

**Оптимизация моделирование систем заряженных частиц на графических ускорителях  
методом молекулярной динамики**

*Я.С. Лавриненко<sup>1,2</sup>, И.В. Морозов<sup>2,1</sup>*

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Объединённый институт высоких температур РАН

Метод молекулярной динамики (МД) широко используется для моделирования систем заряженных частиц и предъявляет высокие требования к вычислительным системам. Поэтому для эффективного решения задач МД моделирования зачастую используют современные суперкомпьютеры с параллельной архитектурой.

В отличие от короткодействующих потенциалов для нейтральных атомов и молекул, дальнедействующий кулоновский потенциал усложняет или делает невозможным использования стандартных методов распараллеливания, таких как декомпозиция по пространству, что усложняет написание программ для параллельных вычислительных систем. Существует ряд модификаций классического МД алгоритма (например, Particle-Particle-Particle-Mesh – PPPM), которые ускоряют расчет взаимодействий между частицами и повышают эффективность распараллеливания. Недостатком подобных алгоритмов является уменьшение точности результатов и низкая эффективность для наноразмерных систем со сравнительно малым числом частиц в системе ( $10^2 - 10^4$ ).

Альтернативой использования модификаций алгоритма МД является применение графических ускорителей (GPU) при сохранении точного расчета взаимодействий. В последнее время GPU широко используются для неграфических вычислений, но их эффективность меняется в зависимости от задачи. МД моделирование систем заряженных частиц может быть эффективно распараллелено благодаря применению декомпозиции по частицам.

Целью данной работы являлось использование графических ускорителей для моделирования уравнения состояния неидеальной электрон-ионной плазмы и диффузии в ионном кристалле нитрида урана.

В системах с малым количеством частиц эффективность GPU падает. Это связано с высокой латентностью памяти ускорителя и недостаточным количеством потоков команд (threads), и, соответственно, арифметических операций для компенсации задержек при обращении к памяти. Решением этой проблемы является выделение нескольких потоков для расчета сил, действующих на каждую частицу. В отличии от стандартного подхода (одна частица – один поток) при малых количествах частиц мы выбирает оптимальное количество

потоков для покрытия латентности памяти и избегаем простоя графического ускорителя.

Использование графических ускорителей позволило увеличить скорость моделирования в десятки раз, что, в свою очередь, дало возможность проводить моделирование для систем с большим количеством частиц и получить качественно новые результаты. В работе приведены исследования производительности полученных алгоритмов в зависимости от размера моделируемой системы (рис. 1), а также результаты моделирования равновесной неидеальной плазмы электронов и ионов и ионного кристалла нитрида урана. Приводится сравнение со свободно распространяемым пакетом МД моделирования LAMMPS.

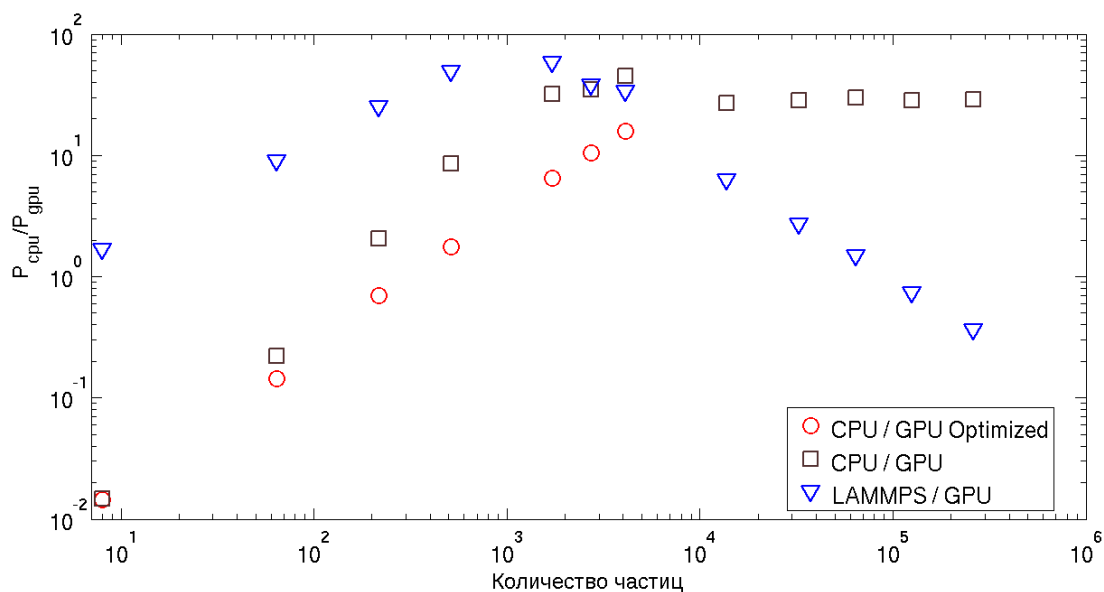


Рис. 1. Ускорение на графическом ускорителе Nvidia Tesla C2050 по сравнению с одним ядром центрального процессора Intel Xeon X5670: кружки – оригинальная программа без оптимизации числа потоков, квадраты – оригинальная программа с оптимизацией числа потоков для малых размеров системы, треугольники – аналогичные расчеты с помощью пакета LAMMPS.