

УДК 519.6

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС МОДЕЛИРОВАНИЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ДЛЯ ГИБРИДНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ

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

Выполнена дальнейшая модернизация ускорительной версии программного комплекса МД, учитывающая взаимодействия частиц как одинаковых, так и разных типов. Исследуется возможность решения задач молекулярной динамики с использованием различных гибридных вычислительных систем.

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

Введение

Проведение молекулярно-динамического моделирования процессов, определяющих свойства конструкционных материалов, требует значительных вычислительных ресурсов. Часть расчетов по комплексу МД уже ведется на гибридных вычислительных системах. В проведенных ранее работах [1–4] получены результаты по адаптации различных частей комплекса МД для выполнения на гибридных вычислительных системах.

К настоящему моменту в ускорительной версии комплекса МД реализованы дополнительные возможности:

- выполнена модернизация функций, реализующих межчастичное взаимодействие;
- реализована возможность расчета взаимодействия для нескольких материалов.

Кроме того, исследованы возможности применения различных гибридных вычислительных систем для решения задач молекулярной динамики:

- получены длительности выполнения расчетов по комплексу МД на однопроцессорной персональной системе, специализированной компактной вычислительной системе ГВС-10 "Кубань", гибридной мультипроцессорной системе;

- выполнено сравнение с универсальными составляющими приведенных систем;
- проведено сравнение ускорителей на основе графических процессоров NVIDIA GT200 и GF100 на задачах молекулярной динамики.

Модернизация программы

Табулирование значений потенциалов и их производных. В предыдущих статьях [3, 4] были представлены результаты разработки ускорительной версии программы расчета сил взаимодействия для парных и многочастичных потенциалов в комплексе МД. Реализованные алгоритмы были узкоспециализированными, расчеты проводились для конкретных типов потенциалов: парного — Морзе и многочастичных — ЕАМ (Ackland и др.) и МЕАМ (Baskes и др.). Для вычислений с другими типами потенциалов программный код необходимо модифицировать, так как используется аналитический вид функций потенциала. При вводе новых модельных функций меняется арифметическая интенсивность программы, что требует проведения дополнительных исследований и настройки программы для оптимальной работы на арифметических ускорителях (АрУ).

В комплексе МД используется метод табулирования значений потенциала и его производной, а при вычислении значений функции потенциала или его производной конкретное значение полу-

чается интерполяцией табличных значений. Поэтому данный алгоритм адаптирован для работы на АрУ. Это позволяет унифицировать работу программы для потенциалов различных видов и использовать библиотеку межчастичных потенциалов комплекса МД для расчетов на АрУ.

При выполнении на гибридных вычислительных системах универсальной части программного комплекса 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. Модифицирована структура программы вычисления сил: для парных и многочастичных потенциалов ЕАМ разработан алгоритм распараллеливания на АрУ 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 текущей и соседних ячейках. Это позволило отказаться от дорогостоящего списка соседей и использовать уже существующие в комплексе МД векторные массивы — цепочки связанных частиц.

Использование нескольких материалов.

Первые версии программ комплекса МД для гибридных вычислительных систем обладали ограниченными возможностями, так как были рассчитаны на использование материала только одного типа и соответственно одного потенциала. Разработка ускорительной версии программы, использующей табулированные значения потенциалов и их производных, позволила адаптировать ее для одновременного использования в задаче нескольких типов материалов и соответственно нескольких потенциалов.

При использовании в задаче двух материалов для взаимодействия частиц одинаковых и разных типов задается три потенциала. При этом задается таблица указателей на номер потенциа-

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

Введенные изменения позволяют моделировать взаимодействие расплавленных металлических наночастиц с поверхностями ОЦК- и ГЦК-металлов [5].

Потенциал МЕАМ для сплава двух элементов. Программа расчета взаимодействия частиц для потенциала МЕАМ отличается от аналогичных программ для парных потенциалов и многочастичных ЕАМ-потенциалов. В ней используется аналитический вид функций. Для сплавов используется несколько наборов параметров, причем для взаимодействия пары одно-типных частиц применяется полный набор параметров, а для взаимодействия частиц разного типа используется набор параметров, отвечающих за функции расчета экранировки и локальных электронных плотностей.

Все ускорительные функции МЕАМ-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 МЕАМ позволяют проводить моделирование свойств и процессов сплавов.

Результаты экспериментов

Исследования, представленные в данной статье, проведены на различных вычислительных системах:

- персональная вычислительная система с АрУ NVIDIA GeForce GTX260 и NVIDIA GeForce 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, ЕАМ, МЕАМ).

При проведении экспериментальных исследований задействованы различные АрУ:

- NVIDIA GeForce GTX260;

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

Спецификации АрУ приведены в таблице.

Для обобщения результаты экспериментов на различных АрУ приведены на рис. 1–3. На рис. 4–6 показаны ускорения, полученные при максимальном задействовании используемых вычислительных систем. Отсутствие некоторых данных связано с нехваткой памяти.

На рис. 1–3 представлены длительности выполнения вычислений, полученные на различ-

Спецификации АрУ

Характеристика	NVIDIA GeForce GTX260	NVIDIA GeForce GTX295	NVIDIA Tesla C1060	NVIDIA GeForce GTX470
Тип GPU	GT200	GT200	GT200	GF100
Частота ядра, ГГц	1,296	1,24	1,3	1,22
Количество потоковых процессоров	192	480	240	448
Количество мультипроцессоров	24	60	30	14
Объем глобальной памяти, Мбайт	896	1 792	4 096	1 280
Интерфейс	PCI-Express x 16	PCI-Express x 16	PCI-Express x 16	PCI-Express x 16

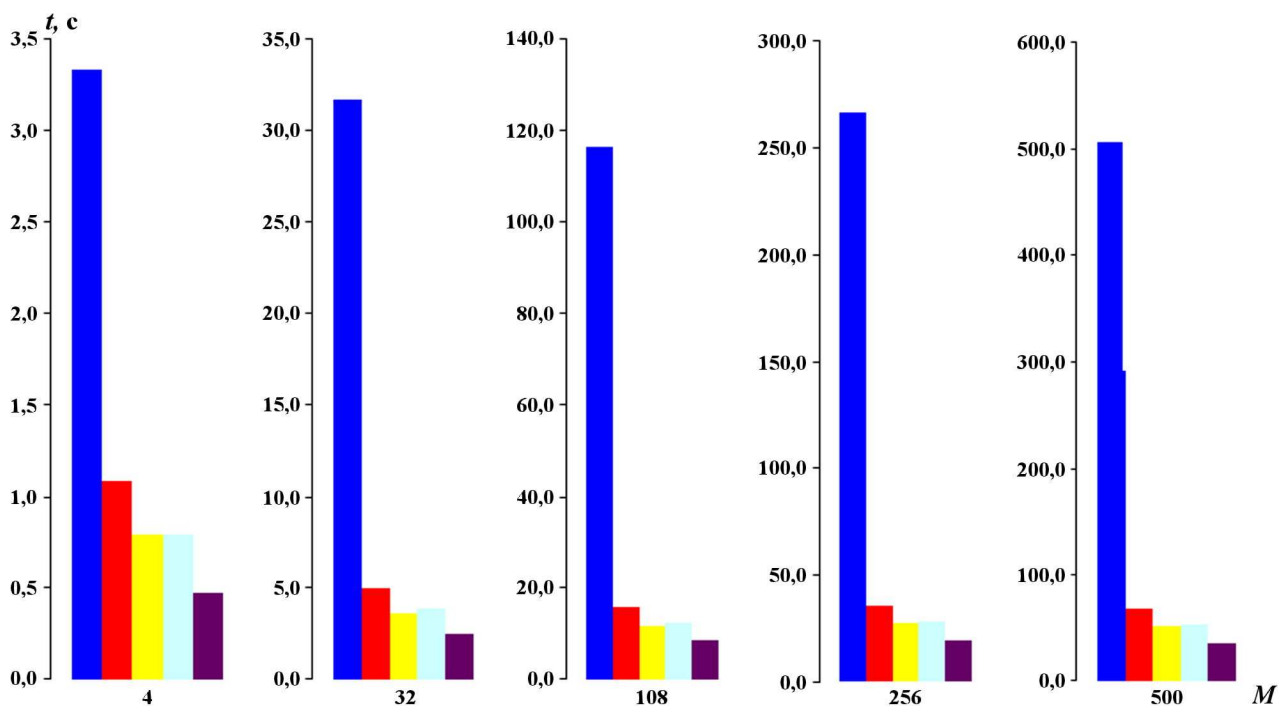


Рис. 1. Длительности вычислений по программе МД (потенциал Морзе, один MPI-процесс): 1-й столбец — 1 ядро ЦП; 2-й столбец — АрУ GeForce GTX260; 3-й столбец — АрУ GeForce GTX295; 4-й столбец — АрУ Tesla C1060; 5-й столбец — АрУ GeForce GTX470

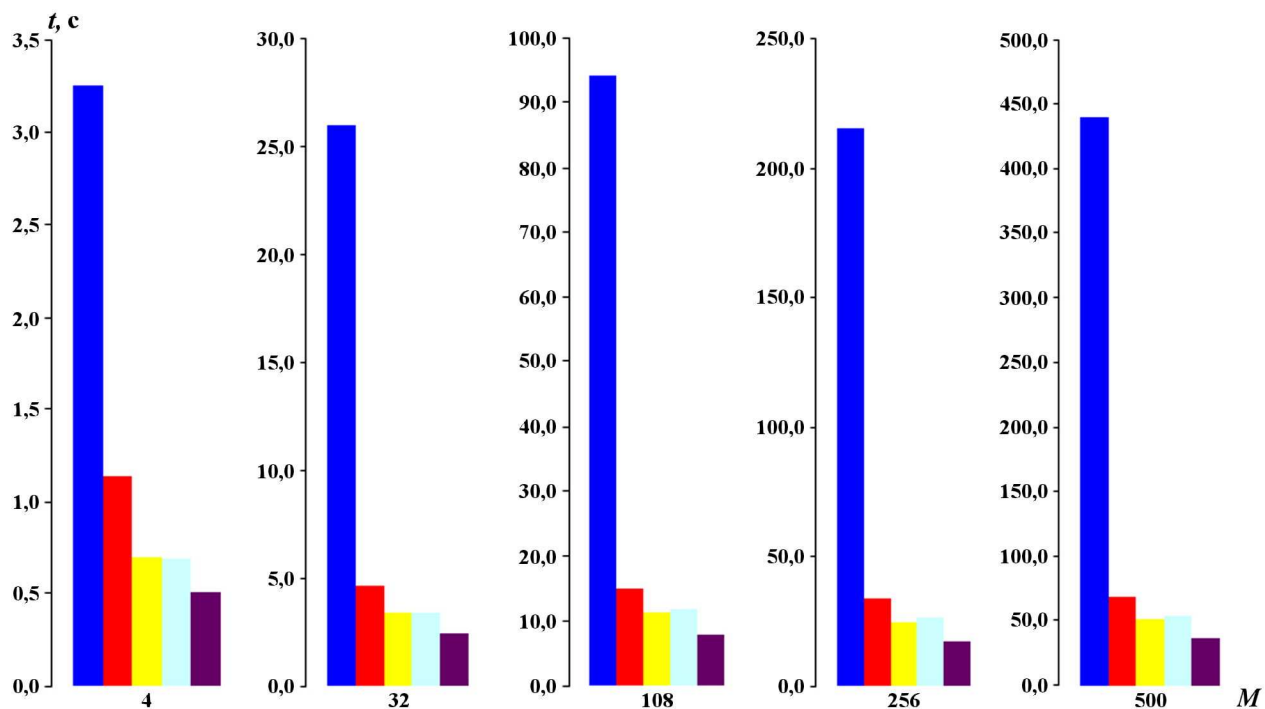


Рис. 2. Длительности вычислений по программе МД (потенциал ЕАМ, один MPI-процесс): 1-й столбец — 1 ядро ЦП; 2-й столбец — АрУ GeForce GTX260; 3-й столбец — АрУ GeForce GTX295; 4-й столбец — АрУ Tesla C1060; 5-й столбец — АрУ GeForce GTX470

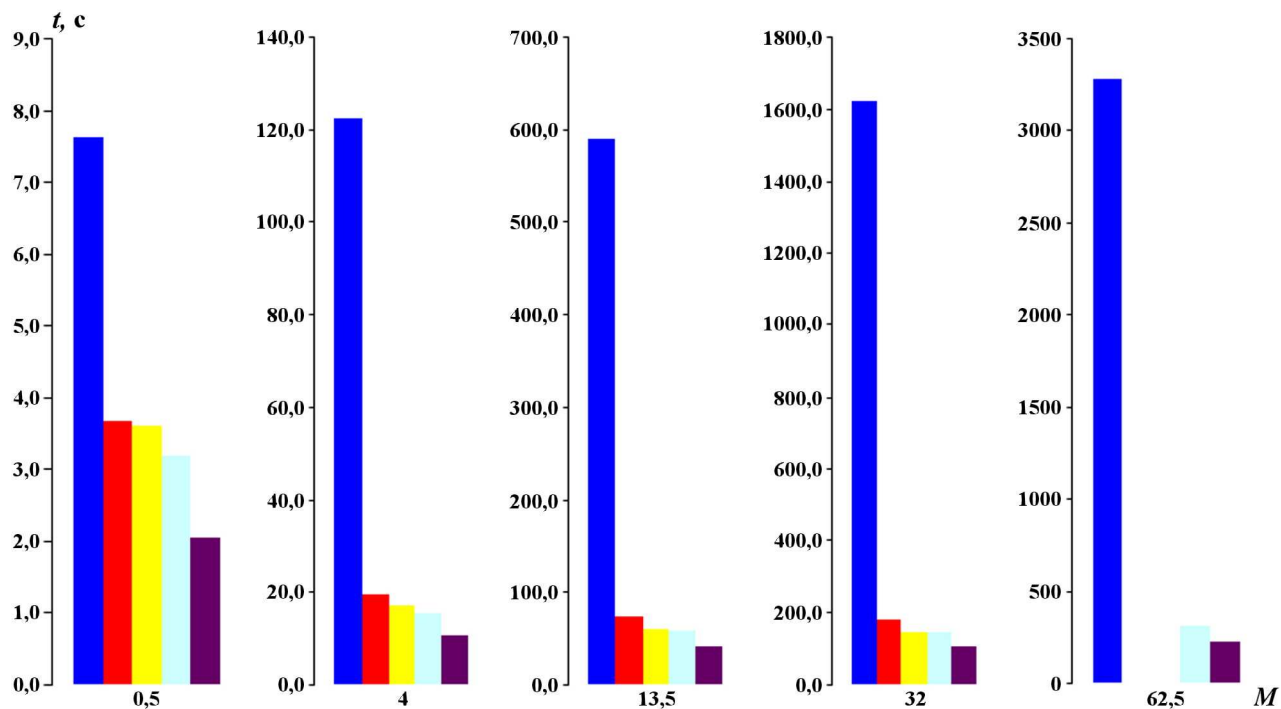


Рис. 3. Длительности вычислений по программе МД (потенциал МЕАМ, один MPI-процесс): 1-й столбец — 1 ядро ЦП; 2-й столбец — АрУ GeForce GTX260; 3-й столбец — АрУ GeForce GTX295; 4-й столбец — АрУ Tesla C1060; 5-й столбец — АрУ GeForce GTX470

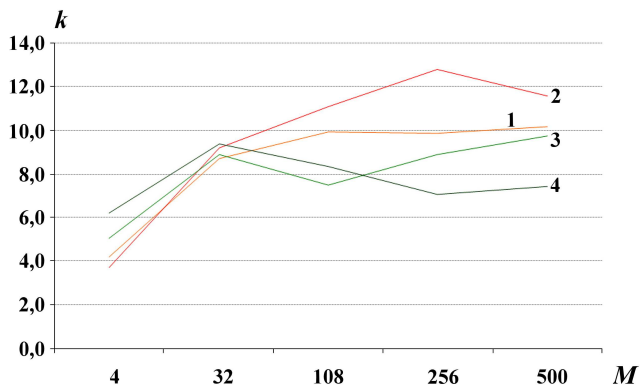


Рис. 4. Ускорение вычислений по комплексу МД для потенциала Морзе: 1 — ГВС-10 "Кубань", 1 МРІ-процесс; 2 — ГВС-10 "Кубань", 8 МРІ-процессов; 3 — мультипроцессорная система, 1 МРІ-процесс; 4 — мультипроцессорная система, 64 МРІ-процесса

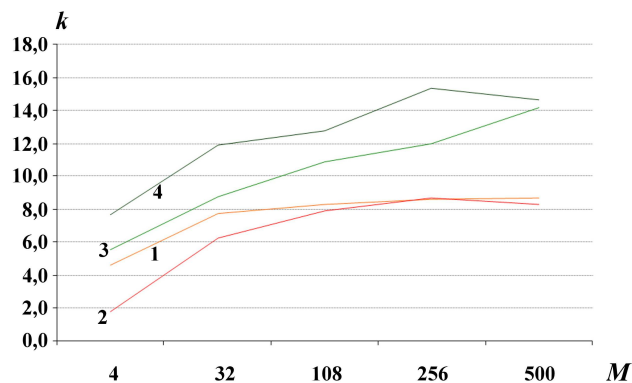


Рис. 5. Ускорение вычислений по программе МД для потенциала ЕАМ: 1 — ГВС-10 "Кубань", 1 МРІ-процесс; 2 — ГВС-10 "Кубань", 8 МРІ-процессов; 3 — мультипроцессорная система, 1 МРІ-процесс; 4 — мультипроцессорная система, 64 МРІ-процесса

ных ускорителях, относительно одного ядра универсального процессора Intel Core i7-920 при использовании одного МРІ-процесса на задачах различных размеров (M — число частиц в тысячах) для различных потенциалов.

Время расчетов по комплексу МД с использованием потенциала Морзе на одном АрУ по сравнению с одним ядром универсального процессора уменьшилось от 3 до 14,5 раза. Наибольшее ускорение получено на АрУ нового поколения NVIDIA GeForce GTX470.

Время расчетов с использованием потенциала ЕАМ на одном АрУ по сравнению с одним ядром универсального процессора уменьшилось от 2,8 до 12,1 раза. Наибольшее ускорение получено на

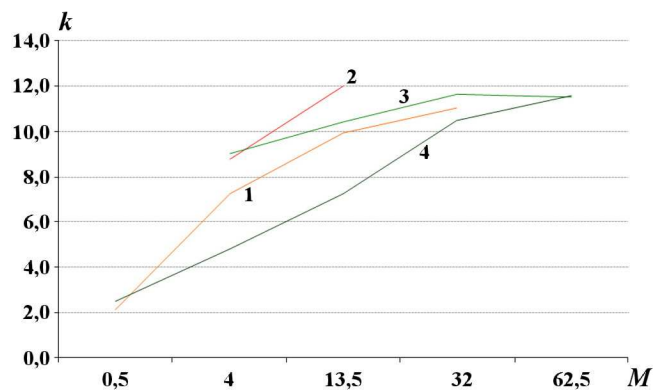


Рис. 6. Ускорение вычислений по программе МД для потенциала МЕАМ: 1 — ГВС-10 "Кубань", 1 МРІ-процесс; 2 — ГВС-10 "Кубань", 8 МРІ-процессов; 3 — мультипроцессорная система, 1 МРІ-процесс; 4 — мультипроцессорная система, 64 МРІ-процесса

АрУ нового поколения NVIDIA GeForce GTX470 (в 1,45–1,9 раза больше чем на других АрУ).

При расчетах с потенциалом МЕАМ длительность вычислений на одном АрУ сократилась по сравнению с одним ядром универсального процессора от 2 до 15 раз. Наибольшее ускорение получено на АрУ нового поколения NVIDIA GeForce GTX470 (в 1,35–1,7 раза больше чем на других АрУ). При выполнении расчетов с потенциалом МЕАМ размер задачи меньше по сравнению с другими потенциалами из-за большего расхода памяти на АрУ.

На рис. 4–6 представлены ускорения вычислений за счет использования АрУ в ГВС-10 "Кубань" и мультипроцессорной системе на задачах различных размеров для различных потенциалов. Для ГВС-10 "Кубань" максимально задействовано 8 МРІ-процессов, при этом вычисления выполнялись на 4 ядрах универсального процессора и 8 АрУ. Для мультипроцессорной системы максимально задействовано 64 МРІ-процесса, при этом вычисления выполнялись на 64 ядрах универсальных процессоров и 64 АрУ.

Коэффициент ускорения k , полученный на обеих гибридных вычислительных системах с использованием одного и максимального количества МРІ-процессов, на различных размерах задач для потенциалов Морзе, ЕАМ и МЕАМ отличается не более чем на 20 %.

С применением графических ускорителей проведено моделирование всестороннего сжатия сплава оружейного плутония Pu-Ga (рис. 7, см. также цветную вкладку). Результаты получе-

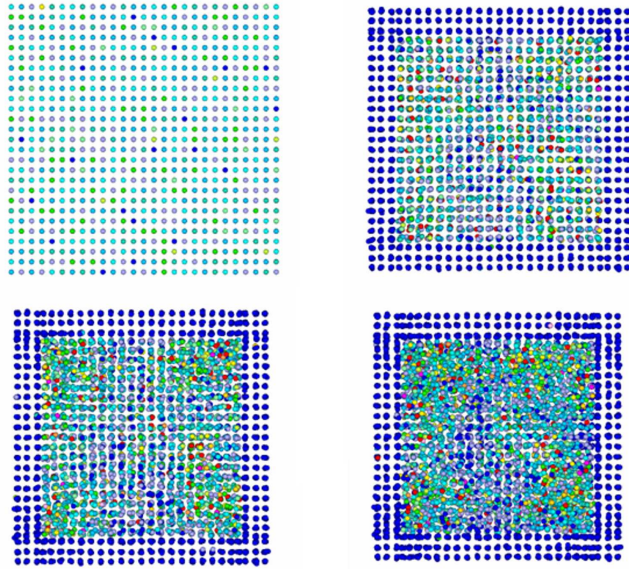


Рис. 7. Моделирование всестороннего сжатия монокристаллического образца Pu-Ga (содержание Ga 5,2%)

ны в кратчайшие сроки, время моделирования на мультипроцессорной системе составило около 5 суток; без применения ускорителей длительность выполнения возрастает на порядок и составляет примерно 50 суток.

Заключение

Реализованный в данной работе подход организации вычисления значений функции 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 функций 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, что актуально для моделирования упругопластических свойств конструкционных материалов.

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

В работе получены длительности выполнения расчетов на различных гибридных вычислительных системах (однопроцессорная персональная система, специализированная компактная вычислительная система ГВС-10 "Кубань", гибридная мультипроцессорная система). 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:

- для потенциала Морзе — от 4 до 10 раз на АрУ NVIDIA GTX260 и от 9 до 19 раз на АрУ NVIDIA GeForce GTX470;
- для потенциала EAM — от 4 до 9 раз на АрУ NVIDIA GTX260 и от 9 до 17 раз на АрУ NVIDIA GeForce GTX470;
- для потенциала MEAM — от 3 до 14 раз на АрУ NVIDIA GTX260 и от 5 до 23 раз на АрУ NVIDIA GeForce GTX470.

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

- для потенциала Морзе — от 4 до 10 раз;
- для потенциала EAM — от 4 до 9 раз;
- для потенциала MEAM — от 2 до 11 раз.

Длительность вычислений уменьшена на мультипроцессорной системе с ускорителями по сравнению с мультипроцессорной системой на универсальных процессорах:

- для потенциала Морзе — от 5,1 до 9,7 раза;
- для потенциала EAM — от 5,6 до 14,2 раза;
- для потенциала MEAM — от 9 до 11,6 раза.

Выполнены расчеты в многопроцессорном режиме, показано масштабирование ускорения на всех исследованных вычислительных системах. Выполнено сравнение различных АрУ. Полученные результаты показывают возможность эффективного использования АрУ для расчета задач молекулярной динамики.

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 // X Межд. семинар "Супервычисления и математическое моделирование". Саров, 29 сентября—3 октября 2008 г.
2. *Крючков И. А., Копкин С. В.* Адаптация алгоритма расчета взаимодействия для многочастичного потенциала МЕАМ на гибридных вычислительных системах // XI Межд. семинар "Супервычисления и математическое моделирование". Саров, 5—9 октября 2009 г.
3. *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.
4. *Копкин С. В., Крючков И. А.* Алгоритм модернизированного многочастичного потенциала для молекулярно-динамического моделирования на графическом арифметическом ускорителе // Там же. 2010. Вып. 3. С. 73—82.
5. *Коваленко Н. О., Воронин Б. Л., Копкин С. В. и др.* Молекулярно-динамическое моделирование взаимодействия расплавленных наночастиц с поверхностями металлов // Межд. науч. конф. по проблемам физики высоких плотностей энергии "XII научные Харитоновские чтения". Саров, 19—23 апреля 2010 г.

Статья поступила в редакцию 13.01.11.
