

УДК 519.6

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС "МОЛОХ" ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛАХ

Ф. А. Сапожников, Г. В. Ионов, В. В. Дрёмов
(РФЯЦ-ВНИИТФ)

В течение последних десяти лет в РФЯЦ-ВНИИТФ разрабатывается программа "Молох", используемая для проведения *параллельных* расчетов на суперкомпьютерах методом классической молекулярной динамики с высоким коэффициентом распараллеливания. Был разработан набор тестов для анализа эффективности реализованных алгоритмов. Он может быть использован для сравнения различных молекулярно-динамических комплексов.

Ключевые слова: молекулярная динамика, список соседей, кристаллическая структура, эффективность распараллеливания.

Введение

Теоретическое и экспериментальное исследование свойств плотного вещества является одним из основных направлений научной работы РФЯЦ-ВНИИТФ. Метод молекулярной динамики (МД) является новым методом исследований в области материаловедения. Современные суперкомпьютеры позволяют напрямую моделировать совместные эффекты в образцах, состоящих из миллиардов атомов, что дает возможность моделировать на атомистическом уровне различные процессы: поведение материала при динамическом нагружении, радиационные повреждения, влияние дефектов и легирующих добавок на механические свойства материала, старение актинидов.

В течение последних десяти лет в РФЯЦ-ВНИИТФ разрабатывается программа "Молох". Это программа для проведения расчетов на суперкомпьютерах в режиме распараллеливания (*параллельных* расчетов). Использование современных средств программирования позволило достичь очень высокой эффективности. В программе реализованы практически все необходимые для моделирования средства: построение потенциалов для различных материалов, моделирование различных процессов в произвольной трехмерной геометрии, автоматический анализ результатов.

Был разработан набор тестов для анализа эффективности использованных алгоритмов. Он может быть использован для сравнения между собой комплексов с разными способами реализации МД.

Проблемы моделирования близкодействия методом МД

Для моделирования близкодействия методом МД необходимо решить ряд задач, в том числе разработать и реализовать алгоритм поиска соседних атомов в пределах заданного радиуса и методы разбиения моделируемого образца для параллельного счета. От успешного решения этих задач зависит гибкость программы.

Поиск соседей в пределах заданного радиуса. Для быстрого расчета энергии взаимодействия атома с другими атомами образца в МД был введен *радиус обрезания взаимодействия*, т. е. считается, что с атомами, выходящими за окружность этого радиуса, данный атом не взаимодействует.

Один из подходов к организации счета МД связан с построением списка соседей для каждого атома, для чего необходимо быстро определить атомы, находящиеся в пределах радиуса обрезания. С этой целью в мире широко исполь-

зуется так называемый метод Link Cell (LCM) как самый простой в реализации и достаточно быстрый при выполнении. В программном комплексе "Молох" был реализован оригинальный алгоритм поиска атомов в заданном радиусе — метод упорядоченного пространства (OSM).

Метод LCM делит пространство с атомами на кубические элементы с постоянной длиной ребра, равной радиусу обрезания (или меньше), и распределяет все атомы по этим кубикам (слева на рис. 1, см. также цветную вкладку). Соседние атомы располагаются в 27 ближайших кубиках. Метод легко реализуется и работает быстро, но его основной недостаток — проблемы с памятью, которой не хватает для увеличивающегося образца (рис. 2, см. также цветную вкладку).

Этот недостаток порождается бесспорным преимуществом метода LCM — постоянной длиной ребра. Разрабатывая новый метод поиска, было решено отказаться от константной длины ребра кубика. Но это приводит к существенному усложнению процедуры поиска кандидатов в соседи данного атома.

Метод OSM делит пространство на области с приближенно равными концентрациями атомов (справа на рис. 1, см. также цветную вкладку), чтобы не зависеть от размера образца. Этот метод работает медленнее, чем LCM, на 15 % для потенциалов типа Леннарда-Джонса (для ГЦК-решетки при радиусе обрезания 10 \AA получим ~ 140 соседей) и на 30 % для потенциалов типа ММПА (для ГЦК-решетки при радиусе обрезания 4 \AA получим ~ 14 соседей), но он никогда не дает сбой.

Метод распараллеливания. Существует несколько подходов к распараллеливанию МД: по силам, по атомам, по пространству. Как было показано в [1], распараллеливание по простран-

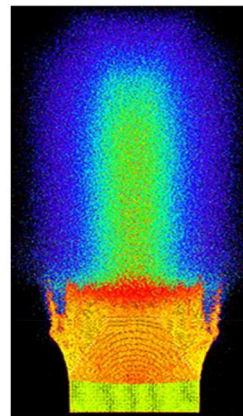


Рис. 2. Контрольный образец (детонация цилиндра из ТАТЬ-подобного ВВ)

ству является наиболее эффективным при большом количестве атомов и процессоров.

В "Молохе" использована иерархическая пространственная декомпозиция (рис. 3), что позволяет с высокой точностью определять *зоны ответственности* процессоров в зависимости от локальной концентрации атомов. Это также позволяет проводить эффективную динамическую балансировку счетной нагрузки на процессоры с локальным изменением этих зон, которая производится вместе с обменом атомами и может запускаться как на каждом шаге, так и по условию превышения порога дисбаланса.

Алгоритм построения зон состоит из нескольких этапов (см. рис. 3):

1. Разрезаем образец вдоль оси X на равные по концентрации атомов слои.
2. Разрезаем каждый слой в отдельности, независимо от других, вдоль оси Y на равные по концентрации атомов бруски.
3. Разрезаем каждый брусок в отдельности, независимо от других, вдоль оси Z на равные по концентрации атомов зоны.



Рис. 1. Примеры систем и способов построения списка соседей

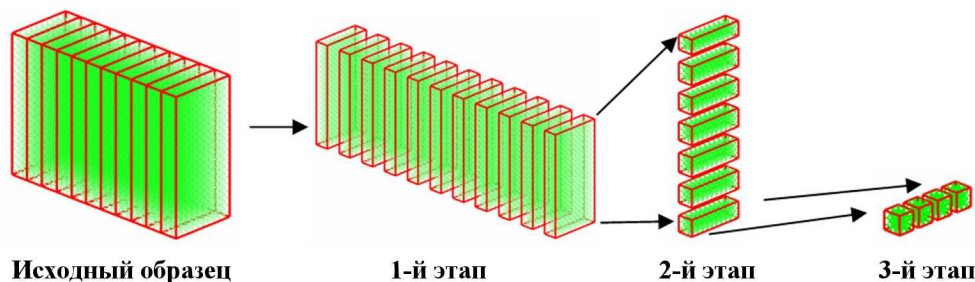


Рис. 3. Иерархическая пространственная декомпозиция

Каждому процессору присваивается своя зона контроля пространства с атомами (или без них, такое может произойти при высокой скорости потока атомов, когда балансировка просто не успевает изменить зоны).

Программный комплекс "Молох"

Любой МД-расчет подразумевает три стадии: построение образца, МД-моделирование, обработка полученных данных. Получение *физически неадекватных* результатов хотя бы на одной из этих стадий ставит под вопрос правильность всего расчета. В программном комплексе "Молох" реализованы эффективные алгоритмы, позволяющие получать достоверные результаты.

Построение образца. Для получения физически правдоподобных образцов в "Молохе" реализован построитель моно- и поликристаллов методом ячеек Вороного (рис. 4, *а*, см. также цветную вкладку). Есть возможность внедрить примеси и дефекты. Существует специальная библиотека предварительно насчитанных дефектов, таких как, например, пузырек гелия в решетке плутония (рис. 4, *б*), петлевая дислокация (рис. 4, *в*). Применяется наложение условий сложной геометрии: полуплоскость,

сфера, цилиндр, прямоугольный параллелепипед (рис. 4, *г*).

Проведение расчетов.

Потенциалы. В "Молохе" реализованы следующие широко известные потенциалы: Леннарда-Джонса, EXP-6, МПА, ММПА, Brenner REBO 2002, AIREBO, *молекулярно-механическое силовое поле* (рис. 5). Непосредственно авторами были разработаны потенциалы GEAM (Generalized Embedded Atom Model) для моделирования материалов со сложной электронной структурой, Modified REBO ABCD — модифицированный REBO с добавлением дальнего действия (до 8 Å) для расчета модельной взрывчатки из четырех типов атомов (параметризация для ТАТБ) [2].

Для улучшения параметров существующих потенциалов и подбора параметров для новых потенциалов в "Молохе" реализован *параллельный генетический* алгоритм, который минимизирует ошибку описания потенциалом заданных экспериментальных или рассчитанных данных.

"Молох" написан на языке C++, что позволяет с легкостью добавлять новые потенциалы при минимальном изменении существующего кода.

Моделирование. Моделирование можно производить в NVE-, NVT-, NPT-ансамблях с ис-

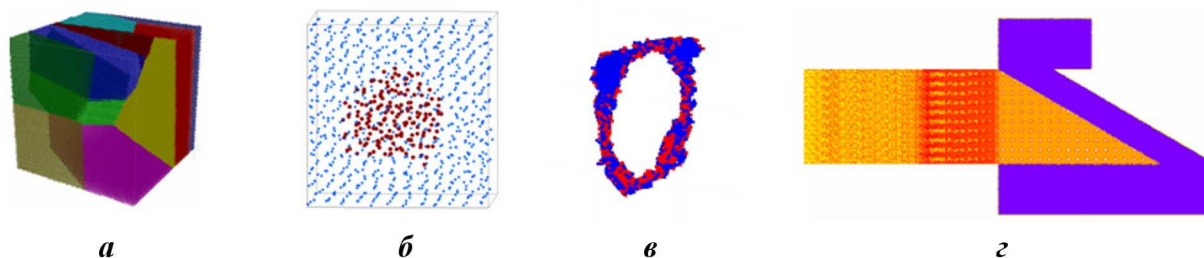


Рис. 4. Построение образца: *а* — поликристалл; *б* — пузырек гелия; *в* — петлевая дислокация; *г* — сложная геометрия

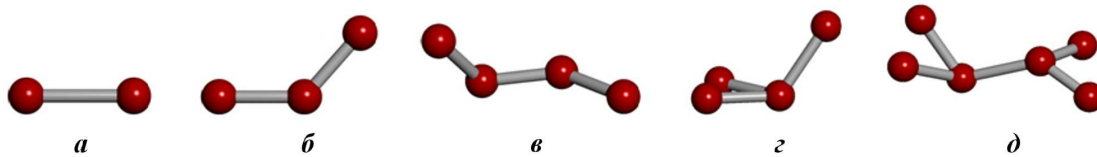


Рис. 5. Элементы молекулярно-механического поля: *a* — ковалентная связь; *b* — валентный угол; *в* — торсионный угол; *г* — хиральный угол; *д* — двойной хиральный угол

пользованием нескольких потенциалов одновременно, с варьированием шага по времени. Реализовано наложение сложных движущихся геометрических ограничений (движущийся схлопывающийся сферический поршень).

Автоматизация расчетов. Были автоматизированы процедуры расчета фононных дисперсионных кривых и DOS при желаемой температуре (рис. 6, *a*), упругих модулей (рис. 6, *б*, см. также цветную вкладку), ударной адиабаты (методом гюгониостата), изотермы, холодной кривой, псевдоизэнтропы.

Анализ результатов. В "Молохе" реализованы построение трехмерных сеток макроскопических характеристик (температура, давление, плотность), определение ковалентных связей и химического состава образца (например, при моделировании испарения нанокластера углерода), а также автоматическое распознавание структур.

После анализа существующих алгоритмов определения кристаллической структуры (центральной симметрии [3], общих соседей [4], распределений углов [5]) и определения области их применимости авторами статьи было принято решение разработать собственный алгоритм автоматического распознавания кристаллической

структуры и дефектов в образце — *метод адаптивного шаблона* (МАШ) [6]. Он определяет такие решетки, как ОЦК, ГЦК, ГПУ, алмазную, листы Графена (легко добавить и другие структуры) и восстанавливает вакансии, идентифицирует междоузлия и разделенные междоузлия, дислокации и дефекты упаковки. МАШ не имеет подстраиваемых параметров и мало чувствителен к температурному разупорядочению.

Эффективность распараллеливания.

Динамическая балансировка счетной нагрузки на процессоры (обычно производится при дисбалансе выше 5%) позволяет добиться высокой эффективности распараллеливания даже на задачах неравновесной МД.

На рис. 7, *a* показан результат выполнения на 64 процессорах теста на *умножение* образца. Расчет проводился для монокристалла меди, $240 \times 25 \times 25$ периодов решетки (600 000 атомов), в периодике по направлениям *Y* и *Z*. Рассчитывалось столкновение $1/3$ образца с $2/3$ образца (по *X*) со скоростью $V = 1000$ м/с. Умножения образца производились по направлениям *Y* и *Z* ($240 \times 25 \times 50$, $240 \times 50 \times 50$, $240 \times 50 \times 100$, $240 \times 100 \times 100$).

На рис. 7, *б* показан результат теста на *деление* образца для монокристалла меди, $120 \times 70 \times 70$ периодов решетки (2 352 000 атомов), в периоди-

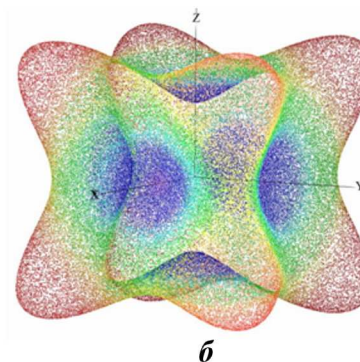
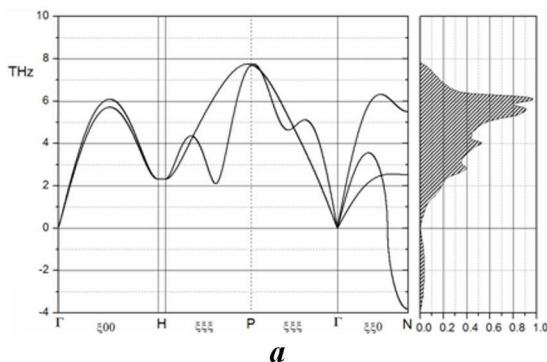


Рис. 6. Результаты выполнения процедур автоматизации расчетов: *a* — фононные дисперсионные кривые и DOS; *б* — угловая зависимость модуля Юнга для ОЦК-решетки меди

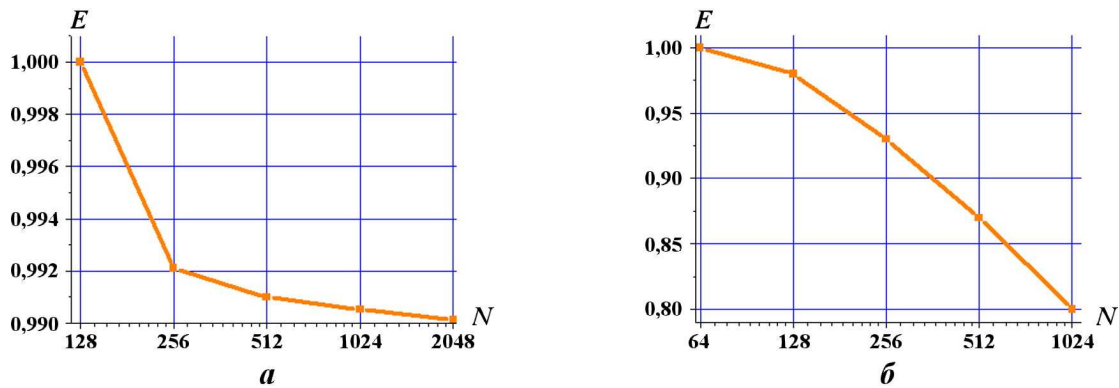


Рис. 7. Эффективность распараллеливания E в тестах на умножение (а) и деление (б) образца; N — количество процессоров

ке по направлениям Y и Z , при столкновении $1/3$ образца с $2/3$ образца (по X) со скоростью $V = 1000$ м/с.

В обоих тестах наблюдается высокая эффективность распараллеливания (дисбаланс меньше 5 %) даже на сильно неравновесной задаче.

Система тестов МД-комплексов

Существует множество тестов для оценки физической адекватности результатов, получаемых с помощью МД-комплексов, однако необходимо иметь тесты, оценивающие программную эффективность как конкретных алгоритмов, так и всего подхода при реализации МД в данном комплексе. Далее будут приведены тесты, направленные на оценку таких важных алгоритмов, как динамическая балансировка, расчет многопотенциальной задачи и построение списка соседей.

В "Молохе" балансировка счетной нагрузки на процессоры осуществляется по сумме времени построения списка соседей и времени вычисления энергии и сил. Дисбаланс D вычисляется по следующей формуле:

$$D = \frac{\max\{t_i\} - \min\{t_i\}}{\langle t_i \rangle},$$

где $t_i = t_i^{cc} + t_i^{ec}$ — суммарное время использования i -го процессора; t_i^{cc} — время построения списка соседей на i -м процессоре, t_i^{ec} — время вычисления энергии и сил на i -м процессоре; $\langle t_i \rangle$ — среднее значение t_i .

Тест 1 ("Death Star"). Данный тест направлен на оценку эффективности реализованной в МД-комплексе динамической балансировки счетной нагрузки на процессоры (если она вообще есть), которая не должна зависеть от осевых направлений течений атомов. В данной задаче полностью реализуется трехмерная деформация тонкой оболочки (рис. 8, см. также цветную вкладку). Динамическая балансировка крайне необходима при моделировании физических процессов, приводящих к большим высокоскоростным деформациям, — ударного нагружения различных материалов. Значительные трехмерные деформации приводят к потокам атомов, которые сложно распределить между процессорами без нарушения баланса.

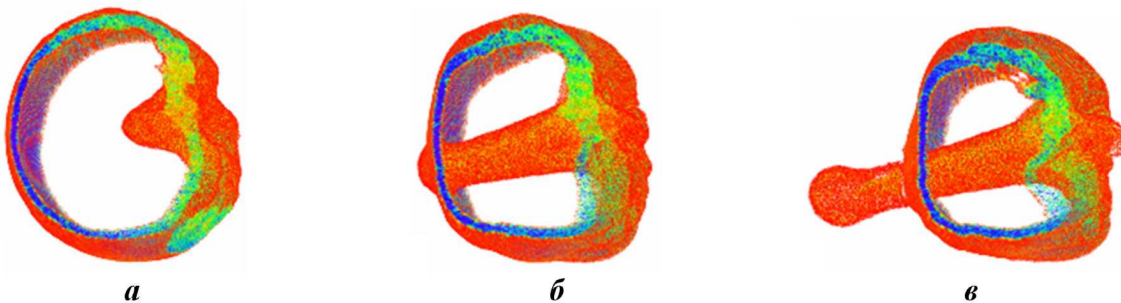


Рис. 8. Срез оболочки $R_{big} = 722 \text{ \AA}$ на разные моменты времени: а — $t = 15$ пс; б — $t = 30$ пс; в — $t = 45$ пс

Тестируемый образец — оболочка с центром в начале координат, внешним и внутренним радиусами R_{big} и $R_{small} = 0,95R_{big}$ соответственно — вырезается из монокристалла меди (ЕАМ [7]) (рис. 9, а). Скорость каждого атома вычисляется по формуле

$$v = V_{\max} e^{-\arccos(\cos \theta \cos \theta_0 + \sin \theta \sin \theta_0 \cos(\varphi - \varphi_0))}, \quad (1)$$

где $V_{\max} = 3000$ м/с — максимальная скорость, и направлена к центру оболочки (рис. 9, б, см. также цветную вкладку).

Сферические координаты выделенного направления нагружения: $\varphi_0 = \pi/6$; $\theta_0 = \pi/3$. Сферические координаты атома: $\varphi = \text{atan2}(y/R_{big}, x/R_{big})$, $\theta = \arccos(z/R_{big})$, где x, y, z — его декартовы координаты (atan2 — функция математической библиотеки C++).

Контрольный образец — куб с ребром $L = 0,995 \sqrt[3]{(R_{big}^3 - R_{small}^3)} 4\pi/3$ — вырезается из монокристалла меди (рис. 9, в) с начальной температурой 300 К. Он имеет почти такое же количество атомов, что и тестируемая оболочка.

При расчете задавались *свободные* граничные условия, шаг по времени 1,5 фс. Считалось 30 000 шагов.

Отношение μ полного времени счета тестируемого образца к полному времени счета контрольного образца должно быть близко к единице. Значительное увеличение данного отношения говорит о низкой эффективности балансировки.

В результате расчетов по программному комплексу "Молох" получено:

- 1) для $R_{big} = 361 \text{ \AA}$ (100 периодов решетки, 2,39 млн. атомов) на 128 процессорах $\mu = 0,95$. Средний дисбаланс при счете обо-

лочки составил 4,6 %, при счете кубика — 4,3 %;

- 2) для $R_{big} = 722 \text{ \AA}$ (200 периодов решетки, 19 млн. атомов) на 1024 процессорах $\mu = 1,1$. Средний дисбаланс при счете оболочки составил 15 %, при счете кубика — 7 %.

Тест 2 ("Cocktail B-52"). Данный тест направлен на оценку эффективности реализованного в МД-комплексе счета с несколькими потенциалами, имеющими сильно различающийся радиус обрезания: MEAM ($3,5 \text{ \AA}$) и LJ (10 \AA). Данная ситуация возникает при моделировании неустойчивости границы между двумя средами.

При этом время трехатомных взаимодействий, рассчитываемых с использованием потенциала MEAM, сильно зависит от радиуса обрезания, что может привести к замедлению расчета в несколько раз на простом поиске среди ненужных для этого потенциала троек атомов.

Тестируемый образец — брусок, состоящий из кубиков, сделанных из Ве (MEAM [8]) и Аг (потенциал Леннарда-Джонса с $\sigma = 3,4^{-10}$, $\varepsilon = 1,7^{-21}$) (рис. 10, а), с начальной температурой 300 К. Взаимодействие Ве—Аг игнорируется.

Контрольный образец — каждый из кубиков в отдельности (рис. 10, б, в).

При расчете задавались свободные граничные условия, шаг по времени 1,5 фс. Считалось 1000 шагов.

Отношение μ полного времени счета тестируемого образца к сумме полных времен счета контрольных образцов Ве и Аг должно быть близко к единице. Значительное увеличение данного отношения говорит о низкой эффективности реализации счета.

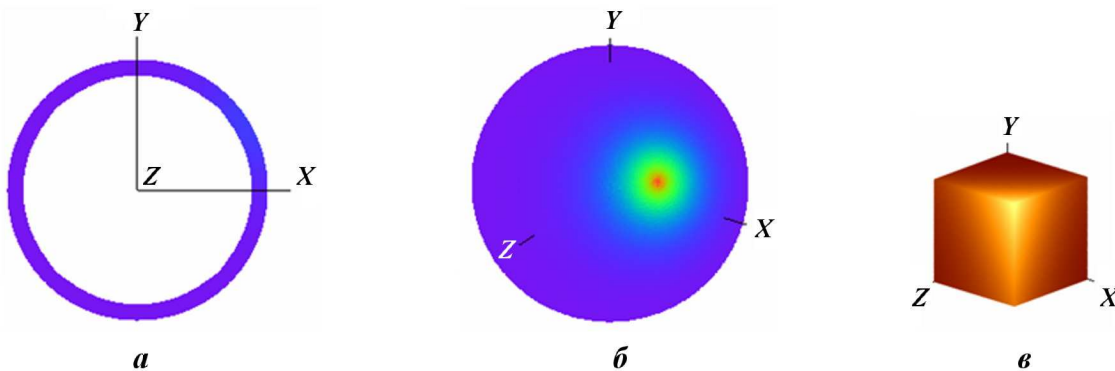


Рис. 9. Тест 1: а — продольный срез тестируемой оболочки; б — раскраска оболочки по кинетической энергии атомов; в — контрольный образец

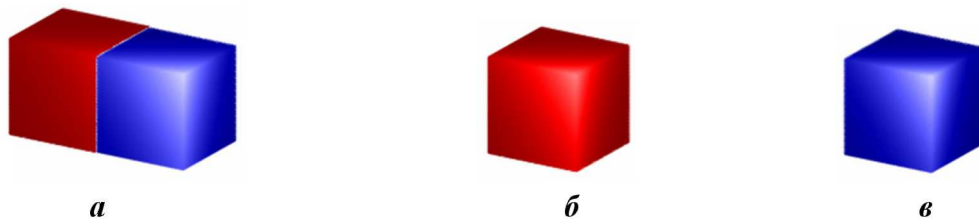


Рис. 10. Тест 2: *a* — тестируемый образец; *b* — контрольный бериллиевый куб; *c* — контрольный аргоновый куб

В результате расчетов получено:

- 1) для $L = 200 \text{ \AA}$ (988 130 атомов Be, 376 785 атомов Ar) на 128 процессорах $\mu = 1,8$. Средний дисбаланс при счете тестируемого образца составил 5%, при счете кубиков Be и Ar — соответственно 6,8% и 10%;
- 2) для $L = 400 \text{ \AA}$ (7901960 атомов Be, 2 997 722 атомов Ar) на 1024 процессорах $\mu = 1,7$. Средний дисбаланс при счете тестируемого образца составил 7,8%, при счете кубиков Be и Ar — соответственно 9% и 16%.

По мнению авторов, $\mu \sim 1,7$ — это хороший результат, добиться которого удалось введением сортировки списка соседей по возрастанию расстояния до них для каждого атома в отдельности. Это позволяет для близких взаимодействий (МЕАМ) полностью прекращать рассмотрение соседей при достижении предельного радиуса, на котором количество соседей менее 10, что на порядок меньше полного количества соседей. Время, затраченное на сортировку, приводит к замедлению расчета менее чем в 2 раза, тогда как время счета потенциала увеличилось менее чем на 1%, что и требовалось.

Тест 3 ("Supernova"). Данный тест направлен на оценку возможности счета с использованием МД-комплекса разлетающихся образ-

цов. При моделировании детонации, например при расчете критического диаметра, возникают ситуации, когда концентрация частиц становится сильно неоднородной, а линейные размеры образца увеличиваются на несколько порядков. Даже в такой ситуации необходимо провести безотказный расчет без остановки на действия, связанные с *ручной* перестройкой данных в программе.

Проблема, которую при этом требуется решить: во время построения списка соседей с помощью методов LCL с константной длиной ребра (радиус обрезания) может возникнуть переполнение памяти для больших пористых образцов.

Тестируемый образец — медный (ЕАМ [7]) шар, атомы которого имеют начальную скорость 1000 м/с, направленную из центра наружу.

Расчет проводился со свободными граничными условиями, шаг по времени задавался равным 1,5 фс. Считалось 200 000 шагов. Цель расчета заключалась в том, чтобы получить результат с сохранением энергии, избежав сообщения об ошибке.

Тест был пройден на образце $R = 200 \text{ \AA}$ (2,85 млн. атомов) на 128 процессорах без остановок. Средний дисбаланс за весь расчет составил 10%. Объем образца увеличился в 224 140 раз (рис. 11, см. также цветную вкладку).

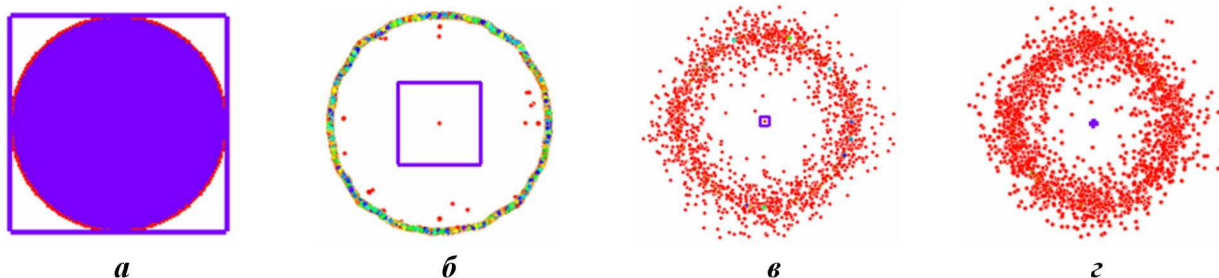


Рис. 11. Тест 3. Продольный срез образца (разные масштабы) на разные моменты времени: *a* — $t = 0$ пс; *b* — $t = 15$ пс; *c* — $t = 150$ пс; *d* — $t = 300$ пс. Квадрат соответствует начальному размеру

Заключение

Решение методом МД физических задач, разнородных с точки зрения геометрии, набора моделируемых веществ и сложности используемых при этом моделей межатомного взаимодействия, требует разработки универсального программного комплекса. Функциональные части такого комплекса должны с максимальной эффективностью использовать вычислительные ресурсы суперкомпьютера, на котором проводятся вычисления.

В настоящей статье, кроме описания собственно программного комплекса "Молох", впервые приведена система тестов, позволяющая оценить ту или иную программу, реализующую метод МД, с точки зрения такой эффективности. В предлагаемых тестах рассмотрены три задачи, принципиально отличающиеся друг от друга по используемой физической модели и, по мнению авторов, наилучшим образом подходящие для тестирования балансировки счетной нагрузки, эффективности алгоритма поиска соседей и эффективности совместной (в рамках одной моделируемой системы) обработки нескольких потенциалов, характеризующихся разной сложностью и радиусом действия.

Предложенная система тестов не претендует на полноту и будет дополнена по мере расширения круга решаемых физических задач.

Список литературы

1. *Plimpton S.* Fast parallel algorithms for short range molecular dynamics // *J. Comp. Phys.* 1995. Vol. 117. P. 1–19.
2. *Sapozhnikov F. A., Dremov V. V., Derbenev I. V. et al.* Molecular dynamics simulation of TATB-like explosive // *AIP Conf. Proc.* 2007. Vol. 955. P. 463–466.

3. *Kelchner C. L., Plimpton S. J., Hamilton J. C.* Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation // *Phys. Rev. B.* 1998. Vol. 58. P. 11085–11088.
4. *Honeycutt J. D., Anderson H. C.* Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters // *J. Phys. Chem.* 1987. Vol. 91. P. 4950–4963.
5. *Ackland G. J., Jones A. P.* Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation // *Phys. Rev. B.* 2006. Vol. 73. P. 054104 (1–6).
6. *Сапожников Ф. А., Ионов Г. В., Дрёмов В. В.* Метод адаптивного шаблона для анализа кристаллических структур и дефектов при молекулярно-динамическом моделировании высокоскоростных деформаций // *Химическая физика.* 2008. Т. 27, № 3. С. 63–70.
7. *Mishin Y., Papaconstantopoulos D. A., Voter A. F., et al.* Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding and embedded-atom calculations // *Phys. Rev. B.* 2001. Vol. 63. P. 224106 (1–15).
8. *Dremov V., Karavaev A., Sapozhnikov F. et al.* Molecular dynamic simulation of thermodynamic and mechanical properties and behaviour of Be when high-rate straining // *DYMAT 2009 Conf. Proc. Brussels, Belgium, 2009.* P. 1277–1283.

Статья поступила в редакцию 21.02.11.