

# עלון

## אישח"מ

עלון האיגוד הישראלי לשיטות חישוביות במכניקה

מספר 18

ספטמבר 2007

**עורך:** דן גבעולי, הפקולטה להנדסת אוירונטיקה וחלל, טכניון, חיפה 32000, טל. 8293814 (04), פקס 8292030 (04), דואר אלקטרוני: givolid@aerodyne.technion.ac.il  
**חברי ועד אישח"מ:** עמנואל אור (מזכיר-גזבר), מיכאל אנגלמן, פנחס בר-יוסף, דן גבעולי (נשיא), יצחק הררי, יונתן טל (אחראי האתר), זהר יוסיבאש  
**איש-קשר עם ECCOMAS:** מישל ברקובייד  
**ועדת ביקורת:** משה איזנברגר ועמיאל הרשאה  
**אתר אישח"מ (IACMM) באינטרנט:** <http://www.iacmm.org.il>  
**רישום לחברות באגוד פרטים נוספים:** באתר האגוד הנ"ל, או פנו למזכיר-גזבר, ד"ר עמנואל אור, טל. 9908640 (04), פקס 9908164 (04), דואר אלקטרוני: emanuelo@rafael.co.il

גלריה של תמונות מיום העיון. מלמעלה, בטור הימני: הרשאה, Ramm, גינוסר, סרוו; בטור האמצעי: מור-יוסף, גנאל, הררי; בטור השמאלי: אדלר, וידנפלד, ברנדון.

### הערות העורר:

נא שלחו לכתובת המערכת (בדואר אלקטרוני או רגיל) חומר לפרסום בעלון. ניתן ורצוי לצרף ציורים ותמונות. לידיעת חברות: ניתן גם לפרסם חומר מסחרי- פרסומי בתשלום. לפרטים נא לפנות למערכת. גירסה צבעונית של עלון זה מופיעה באתר האגוד (ראה לעיל).

הכתבה המרכזית בגליון זה מעט מוסטת מ"השביל הקלאסי" של מכניקה חישובית משום שאינה עוסקת במכניקת הרצף אלא במכניקה אטומיסטית. אולם כיום, בעידן שבו חישובים מרובי-סקאלות תופסים מקום יותר ויותר חשוב בחישוב ההנדסי והמדעי, הגבולות בין התחומים מטשטשים. הכתבה שמה דגש חזק גם על ויזואליזציה – מרכיב חשוב ביותר בפריפריה של מכניקה חישובית.

### חידוש רישום באגוד:

אנא הרשמו כחברים באגוד או חדשו את חברותכם! טופס רישום עם פרטים מלאים ניתן למצוא באתר <http://www.iacmm.org.il/member>

### ISCM-22

יום העיון ה-22 התקיים ב-15.3.07 בטכניון. יום העיון היה מוצלח מאד וכלל הרצאת פתיחה של פרופ' Ekkehard Ramm מאוניברסיטת שטוטגרט, מומחה בעל שם במכניקה חישובית, על שיטות אלמנטים סופיים למבני קליפות. יום העיון הסתיים בהרצאת לומדה של יצחק הררי על שיטות צעידה בזמן באנליזת אלמנטים סופיים דינמית. להלן



## ISCM-23

יום העיון ה-23 יתקיים ב-11.10.07 במכון ויצמן למדע. זוהי הפעם הראשונה שיום עיון של אישח"מ נערך במכון המפורסם שברחובות. ראו פרטים באתר האגודה על תוכנית הכנס, המבטיחה להיות מרתקת. המארגנים המקומיים הם עינת אהרונוב ורמי בן-צבי. אנו מודים למכון ולקרן Goldschlager על התמיכה הנדיבה.

## הדמיה וויזואליזציה אטומיסטית

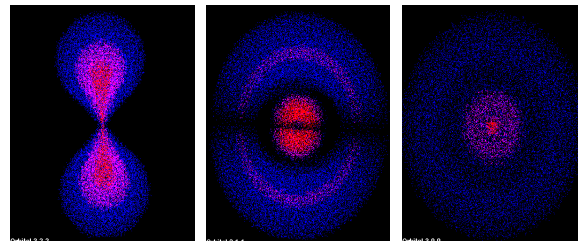
### יוחנה אדלר

### הפקולטה לפיסיקה, טכניון

[phr76ja@techunix.technion.ac.il](mailto:phr76ja@techunix.technion.ac.il)

באופן עקרוני ישום חוק ניוטון לפוטנציאלים הבנויים מפתרונות משוואת שרודינגר יכול לתאר כל תהליך ולדמות כל מדידה שאפשר לבצע במעבדה. בפועל צריך קיצורי דרך אפילו בסקאלה הננומטרית (פיקו-שניות). פירוש הדבר הוא שבמציאות כדי לדמות מצבים רבים יש לעבוד עם מולטי סקאלות, אך באופן אישי כפיסיקאית אני בוחרת להתמקד מבחינה חישובית בננו-סקאלה.

ניתן לפתור את משוואת שרודינגר באופן אנליטי רק לאטום מימן, ופתרון זה נלמד בקורסים בפיסיקה מודרנית או מכאניקה קוונטית. אם מעבירים את הגרעין לנקודה בודדת ומתרכזים בויזואליזציה תלת מימדית של האלקטרונים, אפילו ויזואליזצית הצפיפות של אלקטרון בודד של אטום מימן בודד היא די מסובכת. בד"כ משתמשים בטכניקות כמו smoke rendering. פיתחנו גרסת-בית של חבילת ההדמיה שלנו AViz, שמשתמשת בצבעים שונים לויזואליזצית הצפיפות. דוגמה לכך מודגמת באיור 1.



איור 1: ויזואליזציה של אטום מימן, עם פרמטרים שונים.

עבור סוגי אטומים אחרים (שלא לדבר על מולקולות ומוצקים), ניתן לפתור את משוואת שרודינגר רק בקירוב או באופן נומרי, עקב האינטראקציה בין האלקטרונים (והגרעינים). אטום הליום או מולקולות מימן הם כבר בין אלו שדורשים פתרון נומרי, ומערכות של חומר מעובה דורשות שיטות נומריות מתקדמות. הגישה הסטנדרטית מבוססת על מודלים אטומיסטיים של מכאניקת הקוונטים.

"אלכימיה ממוחשבת" היא עכשיו כלי מעשי עבור מחקר התחום מתפתח במהירות, המחשבים חזקים והאלגוריתמים איתנים. מערכות אטומיות כוללות באופן טיפוסי מיליוני חלקיקים.

דוגמאות:

• **מערכות מסוכנות:** מודלים של מערכות הקשורות לפיתוח אנרגיה גרעינית (כגון תוכנית ASCII בלוס אלמוס).

• **מערכות תעשייתיות חשובות:** קרמיקות (Alumina), מוליכים למחצה (סיליקון, גרמניום, יהלומים) ופולימרים.

סימולציה במחשב חוסכת ביצוע תהליכים יקרים ועדינים במעבדה, אולם המידול חייב להעשות ביחד עם ניסויי מעבדה. בניית מודלים של מוצקים ובמיוחד מתכות שונה מבניית מודלים של מולקולות ונוזלים. חשוב לקבל מיקום אטומי במדויק, ז"א צריך לבצע צעדים קטנים בפתרון הנומרי של המשוואות, וגם חשוב לדאוג לכיול נכון.

ישנן מספר תפישות שגויות נפוצות בקשר להדמיות אטומיסטיות:

1. "פוטנציאלים פשוטים, לדוגמא Lennard-Jones, נותנים קירוב ראשון טוב" – לא נכון! (חוץ מהמקרה של גזים אצילים שהם מתארים במדויק). במיוחד קביעה זו אינה נכונה עבור מתכות (אפילו בפאזה גזית) ועבור פחמן וסיליקון בקרבת השפה.

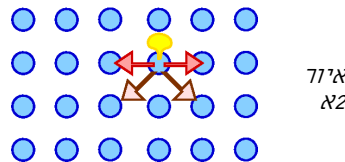
2. "השימוש בפוטנציאלים קלאסיים הוא בזבוז זמן" – לא נכון! הקושי האמיתי היחיד בשימוש בפוטנציאלים אלו הוא שאי אפשר לקבל מהם את פערי האנרגיה של הפסים.

3. "כיום בעידן ההדמיות הממוחשבות ניתן לשכוח מתרמודינאמיקה וסטטיסטיקה" – מאד לא נכון! חייבים לדאוג לפרטי הכיול והסטטיסטיקה. הדגמים בד"כ הם בסקלה ננומטרית ולכן צריך מספר סביר שלהם בכדי לתאר כל מני מצבים, במיוחד עבור מערכות לא מסודרות.

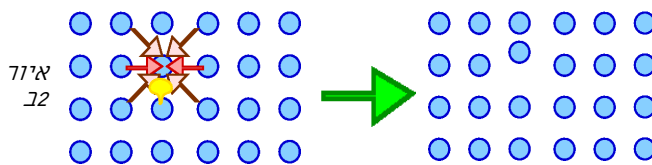
4. "עם חבילות התוכנה הקיימות היום, כל אחד יכול לבצע הדמיה אטומיסטית" – לא נכון! יש חבילות טובות, אך כמו בכל החישוב המדעי יש להשתמש בהם בזהירות. קל מאוד לעשות הדמיה אטומית גרועה מאד!

עתה נפרט בקצרה את השלבים השונים של החישוב (וראו איור 2 על חלקיו השונים):

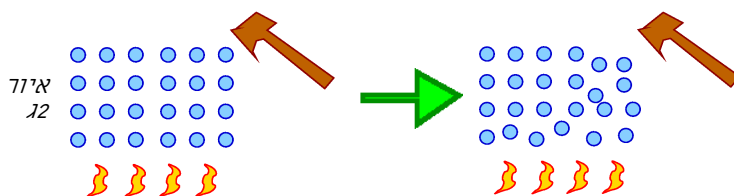
א. ניקח בעיה מסוימת "משולחן המעבדה".



ב. נבנה דגם של אטומים עם תנאי שפה מסוימים ואינטראקציה בין אטומים עם פוטנציאל נתון.



ג. נחשב את הכוחות הפועלים על כל אטום ונניח את האטומים בהתאם.



ד. נמשיך בתהליך זה כאשר אנו מחממים/מקררים/דוחסים/ מותחים/מרעידים/מפציצים את האטומים.

ה. נרשום את המיקום של כל האטומים תוך כדי התהליך ונצייר את ההתפתחות של הדגם אינטראקטיבי ב-AViz.

ש. שילבים א' וב' משפיעות בעיקר על זמן ההכנה, ושילבים ב'-ד' משפיעות בצורה חזקה על אורך הקוד ועל דרישת זמן חיכרון.

הסברים נוספים על המושגים לעיל:

- "תנאי שפה" – מחזוריים או חופשיים או שילוב שלהם.
- "פוטנציאל נתון" – יכול להיות פשוט כגון Lennard-Jones או מסובך כמו שיטת Car-Parinello (פתרון משוואת שרודינגר בכל צעד זמן). בד"כ משתמשים בפוטנציאל בעל סיבוכיות בינונית או בקירוב tight binding או פוטנציאלים קלאסיים איכותיים כמו גרסת Brenner של פוטנציאל Tersoff.
- תהליך העמיסה בסעיף ד' – יש להשתמש בצברים תרמודינמיים שונים, ויישומם לעיתים מסובך.

חישובים אלו דורשים זמן ארוך וזיכרון מחשב משמעותי. לדוגמא, על מעבד פנטיום עם זכרון של לפחות גיגה, הדמיה למשך פיקו שניות בודדות עבור דגם עם 2000 אטומים ועם פוטנציאל קלאסי אורכת כ-24 שעות. כמוכן שיש יתרון לעבודה במחשב-על או בצבר של מעבדים. ניתן למקבל את הקוד לצורך עבודה על מספר רב של מעבדים שבניהם קיימת תקשורת טובה. גם "מקביליות טריביאלית", כלומר הרצת מקרים שונים על מעבדים שונים, היא טובה.

לעיתים אנו מקפאים את הדינמיקה ומשתמשים באותם הפוטנציאלים עבור סימולציות סטטיות, למשל Metropolis Monte Carlo, למציאת מצב אנרגיה מינימלי או מצב יסוד. במיוחד אני מתעניינת במבנים גיאומטריים לא מסודרים והדמיתם. המקורות הטובים של בעיות כאלו הם ניסויים במעבדה.

להלן שתי דוגמאות אפליקציה ספציפיות:

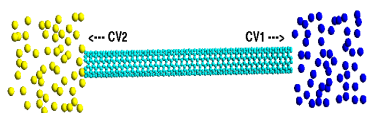
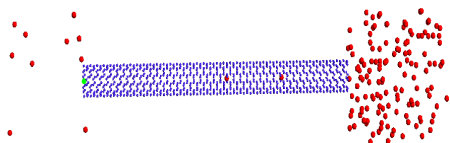
- **נק ביהלומים** (מחקר משותף עם ר. קליש, ד. סעדה וא. טורקי). יהלומים שימושיים כמבודדים בהתקנים אלקטרוניים, אך הם ניזוקים בקלות ע"י קרינה וזיהומים והופכים למוליכים. ניסויים רמזו שאזורים בתוך היהלום הפכו לגרפיט עם הופעת נק. קיבלנו הוכחה להשערה זו כאשר הצלחנו לדמות נק כזה ומצאנו שבהשפעת הקרינה היהלום מגדל אזורים של גרפיט שמתחברים ביניהם ומוליכים חשמל. באיור 3 ניתן לראות תוצאות של הדמיה כזו. משמאל יהלום שניזוק, עם אטומים בעלי 4 שכנים (מורי-יהלום) בכחול ואטומים עם 3 שכנים (דמוי גרפיט) (דמוי גרפיט)

באדום. במרכז אטומים עם 4 שכנים בלבד. מימין אטומים עם 3 שכנים בלבד (ניתן לראות מישרים של הגרפיט בפינה הימנית התחתונה).

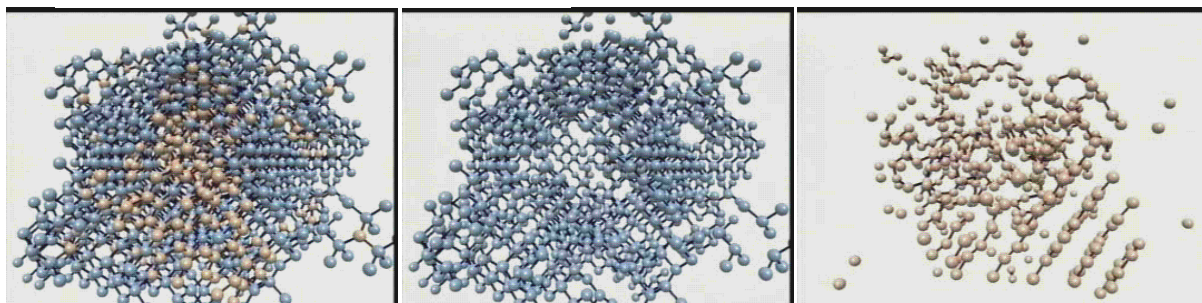
• **שפופרות ננו** (מחקר משותף עם מ. שיינסוף, כ. פאין, י. יעיש וט. מוטח). שפופרות ננו מפחמן הן בעלות שימושים מעשיים ופוטנציאלים רבים, והן קטנות מספיק עבור מידול אטומיסטי להיות אפשרי אם כי לא קל. שני שימושים שאנו בוחנים הם שפופרות כמפרידים של מולקולות העוברות דיפוזיה ושפופרות כחיישני מסה ב-MEMS. בשני הפרויקטים אנו משתמשים בדינמיקה מולקולרית; בראשון אנו משלבים אותה עם שיטת מונטה-קרלו קנונית בנפחים סופיים. אנו ממדלים את אטומי השפופרת בעזרת פוטנציאל אמפירי ריאקטיבי, ומשתמשים בגרסת חיזוי-תיקון עבור משוואות התנועה בפרויקט הדיפוזיה ובשיטת Verlet בפרויקט ה-MEMS.

בפרויקט ההפרדה, אופיין של הדיפוזיה ושל ההפרדה המולקולרית נבחן לעומסים שונים ותערובות מולקולריות שונות, בעוד שבפרויקט החיישנים מחושבות הרעידות המולקולריות. בשני המקרים נדרשת תשומת לב רבה להיבטים של מכניקה סטטיסטית כגון כיוול. בפרויקט ההפרדה נבחנה התנהגות הדיפוזיה בשפופרות ננו קשיחות לעומת שפופרות גמישות. בפרויקט החיישנים התוצאות הראשוניות הראו התאמה עם חישוב אנליטי עבור מקרה פרטי.

איור 4 מראה שני מקרים של אנליזת דיפוזיה. באיור העליון מתוארת דיפוזיה מנפח בעל צפיפות גבוהה לנפח בעל צפיפות נמוכה. באיור התחתון מתוארת דיפוזיה בין שני נפחים המכילים אטומים מסוגים שונים.



איור 4: מקרי הדמיה לדיפוזיה בשפופרות ננו



איור 3: תוצאות הדמיה לנק ביהלום.

## תודות

אני מודה לכל הסטודנטים שלי שאיוריהם מופיעים לעיל, וכן לכל החוקרים הניסיונאים המשתתפים בהנחייתם ואשר הציגו את הבעיות שתוארו. איור 1 הוכן ע"י Joey Fox, איור 3 ע"י דוד סעדה ואיור 4 ע"י טלי מוטת. אני מודה לאבי אברמוב על עזרתו בתרגום לעברית.

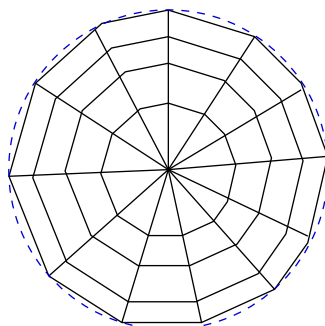
## מקורות

J. Adler, A Column for the simulations section, edited by D. Stauffer in Computers in Science and Engineering, "Visualization in Atomistic and Spin Simulations", Vol 5, p 61-5 (2003)

D. Saada, J. Adler and R. Kalish, "Computer simulation of damage due to ion-impact and its annealing" (1999) Phys. Rev. B 59, 6650

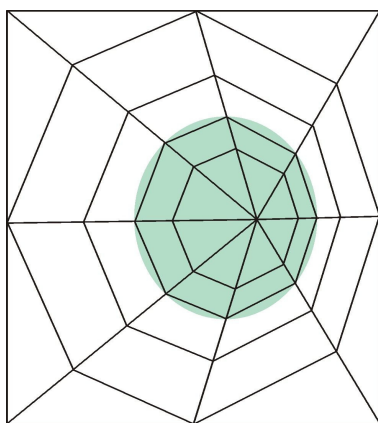
T. Mutat, J. Adler and M. Sheintuch, "Prediction of small molecule transport and separation in narrow carbon nanotubes", in preparation.

איור 1. רשת אלמנטים סופיים עבור טבלה עגולה. הגיאומטריה מיוצגת רק בקירוב.



תכונות חומר קבועות המוגדרות עבורו. מכיוון שצלעות האלמנטים ישירות ואילו שפת הגרעין עקומה, משמעות הדבר היא שאנו מייצגים את תכונות החומר סמוך לפן-הביניים בין שני החומרים בקירוב בלבד. האלמנטים הנמצאים מחוץ לגרעין אך נושקים לו יוגדרו כבעלי תכונות החומר הרך, בעוד שלמעשה שוליהם הפנימיים עשויים מהחומר הקשיח ועובדה זו מוזנחת במודל החישובי. ראו איור 2.

איור 2. מודל עם שני חומרים: חומר "מטריצה" חיצוני וחומר "גרעין" פנימי. תכונות החומר של האלמנטים הנושקים לגרעין מבחוח מיוצגות רק בקירוב.



כדוגמה שלישיית, נניח שבאנליזת מעבר חום פועל על שפת גוף עומס תרמי מפולג בצורת חצי-גל-קוסינוס. באופן עקרוני ניתן לייצג עומס כזה בצורה מדויקת, אולם מטעמי פשטות ונוחות רוב התוכניות המסחריות אינן מאפשרות זאת ורוב המשתמשים אינם מעוניינים בכך. במקום זאת, מקרבים בד"כ את פונקציית הקוסינוס (או כל פונקציית עומס אחרת נתונה) בעזרת פונקציות הצורה של האלמנטים הסופיים. אם, למשל, אנו משתמשים באלמנטים עם פונקציות צורה לינאריות, הקוסינוס יקורב ע"י פונקציה לינארית למקוטעין (אוסף של קטעים ישרים).

המשותף בין כל הדוגמאות האלו הוא שנתוני הבעיה מיוצגים במודל החישובי בקירוב בלבד. תוצאות המודל יכולו שגיאה עקב קירוב זה. שגיאה זו נפרדת מכל השגיאות עליהן דנו בעבר, אולם נשים לב שגם שגיאה זו, כמו שגיאות הדיסקרטיזציה, קטנה עם עידון המודל. למשל, בשלוש הדוגמאות הנ"ל, שגיאת ייצוג הנתונים תקטן כאשר האלמנטים יעשו קטנים יותר עם עידון הרשת.

האם שגיאות כאלו של ייצוג נתונים הן "לגיטימיות" או שאנו צריכים להיות מודאגים מהן? ניתן להראות (למשל,

ראו הספר הקלאסי של Strang and Fix על שיטת האלמנטים הסופיים) שאם המודל הוא עדין מספיק (כך שאנו נמצאים "בתחום האסימפטוטי" של ההתכנסות) אזי שגיאות מהסוג הנ"ל הן לכל היותר מאותו סדר הגודל כמו שגיאות הדיסקרטיזציה, ולכן ניתן להתייחס אליהן כ"לגיטימיות".

## פינת השגיאה הקטנה

בגליון מס' 14 דנו בשגיאת המודל המתימטי, בגליון 16 בשגיאת הדיסקרטיזציה, בגליון 17 בשגיאת העיגול, ובגליון זה נדון בשגיאת ייצוג הנתונים.

כאשר בונים מודל חישובי לבעיה במכניקת הרצף יש צורך להגדיר נתונים רבים. ניתן למיין את הנתונים לפי סוגיהם:

- הגיאומטריה של התחום (המבנה, נפח הבקרה וכו') בו מבצעים את החישוב.
- תנאי שפה או עמיסה משטחית: ערכים נתונים על השפה של המשתנים הראשיים של הבעיה או חלקם (לדוגמה, טמפרטורות נתונות בבעיית הולכת חום או תוזות נתונות בבעיה אלסטית), או של "שטף" משטחי הבעיה או חלקם (לדוגמה, שטף-חום נתון או עומס לחץ נתון).
- עמיסה נפחית: ערכים נתונים בתחום החישובי של העומס הנפחי (או "כוחות גוף", כדוגמת כוחות אינרציאליים או צנטרפוגליים).
- בבעיות תלויות זמן: תנאי התחלה הנתונים בתחום (לדוגמה, הטמפרטורה ההתחלתית או התוזות ההתחלתיות).
- תכונות החומר: נתונים אלו מופיעים כמקדמים במשוואות הדיפרנציאליות ובאופרטורים של תנאי השפה.

ישנם נתונים נוספים שאינם שייכים לקטגוריות הנ"ל, אך הם אינם רלוונטיים לצורך הדיון הנוכחי.

כאשר בונים את המודל ומספקים את נתוני הגיאומטריה, תנאי השפה, העומס הנפחי, תנאי ההתחלה ותכונות החומר, הדבר כרוך לעיתים בשגיאת ייצוג. לדוגמה, נניח שאנו בונים מודל של טבלה אלסטית שטוחה עגולה ומשתמשים באלמנטים סופיים משולשים או מרובעים בעלי צלעות ישירות. השפה במודל שלנו תהיה מורכבת מקטעים ישירים (צלעות האלמנטים הנושקים לשפה), ופירושו הדבר שאנו מייצגים את השפה האמיתית, העגולה, בצורה מקורבת ע"י פוליגון. ראו איור 1.

כדוגמה נוספת נסתכל על טבלה מלבנית העשויה מחומר מסויים שמכילה גרעין (אינקלוזיה) אליפטי העשוי מחומר שני, קשיח יותר. (מצב כזה טיפוסי, למשל, לאנליזה של תא ייצוגי בחומר מרוכב.) נניח שאנו משתמשים באלמנטים סופיים משולשים ומרובעים סטנדרטיים. לכל אלמנט יש