

Politechnika Gdańska

Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej

Katedra Fizyki Ciała Stałego

Streszczenie rozprawy doktorskiej

Algorytmy do lokalizacji dyslokacji
w materiałach symulowanych numerycznie

mgr inż. Szymon Winczewski

Promotor: prof. dr hab. inż. Jarosław Rybicki

Gdańsk 2015

Zjawiska ruchu dyslokacji posiadają istotne znaczenie, gdyż determinują właściwości plastyczne materiałów. Mechanizmy poślizgu trudno jest jednak badać eksperymentalnie. Metody dynamiki molekularnej [1] (molecular dynamics, MD) stoją w zdecydowanej opozycji. Dostarczając czasowo-przestrzennego obrazu zachowania materii w skali atomowej, zapewniając dodatkowo ścisłą kontrolę warunków, stanowią idealne narzędzie do tego celu służące [2].

Skuteczna analiza rezultatów symulacji MD ruchu dyslokacji wymaga wielokrotnego określenia przebiegu linii dyslokacji. Duże rozmiary stosowanych w obliczeniach układów sprawiają, że przy analizie rezultatów nie stosuje się metod służących do detekcji dyslokacji, takich jak DXA [3] (dislocation extraction algorithm), gdyż charakteryzują się one wysokimi kosztami obliczeniowymi. Analiza literatury prowadzi do wniosku, że nie istnieją techniki dedykowane śledzeniu ruchu dyslokacji, pozwalające w sposób dokładny wyznaczyć przebieg linii dyslokacji, charakteryzujące się przy tym wysoką wydajnością oraz uniwersalnością.

W rozprawie przedstawiono nową metodę obliczeniową, służącą do lokalizacji i śledzenia ruchu dyslokacji. Opracowana technika została ukierunkowana na analizę rezultatów symulacji MD ruchliwości dyslokacji. Dzięki zastosowaniu szeregu dedykowanych algorytmów, stworzono metodę pozwalającą badać ruch dyslokacji w sposób dokładny i efektywny obliczeniowo.

Przedłożona rozprawa doktorska składa się z sześciu rozdziałów, zawartych na 162 stronach. W jej treści zamieszczono 33 rysunki oraz 13 tabel. Praca została uzupełniona o spis rysunków i tabel oraz o wykaz literatury, który zawiera 187 pozycji bibliograficznych.

Rozdział 1 stanowi wprowadzenie. Przedstawiono w nim analizę literatury, prezentując bieżący stan wiedzy i pokazując zasadność podjęcia tematyki rozprawy. Sformułowano w nim również cele rozprawy.

W Rozdziale 2 zawarto podstawy teoretyczne, omawiając zagadnienia istotne dla zrozumienia tematyki rozprawy. W rozdziale tym przypomniano podstawowe pojęcia z zakresu teorii dyslokacji oraz przedstawiono metody dynamiki molekularnej. W Rozdziale 2 zaprezentowano także metodę PAD [2] (periodic array of dislocations), powszechnie stosowaną w symulacjach MD ruchliwości dyslokacji, wykorzystaną również w ramach rozprawy. W ostatniej części Rozdziału 2 zaprezentowano metodę BOP [4] (bond-orientational order parameters), stanowiącą fundament dla opracowanej techniki śledzenia ruchu dyslokacji.

W kolejnych trzech rozdziałach przedstawiono główne owoce rozprawy: opracowane, nowe metody obliczeniowe, służące do lokalizacji i śledzenia ruchu dyslokacji.

W Rozdziale 3 omówiono nową technikę obliczania parametrów BOP. Pokazano, że opracowana metoda, mimo że stanowi przybliżenie, zapewnia zanedbywalność błędów. Rozpatrując szereg przypadków testowych wykazano, że zastosowanie zaproponowanego podejścia pozwala znacznie skrócić czas analizy prowadzonej metodą BOP, niekiedy nawet 50-krotnie.

W Rozdziale 4 przedstawiono już główny owoc rozprawy: opracowaną metodę lokalizacji i śledzenia ruchu dyslokacji. W pięciu podrozdziałach omówiono podstawowe idee metody, przedstawiono jej zarys oraz szczegółowo opisano i umotywowano zastosowane w jej ramach algorytmy. W ostatniej części rozdziału przedstawiono krótką charakterystykę powstałego oprogramowania obliczeniowego, stanowiącego implementację powstałej metody.

W Rozdziale 5 przedstawiono przykłady zastosowania stworzonej metody. Na wstępie w szczegółach opisano przeprowadzone symulacje MD ruchliwości dyslokacji krawędziowej w monokryształe molibdenu. Stosując opracowaną metodę do analizy rezultatów pokazano, że jest ona skuteczna i charakteryzuje się wysoką wydajnością.

Ostatni rozdział rozprawy stanowi podsumowanie. Przypomniano w nim postawione cele i pokazano, że zostały osiągnięte. Rozdział uzupełniają komentarze dotyczące planów przyszłych prac.

Literatura

- [1] D. C. Rapaport, *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Cambridge University Press, 1995.
- [2] Y. N. Osetsky, D. J. Bacon, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 11, 427 (2003)
- [3] A. Stukowski, K. Albe, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 18, 085001 (2010)
- [4] P. J. Steinhardt, D. R. Nelson, M. Ronchetti, *Phys. Rev. B* 28, 784 (1983)

Dorobek naukowy autora

Artykuły opublikowane w czasopismach z listy Journal Citation Reports:

1. J. N. Grima, **S. Winczewski**, L. Mizzi, M. C. Grech, R. Cauchi, R. Gatt, D. Attard, K. W. Wojciechowski, J. Rybicki,
Tailoring graphene to achieve negative Poisson's ratio properties,
Advanced Materials 27, 1455 (2015).
2. A. Neumann, M. Bagiński, **S. Winczewski**, J. Czub,
The effect of sterols on amphotericin B self-aggregation in a lipid bilayer as revealed by free energy simulations,
Biophys. J. 104, 1485 (2013).

Artykuły opublikowane w innych czasopismach recenzowanych:

1. M. Płóciennik, **S. Winczewski**, P. Ciecieląg, F. Imbeaux, B. Guillerminet, P. Huynh, M. Owsiak, P. Spyra, T. Aniel, B. Palak, T. Żok, W. Pych, J. Rybicki,
Tools, methods and services enhancing the usage of the Kepler-based scientific workflow framework,
Procedia Computer Science 29, 1733 (2014).
2. **S. Winczewski**, J. Rybicki,
Structure of small platinum clusters revised,
Computational Methods in Science and Technology 17, 75 (2011).

Wystąpienia konferencyjne:

1. **S. Winczewski**, J. Dziedzic, J. Rybicki,
Algorytmy do lokalizacji dyslokacji w materiałach symulowanych numerycznie, wystąpienie ustne,
XXII Warsztaty Naukowe PTSK: Symulacja w badaniach i rozwoju,
Szymbark, Polska, 20-23 maja 2015.
2. **S. Winczewski**, J. Rybicki,
Highly efficient calculation method of bond order parameters, wystąpienie ustne,
Functional and Nanostructured Materials FNMA'14,
Camerino, Włochy, 1-5 września 2014,
3. **S. Winczewski**, J. Rybicki,
Highly efficient calculation method of bond order parameters, wystąpienie ustne,
TRECOP'14 Trends in continuum physics,
Poznań-Będlewo, Polska, 4-7 maja 2014,