



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 41 за 2014 г.



Подрыга В.О., Поляков С.В.

Молекулярно-динамическое  
моделирование процесса  
установления  
термодинамического  
равновесия нагретого  
никеля

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Подрыга В.О., Поляков С.В. Молекулярно-динамическое моделирование процесса установления термодинамического равновесия нагретого никеля // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2014. № 41. 20 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2014-41>

**Ордена Ленина  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ  
имени М.В.Келдыша  
Российской академии наук**

**В.О. Подрыга, С.В. Поляков**

**Молекулярно-динамическое  
моделирование процесса установления  
термодинамического равновесия  
нагретого никеля**

**Москва — 2014**

## **Подрыга В.О., Поляков С.В.**

Молекулярно-динамическое моделирование процесса установления термодинамического равновесия нагретого никеля

Данная работа посвящена молекулярно-динамическому моделированию процессов теплового воздействия на металлический образец, состоящий из атомов никеля. Для решения данной проблемы используется непрерывная математическая модель на основе уравнений классической механики Ньютона, выбран численный метод, использующий в своей основе схему Верле, предложен параллельный алгоритм и выполнена его реализация в рамках технологий MPI и OpenMP. С помощью разработанной программы выполнено исследование процесса установления термодинамического равновесия атомов никеля при нагреве образца до заданной температуры. В численных экспериментах определены как оптимальные параметры методики расчета, так и физические параметры моделируемого процесса. Полученные численные результаты хорошо согласуются с известными теоретическими и экспериментальными данными.

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, никель, потенциал погруженного атома, температура, термостат

## **Victoria Olegovna Podryga, Sergey Vladimirovich Polyakov**

Molecular dynamic simulation of thermodynamic equilibrium problem for heated nickel

This work is devoted to molecular dynamic modeling of the thermal impact processes on the metal sample consisting of nickel atoms. For the decision of this problem the continuous mathematical model on the basis of the classical Newton mechanics equations is used, the numerical method using in the basis the Verlet scheme is chosen, the parallel algorithm is offered and its realization within the MPI and OpenMP technologies is executed. By means of the developed parallel program the investigation of thermodynamic equilibrium of nickel atoms system under the conditions of heating a sample to desired temperature was executed. In numerical experiments both optimum parameters of a calculation procedure, and physical parameters of analyzed process are defined. The received numerical results are well corresponding to known theoretical and experimental data.

**Key words:** molecular dynamics, nickel, EAM, temperature, thermostat

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 13-01-12073- офи\_м.

## 1. Введение

Современная вычислительная техника позволяет моделировать очень сложные системы и процессы. На современном этапе необходимость моделирования сложных систем возникает во многих отраслях знания, в том числе, в рамках внедрения нанотехнологий в промышленности. Изучение микро- и нанопроцессов в конечном итоге приводит к задачам динамики молекулярных систем большой размерности с большим набором неопределенных параметров и разнообразных условий, имитирующих физический эксперимент. В связи с этим в последние десятилетия активно развиваются различные подходы к моделированию больших систем на молекулярном уровне.

Одним из наиболее эффективных подходов, имеющих важное фундаментальное и прикладное значение, является метод молекулярной динамики (МД) [1-4]. В основе метода МД лежит модельное представление о многоатомной молекулярной системе, в которой все атомы представляют собой материальные точки, временная эволюция системы взаимодействующих частиц отслеживается путем интегрирования их уравнений движения. Атомы или молекулы движутся по законам классической механики Ньютона.

Важными областями применения молекулярно-динамического моделирования являются проектирование, изготовление и эксплуатация различных технических систем, основа которых состоит из металлических элементов. Если говорить о современных вакуумных микроприборах, востребованных в нанотехнологиях, то особой популярностью в таких технических устройствах пользуются никель и его сплавы, составляющие основу антикоррозийных металлических покрытий.

В данной работе была поставлена задача разработать вычислительные основы и провести молекулярно-динамическое моделирование процессов теплового воздействия на образец, составленный из атомов никеля. Для решения задачи была выбрана соответствующая математическая модель, изучены необходимые методы моделирования в рамках подхода молекулярной динамики, создана расчетная параллельная программа, основанная на специально выбранных алгоритмах.

С помощью разработанной программы был проведен полномасштабный вычислительный эксперимент, целью которого было исследование процесса установления термодинамического равновесия атомов при нагреве образца до заданной температуры, определение оптимальных параметров применяемых алгоритмов нагрева. Полученные в расчетах результаты продемонстрировали адекватность предложенного численного подхода современным теоретическим представлениям о моделируемом физическом процессе.

Прикладное значение работы связано с разработкой в дальнейшем программного комплекса для моделирования процессов холодного сверхзвукового напыления наночастиц на поверхности материалов, используемых в электронике и медицине.

## 2. Математическая постановка

В классической молекулярной динамике исследуемая система представляется совокупностью взаимодействующих частиц, поведение которых описывается классическими уравнениями движения:

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = \vec{F}_i, \quad i=1, \dots, N, \quad (1)$$

где  $i$  – номер частицы,  $N$  – полное число атомов системы,  $m_i$  – масса частицы с номером  $i$  (в условиях данной задачи масса каждой частицы имеет одно значение, равное массе атома никеля),  $\vec{r}_i(r_x, r_y, r_z)$  – радиус-вектор  $i$ -ой частицы,  $\vec{F}_i(F_x, F_y, F_z)$  – суммарная сила, действующая на данную частицу.

Систему уравнений 2-ой степени (1) можно записать как систему уравнений 1-ой степени следующим образом:

$$\begin{cases} m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{F}_i, \\ \vec{v}_i = \frac{d\vec{r}_i}{dt}, \end{cases} \quad i=1, \dots, N, \quad (2)$$

где  $\vec{v}_i(v_x, v_y, v_z)$  – вектор скорости  $i$ -ой частицы.

Если система замкнута, то силы определяются только в виде взаимодействия  $i$ -ой частицы с остальными частицами и выражаются через градиент потенциальной энергии с обратным знаком, в случае присутствия внешнего воздействия на систему силы представляются собой сумму компоненты взаимодействия с окружающими частицами и компоненты, отвечающей за внешнее воздействие:

$$\vec{F}_i = -\frac{\partial U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)}{\partial \vec{r}_i} + \vec{F}_i^{ext}, \quad i=1, \dots, N, \quad (3)$$

где  $U$  – потенциальная энергия системы,  $\vec{F}_i^{ext}$  – сила взаимодействия с внешней средой.

В условиях данной задачи необходимо исследовать нагрев системы, для чего придется вводить тепло. Таким образом, система не является замкнутой, присутствует внешнее воздействие, позволяющее изменять температуру системы.

Потенциальная энергия системы представляется в виде суммы парциальных энергий, вычисление которых происходит по формуле выбранного потенциала взаимодействия.

В начальный момент времени  $t_0$  задаются координаты  $\vec{r}^0(r_x^0, r_y^0, r_z^0)$  и скорости  $\vec{v}^0(v_x^0, v_y^0, v_z^0)$  всех частиц, после чего решаются уравнения движения, на каждом шаге вычисляются силы, новые координаты и скорости частиц с учетом граничных условий и внешнего воздействия на систему, если оно есть.

Решение системы уравнений (2) проводится с помощью разностной схемы Верле [5]. Схема Верле в скоростной форме имеет следующий вид:

$$r^{n+1} = r^n + v^n \Delta t + \frac{F^n (\Delta t)^2}{m}, \quad (4)$$

$$v^{n+1} = v^n + \frac{F^{n+1} + F^n}{2m} \Delta t, \quad (5)$$

здесь  $\Delta t$  – шаг интегрирования (по времени),  $n$  – номер шага,  $F^{n+1}$  – значение силы на данном шаге, получаемое подстановкой рассчитанных по формуле (4) новых значений координат  $r^{n+1}$  в правую часть уравнений (3).

Кинетическая энергия системы  $E_K$  и кинетическая энергия теплового движения  $E_T$  вычисляются как суммы энергий каждой частицы следующим образом:

$$E_K = \sum_{i=1}^N ke_i, \quad E_T = \sum_{i=1}^N wke_i, \quad (6)$$

$$ke_i = \frac{m|\vec{v}_i|^2}{2}, \quad wke_i = \frac{m|\vec{v}_i - \vec{v}_m|^2}{2},$$

$$\vec{v}_m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{v}_i, \quad i=1, \dots, N, \quad (7)$$

где  $ke_i$  – кинетическая энергия частицы с номером  $i$ ,  $wke_i$  – тепловая кинетическая энергия частицы с номером  $i$ ,  $|\vec{v}_i|$  – длина вектора скорости  $i$ -ой частицы,  $\vec{v}_m$  – скорость центра масс системы.

Полная энергия системы  $E$  представляет собой сумму кинетической энергии системы и потенциальной энергии системы:

$$E = E_K + U. \quad (8)$$

В данной работе исследуется получение равновесного состояния рассматриваемого твердого тела (образца никеля) при определенной температуре. Таким образом, важным параметром для исследования является значение температуры образца. Температура  $T$  определяется следующим образом [6]:

$$T = \frac{2 \langle E_T \rangle}{3 k_b}, \quad (9)$$

$$\langle E_T \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{m |\vec{v}_i - \vec{v}_m|^2}{2}, \quad i=1, \dots, N, \quad (10)$$

где  $k_b$  – постоянная Больцмана.

Еще один не менее важный параметр – давление в системе, определяемое в трехмерной постановке задачи по соотношению (11).

$$PV = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^N m |\vec{v}_i - \vec{v}_m|^2 + \frac{1}{3} \sum_{i=1}^N \sum_{j>i} (\vec{r}_{ij} \cdot \vec{F}_{ij}), \quad i=1, \dots, N, \quad (11)$$

где  $V$  – объем рассматриваемой системы,  $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$ ,  $\vec{F}_{ij}$  – сила взаимодействия между  $i$ -ой и  $j$ -ой частицами.

### 3. Начальные и граничные условия

Начальные условия включают распределение координат частиц, которое имеет четкую структуру для твердых материй, и распределение скоростей, задаваемое согласно выбранной температуре моделирования.

При рассмотрении твердых тел мы имеем дело с кристаллами [7, 8]. Для описания правильной структуры кристаллов удобно использовать понятие кристаллической решетки. Правильное размещение частиц в кристалле можно описать с помощью операции параллельного перемещения, или трансляции.

Никель имеет кубическую гранцентрированную кристаллическую решетку (ГЦК) с параметром (ребром элементарной ячейки) при нормальных условиях (н.у.)  $rcr = 0.3524$  нм.

Рассматриваемая система представляет собой параллелепипед со сторонами  $Lx, Ly, Lz$ .

$\vec{L}(Lx, Ly, Lz) = \vec{k} \cdot rcr$  – размеры рассматриваемой области по осям  $x, y, z$  соответственно, где  $\vec{k}(k_x, k_y, k_z)$  – количество элементарных ячеек.

Таким образом, имеем параллелепипед из  $k_x \cdot k_y \cdot k_z$  кристаллов никеля.

Целью компьютерного моделирования является получение оценок поведения молекулярных систем, состоящих из большого числа частиц. При модельных расчетах ограничиваются рассмотрением характеристик области заданного объема при заданной плотности, для чего вводят молекулярно-динамическую ячейку и задают периодические условия на ее границах.

Суть метода заданного объема области заключается в том, что пространство разбивается на одинаковые ячейки, причем предполагается, что

содержимое ячеек одинаково и границы соприкасаются. При пересечении частицей границы одной ячейки, она попадает в другую, но это значит, что в первую с противоположной стороны попадает частица с такими же характеристиками. При расчете сил, действующих на частицы, учитывается влияние частиц из окружающих симметричных областей. Данный подход позволяет рассматривать большие объемы при малых фактических вычислениях, так как моделируется динамика лишь одной такой ячейки.

Для моделирования бесконечной области вдоль координатных осей  $x, y, z$  используются периодические граничные условия с периодами  $Lx, Ly, Lz$  соответственно:

$$\begin{aligned} r_x &\in [r_x^{\min}, r_x^{\min} + Lx), \\ r_y &\in [r_y^{\min}, r_y^{\min} + Ly), \\ r_z &\in [r_z^{\min}, r_z^{\min} + Lz), \end{aligned} \quad (12)$$

где  $(r_x^{\min}, r_y^{\min}, r_z^{\min})$  – начала отсчета координат по направлениям осей  $x, y, z$  соответственно.

В данной работе рассматривается динамика для образца никеля в трехмерной геометрии. Для моделирования образца бесконечных размеров вдоль координатных осей  $x, y$  и  $z$  наложим условия периодичности в направлении этих осей с периодами  $Lx, Ly, Lz$  соответственно.

С учетом поставленных граничных условий проведем расчет общего числа частиц. Решетка никеля гранецентрированная, что соответствует количеству частиц:  $N = N_1 + N_2$ , где  $N_1 = k_x k_y k_z$  – количество частиц в узлах решетки,  $N_2 = 3k_x k_y k_z$  – количество частиц в центрах граней решетки.

Таким образом, получаем общее количество частиц:

$$N = 4k_x k_y k_z. \quad (13)$$

Значения начальных векторов скоростей генерируются из распределения Максвелла, соответствующего необходимому значению температуры  $T$ , для задачи нахождения состояния релаксации системы за начальное возьмем значение, близкое к необходимому значению.

Компоненты вектора скорости  $\vec{v}(v_x, v_y, v_z)$  получаем с помощью преобразования Бокса-Мюллера следующим образом [9]:

$$\begin{aligned} v_x &= \sqrt{-2\sigma^2 \ln \xi_1} \cos(2\pi\xi_2), & v_y &= \sqrt{-2\sigma^2 \ln \xi_1} \sin(2\pi\xi_2), \\ v_z &= \sqrt{-2\sigma^2 \ln \xi_3} \cos(2\pi\xi_4), \end{aligned} \quad (14)$$



где переменные  $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4$  – случайные независимые переменные, равномерно распределенные в интервале  $(0,1]$ ,  $\sigma^2 = k_b T / m$  – параметр распределения.

Полученные значения проекций скоростей будут величинами независимыми и распределенными согласно распределению Максвелла с нулевым математическим ожиданием и стандартным отклонением, соответствующим значению параметра распределения  $\sigma$ .

#### 4. Потенциал взаимодействия

Потенциальная энергия представляется в виде функции, зависящей от координат рассматриваемых частиц и описывающей взаимодействие между частицами системы.

Выбор определенного вида потенциала взаимодействия основывается на сравнении механических свойств компьютерной модели потенциала и реального материала.

В металлах учет взаимодействия только с ближайшим соседом не достаточен из-за коллективизации электронов проводимости, оказывается необходимым учитывать во взаимодействии множество ближайших атомов в цепочке. Для корректного описания свойств твердого тела используют эмпирические многочастичные потенциалы.

В рамках рассматриваемой задачи выбрана модель взаимодействия, использующая потенциал погруженного атома (ППА) [10]:

$$U_i = \varpi(\rho_i) + \sum_{j>i} \mu(r_{ij}), \quad i=1, \dots, N, \quad j=1, \dots, N, \quad (15)$$

$$\rho_i = \sum_{k \neq i} f(r_{ik}), \quad k=1, \dots, N_i,$$

где  $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$  – расстояние между  $i$ -ой и  $j$ -ой частицами;  $\mu(r_{ij})$  – потенциал парного взаимодействия между  $i$ -ой и  $j$ -ой частицами;  $\varpi(\rho_i)$  – это энергия  $i$ -го атома за счет воздействия соседних  $k$  атомов,  $\rho_i$  – суммарная электронная плотность, создаваемая атомами системы, окружающими  $i$ -ую частицу;  $f(r_{ik})$  – это электронная плотность, создаваемая  $k$ -ым атомом в месте расположения  $i$ -ого атома,  $N_i$  – число атомов, находящихся в соседстве с  $i$ -ым атомом.

В качестве функции парного взаимодействия  $\mu(r_{ij})$  и функции плотности  $f(r_{ik})$  были выбраны формы, предложенные в работе [11]:

$$f(r) = \frac{f_e \exp(-\beta[r/r_e - 1])}{1 + (r/r_e - \lambda)^n}, \quad (16)$$

$$\mu(r) = \frac{A \exp(-\alpha[r/r_e - 1])}{1 + (r/r_e - k)^m} - \frac{B \exp(-\beta[r/r_e - 1])}{1 + (r/r_e - \lambda)^n},$$

где  $r_e$  – межатомное расстояние равновесия,  $f_e$  – параметр, зависящий от энергии когезии,  $A, B, \alpha$  и  $\beta$  – настраиваемые параметры,  $k$  и  $\lambda$  – два дополнительных параметра, отвечающие за обрезание действия потенциала.

Для описания функции погружения  $i$ -го атома  $\varpi(\rho_i)$  используются три уравнения в зависимости от величины электронной плотности:

$$\begin{aligned} \varpi(\rho) &= \sum_{i=0}^3 \varpi_{n_i} \left( \frac{\rho}{\rho_n} - 1 \right)^i, \quad \rho < \rho_n, \\ \varpi(\rho) &= \sum_{i=0}^3 \varpi_n \left( \frac{\rho}{\rho_e} - 1 \right)^i, \quad \rho_n \leq \rho < \rho_0, \\ \varpi(\rho_i) &= \varpi_e \left[ 1 - \ln \left( \frac{\rho}{\rho_s} \right)^\eta \right] \left( \frac{\rho}{\rho_s} \right)^\eta, \quad \rho_0 \leq \rho. \end{aligned} \quad (17)$$

Константы для никеля представлены в таблице 1.

Таблица 1

**Параметры потенциала**

$r_e$	$f_e$	$\rho_e$	$\rho_s$	$\alpha$	$\beta$
2.488746	2.007018	27.562015	27.93041	8.383453	4.471175
$A$	$B$	$k$	$\lambda$	$\varpi_{n_0}$	$\varpi_{n_1}$
0.429046	0.633531	0.443599	0.820658	-2.693513	-0.076445
$\varpi_{n_2}$	$\varpi_{n_3}$	$\varpi_0$	$\varpi_1$	$\varpi_2$	$\varpi_3$
0.241442	-2.735626	-2.7	0	0.26539	-0.152856
$\eta$	$\varpi_e$	$m$	$n$	$\rho_n$	$\rho_0$
0.469	-2.699486	20	20	$0.85 \rho_e$	$1.15 \rho_e$

При большом удалении частиц друг от друга значение энергии взаимодействия таких частиц становится мало. С целью оптимальности расчетов принято рассматривать потенциал (14) в заданной форме (15), (16) при условиях:

$$\mu(r \geq r_c) \equiv 0, \quad \rho(r \geq r_c) \equiv 0, \quad (18)$$

где  $r_c$  – расстояние дальнего действия потенциала, начиная с которого, значения  $\mu$  и  $\rho$  становятся настолько малы, что ими пренебрегают. В рамках данной задачи рассматривался никель, радиус был взят:  $r_c = 0.9$  нм.

## 5. Функции термостатирования

Для поддержания температуры системы вблизи заданного значения используют специальные алгоритмы – термостаты. Также термостаты используются для достижения необходимого значения температуры системы и для релаксации системы с целью обеспечения непрерывности МД расчетов на начальном этапе. При релаксации системы в случае установившегося термодинамического равновесия температура термостата и средняя температура молекулярной системы должны совпадать.

В данной работе для достижения желаемой температуры системы были рассмотрены термостат Берендсена и термостат Ланжевена.

Термостат Берендсена основан на введении в расчет знакопеременного трения. При моделировании взаимодействие с тепловым резервуаром не учитывается явным образом, а задается силой трения.

Отклонения температуры  $T$  от ее желаемого значения  $T_t$  корректируются согласно уравнению Ландау-Теллера [12]:

$$\frac{dT}{dt} = 2 \frac{T_t - T}{\tau_t}, \quad (19)$$

где  $T$  – текущее значение температуры (в момент времени  $t$ ),  $T_t$  – температура термостата,  $\tau_t$  – характерное время взаимодействия с резервуаром.

Отклонения температуры от желаемого значения экспоненциально убывают. Изменение кинетической энергии моделируется путем перемасштабирования скоростей атомов системы на каждом шаге [13]:

$$\lambda = \sqrt{1 + \frac{2\Delta t}{\tau_t} \left( \frac{T_t}{T(t-\Delta t)} - 1 \right)}, \quad (20)$$

где  $\lambda$  – коэффициент пересчета скоростей.

Термостат Ланжевена [14] основан на использовании уравнений движения броуновской динамики. Взаимодействие системы с тепловым резервуаром осуществляется через введение двух дополнительных компонент силы, включающих случайную силу  $\vec{F}_r$ , вызывающую нагрев частиц, и силы трения  $\vec{F}_f$  для компенсации температур и избежания перегрева частиц:

$$\vec{F}_r \sim N(0; \sigma_l^2), \quad \sigma_l^2 = \frac{2k_b T_l m}{\tau_l \Delta t}, \quad \vec{F}_f = -\frac{m(\vec{v} - \vec{v}_f)}{\tau_l}, \quad (21)$$

где  $\vec{F}_r$  должна иметь Гауссово распределение с дисперсией  $\sigma_l^2$ ,  $\vec{v}_f$  – вектор скорости потока частиц.

В результате рассмотрения разных значений параметра  $\tau_l$  определяется оптимальное время взаимодействия с резервуаром в условиях поставленной задачи, благодаря которому система достигнет равновесного состояния в более короткие периоды времени по сравнению с другими значениями данного параметра.

## 6. Программная реализация

Для реализации разработанного численного подхода использовалась концепция параллельного программирования, разработанная в [15]. Ее основу составляют принципы геометрического и функционального параллелизма [16]. В нашем случае это означает, что расчетная область в целом разбивается на локальные домены одинаковой мощности. Мощность домена измеряется в количестве элементарных боксов, в каждом из которых молекулы обязательно взаимодействуют друг с другом. Разбиение на домены производится в рамках топологии «трехмерная решетка», поскольку расчетная область является трехмерным параллелепипедом. Каждый расчетный домен попадает на свой вычислитель, в качестве которого используется узел кластера или суперкомпьютера. Распределение доменов по вычислителям реализовано с помощью библиотеки MPI [17].

Внутри узла (расчетного домена) оказывается некоторое количество элементарных боксов, сгруппированных в трехмерную подрешетку. Такая структура используется для дальнейшего распределения вычислений по трэдам центральных процессоров (ЦПУ) (а в дальнейшем – по вычислительным ядрам графических процессоров (ГПУ)), поскольку вычисления внутри боксов имеют более высокую интенсивность, чем между боксами. В итоге, межмолекулярные взаимодействия в боксах реализуются в параллельном режиме за счет использования технологии OpenMP [18] (а в дальнейшем с использованием CUDA Toolkit [19]).

Основной алгоритм расчета выглядит следующим образом:

1-ый этап – чтение исходных данных MPI-приложением и инициализация структур данных на каждом вычислителе;

2-ой этап – основные вычисления в цикле по времени;

3-ий этап – выполнение результирующих вычислений и деинициализация.

В рамках первого этапа производится, в частности, определение числа молекул в расчетной области, генерация их размещения (в рамках границентрированной решетки никеля), а также генерация равномерного по

углам и максвелловского по модулю распределения их импульсов, расчет стартовых сил.

В рамках основного цикла по времени выполняется следующая последовательность действий.

Сначала вычисляются новые значения координат. Далее производится их коррекция с помощью периодических граничных условий. После этого производится обмен частицами между конкретными боксами, который осуществляется как внутри расчетных доменов, так и между расчетными доменами с помощью функций MPI.

Далее производится расчет сил, на основании которых производится коррекция скоростей частиц и вычисляются все необходимые интегральные характеристики. При достижении контрольных моментов времени необходимые данные сохраняются в файлах.

Код программы был создан на языке ANSI C и адаптирован к вычислениям на кластерах с центральными многоядерными процессорами.

На рис. 1 показана эффективность распараллеливания в рамках одного вычислительного узла.

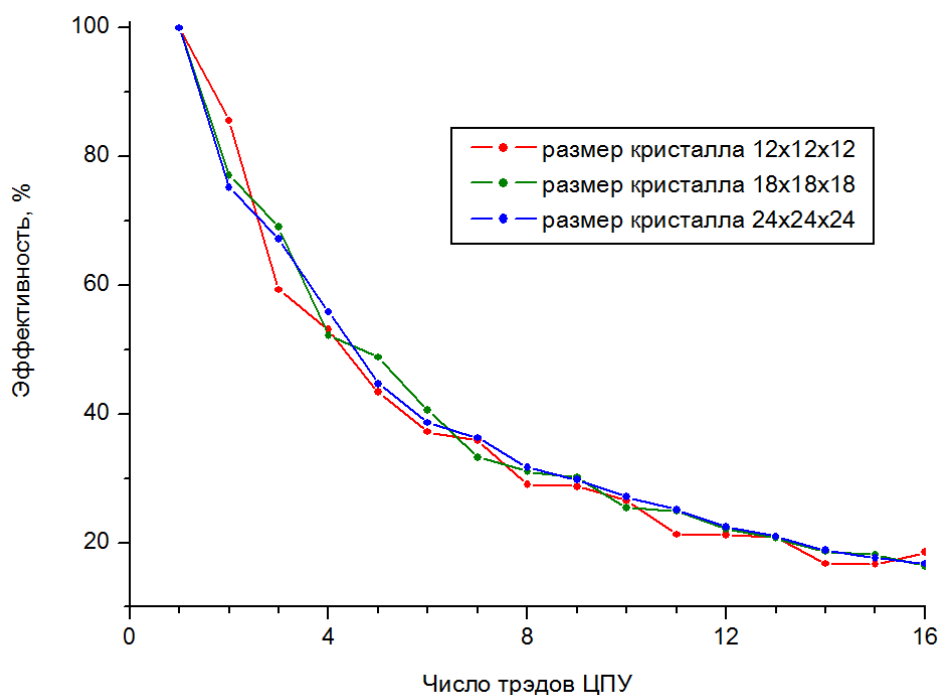


Рис. 1. Эффективность параллельной реализации в рамках одного узла для различных размеров кристалла (выделены цветом).

Анализ полученных данных показывает, что в предложенной реализации происходит быстрое падение эффективности. Оно связано с несколькими факторами. Первый из них – разделение расчетной области на малые элементарные боксы, что в итоге ведет к снижению вычислительной нагрузки и подтверждает высокую достигнутую в программе оптимизацию после-

довательного кода. Отказ от такого рода оптимизации в угоду росту эффективности безусловно не является рациональным.

Второй фактор обусловлен наличием известного узкого места у современных процессоров – неэффективного доступа тредов к общей памяти. Этот фактор выходит за рамки численного алгоритма, однако может быть частично компенсирован.

Третий фактор связан с недостаточным распараллеливанием кода, которое связано с большими накладными расходами при сохранении результатов вычислений. Эта проблема тоже может быть частично преодолена.

В итоге, ослабление действия первого фактора возможно при расчетах больших конфигураций системы. Преодоление второго фактора возможно при переносе вычислений на ГПУ, где взаимодействие с внутренней памятью можно организовать более оптимальным способом, например, через доступный программе кэш. Третий фактор можно ослабить, изменив технологию сохранения данных на диск, например, с помощью организации образа файлов в оперативной памяти.

Помимо расчетов эффективности распараллеливания внутри каждого вычислительного узла (в рамках технологии OpenMP), исследовалась и общая эффективность MPI-приложения. Относительно данного вопроса можно отметить следующее. Высокую эффективность в целом можно получить при существенных увеличениях размеров системы. Например, для реализации в последующем задачи взаимодействия газового потока с никелевой поверхностью (что актуально в задачах сверхзвукового напыления) нам будет необходимо рассмотреть металлическую часть системы, содержащую от нескольких миллионов до нескольких миллиардов атомов. В связи с этим количество вычислительных узлов суперкомпьютерной системы должно быть порядка 100 или больше. В этой ситуации разработанная и пока не очень оптимальная программа, тем не менее, будет весьма эффективной и позволит проводить расчеты в приемлемые сроки.

## **7. Результаты моделирования**

В данном разделе приведем результаты расчетов. Целью расчетов было определение равновесных макропараметров никелевой системы (средние температура, давление и импульс), а также определение оптимальных параметров численного алгоритма и термостатирования.

Вычисления производились для трех вариантов термостатирования: термостат Берендсена, термостат Ланжевена с заданным нулевым потоком, термостат Ланжевена с заданным ненулевым потоком. Расчеты проводились для различных размеров никелевой системы, измеряемых в длинах элементарных ячеек. Нами были выбраны следующие размеры системы: 12x12x12, 18x18x18, 24x24x24, что соответствует количествам частиц: 6912, 23328, 55296. Атомы никеля в начале расчетов располагались строго в узлах ГЦК-решетки. Стартовые распределения скоростей вычислялись на основе

распределения Максвелла при температуре 300 К. Температуры термостатирования также были равны 300 К. Времена взаимодействия атомов с тепловым резервуаром  $\tau_i$  были равны: 1, 0.5, 0.25 и 0.125 пс. При использовании термостата Ланжевена скорость потока равнялась либо нулю, либо вектору  $\vec{v}_f = (+1, -1, +0.5)$  нм/пс. Шаг интегрирования уравнений Ньютона составлял 0.002 пс. Расчеты проводились вплоть до установления режима, соответствующего выходу средних величин на стационар.

Перейдем к описанию полученных результатов.

На рис. 2-4 показаны временные профили температуры для трех режимов термостатирования и трех размеров никелевой системы для времени  $\tau_i = 1$  пс. Их анализ показывает, что все варианты термостатирования удерживают среднюю температуру системы на заданном уровне. Однако флуктуации температуры будут тем меньше, чем больше размеры моделируемой системы.

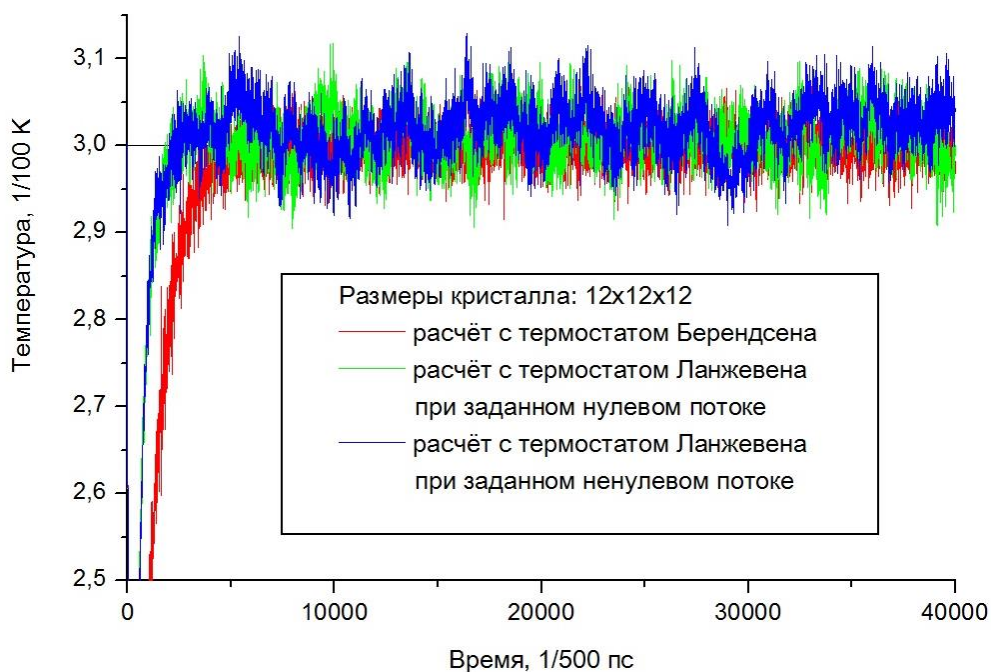


Рис. 2. Временные зависимости температуры для трех вариантов термостатирования (выделены цветом). Размеры системы – 12x12x12.

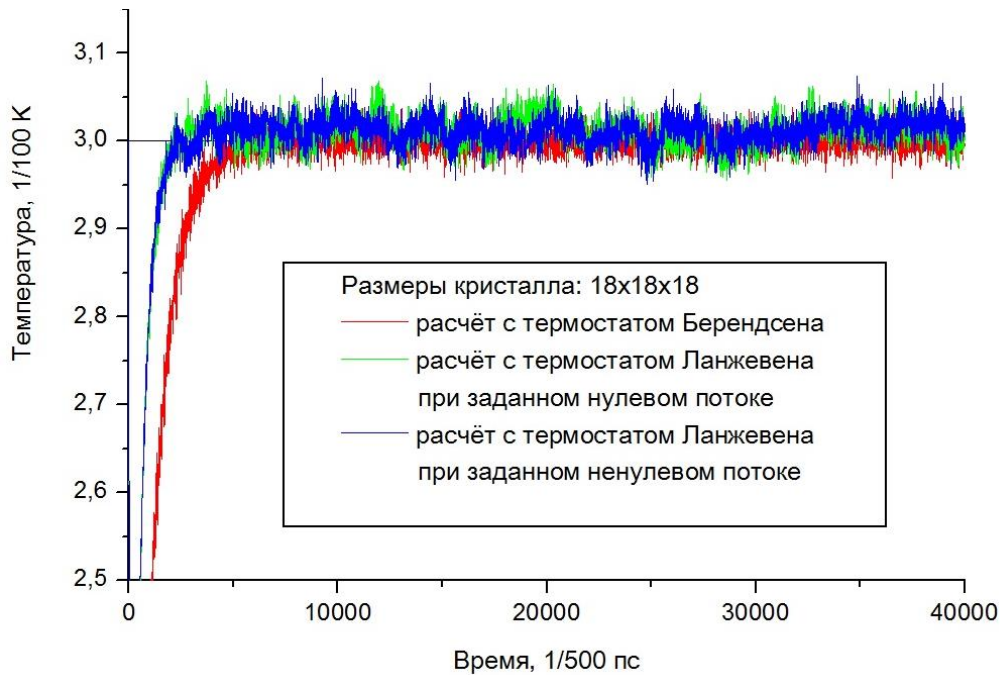


Рис. 3. Временные зависимости температуры для трех вариантов термостатирования (выделены цветом). Размеры системы – 18x18x18.

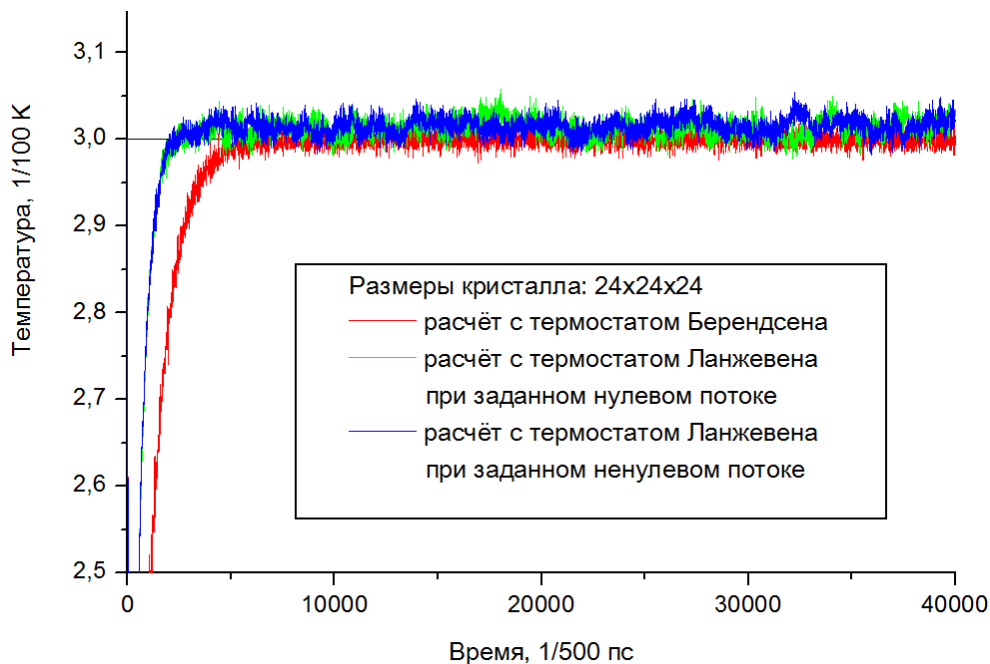


Рис. 4. Временные зависимости температуры для трех вариантов термостатирования (выделены цветом). Размеры системы – 24x24x24.

На рис. 5-7 показаны временные профили температуры, полученные для термостата Ланжевена с заданным нулевым потоком, различных времен взаимодействия с тепловым резервуаром и размеров системы. Как показывают приведенные данные, уменьшение времени взаимодействия приводит к уменьшению времени установления термодинамического равновесия, однако и



увеличивает величину флуктуаций. В этой связи мы далее остановились на величине  $\tau_t = 1$  пс.

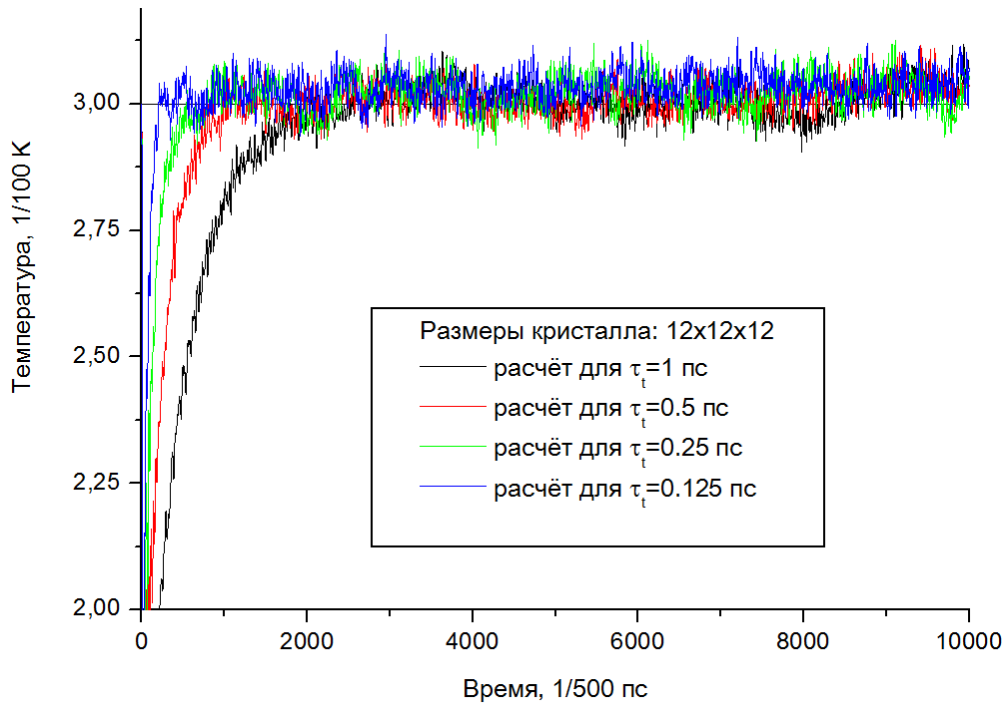


Рис. 5. Временные зависимости температуры для четырех значений времени взаимодействия с тепловым резервуаром (выделены цветом).  
Размеры системы – 12x12x12.

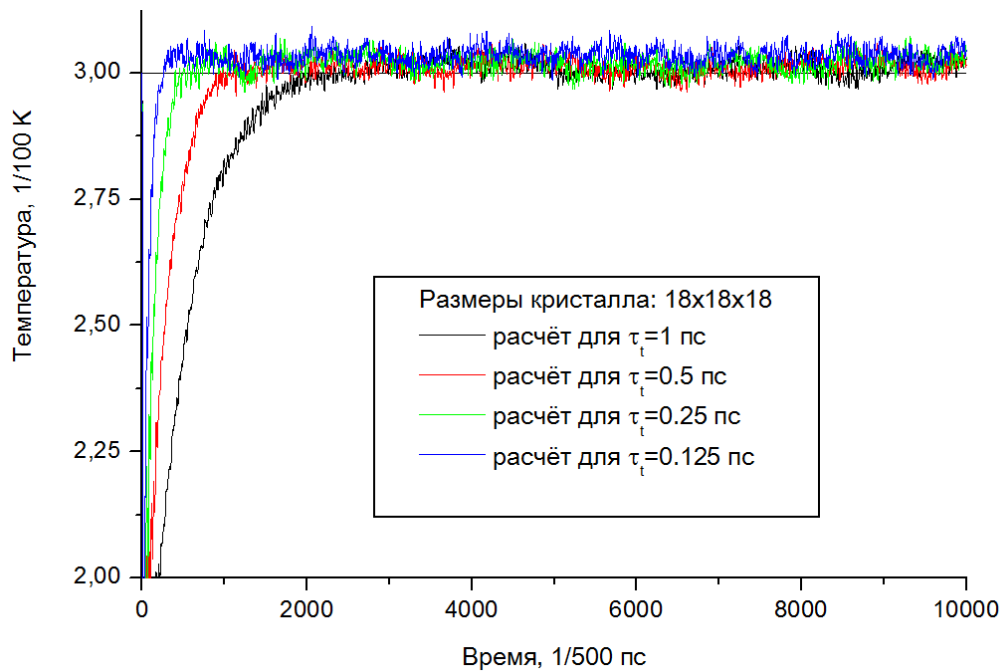
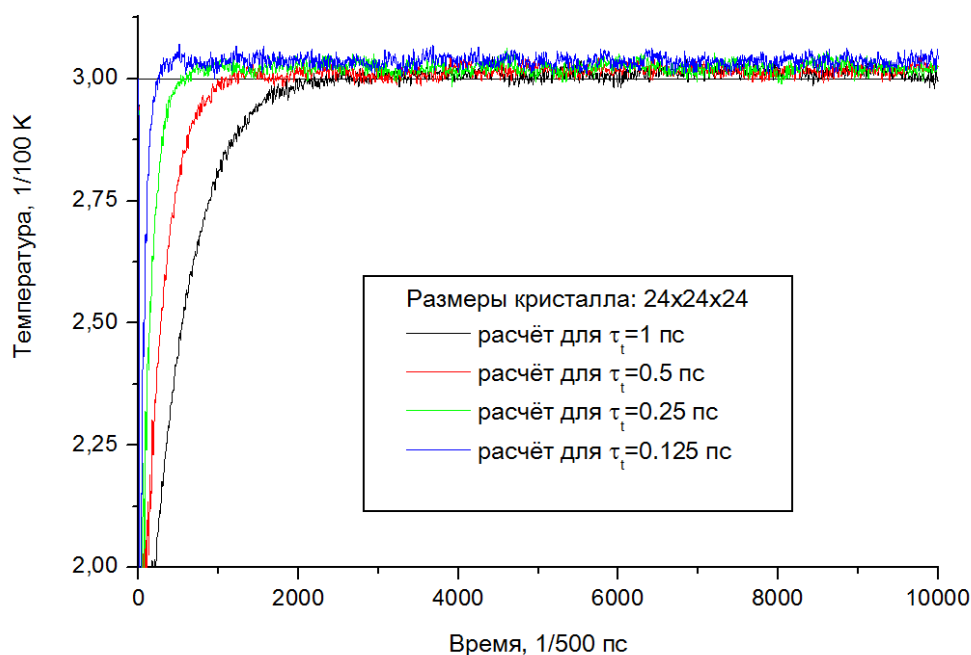
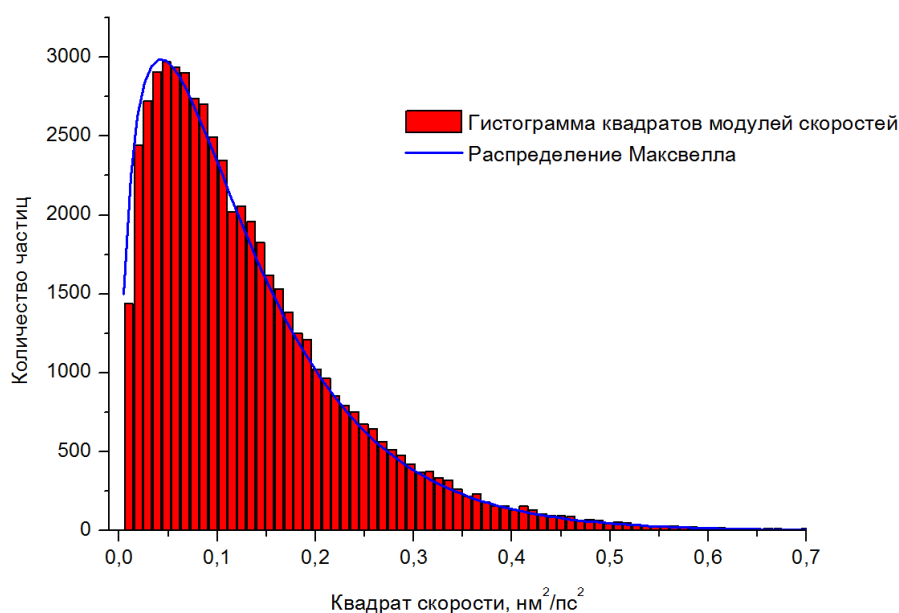


Рис. 6. Временные зависимости температуры для четырех значений времени взаимодействия с тепловым резервуаром (выделены цветом).  
Размеры системы – 18x18x18.



*Рис. 7.* Временные зависимости температуры для четырех значений времени взаимодействия с тепловым резервуаром (выделены цветом).  
Размеры системы – 24x24x24.

На рис. 8 показана гистограмма квадратов скоростей атомов никеля для системы размером 24x24x24, полученная при использовании в расчетах термостата Ланжевена с заданным нулевым потоком и  $\tau_t = 1$  пс на момент времени  $t = 80$  пс, который близок к времени установления термодинамического равновесия. Диаграмма показывает хорошее совпадение численных результатов с аналитическим профилем распределения Максвелла.



*Рис. 8.* Гистограмма квадратов модулей скоростей.  
Размеры системы – 24x24x24.

На рис. 9 показаны временные профили давления для трех размеров системы. Анализ полученных средних для давления показывает, что вблизи равновесия они получаются порядка 1.28 ГПа, что достаточно близко к значению 2.171 ГПа для внутреннего давления в никеле, рассчитанного в работе [20] для низких температур. Полученное значение давления соответствует напряженному состоянию никеля. Для получения ненапряженного состояния необходимо точно знать величину шага решетки. Наш расчет позволяет определить ее численно как раз по величине давления. Как показали наши расчёты нулевое внутренне давление в никеле для комнатной температуры ( $T = 300\text{ K}$ ) реализуется при величине шага решетки  $rcr \approx 0.3531 \pm 0.00005$  нм.

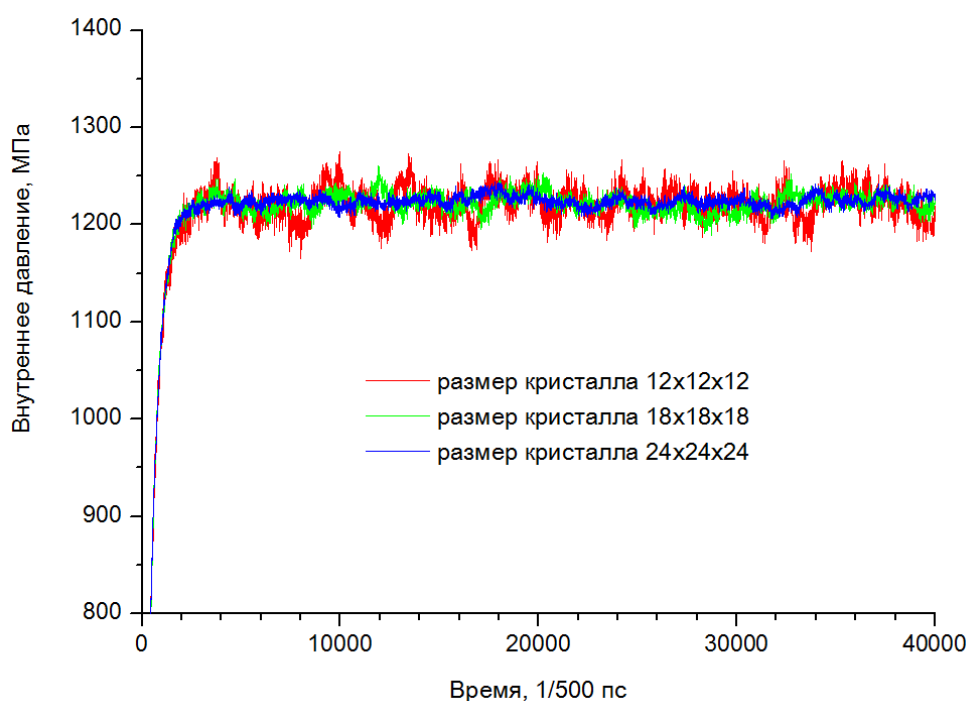


Рис. 9. Временные распределения давления для трех размеров кристалла.

## Заключение

Сформулируем в заключении основные результаты работы.

Рассмотрена проблема молекулярно-динамического моделирования процессов теплового воздействия на металлический образец, состоящий из атомов никеля. Для ее решения использована непрерывная математическая модель на основе уравнений классической механики Ньютона. Численный анализ модели выполнен на основе схемы Верле 2-го порядка точности. Программная реализация численного алгоритма ориентирована на параллельные вычисления с помощью технологий MPI и OpenMP. С помощью разработанной программы выполнено исследование процесса установления термодинамического равновесия атомов никеля при нагреве образца до заданной

температуры. В численных экспериментах определены оптимальные параметры методики расчета (шаг интегрирования, время взаимодействия системы с тепловым резервуаром), а также физические параметры моделируемого процесса (в частности, внутреннее давление образца). Полученные численные результаты хорошо согласуются с известными теоретическими и экспериментальными данными. Дальнейшее использование методики лежит на пути исследования взаимодействий разных фаз: металл – жидкость и металл – газ, широко используемых и востребованных при моделировании сложных процессов в микро- и наносистемах.

### **Библиографический список**

1. Allen M.P. Introduction to Molecular Dynamics Simulation // Computational Soft Matter: From Synthetic Polymers to Proteins. John von Neumann Institute for Computing, Julich, NIC Series. 2004. V. 23. P. 1–28.
2. Каплан И.Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. М.: Наука. 1982. 312 с.
3. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987. 640 с.
4. Sutmann G. Classical molecular dynamics // In: Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms. |Eds. J. Grotendorst, et al. Julich: NIC. 2002. V. 10. P. 211–254.
5. Verlet L. Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // Phys. Rev. 1967. V. 159. P. 98–103.
6. Лагарьков А.Н., Сергеев В.М. Метод молекулярной динамики в статистической физике // Успехи физических наук. 1978. Т. 125, Вып. 3. С. 409–448.
7. Китайгородский А.И. Молекулярные кристаллы. М.: Наука. 1971. 424 с.
8. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука. 1978. 791 с.
9. Box G. E. P., Muller M. E. A Note on the Generation of Random Normal Deviates // The Annals of Mathematical Statistics. 1958. V. 29, № 2. P. 610–611.
10. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // Physical Review B. 1984. V. 29, № 12. P. 6443–6453.
11. Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers // Phys. Rev. B. 69. 2004. P. 144113. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.144113.
12. Landau L.D., Teller E. On the theory of sound dispersion // Physik. Zeits. Sowjetunion. 1936.V. 10. P. 34–43.
13. Molecular dynamics with coupling to an external bath / Berendsen H.J.C. et al. // J. Chem. Phys. 1984. V. 81. P. 3684–3690.
14. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в компьютерной физике. М.: Наука. 1990. 176 с.

15. Гибридная суперкомпьютерная платформа и разработка приложений для решения задач механики сплошной среды сеточными методами / Поляков С.В. [и др.] // Известия ЮФУ. Технические науки. 2012. № 6 (131). С. 105–115.

16. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. СПб: БХВ-Петербург. 2004. 608 с.

17. Официальная документация и учебные пособия по MPI: <http://www.mcs.anl.gov/research/projects/mpi/>

18. Официальная документация и учебные пособия по OpenMP: <http://www.openmp.org>, <http://www.llnl.gov/computing/tutorials/openMP>

19. CUDA Toolkit Documentation v6.0. Santa Clara (CA, USA): NVIDIA Corporation, February 2014: <http://docs.nvidia.com/cuda#axzz33MvzgFZE>

20. Бертяев Б.И., Реут И.И. Об одном уравнении состояния и внутреннем давлении в металлах // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. 2010. Т. 12, № 4. С. 70–75.

## Оглавление

1. Введение.....	3
2. Математическая постановка.....	4
3. Начальные и граничные условия.....	6
4. Потенциал взаимодействия.....	8
5. Функции термостатирования.....	10
6. Программная реализация.....	11
7. Результаты моделирования.....	12
Заключение.....	18
Библиографический список.....	19