

# 基于分子动力学算法的材料拉伸虚拟仿真实验设计

杨 亮, 战光辉, 林仕伟\*

海南大学材料与工程学院, 海南 海口  
Email: yl5923@hainanu.edu.cn, \*linsw@hainanu.edu.cn

收稿日期: 2021年5月12日; 录用日期: 2021年6月21日; 发布日期: 2021年6月28日

## 摘 要

拉伸实验在材料力学教学过程中占有重要的地位, 科学设计基于物理算法的教学辅助系统不但有助于丰富实验内容也有利于提高教学质量。基于铜的EAM嵌入原子势函数, 采用分子动力学算法构建FCC结构铜单晶模型模拟铜的单轴拉伸实验, 通过输出应力-应变曲线和三维可视化原子位置的演化、原子受力等数据直观向学生展示了铜拉伸过程中微观结构的变化。通过外推实验模型和极限实验条件, 可丰富实验教学内容、提高教学质量、培养学生的创新意识和探索精神。

## 关键词

拉伸实验, 虚拟仿真, 物理算法, 分子动力学, 实验教学

# The Design of the Material Stretch Virtual Simulation Experiment Based on Molecular Dynamics Algorithm

Liang Yang, Guanghui Zhan, Shiwei Lin\*

School of Materials Science and Engineering, Hainan University, Haikou Hainan  
Email: yl5923@hainanu.edu.cn, \*linsw@hainanu.edu.cn

Received: May 12<sup>th</sup>, 2021; accepted: Jun. 21<sup>st</sup>, 2021; published: Jun. 28<sup>th</sup>, 2021

\*通讯作者。

文章引用: 杨亮, 战光辉, 林仕伟. 基于分子动力学算法的材料拉伸虚拟仿真实验设计[J]. 创新教育研究, 2021, 9(3): 725-731. DOI: 10.12677/ces.2021.93119

## Abstract

Material stretching experiment plays an important role in the teaching process of materials aesthetics, and scientific design of teaching aids based on physical algorithms not only helps to enrich the experimental content but also helps to improve the quality of teaching. Based on the EAM embedded atomic potential function of copper, this paper simulates the single-axis extrusion experiment of copper by constructing the single crystal model of FCC structure using molecular dynamics algorithm, and shows the changes of microstructure in the process of copper extrusion by output stress-strain curve and three-dimensional visual atomic position evolution, atomic force and other data. Through extrapolated experimental model and extreme experimental conditions, we can enrich the experimental teaching content, improve the teaching quality, cultivate students' innovative consciousness and exploration spirit.

## Keywords

Stretching Experiments, Virtual Simulation, Physical Algorithms, Molecular Dynamics, Experimental Teaching

Copyright © 2021 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

材料力学是材料类、土木类、机械类等本科专业的专业基础课程[1] [2], 其中材料力学性能主要研究材料在承受载荷时变形断裂规律并由此评定材料的力学性质, 并获得材料力学性能指标, 如屈服强度、拉伸强度、伸长率及收缩率等, 以此宏观层面表达材料的力学性能。目前, 随计算机软硬件技术的进步材料力学实验虚拟仿真环境发展很快, 基于不同模拟方法的仿真模拟软件众多, 如基于 CATIA 三维软件建立实验平台[3]、Unity 3D 开发的虚拟仿真实验系统[4] [5]、基于 C++ 开发的教学软件[6]及 Visual Basic 6.0 系统开发了材料力学虚拟仿真实验系统[7]等软件[8]或平台。但大多数虚拟仿真软件注重实验操作过程和人机交互体验, 对仿真结果输出采用植入真实实验数据、采用经验公式或利用有限元算法[9]进行粗化处理, 可高度重现真实实验场景、实验操作过程和真实实验数据, 达到辅助实验教学或理论教学的目的[10]。在材料承受载荷状态下其微观结构、微观结构的演化及断裂微观机理直观表达缺失, 不利于学生由微观结构理解宏观现象, 致使基本理论与实验现象相隔离, 处理测试标件多样化和极限条件材料力学性能表现也相对薄弱, 不利于学生进行深入研学。

材料载荷条件下的形变的起源和结构演化过程需要微观尺度才能更好地解释, 遵守“以虚辅实”的教学原则[11], 本文拟利用分子动力学算法和经典力场以铜为研究对象进行材料微观拉伸实验模拟仿真, 除获得应力 - 应变曲线外, 还可直观观察材料拉伸过程结构变化、原子受力, 以期提高学生微观思维、发散思维和科学素养, 同时融合学生对材料科学基础知识的理解和应用。另外, 利用虚拟实验的优势, 可构建不同晶向和不同微观结构的模型以丰富教学内容和添加教学乐趣, 提高教学质量。本虚拟实验还可以外推实验条件, 进行极限条件下材料拉伸性能的模拟, 有利于学生对该实验项目的深入研学和科学探究。

## 2. 模拟方法

采用美国 Sandia 国家实验室开发的 LAMMPS (*Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*)软件[12]进行以面心结构(FCC)的金属铜为研究对象的拉伸实验项目的模拟仿真, LAMMPS 软件是大规模并行计算的开源分子动力学软件可支持 CPU 和 GPU 进行并行计算, 已经在材料、物理、化学及生物等领域广泛使用[13]。铜原子之间的作用力场采用嵌入原子势(EAM) [14], 该类型势函数可精确描述金属的结合能和原子的受力, 在金属体系研究中被广泛使用, 典型的 EAM 势函数中每个原子的能量由下式给出:

$$E_i = F_\alpha \left( \sum_{j \neq i} \rho_\beta(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{\alpha\beta}(r_{ij})$$

式中,  $F$  是嵌入能, 它是电子密度  $\rho$  的函数,  $\phi$  是原子之间的相互作用势,  $\alpha$ 、 $\beta$  是分别代表原子  $i$  和  $j$  的原子类型。

仿真模型采用 FCC 相纯铜超胞, 晶格常数取 0.36 nm, 为提高计算效率和缩短模拟时间模型大小取  $2.8 \text{ nm} \times 2.8 \text{ nm} \times 2.8 \text{ nm}$ , 体系共计 2048 个铜原子。模拟拉伸过程采用周期性边界条件, 模拟步长设置为 1 fs, 首先模拟体系在 NPT 系综下进行 10 ps 结构弛豫, 使体系的能量最低, 消除模型的内应力对模拟结果的影响, 然后将模拟体系置于 NAPT 系综下, 固定 X 方向和 Z 方向的模型边长, 在 Y 方向施加载荷进行 50 ps 拉伸变形操作, 每 1 ps 进行 100 次采样并进行时间平均计算体系的所受的力, 最终绘制应力-应变曲线和输出原子位置、受力数据以便观察拉伸过程中各原子的微观位置演化和受力分析。

## 3. 仿真设计

### 3.1. 基本实验

#### 3.1.1. 应力 - 应变曲线模拟

金属材料的拉伸实验通常采用国标光滑圆柱试样或哑铃型平板试样在万能材料实验机上进行单向拉伸测试, 将拉力和绝对伸长经过转换即可获得应力 - 应变曲线, 为工程设计和材料选用提供依据。实验过程必须严格遵守中华人民共和国国家标准 GB/T228-2002 金属材料室温拉伸试验方法进行。当然, 学生教学实验也需要严格遵守该标准的约定, 由于国标针对工程应用领域, 对教学实验项目还需要根据实际教学情况进行设计, 补充和提高, 真实教学实验一般要求学生验证不同材质的应力 - 应变曲线, 并掌握测试金属材料的拉伸实验方法、仪器操作和曲线分析等。本虚拟实验利用分子动力学算法采用统计物理的方法进行计算金属材料的应力 - 应变曲线, 如图 1 所示, 第 I 段为弹性阶段, 第 II 段为塑性屈服过程, 第 III 段为应变硬化阶段, 最后一段为断裂阶段, 基本还原了真实实验的应力 - 应变曲线, 但是由于计算模型较小, 计算演化时间较短(ps 级), 曲线数据与真实数据有一定偏差, 但不影响学生分析拉伸过程。

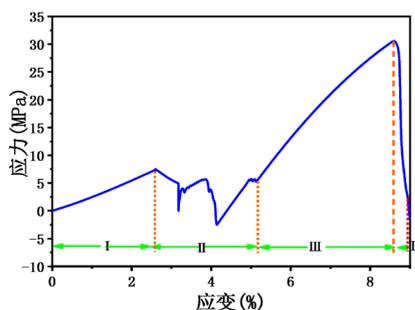


Figure 1. The tensile curve of copper simulated by molecular dynamics  
图 1. 分子动力学模拟的铜的拉伸曲线

### 3.1.2. 拉伸过程结构分析

金属材料在拉伸过程中通常会伴随着微观结构变化，通常的材料力学实验难以进行拉伸过程中金属材料微观结构的原位测量，不能直观的向学生展示由于应力存在使金属材料微观结构演化过程。分子动力学模拟在解决该难题方面存在天然的优势，模拟拉伸过程可输出每个原子的瞬时位置然后利用三维可视化软件直接观察金属材料结构随时间的演化全过程。OVITO [15]是分子动力学输出的位置数据进行三维可视化及通用分析的开源软件，该软件集成共近邻原子分析(*Common Neighbour Analysis*)模块，该模块可以用于分析材料结构信息及变化过程，为直观向学生展示材料微观结构的演化提供了一条途径。通常分子动力学模拟输出的结构数据文件包含在数以百计、甚至数千计的时刻原子模型，通常要逐帧对模型进行分析以展现微观模型结构随时间演化。如图2所示，将拉伸过程FCC相的铜金属材料随时间的微观结构演化过程，可直接反应不同微观结构的比例，有助于学生深入理解金属材料在拉伸过程的微观结构与宏观形变的联系。为了更加直观的展示微观模型结构随时间演化效果，图3列举了1 K温度下金属铜拉伸过程中微观结构随时间演化典型图，可更直接的观察到金属的材料的结构变化过程，可极大引起学生的兴趣，同时将学生掌握的基础材料知识与本实验进行联系，使所学专业知

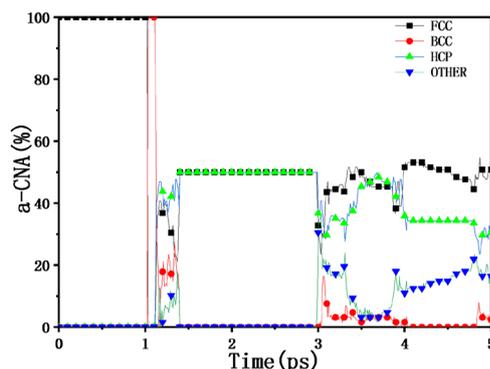


Figure 2. The statistical chart of microstructure change of copper during drawing  
图2. 铜在拉伸过程中微观结构变化的统计图

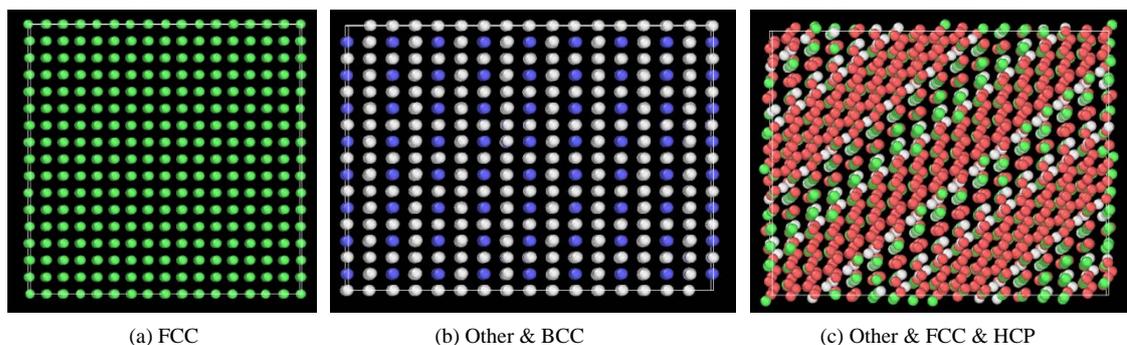
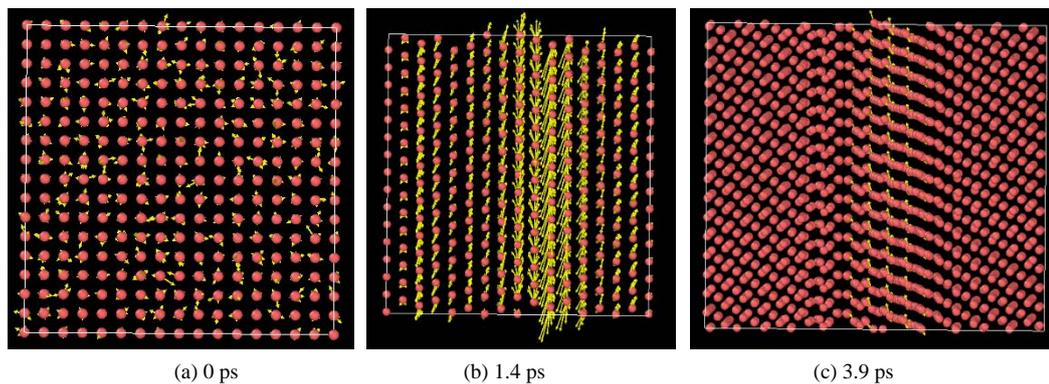


Figure 3. The microstructure change of copper during stretching at 1 K. Among them, gray represents other structure, green represents FCC structure, red represents HCP structure, and blue represents BCC structure  
图3. 1 K 拉伸过程中铜的微观结构变化过程。其中灰色代表 Other 结构，绿色代表 FCC 结构，红色为 HCP 结构，蓝色为 BCC 结构

### 3.1.3. 微观受力

分子动力学方法不但可以模拟材料的应力 - 应变曲线以呼应真实实验的结果，还可以分析载荷情况下材料每个原子的受力情况，通过分析局部原子受力可更深入的了解材料拉伸的微观机理，不但可加强

学生微观思维与宏观现象相联系的分析问题方法，也有利于提升拉伸实验的内涵和教学质量。如图 4 所示，未加载荷每个原子受力随机分布，但是在拉力载荷作用下，材料内部原子的受力呈现分布不均且局部有序排列，据此可引导学生分析金属材料断裂失效的微观机理。

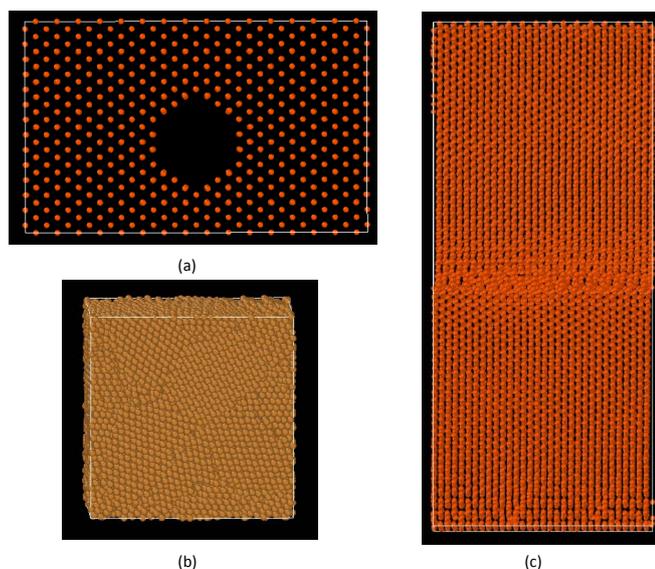


**Figure 4.** Variation of force on each atom during stretching. Yellow heads represent force  
**图 4.** 拉伸过程中每个原子所受力的变化。黄色键头代表力

## 3.2. 实验扩展

### 3.2.1. 结构变化

真实实验实验耗材的制备相对繁琐，非标件的制作成本非常高，因此，拉伸教学实验很少采用特定非标件或特殊结构件进行实验教学，不利于培养学生的探索精神和创新意识。而虚拟教学恰好可弥补真实实验在这方面的不足，利用 lammmps 软件包内在的建模命令或第三脚本可轻松构建实验所需特殊结构模型，如图 5 所示，利用 lammmps 内建命令构建的中间有孔结构模型，该方法可方便外推至构建其他缺陷结构模型，还可构建不同晶面的模型，利用 Voronoi [16]可制备多晶结构，这样不但丰富了实验内容，提高实验教学质量，也可培养学生进行创新、创意思维，增加实验的理论深度和趣味性。



**Figure 5.** The special structure of copper. (a) Single crystal copper model with defects; (b) Polycrystalline copper model; (c) Interface model of copper with different crystal planes  
**图 5.** 铜的特殊结构。(a) 带有缺陷的单晶铜模型；(b) 多晶态铜模型；(c) 不同晶面铜界面模型

### 3.2.2. 极限条件

真实拉伸教学实验仅可在实验室条件(常温常压)下进行, 对不同温度或其他条件进行实验成本极高, 不能满足学生对不同条件下实验现象的了解, 对学生的学术成长不利。采用虚拟实验尤其基于物理算法的虚拟仿真实验可轻松解决这一矛盾, 通过改变参数即可模拟出与极限实验条件相一致的实验现象和结果, 丰富实验内容、提升教学质量和提升学生的创新探索精神。如图 6 所示, 利用分子动力学算法可能方便模拟在超低温(1 K 和 100 K)和超高温条件(700 K 和 1000 K)下的 FCC 结构铜的拉伸实验, 并可计算出应力 - 应变曲线。

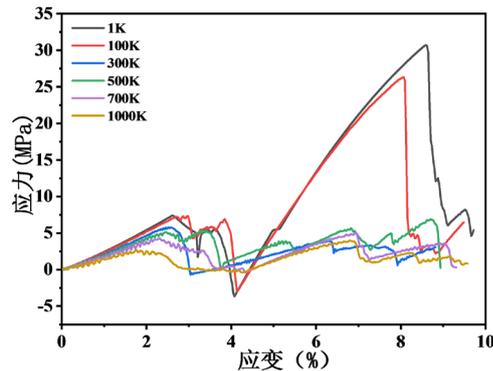


Figure 6. The stress strain curves of single crystal copper at different temperatures  
图 6. 不同温度下单晶铜的应力 - 应变曲线

## 4. 结论

本文遵循“能实不虚，虚实结合”的虚拟教学实验设计原则，设计了拉伸实验的微观结构的虚拟仿真部分，弥补了真空实验在微观机理方面的不足，试图虚拟实验教学方法探索新模式。虚拟仿真设计采用成熟的分子动力学算法为基础，结合精准的 EAM 嵌入原子势函数进行虚拟仿真，仿真结果真实可信，三维可视化演化过程将微观机理可视化，仿真参数可扩展空间大，弥补真实实验条件单一的不足，达到辅助实验教学的目的，同时可方便建立特殊结构的模型，有利于拓展学生思维，提高教学质量。

## 基金支持

海南省高等学校科学研究项目(Hnjg2019-25, Hnjg2020ZD-4)。

## 参考文献

- [1] 张晓亮, 武春霞, 杨文妹, 王彦明. 工程教育专业认证背景下材料力学性能课程教学改革研究[J]. 广东化工, 2020, 47(22): 182-183.
- [2] 李江, 王泓, 张程煜, 王永欣. 材料的力学性能核心实验课程建设与实践教学探索[J]. 高教学刊, 2020(19): 115-117, 121.
- [3] 邹俊俊, 冯岩, 张佩, 卫海. 基于虚拟仿真技术的材料力学实验课程改革[J]. 科技经济导刊, 2020, 28(26): 127-128.
- [4] 谭家亮. 典型复合材料翼盒弯曲稳定性分析与虚拟实验设计[D]: [硕士学位论文]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2020.
- [5] 安军, 曾霞光, 范劲松, 苏崇生, 冯志源. 材料力学课程虚拟仿真实验系统的开发及应用[J]. 装备制造技术, 2020(2): 166-169.
- [6] 耿志挺, 陈学军. 材料力学虚拟仿真实验系统的设计与开发[J]. 实验室研究与探索, 2019, 38(5): 98-101.
- [7] 李霞. 材料力学虚拟仿真实验系统的开发[J]. 实验技术与管理, 2016, 33(12): 125-127.

- 
- [8] 顾永强, 张洋洋, 杨霖. MATLAB 环境下振动力学虚拟教学实验软件的开发[J]. 科技信息(科学教研), 2007(32): 59-60.
- [9] 石庆贺, 陈菊芳, 胡可军, 杨亮, 韩文钦, 朱福先, 杨超. 基于有限元软件的材料力学课堂实例探究[J]. 广东化工, 2020, 47(20): 189-190, 175.
- [10] 周莹, 蔡燕飞, 巩凯, 史劲松. 疫情间的实践课程虚拟仿真线上教学探索[J]. 实验室研究与探索, 2020, 39(11): 119-122, 128.
- [11] 高雪超, 汤吉海. 建设化工类国家虚拟仿真实验教学项目的实践和探索[J]. 化工高等教育, 2020, 37(6): 93-96.
- [12] Plimpton, S. (1995) Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *Journal of Computational Physics*, **117**, 1-19. <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>
- [13] 聂宁明, 胡长军, 张云泉, 贺新福, 张博尧, 李士刚. 材料微观结构演化大规模分子动力学软件比较[J]. 计算机科学与探索, 2017, 11(3): 355-364.
- [14] Foiles, S.M., Baskes, M.I. and Daw, M.S. (1988) Erratum: Embedded-Atom-Method Functions for the FCC Metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and Their Alloys. *Physical Review B*, **37**, 10378. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.37.10378>
- [15] Stukowski, A. (2010) Visualization and Analysis of Atomistic Simulation Data with OVITO—The Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **18**, 015012. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/1/015012>
- [16] 梁海弋, 王秀喜, 吴恒安, 王宇. 纳米多晶铜微观结构的分子动力学模拟[J]. 物理学报, 2002, 51(10): 2308-2314.