

# Параллельное построение поликристаллических образцов наноматериалов по заданной геометрии для моделирования методом молекулярной динамики

А.М.Чупрунов, Ф.А.Сапожников, Т.Б.Фёдорова, Е.Н.Ребенок, Л.М.Зуева

ФГУП Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский Научно-Исследовательский Институт  
Технической Физики имени академика Е.И.Забабахина, Снежинск, Россия

a.m.chuprunov@vniitf.ru, f.a.sapozhnikov@vniitf.ru

**Реферат.** В докладе представлен алгоритм и результаты параллельного построения поликристаллического образца для моделирования методом молекулярной динамики. Моделируемый образец может содержать несколько материалов, заполняющих области, и иметь размеры от нескольких нанометров до десятых долей миллиметра. Области образца представляются в виде внешних поверхностей (boundary representation) или комбинированием твёрдых тел (constructive solid geometry). В каждой области задаётся требуемое количество монокристаллических зёрен. В этих зёрнах расставляются атомы. Расстановка осуществляется трансляцией элементарной кристаллической ячейки с атомами по трём направлениям до границ зерна, которые определяются разбиением Вороного. В зависимости от размеров областей построение образца может проводиться на однопроцессорной вычислительной машине или с использованием многопроцессорной высокопроизводительной вычислительной системы.

При построении геометрия образца разделяется на зоны по числу вычислительных процессов. Каждый процесс отвечает за свою область пространства, расставляя атомы только в этой зоне, представляющей собой прямоугольный параллелепипед. Для этого используется функция определения принадлежности атома к той или иной области образца. Принадлежность к области, представленной в виде поверхностей, определяется с помощью открытого геометрического ядра OpenCascade. Скорость определения принадлежности одной точки является критическим параметром работы алгоритма. Приведенные в докладе оценки показывают, что время построения многомиллиардных образцов может достигать нескольких дней. Для параллельного построения и сохранения информации об атомах используется интерфейс передачи сообщений (MPI). Во время построения образца на многопроцессорной вычислительной системе информация обо всех найденных атомах находится в распределённой памяти. В процедуре записи моделируемого образца из распределённой памяти на дисковый массив системы учитываются ограничения, накладываемые на расположение атомов в пространстве самим методом молекулярной динамики.

На следующем этапе работы планируется разработать параллельный алгоритм внедрения дефектов в построенный образец (дислокации, междоузельные атомы, вакансии и прочее).

## Ключевые слова

CPU, MPI, OpenCascade, geometry, boundary representation, molecular dynamics

## 1 Задание геометрии областей моделируемого образца

Геометрия областей может быть задана в системе автоматизированного проектирования (САПР) и сохранена в файле стандартного формата (с расширением brep), который используется для представления геометрии в виде внешних поверхностей.

Предположим, что необходимо заполнить атомами геометрию моделируемой системы, содержащую две области. Первая область представляет собой сферу, имеющую радиус  $R$ . Вторая область представляет собой куб с ребром  $0.4 * R$ , который вписан в первую область. При этом первая область должна содержать поликристалл олова с 4-мя монокристаллическими зёрнами. Вторая область монокристалл меди с 5-ю зёрнами.

Воспользовавшись программой трёхмерного моделирования Salome [1], можно задать геометрию областей образца и показать в разрезе плоскостью XY (Рисунок 1). Выбрав в диалоговом режиме геометрический модуль Geometry, с помощью графических примитивов сферы Sphere и куба Box задаются две области. Первая область Region1 состоит из сферы Sphere\_1 с радиусом R. Вторая область Region2 состоит из куба Box\_1 с ребром  $0.4 \cdot R$ . Эти две области симметричны относительно начала координат.

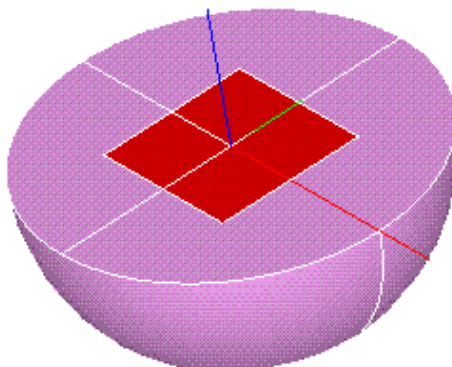


Рис. 1 – Внешний вид образца в разрезе

Построенные области Region1, Region2 с информацией о поверхностном представлении области сохраняются в файлах Region1.brep, Region2.brep соответственно.

По алгоритму построения поликристаллического образца полученные файлы с информацией о границах области загружаются в память вычислительного процесса, и начинается заполнение областей атомами.

## 2 Алгоритм заполнения области

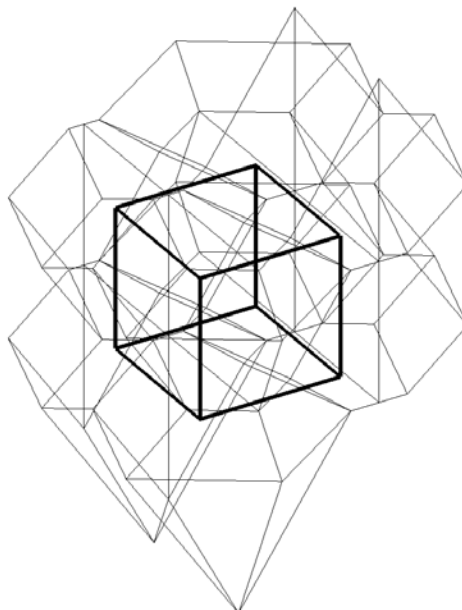
Для заполнения области атомами, кроме границ области, необходимо указать тип элементарной ячейки, число монокристаллических зёрен и при необходимости направление трансляции элементарных ячеек материала (по умолчанию направление выбирается случайным образом). Тип элементарной ячейки соответствует заданному материалу области и определяет число атомов с их пространственное расположение внутри ячейки. Полное заполнение областей ячейками с атомами означает окончание работы алгоритма.

Параллельный алгоритм заполнения атомами поликристаллической структуры образца состоит из следующих этапов:

- 1) Определяются габариты моделируемой системы. Найденные значения минимальной и максимальной координаты для каждой из трёх осей составляют координаты вершин прямоугольного параллелепипеда, в который входят все заданные области.
- 2) В каждой области образца задаётся требуемое количество монокристаллических зёрен. Границы этих зёрен определяются разбиением Вороного.
- 3) Параллелепипед образца разбивается равномерно по каждой оси на N параллелепипедов - зон, за каждую из которых отвечает один вычислительный процесс.
- 4) В зоне образца для каждого зерна области из элементарных ячеек составляется кристаллическая решетка. Атомы элементарных ячеек, попадающие в заданные границы областей, запоминаются в оперативную память вычислительного процесса.
- 5) Полученная информация о расположении атомов в областях, сохраняется на диск из запущенных вычислительных процессов.

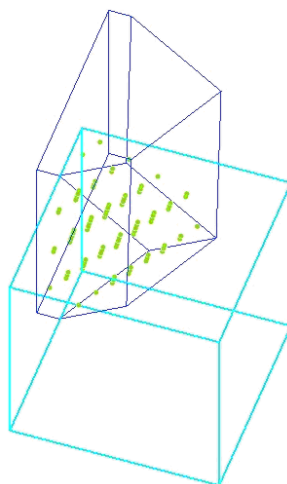
## 3 Разбиение областей на зёрна

Область с материалом в зависимости от заданного числа зёрен может иметь поликристаллическую или монокристаллическую структуру. Если задано несколько монокристаллических зёрен, то для области по заданному числу ядер строится разбиение Вороного (Рисунок 2).



**Рис. 2** – Разбиение Вороного для области

После распределения границы каждого зерна являются границами выпуклого многогранника. При этом возможно пересечение границ зерна и области (Рисунок 3)



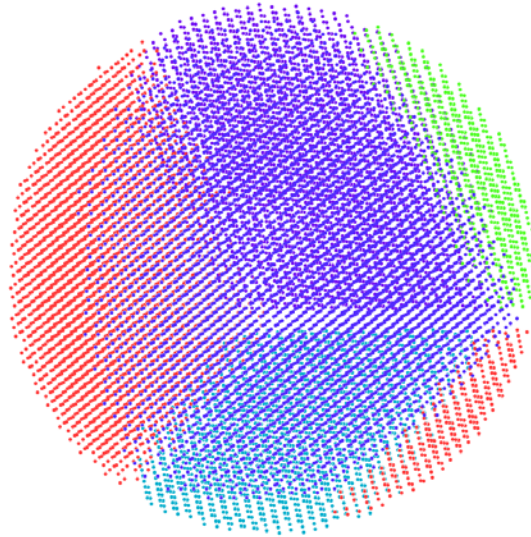
**Рис. 3** – Пересечение зерна и области

Внутри границ полученного многогранника с помощью трансляции элементарной кристаллической ячейки с атомами по трём направлениям осуществляется расстановка атомов.

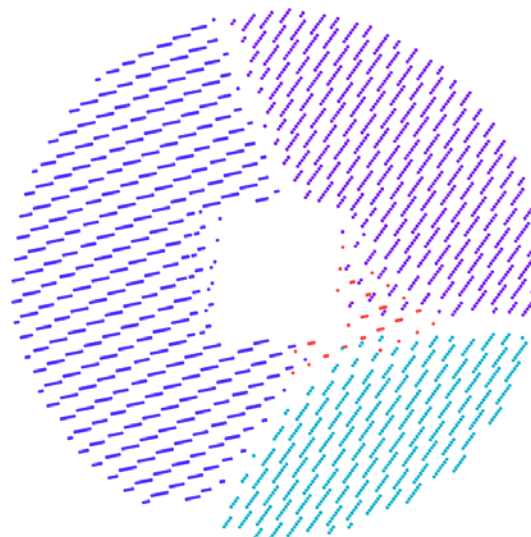
## 4 Трансляция ячеек с атомами

При трансляции ячеек с атомами каждый вычислительный процесс отвечает за свою область пространства образца – зону, представляющей собой прямоугольный параллелепипед. В этой зоне процесс использует функцию определения принадлежности атома к этой той или иной заданной области образца.

В первой области тестового образца атомы расставляются по 4-м зёрнам, направление трансляции в которых выбирается случайным образом (Рисунок 4 и 5).

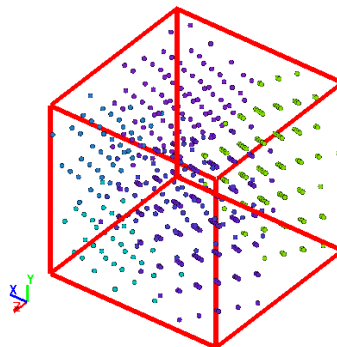


**Рис. 4** – Проекция первой области после построения



**Рис. 5** – Сечение первой области образца после построения

Во второй области тестового образца атомы расставляются по 5-ти зёрнам, направление трансляции в которых выбирается случайным образом (Рисунок 6).



**Рис. 6** – Вид второй области образца после построения

Во время построения принадлежность атома к области, представленной в виде поверхностей, определяется с помощью открытого геометрического ядра OpenCascade[2]. Скорость определения принадлежности одной точки к области является критическим параметром работы алгоритма построения.

## 5 Сохранение информации об атомах

Для параллельного построения и сохранения информации об атомах используется интерфейс передачи сообщений (MPI).

Во время построения образца на многопроцессорной вычислительной системе информация обо всех найденных атомах находится в распределённой памяти системы. После построения из образца исключаются такие атомы зёрен разных областей, которые находятся на недопустимо близком расстоянии для счёта методом молекулярной динамики. В процедуре записи моделируемого образца из распределённой памяти на дисковый массив системы учитываются особенности хранения информации для метода молекулярной динамики, реализованного в программном комплексе MOLOCH [3].

## 6 Оценка времени построения

В зависимости от размеров областей построение образца может проводиться на однопроцессорной вычислительной машине или с использованием многопроцессорной высокопроизводительной вычислительной системы. При необходимости перед запуском алгоритма построения может быть проведена оценка времени построения образца исходя из имеющихся вычислительных ресурсов.

Приведенные в докладе оценки показывают, что время построения многомиллиардных образцов может достигать нескольких дней.

## Список использованных источников

1. SALOME platform for numeric simulation. [Электронный ресурс] - <http://www.salome-platform.org>
2. Open CASCADE Application Framework (OCAF). [Электронный ресурс] – <http://www.opencascade.org>.
3. F.A. Sapozhnikov, V.V. Dremov, G.V. Ionov, I.V. Derbenev, and N.E. Chizhkova, MOLOCH computer code for molecular-dynamics simulation of processes in condensed matter, EPJ Web of Conferences 10, 00017 (2010)

### **The parallel algorithm of multi-billion atom samples generation for molecular dynamics simulations**

**Abstract.** *The aim of our work was to build an effective parallel algorithm that can be used for generation of multi-billion atom polycrystalline samples with defects for large-scale molecular-dynamics simulations.*