

О РЕАЛИЗАЦИИ МЕТОДА ЧАСТИЦ НА ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ЭВМ¹

Л.П. Каменщиков

Институт вычислительного моделирования СО РАН, г. Красноярск

Постановка задачи. В пространстве рассматривается набор из N материальных частиц с массами m_i . На i -ю частицу действуют силы, равнодействующая которых есть \mathbf{F}_i . Начальные условия в момент $t = 0$ заданы. Требуется найти положения частиц и их скорости в последующие моменты времени. Модель сводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\frac{d^2\mathbf{r}_i}{dt^2} = \frac{1}{m_i}\mathbf{F}_i \equiv \mathbf{a}_i, \quad \text{или} \quad \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i, \quad \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{a}_i, \quad i = 1, \dots, N. \quad (1)$$

Интерпретация самого понятия «частица», задание вектора силы \mathbf{F}_i , интервала интегрирования и другие детали в модели зависят от конкретной области приложений. Метод частиц широко применяется при компьютерном моделировании в молекулярной биологии и химии для исследования структуры и динамики макромолекул [1–3], в механике жидкостей, газов и твердых тел [4], в физике плазмы и т.п. Макроскопические свойства системы определяются усреднением состояний отдельных частиц по всей системе. Преимущество метода частиц в том, что он требует значительно меньше априорных предположений о свойствах изучаемого материала, чем методы, основанные на концепции сплошной среды [4]. Когда число частиц достаточно велико, для численного решения уравнений может потребоваться распараллеливание.

Например, в задачах молекулярной динамики частицами являются атомы, молекулы и т.п. Вектор силы на практике часто задается как сумма градиента (с минусом) от потенциальной энергии системы

$$U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_i U_1(\mathbf{r}_i) + \sum_{i,j} U_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \sum_{i,j,k} U_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) + \dots$$

и непотенциальной внешней силы \mathbf{F}_i^{ex} . Если ограничиться только парным взаимодействием молекул, которое во многих случаях хорошо описывается потенциалом Леннарда-Джонса

$$U_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right)^6 \right],$$

то система уравнений (1) примет вид:

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i, \quad m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = -\nabla_{\mathbf{r}_i} \sum_{j \neq i} U_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j), \quad i = 1, \dots, N.$$

Макроскопические свойства системы определяются усреднением состояний отдельных частиц по всей системе. Например, температура находится по формуле:

$$T(t) = \frac{1}{3k_B N} \sum_{i=1}^N m_i |\mathbf{v}_i(t)|^2.$$

Численный алгоритм. Для решения системы (1) можно использовать многие методы — Рунге-Кутты, семейство предиктор-корректор, Гира и т.д. Основные затраты машинного времени обычно приходятся на расчет правой части \mathbf{a}_i , особенно при наличии дальнедействующих сил

¹ Работа поддержана грантом РФФИ, проект № 11-01-00224

(гравитационных, кулоновских), поэтому желательно вычислять правую часть по возможности реже. В данной работе применяли известный метод Штёрмера–Верле [5]

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_i^{n+1} &= \mathbf{r}_i^n + \tau \mathbf{v}_i^n + \frac{1}{2} \tau^2 \mathbf{a}_i^n + O(\tau^3), \\ \mathbf{a}_i^{n+1} &= \mathbf{a}_i(\{\mathbf{r}_i^{n+1}\}), \\ \mathbf{v}_i^{n+1} &= \mathbf{v}_i^n + \frac{1}{2} \tau (\mathbf{a}_i^{n+1} + \mathbf{a}_i^n) + O(\tau^2),\end{aligned}$$

в котором правая часть вычисляется только один раз на каждом временном шаге и который имеет более высокую точность по сравнению с обычным методом Эйлера, т.е. этот метод является компромиссом между точностью расчетов и скоростью их выполнения. Данный метод также сохраняет ряд первых интегралов исходной системы уравнений (полный импульс, полный момент импульса и др.), что бывает важнее, чем повышенный порядок [6].

Некоторые методы распараллеливания. Силы (или потенциалы) в правой части системы (1) можно разделить на короткодействующие и дальнедействующие. Последние требуют распараллеливания прежде всего. Для ускорения расчетов потенциал взаимодействия часто обрывают на некотором расстоянии R_{cut} . Например, для потенциала Леннард-Джонса можно взять $R_{cut} = 2.5\sigma$, т.к. на этом расстоянии значение энергии взаимодействия составляет лишь ≈ 0.0163 от глубины потенциальной ямы ε . Среди различных методов получения параллельных алгоритмов для систем вида (1) отметим следующие [7].

1) *Декомпозиция атомов* — каждый процессор на всем интервале интегрирования «отвечает» за расчет силы и решение уравнений движения только для некоторого подмножества всех атомов. Каждому процессору назначается подматрица матрицы правой части, состоящая из N/P строк матрицы, где P — число процессоров. Каждый процессор вычисляет элементы своей подматрицы. Нагрузка по импорту данных не уменьшается с увеличением числа процессоров, т.к. каждый процессор должен получить координаты всех атомов.

2) *Декомпозиция сил* — как и выше, каждый процессор на всем интервале интегрирования отвечает за расчет силы и решение уравнений движения только для некоторого подмножества всех атомов. Каждому процессору назначается прямоугольная подматрица матрицы силы. Таких подматриц P штук. Однако, каждый процессор отвечает за расчет сил, отнесенных только к фиксированному множеству атомных пар. Во многих случаях, никакие из атомов в данной атомной паре не будут приписаны к тому же процессору, поэтому оба атома должны быть импортированы. Атомные пары располагаются на процессорах таким образом, чтобы каждый процессор импортировал данные только от $\sim \sqrt{P}$ других процессоров на каждом временном шаге. Это позволяет сделать пересылки по импорту данных меньше при увеличении числа процессоров.

3) *Пространственная декомпозиция* — пространство разбивается на блоки с ребром порядка R_{cut} . Число блоков равно числу процессоров. Т.к. частицы двигаются, то прописка частиц на процессорах меняется. Преимущество этого метода в том, что рассматриваются пересылки только с соседними блоками. Недостаток, в том, что при увеличении числа процессоров, область для импорта данных остается большой по сравнению с числом частиц, содержащихся в каждом блоке.

4) *Метод декомпозиции времени* [8], в котором предлагается различные временные шаги интегрирования рассчитывать одновременно на разных процессорах, что, очевидно, подразумевает отсутствие дальнедействующих сил. Точнее говоря, считается, что области, удалённые друг от

друга на расстояние большее, чем диаметр потенциала взаимодействия, не влияют друг на друга в интервале времени хотя бы одного временного шага.

Численный пример Рассмотрим численное моделирование так называемого кулоновского взрыва [9]. Суть его состоит в том, что на сложную молекулу (или группу атомов) воздействуют коротким и сверхмощным световым импульсом, в результате чего молекула теряет все свои электроны, превращаясь в набор положительно заряженных частиц (ионов), которые и взрываются под действием электростатических кулоновских сил расталкивания. В данном примере считаем также, что взрыв происходит не в однородном пространстве, а на оптической полихроматической решетке, сформированной в двух- или трехмерном пространстве лазерными излучателями [10–12]. В центре каждой ячейки этой решетки имеется «потенциальная яма», которая может захватывать пролетающие при взрыве ионы. В 2-D задачах ячейки являются квадратами, в 3-D задачах — кубами с стороной L . Соответствующие уравнения движения ансамбля из N ионов в безразмерных переменных можно записать в виде [12–13]:

$$\frac{dx_i}{dt} = cu_i, \quad (2)$$

$$\frac{du_i}{dt} = -c_1 \sin(2\pi x_i) - c_2 [b - \cos(2\pi x_i)] u_i + c_3 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{(x_i - x_j)}{r_{ij}^3}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (3)$$

$$x_i(0) = x_i^0, \quad u_i(0) = u_i^0, \quad (4)$$

где $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$, $\mathbf{u}_i = (u_i, v_i, w_i)$ — координата и скорость частицы; $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$; c, c_1, c_2, c_3, b — константы, определяемые физико-геометрическими параметрами задачи. В (2)–(4) приведены уравнения для x_i - и u_i - компонент. Для y_i, z_i, v_i, w_i - компонент уравнения аналогичные. Первые два слагаемых в правой части уравнения (3) выражают консервативную и диссипативную (трение) составляющие выпрямленной градиентной силы, а третье слагаемое есть кулоновская сила, действующая на i -й ион со стороны всех других ионов. В общем случае, на ионы всегда действует также и четвертая (случайная) сила, обусловленная квантовыми флуктуациями [12], но ее величина, особенно в момент взрыва, значительно меньше первых трех, поэтому для простоты она здесь не учитывается. Также, с целью упрощения визуализации результатов, считаем, что разлет частиц при взрыве происходит только в плоскости $z = 0$, т.е. задача двухмерная по пространству. Обрыва потенциала взаимодействия не проводилось.

На рис. 1–3 показано положение ансамбля из $N = 360$ ионов химического элемента иттербия при кулоновском взрыве в разные моменты времени. В начальный момент частицы располагались равномерно по кольцу диаметром 2 мм (рис. 1, слева). Пунктиром изображены ячейки оптической решетки, размер ячейки 5×5 мм. На рис. 3 (справа) представлено положение частиц через $9.34 \cdot 10^{-2}$ сек. Видно, что ионы, как целое, расположились квадратом со стороной примерно 35.5 мм, причем этот квадрат оказался повернут на 45° относительно исходной оптической решетки. Этот факт поворота не является априори очевидным и объясняется особенностями строения потенциальных барьеров на решетке. При дальнейшем счете общая картина существенно не менялась, хотя отдельные частицы могут сдвинуться чуть ближе к стационару. При учете случайной силы, частицы испытывали бы мелкие колебания около расчетного стационарного решения.

Для выполнения параллельных расчетов использовали высокоуровневый подход к программированию на базе DVM-системы, разработанной в ИПМ им. М.В.Келдыша РАН [14]. Расчеты

проводились на кластере МВС-100К (1460 узлов, 11680 ядер) в МСЦ РАН.

В табл. 1 приведены время счета и коэффициент эффективности распараллеливания по DVM, который определяется как отношение $\text{Prod}/(\text{Prod}+\text{Lost})$, где Prod — полезное время, суммарное по всем процессорам, а Lost — суммарное время потерь, образуемое дублированием вычислений (недостаточный параллелизм), общим временем коммуникаций, простоями и т.п.

Распараллеливание проводилось только одним методом — декомпозиции атомов. В каждом варианте выполнялось 10 млн шагов по времени. Из таблицы видно, в частности, что при 360-ти частицах на 8-ми процессорах время счета даже больше, чем на 6-ти процессорах, т.к. затраты на коммуникации становятся слишком большим по сравнению с полезным временем, соответственно резко падает эффективность. При 720-ти частицах и на 8-ми процессорах эффективность расчетов остается еще приемлемой. Наряду с методом декомпозиции атомов планируется в дальнейшем реализовать и другие способы распараллеливания.

Автор выражает благодарность д.ф.-м.н. проф. И.В. Краснову за постановку задачи (2)–(4) и за полезные обсуждения.

Литература

- [1] Frenkel D., Smit B. Understanding molecular simulation: From algorithms to applications, 2nd edition, N.-Y.: Academic Press, 2002.
- [2] Rapaport D.C. The art of molecular dynamics simulation, 2nd edition, Cambridge Univ. Press, 2004.
- [3] Мансури Г.А. Принципы нанотехнологии. Пер с англ. М.: Научный мир, 2008.
- [4] Кривцов А.М., Кривцова Н.В. Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела // Дальневосточный математический журнал ДВО РАН, **3**, № 2, 2002, С. 254–276.
- [5] Swope W., Andersen H., Berens P., Wilson K. A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: Application to small water clusters // J. Chem. Phys., **76**, 1982, P. 637–649.
- [6] Еленин Г.Г., Шляхов П.И. О консервативности двухстадийных симметрично-симплектических методов Рунге-Кутты и метода Штермера-Верле // Дифференциальные уравнения, **46**, № 7, 2010, С. 983–989.
- [7] Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comput. Phys., **117**, 1995, P. 1–19.
- [8] Андреев В.В. Использование метода декомпозиции времени в параллельных алгоритмах метода молекулярной динамики // Препринт, вып. 1, Ижевск: Изд-во ИПМ УрО РАН, 2006, 55 с.
- [9] Крайнов В.П. Лазерный термоядерный синтез в кластерах // Соросовский образовательный журнал, 2001, № 10, С. 75–80.
- [10] Krasnov I.V. Effect of rectifying the radiative force and kinetics of atoms in strong bichromatic fields // Laser Phys. - 1994.- 4. -P.906-921.
- [11] Krasnov I. V. All-optical confinement of ultracold plasma with resonant ions // Phys. Lett. A -2009. - 373. - P.2291-2297.
- [12] Krasnov I.V. Three-dimensional localization of atoms in the polychromatic optical super lattice // Phys. Lett. A - 2011. - 375. - P.2471-2478.
- [13] Каменщиков Л.П., Краснов И.В. Формирование ионных кулоновских кластеров в полихроматической оптической решетке // Материалы XIV Всероссийского семинара «Моделирование неравновесных систем», СФУ. Красноярск, 2011, С. 116–119.
- [14] DVM-система, <http://www.keldysh.ru/dvm>.

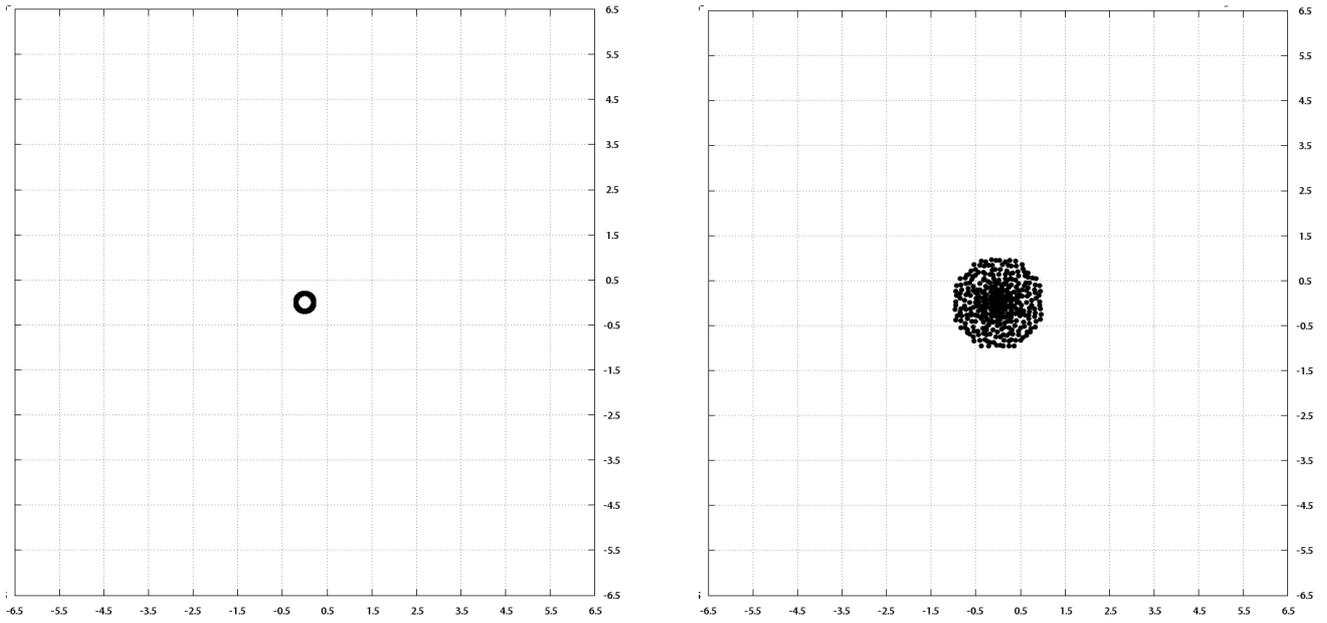


Рис. 1. Слева: начальное расположение частиц ($t = 0$) взято по кольцу диаметром 2 мм. Размер ребра ячейки оптической решетки $L = 5$ мм. Число частиц $N = 360$. Справа: положение частиц через $t = 1.87 \cdot 10^{-4}$ сек. после начала взрыва.

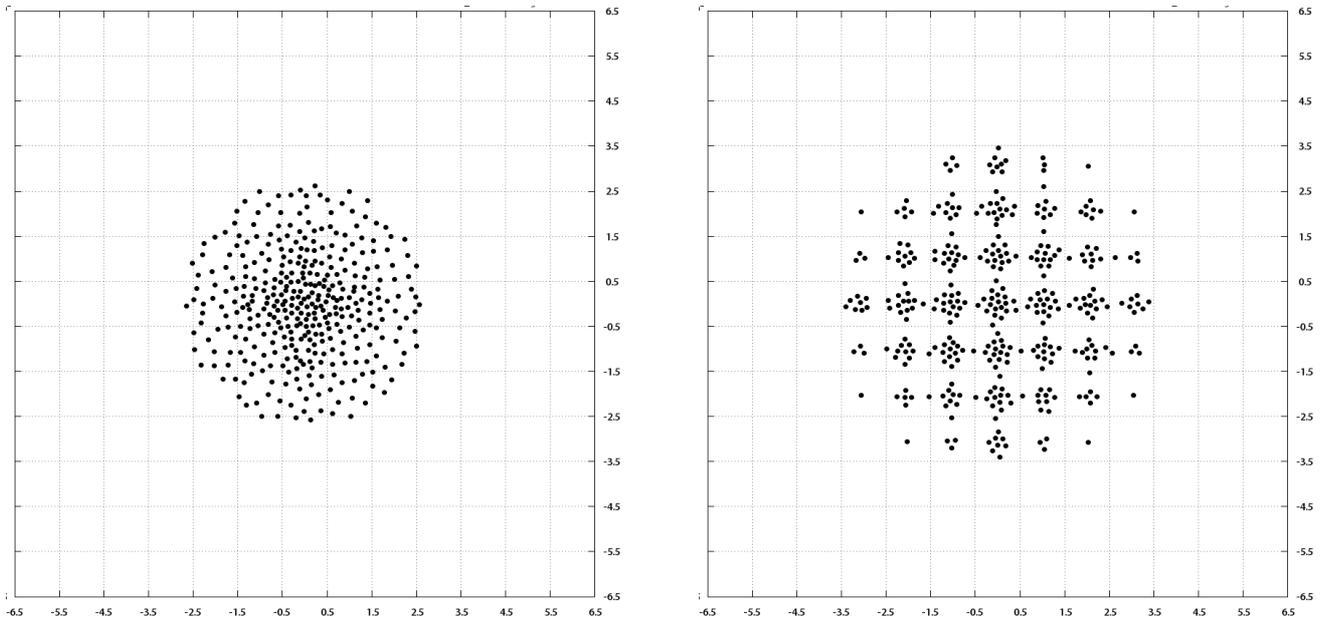


Рис. 2. Слева: положение частиц в момент $t = 9.34 \cdot 10^{-4}$ сек. Справа: в момент $t = 7.47 \cdot 10^{-3}$ сек.

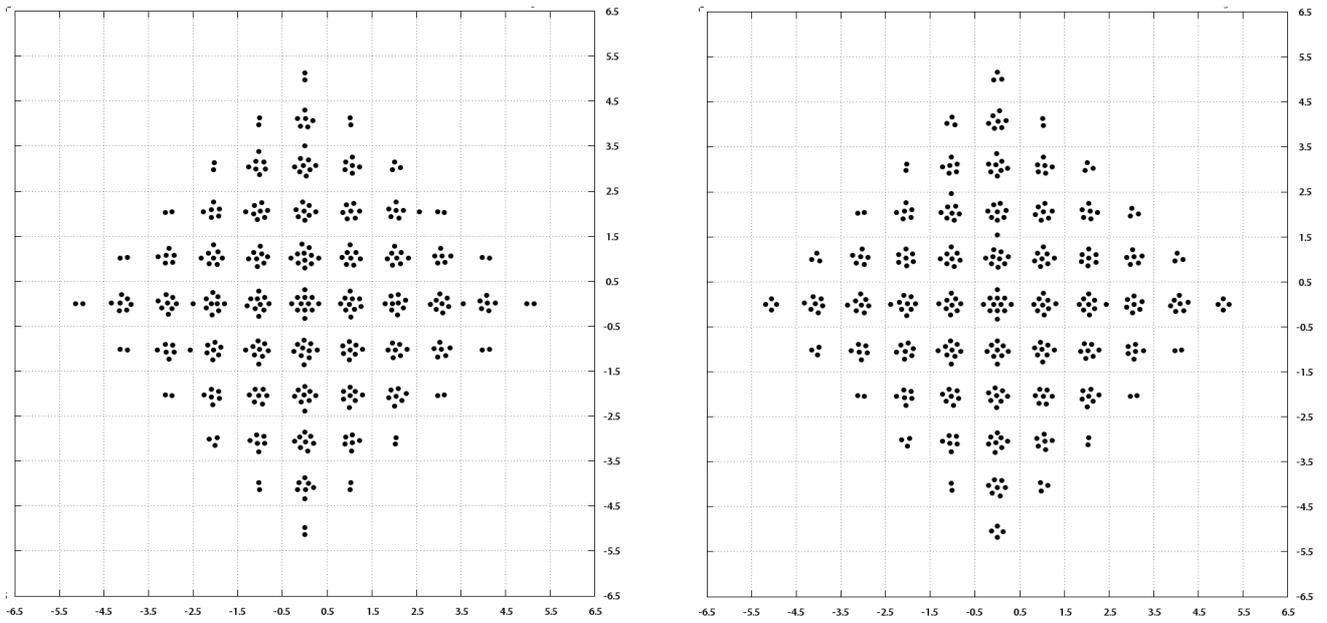


Рис. 3. Слева: положение частиц в момент $t = 5.60 \cdot 10^{-2}$ сек. Справа: в момент $t = 9.34 \cdot 10^{-2}$ сек.

Число процессоров	Время счета (мин.)	Эфф-ть по DVM
360 частиц		
1	304.67	1.000
2	159.82	0.956
4	87.772	0.870
6	65.402	0.783
8	95.636	0.457
720 частиц		
1	1176.9	1.000
2	597.89	0.985
4	308.65	0.955
6	214.83	0.918
8	168.11	0.869

Таблица 1. Время счета и эффективность для разного числа процессоров и для разного числа частиц. Выполнялось 10^7 шагов по времени.