

Apéndice A

Funcionamiento del programa

Como se explicó anteriormente el programa se divide en dos partes, la expansión térmica y la deformación. A continuación se muestra un resumen algo más minucioso que el mostrado en el capítulo 5, nombrando y explicando una a una las funciones llamadas en el archivo principal (main).

Expansión térmica

Fcc neighbor shells

Crea la estructura shells donde se almacenan distintas localizaciones relativas de los átomos en una red fcc en función de la distancia a un átomo central, es decir, se puede decir que son las localizaciones ordenadas de los 1º, 2º... vecinos de un átomo. Por ejemplo, si llamamos a la estructura shells(1) obtenemos las localizaciones de los primeros vecinos.

Input

Lee y procesa el archivo de entrada, éste como se ha dicho anteriormente contiene algunas variables de la simulación como, por ejemplo, el tamaño de la caja, el tipo de potencial, algunas condiciones de contorno, el número de nodos y su posición... También se crean los huecos en la memoria para almacenar los datos de los nodos y se guarda su posición inicial. Lee el archivo “material” y guarda los datos convenientes (LJ o EAM) en una estructura y, por último, se ejecuta la función get periodic box donde se calcula el tamaño de la caja.

Delaunay3d create element

Se crea la malla con fortran, se almacenan los datos de los elementos obtenidos (su número, los nodos que lo forman, el radio y el centro de la esfera circunscrita) y se calcula el número de sitios que tiene cada elemento. Produce el primer archivo de salida donde aparecen las coordenadas de todos los nodos y los nodos que forman cada elemento.

Por otra parte, localiza el nodo central para colocar el hueco (void), calcula el radio de éste y marca los nodos que están dentro mediante una máscara y los que están en la superficie con otra. Los elementos que tienen algún nodo dentro del void quedan inactivos y reenumera el resto. Los nodos que están dentro del void quedan inactivos y el resto se reenumera.

Por último se introducen las condiciones de contorno en desplazamientos y se crea un árbol BSP (Binary space partitioning) que ordena los elementos según las coordenadas de su centro, además almacena el radio del elemento más grande y del más pequeño.

Bin element

Anteriormente se habían dividido los nodos entre los threads disponibles para dividir el trabajo y así agilizarlo; por lo que, ahora, si un nodo pertenece a un thread se añaden a éste todos los elementos que contienen a dicho nodo. Además se añaden los nodos que no están en el threads, pero que pertenecen a un elemento que sí lo está.

Node clusters weights

Crea los clusters: a cada nodo se le asigna los sitios más cercanos (1º y 2º vecinos) que están situados en una red fcc y si un sitio ha sido asignado a más de un nodo se lo queda el que esté más cerca. Se realiza una equipartición del trabajo entre los threads y se comprueba que todos los sitios de un cluster pertenecen a elementos adyacentes al nodo. Por último, se calcula el peso de cada nodo dividiendo el resultado obtenido en la suma de los valores de las funciones de forma para todos los sitios (pertenecan a un cluster o no) de los elementos adyacentes al nodo por el obtenido en la suma de los valores de las funciones de forma para los sitios que pertenecen a clusters.

Neighbor list

Para cada nodo crea una nueva subestructura donde se crean huecos en la memoria para colocar posteriormente su lista de vecinos.

Fix temperature

Para los nodos del borde fija la temperatura.

Set initial temperature

Fija la misma temperatura para todos los nodos, sin embargo se podría establecer un gradiente de temperaturas constante a lo largo del eje z.

Initialize thermodynamic variables

Suma los pesos de todos los nodos calculados anteriormente. Crea la lista de los vecinos de cada sitio. Para cada nodo calcula la traza de la matriz de rigidez con los nodos que pertenecen a la lista de vecinos y con la traza calcula la frecuencia y la entropía del nodo.

Update nodal frequency temperature

Como en los pasos posteriores del programa se calculan la temperatura y la frecuencia reducida (variaciones), aquí se actualiza el valor total.

Update reference

Se actualiza el valor de la posición de referencia.

Initialize energy

Se recalcula la lista de vecinos y para cada nodo se calcula la energía cinética, frequency force, entropy force y la aceleración, teniendo en cuenta la vibración de los átomos, como la suma de las contribuciones de cada sitio del cluster del que forma parte dicho nodo. Calcula la parte de la energía total (cinética y potencial) aportada por los nodos, por lo que a la energía potencial del sistema le resta la aportada por las fuerzas externas.

Perform output

Produce el segundo archivo de salida y un archivo restart donde muestra todos los datos que se han calculado de los nodos y de los elementos. Además en el archivo restart se almacenan todos los datos adicionales que son necesarios para poder ejecutar el programa desde este archivo.

Initialize usage timer

Pone la fecha actual y la información sobre los recursos utilizados.

Conjugate gradient thermo

Con el método de los gradientes conjugados va alterando los valores de la frecuencia reducida para obtener el valor que minimiza la energía del sistema. Además se obtienen los valores de la entropy force y frequency force de cada nodo y la energía total (cinética y potencial) aportada por los nodos.

Update nodal frequency temperature

Se actualiza el valor total de la temperatura y de la frecuencia total con los valores reducidos.

Perform output

Produce un nuevo archivo de salida y un archivo restart donde muestra todos los datos que se han calculado de los nodos y de los elementos. Además en el archivo restart se almacenan todos los datos adicionales que son necesarios para poder ejecutar el programa desde este archivo.

Conjugate gradient

Con el método de los gradientes conjugados se van alterando los valores de la frequency force (energía de cada nodo) y de la posición de cada nodo para obtener la configuración de equilibrio del sistema (mínimo de energía). Además se obtienen los valores de la entropy force,

frecuency force, aceleración, entropía y temperatura actual de cada nodo y la energía total (cinética y potencial) aportada por los nodos.

Compute total energy

Inicializa la energía cinética y potencial para todos los nodos. Calcula la parte de la energía total (cinética y potencial) aportada por los nodos, por lo que a la energía potencial del sistema le resta la aportada por la fuerza externa. Calcula la energía total como la suma de la cinética y potencial.

Compute sample volume

Calcula el volumen total del cubo sumando el volumen que ocupa cada elemento.

Compute virial stress

Calcula los componentes de la matriz de tensión del virial de cada nodo. Calcula la matriz de la tensión del virial total como la suma de las matrices de cada nodo.

Update reference

Se actualiza el valor de la posición de referencia.

Perform output

Produce el archivo final de salida y el archivo restart que sirve de entrada para la etapa de la deformación del cristal.

Deformación del cristal

Fcc neighbor shells

Crea la estructura shells donde se almacenan distintas localizaciones relativas de los átomos en una red fcc en función de la distancia a un átomo central, es decir, se puede decir que son las localizaciones ordenadas de los 1º, 2º... vecinos de un átomo. Por ejemplo, si llamamos a la estructura shells(1) obtenemos las localizaciones de los primeros vecinos.

Input

Lee y procesa el archivo restart, éste contiene todas las variables que son necesarias para poder retomar la simulación como, por ejemplo, los nodos, los elementos, el tipo de potencial, algunas condiciones de contorno...

También localiza el nodo central para colocar el hueco (void), calcula el radio de éste y marca los nodos que están dentro con una máscara y los que están en la superficie con otra. Los elementos que tienen algún nodo dentro del void quedan inactivos y reenumera el resto. Los nodos que están dentro del void quedan inactivos y el resto se reenumera.

Por último se introducen las condiciones de contorno en desplazamientos y se crea el árbol BSP (Binary space partitioning) que ordena los elementos según las coordenadas de su centro, además almacena el radio del elemento más grande y del más pequeño; todo esto se almacena en una estructura. Se ejecuta la función get periodic box donde se calcula el tamaño de la caja.

Bin element

Anteriormente se habían dividido los nodos entre los threads disponibles para dividir el trabajo y así agilizarlo; por lo que, ahora, si un nodo pertenece a un thread se añaden a éste todos los elementos que contienen a dicho nodo. Además se añaden los nodos que no están en el threads, pero que pertenecen a un elemento que sí lo está.

Node clusters weights

Crea los clusters: a cada nodo se le asigna los sitios más cercanos (1º y 2º vecinos) que están situados en una red fcc y si un sitio ha sido asignado a más de un nodo se lo queda el que esté más cerca. Se realiza una equipartición del trabajo entre los threads y se comprueba

que todos los sitios de un cluster pertenecen a elementos adyacentes al nodo. Por último, se calcula el peso de cada nodo dividiendo el resultado obtenido en la suma de los valores de las funciones de forma para todos los sitios (pertenecan a un cluster o no) de los elementos adyacentes al nodo por el obtenido en la suma de los valores de las funciones de forma para los sitios que pertenecen a clusters.

Neighbor list

Para cada nodo crea una nueva subestructura donde se crean huecos en la memoria para colocar posteriormente su lista de vecinos.

Initialize energy

Se recalcula la lista de vecinos y para cada nodo se calcula la energía cinética, frequency force, entropy force y la aceleración, teniendo en cuenta la vibración de los átomos, como la suma de las contribuciones de cada sitio del cluster del que forma parte dicho nodo. Calcula la parte de la energía total (cinética y potencial) aportada por los nodos, por lo que a la energía potencial del sistema le resta la aportada por las fuerzas externas.

Perform output

Produce un archivo de salida y uno restart donde muestra todos los datos que se han calculado de los nodos y de los elemento. Además en el archivo restart se almacenan todos los datos adicionales que son necesarios para poder ejecutar el programa desde este archivo.

Initialize usage timer

Pone la fecha actual y la información sobre los recursos utilizados.

Fix temperature

Para los nodos del borde fija la temperatura.

A partir de aquí realiza un bucle para el número de cargas que está implementado:

Strain void

En el primer paso se crean las matrices de la deformación acumulada y del incremento de deformación como matrices unidad. En los pasos posteriores, se actualiza la deformación acumulada, se establece el incremento de deformación y se calculan las nuevas posiciones de los nodos como su posición actual por la matriz incremento de deformación.

Conjugate gradient

Con el método de los gradientes conjugados se van alterando los valores de la frequency force, de la temperatura reducida, y de la posición de cada nodo para obtener la configuración de equilibrio del sistema (mínimo de energía). Además se obtienen los valores de la entropy force, frequency force, thermal force, aceleración, entropía y temperatura actual de cada nodo y la energía total (cinética y potencial) aportada por los nodos.

Compute total energy

Inicializa la energía cinética y potencial para todos los nodos. Calcula la parte de la energía total (cinética y potencial) aportada por los nodos, por lo que a la energía potencial del sistema le resta la aportada por la fuerza externa. Calcula la energía total como la suma de la cinética y potencial.

Compute sample volume

Calcula el volumen total del cubo sumando el volumen que ocupa cada elemento.

Compute virial stress

Calcula los componentes de la matriz de tensión del virial de cada nodo. Calcula la matriz de la tensión del virial total como la suma de las matrices de cada nodo.

Perform output

Produce el archivo final de salida y el restart.

Remesh force

Crea una nueva estructura donde guarda los elementos y su deformación (raíz cuadrada del 2º invariante). Ordena dicha estructura en orden descendente respecto a su deformación para comprobar si la energía de un elemento es mayor que un determinado valor y así crear nuevos nodos y elementos. Elimina la información sobre los vecinos de todos los nodos, sobre los valores de las variables relacionadas con los elementos, la estructura de los elementos y el árbol BSP. Añade a la lista de nodos aquellos inactivos y los nuevos que se han creado.

Vuelve mallar y a crear la estructura con los elementos y los mismos datos anteriores. Localiza el nodo central para colocar el hueco (void) e inactiva los nodos y elementos que han quedado dentro. Se vuelven a introducir las condiciones de contorno en desplazamientos y se crea de nuevo el árbol BSP (Binary space partitioning).

Divide los nodos y elementos entre los threads. Crea los clusters de nuevo y vuelve a crear los huecos para los vecinos de los nodos. Implementa las condiciones de contorno y fija la temperatura. Actualiza el valor total de la frecuencia y de la temperatura. Se recalcula la lista de vecinos. Para cada nodo calcula la energía cinética, entropy force y la aceleración teniendo en cuenta la vibración de los átomos. Calcula la thermal force de cada nodo como la suma de las contribuciones debidas al movimiento de los átomos y las debidas a la difusión. Inicializa la energía cinética y potencial para todos los nodos. Calcula la parte de la energía total (cinética y potencial) aportada por los nodos, por lo que a la energía potencial del sistema le resta la aportada por la fuerza externa. Calcula la energía total como la suma de la cinética y potencial.