικό μέγεθος της τάξης του  $10^4$  ή λιγότερο. Αυτές οι διακυμάνσεις συνήθως προκαλούνται από λάθη στην ολοκλήρωση του χρόνου και μπορούν να μειωθούν σε μέγεθος με τη μείωση του χρονικού βήματος, αν αυτά θεωρηθούν μεγάλα.

Αργές μετατοπίσεις της συνολικής ενέργειας παρατηρούνται μερικές φορές σε πολύ μεγάλες προσομοιώσεις. Μια τέτοια μετατόπιση θα μπορούσε επίσης να προέρχεται από μια υπερβολική τιμή του  $t$ . Η μετατόπιση της ενέργειας είναι πιο ανησυχητική από ότι οι διακυμάνσεις επειδή η θερμοδυναμική κατάσταση του συστήματος, μεταβάλλεται μαζί με την ενέργεια και ως εκ τούτου οι μέσοι όροι που λαμβάνονται κατά την προσομοίωση δεν αναφέρονται σε μια ενιαία κατάσταση. Εάν υπάρχει η τάση να συμβεί μετατόπιση της ολικής ενέργειας κατά τη διάρκεια μιας προσομοίωσης, μπορεί να προληφθεί, για παράδειγμα με το σπάσιμο της προσομοίωσης σε μικρότερα κομμάτια και την αντικατάσταση της ενέργειας προς την ονομαστική της αξία μεταξύ της προηγούμενης και της επόμενης προσομοίωσης. Ένας κοινός τρόπος για να ρυθμιστεί η ενέργεια είναι η τροποποίηση της κινητικής ενέργειας μέσω του επαναπροσδιορισμού των ταχυτήτων.

Ένα τελευταίο σημείο προσοχής είναι όταν κάποιος μπει στον πειρασμό να επιτύχει την τέλεια διατήρηση της ενέργειας, μειώνοντας το βήμα του χρόνου τόσο ώστε να οδηγήσει το σύστημα σε μεγάλους και άσκοπους χρόνους υπολογισμού. Ένας συμβιβασμός θα επιτρέψει κατά πάσα πιθανότητα τις

μικρές ενεργειακές διακυμάνσεις και ίσως μερικές αργές ενεργειακές μετατοπίσεις, ως το αντίτιμο για να εργαστεί με ένα αρκετά μεγάλο  $\Delta t$  (2.31).

#### 2.5.4 Θερμοκρασία

Η θερμοκρασία  $T$  σχετίζεται άμεσα με την κινητική ενέργεια από τη γνωστή φόρμουλα ισοκατανομής, ορίζοντας μια μέση κινητική ενέργεια  $k_B T/2$  ανά βαθμό ελευθερίας:

$$K = \frac{3}{2} N k_B T \quad \text{Εξίσωση 2.32}$$

Μια εκτίμηση της θερμοκρασίας επομένως λαμβάνεται απευθείας από τη μέση κινητική ενέργεια  $K$  (παράγραφος 2.5.2). Για πρακτικούς σκοπούς, είναι επίσης κοινή πρακτική να καθορίζεται μια «στιγμιαία θερμοκρασία»  $T(t)$ , ανάλογη με την στιγμιαία κινητική ενέργεια  $K(t)$  με μία σχέση ανάλογη με την παραπάνω.

#### 2.5.5 Συνάρτηση ακτινικής κατανομής

Μία από τις πιο σημαντικές στατιστικές ιδιότητες που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για το χαρακτηρισμό υγρών γενικά αλλά και LJ υγρών ειδικότερα, είναι η συνάρτηση ακτινικής κατανομής (Radial Distribution Function), που ορίζεται:

$$g(r) = \frac{1}{\rho^4 \pi r^2 dr} \sum_{ij} \langle \delta(r - |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \rangle \quad \text{Εξίσωση 2.33}$$

Όπου  $\delta(x)$  είναι η συνάρτηση:  $\delta(0) = 1$ , και  $\delta(x) = 0$  για  $x \neq 0$ . Η συνάρτηση ακτινικής κατανομής είναι σημαντική για τρεις λόγους :

1. για κατά ζεύγη πρόσθετα δυναμικά όπως το LJ, όπου η γνώση της συνάρτησης ακτινικής κατανομής δίνει επαρκείς πληροφορίες για τον υπολογισμό των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων, ιδιαίτερα της ενέργειας και της πίεσης.
2. υπάρχουν πολύ αναπτυγμένες θεωρίες ολοκλήρωσης που επιτρέπουν προσδιορισμό της συνάρτησης ακτινικής κατανομής για ένα συγκεκριμένο μοντέλο μοριακής δυναμικής
3. η RDF μπορεί να μετρηθεί πειραματικά, χρησιμοποιώντας τεχνικές σκέδασης νετρονίων.

#### 2.5.6 Μέση τετραγωνική μετατόπιση και συνάρτηση αυτοσυσχέτισης της ταχύτητας

Δύο από τις πιο σημαντικές δυναμικές ιδιότητες που χρησιμοποιούνται για να χαρακτηρίσουν ένα υγρό είναι η μέση τετραγωνική μετατόπιση (MSD: Mean Square Displacement) και η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης της ταχύτητας (VACF: Velocity Autocorrelation Function).

Η μέση τετραγωνική μετατόπιση των ατόμων μπορεί εύκολα να υπολογιστεί σε μια προσομοίωση σύμφωνα με τον ορισμό της, δηλαδή :

$$\Delta r^2(t) = \langle |r(t) - r(0)|^2 \rangle \quad \text{Εξίσωση 2.34}$$

Όπου η αγκύλη  $\langle \dots \rangle$  καταδεικνύει τη μέση τιμή στο σύνολο των ατόμων (ή όλων των ατόμων σε μια υποομάδα). Σε αυτή την περίπτωση πρέπει να δοθεί προσοχή στα «άλματα» των σωματιδίων που τείνουν να εμφανιστούν και σε δίπλα περιοχές όταν χρησιμοποιούνται περιοδικές οριακές συνθήκες που συμβάλλουν στη διάχυση.

Η MSD περιέχει πληροφορίες σχετικά με την ατομική ικανότητα διάχυσης. Αν το σύστημα είναι στερεό, η MSD συγκλίνει σε μια πεπερασμένη τιμή, ενώ εάν το σύστημα είναι υγρό, η MSD αυξάνει γραμμικά με το χρόνο. Σε αυτή την περίπτωση, είναι χρήσιμο να χαρακτηριστεί η συμπεριφορά του συστήματος από την άποψη της κλίσης. Η κλίση αυτή είναι ο γνωστός συντελεστής διάχυσης  $D$ :

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2dt} \langle |r(t) - r(0)|^2 \rangle$$

Όπου  $d$  είναι η διάσταση του συστήματος, συνήθως 2 ή 3.

Η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης της ταχύτητας ορίζεται ως :

$$C(t) = \langle v(t) \cdot v(0) \rangle \quad \text{Εξίσωση 2.35}$$

Και σχετίζεται με τη μέση τετραγωνική μετατόπιση με τη σχέση :

$$D = \frac{1}{d} \int_0^\infty dt \langle v(t) \cdot v(0) \rangle \quad \text{Εξίσωση 2.36}$$

### 2.5.7 Πίεση

Η μέτρηση της πίεσης σε μια προσομοίωση μοριακής δυναμικής βασίζεται στην εξίσωση Clausius.

$$W(r_1, \dots, r_N) = \sum_{i=1}^N r_i \cdot F_i^{TOT} \quad \text{Εξίσωση 2.37}$$

Όπου  $F_i^{TOT}$  είναι η συνολική δύναμη δράσης πάνω σε ένα άτομο  $i$ . Ο στατιστικός μέσος όρος της  $\langle W \rangle$ , εξάγεται ως συνήθως ως μέσος όρος πάνω στην τροχιά της μοριακής δυναμικής:

$$\langle W \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t d\tau \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i(\tau) \cdot m_i \mathbf{a}_i(\tau)$$

όπου γίνεται χρήση του πρώτου νόμου του Νεύτωνα. Ολοκληρώνοντας κατά μέρη προκύπτει :

$$\langle W \rangle = - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t d\tau \sum_{i=1}^N m_i |\mathbf{v}_i(\tau)|^2$$

Αυτό είναι δύο φορές η μέση κινητική ενέργεια, ως εκ τούτου, από το νόμο ισοκατανομής της στατιστικής μηχανικής έχουμε :

$$\langle W \rangle = -dNk_B T \quad \text{Εξίσωση 2.38}$$

Όπου  $k_B$  είναι η σταθερά του Boltzmann.

Τώρα, μπορεί κανείς να σκεφτεί τη συνολική δύναμη που δρα σε ένα σωματίδιο ως το άθροισμα δύο δυνάμεων :

$$\mathbf{F}_i^{TOT} = \mathbf{F}_i + \mathbf{F}_i^{EXT} \quad \text{Εξίσωση 2.39}$$

όπου  $\mathbf{F}_i$  είναι η εσωτερική δύναμη που προέρχεται από τις ενδοατομικές αλληλοεπιδράσεις και  $\mathbf{F}_i^{EXT}$  είναι η εξωτερική δύναμη που ασκείται από τα τοιχώματα του συστήματος.

Εάν τα σωματίδια περικλείονται σε ένα παραλληλεπίπεδο χώρο με πλευρές  $L_x$ ,  $L_y$ ,  $L_z$  ο όγκος είναι  $V = L_x L_y L_z$  και με το κέντρο συντεταγμένων να ορίζεται σε μια από τις γωνίες του, τότε το  $\langle W^{EXT} \rangle$  μπορεί να υπολογιστεί βάση την (2.37) ως :

$$\langle W^{EXT} \rangle = L_x (-PL_y L_z) + L_y (-PL_x L_z) + L_z (-PL_x L_y) = -dPV$$

Όπου το  $-PL_y L_z$  είναι η δύναμη  $F_x^{EXT}$  που ασκείται από τον yz τοίχο κατά μήκος της x διάστασης σε ένα σωματίδιο που βρίσκεται σε απόσταση  $x=L_x$  και ούτω κάθε εξής. Έτσι η (2.38) μπορεί να γραφτεί ως :

$$\left\langle \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{F}_i \right\rangle - dPV = -dNk_B T$$

Ή αλλιώς,

$$PV = Nk_B T + \frac{1}{d} \langle \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{F}_i \rangle \quad \text{Εξίσωση 2.40}$$

Όλες οι ποσότητες, εκτός από την πίεση  $P$  είναι εύκολα προσβάσιμες σε μια προσομοίωση, και ως εκ τούτου η (2.40) αποτελεί έναν τρόπο για να μετρήσει κανείς την πίεση  $P$ . Σημειώνεται πως η (2.40) εκφυλλίζεται στη γνωστή εξίσωση κατάστασης των τέλειων αερίων, εάν τα σωματίδια δεν αλληλοεπιδρούν.

Στην περίπτωση των κατά ζεύγη αλληλοεπιδράσεων μέσω ενός δυναμικού  $\varphi(r)$ , η (2.40) γίνεται :

$$PV = Nk_B T - \frac{1}{d} \langle \sum_i \sum_{j>i} r_{ij} \frac{d\varphi}{dr} \Big|_{r_{ij}} \rangle \quad \text{Εξίσωση 2.41}$$

Η έκφραση αυτή έχει πρόσθετο πλεονέκτημα έναντι της (2.40) να ταιριάζει φυσικά όταν υπάρχουν περιοδικές οριακές συνθήκες, αρκεί να ληφθούν υπόψη κατά τον ορισμό του  $r_{ij}$ .

Όσο για τη δυναμική ενέργεια, και η έκφραση της πίεσης πρέπει να διορθωθεί αν γίνεται αποκοπή δυναμικού στην αριθμητική προσομοίωση. Με βάση την ίδια υπόθεση που αναφέρεται στην παράγραφο 2.5.1 μπορούμε να κάνουμε την ακόλουθη διόρθωση που πρέπει να εφαρμόζονται σε κάθε εξωτερικό άθροισμα στους τύπους πίεσης, που αντιστοιχεί στη συνεισφορά του κάθε  $ij$  ζεύγους :

$$P_{LRC} = \frac{1}{2} 4\pi\rho^2 \int_{R_c}^{\infty} dr_{ij} r_{ij}^2 \mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{F}_{ij} = 8\pi\rho^2 \epsilon\sigma^3 \left[ \frac{4}{9} \left( \frac{\sigma}{R_c} \right)^9 - \frac{2}{3} \left( \frac{\sigma}{R_c} \right)^3 \right] \quad \text{Εξίσωση 2.42}$$

## **2.6 Άλλες υπολογιστικές πτυχές των μοντέλων**

### **2.6.1 Αδιάστατες μονάδες μέτρησης**

Η τελική αλγεβρική σχέση που περιγράφει τα φυσικά φαινόμενα πρέπει να τηρεί ορισμένο και αμετάβλητο σύστημα συντεταγμένων σε σχέση με τις εξαρτημένες μεταβλητές της. Αυτό περιορίζει έντονα τη μορφή των πιθανών αλγεβρικών εκφράσεων που περιγράφουν φυσικά φαινόμενα και είναι η βάση της διαστατικής ανάλυσης.

Στον κόσμο της μοριακής δυναμικής, υπάρχει και ένας άλλος λόγος για τον οποίο οι ερευνητές προτιμούν να επιλέξουν «μη συμβατικές» μονάδες. Τα τυπικά μεγέθη προσομοίωσης με μοριακή δυναμική είναι πολύ μικρά, έως και 1000 άτομα. Ως συνέπεια αυτού, οι περισσότερες από τις ποσότητες που καλούνται να υπολογιστούν είναι μικρές σε μέγεθος όταν μετρούνται σε μακροσκοπικές μονάδες. Υπάρχουν δύο δυνατότητες για να ξεπεραστεί αυτό το πρόβλημα: είτε θα πρέπει να δουλέψουμε με τις μονάδες ατομικής κλίμακας (ps-petaseconds, a.m.u.- atomic mass unit, nm) ή να αδιαστατοποιήσουμε όλες



τις μετρούμενες ποσότητες ως προς τις χαρακτηριστικές τιμές τους. Η δεύτερη προσέγγιση είναι η πιο δημοφιλής. Η αδιαστατοποίηση γίνεται με τις παραμέτρους του μοντέλου, π.χ. στην περίπτωση του μοντέλου LJ: με το μέγεθος  $\sigma$ , την ενέργεια  $\epsilon$ , τη μάζα  $m$  κλπ. Έτσι, η κοινή συνταγή είναι, κάποιος να επιλέγει αυθαίρετα μια τιμή δυναμικού ( $\epsilon$ ) για ένα ζεύγος ατόμων/μορίων και στη συνέχεια οι υπόλοιπες παράμετροι του μοντέλου (π.χ. η συνολική ενέργεια  $E$ ) δίδονται σε όρους αυτής της τιμής αναφοράς ( $E^* = E / \epsilon$ ). Οι άλλες παράμετροι υπολογίζονται επίσης με παρόμοιο τρόπο. Για παράδειγμα, δημιουργούμε τις αδιάστατες ποσότητες :

$$\text{απόσταση} \quad r^* = \frac{r}{\sigma} \quad \text{Εξίσωση 2.43}$$

$$\text{ενέργεια} \quad E^* = \frac{E}{\epsilon} \quad \text{Εξίσωση 2.44}$$

$$\text{θερμοκρασία} \quad T^* = \frac{k_B T}{\epsilon} \quad \text{Εξίσωση 2.45}$$

$$\text{πίεση} \quad P^* = \frac{P \sigma^3}{\epsilon} \quad \text{Εξίσωση 2.46}$$

$$\text{χρόνος} \quad t^* = \frac{t}{\sigma \sqrt{m/\epsilon}} \quad \text{Εξίσωση 2.47}$$

$$\text{δύναμη} \quad F^* = \frac{F \sigma}{\epsilon} \quad \text{Εξίσωση 2.48}$$

$$\text{πυκνότητα} \quad \rho^* = \frac{\rho \sigma^3}{m} \quad \text{Εξίσωση 2.49}$$

Αν γράψουμε το μοντέλο του δυναμικού LJ στην αδιαστατοποιημένη του μορφή:

$$\varphi_{LJ}^*(r^*) = 4 \left[ \left( \frac{1}{r^*} \right)^{12} - \left( \frac{1}{r^*} \right)^6 \right] \quad \text{Εξίσωση 2.50}$$

βλέπουμε ότι είναι ανεξάρτητο από παραμέτρους, συνεπώς, όλες οι ιδιότητες θα πρέπει επίσης να είναι ανεξάρτητες παραμέτρων. Εάν ένα δυναμικό έχει μόνο ένα ζευγάρι παραμέτρων, τότε αυτή η αδιαστατοποίηση έχει πολλά πλεονεκτήματα. Λόγου χάρη, το αδιαστατοποιημένο δυναμικό μπορεί να είναι πραγματικά αποτελεσματικό στη μείωση των μονάδων μέτρησης και καθώς τα αποτελέσματα υπολογισμού είναι πάντα τα ίδια, μπορούν να μεταφερθούν σε διαφορετικά συστήματα μέτρησης με απευθείας μετατροπή χρησιμοποιώντας τις παραμέτρους του μοντέλου  $\sigma$ ,  $\epsilon$  και  $m$ . Αυτό είναι ισοδύναμο με την επιλογή μονάδων για τις παραμέτρους και είναι βολικό ώστε να αναφέρονται οι ιδιότητες του συστήματος σε μορφή  $P^*(\rho^*)$ .

Για παράδειγμα, στον Πίνακα 2 φαίνονται οι τιμές των παραμέτρων του μοντέλου LJ για ορισμένα ευγενή αέρια τα οποία περιγράφονται καλά από ένα τέτοιο φυσικό μοντέλο.

	$\sigma$ (Å)	$\epsilon/k_B$ (K)	$m$ (a.m.u.)
Ne	0.278	32.29	20.18
Ar	3.405	119.8	39.95
Kr	3.680	166.6	83.80
Xe	3.924	257.4	131.29

Πίνακας 2: Παράμετροι του μοντέλου LJ για ορισμένα ευγενή αέρια

### 2.6.3 Παράμετροι προσομοίωσης

Όπως αναφέρθηκε και στα προηγούμενα κεφάλαια ασχολούμαστε περισσότερο με το μοντέλο των N όμοιων ατόμων που βρίσκονται σε μια περιοχή ελέγχου όπου οι περιοδικές οριακές συνθήκες εφαρμόζονται σε όλες τις κατευθύνσεις, και όπου τα άτομα αλληλοεπιδρούν το ένα με το άλλο μόνο μέσω ενός Lennard-Jones δυναμικού (2.50) σε αδιάστατη μορφή. Η παράγωγος του (2.50) σε σχέση με τη σχετική απόσταση  $r$  μεταξύ δύο σωματιδίων είναι ο όρος  $F_2$  στην εξίσωση (3.1) ( $F_3$  και όροι υψηλότερης τάξης αγνοούνται).

Τα N άτομα προσομοιώνονται σε ένα 3D παραλληλεπίπεδο με περιοδικές οριακές συνθήκες στο σημείο κατάστασης Lennard-Jones που ορίζεται από την αδιάστατη πυκνότητα:

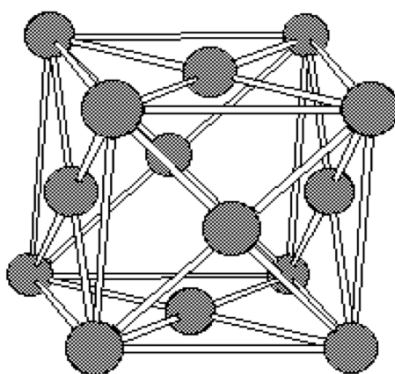
$$\rho^* = 0.8442$$

και την αδιάστατη θερμοκρασία :

$$T^* = 0.72$$

Αυτό είναι μια ρευστή κατάσταση κοντά στο τριπλό σημείο<sup>2</sup> Lennard-Jones.

Η προσομοίωση θα ξεκινήσει με τα άτομα σε ένα εδροκεντρωμένο (FCC) πλέγμα με τυχαίες ταχύτητες. Η διαμόρφωση FCC αντιπροσωπεύει μια διαμόρφωση ελάχιστης ενέργειας και κατά συνέπεια, θα ήταν σταθερή στο  $T=0$ , δηλαδή χωρίς κινητική ενέργεια ως στερεό κρύσταλλο. Από τη στιγμή που θα παρέχει κάποιος κινητική ενέργεια ( $T \neq 0$ ) σε αυτό το σύστημα, γρήγορα θα λιώσει και θα εξελιχθεί στη φυσική υγρή του κατάσταση. Η φάση ισορροπίας, σε αυτό το πολύ απλό μοντέλο, συμβαίνει πολύ γρήγορα. Μια σχεδόν ομοιόμορφη αδιάστατη πυκνότητα διατηρείται για όλη τη διάρκεια της προσομοίωσης.



Εικόνα 6: Ως αρχική διαμόρφωση του συστήματος χρησιμοποιείται το FCC

Η προσομοίωση εκτελείται σε σταθερό αριθμό  $N$ , όγκο  $V$ , και συνολική ενέργεια  $E$  και είναι μια στατιστική δειγματοληψία από τη μικροκανονική κατανομή.

Οι υπολογισμοί δύναμης που κάνουν χρήση του δυναμικού στην εξίσωση (2.50) περικόπτονται σε μια απόσταση αποκοπής  $R_c^* = 2.5$ . Κάνοντας χρήση τέτοιας αποκοπής στην προσομοίωση μας, κάθε άτομο έχει κατά μέσο όρο 55 γειτονικά άτομα. Εάν χρησιμοποιείται η λίστα γειτόνων, ορίζεται ένα εκτεταμένο μήκος αποκοπής  $R_s^* = 2.8$  (που περιλαμβάνει περίπου 78 άτομα) για τη διαμόρφωση της λίστας γειτόνων και οι κατάλογοι ανανεώνονται κάθε 20 χρονικά βήματα. Το κόστος της δημιουργίας της λίστας γειτόνων κάθε 20 χρονικά βήματα αποσβένεται πάνω από το βήμα χρονισμού ανά ώρα.

Το χρονικό βήμα ολοκλήρωσης που πρόκειται να χρησιμοποιηθεί στον αλγόριθμο leap-frog είναι

---

<sup>2</sup> Ένα τριπλό σημείο είναι ένα σημείο στο διάγραμμα φάσης, για την οποία τρεις διακριτές φάσεις θερμοδυναμικής συνυπάρχουν σε ισορροπία. Για το μοντέλο LJ χωρίς περικοπή, οι Mastny και de Pablo το βρήκαν στο  $T^* = 0.694$  και  $\rho^* = 0.96$ .

$$\Delta t^* = 0.00462$$

Στην περίπτωση του Ar, η σταθερά για την αδιαστατοποίηση του χρόνου είναι σύμφωνα με την εξίσωση (2.47) και τις τιμές των παραμέτρων από τον πίνακα 1:

$$\sqrt{\frac{m\sigma^2}{\varepsilon}} = 2.156 \times 10^{-12}$$

Έτσι, η μονάδα χρόνου είναι 2.156 ps. Αυτό είναι περίπου το χρονικό διάστημα για μια περίοδο ταλάντωσης ενός ατόμου Ar. Το χρονικό βήμα ολοκλήρωσης για Ar αντιστοιχεί σε :

$$\Delta t = \Delta t^* \times 2.156 \text{ ps} \approx 0.01 \text{ ps}$$

Με άλλα λόγια, έχει επιλεγεί τέτοιο βήμα χρόνου ολοκλήρωσης ( ~ 1 / 100 της ατομικής περιόδου ταλάντωσης), έτσι ώστε να περιγράφει με ακρίβεια ακόμη και μια τέτοια στοιχειώδης ατομική κίνηση.

## Κεφάλαιο 3

### Υπολογιστικά μοντέλα της Μοριακής Δυναμικής

#### 3.1 Αλγόριθμοι Μοριακής Δυναμικής

Η κλασική μοριακή δυναμική χρησιμοποιείται συνήθως για την προσομοίωση των ιδιοτήτων υγρών ή στερεών. Κάθε ένα από τα  $N$  άτομα ή μόρια στην προσομοίωση αντιμετωπίζεται ως σημειακή μάζα στην οποία εφαρμόζονται οι νόμοι του Νεύτωνα για να υπολογίσει κανείς την κίνησή τους. Από την κίνηση του συνόλου των ατόμων μια ποικιλία χρήσιμων πληροφοριών μπορούν να εξαχθούν, μικροσκοπική και μακροσκοπική, όπως συντελεστές μεταφοράς, διαγράμματα φάσεων και δομικές ή διαμορφωτικές ιδιότητες. Η φυσική του μοντέλου περιέχεται σε ένα δυναμικό ενέργειας, κατάλληλο για το εκάστοτε σύστημα, από το οποίο προέρχονται οι μεμονωμένες εξισώσεις δύναμης που αφορούν κάθε άτομο.

Οι προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής δεν είναι συνήθως απαιτητικές σε μνήμη, δεδομένου ότι αποθηκεύονται μόνο τα διανύσματα των πληροφοριών του ατόμου. Η αύξηση του υπολογιστικού όγκου των προσομοιώσεων οφείλεται:

1. Στον αριθμό των ατόμων
2. Στον αριθμό των χρονικών βημάτων

Η κλίμακα μήκους για ατομικές συντεταγμένες είναι τα Angstrom ( $= 10^{-10}\text{m}$ ). Στις τρεις διαστάσεις πολλές χιλιάδες ή εκατομμύρια άτομα θα πρέπει συνήθως να προσομοιωθούν ώστε να μπορούν να προσεγγισθούν μεγέθη ακόμα και κάτω του μικρο-μέτρου. Σε υγρά και στερεά το μέγεθος του βήματος του χρόνου περιορίζεται από την απαίτηση ότι η παλμική κίνηση των ατόμων πρέπει να παρακολουθείται με ακρίβεια. Αυτό περιορίζει τα χρονικά βήματα στην κλίμακα των femtoseconds και έτσι δεκάδες ή εκατοντάδες χιλιάδες βήματα χρόνου είναι απαραίτητα για την προσομοίωση ακόμα και picoseconds του πραγματικού χρόνου. Λόγω αυτών των υπολογιστικών απαιτήσεων, σημαντική προσπάθεια έχει καταβληθεί από τους ερευνητές για τη βελτιστοποίηση της ΜΔ, ακόμη και για την κατασκευή υλικού ειδικού σκοπού για την εκτέλεση προσομοιώσεων ΜΔ. Η σημερινή στάθμη της τεχνολογίας είναι τέτοια που προσομοιώνει δέκα έως εκατό χιλιάδες συστήματα ατόμων για νανοδευτερόλεπτα και διαρκεί ώρες χρόνου για την CPU, όταν μάλιστα εφαρμόζεται σε μηχανήματα όπως οι: Jugene ή Jurora υπερυπολογιστές στην JSC (Johnson Space Center).

Όλα αυτά από τη στιγμή που οι υπολογισμοί μοριακής δυναμικής είναι εγγενώς παράλληλοι. Όπως θα διευκρινιστεί και στη συνέχεια, υπήρξε σημαντική

προσπάθεια τα τελευταία χρόνια από τους ερευνητές για να εκμεταλλευτούν αυτό τον παραλληλισμό σε διάφορα είδη μηχανών. Η εμπειρία έχει αποδείξει ότι το μοντέλο ανταλλαγής μηνυμάτων προγραμματισμού για μηχανήματα πολλαπλής χρήσης/πολλαπλών δεδομένων (MIMD- Multiple Instruction Multiple Data) είναι η μόνη λύση που παρέχει αρκετή ευελιξία στο να εφαρμοστεί όλη η δομή των δεδομένων και υπολογιστικών προσθηκών που συνήθως χρησιμοποιούνται σε κώδικες ΜΔ στις σειριακές μηχανές.

Όλο και πιο αποδοτικοί αλγόριθμοι αναπτύσσονται για να υλοποιούν συγκεκριμένα είδη κλασσικής μοριακής δυναμικής. Στη διπλωματική αυτή θα αναφερθούν οι εν λόγω αλγόριθμοι που είναι κατάλληλοι για μια γενική κατηγορία των προβλημάτων μοριακής δυναμικής που έχει δύο βασικά χαρακτηριστικά :

1. Το πρώτο χαρακτηριστικό είναι ότι οι δυνάμεις περιορίζονται σε συγκεκριμένο φάσμα, που σημαίνει ότι κάθε άτομο αλληλοεπιδρά μόνο με άλλα άτομα που βρίσκονται γεωμετρικά κοντά. Τα στερεά και υγρά συχνά μοντελοποιούνται με αυτό τον τρόπο λόγω screening effect ή απλά για να αποφευχθεί το υπολογιστικό κόστος του να συμπεριλιφθούν δυνάμεις Coulomb μεγάλης εμβέλειας. Για μικρής εμβέλειας προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής, η υπολογιστική προσπάθεια ανά χρονικό βήμα έχει εύρος  $N$ , δηλαδή τον αριθμό των ατόμων.
2. Το δεύτερο χαρακτηριστικό είναι ότι τα άτομα μπορούν να υποστούν μεγάλες μετατοπίσεις κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης. Αυτό θα μπορούσε να οφείλεται είτε σε διάχυση σε ένα στερεό ή υγρό, είτε σε διαμορφωτικές αλλαγές σε ένα βιολογικό μόριο. Το σημαντικό χαρακτηριστικό από μια υπολογιστική άποψη είναι ότι οι γείτονες του κάθε ατόμου αλλάζουν καθώς η προσομοίωση εξελίσσεται. Ενώ οι αλγόριθμοι μπορούν επίσης να χρησιμοποιηθούν για προσομοιώσεις σταθερής γειτονιάς (π.χ. όλα τα άτομα παραμένουν στις περιοχές πλέγματος σε στερεά), είναι πιο δύσκολο το να παρακολουθούνται συνεχώς οι γείτονες του κάθε ατόμου και να διατηρείται αποτελεσματική διαστασιολόγηση  $O(N)$  για το συνολικό υπολογισμό σε μια παράλληλη μηχανή.

Επιπλέον, πολλοί ερευνητές θέλουν τους αλγόριθμους να λειτουργούν εξίσου καλά για τα προβλήματα με μικρό αριθμό ατόμων, όχι μόνο για τα μεγάλα προβλήματα, όπου δηλαδή ο παραλληλισμός είναι συχνά πιο εύκολο να εκμεταλλευτεί. Αυτό συμβαίνει επειδή η μεγάλη πλειοψηφία των προσομοιώσεων ΜΔ εκτελούνται σε συστήματα από μερικές εκατοντάδες έως μερικές χιλιάδες άτομα όπου το  $N$  επιλέγεται να είναι όσο το δυνατό μικρότερο ενώ εξακολουθεί να είναι αρκετά ακριβές για να μοντελοποιήσει τα επιθυμητά φυσικά αποτελέσματα. Ο υπολογιστικός στόχος στους υπολογισμούς αυτούς

είναι να εκτελεστεί κάθε χρονικό βήμα όσο το δυνατόν γρηγορότερα. Αυτό ισχύει ιδιαίτερα στη ΜΔ μη ισορροπίας, όπου μακροσκοπικές αλλαγές στο σύστημα μπορεί να πάρουν σημαντικό χρόνο για να εξελιχθούν, απαιτώντας εκατομμύρια βήματα χρόνου για να διαμορφωθούν. Έτσι, είναι συχνά πιο χρήσιμο να είναι σε θέση να εκτελεστεί γρήγορα μια προσομοίωση με 1.000.000 βήματα, ενός συστήματος 1000 ατόμων παρά 1.000 χρονικά βήματα ενός συστήματος 1.000.000 ατόμων, αν και η  $O(N)$  έκταση σημαίνει πως η υπολογιστική προσπάθεια είναι η ίδια και για τις δύο περιπτώσεις. Για το σκοπό αυτό, θεωρούμε μοντέλα με μεγέθη τόσο μικρά όσο μερικές εκατοντάδες άτομα.

Από την άλλη πλευρά, για πολύ μεγάλα προβλήματα ΜΔ, είναι σημαντικό οι παράλληλοι αλγόριθμοι να είναι επεκτάσιμοι σε μεγαλύτερες και ταχύτερες παράλληλες μηχανές, δηλαδή να αναπτύσσονται βέλτιστα σε σχέση με το  $N$  και το  $P$  (τον αριθμό των επεξεργαστών).

### **3.2 Μοντέλα δύναμης μακράς και μικρής εμβέλειας**

Ο στόχος στην κλασική προσομοίωση ΜΔ είναι να ολοκληρωθεί το σύνολο των συζευγμένων διαφορικών εξισώσεων (εξισώσεις του Νεύτωνα) και σε γενικές γραμμές μπορεί να γραφτεί :

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = \sum_j F_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + F_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) + \dots \quad \text{Εξίσωση 3.1}$$

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i$$

όπου  $m_i$  είναι η μάζα του ατόμου  $i$ ,  $\mathbf{r}_i$  και  $\mathbf{v}_i$  είναι φορείς θέσης και ταχύτητας του,  $F_2$  είναι μια συνάρτηση που περιγράφει τη δύναμη κατά ζεύγη αλληλεπιδράσεων μεταξύ ατόμων, η  $F_3$  περιγράφει τις αλληλεπιδράσεις τριών σωμάτων και μπορούν να προστεθούν οι αλληλεπιδράσεις πολλών ακόμα σωμάτων. Οι όροι δύναμης είναι παράγωγα των εκφράσεων της ενέργειας (τα δυναμικά) στους οποίους η δυναμική ενέργεια του ατόμου  $i$  είναι τυπικά γραμμένη ως συνάρτηση των θέσεων του ίδιου και άλλων ατόμων. Στην πράξη, μόνο ένας ή μερικοί όροι της εξίσωσης (3.1) διατηρούνται και τα  $F_2$ ,  $F_3$ , κλπ. είναι κατασκευασμένα έτσι ώστε να περιλαμβάνουν κβαντικά φαινόμενα και φαινόμενα πολλών σωμάτων. Στο βαθμό που οι προσεγγίσεις είναι ακριβείς αυτές οι εξισώσεις δίνουν μια πλήρη περιγραφή του χρόνου εξέλιξης του συστήματος.

Οι όροι δύναμης στην εξίσωση (3.1) είναι συνήθως μη-γραμμικές συναρτήσεις της απόστασης  $r_{ij}$  μεταξύ των ζευγών των ατόμων και μπορεί να είναι είτε μεγάλου βεληνικού ή μικρής εμβέλειας στη φύση. Για δυνάμεις μεγάλης εμβέλειας, όπως οι αλληλεπιδράσεις Coulomb σε ένα ιοντικό στερεό ή βιολογικό σύστημα, κάθε άτομο αλληλοεπιδρά με όλα τα άλλα. Υπολογίζοντας

ευθέως αυτές τις δυνάμεις σε κλίμακες όπως  $N^2$  είναι υπερβολικά δαπανηρό για μεγάλο  $N$ . Διάφορες προσεγγιστικές μέθοδοι που ισχύουν σε διαφορετικές συνθήκες βοηθούν στο να ξεπεράσει κανείς αυτή τη δυσκολία. Περιλαμβάνουν αλγόριθμους με πλέγμα σωματιδίων [16], το οποίο έχει εύρος  $f(M)N$ , όπου  $M$  είναι ο αριθμός των σημείων πλέγματος, ιεραρχικές μεθόδους [17], οι οποίες έχουν εύρος  $N \log(N)$ , και πολυπολικές μεθόδους [18] οι οποίες έχουν εύρος  $N$ . Σύγχρονες παράλληλες εφαρμογές αυτών των αλγορίθμων έχουν βελτιώσει το φάσμα της εφαρμογής για προσομοιώσεις πολλών σωμάτων, αλλά λόγω των εξόδων τους, τα μοντέλα δύναμης μεγάλης εμβέλειας δεν εξετάζονται ιδιαίτερα.

Αντίθετα, τα μοντέλα δύναμης μικρής εμβέλειας και ιδίως το μοντέλο Lennard-Jones που παρουσιάστηκε στην παράγραφο 2.2.5, είναι το κύριο μέλημά μας. Τα μοντέλα αυτά έχουν επιλεγεί είτε διότι το screening effect περιορίζει αποτελεσματικά το εύρος της επιρροής των ενδοατομικών δυνάμεων που διαμορφώνονται είτε απλά για να περικοπούν οι αλληλεπιδράσεις μεγάλου βεληνεκούς και να μειωθεί έτσι το υπολογιστικό φορτίο. Σε κάθε περίπτωση, οι αθροίσεις στην εξίσωση (3.1) περιορίζονται σε άτομα μέσα σε κάποια μικρή περιοχή γύρω από το άτομο  $i$ . Όπως είδαμε στην παράγραφο 2.1., αυτή συνήθως υλοποιείται με τη χρήση μιας απόστασης αποκοπής  $R_c$ , έξω από την οποία όλες οι αλληλεπιδράσεις αγνοούνται. Ο υπολογισμός των δυνάμεων τώρα κλιμακώνεται γραμμικά με το  $N$ . Ανεξάρτητα από αυτή την εξοικονόμηση, η συντριπτική πλειοψηφία του χρόνου υπολογισμού που δαπανάται σε μια προσομοίωση ΜΔ δυνάμεων μικρής εμβέλειας είναι κατά την εκτίμηση των όρων ισχύος στην εξίσωση (3.1), ακόμη και στην περίπτωση (όπως το μοντέλο LJ) όπου μόνο ο  $F_2$  όρος πρέπει να εκτιμηθεί. Η ολοκλήρωση στο χρόνο απαιτεί τυπικά μόνο 2-3% του συνολικού χρόνου. Για την ακριβή εκτίμηση των αθροισμάτων απαιτείται η γνώση για το ποια άτομα βρίσκονται εντός της απόστασης αποκοπής  $R_c$  σε κάθε χρονικό βήμα. Το κλειδί είναι να ελαχιστοποιηθεί ο αριθμός των γειτονικών ατόμων που πρέπει να ελεγχθούν για πιθανές αλληλεπιδράσεις δεδομένου ότι οι υπολογισμοί που εκτελούνται σε γειτονικές περιοχές και σε απόσταση  $r > R_c$  είναι σπατάλη υπολογισμού. Υπάρχουν δύο βασικές τεχνικές που χρησιμοποιούνται για να επιτευχθεί αυτό σε διαδοχικές μηχανές. Αυτές αποτελούν αντικείμενο μελέτης μιας και οι παράλληλοι αλγόριθμοι ενσωματώνουν αντίστοιχες ιδέες.

### **3.3 Η λίστα γειτόνων και η μέθοδος link-cell**

Η πρώτη ιδέα για να ελαχιστοποιηθεί ο αριθμός των ατόμων που γειτνιάζουν όταν αυτά πρέπει να ελεγχθούν για πιθανές αλληλεπιδράσεις είναι η «λίστα γειτόνων», η οποία είχε προταθεί από τον Verlet [8]. Για κάθε άτομο, δημιουργείται μια λίστα με τα γειτονικά του. Συνήθως, όταν η λίστα διαμορφώνεται, αποθηκεύονται όλα τα γειτονικά άτομα μέσα σε μια εκτεταμένη απόσταση αποκοπής  $R_s = R_c + \delta$ . Η λίστα αυτή χρησιμοποιείται για μερικά



βήματα χρόνου για να υπολογιστούν όλες οι αλληλεπιδράσεις δύναμης. Τότε ξαναχτίζεται πριν οποιοδήποτε άτομο να μετακινηθεί από μια απόσταση  $r > R_s$  σε  $r < R_c$ . Όμως το  $\delta$  επιλέγεται πάντα να είναι μικρό σε σχέση με το  $R_c$ , η βέλτιστη τιμή του οποίου εξαρτάται από τις παραμέτρους (π.χ. θερμοκρασία, ικανότητα διαχύσεως, πυκνότητα) της συγκεκριμένης προσομοίωσης. Το πλεονέκτημα της λίστας γειτόνων είναι ότι από τη στιγμή που θα συνταχθεί, η εξέταση για πιθανές αλληλεπιδράσεις είναι πολύ ταχύτερη από τον έλεγχο όλων των ατόμων στο σύστημα.

Η δεύτερη τεχνική που χρησιμοποιείται συνήθως για την επιτάχυνση των υπολογισμών της μοριακής δυναμικής προσομοίωσης είναι γνωστή ως η μέθοδος *link-cell* [19]. Σε κάθε χρονικό βήμα, όλα τα άτομα ομαδοποιούνται σε 3-D κύτταρα με μήκος πλευράς  $l$ , όπου  $l = R_c$  ή ελαφρώς μεγαλύτερο. Αυτό μειώνει το έργο της εξεύρεσης γειτόνων ενός δεδομένου ατόμου στον έλεγχο σε 27 περιοχές – την περιοχή στην οποία το άτομο είναι μέσα και τις 26 γύρω του. Από τη στιγμή που ο χωρισμός των ατόμων σε περιοχές απαιτεί μόνο  $O(N)$  εργασία, η επιπλέον επιβάρυνση που συνδέεται με αυτό είναι αποδεκτή για την εξοικονόμηση χρόνου μιας και έχει μείνει να ελεγχθεί μια τοπική περιοχή για τους γείτονες.

Οι ταχύτεροι αλγόριθμοι ΜΔ σειριακής μορφής, μικρής εμβέλειας χρησιμοποιούν ένα συνδυασμό των λιστών γειτόνων και *link-cell* κατηγοριοποίησης. Στη συνδυασμένη μέθοδο, τα άτομα κατηγοριοποιούνται μόνο μια φορά κάθε λίγα βήματα χρόνου για το σχηματισμό καταλόγων γειτόνων. Σε αυτή την περίπτωση τα άτομα είναι κατηγοριοποιημένα σε κύτταρα μεγέθους  $l \geq R_s$ . Σε ενδιάμεσο χρόνο οι κατάλογοι γειτόνων χρησιμοποιούνται κατά το συνήθη τρόπο για να βρει κανείς τους γείτονες κάθε ατόμου σε απόσταση  $R_c$ . Αυτή είναι μια σημαντική εξοικονόμηση πάνω από μια συμβατική μέθοδο σύνδεσης κυττάρων, δεδομένου ότι υπάρχουν πολύ λιγότερα άτομα για να ελεγχθούν σε μια σφαίρα όγκου  $4\pi R_s^3/3$  από ότι σε έναν κύβο όγκου  $27R_c^3$ . Πρόσθετη εξοικονόμηση μπορεί να αποκτηθεί λόγω του 3ου νόμου του Νεύτωνα:

$$F_{ij} = -F_{ji}$$

Υπολογίζοντας μόνο μια δύναμη τη φορά για κάθε ζεύγος ατόμων (αντί για μία φορά για κάθε άτομο στο ζεύγος). Στη συνδυασμένη μέθοδο αυτό γίνεται μόνο με την αναζήτηση στις μισές περιοχές γύρω από κάθε άτομο για να σχηματίσουν τη λίστα του γείτονά του. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα την αποθήκευση του ατόμου  $j$  στη λίστα του ατόμου  $i$  και όχι το άτομο  $i$  στη λίστα του ατόμου  $j$ , έτσι μειώνεται κατά το ήμισυ ο όγκος των υπολογισμών δύναμης που πρέπει να γίνουν.

### **3.4 Παράλληλοι αλγόριθμοι**

Κατά τα τελευταία 20 χρόνια υπήρξε μεγάλο ενδιαφέρον για την επινόηση παράλληλων αλγόριθμων μοριακής δυναμικής. Ο φυσικός παραλληλισμός στη ΜΔ είναι ότι οι υπολογισμοί και οι ενημερώσεις ταχύτητας/θέσης μπορεί να γίνουν ταυτόχρονα για όλα τα άτομα. Μέχρι σήμερα, δύο βασικές ιδέες έχουν αξιοποιηθεί για την επίτευξη αυτού του παραλληλισμού. Ο στόχος σε κάθε μια από αυτές είναι να διαιρέσει τους υπολογισμούς δύναμης στην εξίσωση (3.1) ομοιόμορφα κατά μήκος των επεξεργαστών, ούτως ώστε να επιτυγχάνεται ο μέγιστος παραλληλισμός. Όλοι οι αλγόριθμοι που έχουν προταθεί ή εφαρμοστεί μέχρι στιγμής είναι παραλλαγές σε αυτές τις δύο μεθόδους.

Στην πρώτη κατηγορία μεθόδων ένα προκαθορισμένο σύνολο υπολογισμών δύναμης έχει εκχωρηθεί σε κάθε επεξεργαστή. Η εκχώρηση αυτή παραμένει σταθερή για όλη τη διάρκεια της προσομοίωσης. Ο απλούστερος τρόπος για να γίνει αυτό είναι να δώσει μια υποομάδα των ατόμων σε κάθε επεξεργαστή. Καλούμε αυτή τη μέθοδο atom-decomposition method, δεδομένου ότι ο επεξεργαστής υπολογίζει τις δυνάμεις χωρίς σημασία για το που κινούνται τα άτομα στον τομέα της προσομοίωσης. Με αυτό τον τρόπο μειώνεται το φορτίο εργασίας. Γενικότερα, ένα υποσύνολο βρόχων της δύναμης που συνδέονται με την εξίσωση (3.1) μπορεί να ανατεθεί σε κάθε ένα επεξεργαστή. Αυτό ονομάζεται force-decomposition. Και οι δύο αυτές «αποσυνθέσεις» είναι ανάλογες με την πλεγματοποίηση Lagrange σε μια προσομοίωση υγρών όπου τα κελιά του πλέγματος (υπολογιστικά στοιχεία) κινούνται με το υγρό (τα άτομα σε ΜΔ). Αντίθετα, στη δεύτερη γενική κατηγορία μεθόδων, η οποία ονομάζεται spatial-decomposition του φόρτου εργασίας, κάθε επεξεργαστής έχει επωμιστεί ένα τμήμα της φυσικής προσομοίωσης. Κάθε επεξεργαστής υπολογίζει μόνο τις δυνάμεις για τα άτομα στον υπο-τομέα του. Καθώς η προσομοίωση εξελίσσεται, οι επεξεργαστές ανταλλάσσουν άτομα που μετακινούνται από τον ένα υπο-τομέα στον άλλο. Αυτό είναι ανάλογο με μια πλεγματοποίηση Euler για μια προσομοίωση ρευστών όπου το πλέγμα παραμένει σταθερό στο χώρο ενώ το ρευστό κινείται μέσα από αυτό.

Μεταξύ των δύο κατηγοριών μεθόδων για την παραλληλοποίηση της μοριακής δυναμικής, ένα πλήθος αλγορίθμων έχουν προταθεί και υλοποιούνται από διάφορους ερευνητές. Οι λεπτομέρειες των αλγορίθμων ποικίλλουν σημαντικά από το ένα παράλληλο μηχανήμα στο άλλο, καθώς υπάρχουν πολλοί συμβιβασμοί που εξαρτώνται από προβλήματα και πολλοί που εξαρτώνται από τη μηχανή και πρέπει να εξεταστούν, όπως οι σχετικές ταχύτητες υπολογισμού και επικοινωνίας.

Οι μέθοδοι «αποσύνθεσης» ατόμων, ονομάζονται επίσης μέθοδοι αναπαραγωγής δεδομένων, επειδή είναι πανομοιότυπα αντίγραφα των

πληροφοριών ατόμου που είναι αποθηκευμένα σε όλους τους επεξεργαστές και έχουν συχνά χρησιμοποιηθεί σε μικρής εμβέλειας προσομοιώσεις ΜΔ μοριακών συστημάτων. Αυτό συμβαίνει επειδή η επανάληψη των πληροφοριών κάνει πιο απλό τον υπολογισμό των πρόσθετων όρων των δυνάμεων από 3 ή 4 σώματα. Παράλληλες εφαρμογές σχεδόν απαρχαιωμένων προγραμμάτων βιολογικής ΜΔ όπως το CHARMM και το GROMOS χρησιμοποιούν αυτήν την τεχνική.

Οι μέθοδοι της χωρικής «αποσύνθεσης», που ονομάζονται επίσης γεωμετρικές μέθοδοι, είναι τώρα πιο κοινές στη βιβλιογραφία, επειδή είναι καλά προσαρμοσμένες σε πολύ μεγάλες προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής και σε αλληλεπιδράσεις μεγάλου βεληνεκούς. Αυτή η τεχνική χρησιμοποιείται από σύγχρονες παράλληλες εφαρμογές ΜΔ στη βιολογία όπως οι : AMBER, GROMACS και NAMD.

### **3.5 Ο αλγόριθμος «ατομικής αποσύνθεσης»: Atom- decomposition algorithm**

Ένας από τους πιο συχνά χρησιμοποιούμενους παράλληλους αλγορίθμους είναι ο αλγόριθμος atom-decomposition (AD). Σε αυτό τον αλγόριθμο, σε κάθε επεξεργαστή  $P$  εκχωρείται μια ομάδα  $N/P$  ατόμων κατά την έναρξη της προσομοίωσης. Τα άτομα σε μια ομάδα δε χρειάζεται να έχουν καμία ειδική χωρική σχέση μεταξύ τους. Για ευκολία μπορούμε να υποθέσουμε το  $N$  ως ένα πολλαπλάσιο του  $P$ . Ένας επεξεργαστής θα υπολογίσει τις δυνάμεις μόνο στα  $N/P$  άτομα και θα ενημερώσει τις θέσεις και τις ταχύτητές τους κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης, χωρίς σημασία για το που κινούνται στο φυσικό χώρο. Αυτό είναι μια «αποσύνθεση των ατόμων» για το υπολογιστικό φορτίο εργασίας.

Μια χρήσιμη κατασκευή για την αναπαράσταση της υπολογιστικής εργασίας που απαιτείται στον αλγόριθμο είναι ο  $N \times N$  πίνακας δυνάμεων  $F$ . Το  $(i,j)$  στοιχείο του  $F$  αντιπροσωπεύει τη δύναμη στο άτομο  $i$  λόγω του ατόμου  $j$ . Σημειώνεται ότι ο  $F$  έχει πολλά μηδενικά στοιχεία λόγω των δυνάμεων μικρής εμβέλειας και είναι αντισυμμετρικός, δηλαδή  $F_{ij} = -F_{ji}$  λόγω του 3ου νόμου του Νεύτωνα. Ορίζουμε επίσης, τα  $x$  και  $f$  ως διανύσματα μήκους  $N$  που αποθηκεύουν τη θέση και τη συνολική δύναμη για κάθε άτομο. Για μια προσομοίωση 3-D, το  $x_i$  θα αποθηκεύσει τις τρεις συντεταγμένες του ατόμου  $i$ . Με αυτούς τους ορισμούς, ο αλγόριθμος AD εκχωρεί σε κάθε επεξεργαστή έναν υποπίνακα του  $F$  ο οποίος αποτελείται από  $N/P$  σειρές της μήτρας, όπως φαίνεται στην Εικόνα 7. Αν με  $z$  χαρακτηρίσουμε τους επεξεργαστές από 0 έως  $P-1$ , τότε ο επεξεργαστής  $P_z$  υπολογίζει τα στοιχεία του  $F_z$  υποπίνακα των γραμμών. Επίσης του εκχωρούνται τα αντίστοιχα υποδιανύσματα του μήκους  $N/P$  που συμβολίζονται με  $x_z$  και  $f_z$ .

$$F = \begin{pmatrix} \ddots & & & \\ & F_{ij} & & \\ & & \ddots & \\ \boxed{\phantom{F_{ij}}} & & & \ddots \end{pmatrix} \} \sim N/P \quad \text{Γραμμές για τον } z \text{ επεξεργαστή}$$

Εικόνα 7: Η διαίρεση της μήτρας δύναμης μεταξύ των επεξεργαστών  $P$  στον αλγόριθμο AD. Στον επεξεργαστή  $P_z$  αναθέτονται  $N/P$  σειρές της μήτρας και το αντίστοιχο κομμάτι  $x_z$  του διανύσματος θέσης. Επιπλέον, πρέπει να είναι γνωστό το συνολικό διάνυσμα θέσης  $x$  για να υπολογιστούν τα στοιχεία του πίνακα, το κάθε ένα στη γραμμή του.

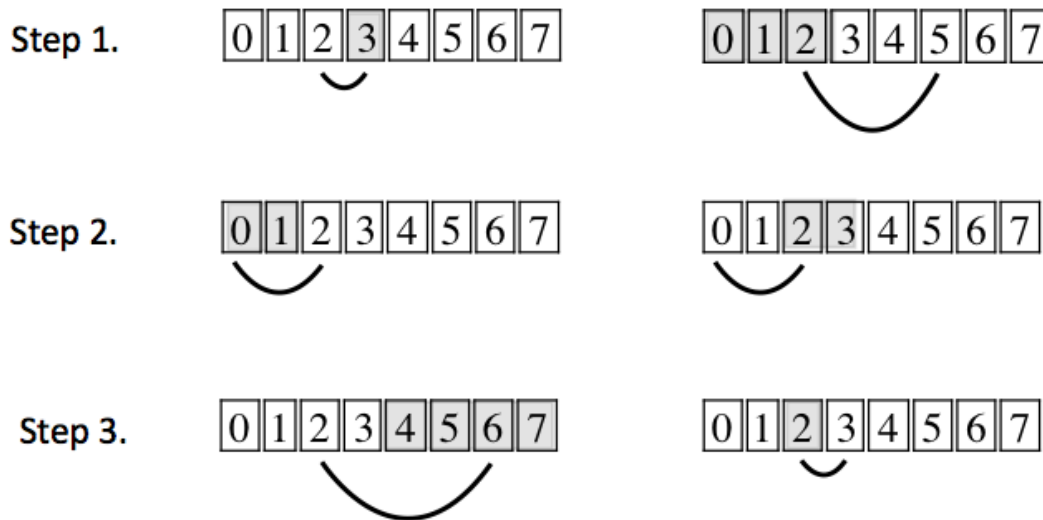
Για το δυναμικό LJ, ο υπολογισμός του στοιχείου της μήτρας  $F_{ij}$  απαιτεί μόνο τις θέσεις των δύο ατόμων,  $x_i, x_j$ . Για τον υπολογισμό όλων των στοιχείων στο  $F_z$ , ο επεξεργαστής  $P_z$  θα χρειαστεί τις θέσεις πολλών ατόμων που ανήκουν σε άλλους επεξεργαστές. Αυτό σημαίνει ότι σε κάθε χρονικό βήμα κάθε επεξεργαστής πρέπει να λάβει τις ενημερωμένες θέσεις των ατόμων από όλους τους άλλους επεξεργαστές, μια λειτουργία που ονομάζεται all-to-all επικοινωνία. Διάφοροι αλγόριθμοι έχουν αναπτυχθεί για την αποτελεσματική εκτέλεση αυτής της λειτουργίας σε διαφορετικές παράλληλες μηχανές και αρχιτεκτονικές. Συνήθως, η εφαρμογή της βιβλιοθήκης MPI (Message Passing Interface) των εργασιών με την επικοινωνία all-to-all λαμβάνει τα πλεονεκτήματα αυτών των βελτιστοποιημένων αλγορίθμων (3.1).

### 3.5.1 Διαδικασίες ανάπτυξης και αναδίπλωσης

Ακολουθώντας την ονοματολογία του Fox, ονομάζουμε τη διαδικασία επικοινωνίας all-to-all, που περιεγράφηκε στα προηγούμενα, ως διαδικασία ανάπτυξης. Κάθε επεξεργαστής διαθέτει μνήμη μήκους  $N$  για την αποθήκευση ολόκληρου του διανύσματος  $x$ . Στις αρχές της ανάπτυξης, ο επεξεργαστής  $P_z$  έχει το  $x_z$ , ένα ενημερωμένο κομμάτι  $x$  μήκους  $N/P$ . Κάθε επεξεργαστής χρειάζεται να αποκτήσει όλα τα κομμάτια του άλλου επεξεργαστή και στη συνέχεια να τα αποθηκεύσει στις σωστές θέσεις στο αντίγραφο του  $x$ . Η Εικόνα 10 απεικονίζει τα βήματα που το πετυχαίνουν αυτό σε ένα παράδειγμα 8 επεξεργαστών. Οι επεξεργαστές χαρτογραφούνται διαδοχικά στα επιμέρους κομμάτια του διανύσματος. Στο πρώτο στάδιο της επικοινωνίας, κάθε επεξεργαστής συνεργάζεται με ένα παρακείμενο επεξεργαστή στο διάνυσμα και ανταλλάσσουν κομμάτια. Ο επεξεργαστής 2 συνεργάζεται με τον 3. Τώρα, κάθε επεξεργαστής έχει ένα συνεχόμενο κομμάτι του  $x$  που είναι μήκους  $2N/P$ . Στο δεύτερο στάδιο, καθένας από τους επεξεργαστές συνεργάζεται με έναν επεξεργαστή δύο θέσεις μακριά και ανταλλάσσει το νέο κομμάτι του (ο 2 δέχεται τα γκριζα μέρη του διανύσματος από τον 0). Κάθε επεξεργαστής έχει τώρα ένα κομμάτι μήκους  $4N/P$  του  $x$ . Στο τελευταίο στάδιο, ο κάθε επεξεργαστής

ανταλλάσσει κομμάτι μήκους  $N/2$  του  $x$  με έναν επεξεργαστή που βρίσκεται  $P/2$  θέσεις μακριά (ο 2 συναλλάσσεται με τον 6). Το συνολικό διάνυσμα κατοικεί πλέον σε κάθε επεξεργαστή.

Η διαδικασία ανάπτυξης μπορεί επίσης να επιτευχθεί με τη χρήση της MPI-allgather συλλογικής λειτουργίας που προβλέπονται από τη βιβλιοθήκη MPI.



Εικόνα 8: Η διαδικασία ανάπτυξης και αναδίπλωσης μεταξύ 8 επεξεργαστών, από τις οποίες κάθε μια απαιτεί 3 βήματα. (Α) Στην ανάπτυξη, ο επεξεργαστής 2 λαμβάνει διαδοχικά τα γκρι υποσύνολα του διανύσματος από τους επεξεργαστές 3, 0 και 6. (Β) Στη διαδικασία αναδίπλωσης, ο επεξεργαστής 2 λαμβάνει διαδοχικά μικρότερα γκρι υποσύνολα του διανύσματος από τους επεξεργαστές 6, 0 και 3.

Μια λειτουργία επικοινωνίας που είναι ουσιαστικά η αντίστροφη της επέκτασης θα αποδειχθεί επίσης χρήσιμη στον αλγόριθμο atom-decomposition (AD). Ας υποθέσουμε ότι κάθε επεξεργαστής έχει αποθηκεύσει νέες τιμές δύναμης καθ' όλη την έκταση του αντίγραφου του διανύσματος της δύναμης  $f$ . Ο επεξεργαστής  $P_z$  χρειάζεται να γνωρίζει τις  $N/P$  τιμές στην  $f_z$ , όπου κάθε μία από τις τιμές αυτές αθροίζεται σε όλους τους επεξεργαστές  $P$ . Αυτό είναι γνωστό ως λειτουργία αναδίπλωσης και απεικονίζεται στην Εικόνα 7B. Στο πρώτο στάδιο ανταλλαγής κάθε επεξεργαστής ανταλλάσσει το ήμισυ του διανύσματος με αυτόν που συναλλάσσεται και βρίσκεται  $P/2$  θέσεις μακριά. Σημειώνεται ότι κάθε επεξεργαστής λαμβάνει το ήμισυ από ότι είναι μέλος του και στέλνει το ήμισυ από ότι δεν είναι μέλος του (ο επεξεργαστής 2 λαμβάνει το σκιασμένο πρώτο μισό του διανύσματος από τον 6). Κάθε επεξεργαστής αθροίζει τις ληφθείσες τιμές με αντίστοιχες που διατηρεί στον «υπο-φορέα» του. Η λειτουργία αυτή είναι αναδρομική και μειώνει κατά το ήμισυ το μήκος των δεδομένων που ανταλλάσσονται σε κάθε βήμα.

Η λειτουργία της αναδίπλωσης μπορεί επίσης να επιτευχθεί με τη χρήση της μειωμένης συλλογικής λειτουργίας που παρέχεται από τη βιβλιοθήκη MPI.

Το κόστος ενός αλγόριθμου επικοινωνίας μπορεί συνήθως να ποσοτικοποιηθεί από τον αριθμό των μηνυμάτων και το συνολικό όγκο των δεδομένων που αποστέλλονται και λαμβάνονται. Και στις δυο αυτές περιπτώσεις οι λειτουργίες ανάπτυξης και αναδίπλωσης της Εικόνας 8 είναι οι καλύτερες δυνατές, κάθε επεξεργαστής εκτελεί  $\log_2(P)$  αποστολές και λήψεις και συναλλάσσει  $N-N/P$  δεδομένων. Κάθε επεξεργαστής εκτελεί επίσης  $N-N/P$  προσθήκες στην αναδίπλωση. Ένα μειονέκτημα είναι ότι οι αλγόριθμοι απαιτούν αποθηκευτικό χώρο  $O(N)$  σε κάθε επεξεργαστή. Εναλλακτικές μέθοδοι για την εκτέλεση all-to-all επικοινωνίας απαιτούν λιγότερη αποθήκευση σε βάρος βέβαια της μεγαλύτερης αποστολής και λήψης δεδομένων. Αυτό δεν είναι συνήθως ένας καλός συμβιβασμός για προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής, επειδή πολλές φορές, αρκετά μεγάλα προβλήματα μπορεί να τρέξουν με λίγα μόνο Gbytes τοπικά διαθέσιμης μνήμης σε επεξεργαστές τελευταίας τεχνολογίας με μεγαλύτερες δυνατότητες.

Έτσι θα περιγραφούν δύο εκδόσεις του atom-decomposition algorithm οι οποίες χρησιμοποιούν τις λειτουργίες ανάπτυξης και αναδίπλωσης.

### 3.5.2 Ο απλούστερος αλγόριθμος

Ο πρώτος αλγόριθμος είναι απλούστερος και δεν επωφελείται από τον 3ο νόμο του Νεύτωνα. Καλούμε αυτόν τον αλγόριθμο **A1**. Αυτός απεικονίζεται στην Εικόνα 8 με τον κυρίαρχο όρο για το κόστος υπολογισμού ή της επικοινωνίας σε κάθε βήμα να παρατίθεται στα δεξιά.

(1)	Construct neighbor lists of non-zero interactions in $F_z$	
	$(S < 4R_z)$ All pairs	$\frac{N^2}{P}$
	$(S \geq 4R_z)$ Binning	$\frac{N}{P} + N$
(2)	Compute elements of $F_z$ , summing results into $f_z$	$\frac{N}{P}$
(4)	Update atom positions in $x_z$ using $f_z$	$\frac{N}{P}$
(5)	Expand $x_z$ among all processors, result in $x$	$N$

Εικόνα 9: Χρονικό βήμα του αλγορίθμου «ατομικής αποσύνθεσης» **A1** για τον  $P_z$  επεξεργαστή

Υποθέτουμε ότι κατά την έναρξη του κάθε χρονικού βήματος κάθε επεξεργαστής γνωρίζει τις τρέχουσες θέσεις όλων των  $N$  ατόμων, δηλαδή το

καθένα έχει ένα ενημερωμένο αντίγραφο ολόκληρου του διάνυσματος  $x$ . Βήμα (1) του αλγορίθμου είναι να κατασκευάσει καταλόγους γείτονα για όλα τα ζεύγη αλληλεπίδρασης που πρέπει να υπολογιστούν στο μπλοκ  $F_z$ . Συνήθως αυτό θα γίνει μόνο μία φορά κάθε λίγα βήματα χρόνου. Εάν ο λόγος της διαμέτρου του φυσικού χώρου  $S$  προς το εκτεταμένο μήκος αποκοπής των δυνάμεων  $R_s$  είναι σχετικά μικρό, τότε είναι πιο γρήγορο για τον  $P_z$  επεξεργαστή να κατασκευάσει τη λίστα γειτόνων ελέγχοντας όλα τα  $N^2/P$  ζεύγη στο μπλοκ  $F_z$ . Όταν η προσομοίωση είναι αρκετά μεγάλη ώστε 4 ή περισσότερες περιοχές μπορούν να δημιουργηθούν σε κάθε διάσταση, είναι ταχύτερο για κάθε επεξεργαστή να «μαζέψει» όλα τα  $N$  άτομα και στη συνέχεια να ελέγξει τις 27 γύρω περιοχές του καθενός από τα  $N/P$  άτομα για να σχηματίσει τις λίστες. Αυτός ο έλεγχος έχει διάσταση  $N/P$ , αλλά έχει ένα μεγάλο συντελεστή, έτσι ώστε η συνολική διάσταση των ομαδοποιημένων λιστών γειτόνων να καταγράφεται ως  $N/P + N$ .

Στο βήμα (2) του αλγορίθμου, οι κατάλογοι γείτονα χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό των μη μηδενικών στοιχείων του πίνακα  $F_z$ . Καθώς υπολογίζεται κάθε ζεύγος αλληλεπίδρασης δυνάμεων, οι συνιστώσες της δύναμης αθροίζονται στο  $f_z$  έτσι ώστε η  $F_z$  στην πραγματικότητα ποτέ δεν αποθηκεύεται ως μήτρα. Με την ολοκλήρωση του χρονικού βήματος, κάθε επεξεργαστής γνωρίζει τη συνολική δύναμη  $f_z$  σε κάθε ένα από τα  $N/P$  άτομά του. Αυτό χρησιμοποιείται για την ενημέρωση της θέσης και της ταχύτητάς τους στο στάδιο (4). (Το στάδιο (3), θα προστεθεί στον άλλο αλγόριθμο.) Τέλος, στο στάδιο (5), οι ενημερωμένες θέσεις των ατόμων στο  $x_z$  μοιράζονται μεταξύ όλων των επεξεργαστών  $P$  κατά την προετοιμασία για το επόμενο χρονικό βήμα μέσω της λειτουργίας ανάπτυξης του Σχήματος 7A. Όπως συζητήθηκε παραπάνω, αυτή η λειτουργία έχει εύρος  $N$ , τόσο όσο και ο όγκος των δεδομένων στο διάνυσμα θέσης  $x$ .

### 3.5.3 Εκμεταλλεύομενοι τον 3ο νόμο του Νεύτωνα

Όπως αναφέρθηκε στην προηγούμενη παράγραφο, ο αλγόριθμος **A1** αγνοεί τον 3ο Νόμο του Νεύτωνα. Εάν διαφορετικοί επεξεργαστές έχουν τα άτομα  $i$  και  $j$ , όπως συμβαίνει συνήθως, τότε και οι δύο επεξεργαστές υπολογίζουν την αλληλεπίδραση  $(i,j)$  και αποθηκεύουν την προκύπτουσα δύναμη στο άτομό τους. Όπως είναι προφανές κάτι τέτοιο κοστίζει σε υπολογισμό και μνήμη και μπορεί να αποφευχθεί, αν με κόστος λίγη περισσότερη επικοινωνία, χρησιμοποιήσουμε έναν τροποποιημένο πίνακα δύναμης  $G$  στον οποίο αναφέρεται κάθε ζεύγος αλληλεπίδρασης μόνο μία φορά. Για να γίνει αυτό χρειάζεται διαγράμμιση της μήτρας δύναμης. Επιλέγουμε αντί να σχηματίσουν τον  $G$ , την ακόλουθη διαδικασία: Ας υποθέσουμε ότι  $G_{ij} = F_{ij}$  εκτός από:  $G_{ij} = 0$  όταν  $i > j$  και όταν το άθροισμα  $i + j$  είναι άρτιος αριθμός, και αντίστοιχα  $G_{ij} = 0$  όταν  $i < j$  και το άθροισμα  $i + j$  είναι περιττό. Εννοιολογικά, το  $G$  χρωματίζεται σε

σκακιέρα, με κόκκινα τετράγωνα πάνω από τη διαγώνιο να μηδενίζονται, και μαύρα τετράγωνα κάτω από τη διαγώνιο που επίσης βρίσκονται στο μηδέν. Ένας τροποποιημένος αλγόριθμος AD **A2** που χρησιμοποιεί το  $G$  για να επωφεληθεί από τον 3ο νόμο του Νεύτωνα φαίνεται στην Εικόνα 10.

(1) Construct neighbor lists of non-zero interactions in $G_z$	
( $S < 4R_z$ ) All pairs	$\frac{N^2}{2P}$
( $S \geq 4R_z$ ) Binning	$\frac{N}{2P} + N$
(2) Compute elements of $G_z$ , doubly summing results into local copy of $f$	$\frac{N}{2P}$
(3) Fold $f$ among all processors, result is $f_z$	$N$
(4) Update atom positions in $x_z$ using $f_z$	$\frac{N}{P}$
(5) Expand $x_z$ among all processors, result in $x$	$N$

Εικόνα 10: Χρονικό βήμα του αλγορίθμου «ατομικής αποσύνθεσης» **A2** για τον  $Pz$  επεξεργαστή, που εκμεταλλεύεται τον 3ο νόμο του Νεύτωνα.

Το βήμα (1) είναι το ίδιο όπως και στον αλγόριθμο **A1**, εκτός μόνο από τα μισά καθώς πολλές καταχωρήσεις της λίστας γειτόνων δημιουργούνται από κάθε επεξεργαστή αφού το  $G_z$  έχει μόνο τα μισά από τα μη μηδενικά στοιχεία του  $F_z$ . Για τις λίστες γειτόνων που σχηματίζονται από ομαδοποίηση, κάθε επεξεργαστής πρέπει ακόμα να ομαδοποιήσει όλα τα  $N$  άτομα, αλλά χρειάζεται να ελέγξει μόνο τις μισές από τις γύρω περιοχές του καθενός από τα  $N/P$  άτομα του. Στο βήμα (2) οι λίστες γειτόνων χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό των στοιχείων  $G_z$ . Για μια αλληλεπίδραση μεταξύ των ατόμων  $i$  και  $j$ , οι προκύπτουσες δυνάμεις στα άτομα  $i$  και  $j$  αθροίζονται σε αμφότερες τις  $i$  και  $j$  θέσεις του διανύσματος δύναμης  $f$ . Αυτό σημαίνει ότι κάθε επεξεργαστής πρέπει να αποθηκεύσει ένα αντίγραφο του συνόλου του διανύσματος της δύναμης, σε αντιδιαστολή με την αποθήκευση μόνο του  $f_z$  όπως στον αλγόριθμο **A1**. Όταν όλα τα στοιχεία του πίνακα έχουν υπολογιστεί, τότε το  $f$  αναδιπλώνεται σε όλους τους επεξεργαστές  $P$  χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο στην Εικόνα 7B. Κάθε επεξεργαστής καταλήγει με το  $f_z$ , το σύνολο των δυνάμεων για τα άτομά του. Τα στάδια (4) και (5) στη συνέχεια εξελίσσονται ίδια όπως στο **A1**.

Πρέπει να σημειωθεί ότι η εφαρμογή του 3ου νόμου του Νεύτωνα μειώνει κατά το ήμισυ το κόστος υπολογισμού στα βήματα (1) και (2) σε βάρος του διπλασιασμού του κόστους επικοινωνίας. Υπάρχουν τώρα δύο βήματα επικοινωνίας (3) και (5), καθένα από τα οποία έχει εύρος  $N$ . Αυτό θα είναι ένα καθαρό κέρδος μόνο εάν το κόστος της επικοινωνίας στον **A1** είναι λιγότερο από το ένα τρίτο του συνολικού χρόνου λειτουργίας. Αυτό δε συμβαίνει



συνήθως σε μεγάλο αριθμό επεξεργαστών, έτσι ώστε στην πράξη σχεδόν πάντα να επιλέγουμε τον **A1** αντί του **A2** για έναν αλγόριθμο AD. Ωστόσο, για μικρούς επεξεργαστές  $P$  ή ακριβά μοντέλα δύναμης, ο **A2** μπορεί να είναι ταχύτερος.

### 3.5.4 Ισορροπία φορτίου

Κάθε επεξεργαστής θα έχει μια ίση ποσότητα εργασίας αν κάθε μπλοκ  $F_z$  ή  $G_z$  έχει περίπου τον ίδιο αριθμό μη μηδενικών στοιχείων. Αυτή θα είναι η περίπτωση όπου η πυκνότητα των ατόμων είναι ενιαία σε ολόκληρη την περιοχή της προσομοίωσης. Ωστόσο, μη ομοιόμορφες πυκνότητες μπορούν να προκύψουν εάν, για παράδειγμα, υπάρχουν ελεύθερες επιφάνειες, έτσι ώστε ορισμένα άτομα να συνορεύουν με κενό, ή να εμφανίζονται αλλαγές φάσης μέσα σε ένα υγρό ή στερεό. Αυτό είναι μόνο ένα πρόβλημα για την ισορροπία του φορτίου, αν τα  $N$  άτομα είναι παραταγμένα σε μια γεωμετρική μορφή όπως είναι συνήθως. Στη συνέχεια, μια ομάδα από  $N/P$  άτομα κοντά σε μια επιφάνεια θα έχουν για παράδειγμα λιγότερους γείτονες από τις ομάδες στο εσωτερικό. Αυτό μπορεί να ξεπεραστεί με τυχαία αλλαγή της σειράς των ατόμων κατά την έναρξη της προσομοίωσης, η οποία ισοδυναμεί με μετάθεση γραμμών και στηλών του  $F$  ή  $G$ . Αυτό εξασφαλίζει ότι κάθε ένας από τους  $F_z$  ή  $G_z$  θα έχει περίπου τον ίδιο αριθμό μη μηδενικών στοιχείων. Μια τυχαία μετάθεση έχει επίσης το πλεονέκτημα ότι η ισορροπία φορτίου πιθανόν θα συνεχιστεί καθώς τα άτομα κινούνται κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης. Σημειώνεται ότι αυτή η μετάθεση χρειάζεται να γίνει μόνο μία φορά, ως ένα βήμα προ-επεξεργασίας πριν από την έναρξη της δυναμικής.

Εν ολίγοις, οι αλγόριθμοι AD μοιράζουν τη δύναμη υπολογισμού και την ολοκλήρωση της Μοριακής Δυναμικής προσομοίωσης ομοιόμορφα σε όλους τους επεξεργαστές (αγνοώντας το στοιχείο των  $O(N)$  ομαδοποιημένων καταλόγων γειτόνων που δεν είναι συνήθως σημαντικό). Ωστόσο, οι αλγόριθμοι απαιτούν καθολική επικοινωνία, καθώς κάθε επεξεργαστής πρέπει να αποκτήσει πληροφορίες που κατέχονται από όλους τους άλλους επεξεργαστές. Αυτή η επικοινωνία έχει το ίδιο εύρος με το  $N$  ανεξάρτητα από το  $P$ , έτσι ώστε να περιορίζει τον αριθμό των επεξεργαστών που μπορούν να χρησιμοποιηθούν αποτελεσματικά. Το κύριο πλεονέκτημα των αλγορίθμων είναι αυτό της απλότητας. Τα βήματα (1), (2) και (4) μπορούν να υλοποιηθούν με την απλή τροποποίηση των βρόγχων και των δομών δεδομένων σε ένα σειριακό ή διανυσματικό κώδικα για τη διαχείριση  $N/P$  ατόμων αντί των  $N$ . Οι διαδικασίες επικοινωνίας, αναδίπλωσης και ανάπτυξης (3) και (5) μπορεί να αντιμετωπίζονται ως blackbox ρουτίνες (όπως για παράδειγμα με τη χρήση των λειτουργιών MPI) και να εισάγονται στις κατάλληλες θέσεις στον κώδικα. Για την παραλληλοποίηση ενός κώδικα, είναι απαραίτητες μόνο λίγες ακόμα αλλαγές.

### **3.6 Αλγόριθμος χωρικής «αποσύνθεσης»: Spatial-decomposition algorithm**

Σε αυτόν τον παράλληλο αλγόριθμο ο φυσικός χώρος προσομοίωσης υποδιαιρείται σε μικρά 3-D κουτιά, ένα για κάθε επεξεργαστή. Αυτό το ονομάζουμε spatial decomposition του όγκου δουλειάς. Κάθε επεξεργαστής υπολογίζει δυνάμεις και ενημερώνει τις θέσεις και τις ταχύτητες όλων των ατόμων μέσα στο κουτί του σε κάθε χρονικό βήμα. Τα άτομα διαχειρίζονται από νέους επεξεργαστές καθώς κινούνται μέσα στο φυσικό πεδίο. Για να υπολογιστούν οι δυνάμεις για τα άτομα, κάθε επεξεργαστής χρειάζεται να γνωρίζει τις θέσεις των ατόμων στις κοντινές περιοχές. Η επικοινωνία που απαιτείται στον αλγόριθμο SD έχει έτσι τοπικό χαρακτήρα σε σχέση με τον καθολικό χαρακτήρα των περιπτώσεων AD και FD.

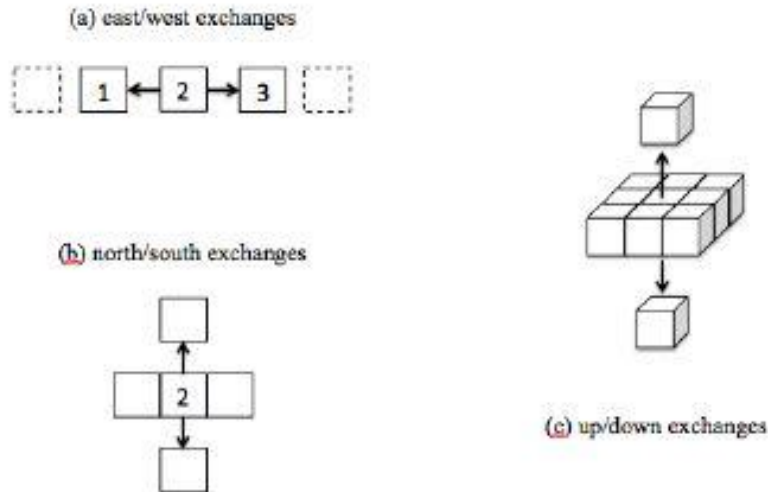
Το μέγεθος και το σχήμα του «κουτιού» που αποδίδεται σε κάθε επεξεργαστή θα εξαρτηθεί από τα  $N$ ,  $P$  και το λόγο διαστάσεων του φυσικού χώρου, ο οποίος υποθέτουμε ότι είναι ένα 3-D ορθογώνιο παραλληλεπίπεδο. Μέσα σε αυτούς τους περιορισμούς, ο αριθμός των επεξεργαστών σε κάθε διάσταση επιλέγεται έτσι ώστε το «κουτί» του κάθε επεξεργαστή να είναι όσο πιο κυβικό γίνεται προκειμένου να ελαχιστοποιηθεί η επικοινωνία. Το κόστος επικοινωνίας του αλγόριθμου SD θα αποδειχθεί ότι είναι ανάλογο προς την επιφάνεια των «κουτιών». Ένα σημαντικό σημείο που πρέπει να σημειωθεί είναι ότι σε αντίθεση με τη μέθοδο σύνδεσης κυττάρων (link-cell method) που περιεγράφηκε πριν, τα μήκη των κουτιών μπορεί τώρα να είναι μικρότερα ή μεγαλύτερα από το μήκος αποκοπής της δύναμης  $R_c$  και  $R_s$ .

Κάθε επεξεργαστής στον αλγόριθμο SD διατηρεί δύο δομές δεδομένων, μία για τα  $N/P$  άτομα στο «κουτί» του και μια για τα άτομα στα κοντινά «κουτιά». Στην πρώτη δομή δεδομένων, κάθε επεξεργαστής αποθηκεύει πλήρεις πληροφορίες: θέσεις, ταχύτητες, λίστες γειτόνων, κλπ. Αυτά τα δεδομένα αποθηκεύονται σε μια ανοιχτή λίστα για να επιτραπούν εισαγωγές και διαγραφές καθώς τα άτομα μετακινούνται σε νέες θέσεις. Στη δεύτερη δομή δεδομένων αποθηκεύονται μόνο θέσεις ατόμων. Η επικοινωνία μεταξύ των επεξεργαστών σε κάθε χρονικό βήμα κρατά τις πληροφορίες αυτές επίκαιρες.

#### **3.6.1 Το σύστημα επικοινωνίας**

Το σύστημα επικοινωνίας που χρησιμοποιείται για να αποκτήσουμε αυτές τις πληροφορίες από τους επεξεργαστές που κατέχουν τα κοντινά κουτιά φαίνεται στην Εικόνα 11. Το πρώτο στάδιο (α) είναι να ανταλλάξει κάθε επεξεργαστής πληροφορίες με τους παρακείμενους επεξεργαστές που βρίσκονται στην ανατολική και δυτική διάσταση. Ο επεξεργαστής 2 γεμίζει ένα ρυθμιστικό

μήνυμα με τις θέσεις των ατόμων που κατέχει, τα οποία είναι μέσα στο μήκος αποκοπής δυνάμεων  $R_s$  του κουτιού του πρώτου επεξεργαστή. Εάν  $s < R_s$ , όπου  $s$  είναι το μήκος του κουτιού στην ανατολική και δυτική κατεύθυνση, αυτό θα είναι το σύνολο των ατόμων του επεξεργαστή νούμερο 2, αλλιώς θα είναι εκείνου που βρίσκεται πλησιέστερα στο κουτί 1. Τώρα, κάθε επεξεργαστής στέλνει το μήνυμά του προς τον επεξεργαστή στη δυτική κατεύθυνση (ο 2 στέλνει προς τον 1) και λαμβάνει ένα μήνυμα από την ανατολική κατεύθυνση. Κάθε επεξεργαστής τοποθετεί τις ληφθείσες πληροφορίες στη δεύτερη δομή δεδομένων του. Τώρα, η διαδικασία αντιστρέφεται με κάθε επεξεργαστή να στέλνει προς τα ανατολικά και να λαμβάνει από τα δυτικά. Αν  $s > R_s$ , όλες οι αναγκαίες θέσεις των ατόμων στην ανατολική και δυτική διάσταση έχουν τώρα αποκτηθεί από κάθε επεξεργαστή. Αν  $s < R_s$ , τα βήματα ανατολής-δύσης επαναλαμβάνονται με κάθε επεξεργαστή να στέλνει περισσότερες θέσεις ατόμων από αυτές που είναι απαραίτητες στους παρακείμενους επεξεργαστές του. Για παράδειγμα, ο επεξεργαστής 2 στέλνει στον επεξεργαστή 1 θέσεις ατόμων από το κουτί 3 (το οποίο ο επεξεργαστής 2 έχει τώρα στη δεύτερη δομή δεδομένων του). Αυτό μπορεί να επαναληφθεί έως ότου κάθε επεξεργαστής μάθει όλες τις θέσεις των ατόμων μέσα σε μια απόσταση  $R_s$  από το κουτί του, όπως υποδεικνύεται και από τα κουτιά με διακεκομμένη γραμμή στο σχήμα. Η ίδια διαδικασία επαναλαμβάνεται τώρα σε βορρά και νότο (όπως στο στάδιο (β) της Εικόνας 8). Η μόνη διαφορά είναι ότι τα μηνύματα που αποστέλλονται τώρα με τον παρακείμενο επεξεργαστή περιέχουν όχι μόνον άτομα τα οποία ο επεξεργαστής ήδη διαθέτει (στην πρώτη δομή δεδομένων του), αλλά και τις θέσεις των ατόμων στη δεύτερη δομή δεδομένων που απαιτούνται από τον παρακείμενο επεξεργαστή. Για  $s = R_s$ , αυτό έχει σαν αποτέλεσμα την αποστολή 3 κουτιών άξια των θέσεων ατόμου σε ένα μήνυμα, όπως φαίνεται στο (β). Τέλος, στο στάδιο (γ) η διαδικασία επαναλαμβάνεται στην κατακόρυφη διεύθυνση. Τώρα οι θέσεις των ατόμων από ένα ολόκληρο επίπεδο κιβωτίων (9 στο σύνολο αντιστοίχως του σχήματος) αποστέλλονται σε ένα μήνυμα.



Εικόνα 11: Η μέθοδος με την οποία ένας επεξεργαστής αποκτά τις θέσεις των κοντινών ατόμων στον αλγόριθμο χωρικής-αποσύνθεσης. Σε έξι ανταλλαγές δεδομένων μπορούν να κοινοποιούνται όλες οι θέσεις των ατόμων στις παρακείμενες θέσεις στα 9α) ανατολικά / δυτικά, (β) βόρεια / νότια.

Υπάρχουν πολλά σημαντικά πλεονεκτήματα σε αυτό το σύστημα, τα οποία μειώνουν το συνολικό κόστος της επικοινωνίας στον αλγόριθμο αυτό.

1. Αρχικά, για  $s \geq R_s$  χρειάζονται οι θέσεις ατόμων από όλα τα 26 γύρω κουτιά που έχουν ληφθεί στις μόλις 6 ανταλλαγές δεδομένων. Επιπλέον, αν η παράλληλη μηχανή έχει μια τοπολογία υπερκύβου (όπως για παράδειγμα ο υπερυπολογιστής IBM BlueGene/P της JSC), τότε οι επεξεργαστές μπορούν να αντιστοιχίζονται με τα κουτιά με τέτοιο τρόπο ώστε και οι 6 από αυτούς τους επεξεργαστές να συνδέονται απευθείας με τον κεντρικό επεξεργαστή. Κατά αυτό τον τρόπο, η διάδοση των μηνυμάτων θα είναι γρήγορη και χωρίς αντιθέσεις.
2. Δεύτερον, όταν  $s < R_s$  έτσι ώστε να απαιτούνται πληροφορίες από πιο απομακρυσμένα κουτιά, αυτό συμβαίνει με μερικές μόνο επιπλέον ανταλλαγές δεδομένων, οι οποίες εξακολουθούν να είναι με τους 6 άμεσα γειτονικούς επεξεργαστές. Αυτό είναι ένα σημαντικό χαρακτηριστικό του αλγόριθμου, το να μπορεί να αποδίδει καλά ακόμη και όταν χρησιμοποιούνται μεγάλοι αριθμοί επεξεργαστών σε σχετικά μικρά προβλήματα.
3. Ένα τρίτο πλεονέκτημα είναι ότι η ποσότητα των δεδομένων που διαβιβάζονται ελαχιστοποιείται. Κάθε επεξεργαστής αποκτά μόνο τις θέσεις των ατόμων που βρίσκονται σε απόσταση  $R_s$  από το κουτί του.
4. Τέταρτον, το σύνολο των λαμβανόμενων θέσεων ατόμων μπορούν να τοποθετηθούν ως συνεχόμενα δεδομένα απευθείας στη δεύτερη δομή

δεδομένων του επεξεργαστή. Δε δαπανάται χρόνος στην αναδιάταξη των δεδομένων, εκτός από το να δημιουργηθούν τα ρυθμιστικά μηνύματα που πρέπει να σταλούν.

5. Τέλος, όπως θα συζητηθεί με περισσότερες λεπτομέρειες παρακάτω, αυτή η δημιουργία του μηνύματος μπορεί να γίνει πολύ γρήγορα. Μια πλήρης σάρωση των δύο δομών δεδομένων γίνεται μόνο μία φορά κάθε λίγα χρονικά βήματα, όταν δημιουργηθούν οι λίστες γειτόνων, για να αποφασιστεί ποιες θέσεις ατόμων θα στείλει σε κάθε μήνυμα. Η διαδικασία σάρωσης δημιουργεί μια λίστα με τα άτομα που απαρτίζουν το κάθε μήνυμα. Κατά τη διάρκεια όλων των άλλων βημάτων, οι λίστες μπορούν να χρησιμοποιηθούν, αντί της σάρωσης της πλήρους λίστας των ατόμων, για να βρεθούν τα αναφερόμενα άτομα και να φορτωθούν τα μηνύματα γρήγορα. Αυτό είναι το ισοδύναμο μιας λειτουργίας συγκέντρωσης σε ένα διανυσματικό μηχάνημα.

### 3.6.2 Ο απλούστερος αλγόριθμος

Ο αλγόριθμος SD μπορεί απεικονιστεί όπως στην Εικόνα 12. Το κουτί  $z$  έχει εκχωρηθεί στον επεξεργαστή  $P_z$ , όπου το  $z$  τρέχει από το 0 έως το  $P-1$ . Ο επεξεργαστής  $P_z$  αποθηκεύει τις θέσεις των  $N/P$  ατόμων του στη θέση  $x_z$  και των αντίστοιχων δυνάμεων στο  $f_z$ . Τα βήματα (1α μέχρι 1γ) είναι η κατασκευή της λίστας γειτόνων που πραγματοποιείται μία φορά κάθε λίγα χρονικά βήματα. Αυτό είναι κάπως πιο πολύπλοκο από ότι στους άλλους αλγορίθμους, επειδή, όπως αναφέρθηκε παραπάνω, αυτό περιλαμβάνει τη δημιουργία καταλόγων των ατόμων που θα κοινοποιηθούν σε κάθε χρονικό βήμα. Αρχικά, στο βήμα (1α) οι θέσεις, οι ταχύτητες, καθώς και κάθε άλλη αναγνωριστική πληροφορία των ατόμων που δεν είναι πλέον μέσα στο κουτί  $z$  θα διαγράφονται από το  $x_z$  (πρώτη δομή δεδομένων) και θα αποθηκεύονται σε ένα ρυθμιστικό μήνυμα. Αυτά τα άτομα που ανταλλάσσονται με τους 6 παρακείμενους επεξεργαστές μέσω του σχεδίου επικοινωνίας της Εικόνας 10. Καθώς η πληροφορία ταξιδεύει προς κάθε διάσταση, ο επεξεργαστής  $P_z$  ελέγχει για νέα άτομα που βρίσκονται τώρα στο εσωτερικό όριο του κουτιού του και τα προσθέτει στο  $x_z$  του. Στη συνέχεια, στο βήμα (1β) όλες οι θέσεις των ατόμων που βρίσκονται εντός της απόστασης  $R_s$  στο κουτί  $z$ , θα αποκτηθούν από το σύστημα επικοινωνίας που περιεγράφηκε παραπάνω. Καθώς τα διαφορετικά μηνύματα φορτώνονται με σάρωση μέσα από τις δύο δομές δεδομένων, δημιουργούνται οι λίστες με τα άτομα που περιλαμβάνονται. Οι λίστες θα χρησιμοποιηθούν στο στάδιο (5). Ο συντελεστής μεγέθους  $\Delta$  για τα στάδια (1α) και (1β) θα εξηγηθεί παρακάτω.

Όταν τα βήματα (1α) και (1β) έχουν ολοκληρωθεί, τότε και οι δύο δομές δεδομένων του επεξεργαστή είναι ενήμερες. Οι λίστες γειτόνων για τα  $N/P$  άτομα του μπορούν τώρα να κατασκευαστούν στο βήμα (1γ). Αν τα άτομα  $i$  και  $j$  βρίσκονται και τα δύο στο κουτί  $z$  (μια αλληλεπίδραση εσωτερική στο κουτί),

το ζεύγος (i,j) αποθηκεύεται μόνο μία φορά στη λίστα γειτόνων. Αν τα i και j είναι σε διαφορετικές θέσεις (μια αλληλεπίδραση δύο κουτιών), τότε και οι δύο επεξεργαστές αποθηκεύουν την αλληλεπίδραση αυτή στους αντίστοιχους καταλόγους γείτονά τους. Εάν αυτό δε γίνει, οι επεξεργαστές θα υπολογίσουν δυνάμεις για τα άτομα που δεν έχουν στην εμβέλειά τους και έτσι θα είναι απαραίτητη επικοινωνία των δυνάμεων πίσω, στους επεξεργαστές που έχουν στην περιοχή τους τα άτομα αυτά. Ένας τροποποιημένος αλγόριθμος που εκτελεί αυτήν την επικοινωνία για να αποφευχθεί ο διπλός υπολογισμός των δυνάμεων στην αλληλεπίδραση των δύο κουτιών συζητείται παρακάτω. Εάν το  $s$ , το μήκος του κουτιού  $z$ , είναι λιγότερο από δύο αποστάσεις αποκοπή, είναι πιο γρήγορο να βρει κανείς τις αλληλεπιδράσεις γείτονα με τον έλεγχο κάθε ατόμου μέσα στο κουτί  $z$  αντί τον έλεγχο σε όλα τα άτομα και στις δύο δομές δεδομένων. Αυτό έχει διάσταση  $(N/P)^2$ . Αν  $s > 2R_s$ , τότε με το κέλυφος των ατόμων γύρω από το κουτί  $z$ , υπάρχουν 4 ή περισσότερες περιοχές σε κάθε διάσταση. Σε αυτή την περίπτωση, όπως και με τους αλγόριθμους από τις προηγούμενες ενότητες, είναι γρηγορότερο να εκτελεστεί η κατασκευή της λίστας γειτόνων από ομαδοποίηση. Όλα τα άτομα και στις δύο δομές δεδομένων χαρτογραφούνται σε περιοχές μεγέθους  $R_s$ . Οι γύρω περιοχές κάθε ατόμου στη θέση  $z$  συνέχεια ελέγχονται για πιθανούς γείτονες.

Ο επεξεργαστής  $P_z$  μπορεί τώρα να υπολογίσει όλες τις δυνάμεις επί των ατόμων του στο βήμα (2) χρησιμοποιώντας τις λίστες γειτόνων.

(1a) Move necessary atoms to new boxes	$\Delta$
(1b) Make lists of all atoms that will need to be exchanged	$\Delta$
(1c) Construct neighbor lists of interacting pairs in box $z$	
( $s < 2R_s$ ) All pairs	$\frac{N}{P} \left( \frac{N}{2P} + \Delta \right)$
( $s \geq 2R_s$ ) Binning	$\frac{N}{2P} + \Delta$
(2) Compute forces on atoms in box $z$ , doubly storing results in $f_z$	$\frac{N}{2P} + \Delta$
(4) Update atom positions in $x_z$ in box $z$ using $f_z$	$\frac{N}{P}$
(5) Exchange atom positions across box boundaries	
with neighboring processors	$\frac{N}{P} (1 + 2R_s/d)^3$
( $s < R_s$ ) Send $N/P$ positions to many neighbors	$R_s^3$
( $s \gtrsim R_s$ ) Send $N/P$ positions to nearest neighbors	$\frac{N}{P}$
( $s \gg R_s$ ) Send positions near box surface to nearest neighbors	$\left( \frac{N}{P} \right)^{2/3}$

Εικόνα 12: Ο αλγόριθμος S1 της «χωρικής αποσύνθεσης» για τον επεξεργαστή  $P_z$  σε ένα χρονικό βήμα.

Όταν η αλληλεπίδραση είναι μεταξύ δύο ατόμων μέσα στο κουτί  $z$ , τότε η προκύπτουσα δύναμη αποθηκεύεται δύο φορές στο  $f_z$ , μία φορά για το άτομο  $i$  και μία φορά για το άτομο  $j$ . Για αλληλεπιδράσεις δύο κουτιών, αποθηκεύεται μόνο η δύναμη που αφορά τα άτομα του επεξεργαστή. Μετά τον υπολογισμό του  $f_z$ , οι θέσεις των ατόμων ενημερώνονται στο βήμα (4). Τέλος, αυτές οι ενημερωμένες θέσεις πρέπει να κοινοποιηθούν στους γύρω επεξεργαστές στο πλαίσιο της προετοιμασίας για το επόμενο χρονικό βήμα. Αυτό συμβαίνει στο στάδιο (5), στο πρότυπο της επικοινωνίας της Εικόνας 12 με τη χρήση των καταλόγων που δημιουργήθηκαν προηγουμένως. Η ποσότητα των δεδομένων που ανταλλάσσεται σε αυτή τη λειτουργία είναι συνάρτηση των σχετικών τιμών της απόστασης αποκοπής της δύναμης και του μήκους του κουτιού. Επίσης, σημειώνεται ότι για τα χρονικά βήματα που κατασκευάζεται η λίστα γειτόνων, το βήμα (5) δεν πρέπει να εκτελείται αφού το βήμα (1β) έχει το ίδιο αποτέλεσμα.

### 3.6.2.1 Το μέγεθος της επικοινωνίας

Οι ενέργειες επικοινωνίας στον αλγόριθμο **S1** εκτελούνται στα στάδια (1α), (1β) και (5). Η επικοινωνία στα δύο τελευταία στάδια είναι πανομοιότυπη. Το κόστος αυτών των βημάτων είναι τόσο όσος και ο όγκος των δεδομένων που ανταλλάσσονται. Για το στάδιο (5) και αν υποθέσουμε ομοιόμορφη πυκνότητα ατόμων, αυτό είναι ανάλογο προς το φυσικό όγκο του κελύφους με πάχος  $R_s$  γύρω από το κουτί  $z$ , δηλαδή  $(s + 2R_s)^3 - s^3$ . Σημειώνεται ότι υπάρχουν περίπου  $N/P$  άτομα σε έναν όγκο  $s^3$  όταν το  $s^3$  είναι το μέγεθος του κουτιού  $z$ . Υπάρχουν τρεις περιπτώσεις για εξέταση :

1. Αν  $s < R_s$  , τότε πρέπει να ανταλλάσσονται δεδομένα από πολλά γειτονικά κουτιά και η λειτουργία διαστασιοποιείται ως  $8R_s^3$ .
2. Αν  $s \geq R_s$  , τότε ανταλλάσσονται δεδομένα σε όλα τα 26 γύρω κουτιά και η λειτουργία διαστασιοποιείται ως  $27N/P$ .
3. Αν  $s \gg R_s$  , τότε μόνο οι θέσεις των ατόμων κοντά στις 6 όψεις του κουτιού  $z$  θα ανταλλάσσονται. Η επικοινωνία τότε έχει μέγεθος όσο το εμβαδόν της επιφάνειας του κουτιού  $z$ , δηλαδή  $6R_s(N/P)^{2/3}$ .

Οι περιπτώσεις αυτές αναφέρονται ρητά στη διάσταση του σταδίου (5). Στην Εικόνα 12, χρησιμοποιούμε τον όρο  $\Delta$  για να αντιπροσωπεύει όποια από τις τρεις περιπτώσεις είναι εφαρμόσιμη για τα δεδομένα  $N$ ,  $P$ , και  $R_s$ . Σημειώνεται ότι το βήμα (1α) συνεπάγεται λιγότερη επικοινωνία δεδομένου ότι δε θα κινηθούν όλα τα άτομα που βρίσκονται σε απόσταση αποκοπής από την πλευρά του κουτιού έξω από το κουτί. Αυτή η λειτουργία όμως εξακολουθεί να έχει μέγεθος τόσο όσο η επιφάνεια του κουτιού  $z$ , έτσι λογίζουμε τη διάσταση της ως  $\Delta$ .

### 3.6.2.2 Το μέγεθος των υπολογισμών

Το υπολογιστικό κομμάτι του αλγορίθμου **S1** βρίσκεται στα στάδια (1γ), (2) και (4). Όλα αυτά έχουν εύρος  $N/P$  με πρόσθετη εργασία στα στάδια (1γ) και (2) για τα άτομα που είναι γειτονικά του κουτιού  $z$  και αποθηκεύονται στη δεύτερη δομή δεδομένων. Ο αριθμός αυτών των ατόμων είναι ανάλογος του  $\Delta$  έτσι ώστε να περιλαμβάνεται στο εύρος αυτών των βημάτων. Ο ηγετικός όρος στη διαστασιολόγηση των σταδίων (1γ) και (2) αναφέρεται ως  $N/2P$  όπως και στους αλγόριθμους **A2** και **F2**, αφού οι αλληλεπιδράσεις στο εσωτερικό του κουτιού αποθηκεύονται και υπολογίζονται μια μόνο φορά για κάθε ζεύγος ατόμων στον αλγόριθμο **S1**. Σημειώνεται ότι καθώς το  $s$  μεγαλώνει αναλογικά με το  $R_s$ , όπως συμβαίνει και στις πολύ μεγάλες προσομοιώσεις, η συνεισφορά του  $\Delta$  στο συνολικό χρόνο υπολογισμού μειώνεται και η συνολική διάσταση του αλγορίθμου **S1** προσεγγίζει το βέλτιστο  $N/2P$ . Στην ουσία, κάθε επεξεργαστής ξοδεύει σχεδόν όλο το χρόνο της εργασίας στο δικό του κουτί και ανταλλάσσει μόνο ένα σχετικά μικρό ποσό πληροφοριών με τους γειτονικούς επεξεργαστές για να ενημερώσει τις οριακές συνθήκες του.

### 3.6.2.3 Η ενημέρωση των δομών δεδομένων

Ένα σημαντικό χαρακτηριστικό του αλγορίθμου  $S_1$  είναι ότι οι δομές δεδομένων τροποποιούνται μόνο μία φορά ανά μερικά χρονικά διαστήματα όσο κατασκευάζονται οι λίστες γείτονα. Συγκεκριμένα, ακόμη και αν ένα άτομο κινείται έξω από τα όρια του κουτιού  $z$  δεν ανατίθεται εκ νέου σε ένα νέο επεξεργαστή μέχρι το βήμα (1α) να εκτελεστεί. Ο επεξεργαστής  $P_z$  μπορεί ακόμα να υπολογίσει σωστά τις δυνάμεις για κάποιο άτομο όσο πληρούνται τα εξής δύο κριτήρια :

- Το πρώτο είναι ότι ένα άτομο δεν κινείται μακρύτερα από το μήκος  $s$  μεταξύ της κατασκευής δύο λιστών γειτόνων.
- Το δεύτερο είναι ότι όλα τα κοντινά άτομα μέσα σε μια απόσταση  $R_s$ , αντί της  $R_c$ , πρέπει να ενημερώνονται κάθε χρονικό βήμα.

Η εναλλακτική λύση είναι να προωθούνται τα άτομα στους νέους επεξεργαστές τους σε κάθε χρονικό βήμα. Αυτό έχει το πλεονέκτημα ότι μόνον τα άτομα του κουτιού  $z$  σε απόσταση  $R_c$  πρέπει να ανταλλάσσονται σε όλα τα χρονικά βήματα όταν λίστες γειτόνων δεν είναι κατασκευασμένες. Αυτό μειώνει τον όγκο της επικοινωνίας μιας και  $R_c < R_s$ . Ωστόσο, τώρα πρέπει επίσης να σταλεί η λίστα γειτόνων των νέων ατόμων. Οι πληροφορίες στη λίστα γειτόνων είναι οι δείκτες των ατόμων που αναφέρονται σε τοπικές θέσεις μνήμης όπου αποθηκεύονται τα γειτονικά άτομα. Αν τα άτομα κινούνται συνεχώς προς νέους επεξεργαστές, αυτοί οι τοπικοί δείκτες χάνουν το νόημά τους. Για να ξεπεραστεί αυτό, μπορεί να οριστεί ένας παγκόσμιος δείκτης (1 έως  $N$ ) για κάθε άτομο και να κινείται με το άτομο από τον ένα επεξεργαστή στον άλλο. Στη συνέχεια



πρέπει να αποθηκευτεί, από κάθε επεξεργαστή, μια χαρτογράφηση του καθολικού δείκτη στην τοπική μνήμη, σε ένα φορέα μεγέθους  $N$  ή θα πρέπει οι καθολικοί δείκτες να αποθηκευτούν και να βρεθούν τα σωστά άτομα όταν αυτά αναφέρονται σε μια λίστα γειτόνων. Η προηγούμενη λύση περιορίζει το μέγεθος των προβλημάτων που μπορούν να επιλυθούν ταυτόχρονα, καθώς συνεπάγεται επιπλέον κόστος για τις εργασίες ταξινόμησης και αναζήτησης.

Από την άλλη πλευρά, ο κώδικας  $S_1$  εκμεταλλεύεται την ιδέα των Tamayo και Giles [29], η οποία τον καθιστά λιγότερο πολύπλοκο και μειώνει το κόστος των υπολογισμών και της επικοινωνίας γενικότερα. Αυτό δεν επηρεάζει τους χρόνους για προσομοιώσεις με μεγάλα  $N$ , αλλά βελτιώνει την απόδοση του αλγορίθμου για τα μεσαία προβλήματα.

### 3.6.3 Εκμεταλλεούμενοι τον 3<sup>ο</sup> Νόμο του Νεύτωνα

Μια τροποποιημένη έκδοση του  $S_1$  που εκμεταλλεύεται πλήρως τον 3ο νόμο του Νεύτωνα μπορεί επίσης να επινοηθεί και να την ονομάσουμε αλγόριθμο  $S_2$ . Εάν ο επεξεργαστής  $P_z$  αποκτά άτομα μόνο από τη δύση, το νότο, και από τις κάτω κατευθύνσεις (και στέλνει τα δικά του άτομα μόνο στα ανατολικά, βόρεια και τις πάνω κατευθύνσεις), τότε κάθε ζεύγος αλληλεπίδρασης χρειάζεται να υπολογιστεί μόνο μία φορά, ακόμα και όταν τα δύο άτομα διαμένουν σε διαφορετικά κουτιά. Αυτό απαιτεί την αποστολή των υπολογιστικών αποτελεσμάτων της δύναμης πίσω στις αντίθετες κατευθύνσεις στους επεξεργαστές οι οποίοι κατέχουν τα άτομα, όπως το βήμα (3) στον αλγόριθμο. Το σύστημα αυτό δε μειώνει το κόστος της επικοινωνίας, αφού οι μισές πληροφορίες κοινοποιούνται δύο φορές πιο συχνά, αλλά μειώνει το φαινόμενο του διπλού υπολογισμού των δυνάμεων για τις αλληλοεπιδράσεις δύο κουτιών. Δύο σημεία χαίρουν ιδιαίτερης σημασίας: Πρώτον, οι συνολικές εξοικονομήσεις της  $S_2$  σε σχέση με την  $S_1$  είναι μικρές, ιδιαίτερα για μεγάλους αριθμούς  $N$ . Μόνο ο όρος  $\Delta$  μπορεί να αποφευχθεί στα στάδια (1γ) και (2). Δεύτερον, η απόδοση των αλγορίθμων SD για τα μεγάλα συστήματα μπορεί να βελτιωθεί με βελτιστοποίηση του τρόπου υπολογισμού της δύναμης σε μονό επεξεργαστή στο στάδιο (2). Όπως και με τις διανυσματικές μηχανές, αυτό απαιτεί να δοθεί περισσότερη προσοχή στις δομές δεδομένων και στη σειρά των βρόχων του υπολογισμού των δυνάμεων και της κατασκευής των λιστών γειτόνων για την επίτευξη υψηλών ποσοστών χρόνου υπολογισμού σε εφαρμογές μονού επεξεργαστή. Εφαρμογή  $S_2$  απαιτεί κωδικοποίηση για τα άτομα που βρίσκονται κοντά στις πλευρές και τις ακμές του κουτιού για να εξασφαλιστεί ότι όλες οι αλληλεπιδράσεις υπολογίζονται μόνο μία φορά [19], το οποίο μπορεί να εμποδίσει αυτή τη διαδικασία βελτιστοποίησης.

### 3.6.4 Ισορροπία φορτίου

Τέλος, το θέμα της ισορροπίας του φορτίου είναι μια σημαντική ανησυχία σε κάθε αλγόριθμο SD. Ο αλγόριθμος  $S_1$  θα έχει ισορροπία φορτίου μόνο αν όλα τα κουτιά έχουν περίπου ίσο αριθμό ατόμων (και γειτονικών ατόμων). Αυτό δε θα συμβεί αν η φυσική πυκνότητα των ατόμων δεν είναι ομοιόμορφη. Επιπλέον, εάν η φυσική περιοχή δεν είναι ένα ορθογώνιο παραλληλεπίπεδο, μπορεί να είναι δύσκολο να διαχωριστεί σε ίσου μεγέθους κομμάτια. Οι εξελιγμένοι αλγόριθμοι εξισορρόπησης φόρτου έχουν αναπτυχθεί για να χωρίσουν έναν ακανόνιστο φυσικό τομέα ή μη ομοιόμορφα πυκνές συστάδες των ατόμων, που όμως δημιουργούν υπο-τομείς που είναι ακανόνιστα σχήματα ή συνδέονται με έναν ακανόνιστο τρόπο με τους γειτονικούς τους επιμέρους τομείς. Σε κάθε περίπτωση, το έργο της ανάθεσης ατόμων σε υπο-τομείς και της επικοινωνίας με τους γείτονές τους γίνεται πιο δαπανηρό και πολύπλοκο. Αν η φυσική πυκνότητα των ατόμων αλλάζει με την πάροδο του χρόνου κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης MD, το πρόβλημα εξισορρόπησης του φορτίου επιδεινώνεται. Κάθε δυναμικό σύστημα εξισορρόπησης φόρτου απαιτεί πρόσθετη υπολογιστική επιβάρυνση και κίνηση δεδομένων.

Εν ολίγοις, ο αλγόριθμος SD, όπως και ο AD και ο FD, χωρίζει ομοιόμορφα τους υπολογισμούς μοριακής δυναμικής σε όλους τους επεξεργαστές. Το βασικό πλεονέκτημά του είναι ότι εκμεταλλεύεται πλήρως την τοπική φύση των ενδοατομικών δυνάμεων εκτελώντας μόνο τοπικές επικοινωνίες. Έτσι, στο μεγάλο  $N$ , επιτυγχάνεται η βέλτιστη  $O(N/P)$  διαστασιολόγηση και είναι σαφώς ο ταχύτερος αλγόριθμος. Ωστόσο, αυτό είναι αληθές μόνο αν η καλή ισορροπία του φορτίου είναι επίσης εφικτή. Από τη στιγμή που η απόδοσή του είναι ευαίσθητη στη γεωμετρία του προβλήματος, ο αλγόριθμος  $S_1$  μας περιορίζει περισσότερο σε σχέση με τους  $A_2$  και  $F_2$  των οποίων η επίδοση είναι ανεξάρτητη της γεωμετρίας. Ένα δεύτερο μειονέκτημα του αλγορίθμου  $S_1$  είναι η πολυπλοκότητα του. Είναι πιο δύσκολο να εφαρμοστεί αποτελεσματικά από ότι οι απλούστεροι αλγόριθμοι  $A_2$  και  $F_2$ . Ειδικότερα, το σύστημα επικοινωνίας απαιτεί επιπλέον κωδικοποίηση και την τήρηση βιβλίων για τη δημιουργία μηνυμάτων και την πρόσβαση σε δεδομένα που λαμβάνονται από γειτονικά κουτιά. Στην πράξη, ενσωματώνοντας τον αλγόριθμο  $S_1$  σε έναν υπάρχων σειριακό κώδικα μοριακής δυναμικής μπορεί να απαιτήσει μια ουσιαστική αναμόρφωση των δομών δεδομένων και του κώδικα.

## Κεφάλαιο 4

### Παραδείγματα Προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής σε Νάνο-Κατεργασίες

Σύμφωνα με τον ορισμό που δόθηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο για τις μικρο-κατεργασίες, οι παραπάνω έχουν σκοπό την παραγωγή στοιχείων στην κλίμακα των μικρών και γενικά μικρογραφίες εξαρτημάτων (miniaturization). Τέτοιου τύπου κατεργασίες μπορούν να επιτευχθούν με πολλούς τρόπους, οι οποίοι έχουν κοινό παρονομαστή την προσπάθεια για μικρότερων διαστάσεων τεμάχια, υψηλότερη ακρίβεια και παραγωγή εξαρτημάτων απόλυτα λειτουργικών. Η ανάπτυξη νέων τεχνολογιών ακολουθεί κυρίως δύο κατευθύνσεις: την υποβάθμιση κλίμακας μεθόδων κατεργασιών που έχουν ήδη ένα άλφα υπόβαθρο σε συμβατικές κατεργασίες και έχουν χρησιμοποιηθεί ευρέως στη βιομηχανία, και την ανάπτυξη νέων αποκλειστικά για αυτό τον τύπο κατεργασιών.

Συνηθίζεται, και κατ'αυτόν τον τρόπο θα γίνει η κατηγοριοποίηση παρακάτω, να διαχωρίζονται σε λιθογραφικές και μη-λιθογραφικές μικρο-κατεργασίες. Οι λιθογραφικές έχουν εξαπλωθεί ευρέως στην κατασκευή ολοκληρωμένων κυκλωμάτων (integrated circuits – Ics), κυρίως με τη μέθοδο της φωτο-λιθογραφίας η οποία χρησιμοποιούταν για αρκετά χρόνια σχεδόν αποκλειστικά για την παραγωγή τσιπ από πυρίτιο (silicon chips), σε σημείο να κορεστεί. Σα συνέπεια είχε την ανάπτυξη νέων μεθόδων που όπως αποκαλούνται, Λιθογραφίες Επόμενης Γενιάς (Next Generation Lithographies – NGL) και συμπεριλαμβάνουν τις X-ray, Galvanoformung and Abformung (LIGA), λιθογραφίες δέσμης ηλεκτρονίων (electron beam) και 3D. Εφόσον ο σκοπός αυτής της διπλωματικής εργασίας είναι να παρουσιάσει τις μικρο-κατεργασίες που μπορούν να προσομοιωθούν με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής, οι λιθογραφίες δε θα μας απασχολήσουν περαιτέρω. Οι μη-λιθογραφικές κατεργασίες χρησιμοποιούν ως επί το πλείστον μηχανική, θερμική, ηλεκτρο-θερμική ή ηλεκτρο-χημική ενέργεια προκειμένου να πετύχουν αφαίρεση υλικού και ως επί το πλείστον μπορούν να προσομοιωθούν με τη ΜΔ. Στην κατηγορία αυτή συμπεριλαμβάνονται συμβατικές και μη-συμβατικές κατεργασίες, κατάλληλα διαμορφωμένες ώστε να αποδίδουν στο 'μικρό-κοσμο', και μερικές πιο ευρείς ομάδες μεθόδων είναι οι μικρο-κοπή, μικρο-ηλεκτροδιάβρωση, κατεργασίες με χρήση laser και ηλεκτροχημικές [70].

#### **4.1 Προσομοίωση με Μοριακή Δυναμική για Λειαντικές Κατεργασίες**

Οι λειαντικές κατεργασίες διενεργούνται από μεγάλο αριθμό κοπτικών ακμών οι οποίες έχουν ακαθόριστο προσανατολισμό και γεωμετρία. Αντίθετα από άλλες κατεργασίες, η αστοχία μιας εκ των ακμών δεν επηρεάζει την κατεργασία και γενικά οι διαφορές ανάμεσα στις λειαντικές κατεργασίες και στις κατεργασίες κοπής είναι η γεωμετρία της κοπτικής ακμής και η αντίστοιχη αναλογία σε μέγεθος του παραγόμενου αποβλήτου [44]. Εξαιτίας στο εξαιρετικά λεπτό απόβλιπτο που παράγεται από λειαντικές κατεργασίες, είναι δυνατή η συγκέντρωση των τάσεων σε πολύ στενά ορισμένες περιοχές της κατεργασίας, και χάρη σε αυτή την ιδιότητα, δύσκολα κατεργάσιμα υλικά γίνεται ευκολότερο να κατεργασθούν. Ο ίδιος μηχανισμός ευθύνεται και για την επιτυχία καλύτερου φινιρίσματος επιφανειών μέσω λειαντικών κατεργασιών.

Δεδομένου ότι οι πρόσφατες εξελίξεις στο σχεδιασμό εργαλείων και μηχανών επιτρέπει την κοπή σε περιοχές οι οποίες αποτέλεσαν τομέα των λειαντικών κατεργασία αποκλειστικά, έχει τονιστεί από Inasaki et al [44], ότι η συγκεκριμένη μηχανική των λειάνσεων παρέχει νέες δυνατότητες, όπου μπορούν να αναπτυχθούν εξαιρετικά μικρού μεγέθους λειαντικές διαδικασίες. Έρευνες οι οποίες στοχεύουν στην ανάπτυξη λειαντικών μέσω και διαδικασιών παρεμποδίζονται κυρίως από το μεγάλο αριθμό κινούμενων λειαντικών μέσων και μη προσβάσιμες περιοχές από κοπτικές ακμές. Η χρήση μοντέλων είναι κοινή και για τις πειραματικές και για τις θεωρητικές έρευνες [45].

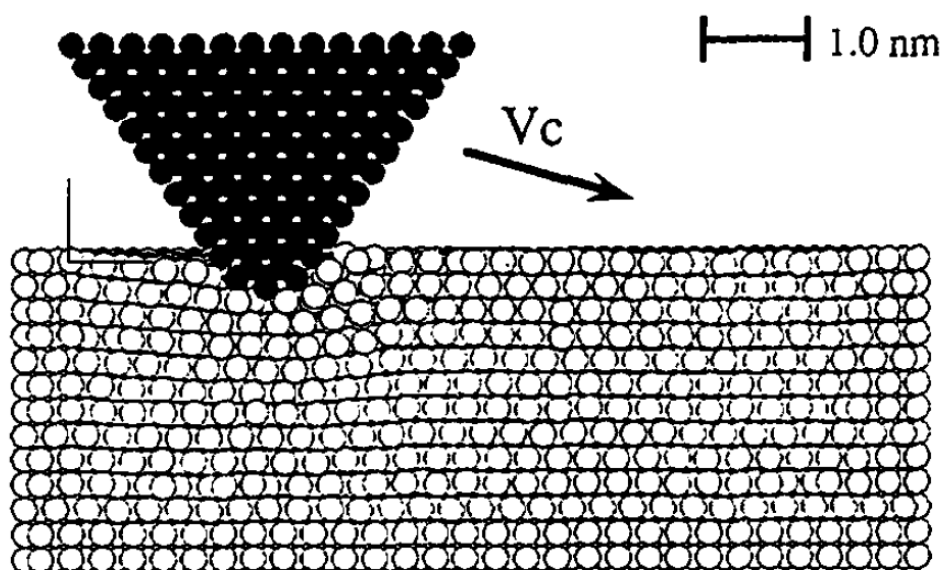
Η αναπτυσσόμενη ζήτηση για υψηλής ακρίβειας προϊόντα διευρύνει την ποικιλία λειαντικών κατεργασιών σε περιοχές υπό του μικρού με βάθου κοπής της τάξης των 10 nm. Στις κατεργασίες ύψιστης ακρίβειας οι απόλυτες τιμές των παραμέτρων των κατεργασιών μειώνονται ταυτόχρονα με το μικρότερο μέγεθος και την κλίμακα της κατεργασίας και αυτό δημιουργεί προβλήματα στις μετρήσεις και στον καθορισμό των παραμέτρων.

Λαμβάνοντας υπόψη τις υποθέσεις γύρω από τα διάφορα μοντέλα αποξεστικών κατεργασιών, η μέθοδος της Μοριακής Δυναμικής είναι ένα χρήσιμο εργαλείο το οποίο μπορεί να παρέχει σε όλα αυτά τα μοντέλα ενδιαφέρουσα υποστήριξη. Ως ολοκληρωμένο φυσικό μοντέλο παρέχει όλες τις πληροφορίες εκ φύσεως, όπως τη γεωμετρία, τις δυνάμεις, την ενέργεια, τη θερμοκρασία και τις φορτίσεις. Για την άλεση, ως μια διεργασία κοπής πολλών σημείων, είναι εύκολο να συγκρίνει κανείς τα αποτελέσματα της έρευνας απόξεσης ενός σημείου με αυτά μεγαλύτερων συστημάτων.

Εξαιτίας του ακαθόριστου προσανατολισμού και της γεωμετρίας των κοπτικών ακμών των λειαντικών μέσων, η διαδικασία αφαίρεσης υλικού σπάνια λειτουργεί αψεγάδιαστα. Στην περίπτωση κακώς προσανατολισμένης κοπτικής

ακμής, δε λαμβάνει καν χώρα δημιουργία αποβλίπτου, παρά μόνο μετακίνηση κατεργαζόμενου υλικού το οποίο συσσωρεύεται στις ακμές των σχηματιζόμενων ραβδώσεων. Το φαινόμενο της συσσώρευσης υλικού περιορίζει την ποιότητα της επιφανείας όπως επίσης και την αποτελεσματικότητα της κατεργασίας, και για αυτό χρήζει περαιτέρω έρευνας.

Κατά την προετοιμασία του μοντέλου για τη μελέτη του φαινομένου της συσσώρευσης υλικού κατά τις διεργασίες λείανσης, πρώτο μέλημα είναι το κατά πόσο αυτό μπορεί να διερευνηθεί με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής.



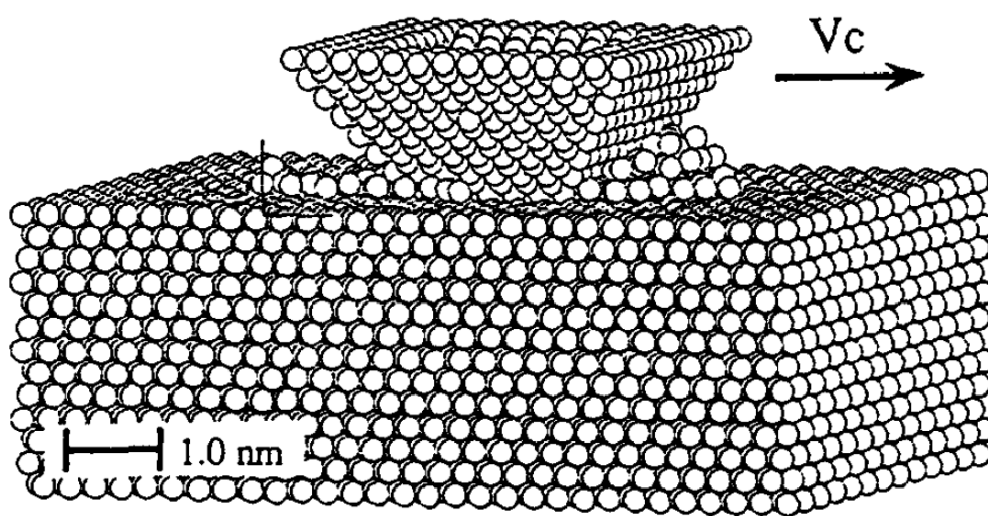
Εικόνα 13: Διαμήκης κοπή

Η παραπάνω εικόνα δείχνει το τεμάχιο αφότου το εργαλείο έχει ήδη αρχίσει να εισχωρεί στο κατεργαζόμενο υλικό για 0.43 nm. Το τεμάχιο μοντελοποιείται από 11476 άτομα σε 13 οριζόντια (1,1,1) στρώματα αναφερόμενα σε χαλκό και το εργαλείο είναι διαμορφωμένο από μπλοκ διαμαντιού. Για να μειωθεί η επιρροή των ρυθμισμένων ορίων και για να συγκρατηθεί ο συνολικός αριθμός ατόμων σε εύλογη απόσταση, η ακτίνα της ακμής έχει εκλεγεί να είναι 0.5 nm, και το βάθος κοπής 1.0 nm.

Για την προσομοίωση του χαλκού χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό Lennard – Jones. Καθώς η σκληρότητα του διαμαντιού είναι πολύ μεγαλύτερη από του χαλκού, η δομή του εργαλείου διατηρήθηκε εξαιρετικά δύσκαμπτη και η παράμετρος του δυναμικού για την αντίδραση εργαλείου–τεμαχίου προήλθε

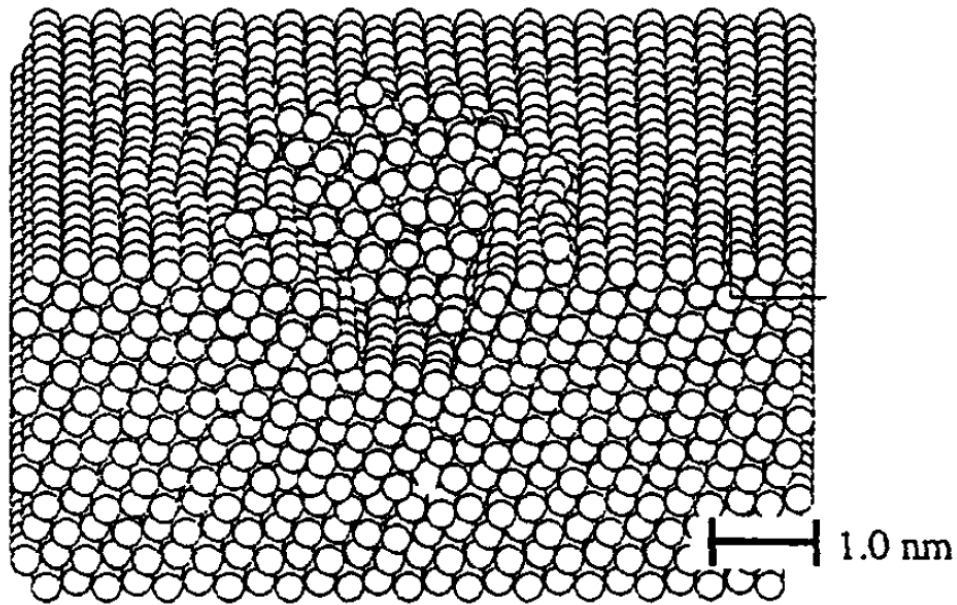
από περιγραφή του Shimada. Για αυτούς τους υπολογισμούς η ταχύτητα κοπής ρυθμίστηκε στα 100 m/s .

Το τμήμα που απεικονίζεται στην Εικόνα 13 παρέχει μια ιδέα του μοντέλου, όπου είναι ορατό γύρω από την ακμή του εργαλείου πως το τεμάχιο διαταράσσεται από την εισχώρηση του λειαντικού μέσου. Ειδικότερα κατά τη φορά της απόξεσης όπου διαφαίνεται σε ένα πρώιμο στάδιο η δημιουργία αποβλίπτου. Οι υπολογισμοί προχωρούν σε βάθος 13500 χρονικών βημάτων, που αντιστοιχούν σε χρόνο 7 ps.



Εικόνα 14: ΜΔ προσομοίωση με ευθύ ευθυγραμμισμένο εργαλείο

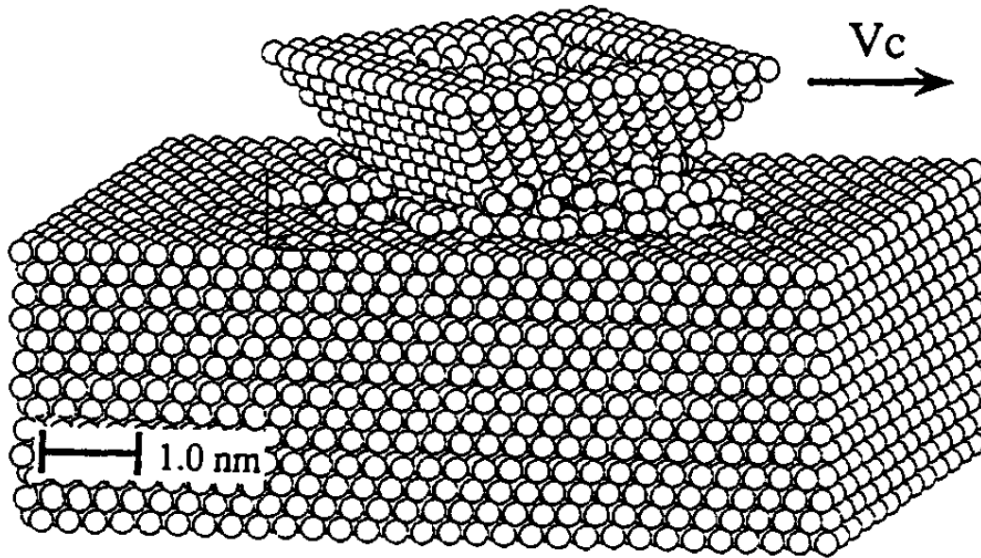
Ο Matsuo [46] υπέδειξε τη σημασία της χρήσης της κοκκώδους απεικόνισης και τη σημαντική επιρροή της σε μελέτες 'ενός κόκκου'. Ένα ρεαλιστικό, πολύπλοκο σχήμα κόκκων μπορεί να παρεμποδίσει την ορθή αξιολόγηση των επιρροών ενός συγκεκριμένου σχήματος εξαιτίας των επιρροών του συνόλου των κοπτικών ακμών που λαμβάνουν χώρα. Το υπολογιστικό μοντέλο επιτρέπει έναν πιο ξεκάθαρο διαχωρισμό των γεωμετρικών επιρροών, όπου το ιδανικό κοπτικό είναι εύκολο να επιτευχθεί. Σα συνέπεια, έχουν εκλεγεί δύο προσανατολισμοί όσων αφορά τη φορά κοπής (Εικόνες 14 & 16). Όπως φαίνεται στην Εικόνα 14, ο σχηματισμός του αποβλίπτου κατά τη φορά κοπής έχει εξελιχθεί περαιτέρω και συσσώρευση υλικού είναι ακόμα μικρή, καθώς το εργαλείο είναι ευθυγραμμισμένο κάθετα στη διεύθυνση της κοπής. Και αυτή η συμπεριφορά έχει παρατηρηθεί από τον Matsuo [46].



*Εικόνα 15: Διατομή του προηγμένου συνόλου*

Στην Εικόνα 15 δίνεται μια εγκάρσια τομή από την προσομοίωση για να μελετηθεί το αυλάκι της κοπής (το εργαλείο έχει απομακρυνθεί). Εδώ μπορεί να δει κανείς μια περιοχή τάσεων κατά τη φορά κοπής η οποία σπρώχνει τα άτομα μακριά (παραμορφωμένες σειρές ατόμων). Το σωστά ευθυγραμμισμένο εργαλείο κόβει κατά μήκος των σειρών των ατόμων, όπως διαφαίνεται από το αυλάκι.

Ο δεύτερος έντονος προσανατολισμός εργαλείου μπορεί να παρασταθεί από το ίδιο εργαλείο, αν περιστραφεί κατά περίπου 45 γύρω από τον κατακόρυφο άξονα. Η Εικόνα 16 απεικονίζει το προχωρημένο στιγμιότυπο για αυτό το σχηματισμό, μετά από ίδιο χρόνο παρατήρησης με αυτό της Εικόνας 14. Εδώ δεν υπάρχει ευθύ επίπεδο στη διεύθυνση της κοπής αλλά δύο πλευρές του κοπτικού οι οποίες προκαλούν ισχυρό χτύπημα πλευρικά. Η σύγκριση με την Εικόνα 14 αποτελεί αποδεικτικό στοιχείο ανάμεσα στους δύο μηχανισμούς. Ο διαχωρισμός ανάμεσα στο σχηματισμό αποβλίπτου και στη συσσώρευση υλικού είναι ακόμα αδύνατος σε αυτό το στάδιο των υπολογισμών. Μετά από αρκετή εξέλιξη (25000 χρονικά βήματα), παρατηρήθηκε ότι όσο μεγαλύτερη είναι η μετατόπιση στις δύο λοξές φορές κοπής (αντίστοιχα και στην κρυμμένη πλευρά) τόσο μεγαλύτερη είναι η συσσώρευση. Κατά συμφωνία με αυτές τις πρώτες παρατηρήσεις, έχει βρεθεί από πειράματα σε χάλυβα, ότι τέτοιες λοξές κοπτικές επιφάνειες μπορούν να προκαλέσουν πλευρική ροή υλικού χωρίς πραγματικά να το κόβουν [46].



Εικόνα 16: Προηγμένη ΜΔ προσομοίωση με στραμένο εργαλείο

#### **4.2 Μελέτη σκοπιμότητας των κατεργασιών απόλυτης ακρίβειας με τη Μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής**

Χρησιμοποιώντας τη Μοριακή Δυναμική προσομοίωση, αναλύεται η σκοπιμότητα κατεργασιών απόλυτης ακρίβειας ή νανο-μετρικής ακρίβειας και κατά πόσο αυτές είναι εφικτές, υπό τη θεώρηση ότι επιτυγχάνεται ο απόλυτος έλεγχος του κοπτικού εργαλείου. Βασιζόμενοι στην ανάλυση, μπορούμε να αντιληφθούμε από ατομιστικής πλευράς τη μικρο-κατεργασία της μορφοποίησης του αποβλίπτου και της παραγωγής της επιφάνειας. Το ελάχιστο πάχος αποβλίπτου, το οποίο αποτελεί μονάδα μέτρησης της ακρίβειας που μπορεί να επιτευχθεί, αναμένεται να είναι περίπου 1 nm ή λιγότερο και το η απόλυτη τραχύτητα και το βάθος του παραμορφωμένου στρώματος της κατεργαζόμενης επιφάνειας αναμένεται περίπου σε 0,5 nm και 5 nm αντίστοιχα. Η ποιότητα της κατεργαζόμενης επιφάνειας του αλουμινίου είναι χειρότερη από του χαλκού, αποτελέσματα που οδηγούν στο συμπέρασμα ότι είναι όντως σκόπιμη η κατεργασία μετάλλων απόλυτης ακρίβειας της τάξεως του 1 nm.

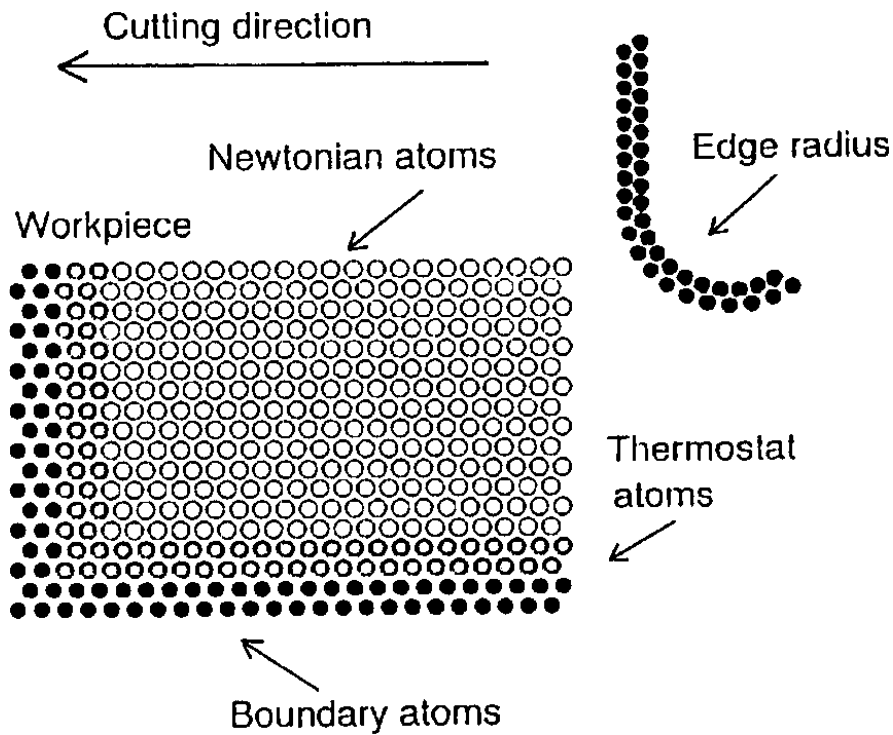
Με τη χρήση κοπτικού εργαλείου από ειδικά κατασκευασμένο διαμάντι πάνω σε μια εξαιρετικά αξιόπιστη μηχανή, αποδείχθηκε πειραματικά από τους S. Shimada, N. Ikawa (I), H. Tanaka, G. Ohnori, J. Uchikoshi ότι μπορεί να παραχθεί απόβλιπτο με πάχος έως και 1 nm. Ωστόσο, κατά την πειραματική αξιολόγηση της κοπής με διαμάντι απόλυτης ακρίβειας προβλέπονται κάποιες αναπόφευκτες δυσκολίες εξαιτίας ορισμένων συκολιών στην ελεγχιμότητα της



κίνησης της μηχανής, στη γεωμετρία του κοπτικού και στην ανάλυση των μετρήσεων για αξιολόγηση διαφόρων επιδόσεων. Στον αντίποδα, συγκρίνοντας διάφορες μελέτες και προσομοιώσεις γύρω από τις μικρο-κοπές [47], [48], [49], [50], [51] παρατηρείται μια συμφωνία στις μορφολογίες των αποβλίπτων, τις δυνάμεις κοπής και την ειδική ενέργεια που απορροφάται ανάμεσα στις προσομοιώσεις με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής και τα πειράματα μικρο-κοπών. Έτσι καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι η τεχνική της ΜΔ προσομοίωσης μπορεί να αποτελέσει ένα χρήσιμο εργαλείο για πρόβλεψη και ανάλυση κατεργασιών μικρο-κοπών με πολύ λεπτό παραγόμενο απόβλιπτο που δεν μπορούν να υλοποιηθούν πειραματικά.

Η προσομοίωση ΜΔ είναι μια μικροσκοπική προσέγγιση για την ανάλυση της συμπεριφοράς ενός συμπαγούς μοντέλου από την ατομιστική οπτική γωνία. Η Εικόνα 17 δείχνει τη σχηματοποίηση μια διδιάστατης ΜΔ προσομοίωσης για ένα (111) επίπεδο δυναμικού Morse, και το υποτιθέμενο υλικό να κόβεται με κατεύθυνση (110) από ένα (111) επίπεδο συμπαγούς διαμαντένιας κοπτικής ακμής [51]. Η ΜΔ προσομοίωση παραγωγής μικρο-αποβλίπτου και επιφανείας από χαλκό και αλουμίνιο διεξάγεται για ποικίλα πάχη αποβλίπτου και οι παράμετροι της προσομοίωσης αναφέρονται στον Πίνακα 3.

Η Εικόνα 18 παριστάνει ένα παράδειγμα της συμπεριφοράς της παραμόρφωσης των κατεργαζόμενων ατόμων μπροστά από την κοπτική ακμή, η ακτίνα της οποίας είναι 2 nm, και κατά την πρόοδο της της κοπτικής ακμής. Πιο αναλυτικά, τα άτομα του ίδιου οριζόντιου πλέγματος σκιάζονται με την ίδια, πανομοιότυπη πυκνότητα και τα αντίστοιχα μετά από την παραμόρφωση συνδέονται από συνεχόμενη γραμμή. Με την πρόοδο της κοπτικής ακμής, μερικά άτομα που βρίσκονται ακριβώς κάτω από την κυκλική κοπτική ακμή 'κόβονται' και το πλέγμα του τεμαχίου παραμορφώνεται σα να κάμπτεται. Όταν η τεταμένη ενέργεια που έχει αποθηκευτεί στο παραμορφωμένο πλέγμα υπερβεί ένα συγκεκριμένο επίπεδο, τα άτομα αναδιανέμονται επιτυχώς στο χαμηλότερο πλέγμα προκειμένου να ηρεμήσουν την τάση του πλέγματος. Ωστόσο, εφόσον η τεταμένη ενέργεια δεν είναι αρκετή για την ανακατανομή στο πλέγμα της πλευρικής όψης, μερικά άτομα παραμένουν ανάμεσα στα δύο πλέγματα σαν μια μορφή ατέλειας.



Εικόνα 17: Σχηματική αναπαράσταση μικρο-κοπής για ΜΔ προσομοίωση

Material	2-D Morse potential material ( Cu, Al )
Configuration	2-D orthogonal cutting
Cutting speed	20 , 200 m/s
Uncut chip thickness	0.1 – 1.2 nm
Tool edge radius	2 , 5 , 10 nm
Rake angle	0°
Clearance angle	7°
Width of cut	1 atomic layer
Bulk temperature	293 K
Number of work atoms	5400 , 8000
Number of tool atoms	676 , 172
Computation time step	1 , 10 fs

Πίνακας 3: Παράμετροι της ΜΔ προσομοίωσης

Σε αυτή την προσομοίωση η οδόντωση της κοπτικής ακμής μπορεί να παράγει δύο τύπους ατελειών, με δύο διαφορετικά διανύσματα Burgers  $a/2[011]$  και  $a/2[101]$ . Ωστόσο, η τοποθεσία και οι συνθήκες της παραγωγής τους δεν έχουν διευκρινιστεί ακόμα. Παρ'όλο που το συγκεκριμένο τεμάχιο έχεις τρεις διευθύνσεις ολίσθησης,  $[110]$ ,  $[011]$  και  $[101]$  η ατέλεια που έχει το ίδιο

διάνυσμα Burgers με την κατεύθυνση της κοπής,  $a/2[110]$ , δεν μπορεί να παρατηρηθεί.

Οι ατέλειες που παράγονται κοντά στην κοπτική ακμή παρουσιάζουν περιοδική και εναλλακτική κίνηση κατά μήκος της διεύθυνσης ολίσθησής τους που συνδέεται με την υπολογίσιμη διακύμανση στη δύναμη κοπής. Καθώς μια ατέλεια κινείται προς το επίπεδο ολίσθησής του, υπάρχουν αρκετές πιθανότητες να πλησιάσει σε απόσταση ατόμου την άλλη ατέλεια η οποία έχει διαφορετικό διάνυσμα Burgers. Σε τέτοιες περιπτώσεις, αυτές οι δύο ατέλειες παρατηρείται ενίοτε να ανταλλάσσουν διανύσματα Burgers χάρη σε ελαφρά μετατόπιση μερικών ατόμων μεταξύ των ατελειών. Αυτή η αντίδραση αποτελείώνεται κατά τη διάρκεια μίας περιόδου της δόνησης του πλέγματος. Κατά συνέπεια, οι ατέλειες ανταλλάσσουν επίσης επίπεδα ολίσθησης. Όπως περιγράφηκαν παραπάνω τα αποτελέσματα της συμπεριφοράς των ατελειών, η ατέλεια φαίνεται να μετακινείται στη μακροσκοπική ζώνη διάτμησης με πλευρικές κινήσεις, όπως φαίνεται στην Εικόνα 19. Με το επιτυχές πέρασμα των ατελειών που παρήχθησαν από τη διεπιφάνεια εργαλείου – τεμαχίου μέσα από τη ζώνη διάτμησης στην ελεύθερη επιφάνεια, το απόβλιπτο παραχθηκε από ένα ατομικό στρώμα και καμία ατέλεια δε φαίνεται να παρέμεινε στο απόβλιπτο.

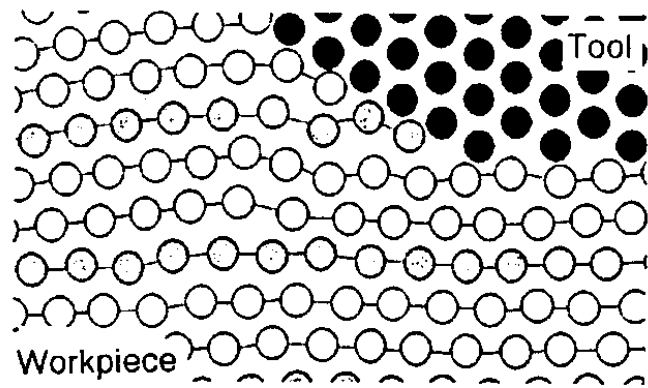
Το ελάχιστο πάχος κοπής (ΕΠΚ) στις κοπές μετάλλων ορίζεται ως το απόβλιπτο με το ελάχιστο δυνατό πάχος που μπορεί να αφαιρεθεί από την κατεργαζόμενη επιφάνεια με ένα πέρασμα της κοπτικής ακμής. Εκτός από την απόδοση της κοπτικής μηχανής, ο κυρίαρχος παράγοντας που επηρεάζει τη μέγιστη δυνατή ακρίβεια κατεργασίας είναι το ΕΠΚ. Με τη μέθοδο της ΜΔ προσομοίωσης μπορεί να προβλεφθεί το ΕΠΚ για αλουμίνιο και χαλκό υπό τον όρο της αψεγάδιαστης κίνησης της κοπτικής ακμής. Στα πλαίσια της ανάλυσης, πάχος αποβλίπτου,  $t_n$ , ορίζεται σαν η απόσταση ανάμεσα στο κέντρο του ατόμου της επιφάνειας του τεμαχίου και του ατόμου ακριβώς κάτω από την κοπτική ακμή. Η Εικόνα 20 δείχνει τα αποτελέσματα της ΜΔ προσομοίωσης μορφοποίησης αποβλίπτου σε κοπή χαλκού με ταχύτητα κοπής 200 m/s με ακτίνα κοπτικής ακμής 5 nm. Έφόσον δεν είναι ορατή η αφαίρεση υλικού με πάχος μικρότερο από 0,2 nm, το αρχικό στάδιο που παρατηρείται μορφοποίηση αποβλίπτου είναι όταν το πάχος αυτού ξεπεράσει τα 0,3 nm. Καθώς το ΕΠΚ φαίνεται να αυξάνεται σε 0,6 nm με μεγαλύτερη ακτίνα κοπτικής ακμής 10 nm, το ΕΠΚ ίσως βρίσκεται σε αναλογία με την ακτίνα της κοπτικής ακμής.

Στην περίπτωση της κοπής αλουμινίου, το ΕΠΚ που παράγεται από κοπτική ακμή με ακτίνα 5 nm βρίσκεται περίπου στα ίδια επίπεδα με αυτό που παράγεται σε κοπή χαλκού. Ωστόσο, με κοπτική ακμή ακτίνας 10 nm, το ΕΠΚ αυξάνει σε 1,2 nm. Όπου για κοπή αλουμινίου οι αναλογίες των ΕΠΚ προς τις

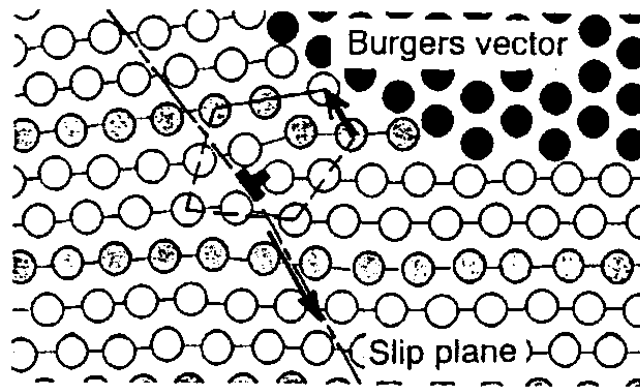
ακτίνες των κοπτικών ακμών παρατηρούνται να είναι έως δύο φορές ψηλότερα από τις κοπές χαλκού.

Η αλληλεπίδραση εργαλείου–τεμαχίου και η αντίσταση στην πλαστική παραμόρφωση του κατεργαζόμενου υλικού προτείνονται σαν πιθανοί παράγοντες που επηρεάζουν τη διαφορά στο ΕΠΚ διαφορετικών υλικών. Η Εικόνα 21 δείχνει την επιρροή της αλληλεπίδρασης εργαλείου–τεμαχίου στη μορφοποίηση αποβλίπτου σε κοπή χαλκού με πάχος αποβλίπτου 0,5 nm και την ακτίνα της κοπτικής ακμής στα 5 nm. Στην ΜΔ προσομοίωση της Εικόνας 24, χρησιμοποιείται το υποθετικό δυναμικό Morse, οι παράμετροι του οποίου μεταβάλλονται στο επίπεδο των 0,1 και 10 αντίστοιχα. Παρ'όλα αυτά, η αξιοσημείωτη διαφορά δεν μπορεί να παρατηρηθεί στη συμπεριφορά του αποβλίπτου και ΕΠΚ. Αυτά έχουν σαν αποτέλεσμα την πρόταση ότι το ΕΠΚ είναι αντιστρόφως ανάλογο στην αντίσταση του υλικού στην πλαστική παραμόρφωση.

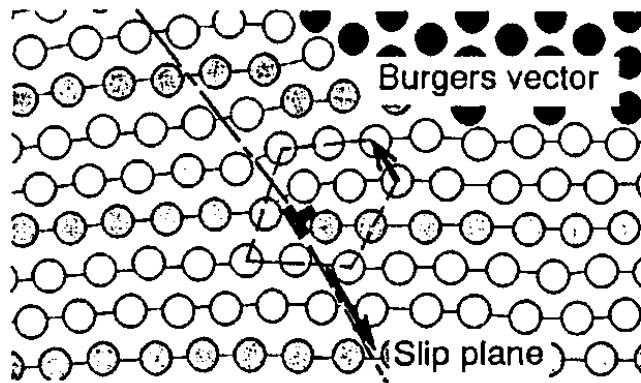
Χάρη στα παραπάνω συμπεράσματα, το ΕΠΚ στην κοπή με διαμάντι εκτιμάται ότι είναι από 0,5 έως 1 nm, το οποίο αντιστοιχεί στο 1/20 και 1/10 αντίστοιχα της κοπτικής ακμής ακτίνας 5 έως 10 nm, τιμές ρεαλιστικές για διαμάντι το οποίο είναι αρκετά αιχμηρό.



(a)  $t = 0$

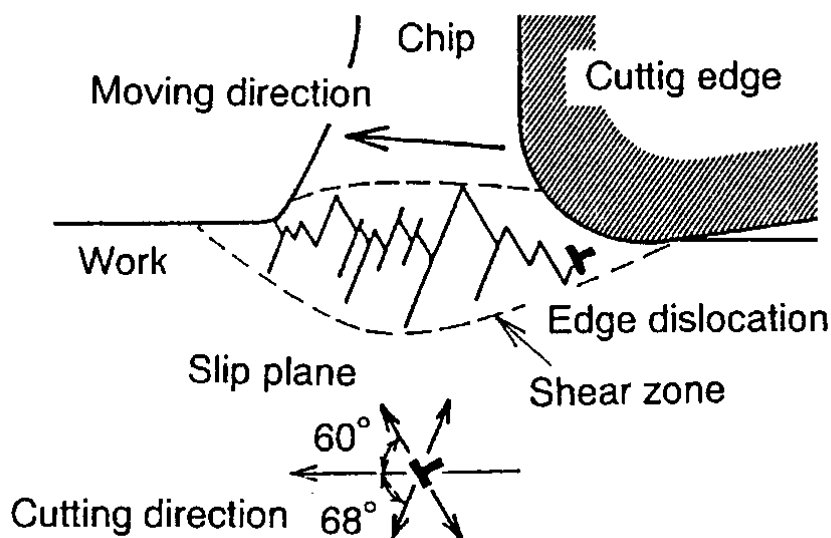


(b)  $t = 500 \text{ fs}$



(c)  $t = 4500 \text{ fs}$

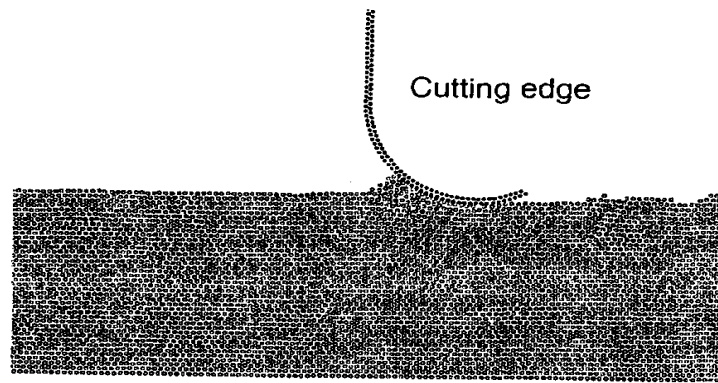
Εικόνα 18: Μορφοποίηση της ατέλειας με διάνυσμα Burgers  $a/2[011]$



Εικόνα 19: Σχηματική αναπαράσταση της κίνησης της ατέλειας προς τη ζώνη διάτμησης

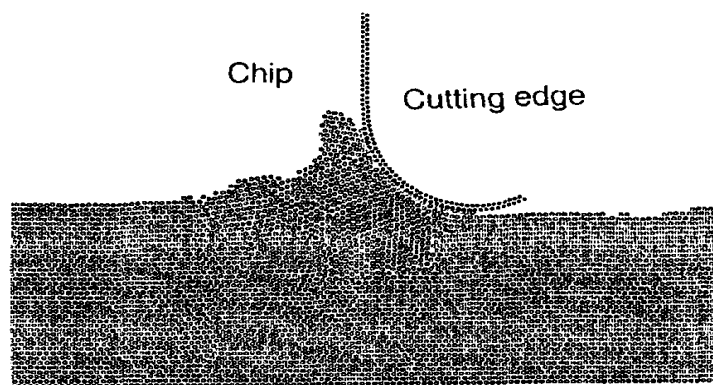
Η Εικόνα 22 δείχνει το απαραμόρφωτο στρώμα στο κατεργαζόμενο υλικό γύρω από την κοπτική ακμή σε κοπή χαλκού και αλουμινίου με πάχος αποβλίπτου 0.5 nm και ακτίνα κοπτικής ακμής 5 nm. Η μετατόπιση των ατόμων από την αρχική θέση έχει ενισχυθεί για καλύτερη κατανόηση. Στην περιοχή κάτω από το απόβλιπτο που πρόκειται να αφαιρεθεί, παρατηρείται πολύπλοκη ελαστική και πλαστική παραμόρφωση εξαιτίας στην οδόντωση ή/και τη στίλβωση της κοπτικής ακμής. Μερικές από τις ατέλειες που δημιουργούνται στη διεπιφάνειες εργαλείου–τεμαχίου κινούνται προς τα κάτω και εισχωρούν στο κατεργαζόμενο τεμάχιο. Κατά την επαναφορά από την ελαστική παραμόρφωση, παρατηρείται υπαναχώρηση της εισχωρημένης ατέλειας μετά από το πέρασμα της κοπτικής ακμής. Ωστόσο, υπολογίσιμη παραμόρφωση στο πλέγμα του υλικού αναγκαστικά θα παραμείνει στο επιφανειακό στρώμα της κατεργαζόμενης επιφάνειας. Το βάθος του παραμορφωμένου στρώματος μπορεί να αξιολογηθεί από τα αποτελέσματα της ΜΔ προσομοίωσης σαν το βάθος της περιοχής όπου παραμένουν τα διαταραγμένα άτομα και η τραχύτητα της επιφάνειας μπορεί επίσης να αξιολογηθεί από το ύψος της ανωμαλίας. Ο Πίνακας 4 δείχνει τις τραχύτητες και τα βάθη του παραμορφωμένου στρώματος και την εισχώρηση των ατελειών στις επιφάνειες του χαλκού και του αλουμινίου.

Από τα αποτελέσματα προκύπτει ότι η μέγιστη δυνατή τραχύτητα επιφάνειας που μπορεί να επιτευχθεί σε κοπή χαλκού αναμένεται να είναι περίπου 0.5 nm υπό την προϋπόθεση της αμεγάδιαστης κίνησης της κοπτικής ακμής. Ωστόσο, είναι δύσκολο να μειωθεί το βάθος του παραμορφωμένου στρώματος σε



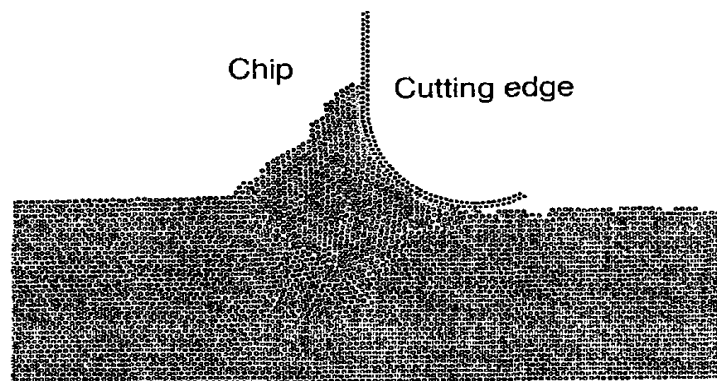
Workpiece

(a)  $t_n = 0.2 \text{ nm}$



Workpiece

(b)  $t_n = 0.3 \text{ nm}$



Workpiece

(c)  $t_n = 0.4 \text{ nm}$

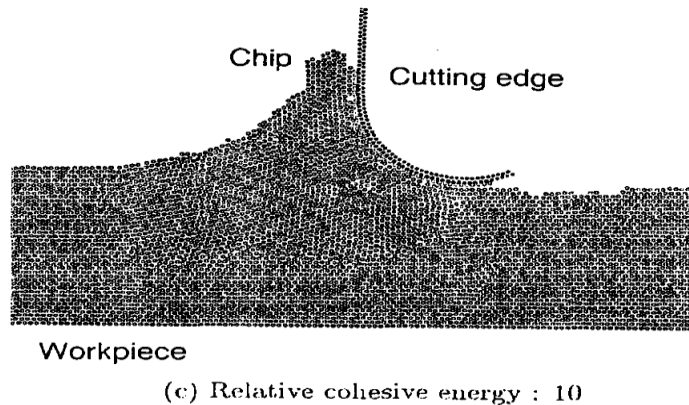
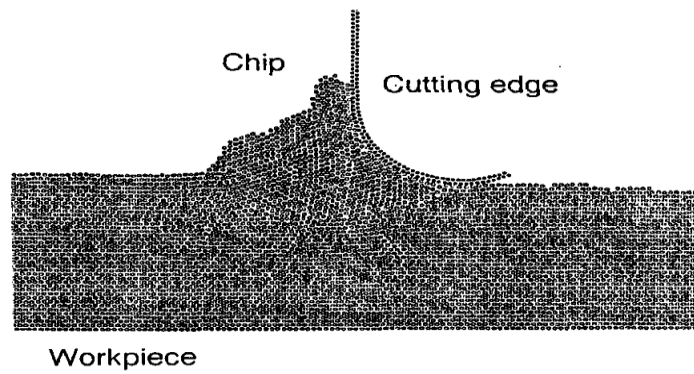
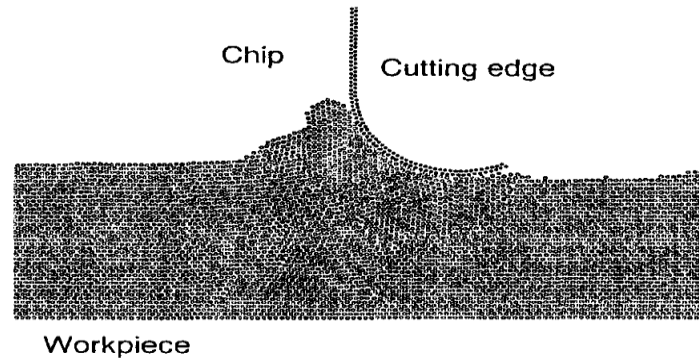
*Εικόνα 20: Μορφοποίηση αποβλίττου σε κοπή χαλκού*

*Ταχύτητα κοπής: 200 m/s*

*Ακτίνα κοπτικής ακμής: 5 nm*

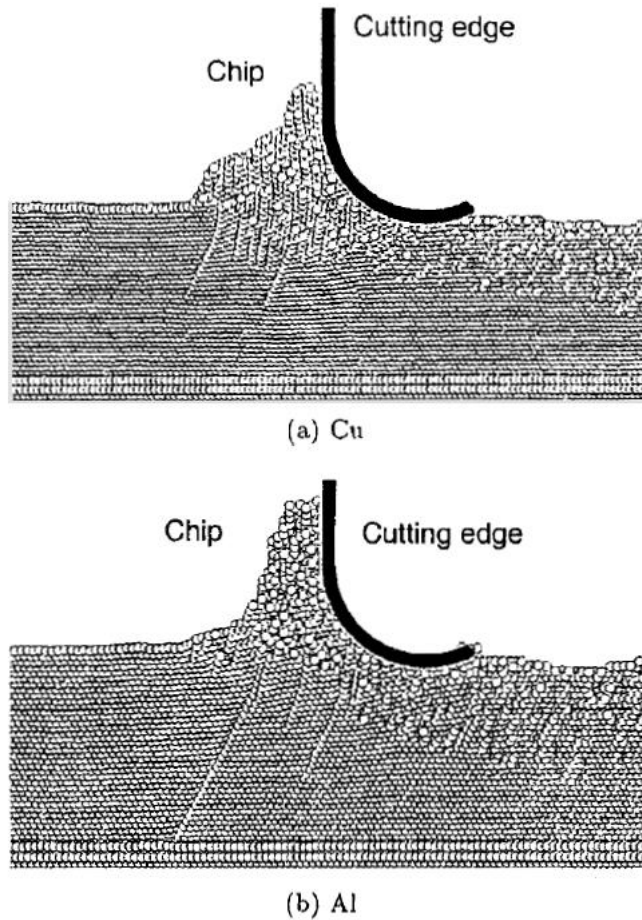
επίπεδο χαμηλότερο από 5 nm. Η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας του αλουμινίου είναι χειρότερη από του χαλκού πιθανότατα εξαιτίας στην ευκολότερη πλαστική παραμόρφωση και εντονότερη αλληλεπίδραση με το

διαμάντι. Συνεπώς, ενισχύεται το συμπέρασμα ότι το ΕΠΚ στην κοπή αλουμινίου είναι μεγαλύτερο από του χαλκού στις κοπές με μεγαλύτερη ακτίνα κοπής.



Εικόνα 21: Αποτελέσματα της αλληλεπίδρασης εργαλείου–τεμαχίου στη μορφοποίηση αποβλίπτου από χαλκό





Εικόνα 22: Τραχύτητα και παραμορφωμένο στρώμα της υπό κατεργασία επιφάνειας  
 Ταχύτητα κοπής: 200m/s  
 Ακτίνα κοπτικής ακμής: 5 nm  
 Πάχος αποβλίπτου: 0.5 nm

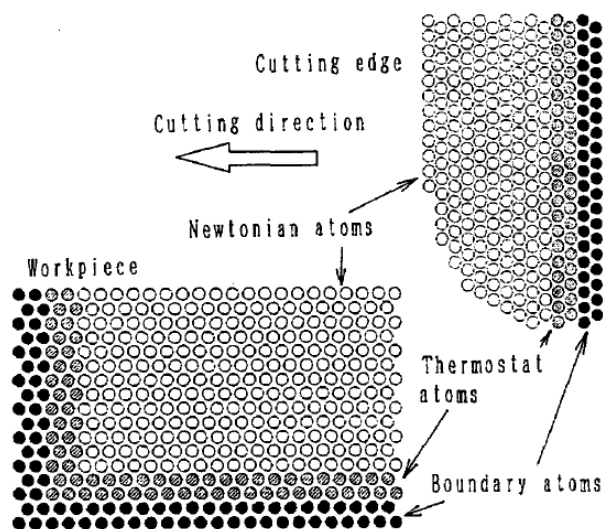
#### **4.3 Σύγκριση των αποτελεσμάτων Μοριακής Δυναμικής Ανάλυσης με Πειραματικά αποτελέσματα Νανο-κατεργασιών**

Όπως αναλύθηκε στην προηγούμενη παράγραφο, έχει αποδειχθεί ότι η νανο-μετρική κοπή μετάλλων είναι σκόπιμη. Το συμπέρασμα αυτό με τη σειρά του μας δημιουργεί την ανάγκη για περαιτέρω μελέτη της διαδικασίας αφαίρεσης υλικού και της λείανσης επιφάνειας από ατομιστική ή μοριακή οπτική γωνία, και όχι μόνο από πλευράς συμβατικής μηχανικής. Βέβαια ενώ οι τεχνικές υπολογιστικής προσομοίωσης έχουν βοηθήσει πολύ στην κατανόηση των κατεργασιών μικρο-κοπών με πάχη αποβλίπτου στη νανο-κλίμακα, είναι σημαντική η σύγκριση των αποτελεσμάτων τους με τις αναλύσεις συμβατικής μηχανικής και η κατανόηση της συσχέτισης των δύο.

Για τη ΜΔ προσομοίωση της μικρο-κοπής χρησιμοποιείται διδιάστατο δυναμικό Morse και εικάζουμε ότι οι διατομικές τάσεις που προκύπτουν από το δυναμικό υπάρχουν ανάμεσα σε κάθε ζεύγος ατόμων. Το μοντέλο αποτελείται από τα οριακά άτομα, τα Νευτώνια άτομα και τα θερμοστατικά όπως φαίνεται στην Εικόνα 23. Τα στατικά οριακά άτομα βρίσκονται στις άκαμπτες βάσεις του τεμαχίου και της κοπτικής ακμής, και η διατομική απόσταση δίνεται σαν παράμετρος της συνάρτησης του δυναμικού Morse και λαμβάνεται σαν ίση με το διάκενο μεταξύ των ατόμων του μοντέλου. Η αρχική ταχύτητα του κάθε ατόμου δίνεται στατιστικά μέσα από την κατανομή Maxwell-Boltzman, συγκεκριμένα για την αρχική συνολική θερμοκρασία. Με την πρόοδο του κοπτικού εργαλείου, η κίνηση όλων των Νευτώνιων ατόμων λύνεται αριθμητικά ακολουθώντας την εξίσωση της κίνησης που φαίνεται στην παρακάτω εξίσωση 4.1:

$$\frac{d(m \mathbf{v}_i)}{dt} = \frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = \mathbf{F}_i \quad \text{Εξίσωση 4.1}$$

Όπου  $m$  είναι η ατομική μάζα, και  $F_i$ ,  $v_i$ ,  $p_i$  αντιστοιχούν στη συνισταμένη δύναμη στο άτομο  $i$ , στην ταχύτητα και την ορμή του. Τα άτομα που βρίσκονται στα δύο πλησιέστερα επίπεδα των οριακών ατόμων, λειτουργούν σαν θερμοστατικά άτομα. Σε αυτό το επίπεδο, ο πρόσθετος όρος  $-a_r$ , προστίθεται στον όρο της δύναμης στην εξίσωση της κίνησης όπως εκφράζεται στην εξίσωση 4.2, όπου  $a$  είναι ο συντελεστής για τη σταθεροποίηση της μέσης θερμοκρασίας του θερμοστατικού στρώματος.



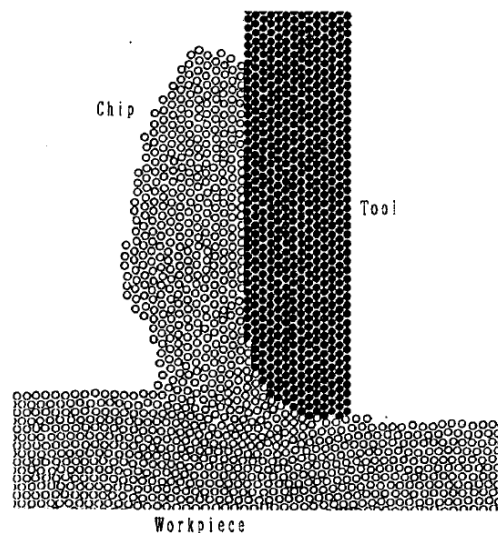
Εικόνα 23: Σχηματική αναπαράσταση του μοντέλου μικρο-κοπής με Μοριακή Δυναμική προσομοίωση

$$\frac{d(m \mathbf{v}_i)}{dt} = \frac{d \mathbf{p}_i}{dt} = \mathbf{F}_i - \alpha \mathbf{p}_i$$

Εξίσωση 4.2

Ο συντελεστής  $\alpha$  ορίζεται από την κατάσταση ότι η συνολική κινητική ενέργεια διατηρείται σταθερή για ένα συγκεκριμένο χρονικό βήμα στην προσομοίωση. Η Εικόνα 23 δείχνει ένα παράδειγμα ΜΔ προσομοίωσης για αφαίρεση αποβλίπτου. Τα αποτελέσματα που ελήφθησαν από την παρούσα ΜΔ προσομοίωση συμπίπτουν με αυτά που υπολογίστηκαν στη μοριακή στατική προσέγγιση όσο αφορά στην αφαίρεση αποβλίπτου και τις δυνάμεις κοπής για αντίστοιχες συνθήκες κοπής αλλά όχι όγκου και θερμοκρασίας. Οι παράμετροι για αυτές τις προσομοιώσεις παρατίθενται στον Πίνακα 4.

Στα [52], [53] περιγράφεται ορθογωνική τρισδιάστατη κοπή τεμαχίου χαλκού με και αιχμηρό κοπτικό εργαλείο από διαμάντι. Σε πείραμα κοπής χαλκού υψηλής αγωγιμότητας (OFHC-Cu) με σχετικά μεγαλύτερο πάχος αποβλίπτου, από 20 έως 440 nm οι κοπτικές δυνάμεις  $F_t$  και  $F_n$ , εφαπτομενική και κάθετη στην κατεργαζόμενη επιφάνεια αντίστοιχα μετρούνται με μετατροπέα ισχύος από χαλαζία. Οι κοπτικές δυνάμεις για πολύ μικρά πάχη αποβλίπτου εκτιμώνται με υπολογισμούς βασισμένους στο κλασικό μοντέλο διάτμησης του Krystof [54], επειδή το μέγεθός τους είναι πολύ μικρό για να μετρηθεί. Καθώς η περιοχή κοπής είναι σχετικά μικρή σε αυτό το πείραμα, η διατμητική τάση υποτίθεται ίση με τη διατμητική δύναμη του χαλκού. Οι παράμετροι που έχουν οριστεί για αυτά τα κοπτικά πειράματα παρατίθενται στον Πίνακα 5.



Εικόνα 24: Παράδειγμα ΜΔ προσομοίωσης για μικρο-κοπή χαλκού

Method	Molecular dynamics	Molecular statics
Material	2-D Morse potential material	2-D Morse potential quasistatic type material
Configuration	2-D orthogonal cutting	2-D orthogonal cutting
Cutting speed	20, 200 m/s	0 m/s
Uncut chip thickness	0.5, 1 nm	0.5, 1 nm
Tool nose shape	Flat	Flat
Tool edge radius	0.5, 2 nm	0.5 nm
Rake angle	0°	0°
Clearance angle	7°	7°
Width of cut	1 atomic layer	1 atomic layer
Bulk temperature	293 K	0 K

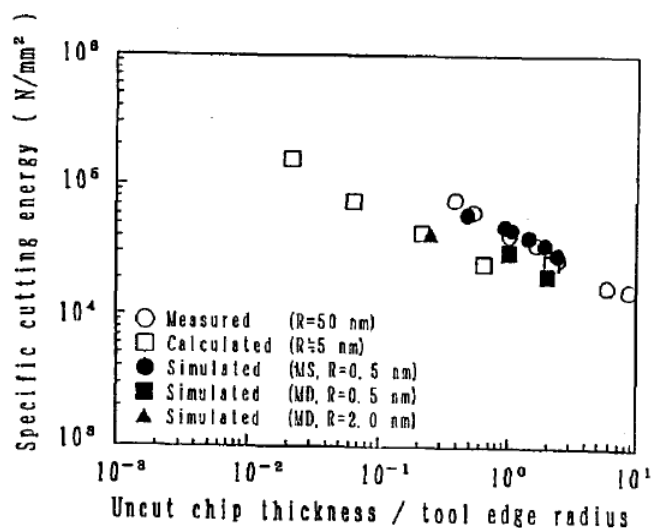
Πίνακας 4: Παράμετροι της υπολογιστικής προσομοίωσης

Machine tool	Experimental cutting machine at Osaka Univ.	PERL-1 at LLNL
Configuration	3-D orthogonal cutting	3-D orthogonal cutting
Material	Polycrystalline OFHC-Cu	Electroplated Cu
Uncut chip thickness	20-440 nm	1-100 nm
Tool noses shape	Chevron nosed	Chevron nosed
Tool edge radius	20 nm estimated	< 10 nm estimated
Rake angle	0°	0°
Clearance angle	7°	7°
Width of cut	6-19 μm	12 μm
Bulk temperature	293 K	293 K

Πίνακας 5: Παράμετροι των πειραμάτων κοπής

Η Εικόνα 24 παρουσιάζει τη μέτρηση και τον υπολογισμό της κοπτικής δύναμης ανά μονάδα πλάτους της κοπτικής ακμής σε συνάρτηση του ονομαστικού πάχους αποβλίπτου. Όλα τα σημεία δεδομένων φαίνονται να βρίσκονται σχεδόν σε ευθεία γραμμή. Μικρά κενά ή μετατοπίσεις μεταξύ διαφόρων σειρών δεδομένων που παρατηρούνται θεωρείται ότι οφείλονται στις διαφορετικές

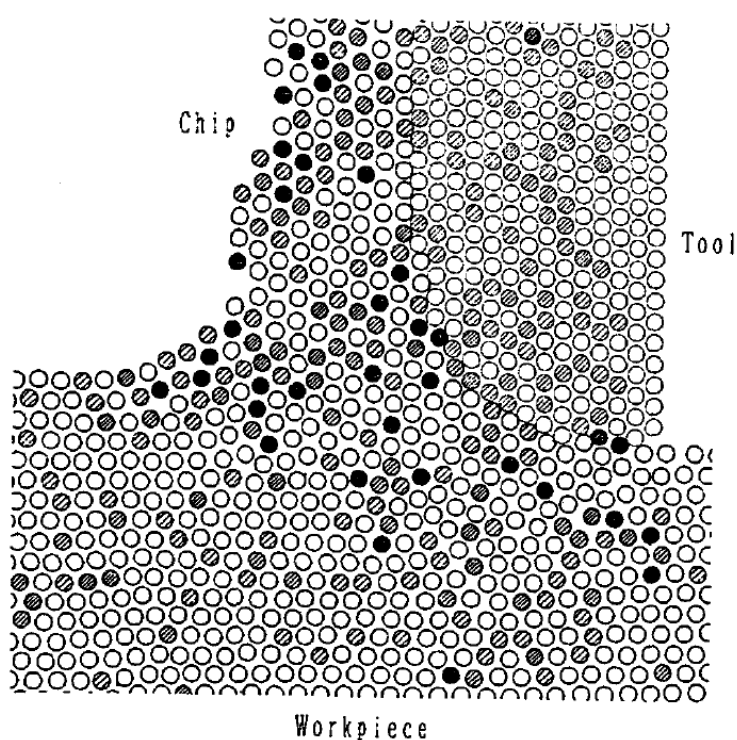
ακτίνες κοπτικών ακμών που χρησιμοποιήθηκαν ανά πείραμα. Όσο μεγαλύτερη η ακτίνα της κοπτικής ακμής, τόσο μεγαλύτερη η κοπτική δύναμη εξαιτίας στη στίλβωση της κοπτικής ακμής. Η Εικόνα 25 δείχνει την επίδραση κλιμακας στην ειδική κοπτική δύναμη σε συνάρτηση του ονομαστικού πάχους αποβλίπτου ομαλοποιημένου από την ακτίνα της κοπτικής ακμής. Επίσης, όλα τα σημεία δεδομένων βρίσκονται σχεδόν σε ευθεία γραμμή όπως παρατηρήθηκε από τους Stowers et al. [55]. Όταν το πάχος του αποβλίπτου είναι μικρότερο από περίπου το μισό της ακτίνας της κοπτικής ακμής, η ειδική ενέργεια υπερβαίνει τη θερμότητα της μορφοποίησης του χαλκού. Το αποτέλεσμα δείχνει ότι η υπολογίσιμα μεγάλη ποσότητα ενέργειας ίσως αναλωθεί για την παραμόρφωση του κατεργαζόμενου υλικού γύρω από την κοπτική ακμή για μικρότερο πάχος αποβλίπτου.



Εικόνα 25: Size effect στην ειδική κοπτική δύναμη σε συνάρτηση του ονομαστικού πάχους αποβλίπτου ομαλοποιημένου από την ακτίνα της κοπτικής ακμής

Η μέθοδος της ΜΔ μπορεί να προσομοιώσει αποτελεσματικά τη διάδοση της δύναμης ή την παραμόρφωση, επειδή η μετατόπιση ενός ατόμου μεταδίδεται απευθείας σαν αλλαγή στο δυατομικό δυναμικό στα γειτονικά άτομα. Για πιο ρεαλιστική προσομοίωση της διαδικασίας της μικρο-κοπής είναι χρήσιμο να ελέγξουμε και τις θερμικές συνθήκες. Καθώς η δυναμική ενέργεια μετατρέπεται σε κινητική κατά τη διάρκεια της ΜΔ προσομοίωσης, η παραγωγή θερμότητας σε σχέση με τη δόνηση του πλέγματος προκύπτει από την μετακίνηση των ατελειών και θεωρητικά προσομοιώνεται σωστά. Ωστόσο, ενώ στα ομοιοπολικά στερεά η θερμότητα διαδίδεται μέσω της δόνησης του πλέγματος, η θερμική αγωγιμότητα στα μέταλλα κυρίως εξαρτάται από την κινητικότητα των ηλεκτρονίων. Εν γένει, τα μέταλλα δείχνουν αξιοσημείωτα μεγαλύτερη θερμική αγωγιμότητα και συνεπώς μικρότερη θερμική κλιμάκωση από αυτή που υπολογίζεται κατά τη ΜΔ προσομοίωση στα πλαίσια της δόνησης του πλέγματος. Για αυτό το λόγο, για να αναλυθεί ένα θερμικό πεδίο στην μικρο-

κοπή, η κλιμάκωση στο θερμικό πεδίο πρέπει να προσαρμόζεται έτσι ώστε να συμπίπτει με αυτή που λαμβάνεται από τη θεωρία της συνεχούς θερμικής αγωγιμότητας. Στην Εικόνα 26, οι συμπαγείς κύκλοι δηλώνουν τα άτομα με θερμοκρασία υψηλότερη από 2000K, οι έντονα σκιασμένοι βρίσκονται ανάμεσα στους 1500-2000K, οι μέτρια σκιασμένοι 1000-1500K, οι ελαφρώς σκιασμένοι 500-1000K και οι ανοιχτοί κύκλοι έχουν θερμοκρασία χαμηλότερη από 500K.



Εικόνα 26: Κατανομή της κινητικής ενέργειας στο μοντέλο  
Όπως εκφράζεται από την ανάλογη θερμοκρασία  
Ταχύτητα κοπής: 200 m/s  
Πάχος αποβλίπτου: 0,5 nm  
Ακτίνα κοπτικής ακμής: 2,0 nm

Η μέθοδος ΜΔ προσομοίωσης αποδίδει λογικά αποτελέσματα συγκρινόμενα με αυτά που προκύπτουν από μια σειρά από πειράματα και μπορεί να αποτελέσει ένα πολύ χρήσιμο εργαλείο για την υπερνίκηση εμποδίων που προκύπτουν στις κατεργασίες μικρο-κοπών [56].

#### **4.4 Πρόβλεψη κοπτικών δυνάμεων κατά την κατεργασία πυριτίου με τη χρήση ‘hybrid molecular dynamic – finite element analysis’ μοντέλου**

Στην παρούσα παράγραφο θα παρουσιαστεί μια καινοτόμος μεθοδολογία παροχής ενός μοντέλου πεπερασμένων στοιχείων της κατεργασίας της μικροκοπής με σχετικές ιδότητες υλικών οι οποίες προέκυψαν από ένα μοντέλο ΜΔ προσομοίωσης για δοκιμή μονοδιάστατου εφελκυσμού σε πυρίτιο. Οι ιδιότητες των υλικών όπως η τάση διαρροής, το όριο αντοχής και το μέτρο ελαστικότητας λαμβάνονται από την καμπύλη τάσεων–παραμορφώσεων που παράγεται από μοντέλο ΜΔ και αυτόματα τροφοδοτεί το μοντέλο πεπερασμένων στοιχείων για την αξιολόγηση των κοπτικών δυνάμεων που απαιτούνται για την κατεργασία φύλλου πυριτίου χρησιμοποιώντας διάφορες κοπτικές παραμέτρους.

Προκειμένου να αποφύγουμε δαπανηρά και χρονοβόρα πειράματα απευθυνόμαστε σε μοντέλα βασισμένα στη φυσική και τη μηχανική όπως την ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων (Finite Element Analysis – FEA), τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών (Finite Difference Method – FDM) και τη μέθοδο της ΜΔ τεχνικής. Μέσα από τη χρήση των δύο πρώτων τεχνικών, έχει ερευνηθεί ένα μεγάλο φάσμα προβλημάτων που συναντώνται στις παραδοσιακές εφαρμογές κατεργασιών, όπως ο καθορισμός της κατανομής της θερμοκρασίας και των τάσεων στην περιοχή της κοπής, όπως επίσης οι παραμένουσες τάσεις και η μορφοποίηση αποβλίπτου [57]. Οι μέθοδοι των FEA και FDM χρησιμοποιούν προσεγγίσεις συνεχούς μηχανικής για να αντιμετωπίσουν προβλήματα κοπής μετάλλων. Σε αυτές τις τεχνικές το κατεργαζόμενο τεμάχιο αντιμετωπίζεται σε συνεχής δομή όπου τα μικρο-συστατικά του όπως η κρυσταλλική δομή και διατομικές αποστάσεις αγνοούνται. Εν αντιθέσει, στις ΜΔ προσομοιώσεις οι κόμβοι, οι οποίοι ορίζουν την ανάλυση του μοντέλου, εκλέγονται βάσει της ατομικής δομής του υλικού όπου το κενό ανάμεσα στους κόμβους συνδέεται με τις διατομικές αποστάσεις [58]. Σε αυτή την περίπτωση μπορούμε να λάβουμε αναλυτική πληροφόρηση σχετικά με τη συμπεριφορά των υλικών.

Η ρύθμιση των απαιτούμενων ιδιοτήτων των υλικών η οποία κρίνεται απαραίτητη για την εκτέλεση μοντέλων FEA με πειραματικά δεδομένα είναι μια μεγάλη πρόκληση. Όσο το μέγεθος του τεμαχίου υπό μελέτη μικραίνει, η πρόκληση μεγαλώνει εξαιτίας στην πολυπλοκότητα χειρισμού του τεμαχίου, στη μέτρηση των παραμέτρων για τις απαιτούμενες συνθήκες του μεγέθους του τεμαχίου και στην υψηλή κλάση τάσεων και παραμορφώσεων. Ωστόσο, προσομοιώσεις όπως της ΜΔ οι οποίες βασίζονται στα άτομα, μπορούν να αποτελέσουν ένα μέσο απόκτησης νέων δεδομένων που μπορούν να βοηθήσουν στη ρύθμιση των ιδιοτήτων των υλικών για χρήση σε ένα μοντέλο FEA.

Έχουν διεξαχθεί εκτεταμένες πειραματικές έρευνες πάνω στην κοπή των μετάλλων προκειμένου να αναπτυχθούν, να περιγραφούν και να βελτιστοποιηθούν οι συνθήκες κοπής και οι κατεργασίες. Επί του παρόντος, οι ιδιότητες των υλικών καθορίζονται συχνά από εφελκυστικές, διατμητικές και θλιπτικές δοκιμές. Αποτελεί πολύ μεγάλη πρόκληση να εκτελείς εφελκυστικές δοκιμές σε εξαιρετικά μικρά τεμάχια και να αντλείς χρήσιμα αποτελέσματα νανο-σκληρομέτρησης από αυτές. Απαιτούν διαδικασίες εξαιρετικά δύσκολες, χρονοβόρες και χρήση εξεζητημένου εξοπλισμού ο οποίος είναι δαπανηρός. Επιπλέον, η παραγωγή ρεαλιστικού δείγματος δοκιμίου κατάλληλου για δοκιμή εφελκυσμού ή δοκιμίου για δοκιμή νανο-σκληρομέτρησης είναι πολύ δύσκολη και απαιτεί ειδικές μεθόδους προετοιμασίας προκειμένου να τηρηθούν επακριβώς οι ιδιότητες και η δομή του υλικού.

Έχουν διεξαχθεί αρκετές μελέτες στη μικρό-κλίμακα με τη χρήση ηλεκτρονικού μικροσκοπίου σάρωσης όπως και μικροσκοπίων ατομικής δύναμης με σήραγγα σάρωσης [59], [60]. Δοκίμια από πυρίτιο προετοιμάστηκαν με τη μέθοδο της χαλκογραφίας στο κατάλληλο σχήμα για δοκιμή εφελκυσμού με μήκη που ποίκιλαν από 30 έως 300 μm, πλάτη 2-5 μm και 2 μm παχιά. Βρέθηκε μετέπειτα ότι η διαδικασία παραγωγής των δοκιμίων με χαλκογραφία επηρέαζε τις ιδιότητες των μετρήσεων. Ένα από τα μεγαλύτερα προβλήματα ήταν αυτό της ρύθμισης των μικρο-ενεργοποιητών που χρησιμοποιούνται για τη μετάδοση των μονοαξονικών τάσεων που απαιτούνται για τη μέτρηση. Σε αυτή την έρευνα χρησιμοποιήθηκε μικροσκόπιο ατομικής δύναμης για την παρατήρηση της επιμήκυνσης του δοκιμίου καθώς αυτό ελκόταν από μονοαξονικές τάσεις. Παρατηρήθηκε σημαντική διαφορά μεταξύ των πειραματικών μεγεθών σε μικρό-μετρα και των νανομετρικών μεγεθών που απαιτούνται για τον προσδιορισμό των ιδιοτήτων του υλικού στη νανο-μετρική κλίμακα, και αυτό παρακίνησε την έρευνα για εναλλακτικούς τρόπους διεύρυνσης της κατανόησης αυτών των κατεργασιών ενώ ταυτόχρονα μειώνεται ο κόπος που απαιτείται για τις πειραματικές μελέτες.

#### **4.4.1 Το μοντέλο της Μοριακής Δυναμικής Προσομοίωσης**

Το δυναμικό που χρησιμοποιήθηκε για να περιγράψει τις διατομικές σχέσεις μεταξύ των ατόμων πυριτίου είναι το Tersoff–Abell [61], [62] το οποίο προέρχεται από το Stillinger–Weber δυναμικό για πλέγματα από διαμάντι. Αυτό χρησιμοποιήθηκε για πρώτη φορά το 1985 για να περιγράψει τους δεσμούς του πυριτίου και να προβλέψει ένα πλέγμα από διαμάντι στο οποίο κάθε άτομο έχει τέσσερα γειτονικά σε τετραεδρικό σχηματισμό σαν την πιο σταθερή ατομική διαμόρφωση. Το δυναμικό Stillinger–Weber έγινε δημοφιλές χάρη στην απλότητα και την αρκετά ρεαλιστική περιγραφή του κρυσταλλικού πυριτίου [63].



Το δυναμικό Stillinger–Weber εκφράζεται ως εξής:

$$u(r_1, r_2, \dots, r_n) = \sum_i \sum_{j>i} u_2(r_i, r_j) + \sum_i \sum_{j>i} \sum_{k>j} u_3(r_i, r_j, r_k) \quad \text{Εξίσωση 4.3}$$

Όπου  $u_2$  και  $h$  υπολογίζονται χρησιμοποιώντας:

$$\begin{aligned} u_2(r_{ij}) &= A(Br_{ij}^{-p} - r_{ij}^{-q})e^{[(c/r_{ij})-r_c]} u_3(r_{ij}, r_{ik}, r_{jk}) \\ &= h(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{jik}) + h(r_{ji}, r_{jk}, \theta_{ijk}) + h(r_{ki}, r_{kj}, \theta_{ikj}) \end{aligned} \quad \text{Εξίσωση 4.4}$$

$$h(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{jik}) = \lambda e^{[(\gamma/r_{ij}-r_c)+(\gamma/r_{ik}-r_c)]} \{\cos(\theta_{jik} - \beta)\}^2. \quad \text{Εξίσωση 4.5}$$

Ενώ το  $\beta$  εκλέγεται για να διατηρήσει την τετραεδρική γωνία της κρυσταλλικής δομής του πυριτίου. Για  $\beta=109,47^\circ$ , το πλέγμα διαμαντιού είναι η καλύτερη ενεργητικά δομή. Βάσει αυτού, το δυναμικό Tersoff–Abell μπορεί διαμορφωθεί στην παρακάτω μορφή:

$$V = \sum_{i \neq j} \phi(r_{ij}) \quad \text{Εξίσωση 4.6}$$

όπου

$$\phi(r_{ij}) = R_c(r_{ij})[F_r(r_{ij}) + b_{ij}F_a(r_{ij})] \quad \text{Εξίσωση 4.7}$$

Το  $b_{ij}$  είναι η συνάρτηση της ακτίνας αποκοπής και οι γωνίες μεταξύ των ατομικών δεσμών μπορούν να υπολογιστούν χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις 4.10-4.12.  $F_r(r_{ij})$  &  $F_a(r_{ij})$  μπορούν να υπολογιστούν χρησιμοποιώντας:

$$F_r(r_{ij}) = f_1 e^{(-\lambda r_{ij})} F_a(r_{ij}) = -f_2 e^{(-\mu r_{ij})} \quad \text{Εξίσωση 4.8}$$

Το  $R_c(r_{ij})$ , που φαίνεται στην εξίσωση 4.9, μειώνει ομαλά την ατομική αλληλεπίδραση στο μηδέν όσο η ακτίνα πλησιάζει την ακτίνα αποκοπής:

$$R_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} \leq R_{ij}, \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos\left(\frac{r_{ij}-R_{ij}}{S_{ij}-R_{ij}} \pi\right), & R_{ij} \leq r_{ij} \leq S_{ij} \\ 0, & r_{ij} \geq S_{ij}, \end{cases} \quad \text{Εξίσωση 4.9}$$

$$b_{ij} = x_{ij}(1 + \beta_i^{n_i} \xi_{ij}^{n_i})^{-1(2n_i)}, \quad \text{Εξίσωση 4.10}$$

Εξίσωση 4.11

$$\xi_{ij} = \sum_{k \neq i,j} R_c(r_{ik})g(\theta_{ijk}),$$

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + \frac{c_i^2}{d_i^2} - \frac{c_i^2}{d_i^2 + (h_i - \cos \theta_{ijk})^2}. \quad \text{Εξίσωση 4.12}$$

Οι παράμετροι  $f_1$ ,  $f_2$ ,  $R$ ,  $S$ ,  $\lambda$ ,  $\mu$ ,  $\beta$ ,  $n$ ,  $c$ ,  $d$  και  $h$  είναι σταθερές που χρησιμοποιούνται στο ενεργειακό δυναμικό Tersoff–Abell για το πυρίτιο (Πίνακας 6).

MD model computational parameters [3]

Potential energy function	Tersoff–Abell potential
Tension test	Uniaxial
Simulation model	$2^{1/2}\mathbf{D}$
WP dimensions	$16r_0 \times 4r_0$
Total number of atoms	60–1000
Simulation speed	20–500 m/s
Crystal orientation	[0 0 1]
Load direction	[0 0 1]
Temperature	300 K
$f_1$	1830 eV
$f_2$	471 eV
$\mu$	$1.7322 \text{ \AA}^{-1}$
$\lambda$	$2.48 \text{ \AA}^{-1}$
$\beta$	$11 \times 10^{-6}$
$N$	0.787
$C$	$1 \times 10^5$
$D$	16.217
$H$	-0.598
$R$	$2.7 \text{ \AA}$
$S$	$3 \text{ \AA}$

Πίνακας 6: Υπολογιστικές παράμετροι του μοντέλου ΜΔ

#### Silicon material properties

Bond type	Covalent
Lattice structure	Diamond cubic
Lattice constant ( $r_0$ )	$5.43 \text{ \AA}$
Crystal orientation	[0 0 1]
Modulus of elasticity	171 GPa
Bulk modulus	100 GPa
Density	$2328 \text{ kg/m}^3$
Melting temperature	$1410^\circ\text{C}$
Thermal conductivity	$150 \text{ W/mK}$
Energy gap	1.06 eV
Specific surface energy	$0.393 \text{ J/m}^2$
Poisson's ratio	0.28
Specific surface energy	$0.393 \text{ J/m}^2$

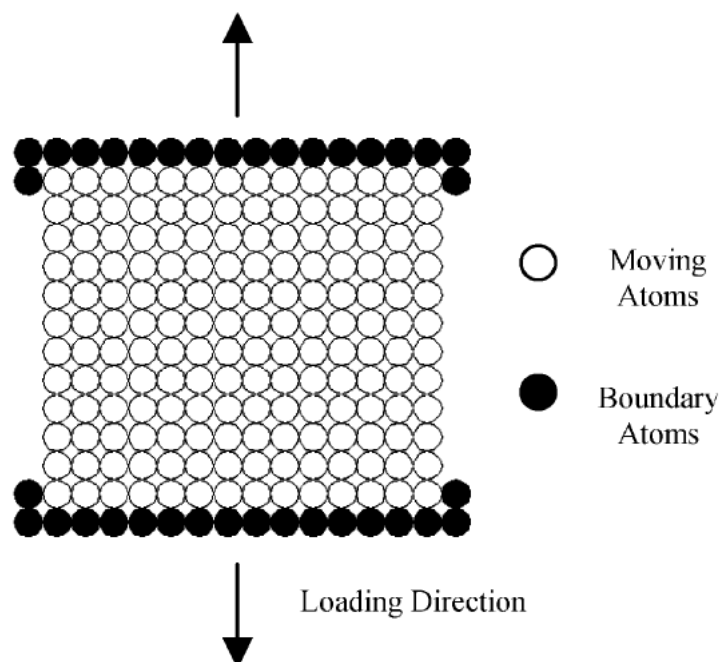
Πίνακας 7: Χαρακτηριστικές ιδιότητες του Πυριτίου

Σχηματικό διάγραμμα για ένα συμβατικό δοκίμιο για εφελκυσμό και το τμήμα μέτρησης που χρησιμοποιείται στις ΜΔ προσομοιώσεις για τεμάχια από διαφορετικά υλικά με διαφορετικές περιοχές μοντελοποίησης φαίνονται στην Εικόνα 27. Μερικές από τις ιδιότητες του πυριτίου και οι υπολογιστικές παράμετροι που χρησιμοποιήθηκαν στο ΜΔ μοντέλο υποδεικνύονται στους Πίνακες 6 και 7. Οι ΜΔ προσομοιώσεις διεξήχθησαν σε διαφορετικούς ρυθμούς

φόρτωσης (20-50m/s) για να ερευνηθεί η επίδραση του ρυθμού παραμόρφωσης στη συμπεριφορά του υλικού και τις μηχανικές ιδιότητες. Οι ατομικές κινήσεις στην περιοχή όπου τα άτομα κινούνται ελεύθερα αρχικά ορίζεται από την ενσωμάτωση των κλασσικών εξισώσεων κίνησης του Hamilton χρησιμοποιώντας μέθοδο Runge-Kutta τέταρτης τάξης. Τα συνοριακά άτομα 'κλειδώνουν' στη θέση που έχουν οριστεί και εξυπηρετούν στο να μειώνουν το φαινόμενο εμφάνισης ακμών και να διατηρούν τη συμμετρία του πλέγματος. Η ακτίνα αποκοπής  $r_c$  εκλέγεται έτσι ώστε η αναλογία του δυναμικού στο σημείο αποκοπής, προς αυτού στο ισοζύγιο, να είναι μικρότερη από 5%. Αυτό είναι απαραίτητο για να μειωθεί ο υπολογιστικός χρόνος που σχετίζεται με την αξιολόγηση των δυνάμεων που τείνουν στο μηδέν.

Το δοκίμιο που μοντελοποιείται έχει διαστάσεις που είναι συνάρτηση της σταθεράς του πλέγματος, για παράδειγμα  $100a \times 40a$ , όπου  $a$  είναι η σταθερά του πλέγματος. Ο συνολικός αριθμός των ατόμων που χρησιμοποιήθηκαν στις προσομοιώσεις ποικίλλει από 60 έως 1000 άτομα, ανάλογα τη δομή του κρυστάλλου. Οι ελεύθερες επιφάνειες προσομοιώνονται έτσι ώστε να μην έχουν εξωτερικές φορτίσεις ή περιορισμούς. Οι πάνω και κάτω πλευρές έχουν περιοριστεί από τα συνοριακά άτομα. Εφελκυστική τάση εφαρμόζεται κατά τη  $[0 \ 0 \ 1]$  διεύθυνση. Αρχικά υπολογίζεται η χαλάρωση του κρυσταλλικού πλέγματος και στη συνέχεια εφαρμόζεται το φορτίο. Οι προσομοιώσεις διεξάγονται έως ότου παρουσιαστεί διαχωρισμός. Καθώς το δοκίμιο μεγάλωνε, η επιμήκυνσή του είχε σαν αποτέλεσμα ένα διαταραγμένο λαιμό μειούμενης διαμέτρου. Βρέθηκε ότι η διαρύθμιση των ατόμων είχε ελαφρώς διαφορετική δομή από τη μία προσομοίωση στην επόμενη αλλά χωρίς να καταγράφεται κάποια προφανής αλλαγή στη συμπεριφορά του υλικού. Παρά τα πλεονεκτήματα της ΜΔ προσομοίωσης και του δυναμικού, υπάρχουν κάποιοι περιορισμοί που εμποδίζουν την ευρεία χρήση τους. Ο υπολογιστικός χρόνος περιορίζει τη χρήση του σε μικρά συστήματα και δυνάμεις που χρησιμοποιούν πολύ ψηλές ταχύτητες εκτέλεσης, περίπου 100-500 m/s ενώ ρεαλιστικές ταχύτητες εκτέλεσης είναι της τάξης των 2-10 m/s. Κρίνεται απαραίτητη η επαναλαμβανόμενη αξιολόγηση της συνάρτησης του ενεργειακού δυναμικού και των παραγώγων του καθ'όλη τη διάρκεια της προσομοίωσης. Η ΜΔ

προσομοίωση παρέχει αξιοσημείωτη ποσότητα πληροφοριών γύρω από το σύστημα, χωρίς ωστόσο να είναι όλη χρήσιμη για τον προσδιορισμό του



Εικόνα 27: Το δοκίμιο που χρησιμοποιήθηκε για τη ΜΔ προσομοίωση

ζητούμενου της έρευνας. Οι κινήσεις όλων των ατόμων που συμμετέχουν στην προσομοίωση υπολογίζονται σε κάθε χρονική στιγμή. Σε προσομοιώσεις εφελκυστικών δοκιμών, τα άτομα κινούνται έτσι ώστε να μπορούν να διατηρήσουν την κατάσταση ισορροπίας μετά από την οποία θα εκτελέσουν μερικές δονήσεις γύρω από αυτές τις θέσεις. Είναι οριακά χρήσιμη πληροφορία να ξέρουμε ή να αξιολογήσουμε όλες τις θέσεις που θα ισορροπήσει ένα άτομο. Το μεγαλύτερο ενδιαφέρον βρίσκεται στην τελική θέση τους και στην αντίστοιχη συνολική δυναμική ενέργεια του συστήματος. Επομένως, η αξιολόγηση των καταστάσεων ισορροπίας σε διάφορα στάδια της εφελκυστικής δοκιμής είναι το κύριο μέλημα.

Στην αρχή κάθε προσομοίωσης εφελκυστικής δοκιμής, οι εξισώσεις κίνησης του Hamilton για τα άτομα του πλέγματος ενσωματώνονται μέχρι το σύστημα να φτάσει στην ελάχιστη δυναμική ενέργεια. Μεταγενέστεροι κύκλοι που χρησιμοποιούν τεχνικές βελτιστοποίησης γενετικού αλγορίθμου (Genetic Algorithm–GA) εκτελούνται χρησιμοποιώντας θέσεις που βρέθηκαν προηγουμένως άτομα για να αξιολογήσουν την καινούρια κατάσταση ισορροπίας. Το κριτήριο αποκοπής για τη λήξη του κύκλου της βελτιστοποίησης

ορίζεται από ένα συντελεστή εγγύτητας λάθους ( $\Delta\phi_{\min}$ ), προγενέστερα προσδιορισμένου από το χρήστη, στην αρχή της προσομοίωσης για τη σύγκριση διαδοχικών βημάτων.

Για την ενίσχυση της απόδοσης της προτεινόμενης GA μεθόδου, μερικές προσαρμογές έπρεπε να λάβουν χώρα για να εγγυηθεί ότι το σύστημα θα συγκλίνει σε μια σωστά διαμορφωμένη κατάσταση ισορροπίας. Ένα από τα μεγαλύτερα προβλήματα των σύνθετων συστημάτων είναι η ύπαρξη πολλών τοπικών ελαχίστων που έχουν υψηλότερη δυναμική ενέργεια σε σχέση με το καθολικό ελάχιστο. Αυτός ήταν ο κύριος λόγος για την πρόταση μιας υποκειμενικής συνάρτησης για το πρόβλημα της βελτιστοποίησης, ώστε το σύστημα να ξεφύγει από τα τοπικά ελάχιστα και να συγκλίνει στο καθολικό. Αυτό επιτεύχθηκε χρησιμοποιώντας ένα βήμα Markov για κάθε άτομο του πλέγματος [64]. Το βήμα Markov είναι μια σειρά από μεταφραστικές κινήσεις για τα άτομα που επιτρέπει στο σύστημα να δεχτεί μια διαμόρφωση με σχετικά υψηλότερη δυναμική ενέργεια προς αναζήτηση του καθολικού ελαχίστου. Μια νέα θέση για κάθε άτομο προκύπτει τυχαία σε κάθε βήμα. Κάθε βήμα ή γίνεται αποδεκτό ή απορρίπτεται βασιζόμενοι στη συνάρτηση πιθανότητας ενός συντελεστή του Boltzmann που οδηγεί το σύστημα προς μια σταθερή διαμόρφωση. Η εντολή εκτέλεσης του βήματος Markov συνοψίζεται ως εξής:

$$H = K + U = \frac{1}{2} \sum Mv_i^2 + \sum_{i \neq j} \phi(r_{ij}), \quad \text{Εξίσωση 4.13}$$

$$M \frac{dv_i}{dt} = -\frac{\partial \phi}{\partial r_i} \quad \text{for } i = 1, 2, 3, \dots, N, \quad \text{Εξίσωση 4.14}$$

$$q_i^{\text{new}} = q_i^{\text{old}} + \xi_i \Delta q \quad \text{for } i = 1, 2, 3, \dots, N. \quad \text{Εξίσωση 4.15}$$

Κάθε βήμα Markov (K) ή γίνεται αποδεκτό ή απορρίπτεται ανάλογα με την αξία του κωνικού συντελεστή κατανομής του Boltzmann που περιγράφεται στην παρακάτω ανισότητα:

$$e^{(-\Delta\phi/RT)} \geq \xi_k. \quad \text{Εξίσωση 4.16}$$

Αυτή η εξίσωση εγγυάται ότι όλες οι κινήσεις που μικραίνουν τη δυναμική ενέργεια του συστήματος γίνονται αποδεκτές και επίσης εξασφαλίζει ότι υπάρχει η πιθανότητα το βήμα Markov να μετακινήσει το σύστημα σε περιοχές της επιφάνειας έξω από τα τοπικά ελάχιστα και επιτρέπουν στο σύστημα να συγκλίνει στο καθολικό ελάχιστο.

Η θερμοκρασία του δοκιμίου έχει επίσης μεγάλη επιρροή στη δύναμη και στην πλαστικότητα του υλικού. Η εξάρτηση του χρόνου και της θερμοκρασίας από

τις μηχανικές ιδιότητες των ελαστο-πλαστικών υλικών μπορούν να περιγραφούν από την εξίσωση του Maxwell, η οποία συνδέει την τάση με την παραμόρφωση ως εξής:

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{1}{G} \frac{d\sigma}{dt} + \frac{\sigma}{\eta} = \frac{1}{G} \left( \frac{d\sigma}{dt} + \frac{\sigma}{\tau} \right) \quad \text{Εξίσωση 4.17}$$

Αυτή η εξίσωση εξηγεί τη σύνδεση μεταξύ των μηχανικών ιδιοτήτων και του ρυθμού παραμόρφωσης. Αυτή η συμπεριφορά εξαρτάται κυρίως από τους δύο ρυθμούς, το ρυθμό παραμόρφωσης και το ρυθμό πλαστικής παραμόρφωσης όταν αυτός ορίζεται από τις παρακάτω σχέσεις:

$$\dot{\varepsilon} = \frac{d\varepsilon}{dt} \quad \text{και} \quad \frac{\sigma}{\eta}$$

Όταν  $\dot{\varepsilon} \ll \sigma/\eta$

Το υλικό συμπεριφέρεται σαν ένα ελαστικά εύθραυστο υλικό, και όταν

$$\dot{\varepsilon} \gg \sigma/\eta$$

συμπεριφέρεται σαν πλαστικό. Η εξάρτηση της θερμοκρασίας από τις μηχανικές ιδιότητες των ελαστο-πλαστικών υλικών που υπακούουν στην εξίσωση του Maxwell ορίζεται από τη σχέση του συντελεστή ιξώδους ή το χρόνο χαλάρωσης με τη θερμοκρασία. Ο μηχανισμός της πλαστικής παραμόρφωσης σχετίζεται με τη διαδικασία ομαδοποίησης των ατόμων. Ο ρυθμός της πλαστικής ροής ορίζεται από την πιθανότητα μιας τέτοιας ομαδοποίησης. Ο χρόνος χαλάρωσης είναι αντιστρόφως ανάλογος της πιθανότητας όπως φαίνεται παρακάτω:

$$\tau = \tau_0 e^{(U/k_B T)} \quad \text{Εξίσωση 4.18}$$

Στο τροποποιημένο πρόγραμμα ΜΔ προσομοίωσης κατά GA, η επίδραση της θερμοκρασίας του δοκιμίου στην προσομοίωση συσσωματώνεται μέσω της φόρμουλας της εξίσωσης της βελτιστοποίησης. Αυτό επιτυγχάνεται με την επιλογή της ταχύτητας του ατόμου του πλέγματος που επηρεάστηκε από το GA βήμα. Το εύρος ταχυτήτων βασίζεται σε κανονική κατανομή που συσχετίζεται με τη θερμοκρασία του δοκιμίου. Οι ταχύτητες των ατόμων ορίζονται από τις δυνάμεις που δρουν πάνω τους και συνδέονται με τη θερμοκρασία μέσω του θεωρήματος της ισοκατανομής αντίστοιχα:

$$\langle \frac{1}{2} M v_i^2 \rangle = \frac{3}{2} k_B T \quad \text{for } i \in \{1, 2, \dots, N\}$$

Εξίσωση 4.19

$$\eta v_i \rightarrow v_i.$$

Εξίσωση 4.20

Οι ταχύτητες κλιμακώνονται με μια προ-προσδιορισμένη παράμετρο  $\eta$  που σχετίζεται με την επιθυμητή θερμοκρασία έτσι ώστε όλο το σύστημα να έχει τη σωστή θερμοκρασία. Οι κανούριες ταχύτητες είτε γίνονται δεκτές είτε απορρίπτονται βάσει του ίδιου κωνικού συντελεστή κατανομής του Boltzmann. Οι ταχύτητες αυτές χρησιμοποιούνται στη συνέχεια για τον υπολογισμό των επιτρεπτών μετατοπίσεων των ατόμων που αντιστοιχούν στις διαφορετικές επιμηκύνσεις των δοκιμίων. Αυτά τα βήματα επαναλαμβάνονται έως ότου εντοπιστεί διαχωρισμός υλικού.

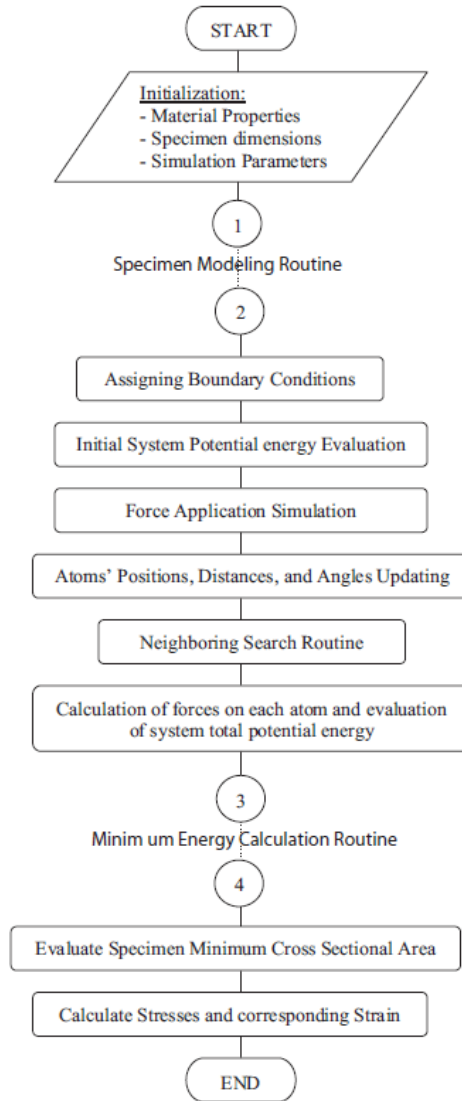
Η GA διαδικασία βελτιστοποίησης συγκλίνει τις συντεταγμένες των ατόμων του πλέγματος ταχέως προς την κατάσταση ισορροπίας για κάθε δοθείσα επέκταση του δοκιμίου χωρίς να χρειάζεται η ολοκλήρωση των διαφορικών εξισώσεων κίνησης του Hamilton. Υπορουτίνες ελέγχουν τις θέσεις των ατόμων και καθορίζουν ποια στρώματα έχουν επηρεαστεί από τα GA βήματα. Αυτές εξαλείφουν τον υπολογιστικό κόπο για αυτά τα άτομα που δεν επηρεάζονται από αυτό το βήμα. Εν γένει, ο υπολογιστικός χρόνος που απαιτείται για αυτή τη ΜΔ-GA διαδικασία είναι αρκετά λιγότερος από αυτόν που χρειάζεται μια συμβατική ΜΔ προσομοίωση.

Το μοντέλο ξεκινά με την προετοιμασία των παραμετρικών τιμών του δοκιμίου όπως το υλικό, την κρυσταλλική δομή και όλες τις συνδεδεμένες τιμές και φυσικές περιγραφικές σταθερές. Οι μεταβλητές της προσομοίωσης ορίζονται επίσης στο αρχικό στάδιο για να περιγράψουν τα επίπεδα φόρτισης και τη θερμοκρασία του περιβάλλοντος. Τότε οι γεωμετρικές παράμετροι του δοκιμίου εισάγονται για να ορίσουν το μέγεθος, τις διαστάσεις και τη δομή των εσωτερικών συστατικών σύμφωνα με τις ιδιότητες του υλικού και τις προδιεγραμμένες τιμές για την πειραματική δοκιμή εφελκυσμού. Η αρχική θέση και η αρίθμηση των ατόμων ορίζονται επίσης και αποθηκεύονται. Αυτές οι πληροφορίες στη συνέχεια χρησιμοποιούνται για τον προσδιορισμό των συνοριακών ατόμων και τον ορισμό των ατόμων που καθορίζουν την επιφάνεια του δοκιμίου. Ακολουθούν οι οριακές συνθήκες και ο προσδιορισμός των περιοχών που θα δεχθούν τη φόρτιση. Αρχικές αποστάσεις και γωνίες μεταξύ των ατόμων υπολογίζονται για να αξιολογηθούν οι αρχικές διατομικές δυνάμεις όπως και η αρχική δυναμική ενέργεια του συστήματος. Εδώ συμπεριλαμβάνεται και μια ρουτίνα αναζήτησης για να προσδιορισθεί το γειτονικό κάθε ατόμου σε αντιστοιχία με την προ-ορισμένη ακτίνα αποκοπής.

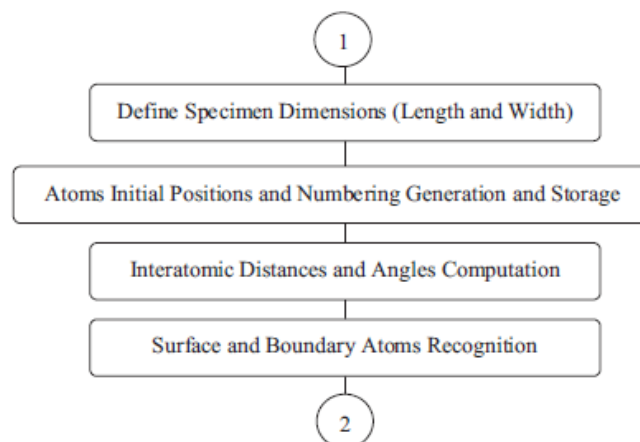


Το επόμενο βήμα είναι να προσδιορισθεί η μέγιστη ατομική ταχύτητα που κάθε άτομο μπορεί να πετύχει σύμφωνα με την απαιτούμενη θερμοκρασία της προσομοίωσης. Το σημαντικότερο βήμα είναι να εκτελεσθεί το βήμα του Markov με τυχαία παραγωγή θέσεων για όλα τα άτομα του μοντέλου σύμφωνα με τις προ-υπολογισμένες θέσεις και μέγιστες επιτρεπτές ταχύτητες για κάθε άτομο. Στη συνέχεια γίνεται εξακρίβωση του κάθε βήματος βασισμένη στο συντελεστή αξιολόγησης του Boltzmann. Μετά τρέχει η ρουτίνα για την ελάχιστη ενέργεια για όλα τα αποδεκτά βήματα για τον προσδιορισμό της θέσης του κάθε ατόμου για την κατάσταση ελάχιστης ενέργειας. Σε κάθε προσαυξημένη μετατόπιση μέχρι και την τελική εφελκυστική επέκταση, μια ρουτίνα διάστασης τρέχει για να αξιολογήσει την ελάχιστη διάμετρο του δοκιμίου που χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό της πραγματικής τάσης που ασκείται στο δοκίμιο. Τελειώνοντας, η τάση υπολογίζεται από την κάθε μία από τις προσαυξημένες μετατοπίσεις μετά από την εκτέλεση της βηματικής ρουτίνας του Markov.

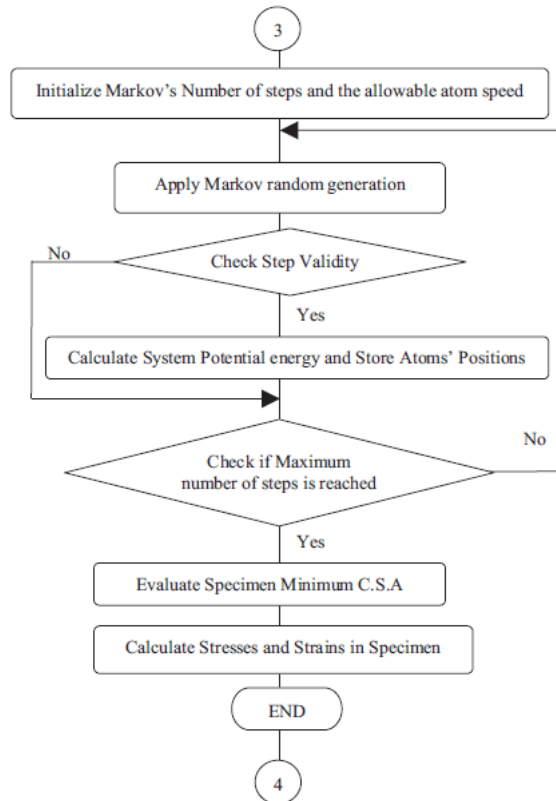
Η έξοδος του προγράμματος είναι της μορφής μιας καμπύλης σύνδεσης της τάσης με την παραμόρφωση που αντιπροσωπεύει τη συμπεριφορά του υλικού για αυτή την προσομοίωση πειραματικής δοκιμής στην ορισμένη ταχύτητα και θερμοκρασία. Στις Εικόνες 28-30 φαίνεται ένα διάγραμμα ροής που περιγράφει τη διαδικασία αυτής της τεχνικής.



Εικόνα 28: Διάγραμμα ροής του υπολογιστικού αλγορίθμου



Εικόνα 29: Ρουτίνα μοντελοποίησης του δοκιμίου



Εικόνα 30: Το βήμα του Markov για τη ρουτίνα υπολογισμού ελάχιστης ενέργειας

#### 4.4.2 Το μοντέλο των πεπερασμένων στοιχείων

Η ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων (FEA) είναι μια μέθοδος προσομοίωσης που χρησιμοποιείται για να παρέχει προβλέψεις για ένα ευρύ φάσμα προβλημάτων κατεργασιών. Χρησιμοποιεί την προσέγγιση συνεχούς μηχανικής για να αντιμετωπίσει προβλήματα μεταλλικών κοπών όπου το κατεργαζόμενο υλικό λαμβάνεται σαν ενιαία μάζα και οι επιρροές των μικρο-συστατικών όπως της κρυσταλλικής δομής, οι διατομικές αποστάσεις κ.λ.π. αμελούνται. Σε αυτή τη μέθοδο, οι αποστάσεις μεταξύ των κόμβων και το πλήθος τους, εκλέγονται βάσει του του επιπέδου ακρίβειας που επιζητάται από την προσομοίωση. Οι Wilson και Beck [66] χρησιμοποίησαν τη FEA προκειμένου να μοντελοποιήσουν δοκιμή κάμψης, και χρησιμοποίησαν πειραματικά μετρημένη αντοχή θραύσης για την επικύρωση των αποτελεσμάτων τους. Επί του παρόντος η FEA χρησιμοποιείται για προβλήματα μακρο-κλίμακας και η χρήση της μπορεί να επεκταθεί για τη μοντελοποίηση συγκεκριμένων δραστηριοτήτων της μικρο-κλίμακας αλλά δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη μοντελοποίηση νανομετρικών αντιδράσεων, καθώς η FEA εκλαμβάνει το αντικείμενο σαν ενιαία μάζα και συνεπώς δεν υπολογίζει τις ατέλειες των υλικών. Είναι αυτές οι τοπικές ατέλειες που

επιδρούν σημαντικά στη συμπεριφορά των υλικών που υπόκεινται στο μοντέλο προσομοίωσης.

Προσομοιώθηκε με FEA δοκιμή ορθογωνικής κοπής καθαρού πυριτίου για να διερευνηθεί η φύση της αφαίρεσης υλικού στις κατεργασίες υπερακριβείας (ultra-precision machining). Το μοντέλο αναπτύχθηκε χρησιμοποιώντας το λογισμικό ABAQUS/Explicit Finite element solver (v.6.4). Το τεμάχιο και το εργαλείο κατασκευάζονται σε συμπαγείς δομές, παραμορφώσιμες και διδιάστατες. Η κοπή εκτελείται χρησιμοποιώντας κοπτικό από διαμάντι σε συνεχή ταχύτητα 2.5 m/s με 5 και 10 μm βάθη κοπής. Η γωνία ελευθερίας και η γωνία αποβλήτου ορίζονται  $10^0$ . Η κοπή προσομοιώθηκε υπό ξηρές συνθήκες. Για αυτή την έρευνα η γραμμική ελαστική συμπεριφορά του υλικού του κατεργαζόμενου τεμαχίου καθώς επίσης και η μη-γραμμική πλαστική, εισάγονται στο FEA μοντέλο από τα αποτελέσματα που ελήφθησαν από το μοντέλο ΜΔ προσομοίωσης της δοκιμής εφελκυσμού (Πίνακας 8).

MD simulation results for Si		
$\sigma_{ut}$ (GPa)	$\epsilon_{max.stress}$	$E$ (GPa)
24	0.25	165

Πίνακας 8: Αποτελέσματα ΜΔ προσομοίωσης για Πυρίτιο

#### 4.4.2.1 Κριτήριο διαρροής και διατμητική αστοχία

Το κριτήριο διαρροής που χρησιμοποιήθηκε στην προσομοίωση FEA είναι το κριτήριο Von Mises με μορφοποιήσεις για το νομό σκληρότητας. Είναι κατάλληλο για υψηλούς ρυθμούς παραμόρφωσης σε αδιαβατικές δυναμικές προσομοιώσεις και πρέπει να χρησιμοποιηθεί για το μοντέλο του εγγραμμικού ελαστικού υλικού.

Η διάτμηση βασίζεται στην τιμή του αντίστοιχου ρυθμού πλαστικής παραμόρφωσης στα σημεία ολοκλήρωσης. Όταν ο δείκτης βλάβης υπερβεί την τιμή 1 κατά την προσομοίωση διάδοσης της ρωγμής, τότε εκτιμάται αστοχία. Ο δείκτης βλάβης ορίζεται ως εξής:

$$\omega = \sum \left( \frac{\Delta \bar{\epsilon}_{pl}}{\bar{\epsilon}_{pl}^f} \right) \quad \text{Εξίσωση 4.21}$$

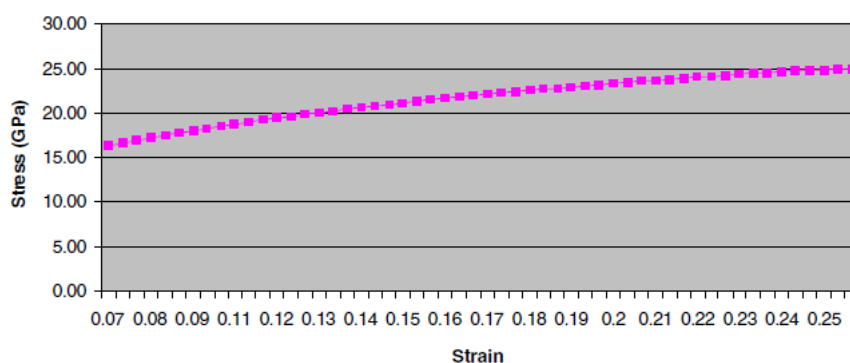
#### 4.4.2.2 Καμπύλη τάσης – παραμόρφωσης για πλαστική παραμόρφωση

Η καμπύλη τάσης–παραμόρφωσης που λάβαμε από το ΜΔ μοντέλο χωρίζεται σε δύο περιοχές, την ελαστική περιοχή που φτάνει μέχρι την τάση διαρροής και την πλαστική περιοχή που εκτείνεται από την τάση διαρροής έως την αστοχία. Τα σημεία της καμπύλης στην πλαστική περιοχή, όπως φαίνονται στην Εικόνα 31, καταχωρήθηκαν σε πίνακα και τροφοδότησαν το FEA μοντέλο για την περιγραφή της μη-γραμμικής πλαστικής συμπεριφοράς του πυριτίου. Ο Πίνακας 9 περιλαμβάνει τις τιμές της καμπύλης και ο Πίνακας 10 παρουσιάζει τις υπόλοιπες παραμέτρους της προσομοίωσης με FEA.

Σε υψηλούς ρυθμούς παραμόρφωσης, παρουσιάζονται κατάγματα σε μικρότερη παραμόρφωση ακόμα και αν η θερμοκρασία και η υδροστατική πίεση παραμένουν οι ίδιες. Στην Εικόνα 35 φαίνεται ένα τυπικό μοντέλο κοπής με FEA με βάθος κοπής 10  $\mu\text{m}$ . Τα τεμάχια που δεν ικανοποιούν κριτήριο κατάγματος με βάση την πλαστική παραμόρφωση και το ρυθμό παραμόρφωσης σε κάθε κόμβο διαγράφονται.

Ο μηχανισμός της αφαίρεσης υλικού μπορεί να περιγραφεί σαν θλίψη στην επιφάνεια του τεμαχίου ακολουθούμενη από μορφοποίηση αποβλίπτου και ροή αυτού στην επιφάνεια αποβλίπτου. Ο κύριος παράγοντας για τη ροή του αποβλίπτου και τη δημιουργία της ζώνης διάτμησης βρέθηκε να είναι η γωνία αποβλίπτου.

Το μοντέλο FEA παρέχει την απαραίτητη σύνδεση μεταξύ της ΜΔ προσομοίωσης και της πειραματικής έρευνας. Παρέχει το μέσο για την επαλήθευση και της ΜΔ και της FEA συγκρίνοντας της προβλεπόμενες δυνάμεις κοπής από την προσομοίωση (Εικόνες 33 και 34) με αυτές που λαμβάνονται πειραματικά στο εργαστήριο από κοπές υπερ-ακριβείας.



Εικόνα 31: Καμπύλη τάσης – παραμόρφωσης για πλαστική παραμόρφωση

Stress–strain values for plastic range

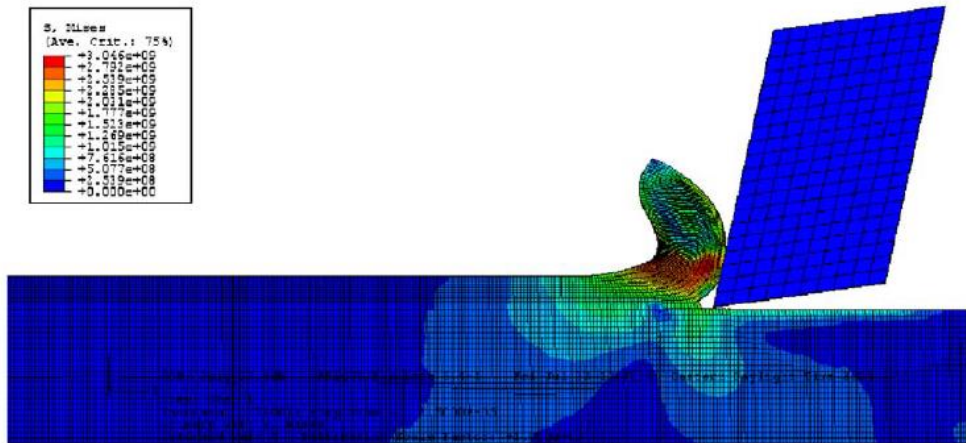
$\varepsilon$	$\sigma$ (GPa)
0.0735	16.21
0.0805	16.85
0.0875	17.44
0.0945	17.98
0.1015	18.49
0.1085	18.96
0.1155	19.40
0.1225	19.81
0.1295	20.21
0.1365	20.58
0.1435	20.93
0.1505	21.27
0.1575	21.59
0.1645	21.90
0.1715	22.20
0.1785	22.48
0.1855	22.75
0.1925	23.02
0.1995	23.27
0.21	23.63
0.217	23.87
0.224	24.09
0.231	24.31
0.238	24.52
0.245	24.73
0.249	24.84
0.25	24.87

Πίνακας 9: Τιμές της καμπύλης τάσης-παραμόρφωσης για την πλαστική περιοχή

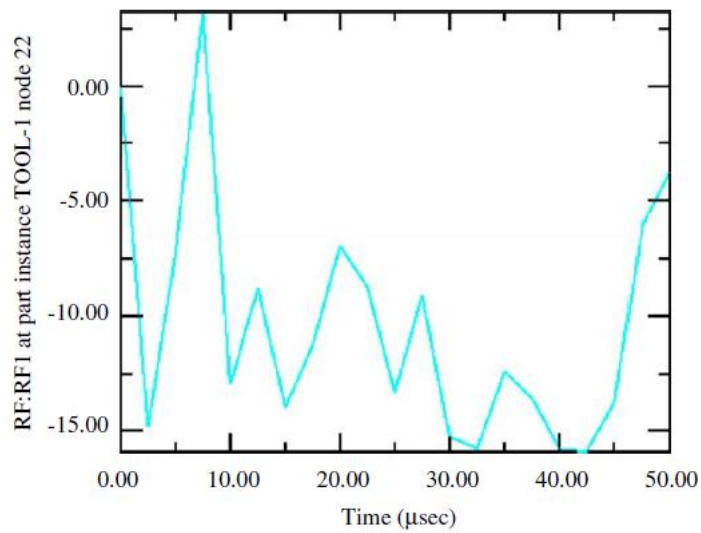
Parametric values used in FEA model

	Tool	Workpiece
Material	PCD diamond	Silicon
$\sigma_{ut}$	50 GPa	24 GPa
$E$	200 GPa	165 GPa
Density	3520 kg/m <sup>3</sup>	2329 kg/m <sup>3</sup>
$\varepsilon$ at max. stress	—	0.25
$\varepsilon_{fracture}$	—	0.25
Type of body	2D deformable shell	2D deformable shell
Elements type	Quadratic plain strain	Quadratic plain strain
Poison's ratio	0.3	0.28
Type of crack simulation	—	Element deletion
Tool/WP interface	Coulomb's law	Coulomb's law
Shear failure criteria	—	$\varepsilon_{pl} > \varepsilon_{pl}^f$
Fixation	$u_y$	$U_x, u_y$

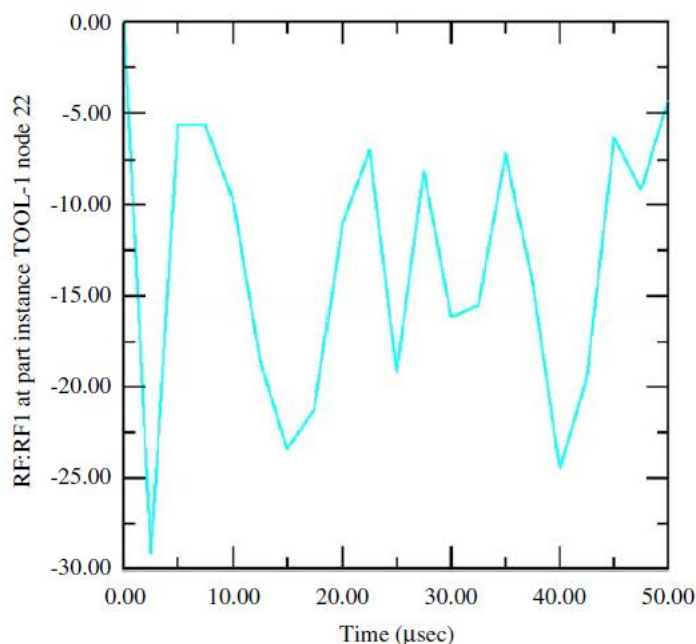
Πίνακας 10: Παράμετροι της προσομοίωσης με FEA



Εικόνα 32: Προσομοίωση μικρο-κοπής με τη μέθοδο FEA



Εικόνα 33: Κοπτική δύναμη με μοντέλο FEA για βάθος κοπής 5 μm

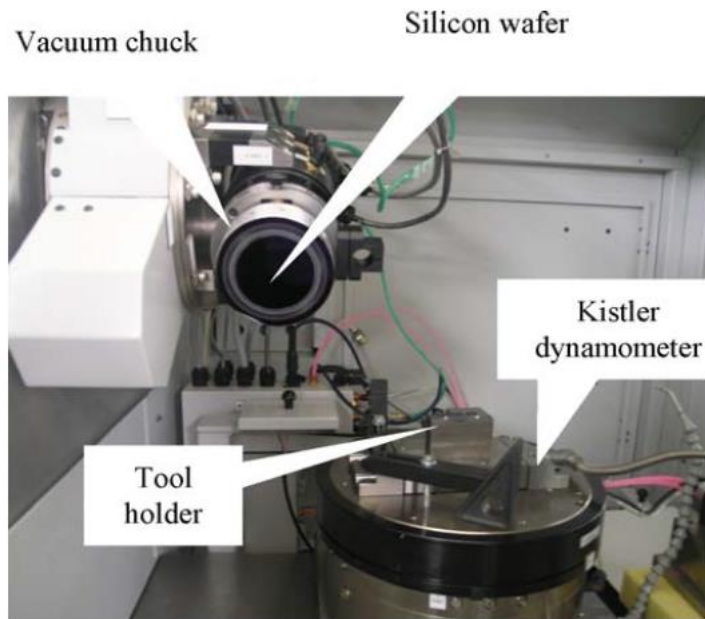


Εικόνα 34: Κοπτική δύναμη με μοντέλο FEA για βάθος κοπής 10 µm

#### 4.4.3 Πειραματική διάταξη

Η πειραματική επαλήθευση της ΜΔ προσομοίωσης και της μοντελοποίησης FEA διεξάχθη σε ένα κέντρο κατεργασιών υπερ-ακριβείας με νανομετρική ακρίβεια θέσης (1 nm), χρησιμοποιώντας κοπτικό εργαλείο από διαμάντι με ακτίνα κοπής 50 nm για βάθος κοπής 10 nm και ταχύτητα πρόωσης 5-10 µm/rev. Το κατεργαζόμενο υλικό ήταν το πυρίτιο και κατεργάστηκε στο [1 0 0] επίπεδο. Η διεύθυνση της τórνευσης ήταν από έξω προς το κέντρο με σταθερή ταχύτητα πρόωσης. Η ταχύτητα της κατεργασίας ήταν από 1.6 έως 16.6 m/s. Το τεμάχιο είχε διάμετρο 100 mm και συγκρατούταν από μια αρπάγη κενού και τα βάθη κοπής ξεκινούσαν από 1 µm και έφταναν έως τα 100 µm. Η Εικόνα 35 δείχνει τη διαρύθμιση ανάμεσα στο φύλλο πυριτίου και την αρπάγη κενού. Τα δεδομένα της μέτρησης των δυνάμεων λήφθηκαν από λογισμικό National Instruments LabVIEW.

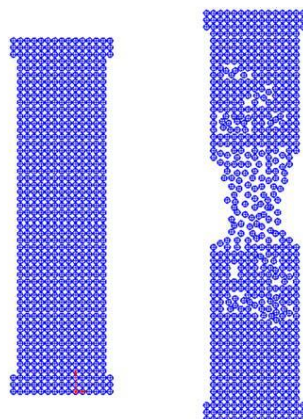




Εικόνα 35: Πειραματική διάταξη

#### 4.4.4 Αποτελέσματα

Στην Εικόνα 36 φαίνεται το φαινόμενο της δημιουργίας λαιμού για 500 άτομα σε παραμόρφωση 0.2. Για εύθραυστα υλικά, τα άτομα δεν μπορούν να συγκρατηθούν για μεγαλύτερα επίπεδα παραμόρφωσης και έτσι δημιουργούνται κενά από τα αρχικά κίονες στάδια της παραμόρφωσης οδηγώντας στην κατάσταση όπου η περιοχή του λαιμού διαχωρίζεται. Έτσι λοιπόν ορίζεται η αστοχία του υλικού.



Εικόνα 36: Αποτελέσματα ΜΔ προσομοίωσης για 500 άτομα

Τα αποτελέσματα της τροποποιημένης ΜΔ-GA μεθόδου προσομοίωσης φαίνονται σύμφωνα με αυτά των συμβατικών ΜΔ υπολογισμών. Ωστόσο, ο υπολογιστικός χρόνος για τη ΜΔ-GA ήταν αισθητά μικρότερος χρησιμοποιώντας ίδιες ρυθμίσεις επεξεργαστή και για τις ίδιες παραμέτρους εφελκυστικής δοκιμής.

Ο σκοπός αυτής της έρευνας ήταν να ενώσει το κενό μεταξύ των πληροφοριών νανο-κλίμακας που απαιτούνται για τη μοντελοποίηση της μικρο-κοπής και τη μηχανική συμπεριφορά των υλικών που παρατηρείται στις κατεργασίες κοπής στη μακρο-κλίμακα.

Συγκρίνοντας τα αποτελέσματα της προσομοίωσης με τα πειραματικά, καταλήγουμε ότι υπάρχει καλή συμφωνία μεταξύ των θεωρητικών τιμών που υπολογίστηκαν με το υβριδικό μοντέλο ΜΔ-GA και των πειραματικών τιμών που μετρήθηκαν στο εργαστήριο. Έτσι επαληθεύεται η προσέγγιση της προσομοίωσης που εκλέχτηκε και αποδεικνύεται η χρησιμότητα της προτεινόμενης τεχνικής για την πρόβλεψη των δυνάμεων κοπής κατεργασιών υπερ-ακριβείας στη μικρο-κλίμακα [67].

## Κεφάλαιο 5

### Συμπεράσματα

Η μαθηματική υλοποίηση της ΜΔ είναι ιδιαίτερα απλή και σαφής, αλλά η επίλυση ενός συστήματος με τη μέθοδο ΜΔ συνεπάγεται μεγάλο υπολογιστικό κόστος. Η διαθεσιμότητα γρήγορων και όχι τόσο ακριβών υπολογιστών με σημαντικές χωρητικότητες μνήμης δίνει στους ερευνητές τη δυνατότητα, να εξερευνήσουν αυτά τα σύνθετα προβλήματα, χωρίς τη βοήθεια πειραμάτων. Η διαρκής ανάπτυξη όλο και πιο ρεαλιστικών δυναμικών για την αναπαράσταση των μετάλλων, από τα μέταλλα κυβικής δομής μέχρι τα μέταλλα εξαγωνικής δομής, τα ομοιοπολικά μέταλλα, όπως το διαμάντι και το πυρίτιο, τα μερικώς ιοντικά/ομοιοπολικά μέταλλα, όπως το καρβίδιο του πυριτίου, και τα άμορφα μέταλλα όπως το γυαλί, επιτρέπουν την επέκταση της προσέγγισης σε ένα μεγάλο εύρος υλικών. Ξεκινώντας από ένα απλό ατομικό μοντέλο, είναι σημαντικό το πώς μπορεί να υπολογιστεί αριθμητικά η συμπεριφορά του μοντέλου, ώστε να εξεταστεί ένα φαινόμενο τόσο σύνθετο, όσο η κατεργασία.

Βασικό σημείο για την επιτυχία αυτής προσέγγισης είναι η ενσωμάτωση μιας διατομικής συνάρτησης δυναμικής ενέργειας, η οποία αντιπροσωπεύει με ακρίβεια το χημικό δεσμό. Οι διατομικές δυνάμεις δεν είναι απλές, λόγω το ότι το άτομο δεν είναι ένα στοιχειώδες σωματίδιο αλλά ένα σύνθετο σώμα, το οποίο αποτελείται από τον πυρήνα και τα ηλεκτρόνια, τα οποία πρέπει να αντιμετωπισθούν σύμφωνα με την κβαντική μηχανική. Στην περίπτωση των μετάλλων, τα ηλεκτρόνια των μετάλλων μπορούν να χωριστούν σε δύο τύπους:

- τα ηλεκτρόνια του πυρήνα, τα οποία είναι ισχυρά δεμένα στο άτομο και
- τα ηλεκτρόνια αγωγής, τα οποία είναι χαλαρά συνδεδεμένα και είναι υπεύθυνα για τα περισσότερα χαρακτηριστικά της κατάστασης των μετάλλων.

Κατά συνέπεια, οποιοδήποτε μοντέλο διατομικών δυναμικών ή δυνάμεων πρέπει να αντιμετωπίσει το σύνθετο πρόβλημα των πολλών αλληλεπιδράσεων. Την ίδια στιγμή, οι περιορισμοί στην υπολογιστική ταχύτητα ευνοούν τη χρήση απλών δυναμικών ζεύγους, τα οποία αναπαριστούν τα απλά μέταλλα με λογική ακρίβεια. Αν συμπεριληφθεί στον υπολογισμό της δυναμικής ενέργειας των ατόμων του συστήματος και η θερμοκρασία του σώματος, τότε η ΜΔ δύναται να επεξεργαστεί το συνδυασμένο θερμομηχανικό πρόβλημα.

Η φυσική κατανόηση των κατεργασιών μικρο-κοπής είναι εξαιρετικής σημασίας για την ανάπτυξη και τη βελτίωση της τεχνολογίας κοπής μετάλλων υπερ-ακρίβειας στο μέλλον. Ωστόσο, αναπόφευκτα εγείρονται ορισμένες δυσκολίες στην παρατήρηση και τον εντοπισμό των μικρο-φαινομένων στην κατεργασία. Για να ξεπεραστούν αυτές οι δυσκολίες η προσέγγιση της ΜΔ μπορεί να

αποδειχθεί ένα πολύ χρήσιμο εργαλείο όπου εκλέγοντας το κατάλληλο ενεργειακό δυναμικό και τη θερμική φόρτιση του πλέγματος του μοντέλου για το κατεργαζόμενο τεμάχιο και το κοπτικό εργαλείο, η ΜΔ προσομοίωση της διαδικασίας αφαίρεσης αποβλίπτου και των κοπτικών δυνάμεων δίνει λογικά συμπεράσματα σε σύγκριση με αυτά που λαμβάνονται από πειράματα κοπής.

## Βιβλιογραφία

1. Chryssolouris, G., (2006), "*Manufacturing Systems: Theory and Practice, 2nd Edition*", Springer, New York.
2. Meyer, M. and Pontikis, V., (1991), "*Computer Simulation in Materials Science*", NATO ASI series, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, the Netherlands.
3. Allen, M. P. and Tildesley, D. J., (1993), "*Computer Simulation in Chemical Physics*", NATO ASI series, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, the Netherlands.
4. Kirchnor, H., O., Kubin, L P. and Pontikis, V., (1996), "*Computer Simulation in Materials Science*", NATO ASI series, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, the Netherlands.
5. Feynman, R. P., Leighton, R. B. and Sands, M., (1964), "*Feynman Lectures on Physics*", Addison-Wesley.
6. Adler, B. J. and Wainwright, T. E., (1957), "*Phase Transition for a Hard Sphere System*", Journal of Chemical Physics.
7. Adler, B. J. and Wainwright, T. E., (1959), "*Studies in Molecular Dynamics. General Method*", Journal of Chemical Physics.
8. Verlet L., (1967), "*Computer 'experiments' on classical fluids*", Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules, Physics Review.
9. Hannon L., Lee G.C., Clementi E., (1986), '*J. Sci. Computing 1*'.
10. Karplus M., McCammon J.A., (1986), *The Molecular Dynamics of Proteins*.
11. Hansen J. P., McDonald I.R., (1986), "*Theory of simple liquids*", 2nd Edition, Academic.

12. Ashcroft N.W, Mermin N.D, (1976), "*Solid state physics*", Brooks Cole.
13. Allen M. P. , Tildesley D. J., (1987), "*Computer simulation of liquids*", Oxford.
14. Berendsen H. J. C., Van Gunsteren W. F., (1986), "*Molecular dynamics simulation of statistical-mechanical systems*", North-Holland.
15. Frenkel D., Smit B., (1996), "*Understanding Molecular Simulation: from algorithms to applications*", Academic Press: San Diego.
16. R. W. Hockney, J. W. Eastwood, (1988), "*Computer Simulation Using Particles*", Adam Hilger, New York.
17. Barnes J. E., Hut P., (1986), Nature 324.
18. Greengard L., Rokhlin V., Comp. J., (1987), Phys. 73.
19. Hockney R. W., Goel S. P., Eastwood J. W. , Comp. J., (1974), Phys. 14.
20. <http://www.charmm.org>
21. <http://www.igc.ethz.ch/GROMOS/index>
22. <http://ambermd.org>
23. <http://www.gromacs.org>
24. <http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd>
25. Mastny E. A., De Pablo J. J., Chem. J., (2007).
26. Fox G. C., Johnson M. A., Lyzenga G. A., Otto S. W., Salmon J. K., and Walker D. W., (1988), "*Solving Problems on Concurrent Processors: Volume 1*", Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ.
27. Schreiber H., Steinhauser O. and Schuster P., (1992), "*Parallel Computing 18*".
28. Lewis J. G., Van de Geijn R. A., (1993), "*Distributed memory matrix-vector multiplication and conjugate gradient algorithms*". In Proc. Supercomputing.

29. Tamayo P., Giles R., (1992), "*A parallel scalable approach to short-range molecular dynamics on the CM-5*". In Proc. Scalable High Performance Computing Conference-92.
30. Brown D., Clarke J. H. R., Okuda M., Yamazaki T., (1993). "*A domain decomposition parallelization strategy for molecular dynamics simulations on distributed memory machines*".
31. Haile J. M., (1992), "*Molecular dynamics simulation*", Wiley.
32. Von Allmen, M., (1987), "*Laser-beam Interaction with Materials*", Springer-Verlag, Germany.
33. Σεραφετινίδης, Α., (1985), "Εισαγωγή στην οπτοηλεκτρονική", ΟΕΔΒ, Αθήνα.
34. Shen, B., Izquierdo, R., Meunier, M., (1994), "*Laser fabrication of three-dimensional microstructures, cavities and columns*". SPIE 2045.
35. Lorazo, P., Lewis, L.J., Meunier, M., (2000), "*Picosecond pulse laser ablation of silicon: a molecular dynamics study*". Appl. Surf. Sci. 168.
36. Bonseo, J., Baudach, S., Krüger, J., Lenzner, M., Wrobel, J.M., Kautek, W., (2000), "*Femtosecond pulse laser machining of semiconducting materials*". In: Conference Digest. "Conference on Laser and Electro-Optics Europe", Piscataway, NJ, USA.
37. Kaspar, J., Luft, A., (1997), "*Electron microscopic investigation of structural changes in single crystalline silicon induced by short pulse laser drilling*". In: Proceedings of the Micro Materials Conference, Dresden.
38. Lenk, A., (1996), "*Dissertation Komplexe Erfassung der Energie- und Teilchenströme bei der Laserpulse-Anblation von Aluminium*". Department of mathematics and natural sciences, Technical University Dresden.
39. Shimada, S., Ikawa, N., Tanaka, H., Ohmori, G., and Uchikoshi, J., (1996), Feasibility Study on Ultimate Accuracy in Micro Cutting Using Molecular Dynamics Simulation.

40. Tansel, I., Rodriguez, O., Trujillo, M., Paz, E., and Li, W., (1998), Micro-end-milling. Wear and Breakage, *International Journal of Machine Tools & Manufacture*.
41. Bao, W.Y. and Tansel, I.N., (2000), Modeling Micro-end-milling Operations. Part II: Tool Run-out, *International Journal of Machine Tools and Manufacture*.
42. Fang, F.Z., (2002), Cutting Edge Effect in Micromachining, *Presentation to the Cutting Committee Meeting (Part II) in 52nd CIRP General Assembly, Spain*.
43. Fang, F.Z., (2002), Cutting Edge Effect in Micromachining, *Presentation to the Cutting Committee Meeting (Part II) in 52nd CIRP General Assembly, Spain*.
44. Inasaki, I. Toenshoff, H.K., Howes, T.D., (1993), Abrasive Machining in the Future, *Annals of the CIRP*.
45. Toenshoff H.K., Peters, J., Inasaki, T., (1992), Modelling and Simulation of Grinding Processes.
46. Matsuo, T., Toyoura, S., Oshima, E., Ohbuchi, Y., (1989), Effect of Grain Shape on Cutting Force in Superabrasive Single-Grit Tests. *Annals of the CIRP*.
47. Ikawa, N., Shimada, S., Tanaka, H., Ohmori, G., (1991), An Atomistic Analysis of Nanometric Chip Removal as Affected by Tool-Work Interaction in Diamond Turning, *Annals of the CIRP*.
48. Inamura, T., Suzuki, H., Takazawa, N., (1990), Cutting Experiments in a Computer Using Atomic Model of a Copper Crystal and a Diamond Tool, *Journal of the JSPE*.
49. Stowers, I. F., (1990), Molecular Dynamics Modeling Applied to Indentation and Metal Cutting. Informal Video Presentation at CIRP Meeting, Berlin.
50. Stowers, I. F., Belak, J. F., Lucca, D.A., Komanduri, R., Moriwaki, T., Okuda, K., Ikawa, M., Shimada, S., Tanaka, H., Dow, T. A., Drescher, J.D., (1991), Molecular Dynamics Simulation of the Chip Forming



Process in Single Crystal Copper and Comparison with Experimental Data, Proc. The ASPE Annual Meeting.

51. Shimada, S., Ikawa,N., Ohmori,G., Tanaka,H., Uchikoshi ,J., (1992), Molecular Dynamics Analysis as Compared with Experimental Results of Micromachining.
52. Ikawa, N., Stiniada.S., Donaldson.R.R., Syn,C.K.,Taylor,J.S., Yoshinaga.H., (1987), Minimum Thickness of Cut in Micromachining – Chip Morphology in Nanometric Cutting.
53. Litawa, N., Shimada.S., Tanaka H., OhmGri.G., (1991), An Atomistic Analysis of Nanometric Chip Removal as Affected by Tool-work Interaction in Diamond Turning.
54. Krystof, J., (1939), Technologische Mecnanik der Zerspannung.
55. Sxwers, I. F., (1990), Molecular Dynamics Modeling applied to Indentation and Metal Cutting., Berlin.
56. Shoichi Shimada, Naoya Ikawa, Giichi Ohmori, Hiroaki Tanaka, Unichi Uchikoshi, (1992), Molecular Dynamics Analysis as Compared with Experimental Results of Micromachining.
57. X. Li, E. Kopalinsky, P. Oxley, (1995), A numerical method for determining temperature distributions in machining with coolant.
58. R. Komanduri, L. Raff, (2001), A review on the molecular dynamics simulation of machining at the atomic scale.
59. T. Tsuchiya, O. Tabata, J. Sakata, Y. Tage, (1998), Specimen size effect on tensile strength of surface-micromachined polycrystalline silicon thin films.
60. Yi T., Kim C., (1999), Microscale material testing: etchant effect on the tensile strength, in: Proceedings of the International Conference on Solid-state Sensors and Actuators, Sendai, Japan.
61. Tersoff J., (1988), New empirical approach for the structure and energy of covalent systems.

62. Tersoff J., (1989), Modeling solid-state chemistry: interatomic potentials for multicomponent systems.
63. Stillinger F.H., Weber T.A., (1985), Computer simulation of local order in condensed phases of silicon.
64. Heermann D.W., (1986) Computer Simulation Methods in Theoretical Physics, Berlin.
65. Heermann W., Nielaba P., Rovere M., (1990), Hybrid molecular dynamics.
66. Wilson C.J., Beck P.A., (1996), Fracture testing of bulk silicon microcantilever beams subjected to a side load.
67. Aly M.F., Veldhuis S.C., Elbestawi M.A., Prediction of cutting forces in the micro-machining of silicon using a “hybrid molecular dynamic-finite element analysis” force model.
68. Girifalco, L. A., Weizer, V. G., (1959), Application of the Morse potential function to cubic materials.
69. Komanduri R., Raff L.M., (2001), A review of the molecular analysis simulation of machining at the atomic scale, Oklahoma, USA.
70. Mamalis A.G., Markopoulos A., Manolakos D.E., (2005), Micro and nanoprocessing techniques and applications, Athens, Greece.
71. Dornfeld D., Sangkee M., Takeuchi Y., (2006), Recent Advances in Mechanical Micromachining, Berkeley