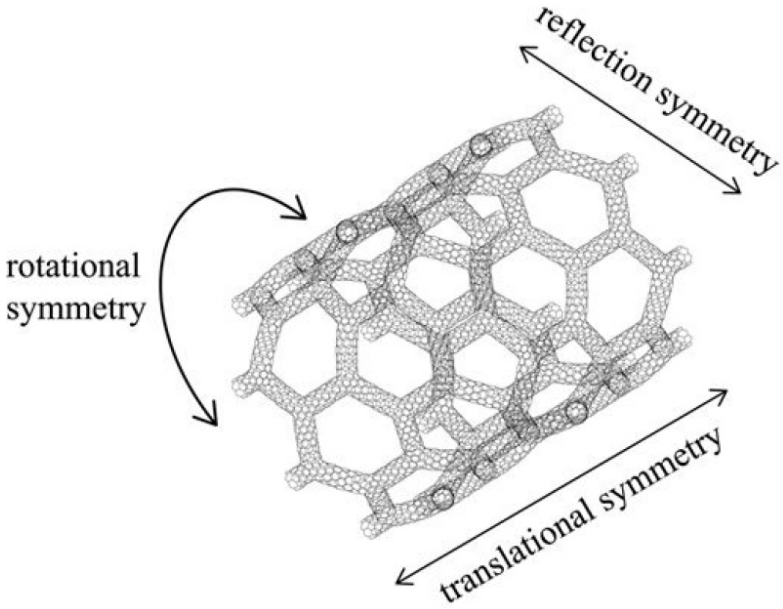
Hessisches Kompetenzzentrum
für Hochleistungsrechnen

Simulation von Kohlenstoffnanoröhrchen



Simulation von Kohlenstoffnanoröhrchen.

Researchers
C. Schröppel, J. Wackerfuß and Prof. Dr. Christian Bischof

Principal Investigator
Michael Burger

Project Term
2013 - 2016

Project Areas
Materials Engineering

Clusters
Lichtenberg Cluster Darmstadt, Linux Cluster Kassel

Institute
Fachgebiet Bauingenieur- und Umweltingenieurwesen, Institute of Scientific Computing

University
Technische Universität Darmstadt, University Kassel

Introduction

Kohlenstoffnanoröhren (englisch: carbon nanotubes, CNTs) besitzen eine Vielzahl interessanter mechanischer Eigenschaften, insbesondere eine hohe Zugfestigkeit bei niedrigem Gewicht. Dies ermöglicht die Konstruktion neuartiger, reißfester Fasern, die unter anderem in Komposit-Werkstoffen verwendet werden [1]. An Flugzeugen des Herstellers Lockheed werden durch CNTs verstärke Materialien bereits eingesetzt [2]. Fügt man „normale“ CNTs zu Strukturen höherer Ordnung zusammen, so erhält man Strukturen, die wiederum die Form eines Röhrchens haben und super carbon nanotubes (SCNTs) genannt werden, [3] (siehe Abbildung). Besonders charakteristisch für SCNT-Strukturen sind ihre hohe topologische und geometrische Symmetrie, Hierarchie und Selbstähnlichkeit. Im Rahmen der Kooperation werden die mechanischen Charakteristika von SCNT-Strukturen mittels Simulation untersucht. Zum Aufgabenbereich zählen die Klärung methodischer Fragen, darunter das Ausnutzen von Symmetrieeigenschaften für die Erarbeitung effizienter Berechnungsalgorithmen. Unser Framework simuliert mechanische Belastungen auf Kohlenstoffnanoröhren.

Methods

Die SCNTs werden mittels eines graphen-algebraischen Algorithmus konstruiert [4]. Die Identifizierung der Knoten durch Tupel anstelle sequenzieller Indizes erlaubt es, unmittelbar

JUSTUS-LIEBIG-UNIVERSITÄT GIESSEN
TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT
UNIKASSEL VERSITÄT
Philipps Universität Marburg

Informationen über die Symmetrie und Hierarchie einer Struktur zu kodieren. Für geometrisch symmetrische Konfigurationen lassen sich hieraus auch unmittelbar Aussagen über die Geometrie ableiten. Zum Lösen des im Rahmen eines atomistischen Finite-Elemente-Verfahrens (AFEM, Wackerfuß) [5] auftretenden Gleichungssystems wird ein präkonditioniertes Verfahren der konjugierten Gradienten eingesetzt.

Results

Unser Algorithmus vermeidet die Konstruktion der Steifigkeitsmatrix, berechnet das benötigte Matrix-Vektor-Produkt mittels eines Matrix-freien Operators [6] und führt zu einem erheblich geringeren Speicherbedarf. Hiermit trägt der Algorithmus einem seit einigen Jahren zu beobachtenden Entwicklungstrend im Hochleistungsrechner-Bereich Rechnung: Speicherbandbreite und Latenzzeiten halten nicht Schritt mit der Steigerung der Rechenleistung der Prozessoren. Dieser Trend wird sich auch in Zukunft fortsetzen und eventuell verstärken. Durch Ausnutzung der verschiedenen Arten von Symmetrie innerhalb der Röhrchen wird die Menge der anfallenden Berechnungen bei der Simulation kleiner Deformationen drastisch reduziert [7]. Eine Parallelisierung nach dem OpenMP-Standard sowie eine Vektorisierung von Kernbereichen der Berechnung erlaubte eine weitere Reduzierung der Berechnungszeit und wies eine gute Skalierungscharakteristik auf.

Outlook

Die bisherigen Ergebnisse sind vielversprechend; weitere Entwicklungen sollen vor allem die Skalierbarkeit des Frameworks verbessern und somit die Gesamtlaufzeit weiter reduzieren. Die Selbstähnlichkeiten der SCNT-Strukturen sollen ebenfalls im Fokus der weiteren Forschung stehen.

Reference

[1] M.F. Yu , B.S. Files , S. Arepalli , and R.S. Ruoff (2000), Tensile Loading of Ropes of Single Wall Carbon Nanotubes and their Mechanical Properties. In: Phys. Rev. Lett. 84: 5552–5555.

[2] URL: https://www.flightglobal.com/news/articles/lockheed-martin-reveals-f-35-to-feature-nanocomposite-357223/

[3] V.R. Coluci , D.S. Galvao, and A. Jorio (2006), Geometric and electronic structure of carbon nanotube networks: 'super'-carbon nanotubes. In: Nanotechnology 17 (2006), Nr. 3: 617.

[4] C. Schröppel, and J. Wackerfuß (2012), Algebraic graph theory and its applications for mesh generation. PAMM12, 1: 663–664.

[5] J. Wackerfuß (2009), Molecular mechanics in the context of the finite element method. In: International Journal for Numerical Methods in Engineering 77, 7: 969–997.

[6] M. Burger, C. Bischof, C Schröppel, and J. Wackerfuß (2015, submitted), A unified and memory efficient framework for simulating carbon nanotubes. Proc. International Conference on Computational Science.

[7] M. Burger, C. Bischof, C. Schröppel, and J. Wackerfuß (2015, submitted), Exploiting structural properties during carbon nanotube simulation. Proc. International Conference on Computational Science and Its Applications.

Last Update: 2022-06-17 22:08