

# МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИОНИЗОВАННЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ НА ГРАФИЧЕСКИХ УСКОРИТЕЛЯХ

И.В. Морозов, Р.Г. Быстрый

Для теоретического исследования неидеальной плазмы широко применяется метод молекулярной динамики (МД). Он позволяет на уровне движения электронов и ионов исследовать элементарные процессы в плазме, такие как плазменные волны, электрон-ионная релаксация, взаимодействие излучения с плазмой и др. [1]. В то же время метод МД предъявляет высокие требования к производительности вычислительных систем и эффективности распараллеливания программ моделирования. В наибольшей степени на скорость работы программ влияют число частиц в системе (размер моделируемой области), реалистичность модели взаимодействия частиц и объем статистического усреднения.

Следует отметить, что статистическое усреднение является неотъемлемой частью моделирования неравновесных сред. Расчет характеристик процесса, таких как, Фурье образ коррелятор тока, заключается в генерации набора МД траекторий из начальных условий, которые идентичны с точки зрения макроскопических параметров, однако представляют собой различные статистически независимые микросостояния. Результаты анализа каждой из данных траекторий усредняются для получения окончательного результата. Это, во-первых, позволяет уменьшить время выполнения программы за счет использования сравнительно малого числа частиц в МД ячейке при сохранении той же точности результатов. Во-вторых, дает возможность получить статистически достоверный результат, позволяет гарантировать, что, наблюдаемые при моделировании, эффекты зависят лишь от макроскопических параметров и не зависят от выбранного микросостояния.

Статистическое усреднение дает возможность простого распараллеливания программ, поскольку расчет траекторий для различных начальных микросостояний может производиться независимо. Требования к коммуникационной сети для соответствующей параллельной вычислительной системы являются, очевидно, минимальными, поэтому данная задача хорошо подходит не только для традиционных кластеров, но и для кластеров на гибридной архитектуре. Примером такого кластера служит К-100 ИПМ РАН, именно на нем получены все результаты, представленные в данной работе.

В настоящей работе метод МД успешно применяется для описания неидеальной плазмы, образующейся при ионизации металлических нанокластеров короткими лазерными импульсами [2-3]. Число атомов в одном кластере, как правило, невелико (до 1млн.), что позволяет напрямую (решая систему уравнений Ньютона для каждой частицы) моделировать динамику электронов и ионов без применения приближения сплошной среды.

Сила, действующая на частицу, определяется выбором потенциала взаимодействия, В данной работе используется потенциал электрон-ионного взаимодействия [3], который обеспечивает учет квантово-механических эффектов на коротких расстояниях:

$$U(r_i) = - \sum_{\forall j \neq i} \frac{Ze^2}{r_{ij}} \operatorname{erf} \left( \frac{r_{ij}}{\sigma} \right),$$

Основной особенностью этого потенциала является то, что он очень медленно убывает с ростом расстояния между частицами. Такие потенциалы называются дальнедействующими. Для систем с дальнедействующим потенциалом неприменим метод списка ближайших соседей, используемый традиционно для короткодействующих потенциалов [4,5]. Это делает задачу вычислительно тяжелой даже для сравнительно небольшого числа частиц в системе. Кроме того, необходимость знать координаты всех частиц системы для вычисления силы, действующей на одну частицу, делает неэффективным стандартный метод распараллеливания МД программ (декомпозиция по пространству), применяемый на системах с распределенной памятью. В этом случае ГПУ с общей памятью для всех потоков может быть существенно более эффективным.

Формулы для потенциала электрон-ионного взаимодействия содержат такие функции как erf() и exp(). Это вычислительно тяжелые функции по сравнению с простейшими арифметическими операциями. По этому, в работе используются, предварительно построенные, интерполяционные таблицы для потенциала и силы. Это позволило исключить из вычислительного ядра все специальные функции, оставив только простейшие арифметические операции. Для хранения интерполяционных таблиц используется текстурная память, которая обладает двумя полезными особенностями: быстрым доступом по случайному адресу и аппаратной интерполяцией.

При выполнении программы на ГПУ выполняется декомпозиция по частицам, т.е. каждый поток вычисляет потенциальную энергию и силу для одной частицы. Таким образом, распараллеливается неявный цикл по частицам. На рис.1 показан график зависимости времени выполнения одного шага молекулярной динамики от числа частиц в системе.

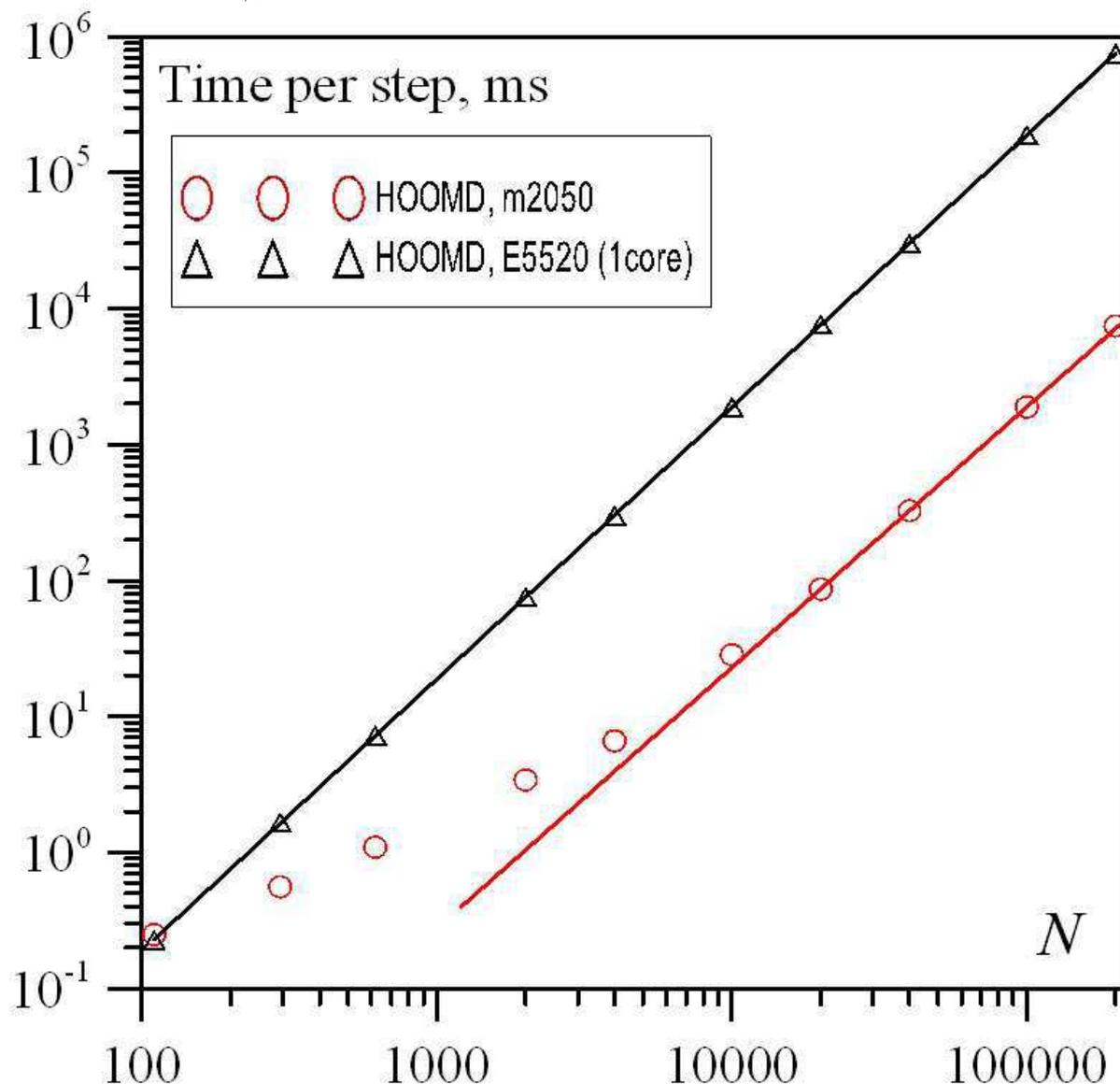


Рис.1

Выбранный нами метод распараллеливания, как видно с рис.1, оказывается неэффективным для систем, в которых менее 5000 частиц. Это объясняется недогрузенностью карты для таких систем. В связи с этим были реализованы альтернативные версии программы, в которых несколько потоков вычисляют силу, действующую на одну частицу. Рассматривались только числа потоков, являющиеся степенями двойки, что позволило избежать необходимости организовывать взаимодействие между потоками которые принадлежат разным блокам. Написаны варианты программы, использующие два, четыре, восемь и шестнадцать потоков на одну частицу. На рис. 2 показаны графики зависимости времени выполнения одного шага молекулярной динамики от числа частиц в системе для каждой из версий. Экспериментально было установлено, какая версия программы, на каких значениях размеров системы даёт большее ускорение. Финальная программа в зависимости от размеров моделируемой системы использует наилучшую из реализованных версий. Достижимые ею ускорения в зависимости от числа частиц, а также ускорения для изначальной версии, которая использует один поток на одну частицу, показаны на рис. 3. Как видно из графиков использование нескольких потоков на одну частицу позволило существенно повысить быстродействие программы (в 4 раза для наименьшего числа частиц).

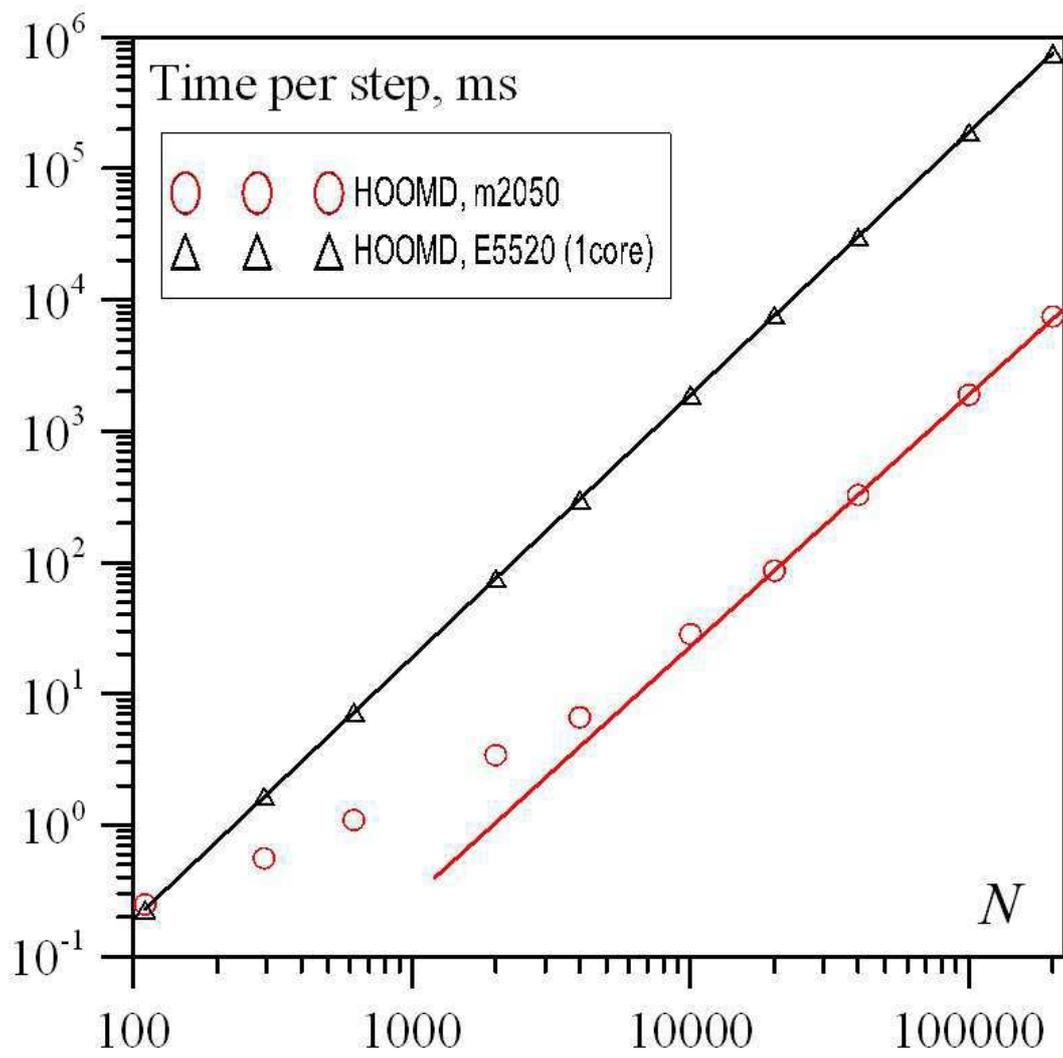


Рис. 2

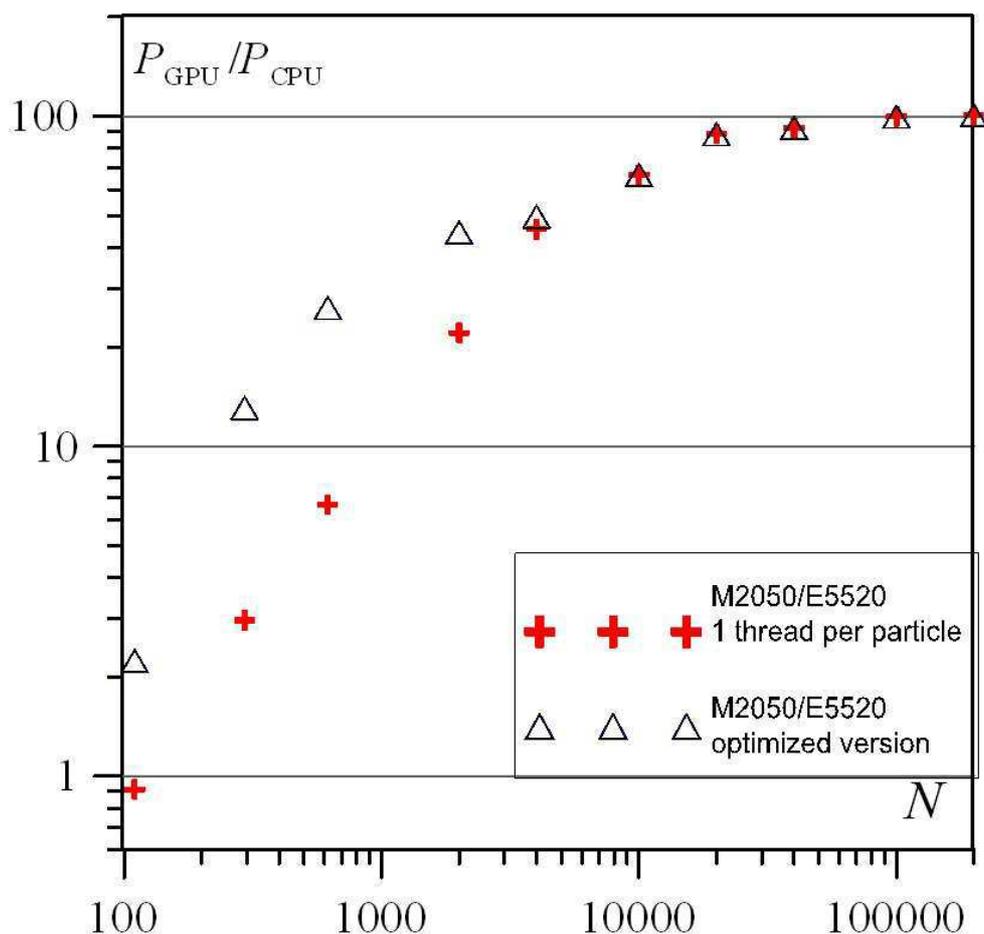


Рис. 3

Также из рис.3 видно, что максимальное ускорение, достигаемое на ГПУ Tesla M2050, по сравнению с одним ядром CPU (Xeon E5520) составляет 100 раз. Это в свою очередь позволило в 100 раз увеличить размеры моделируемой физической системы.

С помощью полученной программы нами исследовалась динамика электронов в наноразмерных кластерах натрия, ионизованных фемтосекундным лазерным импульсом. Были рассчитаны молекулярно-динамические траектории для набора микросостояний при каждом из выбранных размеров кластеров. Вычисление траекторий для различных микросостояний происходило параллельно на отдельном ускорителе. Записанные на диск траектории движения частиц использовались для вычисления автокоррелятора тока с последующим усреднением. На рис.4 показан результат для Фурье образов автокорреляторов тока при различном размере кластера.

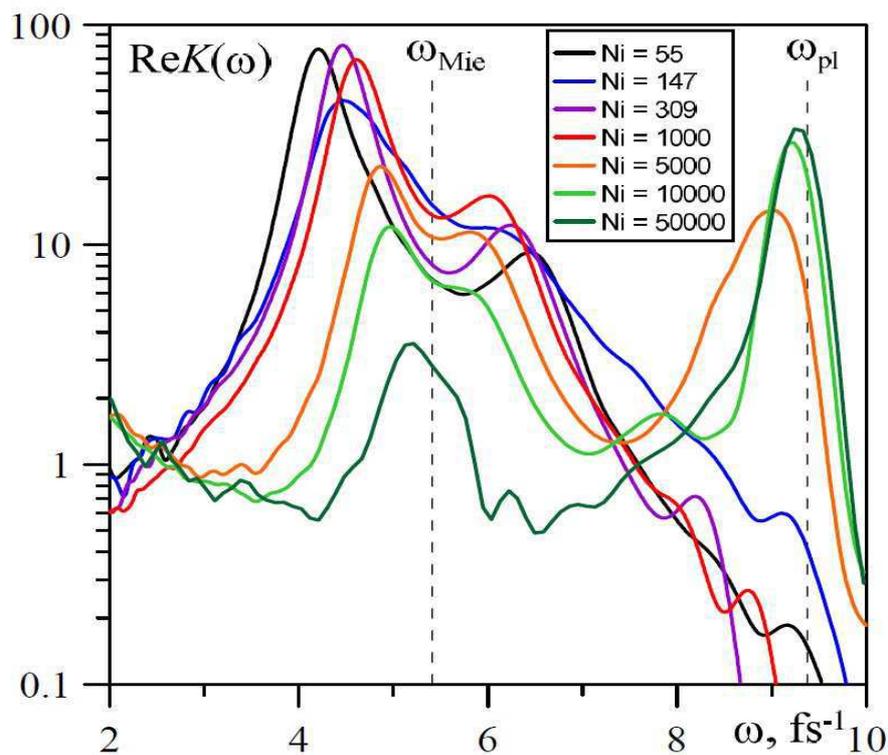


Рис. 4

Основной целью работы было исследование влияния размерных эффектов на частоту и затухание электронных колебаний. Прежние расчеты на центральных процессорах удавалось провести только для кластеров из не более чем 2000 атомов. При этом главные моды колебаний, соответствующие максимумам на Фурье образе коррелятора тока (рис. 4), существенно отличались от теоретических значений.

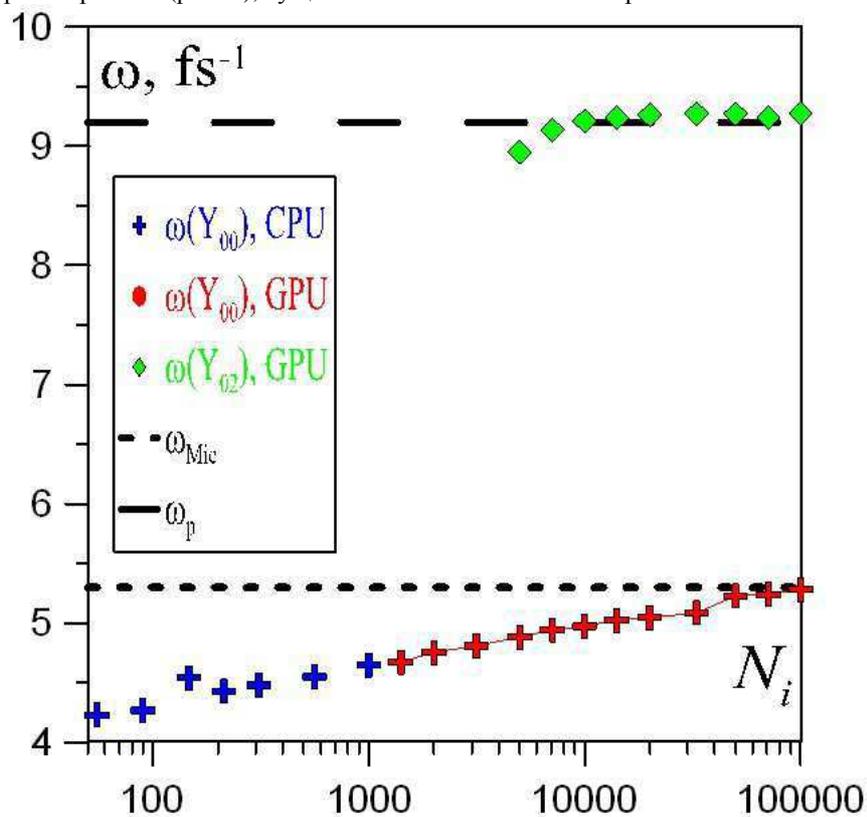


Рис. 5

Синими крестиками на рис. 5 отмечены точки, которые были получены на центральных процессорах, красные крестики и зелёные кружки – данные, полученные на ускорителях. Пунктирными линиями показаны частота Ми и плазменная частота, посчитанные по формулам для пространственно однородной плазмы. Как видно из рис. 5, для больших размеров кластеров полученные частоты близки к теоретическим значениям. Таким образом, применение ускорителей позволило существенно увеличить число частиц, проследить плавный переход от малых к более крупным кластерам и воспроизвести предельное значение для однородной плазмы. Также были исследованы ленгмюровские плазменные колебания, не наблюдавшиеся в малых кластерах при расчетах на центральных процессорах.

Написанная параллельная реализация потенциала электрон-ионного взаимодействия может быть полезна не только для изучения динамики электронов в ионизованных кластерах, но и для исследования других физических задач. Примером такой задачи служит изучение флуктуаций давления в неидеальной плазме [8]

#### ЛИТЕРАТУРА:

1. Морозов И.В., Норман Г.Э. Столкновения и плазменные волны в неидеальной плазме // ЖЭТФ. 2005. Т. 127. №2. С. 412–430.
2. M. Belkacem, F. Megi, P.-G. Reinhard, E. Suraud, G. Zwicknagel. Coulomb explosion of simple metal clusters in intense laser fields // *Phys. Rev. A*, 73, 051201R (2006).
3. T. Raitza, H. Reinholz, G. Ropke, I. Morozov, E. Suraud. Laser excited expanding small clusters: Single time distribution functions // *Contributions to Plasma Physics*. 2009. V. 49. P. 496-506.
4. Фомин Э.С. Сравнение метода Верлет таблицы и метода связанных ячеек для последовательной, векторизованной и многопоточной реализаций // *Вычислительные методы и программирование*. 2010. Т. 11. С. 299-305.
5. W.M. Brown, P. Wang, S.J. Plimpton, A.N. Tharrington. Implementing molecular dynamics on hybrid high performance computers – short range forces // *J. Comput. Phys*. 1995. V. 117. P. 1.
6. Morozov I.V., Kazennov A.M., Bystryi R.G., Norman G.E., Pisarev V.V., Stegailov V.V. Molecular dynamics simulations of the relaxation processes in the condensed matter on GPUs // *Comput. Phys. Commun*. 2011. V. 182. P. 1974–1978.
7. Anderson J.A., Lorenz C.D., Travesset A. General purpose molecular dynamics simulations fully implemented on graphics processing units // *J. Comput. Phys*. 2008. V. 227. P. 5342.
8. Lankin A.V., Norman G.E., Saitov I.M. Pressure Fluctuations in Nonideal Plasma // *Contributions to Plasma Physics*. 2010. V. 50. N. 1. P. 99.