

Разработка методов молекулярно-динамического моделирования для применения на гибридных вычислительных системах

А.М. Казённов^{1,2}, И.В. Морозов^{1,2}, Р.Г. Быстрый^{1,2}

Объединенный институт высоких температур РАН¹, Московский физико-технический институт НИУ²

Высокоэнергетичные воздействия на конденсированное вещество, такие как короткие лазерные импульсы, ударные волны и потоки заряженных частиц, приводят к образованию метастабильных состояний, а при достаточной энергии воздействия, к ионизации вещества мишени и формированию области неидеальной плазмы. Динамика релаксационных процессов в таких средах плохо поддается теоретическому описанию из-за существенной роли столкновительных и коллективных эффектов. Широкое применение здесь находит прямое численное моделирование методом молекулярной динамики (МД) [1-3], который предъявляет высокие требования к производительности вычислительных систем.

В настоящее время все большее число пакетов МД моделирования поддерживают вычисления на графических ускорителях (ГПУ). Однако, пока реализованы лишь простейшие потенциалы взаимодействия, такие как потенциал Леннарда-Джонса. Для моделирования конденсированных веществ требуются более сложные модели взаимодействий, в частности, полуэмпирический потенциал погруженного атома (ППА) [4] для металлов. Моделирование неидеальной электрон-ионной плазмы требует кулоновского потенциала на больших расстояниях и достаточно сложной квантово-механической модели на малых расстояниях.

В данной работе рассматриваются особенности реализации потенциала ППА и дальнего кулоновского потенциала на графических ускорителях Nvidia с применением технологии CUDA. Проведено сравнение эффективности распараллеливания потенциалов Леннарда-Джонса, Кулона и ППА на ГПУ. Показаны ограничения на размер моделируемой системы, связанные с объемом внутренней памяти ГПУ. В качестве примера рассмотрена задача моделирования кристаллизации переохлажденной расплава алюминия.

Максимальный прирост производительности при использовании ГПУ Nvidia GeForce 480GTX по сравнению с выполнением аналогичной программы на одном ядре центрального процессора Intel Xeon E5520 составил 180 раз для кулоновского взаимодействия и около 50 раз для короткодействующих потенциалов Леннарда-Джонса и ППА. Эти цифры показывают, что применение ГПУ для задач МД представляется достаточно перспективным. Следует, однако, отметить, что создание программ, эффективно использующих вычислительные возможности ГПУ, это достаточно трудоемкий процесс, требующий учета специфики архитектуры ГПУ.

Некоторые из разработанных в настоящей работе алгоритмов (метод ППА для ГПУ) были включены в свободно распространяемый пакет HOOMD-blue [5]. Для сравнения также использовался широко применяемый пакет LAMMPS [6].

Литература

1. Kuksin, A. Y., Norman, G. E., Stegailov, V. V., Yanilkin, A. V., and Zhilyaev, P. A., International Journal of Fracture 162 (2010) 127.
2. Kuksin, A. Y., Morozov, I. V., Norman, G. E., Stegailov, V. V., and Valuev, I. A., Mol. Simulat. 31 (2005) 1005.
3. Морозов И.В., Норман Г.Э. Столкновения и плазменные волны в неидеальной плазме // ЖЭТФ. 2005. Т. 127. №2. С. 412–430.
4. Daw, M. S., Foiles, S. M., and Baskes, M. I., Mater. Sci. Rep. 9 (1993) 251.
5. <http://codeblue.umich.edu/hoomd-blue>
6. <http://lammps.sandia.gov>