Capítulo 3

Descripción del modelo de cálculo

En este capítulo se describirá el modelo de cálculo utilizado en las simulaciones. En primer lugar, ser describen dos algoritmos para la resolución numérica de ecuaciones no lineales para lograr la minimización de las ecuaciones descritas en el capítulo 2. También se justificará el uso de potenciales interatómicos empíricos y se detallarán las rutinas programas necesarias para el desarrollo este trabajo.

3.1 Resolución numérica de sistemas de ecuaciones

Los sistemas que resuelven el problema de minimización de la energía del sistema para una temperatura de 0 K del sólido. Con el principio de Máxima Entropía, hemos visto como podemos encontrar potenciales que dependan de la temperatura y la frecuencia de vibración de los átomos, obteniendo a partir de este principio una expresión de la energía interna dependiente de la temperatura, la frecuencia de vibración y la entropía de cada átomo. Para incorporar el efecto de la temperatura en el método QC debemos reemplazar la ec. (2.66) en la expresión de la energía. De esta manera, podemos obtener las derivadas primera y segunda y resolver el sistema de ecuaciones que se desprende mediante la utilización de algoritmos de cálculo. En este capítulo veremos como resolver las ecuaciones anteriormente desarrolladas del método QC mediante diferentes métodos de resolución de ecuaciones no lineales. Explicaremos la solución de las ecuaciones del QC aplicando los siguientes métodos:

- Gradiente Conjugado No Lineal
- Relajación Dinámica

Ambos algoritmos fueron implementados mediante la utilización de la librería PETSc (Balay y col., 2011) (Portable Extension Toolkit for Scientific Computation). Esta librería ofrece una amplia variedad de métodos para la resolución de ecuaciones lineales y no lineales, como así también para la resolución de ecuaciones diferenciales no lineales, ofreciendo la posibilidad de realizar cálculos en paralelo con la utilización del estándar M.P.I. (Message Passing Interface) para cálculo en múltiples procesadores.

3.1.1 Gradiente conjugado no lineal

El método del gradiente conjugado (Shewchuk, 1994) es un algoritmo para resolver numéricamente los sistemas de ecuaciones lineales cuyas matrices son simétricas y definidas positivas. El método fue desarrollado para la minimización de funcionales convexos, garantizando una única solución. El algoritmo de cálculo se basa en encontrar las direcciones de búsqueda para luego minimizar el funcional mediante una búsqueda lineal. Las direcciones de búsquedas se determinan mediante la conjugación de Gram-Schimdt y en cada paso son ortogonales. Los pasos a seguir para la programación son mostrados a continuación en la fig. (3.1), donde $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ es el sistema de ecuaciones, \mathbf{r} es el residuo, se define $\mathbf{M} \approx \mathbf{F}''(\mathbf{x})$ que permite el cálculo de δ , $\mathbf{d} = \mathbf{F}'(\mathbf{x})$ es la dirección de mejora y α es el módulo en que se avanza en la dirección de mejora.

Revisión del GCNL

Para el caso del GCNL el residuo se calcula como $\mathbf{r}_{(i)} = -\mathbf{F}'(\mathbf{x}_i)$. Las direcciones de búsqueda, al igual que en el método lineal son calculadas mediante la conjugación de Gram-Schimdt. Sin embargo, para realizar la búsqueda lineal a lo largo de la dirección de búsqueda es un poco más complicado que para el caso lineal y existen diferentes procedimientos que pueden utilizarse. Al igual que en el GC, el valor de $\alpha_{(i)}$ que minimice $\mathbf{F}(\mathbf{x}_{(i)} + \alpha_{(i)})\mathbf{d}_{(i)}$ es encontrada asegurando que el gradiente es ortogonal a la dirección de búsqueda. Nosotros utilizaremos un algoritmo que encuentre los ceros de $[\mathbf{F}'(\mathbf{x}_{(i)} + \alpha_{(i)})\mathbf{d}_{(i)}]^T\mathbf{d}_{(i)}$.

Para la estimación del parámetro β existen diferentes opciones al igual que en el caso lineal. Estas expresiones no son equivalentes y los investigadores han estudiado las mejores opciones. Dos opciones buenas son las fórmulas de Fletcher-Reebes o la de Polak-Ribière

$$\beta_{(i+1)}^{FR} = \frac{\mathbf{r}_{(i+1)}^{T} \mathbf{r}_{(i+1)}^{T}}{\mathbf{r}_{(i)}^{T} \mathbf{r}_{(i)}}$$
(3.1)

$$\beta_{(i+1)}^{PR} = \frac{\mathbf{r}_{(i+1)}^{T}(\mathbf{r}_{(i+1)} - \mathbf{r}_{(i)})}{\mathbf{r}_{(i)}^{T}\mathbf{r}_{(i)}}$$
(3.2)

El método de Flecher-Reeves converge si el punto de comienzo está lo suficientemente cerca del mínimo deseado, mientras que el método de Polak-Ribière, fig. (3.2), puede en casos



Figura 3.1: Método del Gradiente Conjugado. El mismo sirve de base para la modificación a problemas no lineales.

raros caer en un camino cíclico sin llegar a la convergencia. Sin embargo, el método de Polak-Ribière converge mucho más rápido. Más aún, el método de Polak-Ribière puede asegurar la convergencia si se escoge $\beta = max\{\beta^{PR}, 0\}$. Esto es equivalente a decir que el método vuelve a empezar si $\beta^{PR} \leq 0$. Al volver a empezar el método, la información de las direcciones

de búsqueda anteriores se pierde, pudiendo volver por una dirección ya recorrida. Estas dos ventajas que posee el algoritmo de Polak-Ribière hizo que fuera este método el que se usara para resolver las ecuaciones del QC en otros trabajos.



Figura 3.2: Diagrama en bloques del **GCNL**. El mismo se utilizó para la resolución numérica de las ecuaciones de las simulaciones realizadas.

Búsqueda lineal del GCNL

Una vez que las direcciones de búsqueda han sido encontradas, el método debe buscar la solución aproximada mediante un algoritmo de búsqueda. Este procedimiento se hace encontrando los ceros de $\mathbf{F}^{T}\mathbf{d}$. Aquí \mathbf{F}' es un polinomio en α , que es el módulo de la distancia en la dirección de mejora, \mathbf{d} es la dirección de búsqueda encontrada mediante la conjugación de Gram-Schimdt y entonces podemos utilizar un algoritmo para encontrar las raíces del mismo.

$$\mathbf{F}(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}) \approx \mathbf{F}(\mathbf{x}) + \alpha \left[\frac{d}{d\alpha} \mathbf{F}(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d})\right]_{\alpha=0} + \frac{\alpha^2}{2} \left[\frac{d^2}{d\alpha^2} \mathbf{F}(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d})\right]_{\alpha=0}$$
(3.3)

Por lo tanto

$$\frac{d}{d\alpha}\mathbf{F}(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}) \approx [\mathbf{F}'(\mathbf{x})]^T \mathbf{d} + \alpha \mathbf{d}^T \mathbf{F}''(\mathbf{x}) \mathbf{d}$$
(3.4)

Aquí explicaremos el método de búsqueda mediante secante, que es el que se ha utilizado para la resolución de las ecuaciones del QC. El método de la secante, fue diseñado para evitar calcular la matriz Hessiana \mathbf{F}'' en cada paso de la iteración de Newton y ganar rapidez de cálculo para problemas grandes. Éste método aproxima la derivada de $\mathbf{F}(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d})$ mediante la evaluación de la primera derivada en dos puntos distintos dados $\alpha = 0$ y $\alpha = \sigma$ donde σ es un número arbitrario muy pequeño no nulo. Por ende, podemos aproximar

$$\mathbf{F}''(\mathbf{x}) = \frac{d^2}{d\alpha^2} \mathbf{F}(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}) \approx \frac{\left[\frac{d}{d\alpha} \mathbf{F}(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d})\right]_{\alpha = \sigma} - \left[\frac{d}{d\alpha} \mathbf{F}(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d})\right]_{\alpha = 0}}{\sigma}$$
(3.5)

Esta expresión se hace más exacta a medida que σ se aproxima a cero. Reemplazando la ec. (3.5) en la (3.3) y teniendo en cuenta que queremos minimizar $\mathbf{F}(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d})$ obtenemos

$$\alpha = -\sigma \frac{[\mathbf{F}'(\mathbf{x})]^T}{d} [\mathbf{F}'(\mathbf{x} + \sigma \mathbf{d})]^T \mathbf{d} - [\mathbf{F}'(\mathbf{x})]^T \mathbf{d}$$
(3.6)

Donde $\mathbf{F}'(\mathbf{x}) = \frac{d}{d\alpha} \mathbf{F}(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d})$. El método de la secante al igual que el método de Newton-Raphson aproxima a $\mathbf{F}(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d})$ con una parábola, pero en vez de emplear la primera y segunda derivada en un mismo punto, emplea la primera derivada en dos puntos diferentes y de esta manera puede estimar la función. Con este procedimiento de búsqueda lineal podemos encontrar el valor de la solución x de manera tal que esté razonablemente cerca de la solución exacta. Aquí debemos tener cuidado con los valores de tolerancias empleados, ya que una tolerancia excesivamente pequeña puede producir fallos de convergencia, mientras que valores altos pueden llevar a soluciones no adecuadas del problema.

3.1.2 Relajación Dinámica

El uso de los elementos finitos para resolver problemas de estructuras de mayor tamaño y complejidad es el foco de una intensa investigación. Las capacidades computacionales son cada vez mayores y ofrecen una gran potencia de cálculo cuya forma óptima de resolución resulta ya implementada. Sin embargo, estos procedimientos de cálculo han sido desarrollados y realizados para operar de forma secuencial y habitualmente no son los mejores para afrontar resoluciones en ordenadores con varios procesadores. Se ha de buscar una nueva estrategia de cálculo para procesamiento paralelo y vectorial, con este algoritmo se busca predecir la respuesta estática y dinámica de estructuras no lineales hiperelásticas.

La formulación básica para el algoritmo dinámico adaptativo para estructuras hiperelásticas fue desarrollado por Oakley y Knight (1995a); Oakley y Knight (1995b); Oakley, Knight y Warner (1995). La relajación dinámica es una técnica por la cual la solución estática es obtenida mediante la respuesta de estado estacionario al análisis transitorio dinámico de sistemas autónomos. En el caso que nos toca, la parte del transitorio no es de nuestro interés, sólo lo será la parte estacionaria.

La relajación dinámica es un algoritmo basado en las siguientes ecuaciones semidiscretas de respuesta de movimiento dinámico estructural para el enésimo incremento de tiempo

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{q}}^{\mathbf{n}} + \mathbf{C}\dot{\mathbf{q}}^{\mathbf{n}} + \mathbf{F}(\mathbf{q}^{\mathbf{n}}) = \mathbf{0}$$
(3.7)

donde **M** es una matriz diagonal de la masa, **C** es la matrix de amortiguamiento y **F** es el vector de fuerzas internas. Los vectores $\ddot{\mathbf{q}}$, $\dot{\mathbf{q}}$ y \mathbf{q} , representan la aceleración, la velocidad y el desplazamiento respectivamente. Las fuerzas internas **F** son una función de los desplazamientos.

Llegados a este punto, la ec. (3.7) se resuelve con la aproximación de la diferencia centrada y sigue el bucle que se muestra en el siguiente diagrama. En la referencia del método se puede comprobar el procedimiento completo, los errores cometidos y alternativas al método. Como se comprobará más adelante este método para encontrar la solución númerica nos será bastante más eficiente para el cálculo que el gradiente conjugado no lineal.

En la fig. (3.3) se muestra del diagrama de flujo del algoritmo donde **M** se obtiene a partir de la matriz de rigidez global **K**, Δt se configura con un valor de $\Delta t = 1,0$ y N es el número de columnas de la matriz **K**.



Figura 3.3: Método de Relajación Dinámica

3.2 Potenciales interatómicos

Para la modelización se han utilizado potenciales interatómicos empíricos. En el caso del argón se ha utilizado el potencial Lennard-Jones (Dobbs y Jones, 1957), que ya fue usado en la tesis de Kulkarni (2006) en la nanoindentación con indentador esférico y ahora lo utilizaremos en el caso de uno tipo Berkovich. Para la nanoindentación en cobre se usan dos potenciales que fueron obtenidos por Johnson (1988) y Mishin, Mehl y Papaconstantopoulos (2002). Existen muchas diferencias entre ambos potenciales, la primera de ellas, es el radio de corte. En términos de σ_0 , la distancia al primer vecino, el radio de corte con EAM-Johnson es $1,35\sigma_0$ y con EAM-Mishin es $2,0\sigma_0$. Esto implica una gran diferencia en las interacciones entre vecinos, usando el potencial de Johnson se consideran interacciones con 12 vecinos mientras con el potencial de Mishin estamos considerando 44 vecinos (con una configuración de red perfecta). Por lo tanto, en términos de metodología QC, el radio de corte se toma como el radio de los núcleos atómicos, lo que representa un incremento de coste de tiempo computacional requerido al usar el potencial Mishin. En el Apéndice A tenemos una descripción más extendida de los potenciales en la figura (A.2). En el caso del Aluminio, se emplea el potencial definido por Mishin, Mehl y Papaconstantopoulos (2002) para este material. En este caso, el radio de corte es 1,96 σ_0 , muy similar al caso del cobre.

En la versión de código utilizada contábamos con los potenciales Lennard-Jones para argón y EAM-Johnson para cobre. Por lo tanto, ha sido necesario extraer el código de otra versión para implementar los potenciales EAM-Mishin para el cobre y el aluminio. Se ha añadido y adaptado el código existente que contiene los coeficientes y rutinas necesarias para la utilización de estos potenciales. Con este potencial para el caso del cobre podemos realizar pruebas más afinadas ya que tiene en cuenta más vecinos. A su vez, se realizarán simulaciones sobre muestras de aluminio también con el potencial EAM-Mishin. En este nuevo potencial se prodrá comprobar que tiene un coste computacional mucho mayor que EAM-Johnson y Lennard-Jones.

3.3 Automatización indentador esférico

Vamos a estudiar los defectos que se producen en el cristal FCC de argón, cobre o aluminio con sus direcciones cristalográficas orientadas [100], [010] y [001]. El volumen representativo será un monocristal de tamaño N x N x N, donde en la superficie superior tendremos la zona atomística N_a x N_a x N_a , siendo a_0 la constante de red. Tendremos una representación atomística completa en la zona superior del cristal y en el resto del cristal aplicaremos una serie de restricciones cinemáticas. En la zona atomística aplicaremos el nanoindentador con un diámetro ϕ según corresponda en cada caso. Para poder comenzar el proceso de nanoindentación de un material tendremos la caja de la simulación con unas condiciones iniciales y cada átomo en su posición indeformada a una temperatura T_0 .



Figura 3.4: Modelo del indentador esférico sobre el centro la superficie superior de la caja ya en contacto con la celda computacional

En esta situación, aplicaremos los algoritmos de resolución de ecuaciones para minimizar la energía y dejar que la caja se expanda libremente. Una vez expandida la caja, posicionar el indentador en el centro de la superficie superior de la caja, como se observa en la fig. (3.4). Para ello hemos de identificar el centro de esta superficie y situar el extremo inferior del nanoindentador sobre la misma. Para solventar esto, se ha programado un bucle que, una vez que identifica el centro superior de la caja, hace que avance progresivamente el nanoindentador y en cada paso calcule el radio de contacto del indentador. Para esto, se debe inicialmente posicionar el eje del indentador sobre el centro superior de la caja a una distancia suficiente como para que no se toque a la caja inicialmente. Hacemos descender el indentador y si obtenemos un radio de contacto salimos del bucle y continua el programa. Esta rutina debe usarse una vez la expansión térmica de la muestra está completada. De esta forma, introducimos este automatismo que hace las simulaciones con indentador esférico más sencillas.

3.4 Indentador tipo Berkovich

El nanoindentador tipo Berkovich es una pirámide cuadrada regular que se moverá en la dirección del eje, indentando el material a través de su vértice superior. Para el desarrollo del nanoindentador Berkovich comienza identificando el centro de la cara superior de la caja como en el caso anterior. Llegados a este punto la punta Berkovich produce el primer contacto sobre la caja con vértice superior del de la pirámide cuadrada que se puede observar en la fig. (3.6). Si observamos la estructura del material, es FCC, y este primer contacto puntual se puede producir sobre un sólo átomo de la caja, o bien, en el centro de un grupo de cuatro átomos como se observa en la fig. (3.7). Se ha seleccionado la opción de situar el centro sobre un grupo de cuatro átomos ya que en este caso tenemos un desplazamiento inicial de cuatro átomos a la vez, ya que en el otro caso tenemos el riesgo de obtener problemas de convergencia numérica al ser sólo un átomo el desplazado al iniciar la deformación. A continuación, en función del ángulo seleccionado, aplicaremos un desplazamiento vertical a cada átomo del plano superior dependiendo del paso de deformación en función del ángulo α y de la deformación en cada momento δ . Para ello se ha utilizado un bucle donde imponemos el desplazamiento vertical a los átomos que en encuentran en contacto con el nanoindentador. Identificamos estos átomos calculando la "huella" del nanoindentador Berkovich y comprobando si cada átomo de la superficie superior se encuentra en contacto o no. Calculamos en cada paso

$$Dc = \frac{\delta}{\tan(\alpha)} \tag{3.8}$$

donde δ es el desplazamiento vertical del indentador sobre la muestra y D_c la distacia al centro; si un átomo se encuentra dentro del cuadrado formado por estos cuatro lados que distan D_c del centro, como se muestra en la fig. (3.5), se desplazará.



Figura 3.5: Identificamos el centro de la caja y desplazamos los átomos del entorno en función de α y δ

Tenemos un ejemplo del número de átomos desplazados en cada paso en la fig. (3.8), donde se puede observar el efecto del ángulo en el número de átomos de la superficie desplazados. Aplicando esta sencilla condición de contorno tendremos el efecto que tendría la aplicación de un indentador de este tipo. En cada paso de deformación, adicionalmente, hemos de calcular la fuerza que estamos aplicando en los átomos desplazados.



Figura 3.6: Modelo del indentador tipo Berkovich implementado que se aplicará sobre el centro de la superficie superior de la caja



Figura 3.7: Se muestran las dos opciones para situar el centro del indentador Berkovich: A) Sobre un átomo B) Sobre el centro de un grupo de cuatro átomos

Una vez tenemos identificados los cuatro átomos centrales del plano atómico superior,

que se desplazarán desde el principio, en los sucesivos pasos, tendremos el desplazamiento de las filas contiguas conforme avanza el indentador. En función del ángulo del nanoindentador Berkovich, el avance de los átomos de las filas contiguas avanzarán o no. Podemos llegar a dos casos extremos, en caso de un ángulo muy pequeño, desplazaremos los cuatro átomos iniciales hacia abajo sólo, como hemos visto en la fig. (3.7) y en el caso de que sea cercano al semiplano, tendríamos una compresión uniforme.



Figura 3.8: Número de átomos desplazados por el indentador en la superficie en función del ángulo empleado para una caja de argón con $\sigma_o = 0,34nm$