

В.В. Писарев, к.ф.-м.н., с.н.с. ОИВТ РАН  
Г.С. Смирнов, аспирант МФТИ, м.н.с. ОИВТ РАН  
С.В.Стариков, к.ф.-м.н., зав. лаб. ОИВТ РАН  
В.В.Стегайлов, д.ф.-м.н., зав. отд. ОИВТ РАН

"Расчеты лазерной абляции и другие крупномасштабные атомистические модели: максимизация параллельной эффективности на кластере «Ломоносов»"

Интенсивное совершенствование на протяжении последних десятилетий теоретических и вычислительных методов описания физико-химических процессов на атомистическом уровне обеспечивает фундаментальную методическую основу средств анализа и предсказания, необходимых для наук о материалах, физики, химии и других науках. Одновременный непрерывный взрывной рост производительности компьютерной техники предоставляет уникальные возможности по атомистическому моделированию на беспрецедентном ранее уровне точности, позволяющем формулировать и решать задачи инженерно-технологического уровня в различных областях.

Текущий этап развития технологий параллельных суперкомпьютерных вычислений знаменует переход к новой эре вычислительных методов в науке и технике. Важнейшей особенностью новых подходов является использование массового параллелизма и вычислительных полей, содержащих  $10^5$  –  $10^6$  элементов, позволяющих решать конкретные задачи с экзафлопсным уровнем вычислительной сложности. Анализ мирового опыта показывает, что на квантовые и классические атомистические расчеты в настоящее время выделяется примерно 40% от суммарного объема вычислительных ресурсов лидирующих массивно-параллельных систем.

Поэтому задачи определения проблемных вопросов, препятствующих достижению высокой параллельной эффективности расчетов атомистических моделей, являются чрезвычайно актуальными. К таким вопросам относятся вопросы оптимизации параллельных алгоритмов с учетом топологии интерконнекта, балансировки загрузки вычислительных элементов, параллельного ввода-вывода, обработки данных «на лету», адаптации к новым типам ускорителей.

В докладе будут кратко описаны основные методы распараллеливания классических и квантовых алгоритмов атомистического моделирования и принципы их реализации в современных программных пакетах. Будут приведены результаты нескольких бенчмарков на кластере "Ломоносов".

В докладе будут представлены результаты крупномасштабного моделирования лазерной абляции – процесса, модели которого остро требуют привлечения максимальных вычислительных ресурсов.

В последнее время стало появляться значительное число экспериментальных работ, акцентирующих внимание на объёмном характере процесса модификации поверхности при лазерном импульсном облучении. Однако расчёты, проводимые разными авторами, остаются или полностью одномерными (гидродинамическое моделирование) или квазиодномерными (атомистическое моделирование в небольших системах). В настоящей работе выполнено крупномасштабное атомистическое моделирование плавления и абляции алюминия при

облучении ультракоротким лазерным импульсом. Выявлены различные механизмы лазерной абляции и модификации поверхности. Проведено сравнение результатов, полученных при моделировании для разных размеров систем. Установлено, что при небольших энерговкладах модификация поверхности происходит вследствие плавления, вызванного лазерным излучением, и распространения поверхностных волн.

Для данных расчетов использовалась модель 1.5 млрд. атомов (размером 0.25x0.25x0.4 мкм). Расчеты проводились пакетом LAMMPS с использованием графических ускорителей NVidia Tesla. Всего было задействовано до 640 вычислительных узлов (8 ядер Intel Xeon + 2xNVidia Tesla). В докладе будет приведена параллельная масштабируемость подобных моделей и указаны технические проблемы, препятствующие ее повышению.

Ссылки по теме работы:

1. Янилкин А.В., Жияев П.А., Куксин А.Ю., Норман Г.Э., Писарев В.В., Стегайлов В.В. Применение суперкомпьютеров для молекулярно-динамического моделирования процессов в конденсированных средах // Вычислительные методы и программирование. 2010. Т. 11. С. 111-116. URL: [http://num-meth.srcc.msu.ru/zhurnal/tom\\_2010/v11r113.html](http://num-meth.srcc.msu.ru/zhurnal/tom_2010/v11r113.html)
2. Жияев П.А., Стегайлов В.В. Ab initio молекулярная динамика: перспективы использования многопроцессорных и гибридных суперЭВМ // Вычислительные методы и программирование. 2012. Т. 13. С. 37-45. URL: [http://num-meth.srcc.msu.ru/zhurnal/tom\\_2012/v13r206.html](http://num-meth.srcc.msu.ru/zhurnal/tom_2012/v13r206.html)
3. Стегайлов В.В., Норман Г.Э. Проблемы развития суперкомпьютерной отрасли в России: взгляд пользователя высокопроизводительных систем // Программные системы: теория и приложения. 2014. Т. 5. № 1(19). С. 111–152. URL: [http://psta.psir.ru/read/psta2014\\_1\\_111-152.pdf](http://psta.psir.ru/read/psta2014_1_111-152.pdf)
4. Куксин А.Ю., Ланкин А.В., Морозов И.В., Норман Г.Э., Орехов Н.Д., Писарев В.В., Смирнов Г.С., Стариков С.В., Стегайлов В.В., Тимофеев А.В., ЗАЧЕМ и КАКИЕ нужны суперкомпьютеры эксафлопсного класса? Предсказательное моделирование свойств и многомасштабных процессов в материаловедении. // Программные системы: теория и приложения. 2014. (в печати)
5. Норман Г.Э., Стариков С.В., Стегайлов В.В. Атомистическое моделирование лазерной абляции золота: эффект релаксации давления // ЖЭТФ. 2012. Т. 141. N. 5. С. 910-918. <http://dx.doi.org/10.1134/S1063776112040115>
6. Norman G.E., Starikov S.V., Stegailov V.V., Fortov V.E. et al. Nanomodification of gold surface by picosecond soft x-ray laser pulse // J. Appl. Phys. 2012. V. 112. P. 013104. URL: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4731752>
7. Starikov S.V., Faenov A.Ya., Pikuz T.A., Skobelev I.Yu., Fortov V.E. Soft picosecond X-ray laser nanomodification of gold and aluminum surfaces // Appl. Phys. B. 2014. URL: <http://dx.doi.org/10.1007/s00340-014-5789-y>