

УДК 519.6

**ПРИМЕНЕНИЕ СУПЕРКОМПЬЮТЕРОВ ДЛЯ  
МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ  
В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ**

**А. В. Янилкин<sup>1</sup>, П. А. Жилияев<sup>1</sup>, А. Ю. Куксин<sup>1</sup>, Г. Э. Норман<sup>1</sup>,  
В. В. Писарев<sup>1</sup>, В. В. Стегайлов<sup>1</sup>**

Рассматривается применение метода классической молекулярной динамики на суперкомпьютерах. Исследована эффективность распараллеливания пакета LAMMPS вплоть до 8 тысяч ядер на МВС-100К МСЦ РАН. Выработаны рекомендации по его эффективному использованию, обсуждается выбор числа частиц и времени расчета. Представлен набор моделей и подходов для молекулярно-динамического моделирования фазовых превращений и разрушения. Проведен анализ предсказательности моделирования на основе сравнения результатов расчетов с экспериментом. Расчеты выполнены в МСЦ РАН и на кластере МФТИ-60 кафедры информатики Московского физико-технического института. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 09-08-12161-офи-м), программ фундаментальных исследований РАН № 1, 2 и Федеральной целевой программы “Научные и научно-педагогические кадры инновационной России” на 2009–2013 гг. (Государственный контракт Федерального агентства по науке и инновациям № 02.740.11.0200). Статья подготовлена по материалам доклада авторов на международной конференции “Параллельные вычислительные технологии” (ПаВТ-2010; <http://agora.guru.ru/pavt>).

**Ключевые слова:** классическая молекулярная динамика, суперкомпьютер, эффективность распараллеливания, конденсированная среда.

**1. Введение.** Область применения суперкомпьютеров для расчетов методом классической молекулярной динамики (МД) определяется возможностью распараллеливания и развитием МД-моделей различных процессов. В настоящей статье исследуется параллельная эффективность пакета LAMMPS [1] вплоть до 8 тысяч ядер (МВС-100К, Межведомственный суперкомпьютерный центр (МСЦ) РАН) и его применение для исследования процессов в конденсированных средах. В качестве примеров применения представлены результаты расчетов пластической деформации и разрушения.

Для распараллеливания классических МД-задач используются хорошо зарекомендовавшие себя алгоритмы декомпозиции по пространству. На сегодняшний день классические молекулярно-динамические программы позволяют рассматривать системы, состоящие из  $10^{12}$  атомов [2]. Архитектура суперкомпьютеров накладывает свои ограничения на проведение крупномасштабных расчетов. На МВС-100К МСЦ РАН проведены тестовые расчеты с целью выработки набора рекомендаций для наиболее эффективного проведения расчетов и анализа данных для различных задач, решаемых методом классической МД, для описания которых требуется большое число частиц. Тесты включали в себя расчеты с 1 млрд. атомов и полной загрузкой суперкомпьютера. Определены границы максимального числа частиц и область эффективного использования.

В работе исследуются механизмы и скорости пластического деформирования и разрушения металлов и сплавов при высокоскоростном деформировании ( $10^6$  с<sup>-1</sup> и выше), имеющем место в ударно-волновых явлениях, при импульсном воздействии лазерного излучения или корпускулярных пучков. Изучение проводится на основе моделирования методом молекулярной динамики элементарных процессов, а именно: образование, движение и объединение дислокаций и других дефектов, обеспечивающих неупругое деформирование кристаллической решетки (пластичность), а также зарождение и рост полостей (разрушение) [3–5].

---

<sup>1</sup> Объединенный институт высоких температур РАН, ул. Ижорская, 13/2, 125412, Москва; Московский физико-технический институт, Институтский пер., 9, 141700, г. Долгопрудный; А. В. Янилкин, науч. сотр., e-mail: [aleyanyilkin@gmail.com](mailto:aleyanyilkin@gmail.com); П. А. Жилияев, мл. науч. сотр., e-mail: [peterzhilyaev@gmail.com](mailto:peterzhilyaev@gmail.com); А. Ю. Куксин, ст. науч. сотр., e-mail: [alexey.kuksin@gmail.com](mailto:alexey.kuksin@gmail.com); Г. Э. Норман, зав. отделом, e-mail: [norman@ihed.ras.ru](mailto:norman@ihed.ras.ru); В. В. Писарев, мл. науч. сотр., e-mail: [pisarevvv@gmail.com](mailto:pisarevvv@gmail.com); В. В. Стегайлов, зав. лабораторией, e-mail: [stegailov@gmail.com](mailto:stegailov@gmail.com)

На примере актуальной задачи физики высокоскоростного разрушения проведен крупномасштабный расчет разрыва или вскипания растянутой жидкости. Для моделирования использовано 64 млн. атомов и загрузка около 3500 ядер суперкомпьютера МВС-100К. Приводится сопоставление с данными о динамической прочности и пластичности из ударно-волновых экспериментов (подробнее см. [6]).

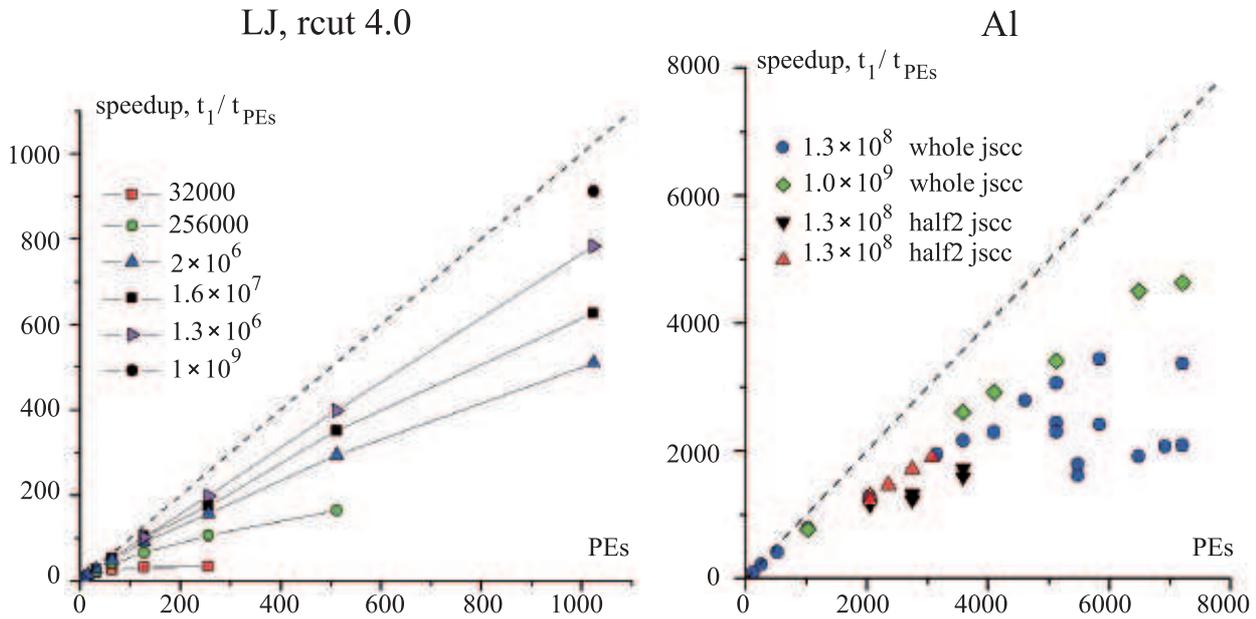


Рис. 1. Зависимость ускорения от числа ядер для различных размеров систем (указано число частиц в системе). Пунктир — идеальное ускорение. Слева — данные расчетов с потенциалом Леннарда-Джонса LJ, справа — с потенциалом EAM (Embedded Atom) для алюминия

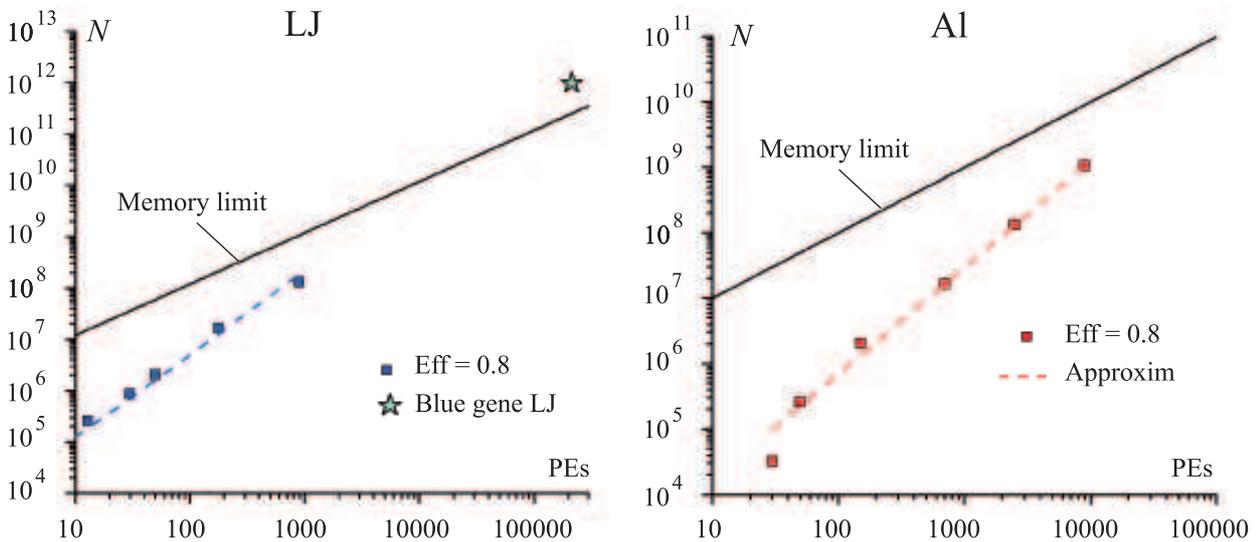


Рис. 2. График “число частиц – число ядер”. Точками показаны расчеты с эффективностью 80%. Сплошная кривая — ограничение по оперативной памяти. Для сравнения приведен максимальный на сегодняшний день расчет на суперкомпьютере BlueGene

**2. Выбор оптимального числа процессоров и времени расчета.**

**2.1. Эффективность распараллеливания МД-задач.** Для каждого фиксированного размера системы определялось время расчета 100 шагов для различного числа ядер (PEs) от 1 до 1000 в случае потенциала LJ (Lennard–Jones) и от 1 до 7200 в случае алюминия. Эффективность параллелизации определяется ускорением вычислений, которое рассчитывалось как отношение времени расчета на одном процессоре  $t_1$  к реальному времени расчета  $t_{PEs}$ . Результаты представлены на рис. 1. Для небольших

размеров систем ( $N = 32\,000$ ) наблюдается значительное снижение эффективности для небольшого числа ядер ( $< 50$ ), а при PEs  $> 100$  с дальнейшим увеличением числа ядер время счета практически не меняется. Аналогичные расчеты были проведены для других размеров систем:  $256\,000$ ,  $2 \times 10^6$ ,  $1.6 \times 10^7$ ,  $1.3 \times 10^7$  и  $1.3 \times 10^8$ . Поскольку проводить расчеты в области насыщения не имеет смысла, в тестовых задачах рассматривалась область с параллельной эффективностью более 60%. Наблюдается хорошая масштабируемость вплоть до расчетов на 7 тысячах ядер.

Как уже было отмечено, использовать суперкомпьютер для расчета в области насыщения, где время расчета практически не меняется с увеличением числа ядер, нецелесообразно, поэтому необходимо ввести критерий эффективного использования. В данном случае мы использовали критерий, основанный на времени обмена  $t_{comm}/t_{full} = 20\%$ , где  $t_{comm}$  — время обмена и  $t_{full}$  — общее время расчета. В соответствии с этим критерием для данного размера системы (числа атомов) определена область эффективного использования (см. рис. 2).

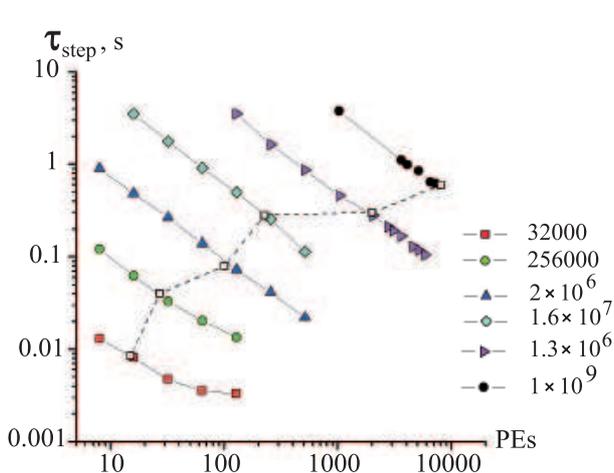


Рис. 3. Зависимость времени расчета одного шага от числа используемых ядер для различных размеров систем. Открытыми точками и пунктиром показана граница области эффективности расчета 80%

Таким образом, кривая эффективности определяет нижнюю границу по используемому числу атомов. С другой стороны, увеличение числа частиц требует все большего объема оперативной памяти. В связи с этим возникает вторая кривая, ограничивающая число атомов сверху. В нашем случае 1 Гб оперативной памяти позволяет рассчитывать примерно 1 млн. атомов. Таким образом, возникает полуостров в координатах “число частиц – число ядер”, в котором можно проводить эффективные расчеты.

На графике приведен рекордный на сегодняшний день расчет [2]:  $10^{12}$  атомов, взаимодействующих по потенциалу LJ. Расчет был проведен на суперкомпьютере BlueGene. Сравнение показывает, что существующая архитектура позволяет проводить подобные расчеты с высокой эффективностью, но требует увеличения объема оперативной памяти.

**2.2. Время расчета.** Для планирования расчетов отдельный интерес представляет время расчета одного шага интегрирования (см. графики на рис. 3).

На основании таких графиков можно определить характерные физические времена, которые можно рассчитать в условиях полной загрузки кластера за разумное время. В качестве используемого размера системы рассмотрим 1 млрд. атомов. Время одного шага составляет  $\tau_{step} = 1$  с. Большинство физических процессов, рассматриваемых с помощью классического метода молекулярной динамики, протекают за времена, значительно большие 1 пс, поэтому будем рассматривать эту величину как наименьшую. Длительность стандартного шага интегрирования составляет 1 фс, или 0.001 пс. Тогда за один час машинного времени (3600 с) при полной загрузке можно посчитать 3.6 пс для 1 млрд. частиц. Тем самым, за один день можно посчитать 86 пс для 1 млрд. или почти 0.86 нс для 100 млн. частиц. Эти оценки зависят от потенциала взаимодействия и могут изменяться как в ту, так и в другую сторону, но для большинства задач по порядку величины они дают правильное значение.

**2.3. Выбор числа частиц.** Выбор значения  $N$  определяется масштабами пространственных и временных корреляций, характерных для поставленной задачи. В системе существует иерархия корреляций

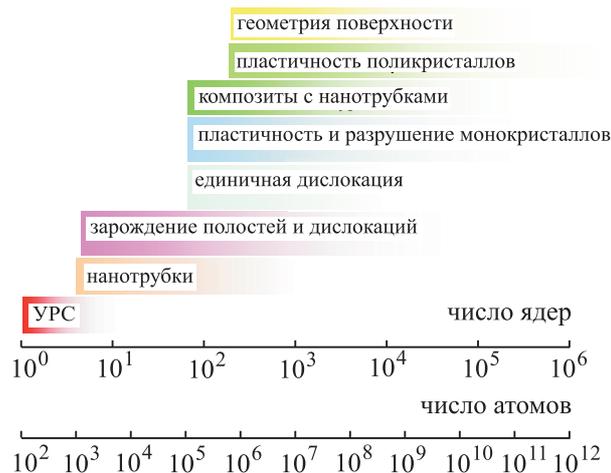


Рис. 4. Число частиц и узлов, необходимых для расчета различных структур и процессов

$r_{c1} < r_{c2} < r_{c3} < \dots$ , которой соответствует иерархия  $N_1 < N_2 < N_3 < \dots$ , где  $N_i = nr_{ci}^3$ . Здесь  $n$  — концентрация частиц,  $r_c$  — область расстояний, которая исследуется. Иными словами, можно сказать, что, выбирая то или иное значение  $N$ , мы тем самым обрываем ряд корреляций, которые можно будет исследовать в данном МД-расчете. Выбирая  $N = nL^3$ , мы также ограничиваем длины волн  $\lambda < L$  равновесных флуктуаций, т.е. фиксируем диапазон волновых векторов, для которого можно будет рассчитать дисперсию колебаний плотности: фоонов в конденсированных средах, плазменных волн в неидеальной плазме, колебаний биомолекул и т.п. Подобным же образом выбор  $N$  ограничивает область исследуемых характеристик таких кооперативных явлений, как дислокации, образование трещин и др.

Существует также иерархия времен корреляций  $\tau_{c1} < \tau_{c2} < \tau_{c3} < \dots$ . Выбор  $L$  обрывает этот ряд, в частности, двумя неравенствами. Во-первых,  $6D\tau_{ci} < L^2$ , где  $D$  — коэффициент диффузии. Во-вторых,  $a_s\tau_{ci} < L$ , где  $a_s$  — скорость звука.

Общий вывод заключается в том, что выбор размера системы (числа частиц) ограничивает предельные значения  $r_c$ ,  $\tau_c$ ,  $\lambda$  и т.п., а также круг явлений и процессов, которые можно исследовать. Выше мы говорили об однородной системе с периодическими граничными условиями. Очевидные варианты требований возникают при моделировании поверхностей, фазовых равновесий и т.п. При переходе к исследованию релаксационных процессов следует учитывать возможность появления дополнительных пространственных и временных характерных масштабов и соответствующих требований на выбор  $N$ .

Физически обоснованный выбор числа частиц в сочетании с тестированием эффективности распараллеливания (см. выше) позволяет установить оптимальное соотношение “количество частиц — число вычислительных ядер” и выполнить исследование выбранного свойства, явления и процесса именно в рамках этого соотношения.

Выбор числа частиц определяется рассматриваемым физическим явлением и структурой. Применительно к физическим задачам, рассматриваемым в настоящей статье, можно выделить требования на размер системы, которые иллюстрируются на рис. 4

### 3. Применение высокопроизводительных расчетов в физике пластичности и прочности.

#### 3.1. Пластическое деформирование металлов. Основным механизмом пластической деформации кристаллических мате-

риалов является движение дислокаций (рис. 5). Поэтому одним из способов упрочнения материалов является создание препятствий, которые бы задерживали дислокации. Примером такого материала является хорошо известный сплав алюминия и меди — дюралюминий. Метод МД успешно использован для исследования взаимодействия движущейся дислокации с включениями и полостями нанометрового размера. Рассмотрим пример подобного расчета для монокристаллического Al с нановключениями Cu. Для анализа используется МД-модель, представляющая собой монокристалл с единичной краевой дислокацией. Визуальная картина взаимодействия дислокации и препятствия показана на рис. 5. Под действием приложенных напряжений часть дислокационной линии проходит вперед, а часть задерживается на нановключении меди, препятствуя дальнейшему движению. При увеличении приложенных напряжений дислокация отрывается от медного включения. Такой механизм наблюдается для препятствий в виде полости.

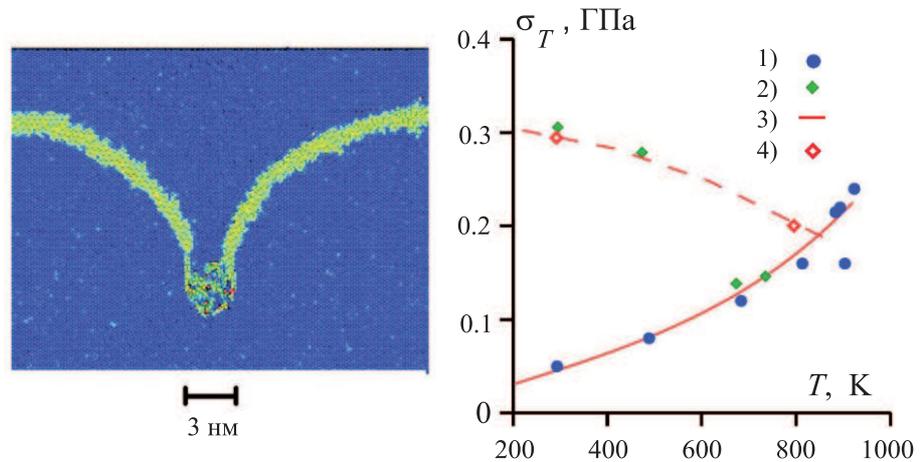


Рис. 5. Изгиб дислокации (светлые атомы) в МД-модели при ее захвате нановключением в процессе сдвиговой деформации. Размер системы: 2 млн. атомов. Зависимость динамического предела текучести от температуры: монокристалл Al (1) и сплав Д16Т (2) — экспериментальные данные, монокристалл Al (3) и сплав Al (4) (4% Cu) — данная работа

МД-модель, представляющая собой монокристалл с единичной краевой дислокацией. Визуальная картина взаимодействия дислокации и препятствия показана на рис. 5. Под действием приложенных напряжений часть дислокационной линии проходит вперед, а часть задерживается на нановключении меди, препятствуя дальнейшему движению. При увеличении приложенных напряжений дислокация отрывается от медного включения. Такой механизм наблюдается для препятствий в виде полости.

Оценка напряжений, необходимых дислокации для преодоления кластеров меди и полостей, показала, что создание препятствий нанометрового размера (0.5–3 нм) существенно повышает предел текучести материала при низких температурах. Характерное расстояние между препятствиями, рассмотренное в расчетах, составляет 10–60 нм. Для кластеров с диаметрами в десятки нанометров с ростом температу-

ры наблюдается существенно меньшее по величине снижение предельного напряжения. Таким образом, процесс преодоления препятствия носит термофлуктуационный характер. Оценки для Al с включениями Cu (4%) постоянного размера 1.5 нм приведены на рис. 5 и согласуются с экспериментальными данными для неотожженного сплава аналогичного состава.

Большая доля материалов не является отдельными сплошными монокристаллами, а состоит из большого числа кристаллитов (зерен), соединенных между собой межзеренными границами. Такие вещества называются поликристаллическими. Было обнаружено, что механические свойства поликристаллических материалов с характерным размером зерна до нескольких сотен нанометров существенно отличаются от свойств обычных крупнозернистых материалов.

Было также показано, что уменьшение размера зерна приводит к значительному увеличению прочности материала (эффект Холла-Петча). Причиной является то, что в результате различной ориентации зерен дислокациям затруднительно переходить из одного зерна в другое, т.е. межзеренные границы являются препятствиями для движения дислокаций. Атомистическое моделирование позволяет исследовать механизмы и закономерности рассмотренного явления. Результаты МД-моделирования свидетельствуют, что в нанокристаллической меди в рассмотренном диапазоне размеров зерна (3.5–13.5 нм) пластическая деформация обусловлена как дислокационным движением внутри зерен, так и зернограницным проскальзыванием (перемещением атомов вдоль межзеренных границ). Получена зависимость предела текучести от среднего размера зерна, которая хорошо дополняет экспериментальные данные и дает оценку максимального предела текучести (рис. 6).

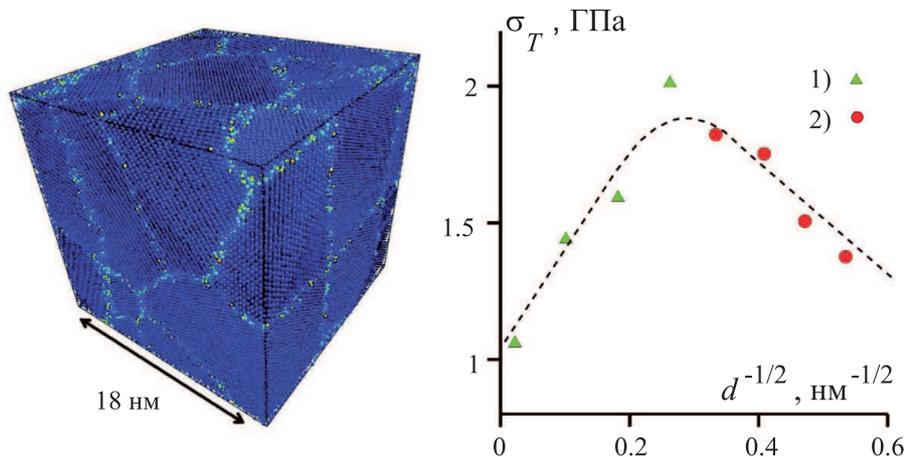


Рис. 6. Пример расчетной ячейки МД-модели нанокристаллической меди. Светлый цвет атомов выделяет межзеренные границы. Зависимость предела текучести от размера зерна: 1) эксперимент, 2) данная работа (максимум предела текучести при  $d = 10$  нм)

получена зависимость предела текучести от среднего размера зерна, которая хорошо дополняет экспериментальные данные и дает оценку максимального предела текучести (рис. 6).

**3.2. Разрыв жидкости.** Выполнено моделирование разрыва растянутой жидкости (рис. 7) и рассмотрен режим растяжения с постоянной скоростью деформирования.

Расчеты проводились с использованием пакета программ LAMMPS. Межатомные взаимодействия описывались потенциалом Леннарда-Джонса (радиус обрезания потенциала равен  $4\sigma$ , скин-радиус для списка Верле равен  $0.3\sigma$ , число соседей в сфере взаимодействия равно 125). Параметры потенциала подобраны так, чтобы моделировать жидкий гексан:  $\epsilon/k = 413$  К и  $\sigma = 5.9$  Å. Моделируемая система содержала 64 млн. частиц. Важным требованием для моделирования разрыва является то, чтобы за время нарастания напряжения в

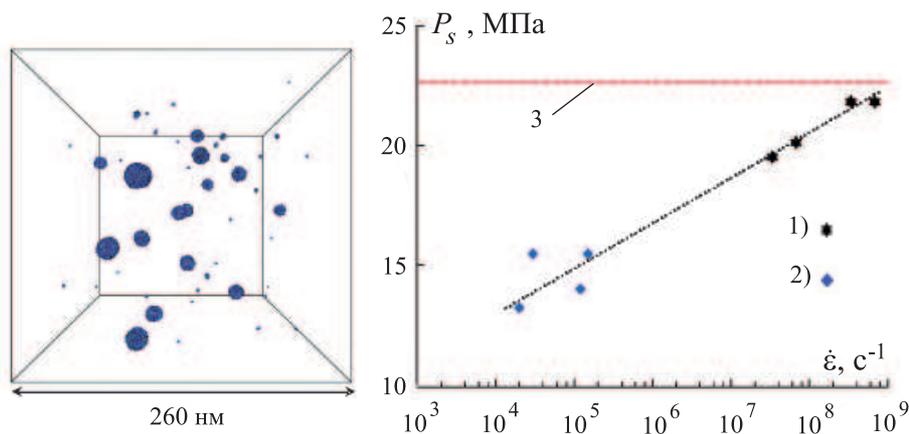


Рис. 7. Снимок расчетной ячейки (показаны только частицы на поверхности полостей). Зависимость прочности жидкого гексана от скорости растяжения: 1) МД, 2) эксперимент, 3) спинадаль жидкость-пар

времени нарастания напряжения в

системе происходили зарождение и рост множества полостей. Концентрация полостей в этом случае обратно пропорциональна скорости растяжения. Оценки показывают, что для скорости растяжения  $10^9 \text{ с}^{-1}$  в системе, содержащей 512 тысяч частиц, успевает зародиться примерно 100 полостей. Чтобы такое же число полостей образовалось при скорости растяжения  $2 \times 10^8 \text{ с}^{-1}$ , необходима система, содержащая более 60 млн. частиц. Характерное время, за которое развивается разрыв, также обратно пропорционально скорости растяжения и составляет около 300 пс при скорости растяжения  $5 \times 10^8 \text{ с}^{-1}$ . Таким образом, для моделирования разрыва жидкости при скоростях растяжения  $10^8\text{--}10^9 \text{ с}^{-1}$  необходимы молекулярно-динамические расчеты очень длинных траекторий (сотни тысяч шагов при одном шаге интегрирования  $\approx 1$  фс) для очень большого числа частиц.

Расчеты проводились в выделенном режиме на суперкомпьютерном кластере МВС-100К МСЦ РАН. Для расчетов использовалось до 3400 вычислительных ядер. Расчет 20 тысяч шагов занимал около 6000 с при использовании 3000 ядер. Одно ядро, таким образом, выполняет около 60 тысяч атом-шагов. Эффективность расчета составила 85% при использовании 3000 ядер, 83% при использовании 3200 ядер и 80% при использовании 3400 ядер (время обмена составило 15%, 17% и 20% от времени расчета соответственно). При расчетах с таким числом частиц проблемой является большой размер файлов конфигурации. Так, в наших расчетах бинарный файл, из которого считывалась начальная конфигурация (координаты и скорости частиц), занимал около 5 Гб. Доступное дисковое пространство позволяет хранить полную конфигурацию не более чем на трех шагах интегрирования, тогда как для диагностики требуется знать состояние системы каждые 1000 шагов. Поскольку интерес представляли только атомы, лежащие на границах полостей, каждые 1000 шагов в текстовый файл выводились координаты частиц, имеющих избыточную потенциальную энергию. Это позволило выводить в текстовые файлы координаты не более 20 тысяч частиц на каждом шаге; файлы при этом имели размер несколько мегабайт для каждого запуска (каждый файл содержал конфигурацию на 20 различных шагах интегрирования). Полная конфигурация сохранялась только в двух файлах, которые использовались для запуска новых расчетов.

**4. Заключение.** Обратим внимание на то, что молекулярное моделирование является двигателем развития высокопроизводительной вычислительной техники. Изложенные подходы позволяют оценить число частиц, необходимое для исследования того или иного явления или процесса, и указать, ради изучения каких явлений или процессов следует строить все более и более многоядерные системы и разрабатывать их перспективную архитектуру. В статье обсуждена предсказательная сила молекулярного моделирования и его соотношение с натурными испытаниями в инженерной практике.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Plimpton S.J.* Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // *J. Comp. Phys.* 1995. **117**. 1–19.
2. *Germann T.C., Kadau K.* Trillion-atom molecular dynamics becomes a reality // *Int. J. of Modern Physics C.* 2008. **19**. 1315–1319.
3. *Куксин А.Ю., Стегайлов В.В., Янилкин А.В.* Молекулярно-динамическое моделирование динамики краевой дислокации в алюминии // *Докл. РАН.* 2008. **420**. 467–471.
4. *Куксин А.Ю., Янилкин А.В.* Кинетическая модель разрушения при высокоскоростном растяжении на примере кристаллического алюминия // *Докл. РАН.* 2007. **413**. 615–619.
5. *Kuksin A.Yu., Norman G.E., Stegailov V.V., Yanilkin A.V.* Molecular simulation as a scientific base of nanotechnologies in power engineering // *J. of Engineering Thermophysics.* 2009. **18**. 197–226.
6. *Pisarev V.V., Kuksin A.Yu., Norman G.E., Stegailov V.V., Yanilkin A.V.* Microscopic theory and kinetic model of fracture of liquids // *Shock Compression of Condensed Matter.* Ed. by M.D. Furnish et al. New York: American Institute of Physics, 2009.

Поступила в редакцию  
12.03.2010