

分子统计热力学 (MST) 计算软件的开发

肖攀¹, 杨荣¹, 王军², 柯孚久^{1,2}, 白以龙¹

1. 中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室, 北京 100190

2. 北京航空航天大学物理科学与核能工程学院, 北京 100191

摘要: 固体力学的发展逐渐深入到了微纳米尺度, 为了研究微纳米尺度材料的力学行为, 除了传统的理论分析和实验测量手段外, 发展可靠而又高效的计算方法成为了当前微纳米力学研究的热点之一。分子统计热力学方法 (Molecule Statistical Thermodynamics, 简称 MST) 是一种新的基于原子表象的分子模拟方法。与传统的基于牛顿运动方程的分子动力学方法 (Molecular Dynamics, 简称 MD) 相比, MST 基于对体系 Helmholtz 自由能的极小化, 适用于分析材料在有限温度下的准静态行为, 具有更高的计算效率。本文介绍了 MST 方法的理论基础, 以及由此而开发的 MST 并行计算软件。在此基础上, 采用 MST 程序模拟了单晶纳米铜体系, 显示其计算时间随体系原子数目成线性关系, 并对 MST 并行程度的计算效率进行了讨论。

关键词: 分子统计热力学方法 (MST); 分子模拟并行计算软件; 微纳米尺度力学; Helmholtz 自由能

Development of the Molecule Statistical Thermodynamics (MST) Parallel Simulation Package

Xiao Pan¹, Yang Rong¹, Wang Jun², Ke Fujiu^{1,2}, Bai Yilong¹

1. LNM, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100190, China

2. School of Physics and Nuclear Energy Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China

基金项目: 国家自然科学基金 (10932011, 11021262, 10972218, 11172024, 11172305); 国家重点研究发展计划 (973计划) (2012CB937500)

Abstract: One frontier in mechanics at micro/nano-meter scales is how to effectively characterize the coupling of multiple spatial and temporal scales. To solve this problem, reliable and efficient multi-scale numerical methods are urgently needed. Molecule statistical thermodynamics (MST) is a new and distinct numerical approach designed for quasi-static analysis of nanomaterials at finite temperature. Different from molecular dynamics (MD) based on Newton equations, MST is a half-analytical numerical method based on the minimization of Helmholtz free energy. As a distinct atomistic representation, MST can provide an effective numerical approach to quasi-static analysis of nanomaterials. To facilitate the application of MST to various nanomaterials, this work fulfills the parallelization of MST procedures and the optimization of calculations of Helmholtz free energy and its derivatives. Based on those considerations, an MST parallel simulation package is developed. Application of MST to single crystal copper shows a linear relationship between the computational consumption and total of atoms. Finally, the parallel efficiency of MST simulation package is also discussed.

Keywords: Molecule statistical thermodynamics (MST); Parallel molecular simulation package; Micro/nano Mechanics; Helmholtz free energy

1. 引言

近年来,人们对固体材料的研究逐渐深入到了微纳米尺度,出现了一些采用传统连续介质力学难以解决的新问题,如纳米压痕过程中微结构的变化^[1]、微纳米材料力学性能的尺寸效应^[2,3]、非晶材料中剪切带的形成及扩展等等^[4-7]。这些问题所涉及的空间尺度范围在纳米到微米量级,而且不同尺度下材料的微观结构及其变形行为有着很大的差别,采用传统的理论分析和实验手段是无法完全解决的,而需要数值计算方法作为补充。

在材料科学当中,针对不同的空间尺度,比较常用的数值计算方法有第一原理方法、分子动力学方法(Molecular Dynamics,简称MD)以及有限元方法(Finite Element Method,简称FEM)。第一原理方法计算精度比较高,但它所能计算的体系只能达到几百个原子左右。MD方法采用原子表象,可以计算更大的原子体系,但在空间和时间尺度上还不能完全满足微纳米尺度下相关力学问题分析的要求。FEM方法能有效计算微米或微米以上尺度的力学问题,但很难获得原子层次的物理信息。因此,现有成熟的数值计算方法不足以完好地解决材料在微纳米尺度的力学问题。

针对微纳米尺度新力学问题的特征以及传统计算

方法的局限性,人们提出了多尺度计算方法^[8-12]。多尺度方法试图在同一模拟中联合采用多种表象形式,这样既可以节省计算量又可以获得原子层次的结构和物理信息,以此来有效地解决微纳米尺度下的力学问题。作为多尺度方法的一种,2005年,白以龙、胡明等人^[13-15]提出了分子/集团统计热力学(Molecule/Cluster Statistical Thermodynamics,简称MST/CST)计算框架,相比其它方法,MST/CST考虑了温度效应,可以用于分析有限温度下微纳米材料的准静态行为。其中MST方法是这一计算框架的基础,MST方法的可靠性以及计算效率都反映了其它两种方法的计算性能。因此,MST方法的研究对于发展含有温度效应的多尺度计算方法有着重要意义。

在提出MST/CST计算框架之后,胡明等人对这一组方法的性能作了初步的分析^[16],但在MST方法的理论基础上,为了使MST方法能保持比较高的计算效率,并且能应用于大规模的体系计算,还需要对MST方法的程序实现进行研究。其中包含并行算法的选取、Helmholtz自由能及其导数的计算及优化、如何采用几种典型势函数来高效地计算自由能及其导数、如何模块化计算程序并保持良好的通用性能扩展性等等。本文着重讨论根据MST方法的理论基础和特点,设计不同的计算环节来平衡内存占用、计算单元之间数据交换及计算效率之间的关系,开发出

并行计算程序。并以此对 MST 方法的计算效率进行讨论。

2. MST 方法的理论基础简介

MST 方法采用原子表象, 通过对原子体系的 Helmholtz 自由能进行极小化来分析材料在有限温度下的准静态行为。理论上, MST 方法的计算核心是通过结合统计热力学和晶格动力学理论而得到的以原子平均坐标为自变量的体系 Helmholtz 自由能^[13]:

$$F = V_0 + 3kT \sum_{i=1}^N \ln \frac{\hbar |D_i|^{1/6}}{kT} \quad (1.1)$$

其中, V_0 为体系的势能, k 和 \hbar 分别为玻尔兹曼和普朗克常数, T 为体系的温度, D_i 则为简化了的原子局部动力学矩阵:

$$D_i = \frac{1}{m_i} \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_i} & \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial y_i} & \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial z_i} \\ \frac{\partial^2 V}{\partial y_i \partial x_i} & \frac{\partial^2 V}{\partial y_i \partial y_i} & \frac{\partial^2 V}{\partial y_i \partial z_i} \\ \frac{\partial^2 V}{\partial z_i \partial x_i} & \frac{\partial^2 V}{\partial z_i \partial y_i} & \frac{\partial^2 V}{\partial z_i \partial z_i} \end{bmatrix} \quad (1.2)$$

其中, m_i 为原子的质量, 而矩阵元素则是势函数对原子平均坐标的二阶导数, (x_i, y_i, z_i) 是第 i 个原子在相应平衡态或亚稳态中平均位置的坐标。对于等温等体积的原子体系, 其平衡构型, 即全部原子的平均位置在空间的分布, 对应于 Helmholtz 自由能极小:

$$\delta F = 0 \quad (1.3)$$

在极小化的过程中, 通过调节体系内每个原子的平均坐标来寻找对应于 Helmholtz 自由能极小的平衡构型, 然后根据平衡构型计算出所关心的物理量。在具体研究微纳米材料准静态力学行为时, MST 方法的分析过程为:

(1) 初始化计算体系的原子构型, 并选择描述原子之间相互作用的势函数。自由能表达式 (1.1) 中包含两项: 第一项为体系势能; 第二项为原子的热振动对自由能的贡献, 其中的动力学矩阵元素可由势函数对原子坐标的二阶导数来确定。

(2) 对体系的自由能进行极小化求解, 得到热平衡构型。在极小化过程中, 除了要计算体系自由能本身外, 还要计算自由能对原子坐标的导数来确定极小化过程中的线搜索方向以及梯度。

(3) 通过自由能极小化得到体系平衡构型之后, 便可以计算在具体问题中所关心的物理量, 如应力、应变、中心对称参数、粒子的局部能量密度等, 用于对具体物理问题的定量分析。

(4) 对体系进行加载。例如, 模拟对纳米杆的压缩过程, 可以在原有构型的基础上, 将体系内所有原子的相对位置沿着加载方向均匀缩小; 在保持体系压缩应变不变的条件下, 再次对体系的 Helmholtz 自由能进行极小, 得到压缩加载后的新构型, 从而可以计算新的物理量值。

3. MST 方法的算法实现及软件开发

3.1 MST 软件开发所需要考虑的因素

理论上 MST 方法基于对原子体系的 Helmholtz 自由能极小化过程, 为了严格地实现 MST 方法的计算过程并保持较高的计算效率, 程序上需要从以下四个方面综合考虑:

(1) 程序计算的可行性。为了使 MST 的理论便于程序计算, 需要对理论中所要涉及到的计算式进行详细推导, 并设计具体的计算过程。同时, 为了提高计算效率, 需要对一些计算式进行分层展开或形式变换。

(2) 计算过程的并行化。在研究微纳米材料力学性能时, 人们希望模拟更大的体系以与实验结果进行对比。然而即使是对一个 $100 \text{ nm} \times 100 \text{ nm} \times 100 \text{ nm}$ 的体系, 其原子数目就达到了 10^8 量级, 一般的单机很难处理如此大的体系。因此, 并行化成为了当前分子模拟的一个重要手段。MST 是一种基于势函数的分子模拟方法, 其主要计算量在于对势函数及其导数的

求解。对基于势函数的分子模拟方法进行并行化, 主要研究如何把求解势函数及其导数的任务有效地分配到不同的计算单元上去, 并尽量平衡每个单元的计算负载。目前常用的分子模拟并行算法有原子分解法^[17]、力分解法^[18]和空间分解法^[19]。为了能让 MST 方法处理更大的原子体系, 根据这三种并行算法的特点, 宜采用空间分解并行算法。

(3) 计算程序的通用性。在分子模拟中会涉及到二维、三维体系, 针对不同的材料有不同的势函数形式, 原子的类型多种多样, 边界条件、加载方式也会根据所考虑的物理问题有所不同。为了扩大 MST 方法的应用范围, 在对 MST 方法进行程序化时需要考虑其通用性。为了设计通用的计算程序, 需要分析由 MST 方法理论所推导出来的计算式形式、以及求解过程的普适性和特殊性。

(4) 计算程序的易操作性和可扩展性。虽然 MST 的计算过程很复杂, 但对于使用者而言只需要提供简单的核心参数, 如原子类型及质量、体系温度、势参数等; 而且能够方便地提交并行计算任务。由于用户所分析的具体物理问题不同, 针对不同的要求, 计算程序应该能方便地扩展新功能, 并且不影响已存在的功能。同时为了进一步发展 MST 方法, 对 MST 方法的理论改进应当能方便地加入到计算程序中, 以分析改进的效果。

3.2 MST 通用并行程序的开发

3.2.1 计算流程

Helmholtz 自由能及导数计算式、不同势函数及导数的计算式, 是 MST 方法的计算核心, 结合自由能极小化方法便可以设计 MST 方法的通用计算流程。从数学上而言, MST 的计算过程对应于一个无约束优化问题, 常用的算法有最速下降法、Newton 法、共轭梯度法等。相比而言, 最速下降法收敛比较慢, 而 Newton 方法的计算量、存储量比较大; 共轭梯度算法的效果介于两者之间, 而且存储量小, 可用来求解大的无约束优化问题^[20]。为了高效地计算大规模的原子体系, 在 MST 计算中的自由能极小化方法采用共轭梯度算法^[20]。结合自由能计算和共轭梯度算法,

MST方法计算的主流程如图 1 所示。

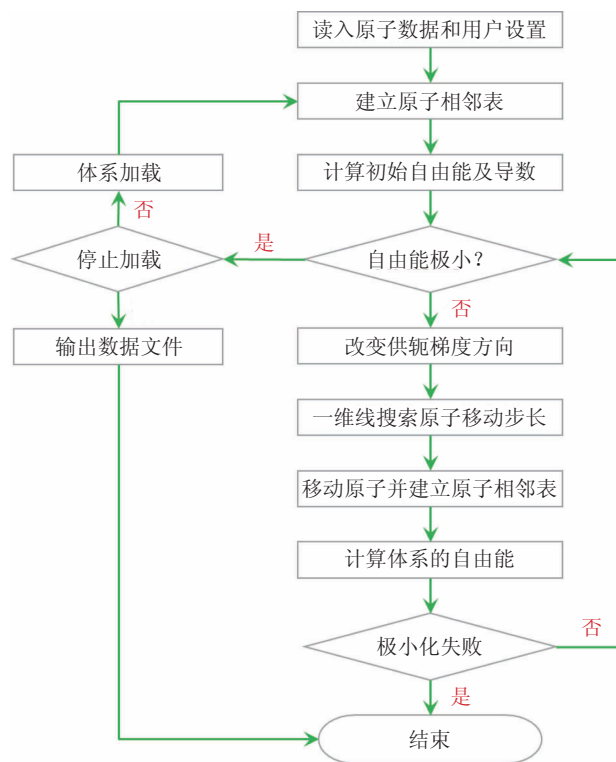


图 1 MST 计算主流程

3.2.2 软件框架模块设计

基于 MST 的理论计算式和主流程, 我们开发了用于 MST 计算的通用软件 MSTs (Molecular Statistical Thermodynamic Simulator)。MSTs 包括串行和并行版本, 串行版本主要用于单机计算, 而并行版本主要用于大规模的并行计算。两个版本都采用 C++ 语言进行开发, 利用其面向对象语言的特点, 分别设计了不同的程序模块, 以提高软件的通用性和扩展性。在串行和并行程序的设计中都包含有以下几个重要模块 (如图 2 所示):

(1) 原子信息模块, 主要负责对这原子数据信息进行存贮及更新。

(2) 相邻原子模块, 主要负责对原子的相邻链表的建立及更新。

(3) 自由能计算模块, 主要负责组织调用各种势函数, 遍历所有原子对, 求解势函数的各阶导数, 完成 Helmholtz 自由能及其导数的计算。

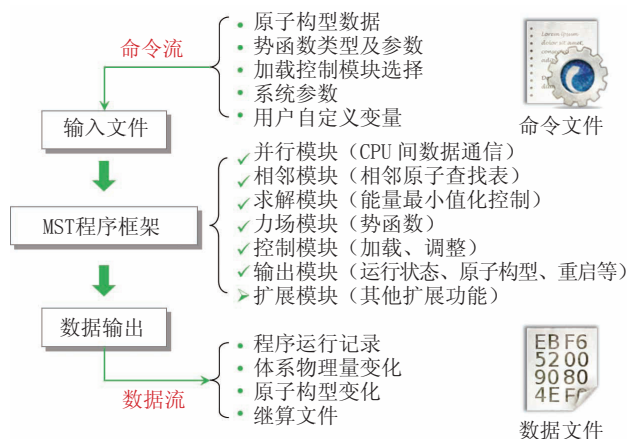


图 2 MSTS 软件的程序框架及操作流程

(4) 极小化求解模块, 主要负责完成自由能极小化的步骤, 其中包括共轭梯度算法、一维线搜索算法、极小化过程的精度控制等。

(5) 控制模块。这一模块主要用于控制 MSTS 的计算过程, 如加载步的设置, 以及通过调整模拟体系的原子构型来施加位移载荷等等。

(6) 输入输出模块。MSTS 采用读入用户命令流的形式来控制计算过程。输入模块则用于分析用户输入的命令并调用其它模块来执行, 另外也用于读入体系的原子构型或恢复文件。而输出模块则用于输出 MSTS 的运行信息、体系相关物理量的变化、保存每个加载步的体系平衡构型用于后处理, 以及生成续算文件等等。

对于并行计算程序还要设计一个专门的并行通信模块。在 MSTS 并行程序中采用的是空间分解并行算法, 其中涉及到原子从一个计算单元迁移到另一个计算单元, 这需要通过并行通信传递原子信息。另外, 在计算自由能及其导数时, 每个计算单元除了完成自身内部原子之间相互作用的求解后, 还需要与邻近计算单元通信, 以补充相邻计算单元内原子与自身内部原子之间的相互作用。在原子信息互换这一方面, MST 方法与 MD 方法是类似的, 因此在 MSTS 并行软件的开发过程中, 并行模块的设计中参考了 MD 计算软件 LAMMPS 的处理方法^[19, 21], 计算单元之间的数据通信则采用的是 MPI 函数库。

3.2.3 操作流程

MSTS 计算软件既可以运行于单机也可以运行于并行机, 并且支持 Windows 和 Linux 操作系统。由于 MSTS 采用了 C++ 的面向对象程序设计, 使其便于扩展, 因此可以方便地根据需求不断添加新功能。MSTS 软件的操作流程如图 2 所示, MSTS 计算程序功能丰富并且具有良好的通用性, 为方便用户操作, 它以命令流的形式来控制计算过程, 而且便于并行任务的提交。MSTS 的串行版本已经在中国软件登记中心进行了软件著作权保护登记(登记号为: 2011SR003778)^[22]。在以后的应用过程中^[23-27], 可以在 MSTS 中加入更多的功能, 扩大 MST 方法的应用范围。

3.3 MST 软件计算效率分析

3.3.1 算例说明

算例体系是一个具有面心立方 (FCC) 晶格结构的单晶纳米杆, 如图 3 (a) 所示^[14]。纳米杆从一个具有 FCC 晶格的单晶块体铜中截取出来, 其晶格常数为 3.615 Å。纳米杆沿 x 方向为 [100] 晶向, 侧表面为 {100} 晶面。计算过程中采用 L-J 势来描述原子之间的相互作用^[14]。纳米杆沿 x, y 和 z 方向的尺寸为 10.8 nm × 2.2 nm × 2.2 nm, 相当于在各个方向截取了 30 × 6 × 6 个晶格长度。纳米杆的 y 和 z 方向采用的是自由边界条件, 而 x 方向两端各有长度为 1.0 nm 的固定原子层, 用于在模拟过程中施加位

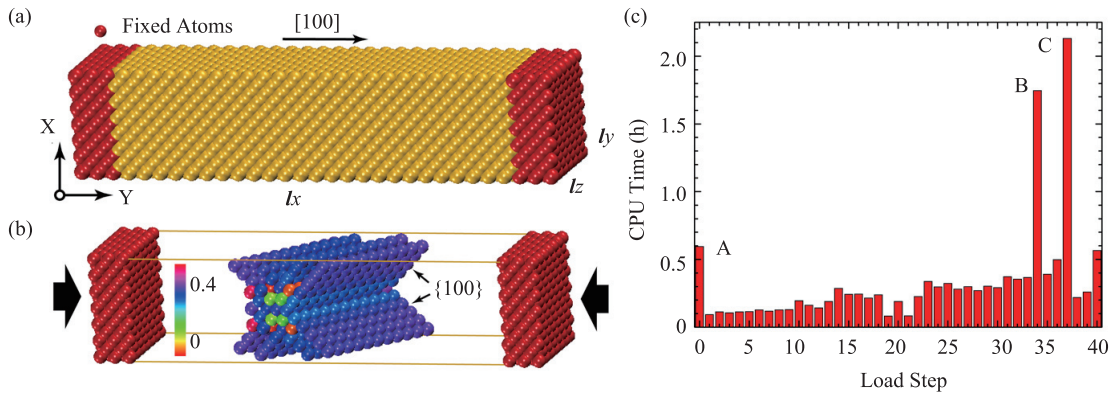


图3 MST 计算单晶铜的压缩过程及所消耗 CPU 时间。(a)算例体系是一个具有面心立方 (FCC) 晶格结构的单晶纳米杆;(b)采用 MST 方法进行压缩模拟, 压缩过程中伴随有位错的产生;(c)压缩过程中每个加载步所消耗的 CPU 时间不一样。

移载荷, 计算过程中的温度为 300 K。

针对这一体系, 采用 MST 方法进行压缩模拟, 压缩过程中伴随有位错的产生, 如图 3 (b) 所示。由于位错的产生具有随机性, 因而压缩过程中每个加载步所消耗的 CPU 时间不一样, 如图 3 (c) 所示。对于第一个加载步, MST 需要花费较多的计算时间来根据初始构型寻找其平衡构型。而在后继加载步中, 由于加载后原子位置离潜在平衡位置比较近, 因而 MST 所花的 CPU 时间较少。当体系中产生滑移位错时, 所花的计算时间则更多, 如图 3 (c) 中的 B、C 两个加载步。

3.3.2 不同原子数

MST 计算时间随原子总数变化情况, 一方面取

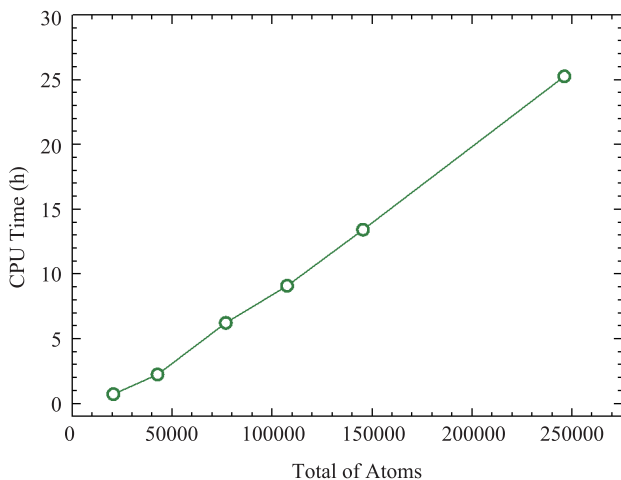


图4 MST 计算时间随体系原子总数的变化

决于方法本身的计算过程, 另一方面也与软件数据结构 and 计算流程设计有关。因此对采用 MST 计算不同原子数的情形进行了分析, 如图 4 所示。计算体系与图 3 (a) 所示构型相似, 为了消除体系边界和形状的影响, 分别取 $l_x: l_y: l_z = 4:1:1$ 来生成原子构型, 原子总数从 20 507 增加到 246 103。从总体上来看, MST 的计算时间与体系规模呈线性关系, 即计算复杂度为 $\Theta(N)$ 。除了说明 MST 方法本身的计算特点外, 也可以看出程序中对于大量原子数据的迁移、自由能导数计算过程的设计是合理有效的, 便于扩展到更大的计算体系。

3.3.3 不同 CPU 核心数

为了测试 MST 计算软件的并行效率, 分别采用不同 CPU 核心数计算了单晶铜纳米杆的压缩过程。计算体系 $l_x \times l_y \times l_z$ 为 $21.6 \text{ nm} \times 5.8 \text{ nm} \times 5.8 \text{ nm}$, 包含 61 529 个原子。计算是在 DELL M610 刀片式服务器上进行, 每个刀片有 2 颗 Intel® 6 核 Xeon (R) X5650 2.66GHz 型号的 CPU, 刀片间的数据通信采用的是 40Gb QDR Infiniband 高速网络, 计算结果如表 1 所示。因为压缩过程中每个加载步的计算时间不相同, 因而表中并没有比较每个加载步所用的计算时间, 而是比较求解自由能导数 1000 次所消耗的平均计算时间。这一计算时间能更客观地反映程序并行效率。

从表 1 可以看出, 当 CPU 核心数从 2 增加至 48 时, 并行效率从 99.5% 下降至 32.5%。对于 CPU 核心数增加至 16 时, 其并行效率为 66.1%,

表 1 不同 CPU 数目下 MST 并行效率对比

CPU 核心数	空间分解	计算时间 (秒/1000 次)	加速比	并行效率
1	1×1×1	1042.3	1	*
2	2×1×1	524.8	1.99	99.5%
4	4×1×1	274.6	3.80	95.0%
8	4×1×2	157.3	6.63	82.9%
16	4×2×2	98.5	10.58	66.1%
32	8×2×2	68.9	15.12	47.2%
48	8×2×3	63.3	16.46	32.5%

说明 MST 程序的并行扩展性是比较好的。但当 CPU 核心数增加至 48 时, 32.5% 的并行效率并不理想。出现这种情况的原因有两个方面: (1) 测试 CPU 核心数较少。囿于计算资源有限, 测试中没能使用几百上千个 CPU 核心来进行测试。当 CPU 核心从 1 增加至 48 时, 核心的分布有三种: 单个 CPU 之内的核心、同一计算结点之内的核心以及不同计算结点之间的核心。这三种情况下 CPU 核心之间的数据交换速度是不相同的, 因而导致并行效率的显著降低。只有当 CPU 数目足够多时, 才能降低这一因素的影响; (2) 计算体系较小。由于采用的是空间分解并行算法, 相邻 CPU 核心之间交换原子数与原子总数比例对并行效率也有影响。确切地说, 只有当交换原子与原子总数的比例较小时 (例如小于 10%), 并行效率的比较才更客观。在当前的测试中, 当 CPU 核心数增加至 48 时, 用于交换原子数达到了近 50.1%, 在一定程度上制约了并行效率。因而, 在下一步工作中, 有必要计算更大体系, 并考虑采用更多的计算资源来进行完整测试。

4. 总结

开发适用于微纳米尺度材料力学性能分析的有效计算方法及程序, 对于微纳米尺度下固体材料的工程应用以及力学问题的机理分析都有着重要意义。本文以一种新的适用于微纳米尺度材料在有限温度

下的准静态行为分析的计算方法——分子统计热力学方法 (简称 MST) 为对象, 重点讨论了基于 MST 方法的理论基础, 如何开发出高效的并行计算程序。根据 MST 方法的计算式和空间分解算法的要求, 设计和开发了 MSTs 通用计算程序, 该程序有串行和并行版本。两个版本的设计中都包含有原子信息模块、相邻原子模块、自由能计算模块、最小化求解模块、控制模块以及输入输出模块。这些模块分别负责不同的功能, 使得 MSTs 程序具有更好的扩展性。为了实现并行计算, 在并行版本中引入了并行计算模块用于原子信息和自由能及其导数计算的数据通信。采用 MST 方法计算不同原子数体系表明, 其计算时间与原子数呈线性关系, 表明出 MST 方法在计算体系上的可扩展性。不同 CPU 核心的测试表明, MST 并行软件具有良好的并行扩展性, 而更完整的并行效率分析还需要作进一步的计算。这些分析和设计可以为同类分子模拟并行软件的开发提供参考。

5. 致谢

本论文得到国家自然科学基金 (基金号: 10932011, 11021262, 10972218, 11172024, 11172305)、973 计划 (2012CB937500) 的支持, 在此表示感谢。感谢中国科学院计算机网络信息中心超级计算中心的中科院超级计算网格环境、佐治亚理工学院动力学性质研究实验室以及首尔大学力学与航天工程学院 WCU 合作计划资助的并行机群对本文工作提供并行计算的支持。

参考文献

- [1] 张泰华. 微/纳米力学测试技术及其应用. 北京: 机械工业出版社; 2004.
- [2] Agrawal R, Peng B, Gdoutos EE, Espinosa HD. Elasticity Size Effects in ZnO Nanowires-A Combined Experimental-Computational Approach. *Nano Lett.* 2008;8(11):3668-74.
- [3] Chen CQ, Shi Y, Zhang YS, Zhu J, Yan YJ. Size Dependence of Young's Modulus in ZnO Nanowires.

- Phys Rev Lett. 2006;96(7):075505.
- [4] Chen H. Glassy metals. Reports on Progress in Physics. 1980;43:353.
- [5] Dai L, Bai Y. Basic mechanical behaviors and mechanics of shear banding in BMGs. International Journal of Impact Engineering. 2008;35(8):704-16.
- [6] Liu LF, Dai LH, Bai YL, Wei BC, Eckert J. Behavior of multiple shear bands in Zr-based bulk metallic glass. Materials Chemistry and Physics. 2005;93(1):174-7.
- [7] Spaepen F. A microscopic mechanism for steady state inhomogeneous flow in metallic glasses. Acta Metallurgica. 1977;25(4):407-15.
- [8] Kohlhoff S, Gumbsch P, Fischmeister H. Crack propagation in b. c. c. crystals studied with a combined finite-element and atomistic model. Philosophical Magazine Pt A Defects and Mechanical Properties. 1991;64:851-78.
- [9] Miller RE, Tadmor EB. The quasicontinuum method: Overview, applications and current directions. Journal of Computer-Aided Materials Design. 2002;9(3):203-39.
- [10] Tan H, Yang W. Atomistic/continuum simulation of interfacial fracture, Part I: Atomistic simulation. Acta Mechanica Sinica. 1994;10(2):151.
- [11] Tan H, Yang W. Atomistic/continuum simulation of interfacial fracture Part II: Atomistic/dislocation/continuum simulation. Acta Mechanica Sinica. 1994;10:237-49.
- [12] Tang S, Hou TY, Liu WK. A mathematical framework of the bridging scale method. International Journal for Numerical Methods in Engineering. 2006;65(10):1688-713.
- [13] Wang HY, Hu M, Xia MF, Ke FJ, Bai YL. Molecule/cluster statistical thermodynamics methods to simulate quasi-static deformations at finite temperature. International Journal of Solids and Structures. 2008;45(13):3918-33.
- [14] Xiao P, Wang J, Ke F, Bai Y. Molecular statistical thermodynamics – a distinct and efficient numerical approach to quasi-static analysis of nanomaterials at finite temperature. Composites Part B: Engineering (Accepted). 2011.
- [15] 谭浩, 郑志军, 汪海英, 夏蒙芬, 柯孚久. 微纳米尺度下材料性能多尺度模拟方法进展. 力学进展. 2011;2.
- [16] 胡明. 纳-微米尺度力学的统计准连续方法和应用. 北京: 中国科学院研究生院; 2006.
- [17] Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. Journal of Computational Physics. 1995;117(1):1-19.
- [18] Plimpton SJ, Hendrickson BA. Parallel molecular dynamics with the embedded atom method. Citeseer; 1993. p. 37-41.
- [19] Plimpton S, Hendrickson B. A new parallel method for molecular dynamics simulation of macromolecular systems. Journal of Computational Chemistry. 1996;17(3):326-37.
- [20] 袁亚湘, 孙文瑜. 最优化理论与方法. 北京: 科学出版社; 1997.
- [21] <http://lammps.sandia.gov/>.
- [22] Xiao P. Molecular Statistical Thermodynamics Simulator. Beijing, 2011.
- [23] Tan H, Wang H, Xia M, Ke F, Bai Y. Self-adaptive molecule/cluster statistical thermodynamics method for quasi-static deformation at finite temperature. Acta Mechanica Solida Sinica. 2011;24(1):92-100.
- [24] Tan H, Wang HY, Xia MF, Ke FJ, Bai YL. Molecule Statistical Thermodynamics Simulation of Nanoindentation of Single Crystal Copper with EAM Potential. Chinese Physics Letters. 2011;28:046201.
- [25] Wang J, Xiao P, Zhou M, Wang Z, Ke F. Wurtzite-to-tetragonal structure phase transformation and size effect in ZnO nanorods. Journal of Applied Physics. 2010;107(2):023512--7.
- [26] Xiao P, Wang J, Ke F, Bai Y. Molecular statistical thermodynamics-a distinct and efficient numerical approach to quasi-static analysis of nanomaterials at finite temperature. Composites Part B: Engineering. 2011.

[27] Xiao P, Wang X, Wang J, Ke F, Zhou M, Bai Y. Surface transformation and inversion domain boundaries in gallium nitride nanorods. *Appl Phys Lett*. 2009;95(21):211907-3.

收稿时间: 2011 年 10 月 8 日

肖攀: 中国科学院力学研究所助理研究员, 博士。主要研究方向为微/纳米尺度力学、多尺度计算方法开发及应用。E-mail: xiaopan@lnm.imech.ac.cn

杨荣: 中国科学院力学研究所助理研究员, 博士。主要研究方向为微/纳米力学测试。E-mail: yangr@lnm.imech.ac.cn

王军: 北京航空航天大学讲师, 博士。主要研究方向为新型陶瓷/半导体纳米线力学性能。E-mail: fxtxwj@163.com

柯孚久: 北京航空航天大学, 博士生导师, 教授。主要研究方向为微/纳米尺度物质的力学、热学性质。E-mail: kefj@lnm.imech.ac.cn

白以龙: 中国科学院力学研究所, 博士生导师, 研究员。主要研究方向为固体的细—微观结构和宏观力学性能的关系。E-mail: byl@lnm.imech.ac.cn