

На правах рукописи



Семенов Сергей Александрович

**ТЕХНОЛОГИЯ ПРОГРАММИРОВАНИЯ АЛГОРИТМОВ  
МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ  
НАНОСИСТЕМ НА ГРАФИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОРАХ**

Специальность: 05.13.11 – Математическое и программное обеспечение  
вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей

Специальность: 05.13.18 – Математическое моделирование, численные  
методы и комплексы программ

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Москва – 2017

Работа выполнена на кафедре «Вычислительная математика и программирование» ФГБОУ ВО «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,  
профессор  
Ревизников Дмитрий Леонидович

Научный консультант: кандидат физико-математических наук,  
Сластушенский Юрий Викторович

Официальные оппоненты: Егоров Иван Владимирович,  
доктор физико-математических наук,  
профессор, член-корреспондент РАН,  
главный научный сотрудник ГНЦ ФГУП  
«Центральный аэрогидродинамический  
институт имени профессора Н.Е. Жуковского»

Карпенко Антон Геннадьевич,  
кандидат физико-математических наук,  
доцент кафедры гидроаэромеханики ФГБОУ  
ВО «Санкт-Петербургский государственный  
университет»

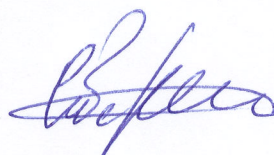
Ведущая организация: Федеральное государственное учреждение  
«Федеральный исследовательский центр  
Институт прикладной математики им. М.В.  
Келдыша Российской академии наук»

Защита состоится «29» декабря 2017 года в 12 часов 00 минут на заседании диссертационного совета Д 212.125.04 при ФГБОУ ВО «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)» по адресу 125993, г. Москва, А-80, ГСП-3, Волоколамское шоссе, д. 4.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке ФГБОУ ВО «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)» или на сайте МАИ по ссылке: [https://mai.ru/events/defence/index.php?ELEMENT\\_ID=85260](https://mai.ru/events/defence/index.php?ELEMENT_ID=85260).

Автореферат разослан «\_\_» \_\_\_\_\_ 2017 г.

Учёный секретарь  
диссертационного совета Д 212.125.04,  
кандидат физико-математических наук



Северина Н.С.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### **Актуальность темы.**

В последнее время все больший интерес вызывает проведение массивных вычислений с использованием графических процессоров (GPU). Известны варианты применения графических ускорителей к задачам линейной алгебры, математической физики, вычислительной аэрогидродинамики и т.д. В отличие от универсальных процессоров (CPU) видеочипы предназначены, в первую очередь, для параллельных вычислений с большим числом арифметических операций. Упрощение инструкций одного ядра, уменьшение потребления энергии и увеличение общего числа потоковых процессоров обуславливают преимущество графических ускорителей над традиционными высокопроизводительными вычислительными комплексами. Немаловажным является и существенное снижение требований к инфраструктуре вычислительных систем, для проведения массивных параллельных расчетов достаточно оснащение персонального компьютера соответствующей видеокартой.

Одной из перспективных областей применения графических процессоров является молекулярно-динамическое моделирование. Внутренне присущий этому направлению параллелизм вычислительного процесса находит адекватное отражение в архитектуре видеокарт. В настоящее время существует целый ряд эффективных реализаций ускорения вычислений для сравнительно простых потенциалов межчастичного взаимодействия. В этой связи можно отметить известные программные комплексы молекулярно-динамического моделирования HOOMD, AMBER, LAMMPS, GROMACS, NAMD, CHARMM, ACEMD, Desmond, Espresso, Folding@Home. Все они оснащены средствами, позволяющими использовать GPU для ускорения расчётов. Однако предсказательной возможности простых потенциалов зачастую недостаточно для адекватного воспроизведения широкого спектра свойств наносистем. Необходимо использовать многочастичные потенциалы, отражающие реальные свойства межчастичных связей. Это обуславливает актуальность разработки специальных подходов к программной реализации параллельных алгоритмов на GPU, адаптированных к специфике таких потенциалов. При этом большое значение имеет технологичность разработки и модификации программ данного класса, возможность интеграции с имеющимися программными комплексами, визуализация результатов вычислительного эксперимента в реальном времени. Данным вопросам посвящена диссертационная работа.

**Целью работы** является разработка технологии программирования алгоритмов молекулярно-динамического моделирования наноструктур со сложными потенциалами межчастичного взаимодействия на графических процессорах. Для этого необходимо решение следующей группы **задач**:

- ✓ Анализ существующих алгоритмов молекулярно-динамического моделирования с позиций поиска оптимального отображения вычислительных процессов на архитектуру графических процессоров.
- ✓ Выработка подходов к размещению данных в памяти видеокарты с целью минимизации числа перекрестных запросов при параллельных вычислениях.
- ✓ Разработка способов наследования классов в технологии CUDA, обеспечивающих возможность оснащения программы новыми потенциалами межчастичного взаимодействия без модификации основного кода.
- ✓ Разработка методов интеграции программного обеспечения с имеющимися программными комплексами молекулярно-динамического моделирования.
- ✓ Разработка методов и средств визуализации результатов вычислительного процесса в реальном времени.
- ✓ Применение разработанной технологии программирования для создания авторского комплекса программ молекулярно-динамического моделирования наносистем.
- ✓ Проведение вычислительных экспериментов, направленных на анализ эффективности вычислительного процесса.
- ✓ Разработка подходов к моделированию теплопроводности наноструктур с использованием созданного программного обеспечения.
- ✓ Проведение вычислительных экспериментов по моделированию процессов теплопереноса в наноструктурах. Выявление режимов аномальной теплопроводности.
- ✓ Разработка методов согласования молекулярно-динамического моделирования и макромасштабного описания процессов аномальной теплопроводности с использованием дробно-дифференциальных уравнений.

#### **Научная новизна.**

Разработаны методы построения программного обеспечения для молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических

процессорах, включающие методы отображения вычислительных процессов на архитектуру видеокарт, методы размещения данных в памяти видеокарты, способы наследования классов в технологии CUDA, обеспечивающие возможность оснащения программ новыми потенциалами межчастичного взаимодействия без модификации основного кода.

Предложены подходы к повышению эффективности параллельных вычислений на графических процессорах, включающие использование гибридной модели поиска ближних частиц, составление и обновление списка соседних атомов с целью минимизации коллизий памяти, оптимальное распределение операций по вычислительным потокам, выделение дополнительной памяти для создания копий координат взаимодействующих атомов.

С использованием созданного по разработанной технологии программного обеспечения исследованы вопросы моделирования теплопроводности углеродных наносистем. Для описания аномальных режимов теплопроводности разработан подход, основанный на сочетании методов молекулярной динамики и дробно-дифференциального исчисления. Предложен алгоритм определения параметров макроскопической модели по данным молекулярно-динамического моделирования. Таким образом, установлена связь между различными масштабами в описании аномальной теплопроводности.

**Достоверность и обоснованность** результатов, полученных в ходе диссертационного исследования, обеспечивается согласованностью результатов проведённых вычислительных экспериментов с лабораторными измерениями, а также результатами моделирования с использованием других программных комплексов, полученными независимыми друг от друга способами.

#### **Практическая ценность.**

Представленная в диссертации технология программирования даёт возможность повысить эффективность разработки программного обеспечения для моделирования динамических систем на графических процессорах, использовать и расширять уже существующие программные модули, осуществлять интеграцию разрабатываемых программных средств с имеющимися программными комплексами.

Разработанные в диссертации методы и средства математического моделирования имеют высокую значимость с точки зрения перспектив их применения для исследования диффузионных и тепловых процессов в наносистемах.

Результаты диссертационного исследования могут быть использованы при составлении образовательных курсов по методам программирования для графических процессоров и математическому моделированию наносистем.

#### **Апробация работы.**

Материалы диссертации докладывались и обсуждались на следующих российских и международных форумах:

- VIII Международная конференция по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ`2012), 25-31 мая 2010 г., Алушта.
- 11-я Международная конференция «Авиация и космонавтика – 2012», 13-15 ноября 2012 г., Москва.
- 55-я научная конференция МФТИ, 19-25 ноября 2012г., Долгопрудный.
- XVII Международная конференция по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСПСС`2013), 22-31 мая 2013 г., Алушта.
- 15-я Международная конференция «Авиация и космонавтика – 2016», 14-18 ноября 2016 г., Москва.
- 16-я Международная конференция «Авиация и космонавтика – 2017», 20-24 ноября 2017 г., Москва.

#### **Публикации.**

По теме диссертации опубликовано 11 работ, из них 4 статьи в научных журналах из перечня ВАК РФ для представления основных научных результатов диссертаций на соискание учёных степеней доктора и кандидата наук. Список публикаций приведён в конце автореферата.

#### **Структура и объём работы.**

Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения, глоссария, списка литературы. В работе содержится 20 таблиц, 95 рисунков и 115 библиографических ссылок. Общий объём работы составляет 160 страниц.

## **СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

**Во введении** диссертационной работы дан краткий обзор применения графических процессоров в научных исследованиях. Отмечены особенности создания программного обеспечения для проведения массивных параллельных вычислений на видеокартах. Приведено обоснование актуальности темы диссертационной работы, сформулированы цели и задачи, отмечена научная новизна, представлены данные по апробации работы и перечислены авторские публикации по теме.

**В первой главе** дано описание задач и методов молекулярно-динамического моделирования. Рассмотрены вопросы, связанные с решением задач рассматриваемого класса на графических процессорах.

Молекулярно-динамическое моделирование основано на решении уравнений динамики структурных элементов (частиц):

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i = -\nabla_i E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (1)$$

где  $t$  – время,  $m_i$ ,  $\mathbf{r}_i$  – масса и радиус вектор  $i$ -ой частицы,  $N$  – число частиц в системе,  $\mathbf{F}_i$  – сила, действующая на  $i$ -ую частицу,  $\nabla_i E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$  – градиент потенциала межчастичного взаимодействия.

Одним из наиболее распространенных методов численного интегрирования системы уравнений (1) является метод скоростей Верле второго порядка точности:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{r}_i(t) + \Delta t \cdot \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \mathbf{a}_i(t) \\ \mathbf{a}_i(t + \Delta t) &= \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} \end{aligned} \quad (2)$$

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{2} \Delta t (\mathbf{a}_i(t) + \mathbf{a}_i(t + \Delta t))$$

где  $\mathbf{v}_i$  – скорость  $i$ -ой частицы,  $\mathbf{a}_i$  – ускорение.

Существенным является то, что в силу ограниченности радиуса взаимодействия между частицами, такой алгоритм допускает распараллеливание вычислений для процессов, происходящих в различных областях пространства. Это позволяет эффективно применять его на многопроцессорных вычислительных системах. Интенсивный рост производительности вычислительной техники позволяет в настоящее время моделировать структуры, состоящие из сотен миллионов структурных элементов. Как уже отмечалось, присущий молекулярно-динамическому моделированию параллелизм вычислительного процесса находит адекватное отражение в архитектуре видеокарт, что создает условия для их эффективного применения в задачах рассматриваемого класса. Графические карты имеют собственную архитектуру вычислителей, которые объединяются в блоки и grids. Изначально они были рассчитаны на обработку видео и операции с матрицами. Для выполнения задач общего назначения требуется адаптация вычислительных моделей под многопоточную систему исполнения и разноуровневую систему памяти.

В настоящее время существует целый ряд реализаций ускорения вычислений для сравнительно простых потенциалов межчастичного

взаимодействия. Однако для более точного описания широкого спектра свойств наносистем необходимо использовать многочастичные потенциалы, отражающие реальные свойства межчастичных связей. В качестве типичного представителя таких потенциалов в настоящей работе рассматривается потенциал Бреннера. С одной стороны, его использование позволяет исследовать довольно широкий класс наносистем, с другой – на примере этого потенциала можно отчетливо проследить основные проблемы молекулярно-динамического моделирования на графических процессорах.

Потенциал Бреннера состоит из притягивающей –  $V^A(r_{ij})$ , и отталкивающей –  $V^R(r_{ij})$ , компонент, а также функции порядка связи –  $b_{ij}$ :

$$E^B = \sum_i \sum_{j>i} (V^R(r_{ij}) - b_{ij}V^A(r_{ij})), \quad (3)$$

$$V_A(r_{ij}) = f^c(r_{ij}) \sum_{n=1,3} B_n e^{-\beta_n r_{ij}}, \quad (4)$$

$$V^R(r_{ij}) = f^c(r_{ij}) \left(1 + \frac{Q}{r_{ij}}\right) A e^{-\alpha r_{ij}}, \quad (5)$$

$$b_{ij} = \frac{1}{2} (b_{ij}^{\sigma-\pi} + b_{ji}^{\sigma-\pi}) + \pi_{ij}^{RC} + b_{ij}^{DH}, \quad (6)$$

$$b_{ij}^{\sigma-\pi} = \left[ 1 + \sum_{k \neq i, j} f_{ik}^c(r_{ik}) G(\cos(\theta_{ijk})) e^{\lambda_{ijk}} + P_{ij}(N_i^C, N_i^H) \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (7)$$

$$\pi_{ij}^{RC} = F_{ij}(N_i^l, N_j^l, N_{ij}^{conj}), \quad (8)$$

$$b_{ij}^{DH} = T_{ij}(N_i^l, N_j^l, N_{ij}^{conj}) \left[ \sum_{k \neq i, j} \sum_{l \neq i, j} (1 - \cos^2(\Theta_{ijkl})) f_{ik}^c(r_{ik}) f_{jl}^c(r_{jl}) \right], \quad (9)$$

где  $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$  – расстояние между  $i$ -ым и  $j$ -ым атомами,  $b_{ij}^{\sigma-\pi}$  – показатель взаимного расположения трёх атомов,  $G_c(\cos(\theta_{ijk}))$  – функция угла, образованного тремя атомами,  $\pi_{ij}^{RC}$  – корректирующий показатель материала,  $b_{ij}^{DH}$  – показатель взаимного расположения четырёх атомов,  $P_{ij}(N_i^C, N_i^H)$ ,  $F_{ij}(N_i^l, N_j^l, N_{ij}^{conj})$ ,  $T_{ij}(N_i^l, N_j^l, N_{ij}^{conj})$  – функции, интерполирующие экспериментальные данные, величина  $f^c(r)$  ограничивает расстояние межчастичного взаимодействия.

Применение таких потенциалов требует разработки специальных подходов к программной реализации параллельных алгоритмов на GPU с адаптацией к специфике решаемых задач.



Во второй главе представлены методы разработки программ для молекулярно-динамического моделирования на графических процессорах. Процесс проектирования программного обеспечения разбивается на три этапа: выбор основы проекта, добавление основного функционала, добавление внешнего функционала. На первом этапе выбирается шаблон CUDA, который соответствует поставленной задаче. Производитель NVIDIA предоставил широкий набор шаблонов; выбор одного из них обеспечит длительную поддержку и полную совместимость с аппаратным обеспечением и операционными системами. На втором этапе в проект включается основной функционал. На третьем этапе в проект добавляется дополнительный функционал на уровне кода или совместимых модулей. Описанный процесс можно представить следующей схемой (рис. 1).

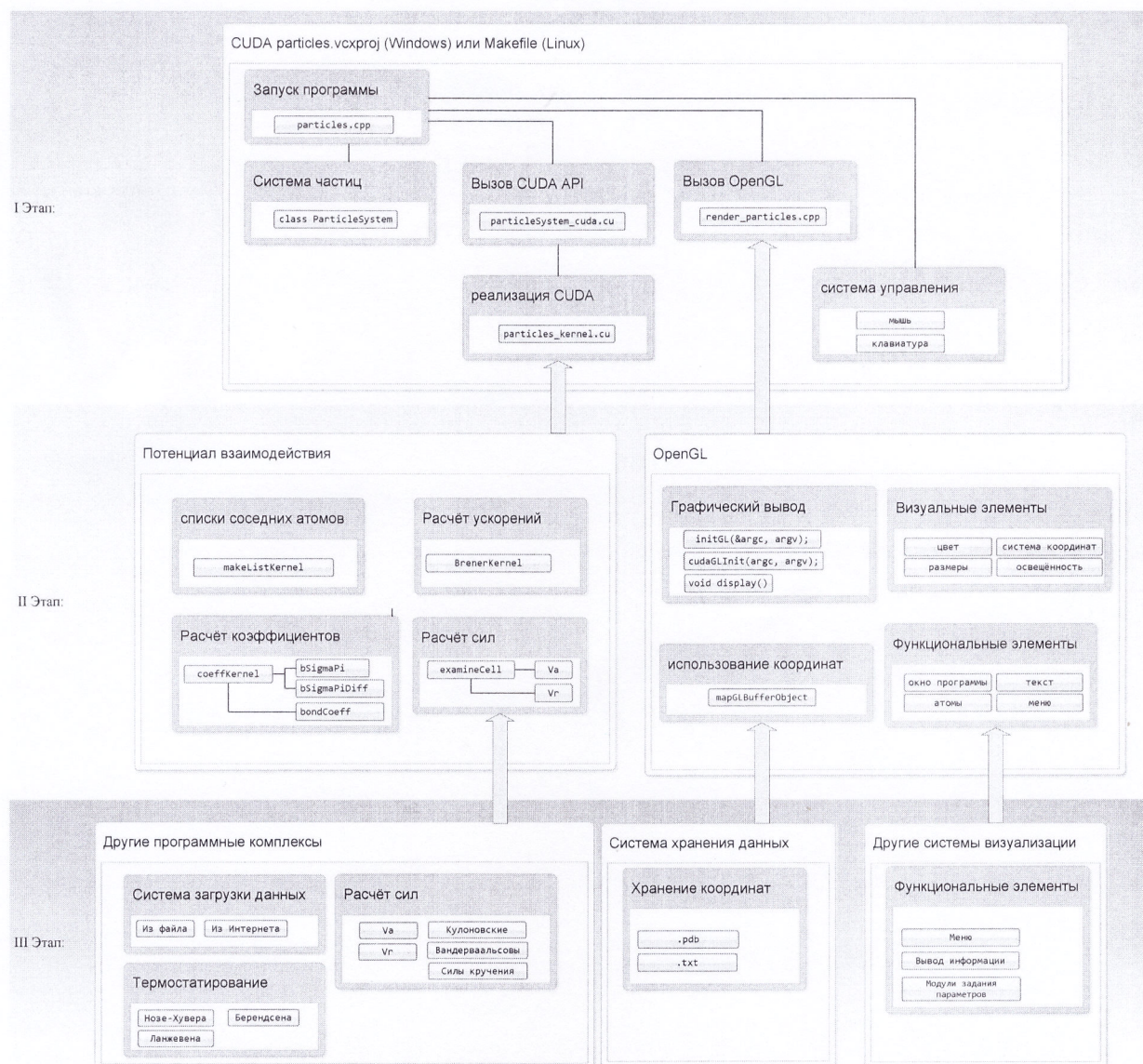


Рис. 1. Схема процесса разработки взаимодействующих компонент программы

Предложен подход к повышению эффективности параллельных вычислений на графических процессорах за счёт использования гибридной модели расчётной области для численного решения уравнений динамики частиц. Используется комбинация ячеистой модели и составления списка соседей для каждого атома. Применение такой модели позволяет, с одной стороны, достичь вычислительной сложности  $O(N)$  в наиболее затратной по времени части вычислительного процесса, а с другой стороны, добиться бесконфликтного доступа к памяти.

Особенности доступа к памяти при программировании на GPU показаны на рис. 2.

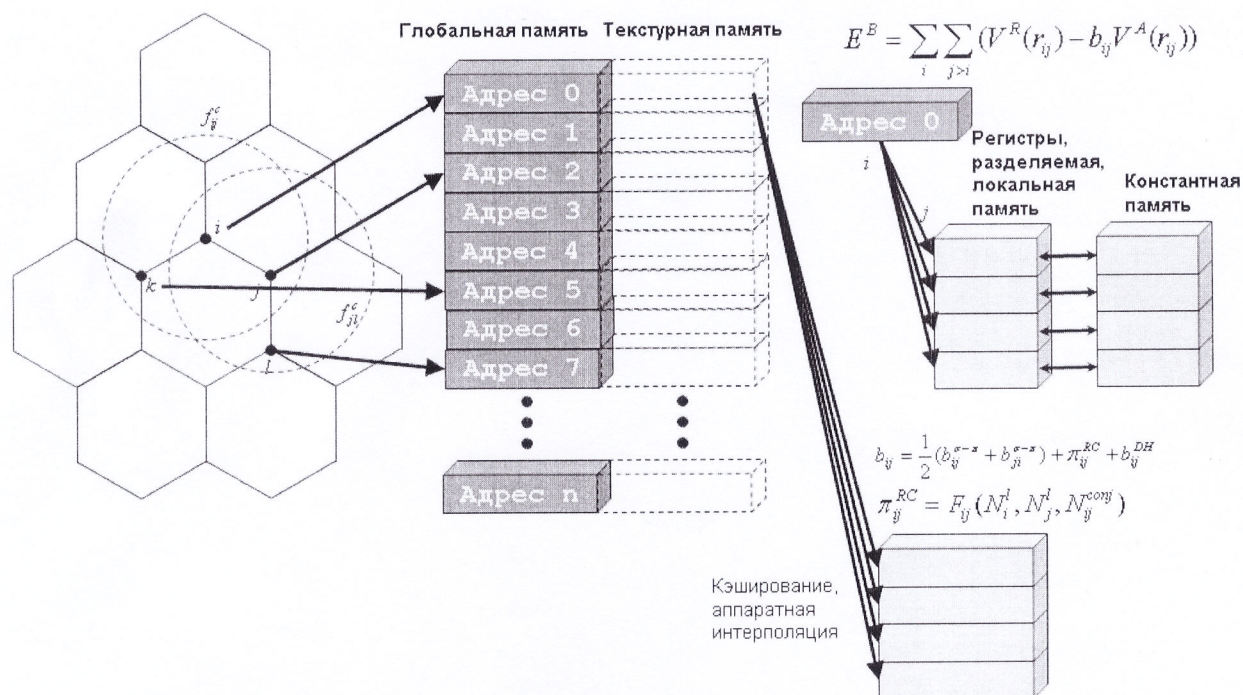


Рис. 2. Схема использования памяти GPU при вычислениях сил в потенциальном поле

Представлена эффективная реализация алгоритмов молекулярно-динамического моделирования систем со сложным потенциалом межчастичного взаимодействия на видеокартах.

Схема скоростей Верле разбивается на две части: выполнение операций обновления координат и скоростей, вычисления сил, действующих на атомы, и ускорений. Для процедуры обновления координат подбирается максимальное число вычислительных потоков в блоке.

Доступ к памяти улучшается за счёт сортировки элементов. Вычислительные потоки записывают результаты в один массив одновременно, при следующем обращении к памяти они используют весь массив необходимых значений.

Вычисление сил разбивается на два этапа: вычисление сложных коэффициентов потенциала межатомного взаимодействия с их сохранением в дополнительную память и использование готовых коэффициентов для суммирования сил со стороны всех атомов. Такой подход позволяет избежать блокирования доступа к памяти для параллельных потоков вычислений. Предложен эффективный подход к реализации вычисления потенциала межатомного взаимодействия на GPU. Основной задачей является обеспечение наиболее эффективного доступа к памяти. Для этого выделяется дополнительная память и переменные, которые хранят копии координат до 8 соседних атомов. Из функции вычисления сил выносятся расчёт коэффициентов, так что вычислительно сложная часть операций перенесена в специальную функцию. Затратная по времени функция составления списка соседних атомов оперирует значениями хеш-функции и дополнительной памятью, после построения списка расположение координат атомов оказывается выровненным в памяти, и не возникает перекрёстного доступа на следующих этапах. Можно сформулировать следующее утверждение.

Утверждение.

Алгоритм расчёта атомных сил с выделением дополнительной памяти для хранения списка взаимодействующих атомов имеет вычислительную сложность  $O(\frac{N}{P})$ , где  $P$  – число ядер графического процессора.

Докажем это. Согласно предлагаемому алгоритму число потоков устанавливается равным числу элементов  $N$ . При вычислениях на GPU имеет место пропорциональная зависимость затрат времени от загруженности памяти. Использование ограничивающей функции приводит к увеличению памяти в фиксированное количество раз, зависящее только от  $s$  – числа ковалентных связей, и не зависящее от числа атомов в системе. Учитывая введение дополнительной памяти в количестве  $m$  ячеек, вычисления с известными значениями  $b_{ij}$  потребуют  $s \cdot m \cdot N$  условных единиц времени. Вычисления за счёт функции ограничения потребуют  $s^3 \cdot N$ . Общее число условных единиц времени составит  $s^3 \cdot N + s \cdot m \cdot N$ . За счёт реализованных методов у каждого потока вычислений есть набор данных и инструкций, одному потоку вычислений нет необходимости ожидать, пока другой поток подготовит данные для расчёта (рис. 3).  $N$  потоков выполняются на  $P$  процессорах, что даёт сложность  $(s^3 + sm) \frac{N}{P}$ .

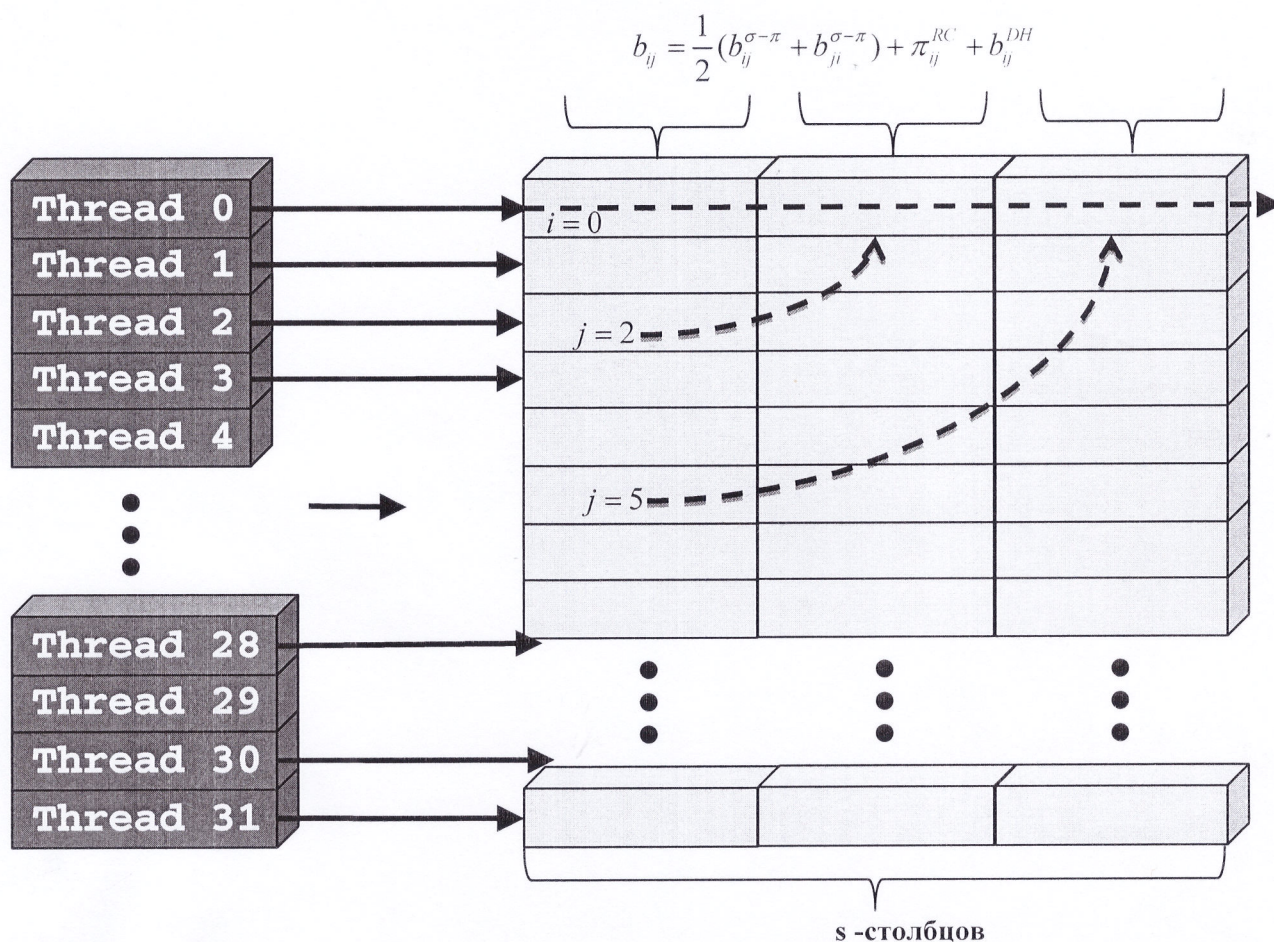


Рис. 3. Организация бесконфликтных запросов памяти при вычислении потенциала Бреннера

Создан авторский комплекс программ для молекулярно-динамического моделирования наносистем, разработанный по описанной выше технологии.

Описаны принципы взаимодействия различных программ на нескольких уровнях: расчётном, ввода, вывода, обмена данных, отображения и визуализации. Уровень ввода, вывода, обмена данных предполагает взаимодействие программ, поддерживающих форматы хранения данных XYZ, NAMD, LAMMPS, pdb. Расчётный уровень предполагает взаимодействие с программами NAMD, LAMMPS таким образом, что выполняется совместимый программный код. Уровень визуализации предполагает взаимодействие с программами OVITO, VMD.

**В третьей главе** представлены результаты вычислительных экспериментов по моделированию наноструктур на графических процессорах. Для проведения расчётов использовался разработанный автором программный комплекс.

В качестве примера рассмотрен материал графен, который находит всё большее применение в различных отраслях современной индустрии. Влияние

числа потоков в элементарном вычислительном блоке на время расчёта показано в таблице 1, время измерено в задаче моделирования листа графена, содержащего 6720 атомов на аппаратном обеспечении Intel Core i5-4200U, 1.6 ГГц, 2 ядра, 12 Гб RAM, nVidia GeForce 840M (384 ядра) под управлением ОС Windows 8.1. Максимальные значения числа вычислительных потоков в блоке: [1024, 1024, 64].

Таблица 1. Время выполнения функций (микросекунды) в зависимости от параметров инициализации GPU.

	Число потоков в блоке					
	[32,1,1]	[64,1,1]	[128,1,1]	[256,1,1]	[512,1,1]	[1024,1,1]
Обновление координат и скоростей по алгоритму скоростей Верле	-	-	20	-	-	-
Вычисление хэш-функции	21	23	23	23	24	23
Выравнивание данных	68	75	71	75	72	73
Сортировка	-	-	-	-	-	140
Формирование списка соседних атомов	2795	2600	2600	2855	2820	3045
Вычисление коэффициентов потенциала	2630	2640	2650	2680	3165	-
Вычисление сил, ускорений	260	260	262	263	269	-

В таблице 2 приведены оптимальные параметры конфигурации запуска вычислений на графических процессорах. Для каждой функции устанавливаются независимые параметры конфигурации, значения которых соответствуют логическому представлению вычислительных потоков в блоке. Реализованные методы выравнивания памяти и использование объединённых переменных позволяют задавать одномерную конфигурацию блоков, что имеет более простое логическое представление данных.

Общий прирост ускорения при оптимальном выборе числа вычислительных потоков достигает 13.3%. Здесь же представлены показатели затрат времени выполнения различных функций в процентах от общего времени одного шага для образца из 6720 атомов. Из таблицы видно, что 91% времени требуется для расчёта потенциала и обновления списка соседних атомов. Отметим, что этап сортировки имеет вычислительную сложность  $\alpha N \log N$ , но даёт незначительный вклад в общее время вычислений.

Таблица 2. Оптимальные конфигурации запуска вычислений на графических процессорах.

	Конфигурация вычислительных потоков	Прирост эффективности, %	Доля вычислительного времени на одном шаге, %
Обновление координат и скоростей по алгоритму скоростей Верле	[128,1,1]	-	0.4
Вычисление хэш-функции	[32,1,1]	12.5	0.4
Выравнивание данных	[32,1,1]	9.3	1.2
Сортировка	[1024,1,1]	-	2.3
Формирование списка соседних атомов	[128,1,1]	14.6	43.1
Вычисление коэффициентов потенциала	[32,1,1]	15.3	44.1
Вычисление сил, ускорений	[32,1,1]	3.3	4.3

В качестве примера, позволяющего продемонстрировать методы работы с памятью, рассмотрено моделирование фуллерена. В фуллерене каждый атом имеет три соседних, таким образом, задействованы все параметры потенциала, такие как угловая функция, двугранные углы, корректирующие значения связности. В отличие от пространственно вытянутого листа графена такая структура имеет компактное расположение атомов. Применение хэш-функции и сортировки при условии использования 16 вычислительных потоков в блоке и 64 ячейках памяти позволило уменьшить число перекрёстных запросов к памяти на 13%.

На рис. 4 представлены данные, полученные с помощью разработанного программного обеспечения и с использованием известного пакета молекулярно-динамического моделирования LAMMPS. Моделирование проводилось применительно к задаче теплопереноса в листе графена на аппаратном обеспечении Intel Xeon CPU E5-2650, 2.00 ГГц, 32 ядра в ОС, 128 Гб RAM, NVIDIA Tesla M2075 (448 ядер), NVIDIA Quadro 4000 (256 ядер) под управлением ОС Centos 6.2. Максимальные значения числа вычислительных потоков в блоке: [1024, 1024, 64].

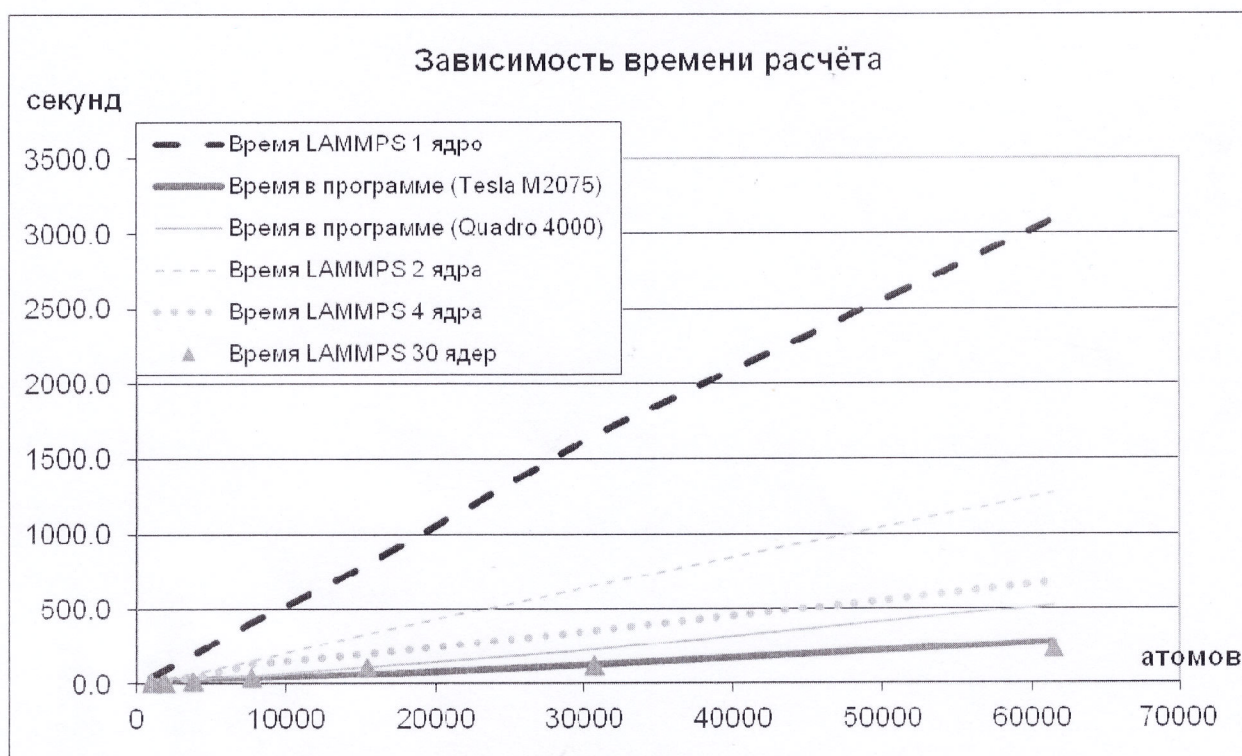


Рис. 4. Зависимость времени расчёта от числа частиц

Можно видеть, что разработанный подход с использованием вычислений на графических процессорах одной видеокарты позволяет существенно повысить производительность в сравнении с вычислениями LAMMPS на многопроцессорных машинах вплоть до 32 ядер.

**В четвёртой главе** с использованием разработанного программного обеспечения решается задача моделирования теплопроводности в углеродных наносистемах. Основным интересом представляют аномальные режимы теплопроводности, наблюдаемые для ряда материалов при низких температурах. В вычислительных экспериментах по центру образцов (графеновые листы) подводится тепловой импульс, после чего моделируется его распространение вдоль наноструктуры (одномерная постановка). По изменению температурного профиля определяется характер распространения тепла. В отличие от классической теплопроводности, характеризующейся линейной зависимостью среднего квадрата ширины температурного профиля от времени, в аномальных процессах наблюдается отклонение от линейного закона и появление дробного показателя степени  $p$ ,  $\langle r^2 \rangle \sim t^p$ . При этом возможны режимы «супердиффузии» ( $1 < p < 2$ ) и «субдиффузии» ( $0 < p < 1$ ), связанные соответственно с прыжковым механизмом переноса и наличием ловушек в среде. Для теплопроводности углеродных наноструктур характерен первый вариант, обусловленный баллистическим механизмом фононного переноса энергии.

Типичные картины распределения температуры по длине образца показаны на рис. 5 для начальной средней температуры листа в 16К.

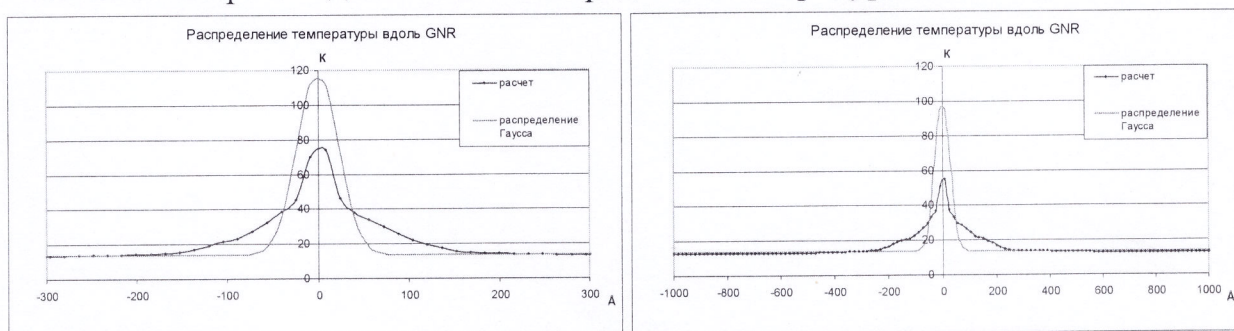


Рис. 5. Распространение теплового импульса в листе графена при температуре  $T=16\text{K}$

При обработке полученных распределений температуры применяются методы оценки параметра  $p$  по среднеквадратичному отклонению и по спаду максимума температурного пика. Однако с повышением температуры образца применение данных оценок затруднено из-за наличия шума. В этой связи предложен способ определения параметра  $p$  на основе выделения значимой с точки зрения энергосодержания части теплового импульса.

Такой подход позволил провести анализ режимов теплопроводности, возникающих в листе графена, в диапазоне температур от 16К до 400К. График зависимости параметра  $p$  от температуры представлен на рис. 6. Видно, что при низких температурах наблюдается аномальный режим теплопроводности.

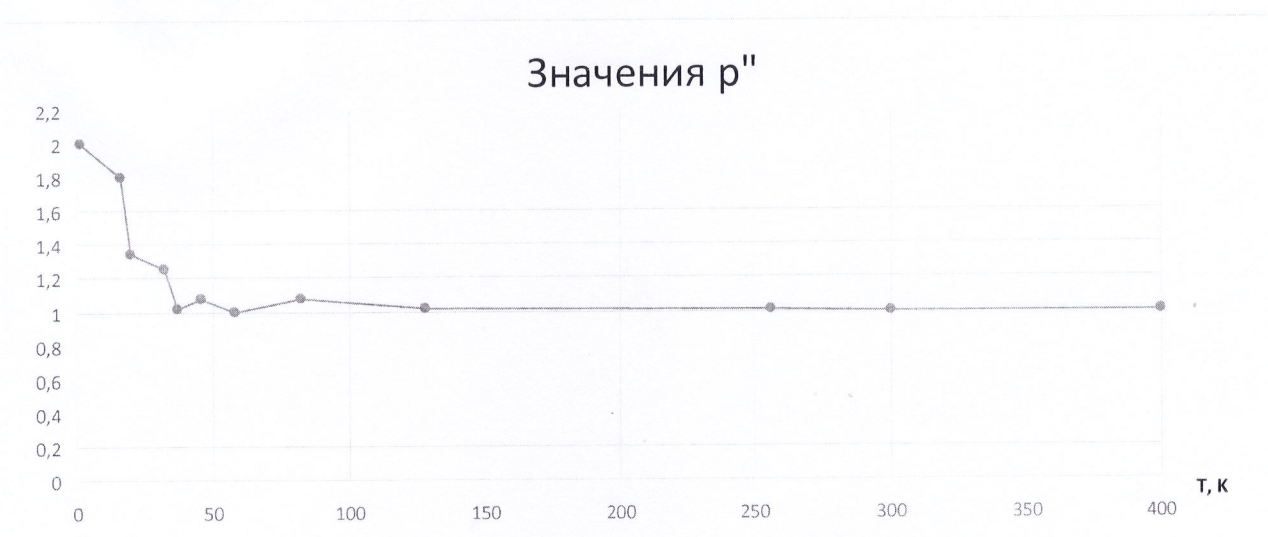


Рис. 6. Значения параметра  $p$  в диапазоне температур от 16К до 400К

Явление одномерного распространения тепла в исследованных наноструктурах можно описать математической моделью, основанной на дробно-дифференциальном уравнении теплопроводности:



$$\frac{\partial^\gamma u(x,t)}{\partial t^\gamma} = D \frac{\partial^\alpha u(x,t)}{\partial x^\alpha}, \quad (10)$$

где  $u(x,t)$  – температура,  $D$  – коэффициент температуропроводности ( $D > 0$ ),  $\alpha$  и  $\gamma$  – параметры, характеризующие порядок дробных производных по пространству и времени соответственно.

Для решения данного уравнения разработаны различные численные методы, в том числе конечно-разностные методы и метод случайного блуждания.

В качестве примера приведём результаты сравнения распределений температуры, полученных для листа графена при 16К методом молекулярно-динамического моделирования, с решением соответствующего дробно-дифференциального уравнения с параметрами  $\gamma=1$ ,  $\alpha = \frac{2\gamma}{p''} = \frac{2}{1.81} = 1.10$  и  $D=0.17$ . На рис. 7 показаны температурные профили в момент времени 7 пс.

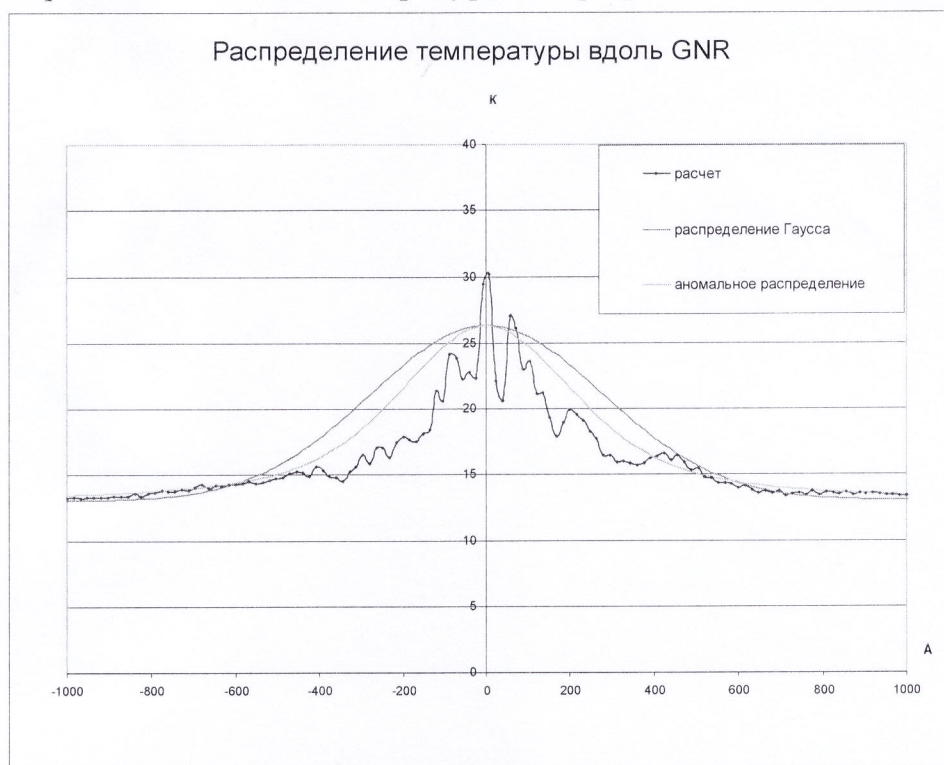


Рис. 7. Графики распределения температуры вдоль листа графена при температуре 16К

Можно видеть, что дробно-дифференциальная модель описывает возникающее распределение температуры более точно по сравнению с классической моделью теплопроводности (распределение Гаусса).

Отметим, что в режимах нормальной теплопроводности разработанный подход к обработке результатов молекулярно-динамического моделирования позволил получить температурные зависимости коэффициентов теплопроводности листов графена и нанотрубок, согласующиеся с известными экспериментальными и расчётными данными.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

1. Разработана технология построения программных средств для молекулярно-динамического моделирования наносистем со сложными потенциалами межчастичного взаимодействия на графических процессорах. Данная технология позволяет масштабировать программный комплекс на современные вычислители NVIDIA, что обеспечивает возможность увеличения производительности вычислений без изменения кода. Разработаны методы отображения вычислительных процессов на архитектуру видеокарт, способы наследования классов в технологии CUDA, обеспечивающие возможность оснащения программ новыми потенциалами межчастичного взаимодействия без модификации основного кода.
2. Предложены подходы к повышению эффективности параллельных вычислений на графических процессорах, включающие использование гибридной модели расчётной области, методы размещения данных в памяти видеокарты с целью минимизации конфликтов доступа при параллельном обращении, оптимальное распределение операций по вычислительным потокам, выделение дополнительной памяти для создания копий координат взаимодействующих атомов. Дана оценка вычислительной сложности алгоритмов. На представительном ряде задач показана эффективность разработанных подходов.
3. На основе разработанной технологии программирования создан комплекс программ молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах. Разработаны методы и средства визуализации результатов вычислительного процесса в реальном времени, методы интеграции программного обеспечения с имеющимися программными комплексами молекулярно-динамического моделирования.
4. С использованием разработанного программного обеспечения исследованы вопросы моделирования теплопроводности углеродных наносистем. Для описания аномальных режимов теплопроводности предложен подход, основанный на сочетании методов молекулярной динамики и дробно-дифференциального исчисления. Представлен алгоритм определения параметров макроскопической модели по данным молекулярно-динамического моделирования. Таким образом, установлена связь между различными масштабами в описании аномальной теплопроводности.

## ОПУБЛИКОВАННЫЕ РАБОТЫ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

### Статьи в научных журналах из перечня ВАК РФ

1. Ревизников Д.Л., Семенов С.А. Особенности молекулярно-динамического моделирования наносистем на графических процессорах. // Программная инженерия, 2013, С. 31-35.
2. Семенов С.А. Использование графических процессоров в молекулярно-динамическом моделировании. // Электронный журнал труды МАИ, 2013, № 65, С. 1-6.
3. Семенов С.А. Реализация гибридного алгоритма молекулярно-динамического моделирования на графических вычислителях. // Научно-технический вестник Поволжья, 2013, № 6, С. 415-422.
4. Семенов С.А., Ревизников Д.Л. Эффективное использование программируемых графических процессоров в задачах молекулярно-динамического моделирования. // Системы и средства информатики, 2017, № 4.

### Материалы научных конференций

5. Медведев А.А., Масленников А.А., Магидович С.С., Колесник С.С., Семенов С.А. Особенности построения и использования Beowulf-кластера гибридных вычислительных систем. // Московская молодёжная научно-практическая конференция «Инновации в авиации и космонавтике – 2012». Сборник тезисов докладов. – М.: ООО «Принт-салон», 2012, С. 69-70.
6. Ревизников Д.Л., Семенов С.А. Оптимизация алгоритмов молекулярно-динамического моделирования для параллельных расчётов наносистем на графических процессорах. // Материалы IX конференции по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ 2012). – М.: Издательство МАИ, 2012, С. 510-512.
7. Семенов С.А. Разработка программы молекулярно-динамического моделирования на графических процессорах. // Сборник материалов XI международной конференции «Авиация и космонавтика – 2012». – М.: 2012, С. 397-398.
8. Семенов С.А. Вычисление градиента потенциала Бреннера на видеокартах в задачах молекулярной динамики наноструктур. // Труды 55-й научной конференции МФТИ «Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук». Том 2. Управление и прикладная математика. – М.: МФТИ, 2012., С. 83-85.

9. Семенов С.А. Измерение и сравнение скорости вычислений на GPU в задачах молекулярной динамики. // Материалы XVIII международной конференции по Вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2013). – М.: Изд-во МАИ, 2013, С. 134-136.
10. Семенов С.А., Сластушенский Ю.В. Ускорение вычислений в задачах моделирования динамики частиц с помощью графических процессоров. // Сборник материалов 15-й международной конференции «Авиация и космонавтика – 2016». – М.: Люксор, 2016., С. 397-398.
11. Семенов С.А., Сластушенский Ю.В., Ревизников Д.Л. Численный анализ режимов теплопроводности в углеродных наноструктурах. // Сборник материалов 16-й международной конференции «Авиация и космонавтика – 2017».