

LAMMPS ile Moleküler Dinamik

Hande Toffoli

Orta Doęu Teknik Üniversitesi, Fizik Bölümü

İçerik

- 1 Malzeme Biliminde Nümerik Hesaplamanın Yeri
- 2 Klasik Moleküler Dinamiğin Temel Öğeleri
- 3 Modern Nümerik Malzeme Biliminde YBH

- 1 Malzeme Biliminde Nümerik Hesaplamanın Yeri
- 2 Klasik Moleküler Dinamiğin Temel Öğeleri
- 3 Modern Nümerik Malzeme Biliminde YBH

Neden Nümerik Hesap?

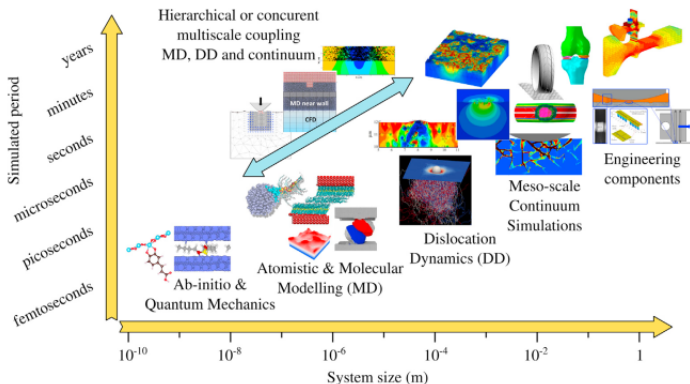
Her İşin Başı Schrödinger Denklemi

$$\left\{ \begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_i^2 && \text{Kinetik enerji} \\
 & + \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} && \text{El-el etkileşmesi} \\
 & + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_i \sum_l \frac{Z_l}{|\vec{r}_i - \vec{R}_l|} && \text{El-çekirdek etkileşmesi}
 \end{aligned} \right. \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = E\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$$

- $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ sistem hakkında gerekli tüm bilgiyi içerir.
- Analitik çözüm en fazla He iyonu için mümkündür.
- Yaklaşımlar \Rightarrow İstenen niceliğe göre değişik seviyelerde

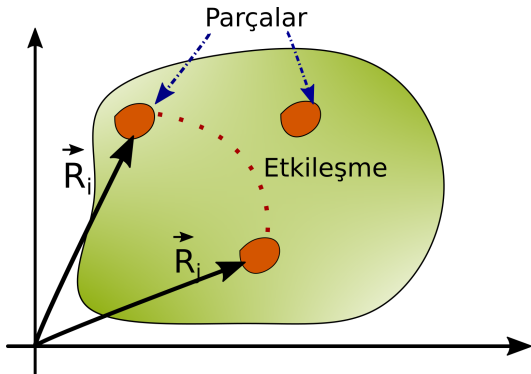
Hangi model seçilmeli?

Problem büyüklüğü ve simülasyon süresi



Vakis et al., *Tribology International* (2018)

Modellerin Ortak Ögeleri



- **Parçalar:** Sistemin bölünemez en küçük parçaları
- **Etkileşme:** Parçacıklar arasındaki etkileşme
- **Çözüm:** Diferansiyel denklemler, istatistikî metodlar, makina öğrenmesi

1 Malzeme Biliminde Nümerik Hesaplamanın Yeri

2 **Klasik Moleküler Dinamiğin Temel Öğeleri**

3 Modern Nümerik Malzeme Biliminde YBH

Moleküler Dinamik

Klasik mekanik

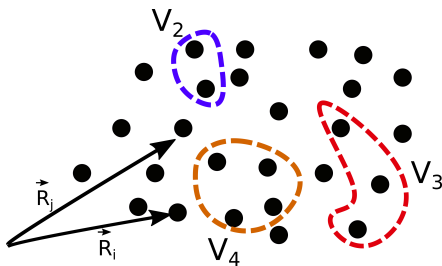
$$m_i \vec{a}_i = -\nabla_i U(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_N)$$

- Atomlar klasik noktasal parçacıklar olarak modellenir.
- Newton denklemleri çözülür.
- Pozisyonlar ve hızlar \Rightarrow sıcaklık, istatistiki ortalamalar, zamana göre evrilme vs.
- ÖNEMLİ: Moleküler dinamik sadece klasik mekanikle değil, herhangi bir yaklaşım seviyesinde yapılabilir.
- Uygun bir potansiyel enerji modeli gereklidir.

Atomlararası potansiyeller

Çok parçalı açılım

$$U = \sum_{ij} V_2(\vec{R}_i, \vec{R}_j) + \sum_{ijk} V_3(\vec{R}_i, \vec{R}_j, \vec{R}_k) + \sum_{ijkl} V_4(\vec{R}_i, \vec{R}_j, \vec{R}_k, \vec{R}_l) + \dots$$



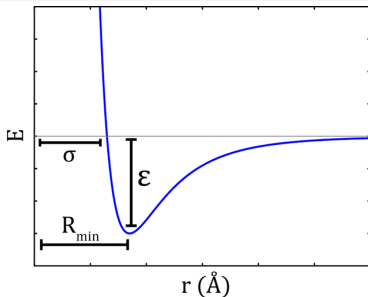
Atomlararası potansiyeller

En basit potansiyel: Lennard-Jones

$$U = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} 4\epsilon \left(\frac{\sigma^6}{r_{ij}^6} - \frac{\sigma^{12}}{r_{ij}^{12}} \right)$$

r_{ij} : i ve j atomu arasındaki uzaklık

σ, ϵ : potansiyelin parametreleri



Atomlararası potansiyeller

- Metalik sistemler — yönelimden nispeten bağımsız, elektron yoğunluğu kullanılır \Rightarrow 2. terim (Embedded Atom)

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \left[-\eta^2 e^{-2q(r_{ij}/r_0 - 1)} \right]^{1/2} + A e^{-p(r_{ij}/r_0 - 1)}$$

- Kovalent sistemler — hem uzaklık, hem yönelim \Rightarrow 2. + 3. terimler (Tersoff)

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} f_C(r_{ij}) + b_{ij}(\theta_{ijk}) f_A(r_{ij})$$

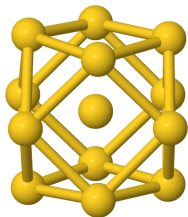
- Organik ve biyolojik moleküller — bağ, açı, bükülme \Rightarrow 2. + 3. + 4. terimler (CHARMM, AMBER)

$$U = \sum_{bonds} k_{bond} (d - d_0)^2 + \sum_{angles} k_{angle} (\theta - \theta_0)^2 + \sum_{torsions} k_{torsion} [1 + \cos(\eta\xi - \delta)]$$

Kenar koşulları

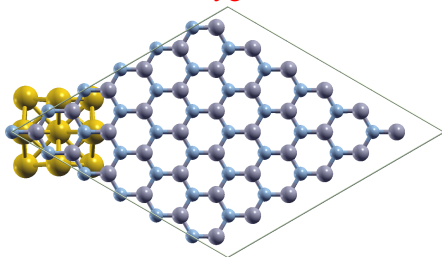
- Sonlu sistemler \rightarrow Serbest
- Büyük sistemler \rightarrow Periyodik

Lokalize



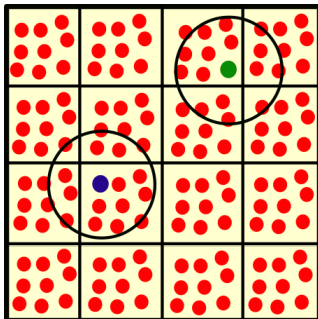
Au_{13} Kümesi

Yaygın



$Au_{13}/h\text{-BN}$

Enerji hesapları



- Tüm atom çiftleri, üçlüleri vb üzerinden toplam almak çok zordur.
Çift sayısı: $N \times (N - 1)/2$ uzaklık hesabı
- Her atomun sadece en yakın komşuları ile etkileştiği varsayılır.
Çift sayısı: $N \times N_{komu}/2$ uzaklık hesabı
- Sınır koşulları konusunda dikkatli olmak gereklidir. Periyodik sistemlerde komşular yan hücrede olabilir.

Newton denklemlerinin çözümü

Verlet algoritması

Türevlerin kesikli gösterimi ($dt \rightarrow \Delta t$):

$$\vec{R}_i(t + \Delta t) = \vec{R}_i(t) + \vec{v}_i(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{a}_i(t)\Delta t^2 + \frac{1}{6}\vec{b}_i(t)\Delta t^3 + \mathcal{O}(\Delta t^4)$$

$$\vec{R}_i(t - \Delta t) = \vec{R}_i(t) - \vec{v}_i(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{a}_i(t)\Delta t^2 - \frac{1}{6}\vec{b}_i(t)\Delta t^3 + \mathcal{O}(\Delta t^4)$$

$$\vec{R}_i(t + \Delta t) = 2\vec{R}_i(t) - \vec{R}_i(t - \Delta t) + \frac{\vec{F}_i(t)}{m_i}\Delta t^2 + \mathcal{O}(\Delta t^4)$$

- Hata payı 4. derecedendir.
- Bir sonraki adımdaki pozisyonlar, önceki iki adımdaki pozisyonlardan ve bir önceki adımdaki kuvvetlerden elde edilir.
- Zamanla, hata payları birikerek, enerjide 'drift' oluştururlar.

Sıcaklık kontrolü

Sıcaklık

$$T \equiv \frac{2}{3Nk_B} \sum_i \frac{1}{2} m_i v_i^2$$

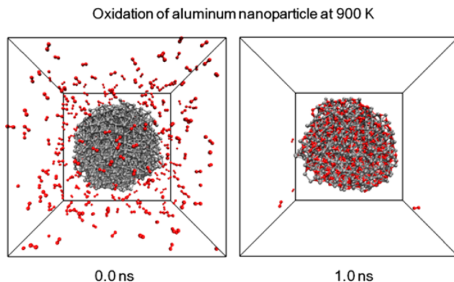
k_B : Boltzman sabiti

N : Atom sayısı

- Başlangıç koşullarından ve nümerik drift'ten dolayı, sıcaklık istediğimiz gibi olmayacaktır.
- Sıcaklık kontrolü için *termostat* adı verilen mekanizmaların kullanılması gereklidir.
- Termostatlar, fazla ya da az kinetik enerji durumunda atomik hızları değiştirerek gerekli sistemin gerekli sıcaklığa erişmesini sağlarlar.
- Nose-Hoover, Langevin, Anderson, Berendsen vb birçok termostat çeşidi mevcuttur.

Bir örnek

Alüminyum Nanoparçacıklarının Oksitlenmesi

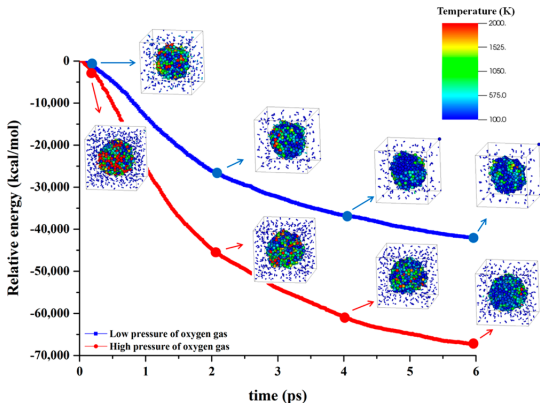


Hong and van Duin, *JPCCC* (2015)

- Al nanoparçacıklarının yakıt olarak kullanılma potansiyelleri bulunmaktadır.
- Oksidasyon mekanizması, değişik sıcaklıklarda ve O_2 basınç değerlerinde incelenmiştir.
- Potansiyel \Rightarrow reaksiyonlar için optimize edilmiş olan REAX-FE

Bir örnek

Alüminyum Nanoparçacıklarının Oksitlenmesi



Hong and van Duin, *JPCA* (2015)

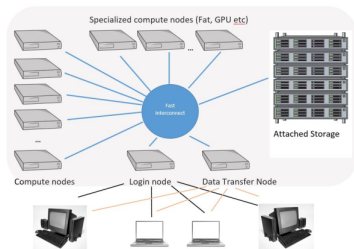
1 Malzeme Biliminde Nümerik Hesaplamanın Yeri

2 Klasik Moleküler Dinamiğin Temel Öğeleri

3 Modern Nümerik Malzeme Biliminde YBH

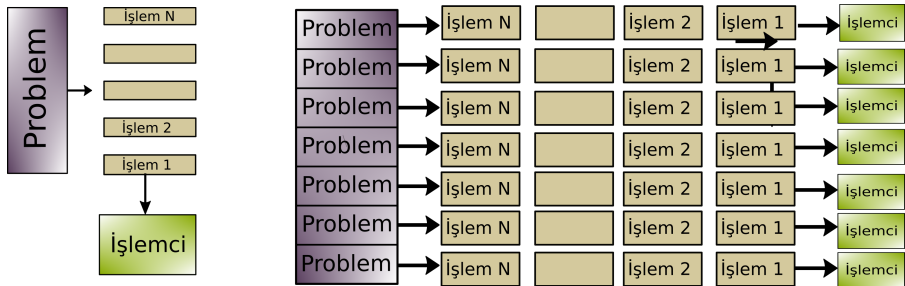
YBH Merkezleri

YBH Nedir?



- *Headnode* ya da *login node*: Kullanıcıların sisteme giriş yaptığı düğüm.
- *Compute nodes*: Kullanıcıların hesaplarını çalışmak üzere gönderdikleri düğümler.
- *Interconnect*: Nodları birbirine bağlayan network bağlantısı
- *Veri transfer nodu*: Hesapların bitiminde kullanıcının sonuçları alabileceği düğüm.

Paralel hesaplama



- Büyük bir problem, birbirinden bağımsız küçük parçalara bölüp aynı anda birden fazla işlemcide çözülebilir.

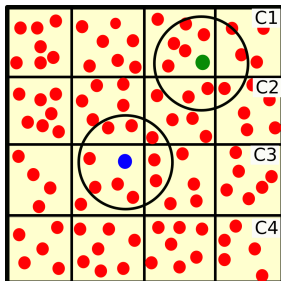
$$\vec{A} + \vec{B} = \sum_{i=1}^N (A_i + B_i) = \underbrace{\sum_{i=1}^n (A_i + B_i)}_{C1} + \underbrace{\sum_{i=n+1}^{2n} (A_i + B_i)}_{C2} + \dots + \underbrace{\sum_{i=N-n+1}^N (A_i + B_i)}_{Cn}$$

MD hesapları

Steve Plimpton, *J Comp Phys* (1995)

- MD hesapları \Rightarrow sadece atom bilgisi, düşük RAM
- Problemlerin karakteristik büyüklüğü: $100\text{nm} \times 100\text{nm} \times 100\text{nm}$ 'lik ve 1 ns 'lik bir simülasyon:
 - Uzaklıklar \approx Angstrom $\Rightarrow \approx 10^6$ atom
 - $\Delta t \approx$ femtosaniye $\Rightarrow \approx 10^6$ basamak
- Gerçekçi sistemlerde seri hesap mümkün değildir.
- Kısa menzilli kuvvetler \Rightarrow atomlar sadece yakın komşuluklarındaki diğer atomlarla etkileşirler
- Atomlar simülasyon boyunca çok mesafe kat etmezse, komşuluk tablosunu değiştirmek gerekli olmaz.

YBH ile MD hesapları



- Birbirlerine yakın atomlardan oluşan atomların konumları ayrı işlemcilerde/düğümelerde tutulabilir.
- Her atomun üzerindeki kuvvete kendi komşuluğundaki her atomun katkısı vardır.
- Değişik atomlardan gelen katkılar aynı anda farklı işlemcilerde hesaplanabilir.

Sınırları zorlayan bir örnek

100 Milyon Cu atomu!



Computer Physics Communications

Volume 259, February 2021, 107624



86 PFLOPS Deep Potential Molecular Dynamics simulation of 100 million atoms with *ab initio* accuracy ☆, ☆☆

Denghui Lu ^a, Han Wang ^b, Mohan Chen ^a, Lin Lin ^{c,d}, Roberto Car ^e, Weinan E ^e, Weile Jia ^e 吳, Linfeng Zhang ^e 吳

- Moleküler dinamik
- Atomların komşulukları farklı işlemcilerde dağıtılır.
- Atomlararası potansiyeller kullanılarak enerjilerin ve kuvvetlerin hesabında ML algoritmaları.
- Hem GPU hem CPU için destek

Sınırları zorlayan bir örnek

100 Milyon Cu atomu!

