

[文章编号] 1001-246X(2008)06-0718-07

并行化光滑分子动力学方法及其与分子动力学的耦合

王汉奎, 张 雄, 刘 岩

(清华大学航天航空学院, 北京 100084)

[摘 要] 提出光滑分子动力学方法(SMD)的并行化计算方法, 编制光滑分子动力学以及光滑分子动力学-分子动力学(SMD-MD)耦合的并行程序, 并分析铜纳米单晶的单向拉伸和带裂纹板的拉伸问题. 光滑分子动力学在分子动力学基础上引入背景网格, 在背景网格点上求解运动方程, 由此将控制MD临界时间步长的因素化为背景网格单元尺寸, 扩大可用的时间积分步长, 缩短总计算时间. 通过单晶拉伸和带裂纹板拉伸等较大规模问题的计算, 验证方法的正确性. 与传统分子动力学相比, SMD和SMD-MD耦合方法可以节约计算时间.

[关键词] 光滑分子动力学; 并行处理; 多尺度计算; 多时间步

[中图分类号] O346.1

[文献标识码] A

0 引言

计算机硬件的发展和算法的不断优化, 使得大规模仿真成为可能. 自上世纪60年代^[1]以来, 分子动力学逐渐成为计算物理学、计算材料学和计算力学中广泛使用的一种方法. 分子动力学模拟不受实验条件限制, 可以得到实验无法测量的数据, 可以从微观角度考查物理量的变化. 但受计算机存储和计算速度的限制, 分子动力学可以模拟的空间尺度和时间尺度都很小. 分子动力学模拟中大多数原子在做高频热振动, 为使计算不发散, 计算时间步长受系统最小振动周期限制, 大多取fs(10^{-15} s)量级. 即使计算上百万步, 也只能模拟ns(10^{-9} s)级现象, 与常规实验相去甚远. 并且计算时间越长, 计算累积误差越大, 计算结果的可信度就会下降. 即使采用高性能计算机, 分子动力学可以计算的空间尺度和时间尺度也是很有限制的.

1 光滑分子动力学

经典分子动力学是将组成系统的微观粒子(原子)视为经典粒子, 粒子与粒子间相互作用由原子势函数确定, 每个粒子服从牛顿运动定律, 求解每个粒子的运动方程, 进而得出整个粒子构成系统的一些物理量随时间的变化. 分子动力学的时间积分步长通常取 $10^{-15} \sim 10^{-14}$ s. 受计算机计算能力的限制, 分子动力学模拟的时间尺度在10 ns以下.

光滑分子动力学采用了物质点法^[4,5]的求解格式. 物质点法是将连续体离散为一系列物质点, 物质点携带了密度、速度和应力等各种物理量, 并根据所受的外力和内力在背景网格中运动. 在每一时间步, 首先建立背景网格, 将背景网格与物质点固连, 物质信息映射到背景网格并在背景网格上求解运动方程; 然后将求解结果映射回物质点, 得到下一时刻物质点信息. 物质点法的临界时间步长由背景网格大小决定, 克服了有限元中网格畸变引起的时间步长减小的问题, 适用于冲击、碰撞和爆炸等过程的数值模拟.

光滑分子动力学^[6,7](SMD)是在分子动力学(MD)的基础上引入背景网格(图1), 将分子动力学中的原子看作是物质点法中的物质点. 在进行时间积分时, 首先将原子信息映射到背景网格, 在背景网格上求解动量方程, 然后将更新后的背景网格信息映射回原子, 更新原子信息, 完成一时间步计算. 分子动力学积分的临界时间步长由系统的最小周期决定, 而光滑分子动力学引入背景网格, 在背景网格上积分, 相当于光滑了系统中高频分量, 临界时间步长由背景网格大小决定.

[收稿日期] 2007-02-07; [修回日期] 2008-01-25

[基金项目] 国家自然科学基金(10672088)、国家重点基础研究发展计划(2004CB619304)和新世纪优秀人才支持计划(NCET-04-0091)资助项目

[作者简介] 王汉奎(1982-), 男, 山西忻州, 博士生, 从事多尺度计算方面的研究.

对背景网格的选取没有限制, 为计算方便多取规则网格, 本文算例中均取 8 节点立方体网格. 每一时间步求解前, 首先建立背景网格, 新建立的背景网格在每一时间步中与当前构形固连, 原子与背景网格节点映射由有限元形函数 $N(\mathbf{r}_k)$ 来完成. 原子点速度、加速度可由节点的速度、加速度近似表示为

$$\dot{\mathbf{r}}_k = \sum_{I=1}^{N_p} N_I(\mathbf{r}_k) \cdot \dot{\mathbf{r}}^I, \quad (1)$$

$$\ddot{\mathbf{r}}_k = \sum_{I=1}^{N_p} N_I(\mathbf{r}_k) \cdot \ddot{\mathbf{r}}^I, \quad (2)$$

其中 $\dot{\mathbf{r}}_k, \ddot{\mathbf{r}}_k$ 表示原子 k 的速度和加速度, $\dot{\mathbf{r}}^I, \ddot{\mathbf{r}}^I$ 表示节点 I 的速度和加速度, $N_I(\mathbf{r}_k)$ 为原子 k 对背景网格节点 I 的形函数, N_p 为节点总数, N_a 为原子总数. 分子动力学中原子的运动方程为

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{F}_i, \quad (3)$$

将原子运动方程映射到网格节点, 建立节点运动方程

$$\sum_{i=1}^{N_a} N_J(\mathbf{r}_i) m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \sum_{i=1}^{N_a} N_J(\mathbf{r}_i) \mathbf{F}_i, \quad (4)$$

将近似方程(2)代入式(3), 得

$$\sum_{I=1}^{N_p} M_{JI} \ddot{\mathbf{r}}_I = \mathbf{F}_J, \quad (5)$$

其中

$$\mathbf{F}_J = \sum_{i=1}^{N_a} N_J(\mathbf{r}_i) \mathbf{F}_i, \quad (6)$$

$$M_{JI} = \sum_{i=1}^{N_a} N_J(\mathbf{r}_i) m_i N_I(\mathbf{r}_i). \quad (7)$$

对方程(7)取集中质量阵并进行时间积分, 得到下一时间步节点信息, 再由建立在背景网格上的形函数映射得到原子信息. 在进行下一步更新时, 将当前网格丢弃, 重新使用上一步的规则网格, 并计算映射矩阵 N .

2 并行化

光滑分子动力学是基于处理单个原子的运动, 当原子数量达到一定规模时, 单机的计算能力和存储量很难满足要求, 并行处理是一种行之有效的方法.

本文中并行策略采用区域分解法, 即将所求解的区域按处理器个数分解成小求解区域, 每个处理器负责处理一个区域内所有的信息. 每个处理器既要处理区域内部原子信息, 也要处理网格节点信息.

对原子信息部分的处理参考分子动力学并行化^[13], 这方面已比较成熟^[9-11] (图 2).

对每块小区域分布相同的背景网格 ($N_x \times N_y \times N_z$), 采用 6 面体网格, 网格内原子信息的计算只依赖原子所处网格的 8 个节点信息. 在不同区域交界面附近设置重叠网格, 重叠网格的节点信息要与相邻区域通信后才可以正确得出.

每步计算中, 网格部分每步信息更新均须完成在三个方向 (x, y, z) 上的六次通信, 通信总量为 $K(2N_x N_y + 2N_y N_z + 2N_x N_z)$, 其中 K 为应参与信息交换边界网格的层数, $K = L_m / L_c$, L_m 为网格大小, L_c 为原子势的截断半径.

对照分子动力学及物质点法的积分过程, 光滑分子动力学的积分步骤如下:

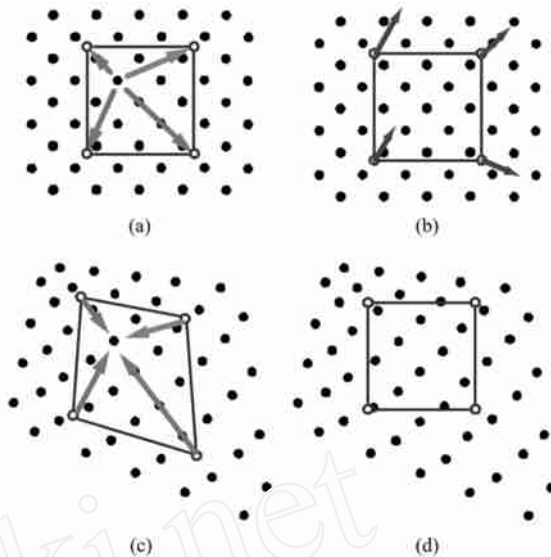


图 1 光滑分子动力学

Fig. 1 Smoothed molecular method

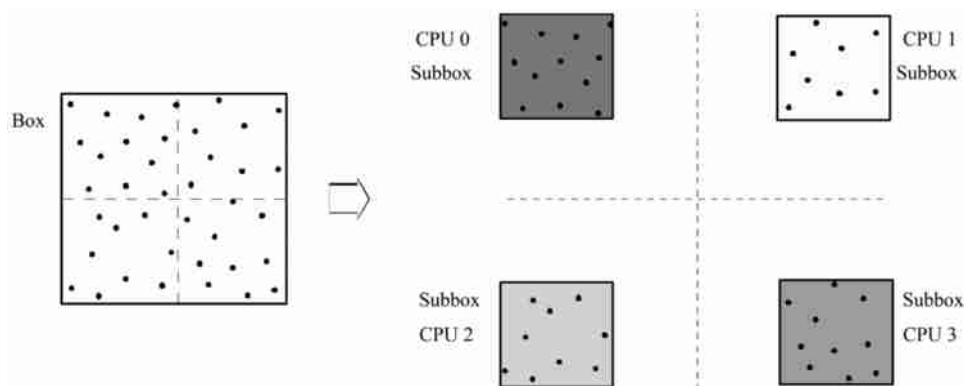


图 2 原子部分的并行化

Fig. 2 Parallel of atoms

预处理. 布置背景网格, 并由原子位置计算映射矩阵 N ;

利用背景网格, 将原子信息映射到背景网格;

不同处理器间通信, 更新重叠网格节点信息;

对方程(5)时间积分, 得 $t + t/2$ 节点信息, 将 $t + t/2$ 时刻节点加速度、速度映射到原子, 得 a_i^* , v_i^* , 更新原子信息

$$v_i(t + \frac{t}{2}) = v_i(t) + \frac{t}{2} a_i^*, \quad (8)$$

$$x_i(t + t) = x_i(t) + t v_i^*; \quad (9)$$

由原子(分子)势函数计算新构形下原子力 $F_i(t + t)$, 并将原子信息映射到背景网格, 对方程(5)时间积分, 得 $t + t$ 时刻节点信息, 将 $t + t$ 时刻节点加速度映射到原子, 得 a_i^{**} , 更新原子信息

$$v_i(t + t) = v_i(t + \frac{t}{2}) + \frac{t}{2} a_i^{**}. \quad (10)$$

光滑分子动力学并行化基于分子动力学并行化, 除原子信息交换要通信外, 背景网格也需要通信, 光滑分子动力学并行效率比分子动力学并行效率低. 网格越密, 由于网格带来的通信量也越大, 并行效率也越低.

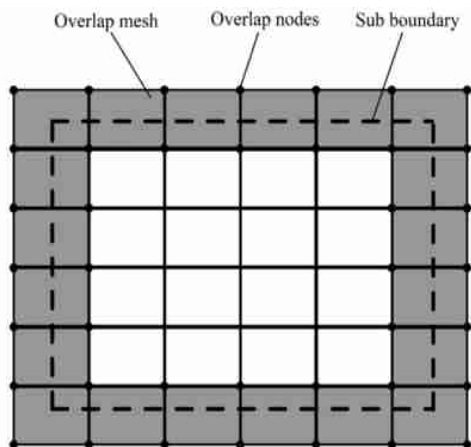


图 3 网格部分并行化

Fig. 3 Parallel of meshes

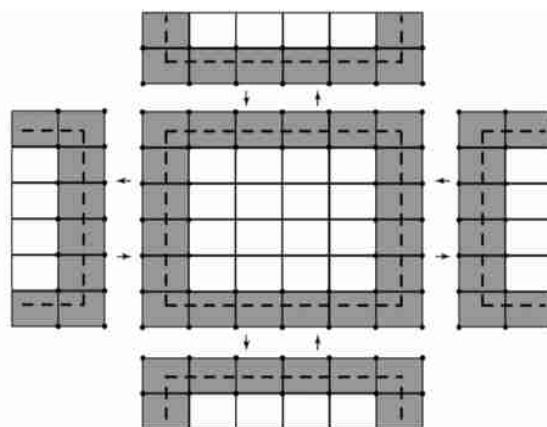


图 4 信息交换

Fig. 4 Data exchange

3 MD 与 SMD 耦合

采用 SMD 计算, 可以增大计算时间步以减少总计算时间, 但对于模拟某些现象如位错发生、相变等, 还需保留分子间相对运动的高频分量. 在这种情况下, 可采用 SMD 与 MD 耦合的方法.

SMD 与 MD 都基于原子(分子)计算,在同一空间尺度. SMD 采用的时间步大,MD 采用的时间步小,通常取 SMD 时间步长 $\Delta t(SMD)$ 为 MD 时间步长 $\Delta t(MD)$ 的 N 倍(N 为正整数). 积分过程如图 5 所示.

SMD 区每更新一步,MD 区要更新 N 步. 在 MD 区更新 N 步的过程中,与 SMD 区相邻部分原子计算力时需要 SMD 区一些原子的中间步的信息,这些中间步信息可由前后两步 SMD 信息线性插值得出,

$$x_{n+[k]} = x_n + k \frac{x_{n+1} - x_n}{N}, \tag{11}$$

式中 $x_{n+[k]}$ 为 I 区原子在 $n + kt$ 时刻信息, x_n 为原子在 n 时刻信息, x_{n+1} 为原子在 $(n + 1)$ 时刻信息. 在 SMD 与 MD 耦合计算中,背景网格布满整个模拟区域,如图 6 所示. 在 SMD 区划分出与 MD 区相邻的一层网格 I, I 内原子积分时间步长是 $\Delta t(SMD)$, I 内原子插值计算出每 $\Delta t(MD)$ 时间步的信息,用于 MD 区计算. MD 区每 N 步计算一次耦合界面网格节点信息.

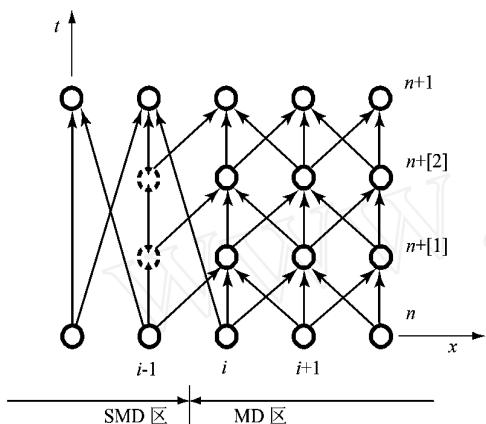


图 5 多时间步耦合

Fig. 5 Multiple time step coupling

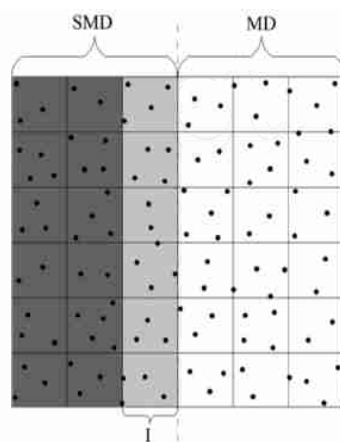


图 6 SMD 与 MD 区耦合

Fig. 6 Coupling of SMD and MD

SMD-MD 耦合的并行化在 SMD 并行化的基础上进行, SMD 与 MD 不同的只是积分方式及积分的时间步长. SMD 与 MD 耦合,除 SMD 区线性插值外,并没有引入其它计算. 而线性插值的计算不需要不同处理器间通信. SMD-MD 耦合的并行化方式可以完全采用 SMD 并行化方式,只是其中的一部分区域积分方式采用传统 MD 积分,时间步长取 $\Delta t(MD)$.

算例结果中用到了原子应力,本文中采用 Virial 形式^[12]

$$i,kl = \frac{1}{V_i} \left[- \frac{p_{i,k} p_{i,l}}{m_i} + \frac{1}{2} \sum_j \left(\frac{\partial U_{total}}{\partial r_{ij}} \frac{r_{i,k} r_{j,l}}{r_{ij}} \right) \right]. \tag{12}$$

对于原子 i , i,kl 为原子 i 的应力张量, V_i 为原子 i 的体积, m_i 为原子 i 的质量, $p_{i,k}$ 为原子 i 的动量在 k 方向上的分量, $r_{ij,k}$ 为原子 i 到原子 j 矢量的 k 分量.

4 数值算例

4.1 铜纳米单晶的单向拉伸

分别用分子动力学(MD)与光滑分子动力学(SMD)对铜纳米单晶进行单向拉伸,比较不同方法计算得到的结果. 计算单晶铜在 $[010]$ (x)和 $[100]$ (y)方向取 $10 a_0$,在 $[001]$ (z)方向取 $64 a_0$. 原子总数为 29 327, 势函数采用 EAM 势,三个方向均为非周期边界条件. 首先用分子动力学将该构形弛豫 1 ns,然后在两端以恒定速度加载,拉伸应变率 $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$,初始温度为 10 K. MD 步长取 10 fs, SMD 步长取 160 fs 和 80 fs,并且 SMD 取三种不同网格进行计算,这三种不同网格将求解区域划分成 $2 \times 2 \times 12$, $5 \times 5 \times 30$ 及 $10 \times 10 \times 60$ 个单元. 应力应变曲线如图 7 所示.

在应变比较小(< 0.1)的情况下,应力与应变关系基本呈弹性, SMD 曲线与 MD 曲线吻合得较好. 由 SMD 计算出的应力应变曲线与由 MD 计算出的应力应变曲线几乎在同一应变下突变,之后曲线略有偏离.

SMD 与 MD 相比,在弹性阶段吻合的很好.在进入塑性阶段后,试件中有位错产生,但由于 SMD 的映射过程将原子尺度的位错信息进行了一定的光滑,不能够很好地反映这种变化,因此在进入塑性阶段后曲线出现偏离,可以通过 SMD 与 MD 耦合的办法来解决这一问题.相比 MD,SMD 对总计算时间有很大节约(见表 1),模拟同样长时间内的分子变化,SMD 所用时间约为 MD 时间的 $1/N$.

表 1 计算时间

Table 1 Computing time

方法	时间步长/fs	总时间步	总计算时间/s
MD	10	34 560	4 912.55
SMD(2 × 2 × 12)	160	2 160	345.1
SMD(5 × 5 × 30)	160	2 160	355.4
SMD(10 × 10 × 60)	80	4 320	625.2

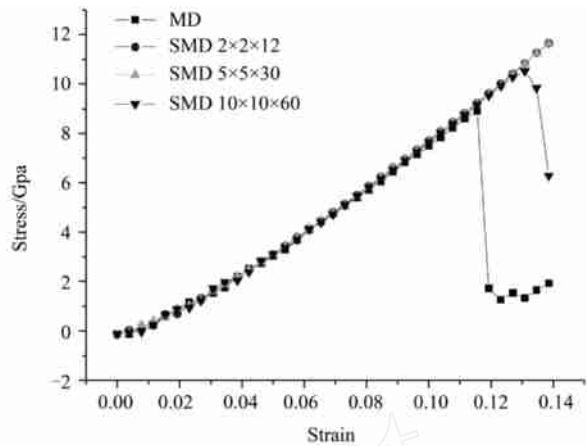


图 7 单晶铜的应力应变曲线

Fig. 7 Stress-strain curve of single-crystal copper

4.2 带裂纹板的拉伸

本算例采用 MD-SMD 耦合的方式求解,如图 8 所示.试件材料为铜,在模拟区域中部采用 MD 区,两侧采用 SMD 区,MD 区占总区域的 35%.沿 $[100](x)$, $[010](y)$, $[001](z)$ 方向的各边边长分别为 $180 a_0$, $404 a_0$, $4 a_0$,原子总数为 1 168 196 个.在结构的正中间,开有一长为 $60 a_0$ 的裂纹,占总宽度的 $1/3$. x, y 方向为自由边界, z 方向为周期边界,在 y 方向两端 ($2 a_0$) 原子施加方向相反的恒定速度 v (10 m s^{-1}).采用 MD-SMD 耦合计算,背景网格数为 $24 \times 60 \times 1$.平均网格大小为 $2.7 \times 2.4 \times 1.4 \text{ nm}^3$.在 SMD 区,平均一个网格内有 811 个原子,MD 区时间步长为 10 fs,SMD 区时间步长为 MD 区的 10 倍,即 100 fs,初始温度为 10 K,整个加载过程 0.4 ns.比较在 $\epsilon = 0.038$ 时 y 方向的正应力 σ_{yy} (图 9)和剪应力 τ_{xy} (图 10)及裂纹长度随应变的变化曲线(图 11),可以看出,SMD-MD 耦合计算与 MD 计算比较,

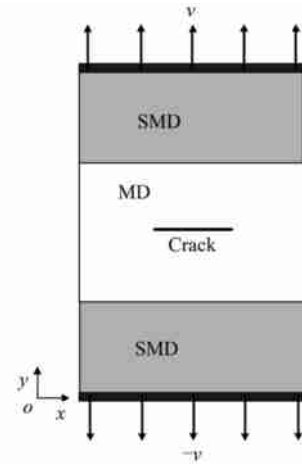


图 8 MD - SMD 耦合

Fig. 8 Coupling of MD and SMD

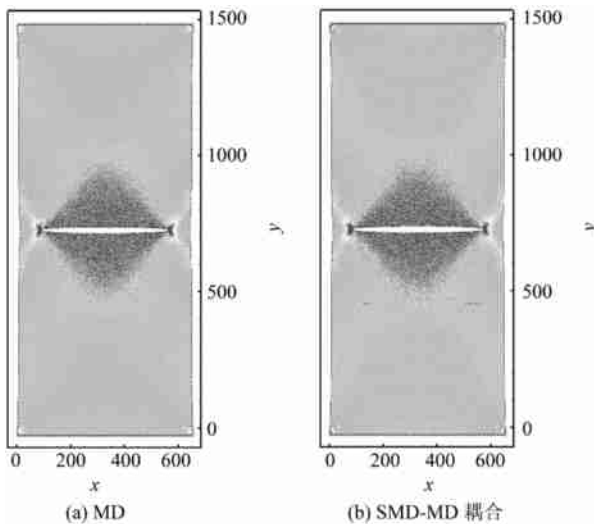


图 9 正应力结果

Fig. 9 Normal stress

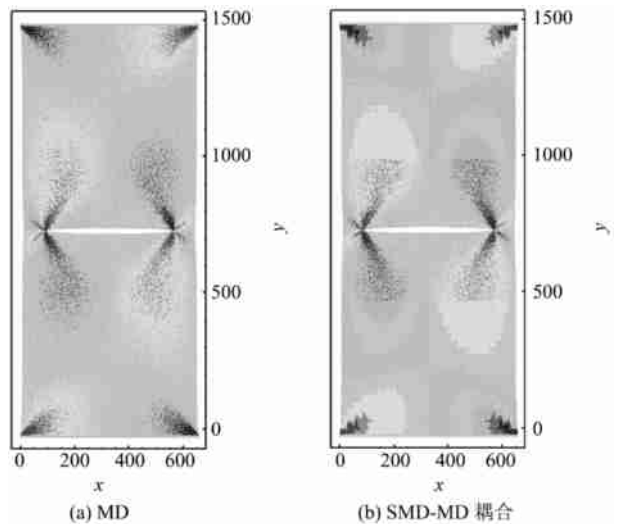


图 10 剪应力 τ_{xy} 结果

Fig. 10 Shear stress

应变 - 裂纹长度曲线吻合的很好,剪应力、正应力符合的也比较好. MD 结果由于高频分量得到了保留,应力云图过渡较为平滑;SMD-MD 耦合计算结果在 SMD 区应力经过背景网格的光滑化,不同应力层次间轮廓较为清晰. 正应力与剪应力云图在两个不同方法计算区域表现出了很好的连续性. 但正应力在 SMD-MD 耦合界面处偏大,可能是耦合方法不完善造成,耦合方法有待进一步改进. 使用四进程并行计算,SMD-MD 耦合方法的总计算时间只有 MD 总计算时间的 49.5%. 图 12 为使用不同数量的处理器完成计算所用时间,分子动力学计算并行效率为 88%,耦合计算的并行效率为 82%.

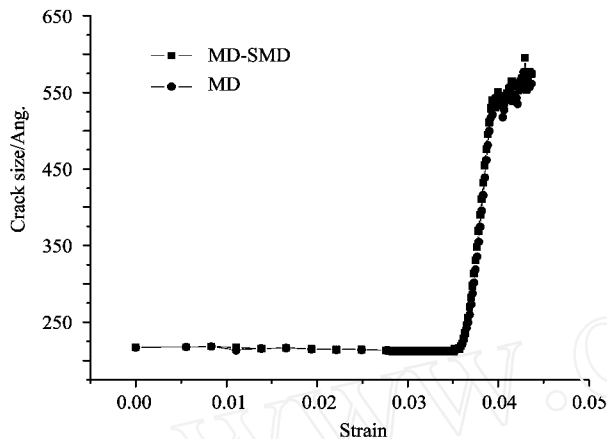


图 11 应变-裂纹长度曲线

Fig. 11 Strain-crack size

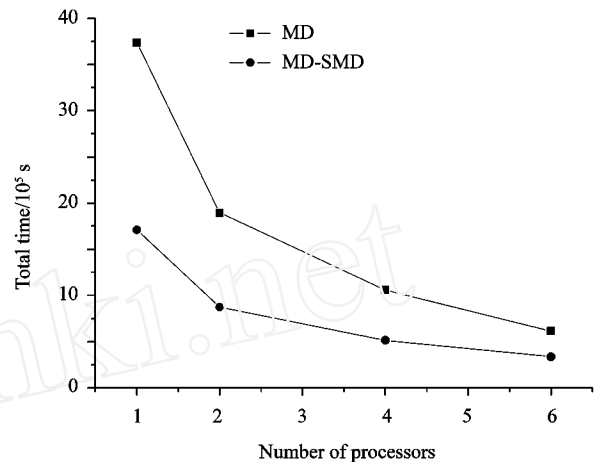


图 12 计算时间

Fig. 12 Computing time

以上算例均在自行搭建的并行环境上计算完成,该并行环境是基于 PC 的集群系统,处理器为 AMD 3800+,网络为千兆以太网;采用 Linux 操作系统及 MPICH 库.

5 结论

本文发展了光滑分子动力学的并行化计算方法.光滑分子动力学通过滤掉系统中的高频分量,显著地扩大计算时间步长.与传统分子动力学相比,减少了总计算时间,通过并行化扩大了模拟的空间尺度.用纳米单晶单向拉伸和带裂纹板拉伸算例进行验证.纳米单晶拉伸 SMD 结果与 MD 结果比较,在弹性阶段完全吻合,而且也能很好地捕捉到屈服点.进入塑性阶段后,SMD 由于滤掉了分子间相对运动的高频分量,不能很好地反映屈服行为,这可以通过 SMD-MD 耦合的办法解决.用耦合方法计算了带裂纹板的拉伸,在裂纹周围 35% 的区域由 MD 计算,其余部分用 SMD. SMD-MD 耦合计算的时间只有传统全部用 MD 计算时间的 49.5%,计算结果基本符合,两种方法得出的剪应力结果一致而且很平滑地通过交界区;正应力结果大体一致,但在耦合界面处偏大.这可能是耦合方法不完善造成,在今后工作中进一步改进耦合计算方法.光滑分子动力学通过并行化,可以在空间尺度上处理大规模问题,通过与 MD 耦合,可以保留分子动力学优点,同时,缩短总计算时间.

[参 考 文 献]

- [1] Alder B J, Wainwright T E. Phase transition for a hard sphere system[J]. The Journal of Chemical Physics, 1957, 27:1208 - 1209.
- [2] Park H S, Liu W K. An introduction and tutorial on multiple - scale analysis in solids[J]. Comput Methods Appl Mech Engrg, 2004, 193: 1733 - 1772.
- [3] Curtin W A, Miller R E. Atomistic/continuum coupling in computational materials science[J]. Modelling Simul Mater Sci Eng, 2003, 11: R33 - R68.
- [4] Sulsky D, Chen Z, Schreyer H L. A particle method for history dependent materials[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1994, 118: 179 - 196.
- [5] Zhang X, Sze K Y, Ma S. An explicit material point finite element method for hyper velocity impact[J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2006, 66: 689 - 706.

- [6] Liu Y, Zhang X, Sze K Y, et al. Smoothed molecular dynamics for large step time integration[J]. Journal of Computational Physics, in review.
- [7] 刘岩. 微纳米部件力学行为的无网格法研究[博士学位][D]. 北京:清华大学, 2006.
- [8] Swope W C, Anderson H C, Berens P H, et al. A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: application to small water cluster[J]. Journal of Chemical Physics, 1982, **76**:637 - 649.
- [9] Vashishta P, Kalia R K, Nakano A. Multimillion atom molecular dynamics simulations of nanostructures on parallel computers[J]. Journal of Nanoparticle Research, 2003 **5** (1 - 2): 119 - 135.
- [10] Kadau K, Germann T C, Lomdahl P S. Large scale molecular-dynamics simulation of 19 billion particles[J]. International Journal of Modern Physics C, 2004, **15** (1): 193 - 201.
- [11] Buehler MJ, Hartmaier A, Gao H J, Duchaineau M, Abraham F F. Atomic plasticity: description and analysis of a one billion atom simulation of ductile materials failure[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2004, **193** (48 - 51): 5257 - 5282.
- [12] Schitz J, Vegge T, Tolla F D, et al. Atomic scale simulations of the mechanical deformation of nanocrystalline metals[J]. Physical Review B, 1990, **60**:11971 - 11983.
- [13] Steve Plimpton. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics[J]. Journal of Computational Physics, 1995, **117**:1 - 19.

Parallel Smoothed Molecular Dynamics Method and Coupling with Molecular Dynamics

WANG Hankui, ZHANG Xiong, LIU Yan

(School of Aerospace, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: A parallel smoothed molecular dynamics(SMD) method is proposed. Parallel programs with SMD and SMDMD coupling are developed for loading problems of a plate with a crack and a nano single crystal copper beam subjected to remote tensile. With traditional molecular dynamics, smoothed molecular dynamics method introduces fixed background mesh and solves motion equations. Critical time step in SMD is controlled by background grid size and could be enlarged to save simulation time. Results are in agreement with those of traditional molecular dynamics. Compared with traditional MD simulation, SMD and SMDMD coupling methods save computing time.

Key words: smoothed molecular dynamics; parallel processing; multiscale computation; multiple time step