

УДК 519.6

АЛГОРИТМ МОДЕРНИЗИРОВАННОГО МНОГЧАСТИЧНОГО ПОТЕНЦИАЛА ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НА ГРАФИЧЕСКОМ АРИФМЕТИЧЕСКОМ УСКОРИТЕЛЕ

С. В. Копкин, И. А. Крючков
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Представлены основные этапы адаптации алгоритма вычисления значений потенциала МЕАМ в комплексе МД для гибридной вычислительной системы. Показано ускорение, достигаемое на различном количестве вычислительных устройств. Проведены тестовые расчеты, подтвердившие точность вычислений.

Ключевые слова: арифметический ускоритель, молекулярная динамика, потенциал, МЕАМ, ускорение, гибридная вычислительная система.

Введение

В мире активно развиваются различные программные комплексы молекулярной динамики. Для этого класса задач в качестве вычислителя представляется перспективным использование арифметических ускорителей (АрУ). Проекты для АрУ находятся на различных стадиях исполнения. Преобладают среди них проекты по исследованию сложных биомолекулярных структур. В качестве демонстрационных расчетов выступает моделирование поведения молекул протеинов в жидкости.

С применением ускорителей в [1] проведены разработка и тестирование алгоритма расчета взаимодействия атомов с использованием потенциалов Морзе [2] и ЕАМ [3]. Эти исследования показали возможность использования АрУ для выполнения трудоемких расчетов моделирования развития радиационных каскадов методами молекулярной динамики, основная часть которых выполняется на мультипроцессорных системах и требует значительных вычислительных ресурсов. Привлечение дополнительных вычислительных ресурсов особенно необходимо при получении значений модернизированного многочастичного потенциала погруженного атома МЕАМ [4], который используется в программном комплексе МД для описания кристаллической структуры плутония.

В работе исследуется возможность применения гибридных мультипроцессорных систем, содержащих АрУ, для расчетов значений потенциала МЕАМ. Осуществлена адаптация алгоритма к выполнению на гибридной вычислительной системе. Приведены длительности вычисления с использованием ускорителей и без них.

Математическая модель и алгоритм расчета взаимодействия для потенциала МЕАМ

Для проведения расчетов по моделированию развития радиационных каскадов в металлических кластерах при радиационном старении конструкционных материалов необходимо точное описание свойств исследуемого материала на микроуровне. На практике часто в качестве активного материала используется плутоний, поэтому его свойства необходимо изучить в первую очередь. Это элемент со сложной структурой электронных оболочек, и ему соответствует несколько фаз твердого состояния. Использование потенциала на основе усредненного электронного поля, как в потенциале ЕАМ, уже не достаточно. В [4] была предложена модель многочастичного взаимодействия, учитывающая угловые зависимости, — модернизированный потенциал погруженного атома МЕАМ.

В модели взаимодействия для потенциала МЕАМ потенциальная энергия системы взаимодействующих частиц (атомов) записывается следующим образом:

$$E_{tot} = \sum_{i=1}^N E_i, \quad E_i = F(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \varphi(r_{ij}),$$

где $F(\rho_i)$ — энергия погружения атома i в металлическую структуру; ρ_i — электронная плотность в месте погружения атома i , зависящая от положения окружающих атомов; $\varphi(r_{ij})$ — парный потенциал; r_{ij} — расстояние между атомами i и j .

Энергия погружения атома определяется по формуле

$$F(\rho_i) = A E_c \frac{\rho_i}{\rho_0} \ln \frac{\rho_i}{\rho_0},$$

где E_c , A и ρ_0 — параметры. Электронная плотность ρ_i , в свою очередь, строится на основе парных функций Γ_i с учетом углов между тройками частиц:

$$\rho_i = \rho_i^{(0)} \frac{2}{1 + \exp(-\Gamma_i)}, \quad \Gamma_i = \sum_{l=1}^3 t^{(l)} \left[\frac{\rho_i^{(l)}}{\rho_i^{(0)}} \right]^2,$$

где $t^{(l)}$ — параметры потенциала; $\rho_i^{(l)} = \sum_{j \neq i} \rho^{(l)}(\vec{r}_{ij}, S_{ij})$, $l = \overline{0, 3}$; $\rho^{(l)}$ — функции, строящиеся на основе проекций векторов \vec{r}_{ij} на оси координат; S_{ij} — экранировочная функция.

В потенциале МЕАМ экранировочная функция S_{ij} для атомов i и j является произведением многочастичной экранирующей функции \bar{S}_{ij} и радиальной экранирующей функции f_c :

$$S_{ij} = \bar{S}_{ij} f_c \left(\frac{r_c - r_{ij}}{\Delta r} \right),$$

где r_c и Δr — соответственно радиус и область экранировки (подгоночные параметры потенциала).

Многочастичная экранирующая функция \bar{S}_{ij} между атомами i и j определяется как произведение экранирующих факторов S_{ijk} , обусловленных экранировкой взаимодействия атомов i и j атомом k :

$$\bar{S}_{ij} = \prod_{k \neq i, j} S_{ikj},$$

где S_{ijk} вычисляются на основе простой геометрической конструкции.

Радиальная (сглаживающая) экранирующая функция f_c определена следующим образом:

$$f_c(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 1; \\ \left[1 - (1-x)^4 \right]^2, & 0 < x < 1; \\ 0, & x \leq 0. \end{cases}$$

Соответственно алгоритм расчета многочастичного взаимодействия состоит в получении сил, действующих на все частицы. Его можно разделить на несколько этапов:

- 1) вычисление экранирующих функций, которые получаются перебором всех троек взаимодействующих атомов;
- 2) получение электронных плотностей и значений функций парного потенциала;
- 3) вычисление энергии погружения частицы и полной потенциальной энергии;
- 4) получение сил на основе численного дифференцирования полной энергии системы взаимодействующих частиц.

Состав аппаратно-программных средств

Исследования, представленные в работе, проведены на экспериментальной мультипроцессорной вычислительной системе с АрУ, которая состоит из двухсокетовых вычислительных модулей на базе четырех ядерных процессоров Intel. К каждому вычислительному модулю через PCI-Express подключены по два АрУ NVIDIA. Вычислительная система объединена коммуникационной средой. Структура вычислительной системы показана на рис. 1.

Для реализации на АрУ используется программная архитектура NVIDIA CUDA [5].



Рис. 1. Структура экспериментальной мультипроцессорной системы

Адаптация алгоритма вычисления значений потенциала МЕАМ

В результате работ по адаптации алгоритма вычисления значений потенциала МЕАМ к выполнению на АрУ было реализовано несколько модернизаций программы, которые описаны ниже.

Реализация смешанного сеточно-списочного алгоритма.

Первоначальный алгоритм. Изначально алгоритм расчета силы, действующей на частицу, выглядел следующим образом.

Численно получается градиент полной энергии. Для i -й частицы рассчитывается полная энергия E_{tot} частиц, попавших в зону ее влияния.

Компоненты силы вычисляются по следующим формулам:

$$F_x = - \frac{E_{tot}(\dots, \vec{r}_{i-1}, \vec{r}_i + h\vec{e}_x, \vec{r}_{i+1}, \dots) - E_{tot}(\dots, \vec{r}_{i-1}, \vec{r}_i - h\vec{e}_x, \vec{r}_{i+1}, \dots)}{2h};$$

$$F_y = - \frac{E_{tot}(\dots, \vec{r}_{i-1}, \vec{r}_i + h\vec{e}_y, \vec{r}_{i+1}, \dots) - E_{tot}(\dots, \vec{r}_{i-1}, \vec{r}_i - h\vec{e}_y, \vec{r}_{i+1}, \dots)}{2h};$$

$$F_z = - \frac{E_{tot}(\dots, \vec{r}_{i-1}, \vec{r}_i + h\vec{e}_z, \vec{r}_{i+1}, \dots) - E_{tot}(\dots, \vec{r}_{i-1}, \vec{r}_i - h\vec{e}_z, \vec{r}_{i+1}, \dots)}{2h}.$$

Таким образом, для получения силы, действующей на частицу i , численно находится сумма энергий частиц, попадающих в сферу действия i -й частицы для шести различных положений этой частицы.

Первый раз перебор частиц в ячейках осуществляется по спискам связанных частиц или массивам указателей на соседние частицы, где каждая частица в массиве ссылается на следующую.

Для ускорения счета еще пяти состояний суммарной энергии частиц в области влияния i -й частицы введены массивы локальных списков соседей первого, второго и третьего порядков.

Массив соседей первого порядка содержит номера частиц, попавших в *радиус обрезания* текущей частицы. В массив соседей второго порядка входят номера частиц, попавших в радиус обрезания частиц из первого массива. В массив третьего порядка попадают номера частиц, оказывающих влияние на экранировку между парами частиц из второго массива. Перебор пар и троек частиц для расчета оставшихся пяти состояний энергии осуществляется по этим массивам.

Модернизированный алгоритм. Первоначальный алгоритм имеет недостаток. Расчет энергии в первом состоянии осуществляется по связанным спискам на увеличенной сетке. Поэтому перебор троек частиц занимает значительную часть машинного времени. Для сокращения времени перебора решено ввести в комплекс МД глобальный список соседей. Соответственно получен смешанный *сеточно-списочный* алгоритм.

Списки соседей строятся на основе ограниченности зоны влияния частиц друг на друга. Для каждой частицы строится массив соседей, окружающих ее и попавших в область ее влияния. Для этого перед началом выполнения алгоритма расчета сил или энергии для каждой участвующей в процессе частицы, как для действительной, так и для фиктивной, производится перебор ее соседей, попавших в 27 ячеек, где 27-й является центральной ячейкой, в которую попала выбранная частица. Номера тех частиц, что попали в область влияния, заносятся в массив соседей, имеющий размерность $M \times n$,

где M — число частиц, приходящихся на процесс, n — возможное число соседей (для МЕАМ-потенциала плутония $n = 12$).

Далее производится расчет силы так же, как в первом алгоритме; меняется лишь способ перебора пар и троек частиц. При переборе троек частиц необходимо исключить повторяющиеся частицы из пересечения областей влияния каждой частицы в паре (рис. 2).

Так же, как и в первоначальном алгоритме, оставшиеся пять состояний рассчитываются по накашливаемым при первом проходе массивам локальных соседей первого, второго и третьего порядков.

В данной реализации алгоритма длительность выполнения расчетов сократилась за счет увеличения использования памяти на дополнительный двумерный массив размером $M \times n$ списка соседей.

Численные эксперименты показали, что за счет использования этого алгоритма получено в среднем ускорение в 6–6,5 раз.

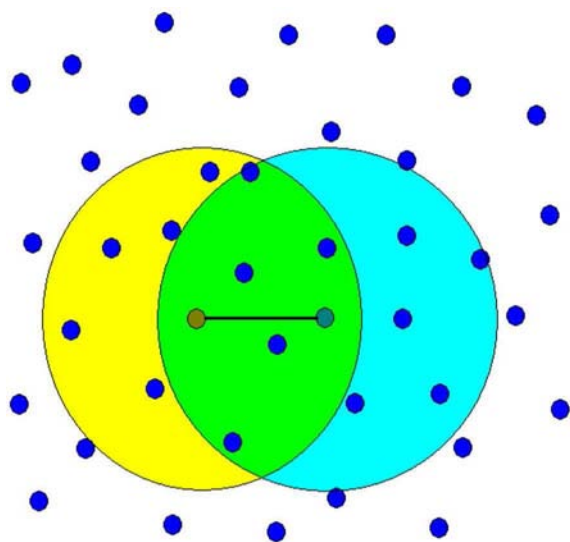


Рис. 2. Пересечение областей влияния взаимодействующих частиц

Реализация распараллеливания по парам частиц.

Первоначальный алгоритм. В первом варианте применялся подход, уже использованный при решении задач с вычислением на АрУ потенциалов Морзе и ЕАМ [1]. Но так как потенциал МЕАМ является значительно более сложным (длительность вычисления приблизительно в 100 раз больше), а количество задействованных ячеек (по которым производилось распараллеливание на АрУ) меньше (рис. 3, а), то этот подход оказался малоэффективным.

Рис. 4, а демонстрирует подход в первом, немодернизованном варианте. Распараллеливание на потоки производится по числу ячеек (NumCell), а в каждом потоке выполняется расчет всех данных для частиц в ячейке и их соседей. Таким образом, АРУ исполняет NumCell потоков, каждый из которых содержит большое количество инструкций.

Модернизированный алгоритм. В связи с вышесказанным понадобилась существенная переработка алгоритма расчета взаимодействия частиц. Целью этой переработки было достижение значительного числа потоков, выполняющихся на ускорителе, с не чрезмерно большим количеством операций на каждом из них (рис. 3, б).

На рис. 4, б показан модернизированный вариант. Распараллеливание на потоки реализовано по парам взаимодействующих частиц, т. е. по числу частиц в процессе (NumPart), помноженному на число соседей (NumNei), а в каждом потоке производится расчет данных только для конкретной ча-

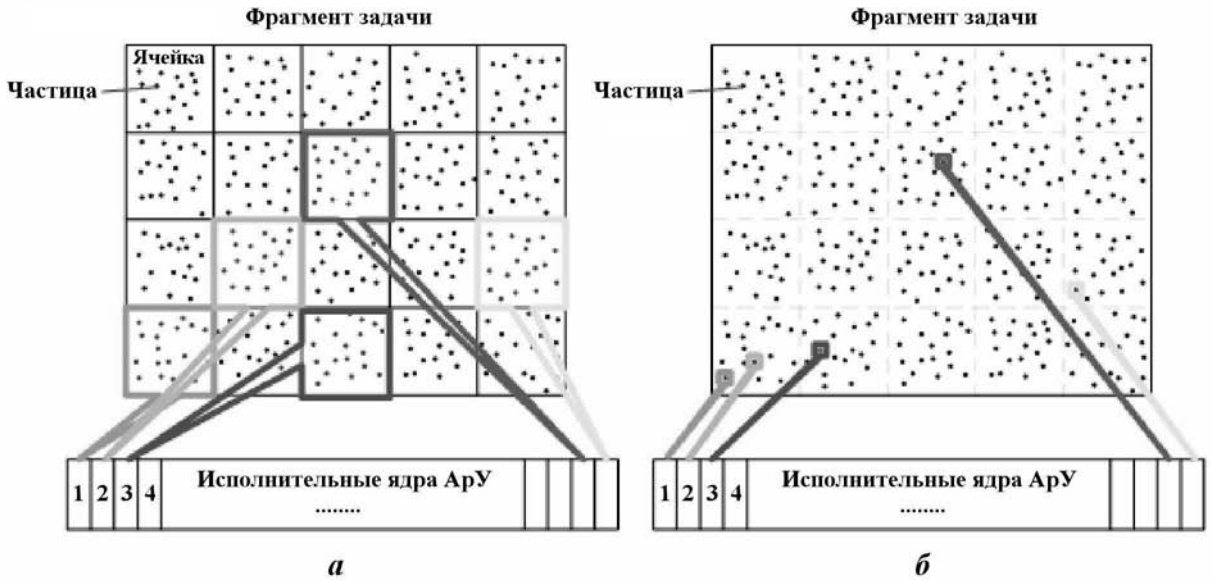


Рис. 3. Распределение задачи на ядра АрУ: *a* — на одном ядре АрУ вычисляется одна ячейка; *б* — на одном ядре АрУ вычисляется частица

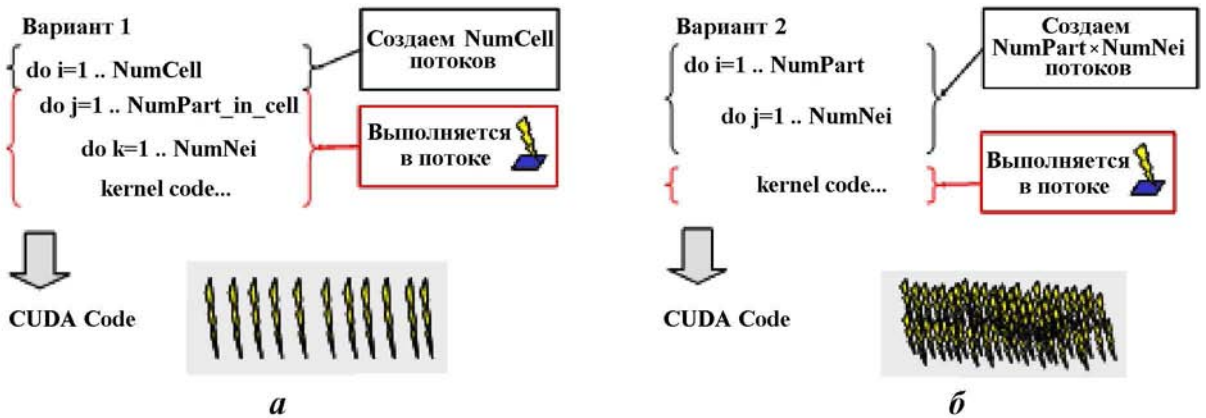


Рис. 4. Формирование задачи по потокам на ядрах АрУ: *a* — первоначальный вариант; *б* — модернизированный вариант

стицы или ее соседа. Таким образом, на АрУ выполняются $\text{NumPart} \times \text{NumNei}$ потоков (значительно больше, чем NumCell). При этом каждый из потоков содержит количество инструкций, приблизительно в 30 раз меньшее по сравнению с первоначальным вариантом.

Оптимизация расчета экранировки. Как указывалось выше, для получения силы, действующей на частицу, необходимо вычислить шесть раз полную энергию частиц, попавших в зону ее влияния. При этом состояние пар и троек некоторых частиц не меняется и пересчитывать функции потенциала не требуется.

В связи с тем, что на АрУ распараллеливание идет по парам частиц, появилась возможность сохранять результаты вычислений для неизменных пар.

Самый затратный по времени процесс вычисления экранировки пары частиц третьей разбит на несколько этапов. На первом этапе вычисляются экранирующие функции только неизменных пар $\hat{S}_{lj} = \prod_{k \neq l \neq j} S_{ljk}$ ($l \neq i$). На втором этапе неполная функция экранировки \hat{S}_{lj} для шести состояний частицы i умножается на произведение неучтенных множителей: $S_{lj}^{1-6} = \hat{S}_{lj} \prod_{i \neq l \neq j} S_{lji}^{1-6}$ ($l \neq i$ и $j \neq i$). На

третьем этапе вычисляются функции S_{ij}^{1-6} , а на четвертом — S_i^{1-6} . Результатом являются парные составляющие энергии частиц в сфере влияния частицы i для шести ее состояний.

Оптимизация работы с памятью. Для достижения более высокой скорости работы с памятью АрУ проведена модификация структур данных, используемых в программе.

Эффективная работа с памятью требует организации общего доступа [5]. Необходимо, чтобы операция с памятью была оформлена как обращение к единой непрерывной области (рис. 5).

В соответствии с данным подходом организована работа с массивами данных, используемых в программе. Наиболее показательной является функция вычисления итоговой энергии, так как в ней происходит обращение ко всем используемым массивам.

При данном подходе скорость работы с памятью возрастает более чем в 3 раза и заметно уменьшается длительность выполнения программы.

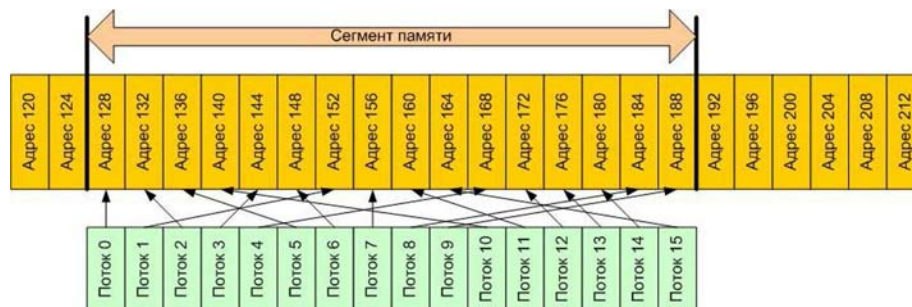


Рис. 5. Пример обращения к единой непрерывной области памяти

Результаты экспериментов

Исследования на вычислительной системе. Исследования проведены в двух постановках.

Постановка исследований 1. В данной постановке ядра универсальных процессоров (ЦП) и гибридные вычислители¹ выполняют одинаковые задачи и задействуют одинаковое количество MPI-процессов. Сравнение длительностей выполнения задач дано для следующих конфигураций:

- 1 ядро — 1 ядро ЦП + 1 АрУ (1 вычислительный модуль);
- 2 ядра — 2 × (1 ядро ЦП + 1 АрУ) (1 вычислительный модуль);
- 4 ядра — 4 × (1 ядро ЦП + 1 АрУ) (2 вычислительных модуля);
- 8 ядер — 8 × (1 ядро ЦП + 1 АрУ) (4 вычислительных модуля);
- 16 ядер — 16 × (1 ядро ЦП + 1 АрУ) (8 вычислительных модулей).

Тестирование проведено методом умножения.

На рис. 6 показано сравнение длительностей вычислений программы МД (потенциал МЕАМ) на одном ядре ЦП и одном гибридном вычислителе (1 ядро ЦП + 1 АрУ) (здесь и далее $M \times M \times M$ — размер задачи).

Длительность выполнения ускоряемой части уменьшена в результате применения ускорителя в 11,9 раза по сравнению с одним ядром ЦП. Длительность всего вычислительного процесса на гибридном вычислителе уменьшилась в 10,5 раза по сравнению с одним ядром ЦП.

На рис. 7 показано сравнение длительностей вычислений программы МД (потенциал МЕАМ) на 16 ядрах ЦП и 16 гибридных вычислителях.

В результате применения АрУ длительность выполнения ускоряемой части уменьшена в 12,4 раза, а длительность всего вычислительного процесса — в 11,1 раза.

При увеличении размера задачи и количества используемых АрУ ускорение, полученное на одном ускорителе, сохраняется. Например, на задаче размером $25 \times 25 \times 25$ ускорение на шаге составляет:

¹Под гибридным вычислителем здесь и далее понимается связка одного ядра ЦП и одного АрУ (1 ядро ЦП + 1 АрУ).

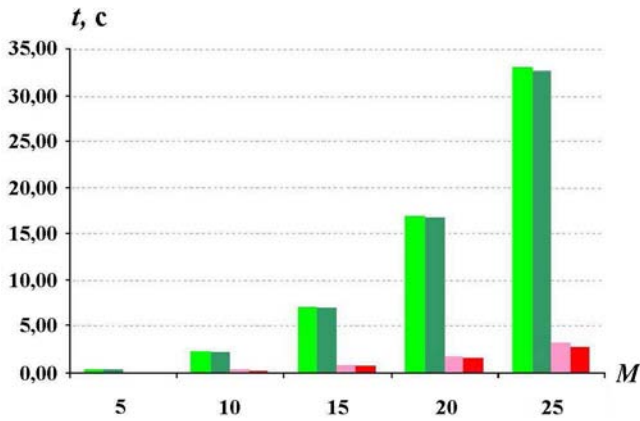


Рис. 6. Постановка исследований 1. Сравнение длительностей вычислений программы МД (потенциал МЕАМ) на 1 ядре ЦП и 1 гибридном вычислителе (1 ядро ЦП + 1 АрУ): 1-й столбец — шаг задачи, 1 ядро ЦП; 2-й столбец — ускоряемая часть, 1 ядро ЦП; 3-й столбец — шаг задачи, 1 ядро ЦП + 1 АрУ; 4-й столбец — ускоряемая часть, 1 ядро ЦП + 1 АрУ

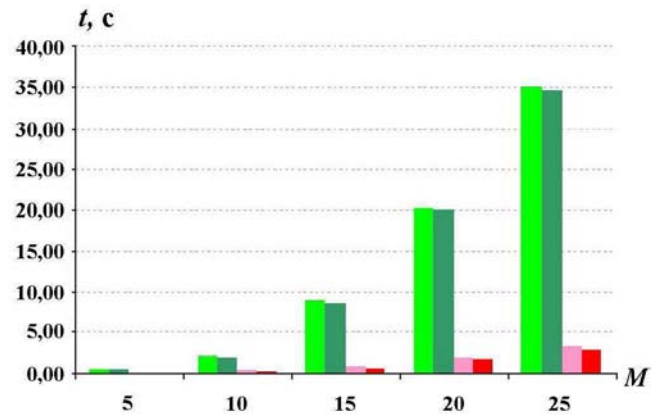


Рис. 7. Постановка исследований 1. Сравнение длительностей вычислений программы МД (потенциал МЕАМ) на 16 ядрах ЦП и 16 гибридных вычислителях (1 ядро ЦП + 1 АрУ): 1-й столбец — шаг задачи, 16 ядер ЦП; 2-й столбец — ускоряемая часть, 16 ядер ЦП; 3-й столбец — шаг задачи, $16 \times (1 \text{ ядро ЦП} + 1 \text{ АрУ})$; 4-й столбец — ускоряемая часть, $16 \times (1 \text{ ядро ЦП} + 1 \text{ АрУ})$

- для конфигурации 1 ядро ЦП + 1 АрУ — 10,5;
- для конфигурации $2 \times (1 \text{ ядро ЦП} + 1 \text{ АрУ})$ — 10,4;
- для конфигурации $4 \times (1 \text{ ядро ЦП} + 1 \text{ АрУ})$ — 9,7;
- для конфигурации $8 \times (1 \text{ ядро ЦП} + 1 \text{ АрУ})$ — 10,0;
- для конфигурации $16 \times (1 \text{ ядро ЦП} + 1 \text{ АрУ})$ — 11,1.

На рис. 8, а показан коэффициент ускорения k , полученный на ЦП. На 16 ядрах ЦП его значения варьируются от 10,5 до 16 в зависимости от размера задачи.

На рис. 8, б показан коэффициент ускорения, полученный при использовании гибридных вычислителей. На 16 вычислителях его значения варьируются от 32 до 168 в зависимости от размера задачи.

Коэффициент ускорения получен относительно длительности вычислений на одном ядре.

Постановка исследований 2. В данной постановке гибридные вычислители выполняют задачу размером² в четыре раза больше, чем ядра ЦП. Декомпозиция задачи на гибридных вычислителях задействует в четыре раза меньше MPI-процессов. Сравнение длительностей выполнения задач дано для следующих конфигураций:

- 4 ядра — 1 ядро ЦП + 1 АрУ (1 вычислительный модуль);
- 8 ядер — $2 \times (1 \text{ ядро ЦП} + 1 \text{ АрУ})$ (1 вычислительный модуль);
- 16 ядер — $4 \times (1 \text{ ядро ЦП} + 1 \text{ АрУ})$ (2 вычислительных модуля);
- 32 ядра — $8 \times (1 \text{ ядро ЦП} + 1 \text{ АрУ})$ (4 вычислительных модуля);
- 64 ядра — $16 \times (1 \text{ ядро ЦП} + 1 \text{ АрУ})$ (8 вычислительных модуля).

Тестирование проведено методом умножения.

На рис. 9 приводится сравнение длительностей вычислений программы МД (потенциал МЕАМ) на 4 ядрах ЦП и 1 гибридном вычислителе. В результате применения ускорителя длительность выполнения ускоряемой части уменьшена в 3 раза по сравнению с 4 ядрами. Длительность всего вычислительного процесса на гибридном вычислителе уменьшена в 2,7 раза.

²Размер задачи определяется количеством периодов кристаллической гранецентрированной кубической решетки.

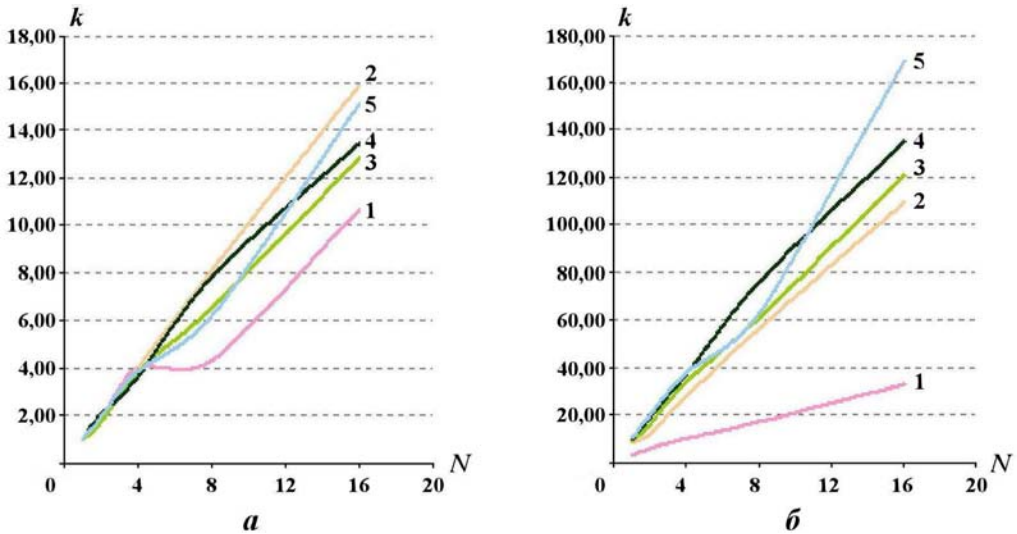


Рис. 8. Постановка исследований 1. Коэффициент ускорения вычислений для программы МД (потенциал МЕАМ): *a* — вычисления выполняются только ядрами ЦП; *b* — вычисления выполняются гибридными вычислителями; 1 — размер задачи $5 \times 5 \times 5$; 2 — размер задачи $10 \times 10 \times 10$; 3 — размер задачи $15 \times 15 \times 15$; 4 — размер задачи $20 \times 20 \times 20$; 5 — размер задачи $25 \times 25 \times 25$ (N — количество ядер ЦП или гибридных вычислителей)

На рис. 10 дано сравнение длительностей вычислений программы МД (потенциал МЕАМ) на 64 ядрах ЦП и 16 гибридных вычислителях. В результате применения ускорителя длительность выполнения ускоряемой части уменьшена в 3,6 раза, а длительность всего вычислительного процесса уменьшена в 3,4 раза.

На рис. 11, *a* показан коэффициент ускорения, полученный на 64 ядрах ЦП. Его значения варьируются от 8,5 до 12,5 в зависимости от размера задачи.

На рис. 11, *b* показан коэффициент ускорения, полученный при использовании 16 гибридных вычислителей. Его значения варьируются от 18 до 42 в зависимости от размера задачи.

Коэффициент ускорения получен относительно длительности вычислений на 4 ядрах.

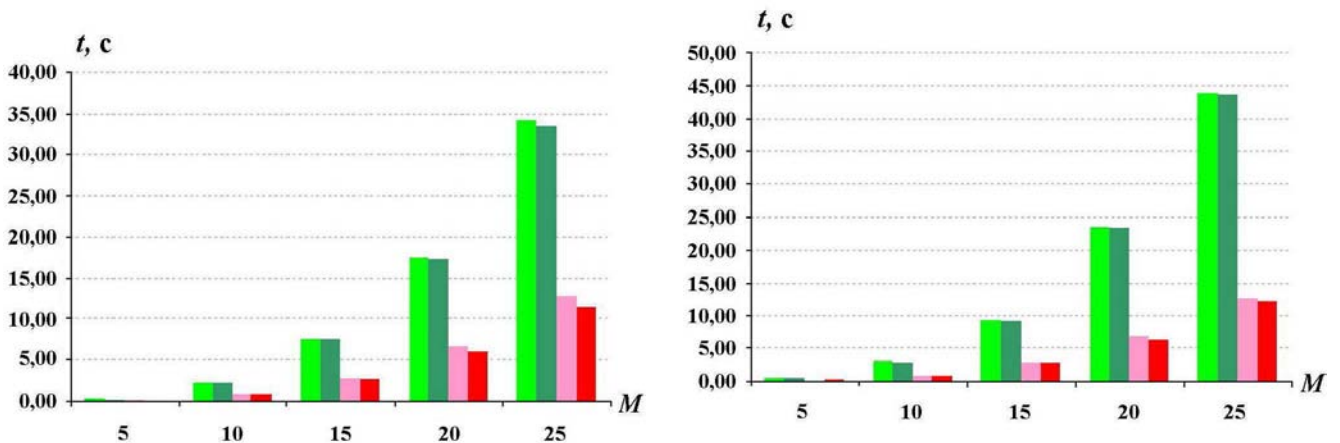


Рис. 9. Постановка исследований 2. Сравнение длительностей вычислений программы МД (потенциал МЕАМ) на 4 ядрах ЦП и 1 гибридном вычислителе (1 ядро ЦП + 1 АрУ): 1-й столбец — шаг задачи, 4 ядра ЦП; 2-й столбец — ускоряемая часть, 4 ядра ЦП; 3-й столбец — шаг задачи, 1 ядро ЦП + 1 АрУ; 4-й столбец — ускоряемая часть, 1 ядро ЦП + 1 АрУ

Рис. 10. Постановка исследований 2. Сравнение длительностей вычислений программы МД (потенциал МЕАМ) на 64 ядрах ЦП и 16 гибридных вычислителях (1 ядро ЦП + 1 АрУ): 1-й столбец — шаг задачи, 64 ядра ЦП; 2-й столбец — ускоряемая часть, 64 ядра ЦП; 3-й столбец — шаг задачи, $16 \times (1 \text{ ядро ЦП} + 1 \text{ АрУ})$; 4-й столбец — ускоряемая часть, $16 \times (1 \text{ ядро ЦП} + 1 \text{ АрУ})$

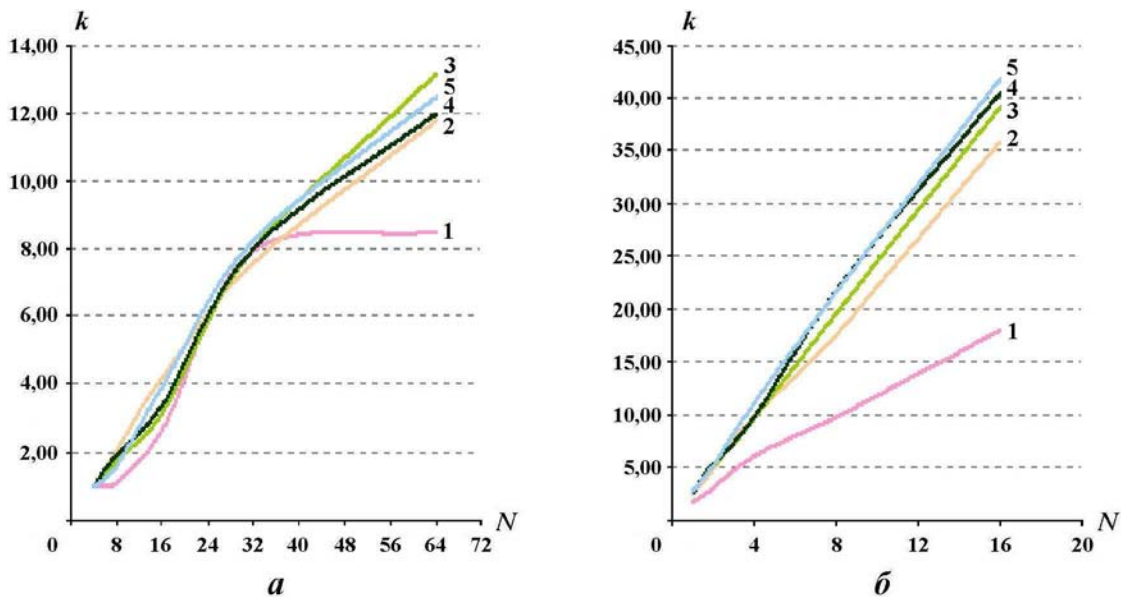


Рис. 11. Постановка исследований 2. Коэффициент ускорения вычислений для программы МД (потенциал МЕАМ) *a* — вычисления выполняются только ядрами ЦП; *б* — вычисления выполняются гибридными вычислителями: 1 — размер задачи $5 \times 5 \times 5$; 2 — размер задачи $10 \times 10 \times 10$; 3 — размер задачи $15 \times 15 \times 15$; 4 — размер задачи $20 \times 20 \times 20$; 5 — размер задачи $25 \times 25 \times 25$ (N — количество ядер ЦП или гибридных вычислителей)

Корректность полученных результатов. Правильность вычислений, выполняемых адаптированной для гибридных систем версией комплекса МД, проверена экспериментально.

Выполнено моделирование процесса развития радиационного каскада в дельта-плутонии. Первичная частица имеет энергию 300 эВ и направление (1, 3, 5). Размер задачи — $15 \times 15 \times 15$.

Расчет выполнялся до момента времени 2 пс на 8 ядрах ЦП с применением 8 АрУ и без них. Полученный график количества дефектов N_d приведен на рис. 12 (см. также цветную вкладку). Эксперимент проводился с двойной точностью.

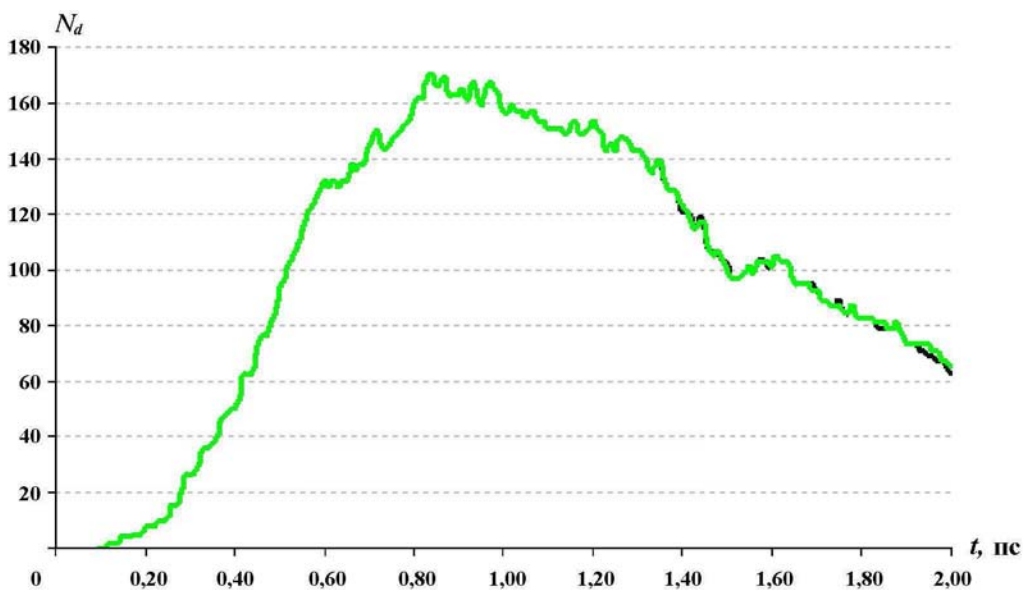


Рис. 12. Поведение количества дефектов в каскадной области (дельта-плутоний, потенциал МЕАМ)

Наблюдается появление отклонений на стадии остывания каскадной области. Поскольку обработка — поиск дефектов кристаллической решетки — производится методом сфер, то из-за минимальной погрешности вычислений, накапливающейся во время счета, частицы, попавшие в окрестность сферы, но не попавшие внутрь, продолжают считаться дефектными. Погрешность может быть вызвана различной последовательностью вычислений суммарной энергии (отсутствие ассоциативности при суммировании с плавающей запятой) в реализациях комплекса для ЦП и АрУ. Качественно результаты идентичны; количественное отклонение не превышает 2 %, и только на стадии остывания. Это отклонение находится в пределах статистической погрешности.

Список литературы

1. *Воронин Б. Л., Ерофеев А. М., Копкин С. В. и др.* Применение графических арифметических ускорителей для расчета задач молекулярной динамики по программному комплексу МД // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2009. Вып. 2. С. 55—61.
2. *Алейников А. Ю., Барабанов Р. А., Бутнев О. И. и др.* Программа МДП-СОВЦ решения задач молекулярной динамики на параллельных ЭВМ с распределенной памятью // Там же. 2001. Вып. 1. С. 3—13.
3. *Ackland G. J., Tichy G., Vitek V., Finnis M. W.* Simple N-body potentials for the noble metals and Nickel // *Philos. Mag. A.* 1987. Vol. 56. P. 735.
4. *Baskes M. I., Chen S. P., Cherne F. J.* Atomistic model of gallium // *Phys. Rev. B.* 2002. Vol. 66(10). P. 104—107.
5. NVIDIA CUDA Compute Unified Device Architecture Programming Guide. Ver. 2.0. NVIDIA Corporation, 2008.

Статья поступила в редакцию 01.03.10.
