

单晶硅磨削过程分子动力学仿真并行算法*

郭晓光 郭东明 康仁科 金洙吉

(大连理工大学精密与特种加工教育部重点实验室 大连 116021)

摘要: 建立单晶硅超精密磨削过程的三维分子动力学仿真模型, 分析分子动力学仿真串行程序特点和并行仿真的可行性, 提出基于区域二次划分的分子动力学仿真并行算法。编制并行仿真程序, 进行分子动力学仿真, 从瞬间原子位置图方面分析单晶硅超精密磨削过程的加工机理。将并行仿真结果与串行程序仿真结果进行对比分析, 从瞬间原子位置图和系统能量方面验证并行程序结果的正确性, 在仿真规模和计算时间方面并行程序有很大优势, 从而说明并行仿真程序是有效的, 可以应用在不同原子规模的分子动力学仿真计算中。

关键词: 分子动力学仿真 并行算法 区域分解

中图分类号: TG580.1

Parallel Algorithm in Molecular Dynamics Simulation Based on Monocrystal Silicon Grinding

GUO Xiaoguang GUO Dongming KANG Renke JIN Zhuji

(Key Laboratory for Precision & Non-traditional Machining of Ministry of Education,
Dalian University of Technology, Dalian 116021)

Abstract: A 3D grinding molecular dynamics (MD) simulation model of monocrystal silicon is established. The characteristics of MD serial program and the feasibility of parallel simulation are presented. An MD simulation parallel algorithm in which the domain is decomposed twice is developed. Parallel program is made and executed. From the viewpoint of the instantaneous distribution of atoms, the mechanism of monocrystal silicon grinding process is analyzed. In addition, through the comparison of the results between the serial and the parallel simulations, it is proved that the results of the parallel simulation is reliable. From the viewpoint of simulation size and computation time, the parallel program has great advantage over the serial program. In conclusion, the parallel program is effective and can be used in MD simulations of the system with different sizes.

Key words: Molecular dynamics simulation Parallel algorithm Domain decomposition

0 前言

超精密磨削技术是单晶硅超精密加工技术的前沿, 目前国际上超精密磨削技术和装备都已发展到了相当高的水平, 但对超精密磨削机理的研究还没有完全的认识, 这在一定程度上影响了超精密磨削技术的发展, 故开展硅片超精密磨削机理的研究具有非常重要的意义。近年来国内外对超精密加工机理的研究主要应用基于扫描探针显微镜(Scanning probe microscope, SPM)的试验方法、超精密加工试

验方法、有限元模拟方法以及分子动力学模拟方法等。SPM虽然是一种非常有效的研究超精密加工机理的试验方法, 但由于仪器昂贵、加工过程的可控性差, 以及受外界环境的影响大等原因, 在试验中存在着很多的困难。超精密加工试验也是一种直接有效的研究超精密加工机理的研究方法, 但是也存在着可控性差、观察测量困难和试验费用昂贵等缺点, 使得超精密加工试验也不可避免地存在着很多困难。有限元模拟对研究宏观切削现象是行之有效的, 但由于它是建立在接触力学和弹塑性力学基础上的模拟方法, 所以不适合用来研究纳米级加工过程的机理。分子动力学(Molecular dynamics, MD)方法是用于计算以固体、液体、气体为模型的单个

* 国家自然科学基金(50390061)和国家自然科学基金(50325518)资助项目。20070218收到初稿, 20070824收到修改稿

分子运动,它是探索各种现象本质和某些新规律的一种强有力的计算机模拟方法,具有沟通宏观特性与微观结构的作用,对于许多在理论分析和试验观察上难以理解的现象可以做出一定的解释,因此在物理、化学、材料、摩擦学等多个学科领域得到了广泛而成功的应用,并逐渐渗透到机械加工领域^[1-2]。

运用分子动力学仿真研究超精密加工过程,能够解决传统切削理论难以解释纳米级超精密加工机理的问题,同时用数值计算代替加工试验克服了超精密加工试验难以实现和测控的困难。但是分子动力学方法属于计算机模拟中典型的计算瓶颈问题,并行计算是分子动力学仿真的必由之路,因为并行计算能够解决串行分子动力学仿真计算时间长、仿真规模小的局限,使运用分子动力学仿真方法研究单晶硅超精密磨削过程具有更加现实的意义^[3]。

国内应用分子动力学研究机械加工过程起步较晚,目前只有清华大学、天津大学和哈尔滨工业大学等几所大学借助于分子动力学仿真对机械加工过程开展了理论方面的研究工作。国外方面,美国、日本和澳大利亚等的研究者对切削、压痕等过程进行了深入研究,但在磨削方面研究的比较少。总的来说,分子动力学仿真在机械加工领域虽然已经取得了很大进展,但对于单晶硅的超精密磨削过程机理研究还没有一个统一的完整认识,需要进一步深入研究。

作者应用分子动力学方法,建立了单晶硅超精密磨削过程的三维分子动力学模型,并将德拜模型引入仿真计算中。通过对现有并行算法的分析,提出了基于二次区域划分的分子动力学并行仿真算法,进行了并行仿真计算,分析了单晶硅超精密磨削过程的加工机理,并将并行仿真结果与串行仿真结果进行了对比分析。

1 分子动力学仿真

1.1 仿真模型的建立

单晶硅磨削过程分子动力学仿真模型如图1所示。磨粒为金刚石原子,仿真中认为磨粒为绝对刚性的,即不因磨削力作用而变形磨损。工件为单晶硅原子,分为牛顿层、恒温层和固定边界层。牛顿层的原子运动可由牛顿方程来描述;恒温层的引入是为了使磨削过程中产生的热量及时传导出去,该层原子需要被标度以保持该区域温度恒定;固定边界层的原子始终保持不动,减小边界效应和保证晶

格的对称性,可不参与计算。

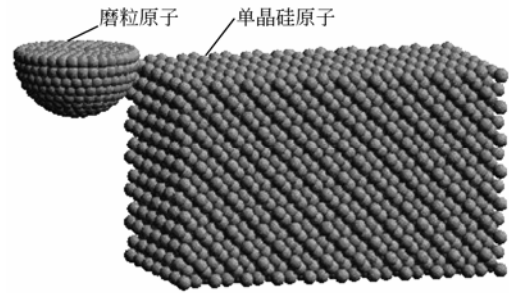


图1 单晶硅磨削过程分子动力学仿真模型

1.2 力的计算

单晶硅是金刚石型晶体结构,对硅原子势能的计算应考虑多原子价键之间的相互影响因素,故采用多原子系统的 Tersoff 势函数^[4]对单晶 Si-Si 和金刚石 C-C 以及 Si-C 进行计算,公式如下

$$u(r_{ij}) = f_c(r_{ij})[f_r(r_{ij}) + b_{ij}f_a(r_{ij})] \quad (1)$$

式中 u_{ij} ——原子 i 与原子 j 之间的势函数

$f_c(r_{ij})$ ——截断函数

$f_r(r_{ij})$ ——排斥项函数

b_{ij} ——低价函数

$f_a(r_{ij})$ ——吸引项函数

r_{ij} ——原子 i 与原子 j 之间的距离

势函数确定以后,原子之间的作用力就可以通过势函数对 r_{ij} 求导得出,即

$$F_{ij} = -\frac{du(r_{ij})}{dr_{ij}} \quad (2)$$

作用在第 i 原子上的总原子力等于其周围所有原子对该原子作用力的合力,即

$$F_i = \sum_j F_{ij} = \sum_j -\frac{du(r_{ij})}{dr_{ij}} \quad (3)$$

1.3 温度转换模型

仿真过程中原子动能和温度之间的转换对于仿真结果有很大影响,所以建立合理的温度转换模型至关重要。目前主要有三种模型:杜隆伯替模型,德拜模型和爱因斯坦模型。SINNOTT 通过对比发现(图2):在纳米级加工过程中,德拜模型最适合于硅原子,而爱因斯坦模型适合于金刚石原子^[5]。

本文中对于单晶硅原子采用了德拜温度转换模型,为

$$c_v = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = \frac{12\pi^4 Nk_B}{15} \left(\frac{T}{\theta}\right)^3 \quad (4)$$

式中 c_v ——比定容热容

\bar{E} ——固体的平均热力学能(内能)

T ——原子的绝对温度

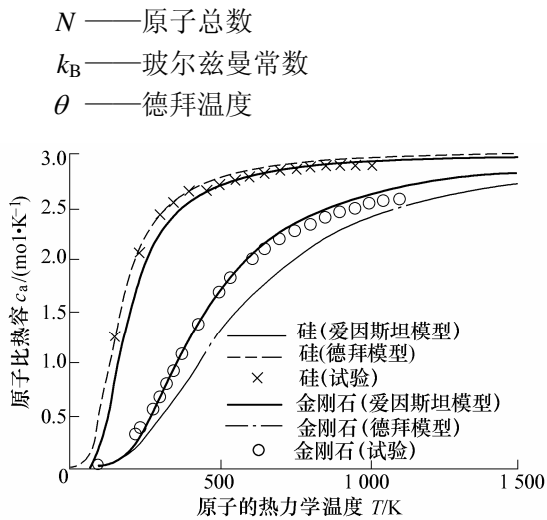


图 2 原子比热值理论与试验对比

由式(4)可知,在极低温度下,比热容和温度 T^3 成正比,这个关系式与试验相符合,称为德拜定律。温度越低,德拜近似越好^[6-7]。

1.4 并行程序可行性分析

分子动力学仿真串行程序中主要包括:速度、位置的初始化、原子所受作用力的计算、速度的更新计算、位置的更新计算等。其中只有原子的受力计算需要第二和第三原子的位置信息,而其他的计算都是独立的。另外,通过对原子的受力计算进行分析,可以发现对每个原子的受力计算本身来说这个计算也是原子间相互独立的,即是可以拆分的,所以分子动力学仿真计算在本质上适合于并行计算。

1.5 并行算法分析

根据计算载荷分配的不同,分子动力学并行算法主要分为三种^[8-10]:原子分解法、原子间作用力分解法和空间区域分解法。原子分解并行算法易于实现负载平衡问题,其缺点是需要全局通信,导致通信成本高,因此仅适合规模比较小或长距离作用力问题,不易扩展。作用力分解法是原子分解法的一种改进,具有原子分解法的优点,且通信成本较低,节省了大量内存空间,因此它比原子分解法计算规模要大,但仍不适合计算规模大以及处理机台数较多的并行机。与原子分解法和作用力分解法相比较,区域分解法只与近邻处理机之间进行通信处理,通信时间耗费少,内存占用少,可以明显增加分子动力学模拟的原子数量,并且具有很好的扩展性,适合计算规模大和处理机台数多的情况,故选择区域分解法为本文分子动力学并行仿真程序的算法。

但根据目前仿真模型的具体情况和并行计算的需要,需要对区域分解法进行改进,因此提出了基

于空间区域二次划分的分子动力学仿真并行算法,即首先对整个仿真模型进行一维的区域划分,此次划分的区域称为计算区(每个计算区对应一个计算进程),然后采用立方网格区域法对每个计算区内进行第二次划分,划分的区域称为计算单元,如图 3 所示。具体来说,对整个分子动力学仿真模型进行区域划分时(设有 P 个计算结点),首先在 x 方向平均划分出 P 个大小基本相同的计算区,每个计算区对应一个计算结点,整个模型中的原子根据其坐标被分配于各个计算区中,此次为第一次区域划分。根据同样原则,在每一个计算区中再进行第二次划分,从而划分出计算单元。每一个计算单元均为一个长方体,其最小边长应大于或等于截断半径,所以每个计算区中计算单元的数量取决于计算区本身尺度的大小。通过以上划分可以很方便地以一个计算单元为基本单位进行消息的传递,有效地减少了通信开销。

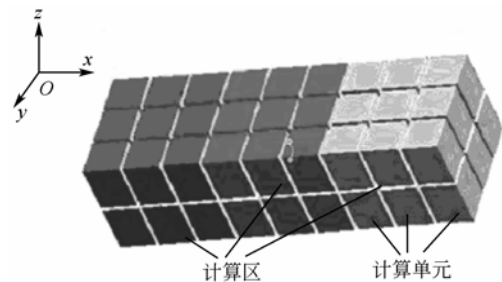


图 3 区域划分示意图

2 分子动力学仿真结果分析

2.1 并行程序仿真结果

对单晶硅的超精密磨削过程进行了三维分子动力学仿真计算,磨削过程仿真试验参数见表 1。仿真中认为磨粒是绝对刚性的,即不因磨削力作用而变形磨损。

表 1 磨削过程仿真试验参数

参数	数值
单晶硅原子数	27 007
金刚石原子数	9 019
仿真温度 T/K	293
磨削速度 $v/(m \cdot s^{-1})$	100
时间步长 t/fs	10
磨削深度 d/nm	2.172 8

选取了仿真过程中 4 个不同时刻的瞬间原子位置图来进行研究,如图 4 所示。从图 4 可以看出,磨粒附近的单晶硅表面及内部有变形存在,在磨粒的前方和两侧堆积了一定数量的硅原子,但未发现明显的裂纹,故认为材料的去除方式是塑性变形方式,没有明显的位错产生,可以把磨削过程解释为:

随着磨粒的运动，与金刚石磨粒接触的最外层硅原子与金刚石原子间的作用力由引力转化为排斥力，同时它们又受到内部硅原子的作用力，由于金刚石原子的结合能大，在磨削过程中不会变形磨损，因此最外层的硅原子受到的排斥力占主导地位，从而使得磨粒前方和两侧的硅晶格在磨粒的作用下发生了剪切挤压变形，堆积在磨粒的前方和两侧，当贮存在变形晶格中的应变能超过一定值且不足以形成位错时，硅的原子键断裂，形成切屑。另外从图 4 中还可以观察到磨粒经过后已加工表面会有微弹现象。

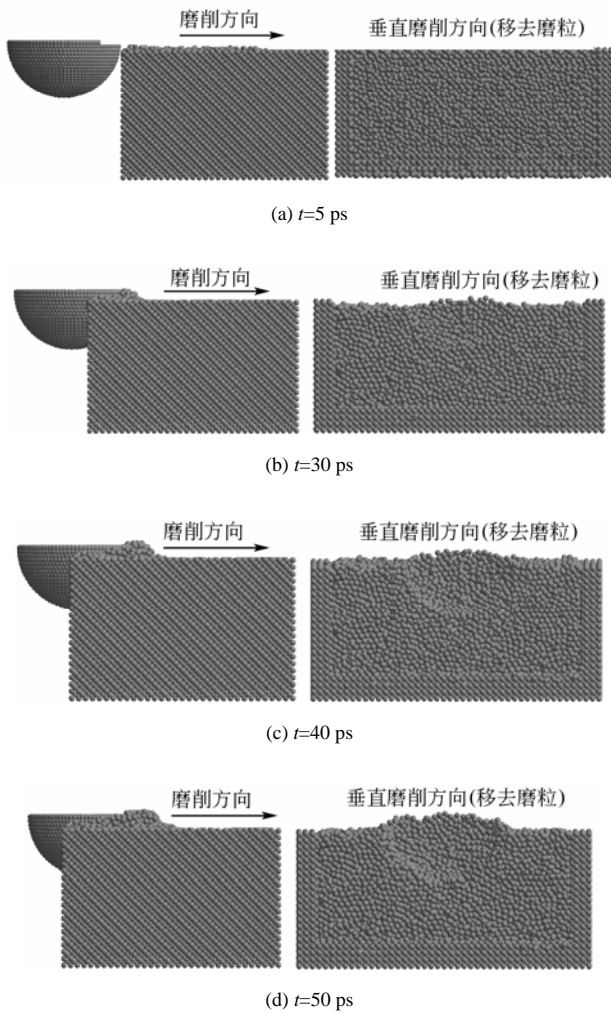


图 4 不同时刻瞬间原子位置图

2.2 串、并程序仿真结果对比

2.2.1 瞬间原子位置和系统能量对比

主要从瞬间原子位置图和系统能量两方面对串、并行结果进行了对比分析，通过观察瞬间原子位置可以非常直观地了解切屑形状、流向、形变等信息；在相同仿真条件下，当系统能量达到平衡时，说明系统已达到稳定状态，在给定初始条件(包括初始能量)下，串、并程序的能量如果能基本一致(因为速度的初始化是随机的所以两者不可能完全一

致)，则可认为串、并程序结果是一致的。

图 5、6 是分别采用串行、并程序仿真单晶硅纳米级磨削过程中同一时刻的瞬间原子位置图，从图中可以看出，切屑不仅在磨粒运行方向前面发生堆积而且在磨粒的两侧还有侧积，图像还显示出磨粒经过后已切削表面会有微弹，说明磨粒进入工件后对前方和左右两方工件材料都有挤压作用。总的来说，串行和并行仿真的瞬间原子位置图基本一致，这说明并行程序是正确的。

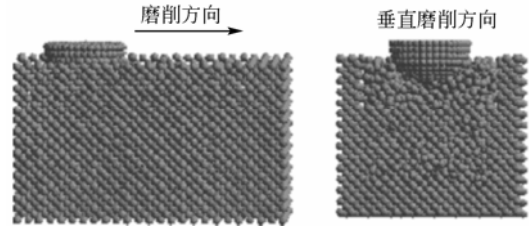


图 5 单晶硅串行仿真磨削过程中瞬间原子位置图

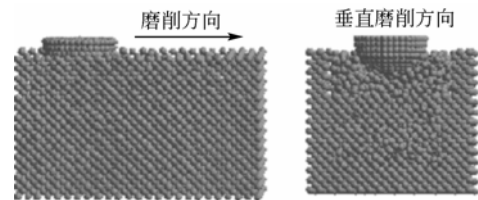


图 6 单晶硅并行仿真磨削过程中瞬间原子位置图

串行和并行仿真过程中系统都在 150 步左右趋于平衡，其能量的平衡值均在 $3.50 \times 10^{-15} \pm 2\%$ 范围之内，并且仿真过程中能量的变化趋势基本一致。

2.2.2 仿真规模和计算时间

表 2 所示为普通单机串行程序和不同数量结点机并程序计算结果的对比。表 2 中 a 是单晶硅的晶格常数，为 0.5432 nm 。从表 2 中可知，编制的并行仿真程序可应用在数万个原子的系统中，在联想深腾 1800 机群系统上进行运算后计算时间较普通单机的串行仿真至少缩短了 10 倍，仿真规模扩大后，计算时间增加不多，这些说明此并程序的性能很好，在仿真规模和计算时间方面都明显优于单机的串行计算。

表 2 分子动力学串行、并行仿真结果

计算类型	工件尺寸长宽高	模拟时间	运行时间
	$l \times b \times h / (\text{nm} \times \text{nm} \times \text{nm})$	t_1 / ps	t_2 / s
普通单机串行	$21a \times 9a \times 6a$	10	2.100×10^4
1 个结点机并行	$21a \times 9a \times 6a$	10	1.890×10^3
2 个结点机并行	$21a \times 9a \times 6a$	10	1.056×10^3
3 个结点机并行	$21a \times 9a \times 6a$	10	0.710×10^3
4 个结点机并行	$21a \times 9a \times 6a$	10	0.540×10^3
4 个结点机并行	$26a \times 20a \times 10a$	10	1.590×10^3

通过以上分析,可知在串、并程序仿真结果的瞬间原子位置图对比中,切屑的形成过程和方式、工件的变形及加工面的形貌都基本保持一致;系统能量变化曲线中,串、并行计算结果在达到趋衡的时间步数、趋于平衡的趋势和过程以及能量的平衡值等方面都几乎保持一致。从而证明,文中设计的并行仿真结果与串行仿真结果非常吻合,是正确有效的,并且在仿真规模和计算时间方面都优于串行仿真程序,因此该并行程序可以应用于不同原子规模的磨削过程的分子动力学仿真计算。

3 结 论

(1) 磨削过程中,磨粒的剪切挤压作用使磨粒前方和两侧的硅晶格下发生了变形,硅原子堆积在磨粒的前方和两侧,当贮存在变形晶格中的应变能超过一定值且不足以形成位错时,硅的原子键断裂,形成切屑,当磨粒经过后已加工表面还会有微弹现象发生。

(2) 在串行和并行仿真结果的瞬间原子位置图对比中,切屑的形成过程和方式、工件的变形及加工面的形貌都基本保持一致;在系统能量变化曲线的对比中,串行和并行计算结果在达到趋衡的时间步数、趋于平衡的趋势和过程以及能量的平衡值等方面都几乎保持一致。说明并行仿真程序是正确的,结果是有效的,可以应用于不同原子规模的磨削过程的分子动力学仿真计算。

(3) 在仿真规模和计算时间方面,并行仿真程序较串程序有很大提高,并行仿真程序将仿真的原子数由原来串程序的数千个原子扩大了数十倍以上,而仿真时间至少缩短到十分之一,再次证明此分子动力学仿真并行程序的设计是成功的。

参 考 文 献

- [1] 郭晓光,郭东明,康仁科,等. 单晶硅超精密磨削过程的分子动力学仿真[J]. 机械工程学报, 2006, 42(6): 46-49.
GUO Xiaoguang, GUO Dongming, KANG Renke, et al. Molecular dynamics simulation in monocrystal silicon grinding[J]. Chinese Journal of Mechanical Engineering, 2006, 42(6): 46-49.
- [2] 唐玉兰,梁迎春,霍德鸿,等. 单晶铜纳米切削过程的研究[J]. 纳米技术与精密工程, 2004, 2(2): 132-135.

- TANG Yulan, LIANG Yingchun, HUO Dehong, et al. Study on nanometric cutting process of monocrystalline copper by molecular dynamics[J]. Nanotechnology and Precision Engineering, 2004, 2(2): 132-135.
- [3] 曹小林,莫则尧,张景琳,等. 基于“块-单元”数据结构的分子动力学并行计算[J]. 计算物理, 2004, 21(5): 377-385.
CAO Xiaolin, MO Zerao, ZHANG Jinglin, et al. Parallel computation for molecular dynamics simulation based on cell-block data structures[J]. Chinese Journal of Computation Physics, 2004, 21(5): 377-385.
- [4] TERSOFF J. Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent system[J]. Physics Review, 1989, B39: 5 566-5 568.
- [5] CHEONG W C D, ZHANG L C, TANAKA H. Some essentials of simulation nano-surfacing processes using the molecular dynamics method[J]. Key Engineering Materials, 2001, 196: 31-42.
- [6] 黄昆. 固体物理学[M]. 北京: 高等教育出版社, 1985.
HUANG Kun. Solid-state physics[M]. Beijing: Higher Education Press, 1985.
- [7] 房晓勇,刘竞业,杨会静. 固体物理学[M]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学出版社, 2004.
FANG Xiaoyong, LIU Jingye, YANG Huijing. Solid-state physics[M]. Harbin: Harbin Institute of Technology Press, 2004.
- [8] SMITH W. Molecular dynamics on hypercube parallel computers[J]. Comp. Phy. Comm. 1991, 62(283): 229-248.
- [9] MURTY R, OKUNBOR D. Efficient parallel algorithms for molecular dynamics simulations[J]. Parallel Computing, 1999, 25: 217-230.
- [10] PLIMPTON S J. Molecular dynamics simulations of short-range force systems on 1024-node hypercubes[C]// Distributed Memory Computing Conference, Apr. 9-12, 1990, Charleston, USA. 1990: 478-483.

作者简介: 郭晓光,女,1976年出生,博士研究生,讲师。主要研究方向为超精密加工技术和分子动力学仿真。

E-mail: guoxg@dl.cn

郭东明,男,1959年出生,大连理工大学副校长,教授,博士研究生导师。主要研究方向为特种及精密加工、几何量精密测量、加工过程的计算机控制技术等。

E-mail: guodm@dlut.edu.cn