

Использование графических процессоров в молекулярно-динамическом моделировании

Семенов С. А.

Московский авиационный институт (национальный исследовательский институт),

МАИ, Волоколамское шоссе, 4, Москва, А-80, ГСП-3, 125993, Россия

e-mail: stdx@inbox.ru

Аннотация

Первоначально графические процессоры создавались для выполнения графических эффектов и обработки визуальных сцен. Сейчас производители предоставляют средства разработчиков для выполнения задач общего назначения. В этой статье рассматривается возможность использования вычислительной мощности видеокарт в молекулярной динамике. Показано, что использование графических процессоров сокращает время моделирования с нескольких дней до нескольких минут, при этом потребляя меньшую мощность.

Ключевые слова

графические процессоры, видеокарты nVidia, молекулярно-динамическое моделирование, наноматериалы, фуллерены

В ноябре обновился список «Топ 500». Закономерным стало то, что первое место занимает вычислительная машина на основе видеопроцессоров nVidia. Возможность компьютеров поддерживать экспоненциальный рост вычислительной способности обусловлен уменьшением размера отдельных компонент, высоким уровнем интеграции, быстрыми исполнениями инструкций, возможностью аппаратного кэширования памяти, множеством конвейеров, созданием расписания инструкций. Построение таких машин на основе доступных существующих центральных процессора (CPU) является дорогостоящим решением. Чтобы уменьшить потребляемую мощность и уменьшить стоимость необходимо реализовывать множество ядер на одном кристалле. В качестве подобного решения на сегодняшний момент можно рассматривать графические процессоры (GPU). Последние версии GPU полностью программируемы и имеют тысячи потоков вычислений. Они могут

эффективно применяться во множестве инженерных, физических, химических, биологических, математических задач. Одной из таких задач в статье рассматривается молекулярно-динамическое моделирование углеродных наноструктур.

Графические процессоры стали составной частью практически всех современных компьютеров. Их стоимость постоянно снижается, а функциональность увеличивается. Это становится причиной использования графических процессоров в качестве сопроцессоров к центральному, а в некоторых графических задачах и в качестве основных вычислителей. Этот шаг приводит к новому шагу развития суперкомпьютеров, который можно наблюдать на примере списка «Топ 500».

Возможности оптимизированных алгоритмов дают расчеты материалов большого количества систем в протяженных интервалах моделирования. Фирмами-производителями видеопроцессоров предпринимаются попытки создать аппаратные ресурсы, которые оперируют векторной арифметикой и параллельными нитями исполнения. Но существующие математические задачи накладывают свои ограничения на одновременное выполнение расчетов. В статье рассматриваются требования и возможности разработки GPU приложений, масштабируемости молекулярно-динамического моделирования для углеродных структур. Масштабируемость - ключевой параметр для разработки высокопроизводительного параллельного алгоритма. В будущем алгоритмы будут модернизироваться, так как на данном этапе развития программное обеспечение для работы с GPU несовершенно.

Архитектура CUDA (compute unified device architecture) [1], разработана фирмой nVidia, одной из первой среди подобного класса программного обеспечения дает доступ разработчикам к ресурсам видеокарты. CUDA оперирует на высоком уровне параллельной программой. Создаются независимые потоки вычисления (thread), которые соответствуют аппаратному обеспечению.

Известно достаточное количество программ молекулярно-динамического моделирования LAMPS[2], NanoHive[3], GROMACS[4], NAMD[5]. В некоторых из них используется технология CUDA. Они разработаны под отдельные специфические задачи.

В задаче молекулярной динамики интуитивным распределением ресурсов является назначение одного вычислительного потока на один атом системы. Программа строится из последовательных запусков параллельных вычислений. Желательно минимизировать подготовку данных для этих запусков. У всех потоков есть общая память, она может стать узким местом в тех случаях, когда разным потокам требуется один и тот же сегмент. Такие ситуации следует избегать известными методами одновременного доступа к памяти.

Обычные задачи молекулярно-динамического моделирования предполагают вычисление сил, действующих на атом или молекулу, интегрирование уравнений движения, измерение свойств материалов. Наибольшее время занимают вычисления действующих сил. В случае систем с большим количеством частиц рассматривают действие сил в коротком диапазоне ближайших соседей. Для эффективного определения силы необходимо быстро определять соседние атомы. Это можно выполнить несколькими методами [6]. Например, использовать ячеистую модель движения, в которой все пространство разбивается на ячейки и каждый атом попадает в определенную ячейку. Это уменьшает количество вычислений для N атомов с $O(N^2)$ до $O(N)$.

В качестве простого примера углеродной наносистемы рассматриваются два атома углерода. В этом случае задача имеет аналитическое решение. В связи углерод-углерод атомы находятся в состоянии sp^2 гибридизации, формула для связи $-C=C-$. Расстояние между атомами $b=1.4 \text{ \AA}$

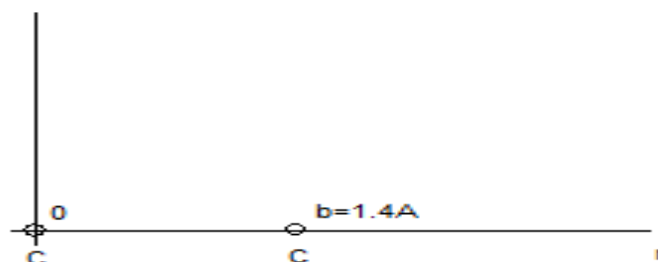


Рисунок 1. Выбор системы координат для решения уравнения движения двух атомов.

Система координат (рис.1) выбирается таким образом, чтобы один атом был неподвижен, а расстояние до второго атома – r . Система двух связанных частиц имеет 5 степеней свободы, но повороты в пространстве не влияют на взаимное расположение атомов. В таком случае модуль вектора скорости системы частиц сохраняется, так как система консервативна, а вектор скорости имеет случайное направление, обусловленное тепловым движением. Выбор подвижной системы координат не ограничивает общность решения.

В таком случае потенциал взаимодействия запишется для двух частиц [7]:

$$U_{CC} = K(r_{ij} - b)^2, K = 236 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^2}, b=1.4 \text{ \AA},$$

Уравнения движения:

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = -\frac{dU}{dr_i},$$

$$\frac{dr_i}{dt} = v_i \quad (1)$$

Начальные условия:

$$r(0) = b, \quad r'(0) = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}$$

Отсюда решение имеет вид:

$$r = \sqrt{\frac{k_B T}{K}} \sin \omega t + b, \quad (2)$$

где постоянная Больцмана $k = 1.38054 \cdot 10^{-23} \frac{\text{Дж}}{\text{К}}$, масса углерода $m_C = 1.993 \cdot 10^{-26} \text{ кг}$,

температура $T=300\text{К}$, $\omega = \sqrt{\frac{2K}{m}}$, время $t = n\tau$, n – номер цикла, τ – шаг по времени.

Исследуя колебательную систему (2) на устойчивость [8] и используя рекомендации [9], шаг по времени выбирается:

$$\tau < \frac{0.5}{\omega} = \frac{0.5}{\sqrt{\frac{2 \cdot 236}{1.993 \cdot 10^{-26}}}} \quad (3)$$

1 фемтосекунда. Выбор шага по времени диктуется не только условием устойчивости, но и точностью вычисления колебательного движения. Для оценки точности приближенного решения необходимо провести анализ аппроксимации [8]. Выбранный шаг 1 фемтосекунда удовлетворяет точности аппроксимации.

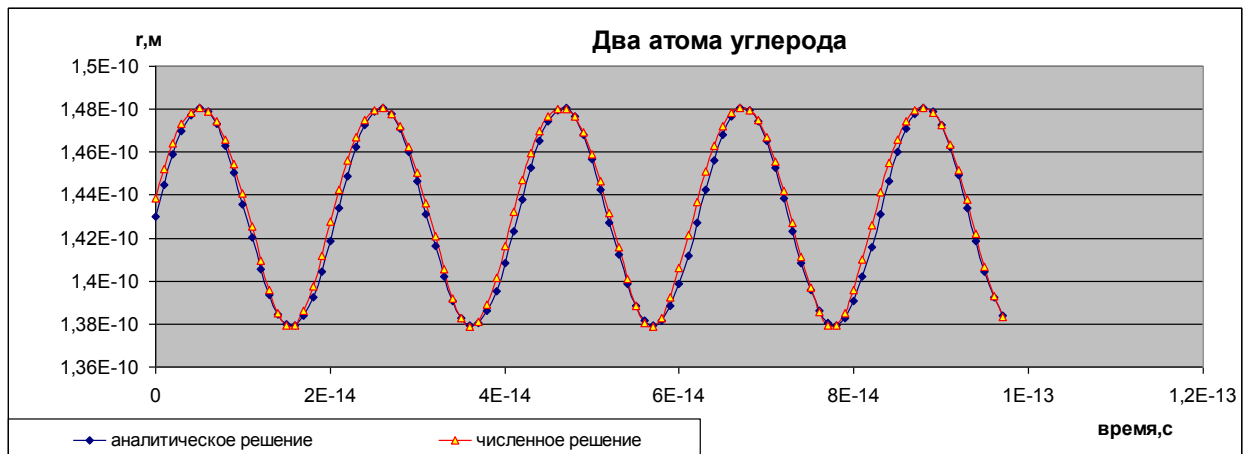


Рисунок 2. Колебание расстояния между двумя атомами углерода.

На рисунке 2 видно совпадение аналитического решения с численным решением системы двух атомов с использованием потенциала Бреннера. Здесь можно видеть более общее свойство, что простое аналитическое решение совпало не только с численным решением с использованием потенциала двух атомов, но и с решением с использованием более сложного потенциала.

Для численного решения использовались данные, опубликованные в статье Бреннера [10], поэтому заложенные константы совпадают численными результатами. Но энергия когезии [11,12], которая названа Бреннером энергией атомизации, дается выражением:

$$\Delta H_{atom} = E_{system} - \sum_{i=1}^N E_i \quad (4)$$

не определяется потенциалом. Если атомы удалены на расстояние большее расстояния усечения, то потенциал Бреннера будет давать 0. Т.е энергия атомизации полностью состоит из энергии связей. Поэтому нужно использовать для процедуры подбора констант (fitting procedure) потенциала либо значение длины связи, либо значение энергии атомизации.

Выводы

Общее ускорение оптимизированных алгоритмов под видеокарту NVidia Quadro 4000 составило примерно 300 раз по сравнению с Core 2 Duo 2.6ГГц:

- графический процессор дал ускорение в 10 раз,
- ячеистая модель движения - в 10 раз,
- разделение потенциала взаимодействия на отдельные части - в 3 раза.

На аппаратном обеспечении Intel Core i3, 2.93ГГц, 4 ядра, 4Гб RAM, nVidia GeForce GTX 480 для вычисления потенциала затрачивается 185 микросекунд на каждом шаге. При продолжительном расчете необходимо 3 минуты компьютерного времени для молекулярно-динамического моделирования 1 наносекунды «жизни» углеродной наноструктуры.

Для моделирования углеродных систем с точки зрения ближнего взаимодействия атомов эффективно использовать потенциал Бреннера.

Для быстрого выполнения расчета уравнений движения нужно использовать алгоритмы параллельных вычислений.

В целом, полученные результаты свидетельствуют о высокой эффективности использования параллельных алгоритмов на графических процессорах в задачах молекулярно-динамического моделирования наноструктур.

Библиографический список

1. NVIDIA CUDA programming guide, version 4.2, <http://www.nvidia.com>, 2012.
2. S. Plimpton, Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics, J. Comp. Phys. 117 (1995) 1–19.
3. NanoHive <http://www.nanohive-1.org/>

4. H.J.C. Berendsen, D. van der Spoel, R. van Drunen, GROMACS: a message-passing parallel molecular dynamics implementation, *Comp. Phys. Commun.* 91 (1995) 43–56.
5. J.C. Phillips, R. Braun, W. Wang, J. Gumbart, E. Tajkhorshid, E. Villa, C. Chipot, R.D. Skeel, L. Kale', K. Schulten, Scalable molecular dynamics with NAMD, *J. Comp. Chem.* 26 (2005) 1781–1802.
6. Michael P. Allen. *Introduction to Molecular Dynamics Simulation Computational Soft Matter: From Synthetic Polymers to Proteins, Lecture Notes*, John von Neumann Institute for Computing, NIC Series, Vol. 23, pp. 1-28, 2004.
7. Kovalev V.L., Yakunchikov A.N. Fuhuo L. Tangential momentum and thermal accommodation coefficients for hydrogen molecules on graphite surface. *Acta Astronautica*, 2011, v. 69 (7-8), pp. 744-746.
8. В.Е. Зализняк. *Основы вычислительной физики. Часть 2. Введение в методы частиц.* – Москва – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика»; Институт компьютерных исследований, 2006. – 156 с.
9. Kai Nordlund, “Basics of md, initialization, time step choice, speedup methods,” <http://beam.acclab.helsinki.fi/~knordlun/atomistiset/>.
10. Brenner D. W., Shenderova O. A., Harrison J.A “A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons” – *J. Phys.: Condens. Matter.* 2002. V. 14. P. 783. – 2002.
11. Yin M.T., Cohen M.L. Will Diamond Transform under Megabar Pressures? // *Physical Review Letters.* 1983. Vol. 50. №25. P.2006
12. Yin M.T., Cohen M.L. Structural theory of graphite and graphitic silicon. // *Physical Review B.* 1983. Vol. 29. №12. P.6996