

УДК 681.3

М.К. Буза, О.М. Кондратьева

## ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ НА МНОГОЯДЕРНОМ ПРОЦЕССОРЕ

*Предлагается методика распараллеливания пакета XMD молекулярной динамики на базе вычислительной системы с общей памятью. Выполняется параллельная реализация алгоритма молекулярной динамики в форме многопоточного Windows-приложения. Исследуется эффективность полученной реализации для моделирования ряда процессов в физике полупроводников на многоядерных компьютерах.*

### Введение

В настоящее время не только суперкомпьютеры, но и персональные компьютеры и ноутбуки основаны на технологиях, поддерживающих **параллельную** обработку. На сегодняшний день разработан, отлажен и апробирован огромный объем программного обеспечения. Естественно, хотелось бы его эффективно использовать при работе на многопроцессорных и многоядерных вычислительных установках. Для этого необходимо **создать** механизм разделения последовательного алгоритма на части и организовать их параллельное выполнение на разных процессорах.

В статье рассматривается алгоритм классической молекулярной динамики (МД). Для описания межатомных взаимодействий используется эмпирический потенциал, а динамика ансамбля атомов описывается системой уравнений движения Ньютона. Моделирование методом МД относится к классу больших задач и активно исследуется на предмет распараллеливания. Существуют различные пакеты МД-моделирования, ориентированные как на последовательные, так и на параллельные вычисления.

Цель настоящей работы - увеличить производительность пакета XMD (Molecular Dynamics for Metals and Ceramics) [1], ставшего практически стандартным для МД-моделирования. Для достижения поставленной цели к пакету XMD добавлены многопоточные версии функций вычисления сил, что позволяет сократить время моделирования на многопроцессорных компьютерах с общей памятью. Эффективность модифицированного пакета была исследована при решении следующих задач по моделированию в физике полупроводников: отжиг, диффузия, аморфизация и распыление.

### 1. Метод МД

Основной идеей метода молекулярной динамики [2] является то, что атомы вещества рассматриваются как точечные массы, движение которых описывается классическими уравнениями Ньютона. Интегрирование этих уравнений позволяет найти траектории движения всех атомов в заданном объеме пространства. Анализируя их, можно получить необходимую информацию о моделируемой системе в целом: плотности, температуре, фазовом состоянии, дефектах (в случае кристалла) и т. п.

Пусть  $N$ - число атомов в рассматриваемом объеме. Обозначим  $\vec{r}_i, \vec{v}_i, \vec{p}_i$  соответственно трехмерные координаты, скорости и импульсы атомов;  $\vec{F}_i$  - силы, действующие на атомы,  $i=1, \dots, N$ . Тогда поведение атомов, образующих данный ансамбль, описывается системой уравнений

$$\begin{cases} \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i; \\ \frac{d\vec{p}_i}{dt} = \vec{F}_i. \end{cases} \quad (1)$$

Силы межатомного взаимодействия можно найти как градиент потенциальной энергии системы, причем энергия определяется из потенциалов взаимодействия для входящих в нее