

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС МОДЕЛИРОВАНИЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ДЛЯ ГИБРИДНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ

И. А. Крючков, С. В. Копкин

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

Введение

В проведенных ранее работах [1, 2, 3] получены результаты по адаптации различных частей комплекса МД для расчетов на гибридных вычислительных системах.

Проведение молекулярно-динамического моделирования процессов определяющих свойства конструкторных материалов является очень трудоемким и требует значительных вычислительных ресурсов. Часть расчетов по комплексу МД уже ведется на гибридных вычислительных системах.

В настоящей работе приведено обобщение по основным видам взаимодействий частиц, показаны особенности данного подхода.

Реализованы дополнительные возможности в ускорительной версии комплекса МД, а также исследуется возможность применения различных гибридных вычислительных систем для решения задач молекулярной динамики.

В частности:

- выполнена модернизация функций, реализующих межчастичное взаимодействие;
- реализована возможность расчета взаимодействия для нескольких материалов;
- получены длительности выполнения на однопроцессорной персональной системе, специализированной компактной вычислительной системе ГВС-10 «Кубань», гибридной мультипроцессорной системе;
- выполнено сравнение с универсальными составляющими приведенных систем;
- проведено предварительное сравнение ускорителей на основе графических процессоров NVIDIA GT200 и GF100 на задачах молекулярной динамики.

1. Модернизация программы

1.1. Табулирование значений потенциалов и их производных

В предыдущих работах были представлены результаты разработки ускорительной версии программы расчета сил взаимодействия для парных, многочастичных ЕАМ и МЕАМ потенциалов в комплексе МД. Реализованные алгоритмы были узкоспециализированными, расчеты проводились для конкретных типов потенциалов: парный – Морзе, многочастичный ЕАМ – Ackland et al. и МЕАМ по модели Baskes et al. Для вычислений с другими

типами потенциалов программный код необходимо модифицировать, т. к. используется аналитический вид функций потенциала. При вводе новых модельных функций меняется арифметическая интенсивность программы, что требует проведение дополнительных исследований и настройки программы для оптимальной работы на арифметических ускорителях.

В комплексе МД используется метод табулирования значений потенциала и его производной, а при вычислении значений функции потенциала или его производной, конкретное значение получается интерполяцией табличных значений. Поэтому данный алгоритм адаптирован для работы на арифметических ускорителях. Это позволяет унифицировать работу программы для потенциалов различных видов и использовать библиотеку межчастичных потенциалов комплекса МД для расчетов на арифметических ускорителях.

При работе комплекса на гибридных вычислительных системах на универсальной части вызывается программа подготовки начальных данных, которая заполняет массивы данных параметрами задачи, строит начальную геометрию, вычисляет по аналитическим функциям значения потенциалов и их производных и заполняет массивы таблиц. Далее таблицы значений копируются в память ускорителей и используются во время работы молекулярно-динамического решателя.

Программы молекулярно-динамического решателя реализованные для выполнения на ускорительном сегменте переработаны в соответствии с использованием табличных значений потенциалов и их производных. Добавлены ускорительные функции интерполяции парных и многочастичных потенциалов. Переработана структура программы вычисления сил – для парных и многочастичных потенциалов ЕАМ разработан алгоритм распараллеливания на арифметических ускорителях по локальному списку частиц. Каждой частице ставится в соответствие номер ячейки в которой она находится и каждый поток ускорителя при обработке своей частицы производит перебор всех частиц в соответствующей ячейке, начиная с первой и по всем частицам из соседних ячеек. Это позволило отказаться от дорогостоящего списка соседей и использовать уже существующие в комплексе МД векторные массивы – цепочки связанных частиц.

1.2. Использование нескольких материалов

Первые версии программ комплекса МД для гибридных вычислительных систем обладали ограниченными возможностями, т. к. были рассчитаны на использование только одного типа материала и соответственно одного потенциала. В комплексе МД для универсальных вычислительных систем существ-

ует возможность проведения расчетов с несколькими типами материалов одновременно и соответственно несколькими потенциалами. Разработка ускорительной версии программы, использующей табулированные значения потенциалов и их производных, позволила адаптировать ее для использования нескольких типов материалов в задаче и соответственно нескольких потенциалов.

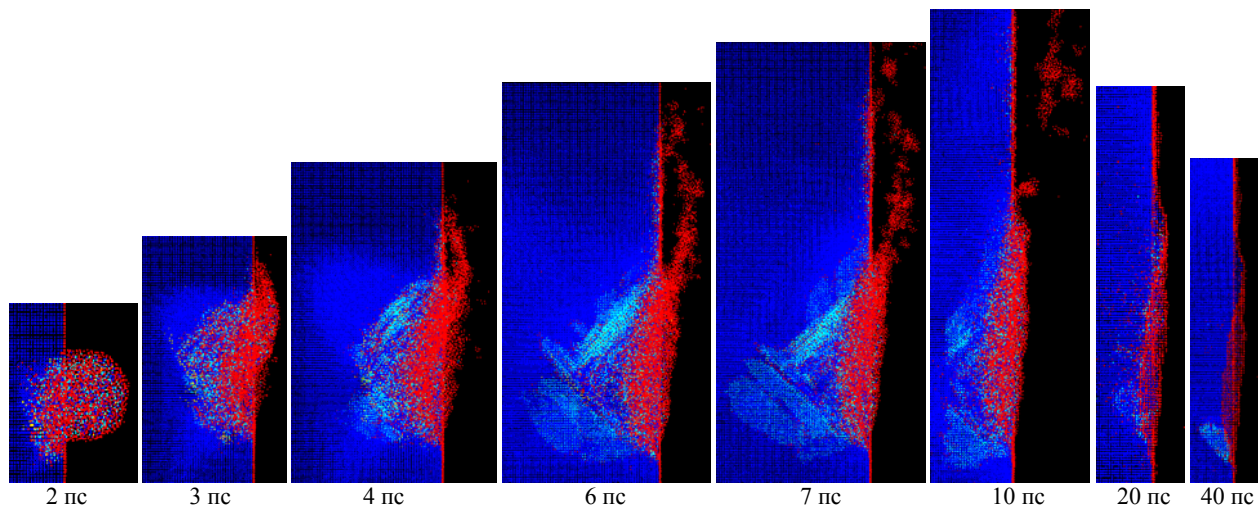


Рис. 1. Процесс взаимодействия капли с [100] мишенью при косом ударе 60° к нормали, скорость капли 5 км/с. Под картинками время в пс. Синим цветом помечены атомы, принадлежащие ОЦК решетке, циан соответствует ГПУ, желтый – ГЦК, красным цветом помечены атомы, принадлежащие к дефектным структурам

При использовании двух материалов в задаче для взаимодействия частиц одинакового и разного типа соответственно задается три потенциала. При этом задается таблица указателей на номер потенциала.

В программе подготовки начальных данных строится несколько таблиц по числу используемых потенциалов. Все таблицы копируются в память ускорителя и используются во время работы молекулярно-динамического решателя, реализованного для использования арифметических ускорителей. Добавлены ускорительные функции для интерполирования значений потенциалов и их производных с учетом типа взаимодействующих частиц.

Введенные изменения позволяют моделировать взаимодействие расплавленных металлических наночастиц с поверхностями ОЦК и ГЦК металлов[4]. Проведен расчет взаимодействия расплавленной капли меди (Cu) с поверхностью тантал (Ta) ОЦК (рис. 1).

1.3. Потенциал MEAM для сплава Pu-Ga

Программа расчета взаимодействия частиц для потенциала MEAM отличается от аналогичных программ для парных и многочастичных EAM потенциалов. В ней используется аналитический вид функций. Для сплавов используется несколько наборов параметров, причем для взаимодействия пары однотипных частиц применяется полный набор параметров, а для взаимодействия частиц разного типа используется набор параметров отвечающих за функции расчета экранировки и локальных электронных плотностей.

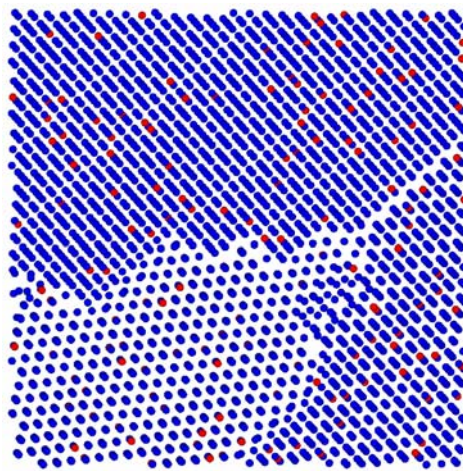


Рис. 2. Поликристаллический Pu-Ga (содержание Ga 5.2 %). Размер образца $20 \times 20 \times 20$, 10 зерен. Синим цветом помечены атомы Pu, красным – Ga

Все ускорительные функции MEAM потенциала были доработаны для использования частиц двух типов. В программу подготовки начальных данных добавлено копирование всех наборов параметров потенциалов, в программы расчета взаимодействия частиц добавлена ускорительная функция выбора типа взаимодействия и соответственно набора параметров. При этом набор ускорительных аналитических функций претерпел лишь небольшие изменения, связанные с добавлением нескольких дополнительных параметров – множителей.

Все изменения в алгоритмах и программах расчета взаимодействия с потенциалом MEAM позволяют проводить моделирование свойств и процессов в конструкционном материале – сплав Pu-Ga [3].

2. Результаты экспериментов

Исследования, представленные в отчете проведены на различных вычислительных системах:

- персональная вычислительная система с АрУ NVIDIA GTX260 и NVIDIA GTX470;
- специализированная компактная вычислительная система ГВС-10 «Кубань»;
- мультипроцессорная гибридная вычислительная система.

На каждой из перечисленных вычислительных систем выполнен расчет по комплексу МД в различных постановках (потенциалы Морзе, EAM, MEAM).

При проведении экспериментальных исследований задействованы различные арифметические ускорители:

- NVIDIA GTX260;
- NVIDIA GTX295;
- NVIDIA Tesla C1060;
- NVIDIA GTX470.

Спецификации АрУ приведены в таблице.

Для обобщения результаты экспериментов на различных арифметических ускорителях приведены на рис. 3–5. Также на рис. 6–8 даны ускорения, полученные при максимальном задействовании используемых вычислительных систем.

На рис. 3–5 представлены длительности выполнения вычислений полученные на различных ускорителях относительно одного ядра универсального процессора Intel Core i7 920 при использовании 1 MPI-процесса на задачах различных размеров для различных потенциалов.

Таблица 1

Спецификация арифметических ускорителей

Характеристики	NVIDIA GTX260	NVIDIA GTX295	NVIDIA Tesla C1060	NVIDIA GTX470
Тип GPU	GT200	GT200	GT200	GF100
Частота ядра, ГГц	1,296	1,24	1,3	1,22
Потоковых процессоров, шт.	192	480	240	448
Мультипроцессоров, шт.	24	60	30	14
Объем глобальной памяти, Мбайт	896	1792	4096	1280
Интерфейс	PCI-Express x16	PCI-Express x16	PCI-Express x16	PCI-Express x16

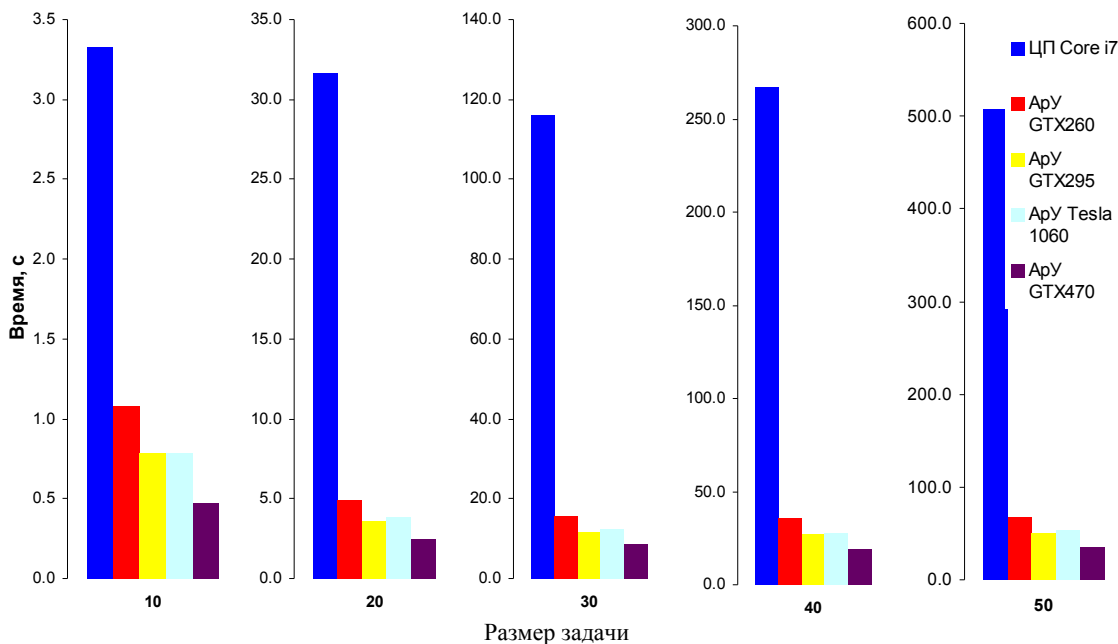


Рис. 3. Длительности вычислений по программе МД (потенциал Морзе, 1 MPI-процесс)

Ускорение, полученное на одном АрУ, составило от 3 до 14,5 раз по сравнению с одним ядром универсального процессора. Наибольшее ускорение получено на АрУ нового поколения NVIDIA GTX470.

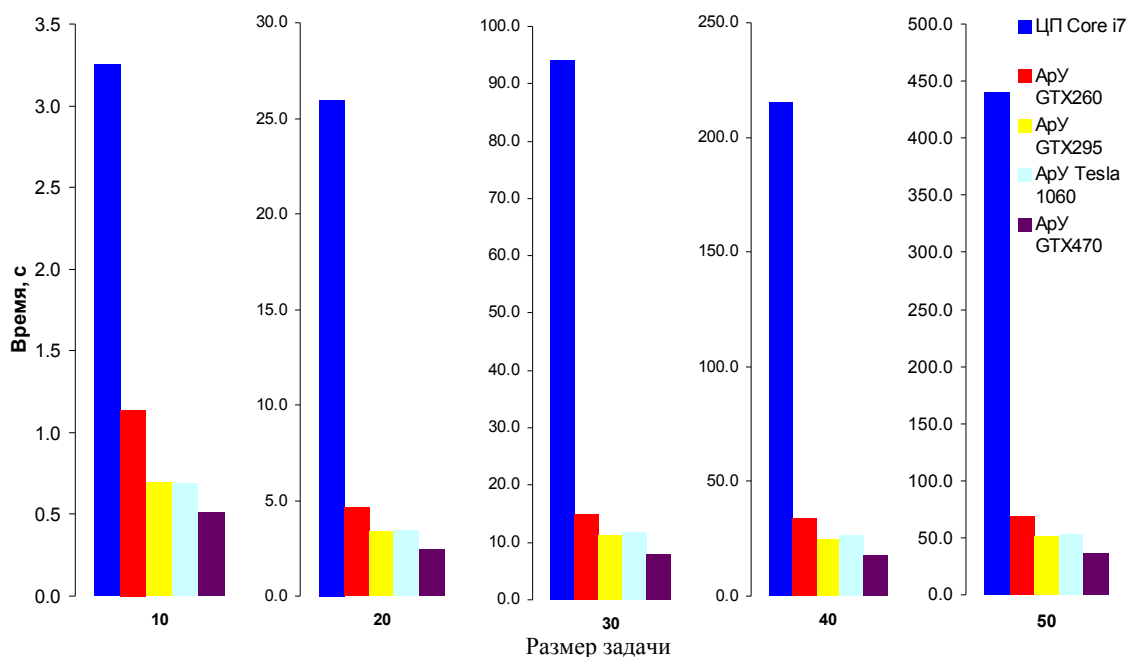


Рис. 4. Длительности вычислений по программе МД (потенциал ЕАМ, 1 MPI-процесс)

Ускорение, полученное на одном ApУ, составило от 2,8 до 12,1 раз по сравнению с одним ядром универсального процессора. Наибольшее ускорение получено на ApУ нового поколения NVIDIA GTX470 (от 1,45 до 1,9 раз больше чем другие ApУ).

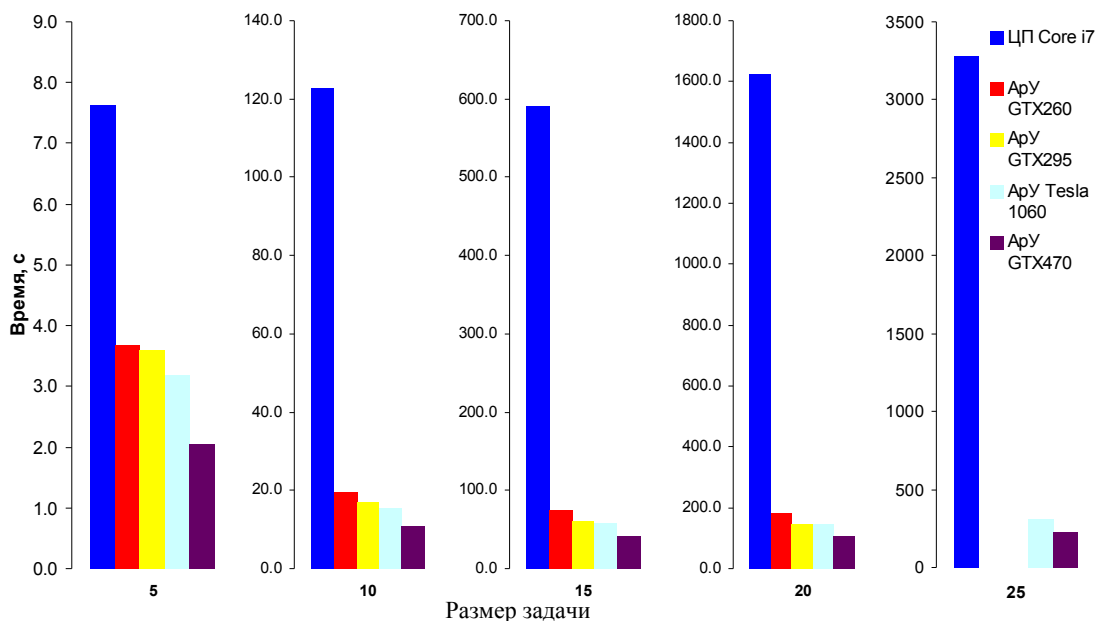


Рис. 5. Длительности вычислений по программе МД (потенциал MEAM, 1 MPI-процесс)

Ускорение, полученное на одном ApУ, составило от 2 до 15 раз по сравнению с одним ядром универсального процессора. Наибольшее ускорение получено на ApУ нового поколения NVIDIA GTX470 (от 1,35 до 1,7 раз больше чем другие ApУ).

На рис. 6–8 представлены ускорения, полученные при выполнении вычислений на ГВС-10 «Кубань» и мультипроцессорной системе на задачах различных размеров для различных потенциалов.

Для ГВС-10 «Кубань» максимально задействовано 8 MPI-процессов, при этом вычисления выполнялись на 4 ядрах универсального процессора и 8 арифметических ускорителях.

Для мультипроцессорной системы максимально задействовано 64 MPI-процесса, при этом вычисления выполнялись на 64 ядрах универсальных процессоров и 64 арифметических ускорителях.

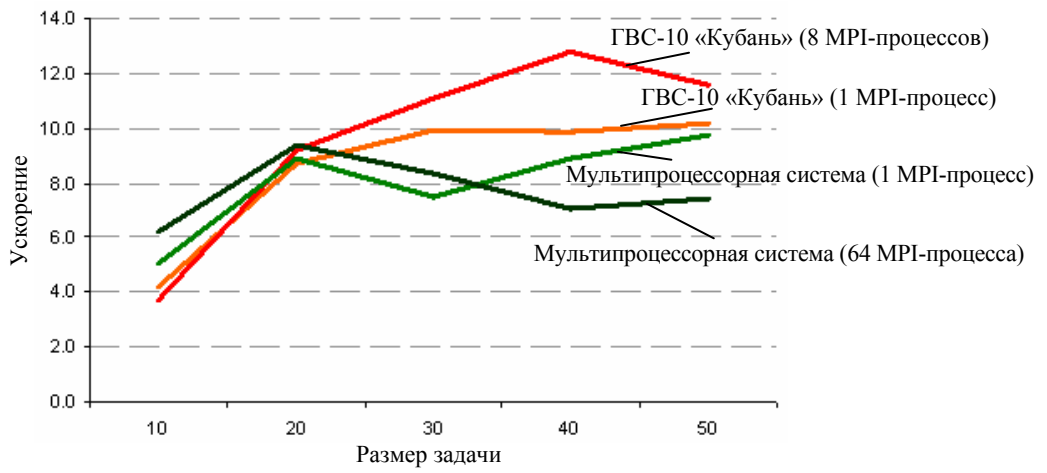


Рис. 6. Ускорение вычислений по программе МД (потенциал Морзе)

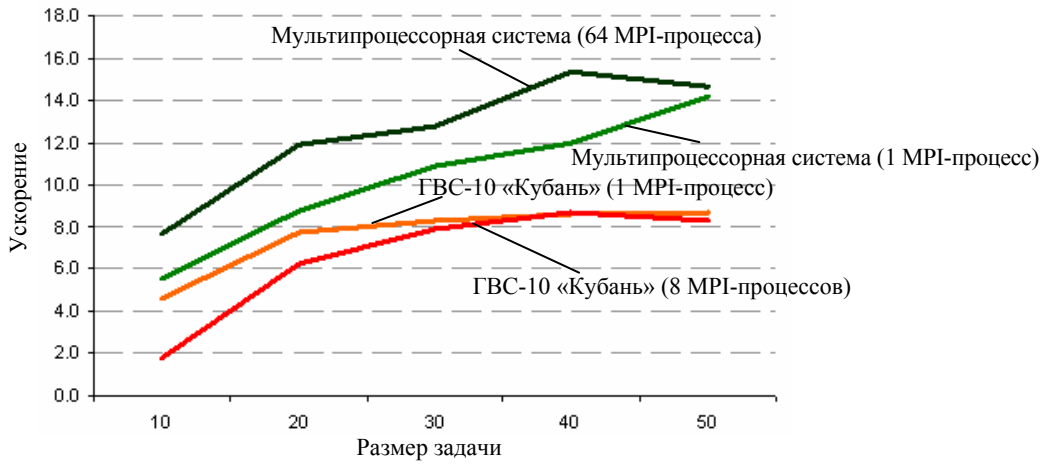


Рис. 7. Ускорение вычислений по программе МД (потенциал EAM)

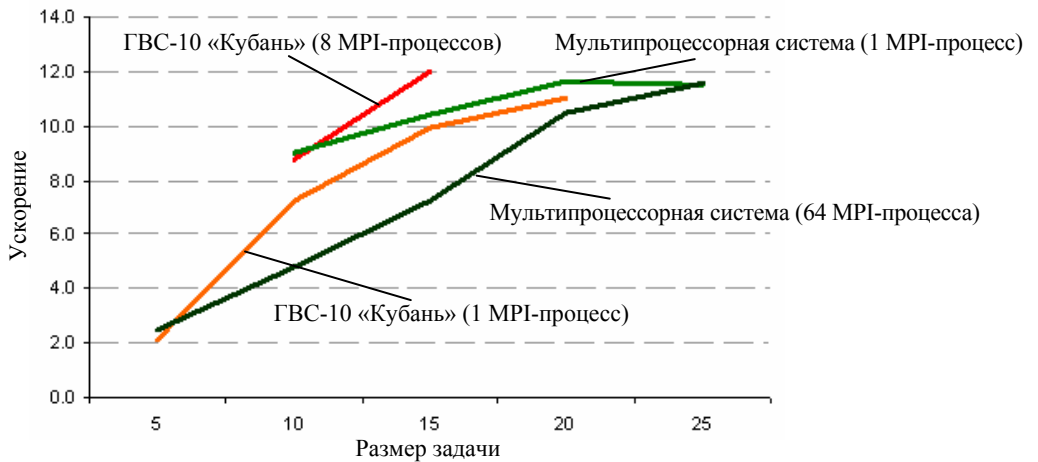


Рис. 8. Ускорение вычислений по программе МД (потенциал MEAM)

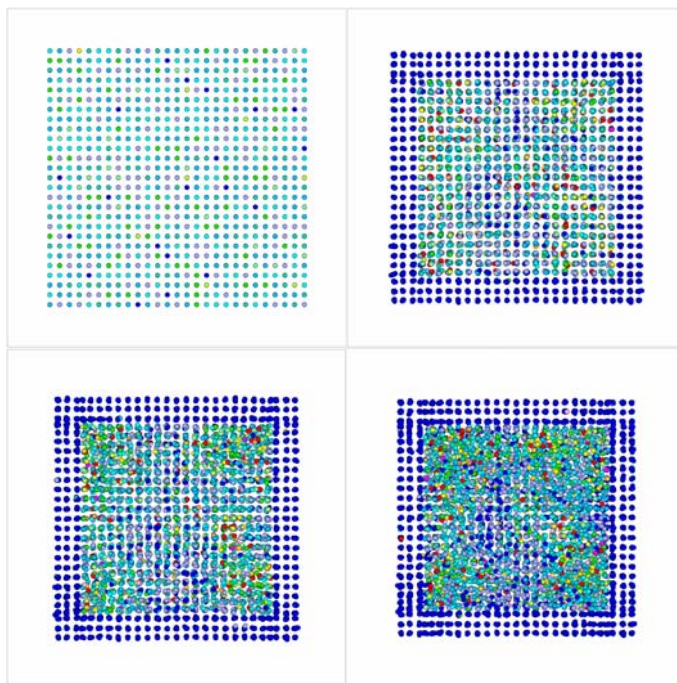


Рис. 9. Моделирование всестороннего сжатия монокристаллического образца Pu-Ga (содержание Ga 5,2 %)

Ускорение, полученное на обеих гибридных вычислительных системах, на одном и на максимальном количестве MPI-процессов отличается не более чем на 20 % на различных размерах задач для потенциалов Морзе, EAM и MEAM.

3. Перспективы

С применением графических ускорителей проведено моделирование всестороннего сжатия сплава Pu-Ga (рис. 9). Результаты получены в кратчайшие сроки, время моделирования составило около 5 суток, без применения ускорителей длительность выполнения возрастает на порядок и составит примерно 50 суток.

Заключение

Реализованный в данной работе подход организации вычисления значений межчастичного взаимодействия позволяет производить производственные расчеты по всем основным типам потенциалов. Разработаны программы молекулярно-динамического решателя в соответствии с использованием табличных значений потенциалов и их производных для выполнения на АрУ. Добавлены ускорительные функции интерполяции парных и многочастичных потенциалов. Программы доработаны с учетом использования в расчетах нескольких материалов.

Все ускорительные функции MEAM потенциала были доработаны для использования частиц двух и более типов. При этом набор аналитических функ-

ций для ускорителя претерпел лишь небольшие изменения, связанные с добавлением нескольких дополнительных параметров – множителей.

Все эти изменения позволили провести расчеты получения холодных кривых для сплава Pu-Ga (актуально для моделирования упругопластических свойств конструкционных материалов).

В целом возможность применения в расчете нескольких материалов расширяет класс решаемых задач на ускорителях.

В работе получены длительности выполнения на различных гибридных вычислительных системах (однопроцессорной персональной системе, специализированной компактной вычислительной системе ГВС-10 «Кубань», гибридных мультимикросистемной системе). На каждой из приведенных систем получены значения ускорений, относительно универсальных составляющих.

Длительность вычислений уменьшена на однопроцессорной персональной системе по сравнению с одним ядром универсального процессора:

- потенциал Морзе – от 4 до 10 (АрУ NVIDIA GTX260) и от 9 до 19 раз (АрУ NVIDIA GTX470);
- потенциал EAM – от 4 до 9 (АрУ NVIDIA GTX260) и от 9 до 17 раз (АрУ NVIDIA GTX470);
- потенциал MEAM – от 3 до 14 (АрУ NVIDIA GTX260) и от 5 до 23 раз (АрУ NVIDIA GTX470).

Длительность вычислений уменьшена на ГВС-10 «Кубань» по сравнению с одним ядром универсального процессора:

- потенциал Морзе – от 4 до 10 раз;
- потенциал EAM – от 4 до 9 раз;
- потенциал MEAM – от 2 до 11 раз.

Длительность вычислений уменьшена на мультипроцессорной системе по сравнению с одним ядром универсального процессора:

- потенциал Морзе – от 5,1 до 9,7 раз;
- потенциал ЕАМ – от 5,6 до 14,2 раз;
- потенциал МЕАМ – от 9 до 11,6 раз.

Выполнены расчеты в многопроцессорном режиме, показано масштабирование ускорения на всех исследованных вычислительных системах.

Выполнено сравнение различных арифметических ускорителей, включая АрУ нового поколения NVIDIA GTX470. Полученные результаты позволяют рассчитывать на возможность эффективного использования арифметических ускорителей нового поколения для расчета задач молекулярной динамики.

Литература

1. Воронин Б. Л., Ерофеев А. М., Копкин С. В., Крючков И. А., Рыбкин А. С., Степаненко С. А., Южаков В. В. Применение графических арифметических ускорителей для расчета задач молекулярной динамики по программному комплексу МД // Доклад.

X Международный семинар Супервычисления и Математическое Моделирование, Саров, 29.09 – 3.10, 2008 г.

2. Крючков И. А., Копкин С. В. Адаптация алгоритма расчета взаимодействия для многочастичного потенциала МЕАМ на гибридных вычислительных системах // Доклад. XI Международный семинар Супервычисления и Математическое Моделирование, Саров, 5–9 октября 2009 г.

3. Копкин С. В., Крючков И. А. Алгоритм модернизированного многочастичного потенциала для молекулярно-динамического моделирования на графическом арифметическом ускорителе // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2010. Вып. 3.

4. Коваленко Н. О., Воронин Б. Л., Копкин С. В., Грушин С. А., Кечин А. Г., Анисимов А. Н., Иоилев А. Г. и др. Молекулярно-динамическое моделирование взаимодействия расплавленных наночастиц с поверхностями металлов // Доклад. Международная научная конференция по проблемам физики высоких плотностей энергии «XII научные Харитоновские чтения», Саров, 19–23 апреля 2010 г.