

УДК 519.6

## ПРИМЕНЕНИЕ ГРАФИЧЕСКИХ АРИФМЕТИЧЕСКИХ УСКОРИТЕЛЕЙ ДЛЯ РАСЧЕТА ЗАДАЧ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ПО ПРОГРАММНОМУ КОМПЛЕКСУ МД

Б. Л. Воронин, А. М. Ерофеев, С. В. Копкин, И. А. Крючков, А. С. Рыбкин,  
С. А. Степаненко, В. В. Южаков  
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Исследуются возможности применения вычислителей с гибридной архитектурой для решения задач молекулярной динамики. Вычислители содержат универсальные процессоры и арифметические ускорители GPU NVIDIA 8800GTX.

Приведен анализ исходного алгоритма, пояснения по разбиению программы на фрагменты, замеры длительностей исполнения всей программы и ее фрагментов на универсальных процессорах и арифметических ускорителях.

*Ключевые слова:* графический арифметический ускоритель, процессор, программный код, производительность, молекулярная динамика.

### Введение

Для оценки эффективности применения графических арифметических ускорителей (АрУ) проведены исследования возможности адаптации программного комплекса расчета задач молекулярной динамики МД [1].

Программный комплекс МД реализует метод классической молекулярной динамики больших ансамблей микрочастиц, представляемых с точки зрения механики системой материальных точек, находящихся в потенциальном поле сил межчастичного взаимодействия. В числе основных применений — задачи радиационного старения, исследующие процессы зарождения и развития радиационных каскадов в гранецентрированных кубических решетках металлов, и моделирования процессов диффузии легких примесей в металлах.

Использование в расчетах методами молекулярной динамики современных потенциалов многочастичного взаимодействия ЕАМ [2] и особенно МЕАМ [3] требует больших вычислительных и временных ресурсов. Поэтому дополнительные возможности ускорения расчетов очень полезны.

Для решения задач молекулярной динамики в настоящее время широко используются как вычислительные системы общего назначения, так и специализированные гибридные мультипроцессорные системы. Применяемые и разрабатываемые программные комплексы для расчета задач молекулярной динамики характеризуются большим алгоритмическим разнообразием [4]. Очень широк охват областей их применения — от физики и материаловедения до медицины и фармакологии.

Данная реализация метода молекулярной динамики отличается хорошей масштабируемостью, большим количеством независимых арифметических вычислений, относительно небольшим количеством обменов. Эти особенности позволяют ожидать достижения хорошей эффективности счета на гибридных системах с АрУ.

Расчет вариантов задач с различным потенциалом дал возможность исследования влияния сложности математической части на коэффициент ускорения программы в целом.

Основные цели работы:

- проанализировать используемые в программном комплексе МД алгоритмы;

- провести адаптацию к счету на АрУ наиболее пригодных для этого фрагментов комплекса МД;
- исследовать влияние различных факторов на коэффициенты ускорения фрагментов и программы в целом;
- наметить план дальнейших работ по адаптации и реализации варианта комплекса МД для счета на гибридных системах с АрУ.

### Исследуемые математические модели программного комплекса МД

В программном комплексе МД реализован метод классической механики, основанный на решении систем уравнений Гамильтона.

В комплекс МД внедрены как парные (Морзе, Ленард—Джоунс и др.), так и многочастичные потенциалы (EAM Ackland, MEAM Beakes и др.). Тестирование проводилось на потенциалах двух видов:

1. *Парный потенциал Морзе*. Выражение для потенциала состоит из двух экспонент и имеет вид

$$u(r) = u_0 \left[ e^{-2\alpha r_0(r-1)} - 2e^{-\alpha r_0(r-1)} \right],$$

где  $r$  — расстояние между частицами;  $u_0, r_0, \alpha$  — константы.

2. *Многочастичный потенциал EAM Ackland*. Потенциальная энергия ансамбля из  $N$  частиц определяется как

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{i \neq j} \varphi(r_{ij}) - \sum_{i=1}^N \Phi(\rho_i),$$

где  $\varphi(r_{ij})$  — потенциал между частицами  $i$  и  $j$ ;  $\rho_i$  — электронная плотность  $i$ -й частицы,  $\rho_i = \sum_{j=1}^{N-1} \rho(r_{ij})$ ;  $\Phi(\rho_i)$  — энергия погружения частицы  $i$ .

**Алгоритм расчета сил с многочастичными потенциалами.** Для вычисления силы  $\mathbf{F}_i$ , действующей на частицу с номером  $i$ , необходимо взять градиент от полной энергии:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_i &= -\text{grad} U = -\text{grad} \sum_i U_i = -\text{grad} \left( \Phi(\rho_i) + \sum_{j \neq i} \Phi(\rho_j) + \sum_{j \neq i} \varphi(r_{ij}) \right) = \\ &= -\sum_{j \neq i} \left[ \frac{\partial \varphi}{\partial r} \Big|_{r=r_{ij}} \left( \frac{\partial \Phi}{\partial \rho} \Big|_{\rho=\rho_i} + \frac{\partial \Phi}{\partial \rho} \Big|_{\rho=\rho_j} \right) + \frac{\partial \varphi}{\partial r} \Big|_{r=r_{ij}} \right] \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}}, \end{aligned}$$

где  $U_i$  — потенциальная энергия  $i$ -й частицы.

Силы рассчитываются за два прохода по всем парам частиц, находящихся в одной ячейке сетки.

Во время первого прохода рассчитывается электронная плотность всех возможных пар частиц. Используется симметричность функции  $\rho(r_{ij}) = \rho(r_{ji})$ .

Во время второго прохода рассчитываются окончательные силы. Для каждой пары частиц  $i$  и  $j$  рассчитывается  $r_{ij}$ ; далее используются уже рассчитанные значения плотности  $\rho_i$  и  $\rho_j$  и одновременно с этим значения

$\frac{\partial \varphi}{\partial r} \Big|_{r=r_{ij}}$  суммируются с  $\frac{\partial \rho}{\partial r} \Big|_{r=r_{ij}} \left( \frac{\partial \Phi}{\partial \rho} \Big|_{\rho=\rho_i} + \frac{\partial \Phi}{\partial \rho} \Big|_{\rho=\rho_j} \right)$ .

Оценку вычислительных затрат нужно проводить из следующих соображений.

В сеточном подходе количество операций пропорционально среднему количеству частиц, попадающих в ячейку, которые обозначим через  $M$ , а также количеству частиц из соседних ячеек —  $K$ . Соответственно, если вся задача состоит из  $C$  ячеек и  $N$  частиц, то  $M = N/C$ ,  $K = 26N$

для трехмерного случая и  $K = 8N$  — для двумерного. Применяя третий закон Ньютона и используя симметричность или антисимметричность функций потенциала, сокращаем  $K$  до  $13N$  и  $4N$  соответственно. При вычислении парных составляющих потенциала и силы для каждой ячейки производится  $(M + K)^2$  операций вычисления функции  $\varphi(r_{ij})$ . Для всей задачи это составляет  $C(M + K)^2$  операций. Вычисление новых координат и скоростей пропорционально  $N$ . Время расчета сил составляет до 90 % времени счета всей задачи. Для МЕАМ-потенциала число операций  $\sim (M + K)^3$ . Время счета одного шага задачи с МЕАМ-потенциалом, в которой содержится 5 000 атомов, составляет  $\sim 50$  секунд на одном ядре многопроцессорной ЭВМ. Время счета такой же задачи с потенциалом ЕАМ Ackland составляет  $\sim 0,7$  секунды, с потенциалом Морзе — 0,4 секунды.

На сегодняшний момент наиболее востребованными при проведении расчетов являются потенциалы ЕАМ и МЕАМ. В данной работе исследовался потенциал ЕАМ Ackland, в дальнейшем планируется провести аналогичные исследования для потенциала МЕАМ.

### Адаптация программы

Структура гибридной вычислительной системы представлена на рис. 1. Она содержит универсальный четырехъядерный процессор (ЦП) семейства Kentsfield Intel Core 2 Quad Q6600, работающий на тактовой частоте 2,4 ГГц, и АРУ NVIDIA 8800GTX, подключенный с использованием шины PCI-Express x16, поддерживающей стандарт версии 1.1.

АРУ состоит из процессора NVIDIA G80 и оперативной памяти типа GDDR3 объемом 768 Мб. Процессор G80 содержит 16 мультипроцессорных блоков и 6 контроллеров памяти, обеспечивающих подключение 64-битных линий к оперативной памяти. Каждый мультипроцессорный блок включает 8 потоковых процессоров, массив из 8192 32-битных регистров и общую память объемом 16 Кб.

При компиляции программы для универсального процессора использовался компилятор Intel Fortran 10.1.3885 с оптимизацией О3, для работы с ускорителем применялся компилятор архитектуры NVIDIA CUDA 1.1 [5].

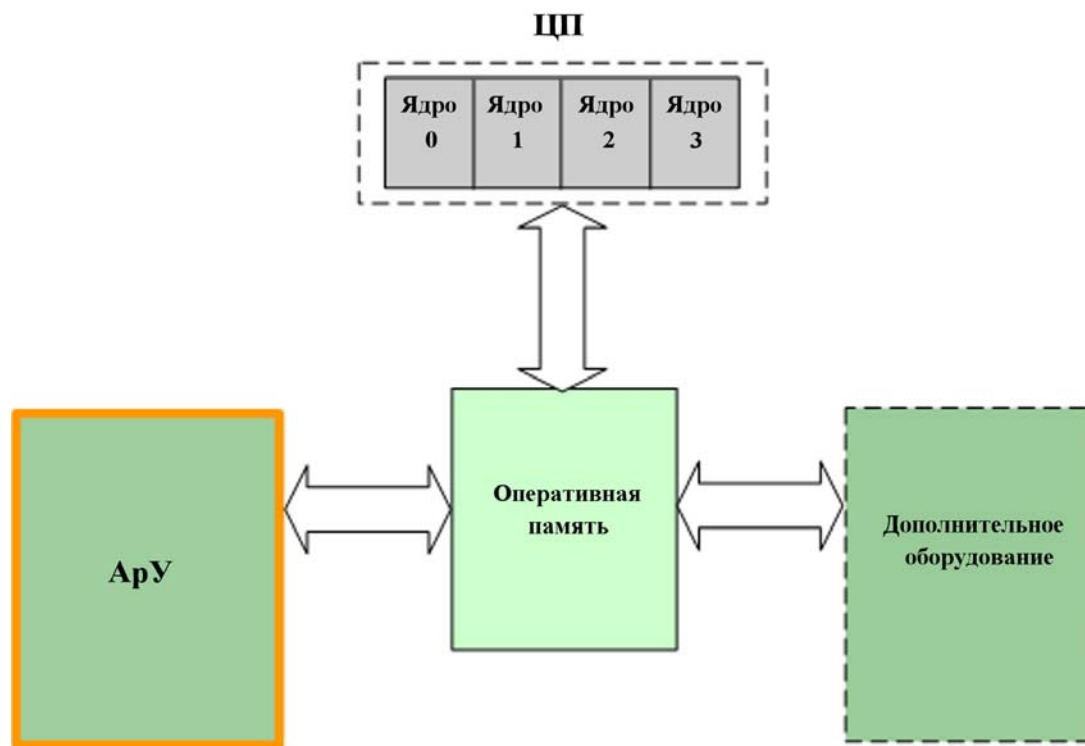


Рис. 1. Структура вычислительного модуля

На первом этапе адаптации комплекса МД к вычислениям на АрУ был выбран фрагмент программы, который:

- занимает (по времени) значительную часть вычислений на одном шаге;
- выполняется в рамках одного MPI-процесса;
- содержит вычисления, которые могут выполняться параллельно, независимо друг от друга.

Этот фрагмент содержит функцию расчета сил для ячеек:

```
do j = 1, n
  call cell_forces(c_n(j))
end do
```

Расчет сил в различных ячейках можно выполнять одновременно (параллельно).

Адаптация проводилась для функций вычисления потенциала Морзе и потенциала Ackland.

Основные отличия этих двух вариантов заключаются:

- в количестве арифметических операций (Морзе —  $n^2$ , Ackland —  $2n^2$ );
- в необходимости расчета в потенциале Ackland сил с многочастичными потенциалами.

На рис. 2. представлена структура программы с вычислением алгоритма расчета сил с потенциалом Морзе в первоначальном виде (рис. 2, а) и в модернизированном виде для вычисления на АрУ (рис. 2, б). Жирной линией выделена ускоряемая часть.

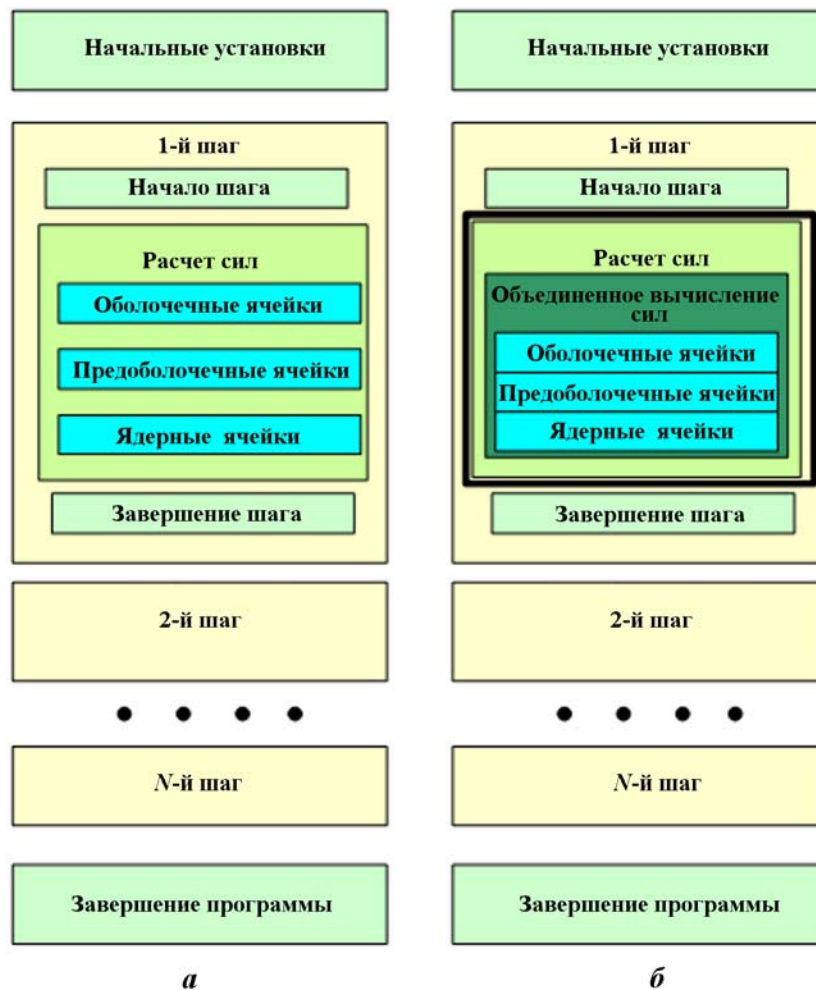


Рис. 2. Структура программы с вычислением потенциала Морзе: а — первоначальный вариант; б — модернизированный вариант

Структура программы, реализующей алгоритм расчета сил с потенциалом Ackland, аналогична представленной на рис. 2.

Изначально расчет сил для ячеек велся в три этапа: 1) для оболочечных ячеек; 2) для предоболочечных ячеек; 3) для ядерных ячеек. Для вычисления на ускорителе указанные этапы были объединены. Это позволило выполнять расчет один раз и эффективно задействовать АрУ.

Необходимые функции были реализованы на языке программирования С — для проверки результатов — и с использованием CUDA — для вычислений на АрУ. Все вычисления выполнялись с одинарной точностью.

Рассмотрим структуру вычислительного процесса, реализованного при расчете по комплексу МД. В качестве примера используем задачу с размерами  $L^3 = 55 \times 55 \times 55$  периодов кристаллической решетки в варианте с потенциалом Морзе (метод умножения). Длительности вычислений указаны в таблице. В данном случае ускоряемый фрагмент совпадает с объединенной функцией вычисления сил;  $T_1$  — длительность выполнения вычислительного процесса универсальным процессором,  $T_2$  — гибридным устройством (с использованием в нем АрУ и ЦП по отдельности, а также совместно).

Ускорение на всей задаче достигается благодаря ускорению вычисления объединенной функции. По сравнению с одним ядром ЦП это ускорение на АрУ составляет 5,69, по сравнению с двумя ядрами ЦП — 2,9, с четырьмя — 1,57. Уменьшение ускорения логично, так как задача считается методом умножения, т. е. объем вычислений на АрУ увеличивается с увеличением количества ядер (рис. 3, б), в то время как вычисления на ядрах ЦП выполняются параллельно (рис. 3, а).

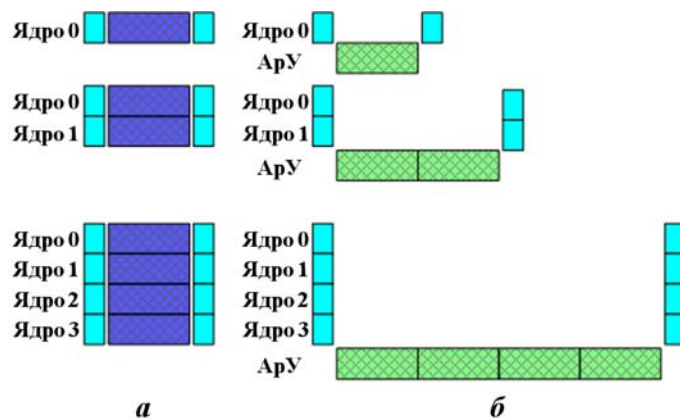


Рис. 3. Изменение объема вычислений в зависимости от количества ядер процессора (метод умножения): а) вычисления на ЦП; б) вычисления на АрУ

### Длительности вычислений по программе МД (потенциал Морзе, задача с размерами $55 \times 55 \times 55$ периодов кристаллической решетки)

Кол-во ядер процессора	Составляющая	Процессорная реализация	Гибридная реализация		Ускорение ( $T_1/T_2$ )
		$T_1$ , с	Вычислительное устройство	$T_2$ , с	
1	Объединенное вычисление сил	15,92	АрУ	2,80	5,69
	Сопутствующие вычисления на шаге 1 шаг	7,04	ЦП	7,07	1,00
		22,96	ЦП + АрУ	9,87	2,33
	Весь тест (3 шага)	68,52	ЦП + АрУ	29,60	2,32
2	Объединенное вычисление сил	17,71	АрУ	6,12	2,90
	Сопутствующие вычисления на шаге 1 шаг	7,16	ЦП	7,10	1,01
		24,87	ЦП + АрУ	13,22	1,88
	Весь тест (3 шага)	71,86	ЦП + АрУ	38,54	1,86
4	Объединенное вычисление сил	16,30	АрУ	10,40	1,57
	Сопутствующие вычисления на шаге 1 шаг	5,93	ЦП	5,91	1,00
		22,23	ЦП + АрУ	16,31	1,36
	Весь тест (3 шага)	66,72	ЦП + АрУ	48,91	1,36

## Результаты экспериментов

**Результаты тестирования с применением потенциала Морзе.** Длительности вычислений по комплексу МД с применением потенциала Морзе приведены на рис. 4 ( $L$  — линейный размер кубической счетной ячейки). Вычисления выполнялись методом умножения.

Длительность вычислений на адаптируемом фрагменте уменьшена в результате применения ускорителя в 6,44 раза по сравнению с применением одного ядра ЦП. Ускорение этого фрагмента по сравнению с выполнением на двух и четырех ядрах ЦП составило 3,28 и 1,59 соответственно.

Длительность всего вычислительного процесса на гибридном вычислителе уменьшилась в 4,10 раза по сравнению с выполнением на одном ядре ЦП. Ускорение процесса по сравнению с выполнением на двух и четырех ядрах составило 2,67 и 1,49 соответственно.

**Результаты тестирования с применением потенциала Ackland.** Длительности вычислений по комплексу МД с применением потенциала Ackland приведены на рис. 5. Вычисления выполнялись методом умножения.

Длительность вычислений на адаптируемом фрагменте уменьшена в результате применения ускорителя в 8,72 раза по сравнению с использованием одного ядра ЦП. Ускорение этого фрагмента по сравнению с выполнением на двух и четырех ядрах составило 3,58 и 2,06 соответственно.

Длительность всего вычислительного процесса на гибридном вычислителе уменьшилась в 6,64 раза по сравнению с использованием одного ядра ЦП. Ускорение процесса по сравнению с выполнением на двух и четырех ядрах составило 3,26 и 1,98 соответственно.

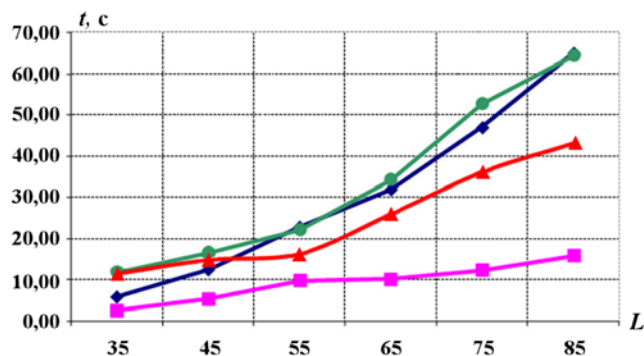


Рис. 4. Длительность вычислений по программному комплексу МД с применением потенциала Морзе, метод умножения: —◆— 1 ядро ЦП; —■— 1 ядро ЦП + АрУ; —●— 4 ядра ЦП; —▲— 4 ядра ЦП + АрУ

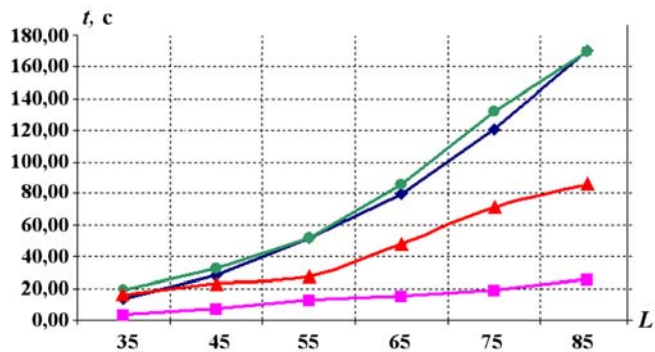


Рис. 5. Длительность вычислений по программному комплексу МД с применением потенциала Ackland, метод умножения: —◆— 1 ядро ЦП; —■— 1 ядро ЦП + АрУ; —●— 4 ядра ЦП; —▲— 4 ядра ЦП + АрУ

## Заключение

В результате проведенных работ показана возможность применения вычислителей с гибридной архитектурой для решения задач молекулярной динамики. Выполнена адаптация программного комплекса МД.

Длительность всего вычислительного процесса при использовании потенциала Морзе на гибридном вычислителе уменьшилась в 4,10 раза по сравнению с выполнением на одном ядре ЦП; по сравнению с выполнением на двух и четырех ядрах ускорение составило 2,67 и 1,49 соответственно.

Длительность всего вычислительного процесса при использовании потенциала Ackland на гибридном вычислителе уменьшилась в 6,64 раза по сравнению с выполнением на одном ядре ЦП; по сравнению с двумя и четырьмя ядрами ускорение составило 3,26 и 1,98 соответственно.

В дальнейшем представляется целесообразным исследовать:

- алгоритм вычисления сил с МЕАМ-потенциалом;
- эффективность применения нескольких АрУ для выполнения вычислений;
- эффективность применения нескольких вычислителей с гибридной архитектурой, объединенных в мультипроцессорную систему для решения задач молекулярной динамики.

### Список литературы

1. *Алейников А. Ю., Барабанов Р. А., Бутнев О. И. и др.* Программа МДП-СОВЦ решения задач молекулярной динамики на параллельных ЭВМ с распределенной памятью // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2001. Вып. 1. С. 3–13.
2. *Ackland G. J., Tichy G., Vitek V., Finnis M. W.* // Philos. Mag. A. 1987. Vol. 56. P. 735.
3. *Baskes M. I., Chen S. P., Cherne F. J.* // Phys. Rev. B. 2002. Vol. 66(10). P. 104–107.
4. GPU Acceleration of Molecular Modeling Applications. <http://www.physics.uiuc.edu/>.
5. NVIDIA CUDA Compute Unified Device Architecture Programming Guide. Ver 1.1. November 2007. NVIDIA Corporation, 2007.

Статья поступила в редакцию 16.10.08.

---