

## **РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЕ АЛГОРИТМА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ПОВРЕЖДЕНИЙ В КРИСТАЛЛЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИНТЕРФЕЙСА MPI**

**О.М. Кондратьева, В.И. Белько**  
Беларусь, г. Минск

Эффективность процессов решения больших задач зависит от многих факторов, в частности от уровня развития языков программирования [1]. Цель данной работы – адаптировать последовательную программу, используя интерфейс MPI, для выполнения на конкретной параллельной системе и проанализировать эффективность выбранной технологии.

Рассмотрим компьютерное моделирование методом молекулярной динамики [2], которое является одним из мощных и универсальных методов исследования в современной физике и химии и относится к классу «больших» и в определенной мере «хорошо распараллеливаемых» задач.

В молекулярной динамике строится численная модель молекулярной системы (жидкое или газообразное физическое тело). Атомы заменяются «идеальными атомами», то есть материальными точками, которые характеризуются положением в пространстве и скоростью, и взаимодействуют друг с другом в соответствии с межатомным потенциалом. Потенциал позволяет рассчитать силы, действующие на каждый атом со стороны других атомов (как правило, не всех, а находящихся в пределах радиуса взаимодействия). Траектория движения каждого атома определяется законом Ньютона и может быть найдена как результат интегрирования дифференциального уравнения второго порядка. Таким образом, задав начальные положения и скорости всех атомов, мы однозначно определяем динамику всей системы.

Рассмотрим алгоритм молекулярной динамики. Задаем начальные положения и скорости  $N$  материальных точек, располагая их равномерно в «ячейке» (прямоугольный параллелепипед). Вводим периодические граничные условия: атом, вылетающий через грань ячейки, снова влетает в нее через противоположную грань и продолжает движение с той же скоростью. Противоположные грани отождествляются. Хотя мы имеем дело по сути с трехмерным тором, считается, что таким образом моделируется все трехмерное пространство (бесконечная сплошная среда). Начальные скорости точек задаются случайно, при этом они масштабируются таким образом, чтобы система имела заданную температуру и нулевой суммарный импульс.

(1) Вычисляем силу, действующую в данный момент на каждый атом. Эта сила однозначно определяется координатами всех других атомов.

(2) Вычисляем положения и скорости всех атомов в следующий момент времени, по истечении 1 «временного шага». Для этого выполняем один шаг в численном алгоритме решения  $N$  уравнений Ньютона.

Этапы (1) и (2) повторяются циклически до тех пор, пока система не достигнет «равновесия», т.е. Однородного состояния с малыми градиентами макроскопических параметров (температура, давление, плотность). Наибольших вычислительных ресурсов требует этап (1).

Для моделирования повреждений в кристалле в систему, достигшую равновесия, вносится возмущение. В нашем случае выбранный атом в центре ячейки получает импульс, то есть большую кинетическую энергию. Циклическое повторение этапов (1) и (2) продолжается до тех пор, пока система вновь не достигнет «равновесия».

Чем больше число  $N$  (количество атомов в ячейке), тем больше временных шагов (повторения этапов (1) и (2)) необходимо для достижения равновесия, и тем больше вычислительные затраты на один временной шаг. С другой стороны, чем больше  $N$ , тем лучше модельная система описывает реальный материал. Поэтому, никакой компьютер не является слишком мощным для такой задачи, и никакое число процессоров достаточно. Содержательные результаты для рассматриваемой задачи получаются при количестве атомов порядка  $10^4$ - $10^5$ .

Наиболее простой вариант декомпозиции – «по входным параметрам» – может быть достаточно эффективным для рассматриваемой задачи. При моделировании повреждений в кристалле расчет повторяется несколько раз с разным направлением исходного «импульса-возмущения», затем результаты усредняются. Аналогично поступают с начальными положениями и скоростями атомов. В работе исследуется именно этот вариант распараллеливания.

В литературе описан ряд подходов для более изощренного распараллеливания алгоритма молекулярной динамики. В работе [3], например, предлагаются три таких подхода: алгоритм дублирования данных (replicated data algorithm), алгоритм систолических циклов (systolic loop algorithm) и алгоритм параллельных связанных ячеек (parallel link-cells algorithm). Перечисленные подходы являются предметом дальнейшего исследования.

Итак, в работе рассматривается задача распараллеливания алгоритма молекулярной динамики с использованием декомпозиция «по входным параметрам». Исходным материалом являлся последовательный ал-

горитм молекулярной динамики, специализированный для описания ковалентных кристаллов (таких, как кремний и карбид кремния). Используя интерфейс MPI, разработана параллельная версия алгоритма. Приводятся результаты вычислительных экспериментов, проводимых для решения конкретной прикладной задачи: нахождение уровня повреждений при ионном облучении карбида кремния в зависимости от скорости набора дозы и температуры материала [4].

### Литература

1. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. – Санкт-Петербург – БХВ-Петербург, 2002.
2. Daan Frenkel and Berend Smit. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Application. – San Diego–London–Boston–New York–Sydney–Tokyo–Toronto, – AP, 1998.
3. W.Smith. Molecular dynamics on hypercube parallel computer. // Computer Physics Communications 62 (1991) 229-248.
4. Posselt M., Gao F., Weber W.J., Belko V.I. A comparative study of the structure and energetics of elementary defects in 3C- and 4H-sic // J. Phys.: Condens. Matter 16 (2004) 1307-1323.