

КРУПНОМАСШТАБНОЕ АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛАЗЕРНОЙ АБЛЯЦИИ АЛЮМИНИЯ НА СУПЕРКОМПЬЮТЕРЕ «ЛОМОНОСОВ»

В.В. Писарев^{1,2}, С.В. Стариков^{1,2}, В.В. Стегайлов^{1,2}

¹ Объединенный институт высоких температур РАН, Москва

² Московский физико-технический институт (государственный университет), Москва

В работе представлены результаты молекулярно-динамического (МД) моделирования лазерной абляции металла — модификации поверхности с выносом вещества за счет нагрева мощным лазерным импульсом. Использование рекордных расчетов на суперкомпьютере «Ломоносов» позволило провести МД моделирование с 1,5 млрд. атомов и выйти на уровень 3-х мерных атомистических моделей наноструктурирования поверхностей субпикосекундными лазерными импульсами.

МД моделирование представляет собой численное интегрирование уравнений движения для системы атомов с выбранным потенциалом взаимодействия:

$$m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} = -\frac{\partial U(\{\vec{r}_k\})}{\partial \vec{r}_i} + \vec{F}_{ext}, \quad (1)$$

где m_i , r_i , v_i — масса, вектор координаты и скорости i -й частицы, соответственно, $U(\{r_k\})$ — потенциал межчастичного взаимодействия, F_{ext} — сила, отражающее возможное внешнее воздействие на систему. Потенциал взаимодействия может быть как парным, так и многочастичным, и его выбор определяет все динамические свойства моделируемой системы. Благодаря тому, что при МД моделировании вещество рассматривается на атомарном уровне и не вводится никаких предположений о свойствах материала кроме выбора потенциала, этот метод оказывается мощным инструментом исследования наноразмерных систем и быстротекущих процессов. Подробнее особенности метода МД описаны, например, в [1]

Основной расчёт в данной работе представлял собой МД моделирование лазерной абляции и наноструктурирования поверхности алюминия с учётом большой площади открытой поверхности. В последнее время стало появляться значительное число экспериментальных работ, акцентирующих внимание на объёмном характере процесса модификации поверхности при лазерном облучении. Требования наномасштабного структурирования поверхности обуславливают недостаточность континуального гидродинамического описания подобных процессов. Однако расчеты с учетом атомной структуры чрезвычайно требовательны к суперкомпьютерным ресурсам. Основную вычислительную сложность представляет вычисление сил (производной потенциала) в (1). В типичном случае короткодействующего потенциала сила, действующая на атом, зависит от положения ~100 ближайших соседей, а моделирование пространственно неоднородных воздействий требует, по меньшей мере, нескольких сотен тысяч атомов в расчете и десятков тысяч шагов численного интегрирования. Для ускорения расчетов обычно используется распараллеливание с декомпозицией по пространству. Такой подход позволяет проводить МД моделирование для систем, включающих до нескольких миллиардов атомов на временах ~1 мкс [2].

В квазиодномерном случае (атомистическое моделирование с периодическими граничными условиями), когда только направление вглубь металла имеет микронный размер, расчёты соответствуют случаю однородной ("пространственно бесконечной" по поверхности) засветки образца. В реальной ситуации интенсивность и энерговыход лазерного пятна на поверхности имеет форму, близкую к распределению Гаусса. Модификация поверхности обусловлена как распространением волны сжатия и фронта плавления вглубь вещества, так и распространением волн (температуры, давления, плотности и др.) вдоль облучаемой поверхности. Кроме того, как показано в недавних работах (см., например, [3]), при небольших энерговыкладах модификация поверхности может происходить не только за счёт лазерной абляции, но и за счёт плавления и расплескивания металла на поверхности. Все эти эффекты могли быть учтены только в трехмерной модели, где все три размера имеют микронный масштаб.

МД моделирование проводилось с использованием свободного пакета LAMMPS [4], который оптимизирован для массивно-параллельных расчетов и позволяет использовать ускорение вычисления сил на GPU через CUDA и OpenCL [5]. Для моделирования алюминия использовался короткодействующий многочастичный потенциал погруженного атома (EAM) [6].

Ряд тестовых расчетов показывает масштабируемость задачи вплоть до 16000 процессоров на x86 части кластера «Ломоносов» с эффективностью выше 70% в режиме «weak scaling», т.е. при приблизительно одинаковом числе атомов, приходящихся для расчета на одном узле (рис. 1а). GPU-ускорение на Nvidia Tesla дает приблизительно семикратный прирост производительности в расчете на один узел (рис. 1б), масштабируемость задачи удалось проверить до 640 GPU-узлов (~80% GPU части кластера).

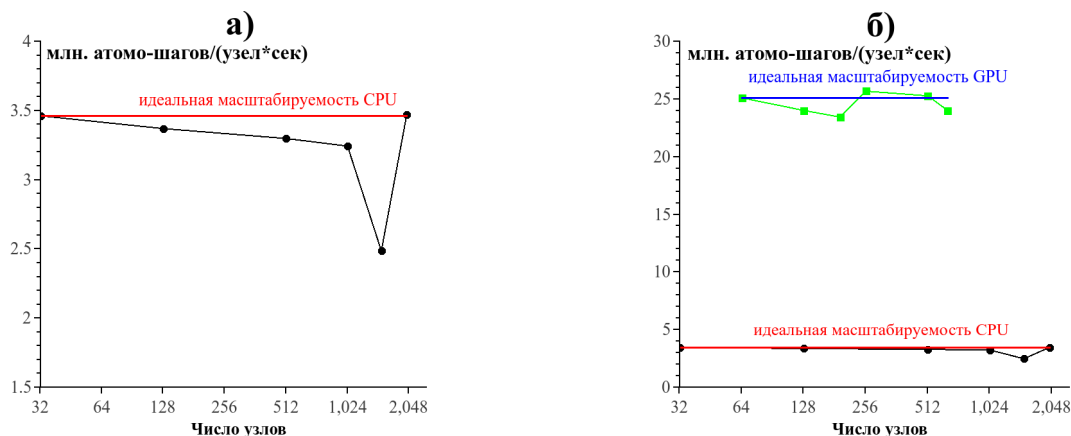


Рис. 1. а) Масштабируемость МД моделирования лазерной абляции на x86-узлах кластера «Ломоносов». x86-узел содержит 2 4-ядерных процессора Intel Xeon X5570 Nehalem. б) Масштабируемость МД моделирования лазерной абляции на GPU- и x86-узлах кластера «Ломоносов». x86-узел содержит 2 4-ядерных процессора Intel Xeon X5570 Nehalem, GPU-узел содержит 2 ускорителя Nvidia X2070 и 2 4-ядерных процессора Intel Xeon X5570 Nehalem.

Особенностью МД расчетов на GPU ускорителях является зависимость производительности узла от загрузки. Так, для проведенных расчетов оптимальным оказалось проведение расчетов при загрузке > 1 млн. атомов/узел (рис. 2).

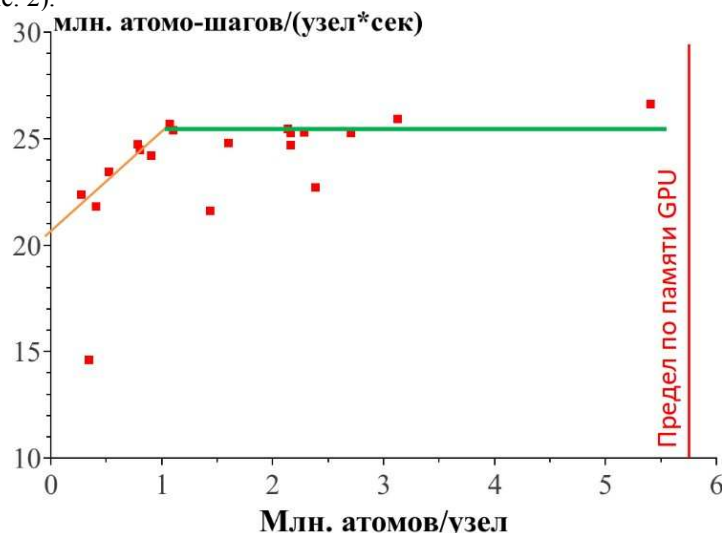


Рис. 2. Производительность МД моделирования на GPU узлах в зависимости от загрузки одного узла.

В оптимальном режиме GPU при загрузке 2 млн. атомов/узел скорость расчета составила ~ 100 мсек/шаг моделирования, что позволяет при длительности шага моделирования 1 фс промоделировать процесс длительностью ~ 1 нс за сутки. Таким образом, проведенные расчеты показывают возможность полномасштабного атомистического моделирования процессов на микронных пространственных и наносекундных временных масштабах на современных вычислительных системах.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 13-01-12070-офи_м.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Д. Френкель, Б. Смит. "Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем" М.: Научный мир. 2013. 578 С.
2. J. Diemand et al. "Large scale molecular dynamics simulations of homogeneous nucleation" // J. Chem. Phys. 2013. V. 139. P. 074309.
3. G.E. Norman et al "Nanomodification of gold surface by picosecond soft x-ray laser pulse" // J. Appl. Phys. 2012. V. 112. P. 013104.
4. S.J. Plimpton "Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics" // J. Comp. Phys. 1995. V. 117. Pp. 1-19.
5. W.M. Brown et al. "Implementing Molecular Dynamics on Hybrid High Performance Computers - Short Range Forces" // Comp. Phys. Comm. 2011. V. 182. Pp. 898-911.

6. X.-Y. Liu et al. "Atomistic studies of segregation and diffusion in Al-Cu grain boundaries" // Appl. Phys. Lett. 1998. V. 72. P. 1578.