

Применение суперкомпьютеров для молекулярно-динамического моделирования процессов в конденсированных средах *

А.В. Янилкин, П.А. Жилияев, А.Ю. Куксин, Г.Э. Норман, В.В. Писарев, В.В. Стегайлов

В работе обсуждается использование метода классической молекулярной динамики на суперкомпьютерах. Исследована эффективность распараллеливания пакета LAMMPS вплоть до 8 тыс. 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.

1. Введение

Область применения суперкомпьютеров для расчетов методом классической молекулярной динамики (МД) определяется возможностью распараллеливания и развитием МД моделей различных процессов. В данной работе исследуется параллельная эффективность пакета LAMMPS [1] вплоть до 8 тыс. ядер (МВС-100К МСЦ РАН) и применение его 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 проведения 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⁻¹ 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); зарождение и рост полостей (разрушение) [3–5].

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 [6].

*Расчеты выполнены в МСЦ РАН и на кластере МФТИ-60 кафедры информатики МФТИ (ГУ). Работа поддержана по гранту РФФИ 09-08-12161-офи-м, программам фундаментальных исследований РАН № 1, 2 и контракту с Sandia National Laboratories в рамках U.S. DOE/NNSA Advanced Simulation and Computing program.

2. Выбор оптимального числа процессоров и времени расчета

2.1. Эффективность распараллеливания МД задач

Для каждого фиксированного размера системы определялось время расчета 100 шагов, запускаемой на различном числе ядер (PEs) от 1 до 1000 в случае потенциала LJ и от 1 до 7200 в случае алюминия. Эффективность параллелизации определяется ускорением вычислений, которое рассчитывалась как отношение времени расчета на одном процессоре t_1 к реальному времени расчета t_{PEs} . Результаты представлены на рис.1. Для небольших размеров систем ($N=32000$) 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 256000 , $2 \cdot 10^6$, $1.6 \cdot 10^7$, $1.3 \cdot 10^7$, $1.3 \cdot 10^8$. 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 тыс. ядрах.

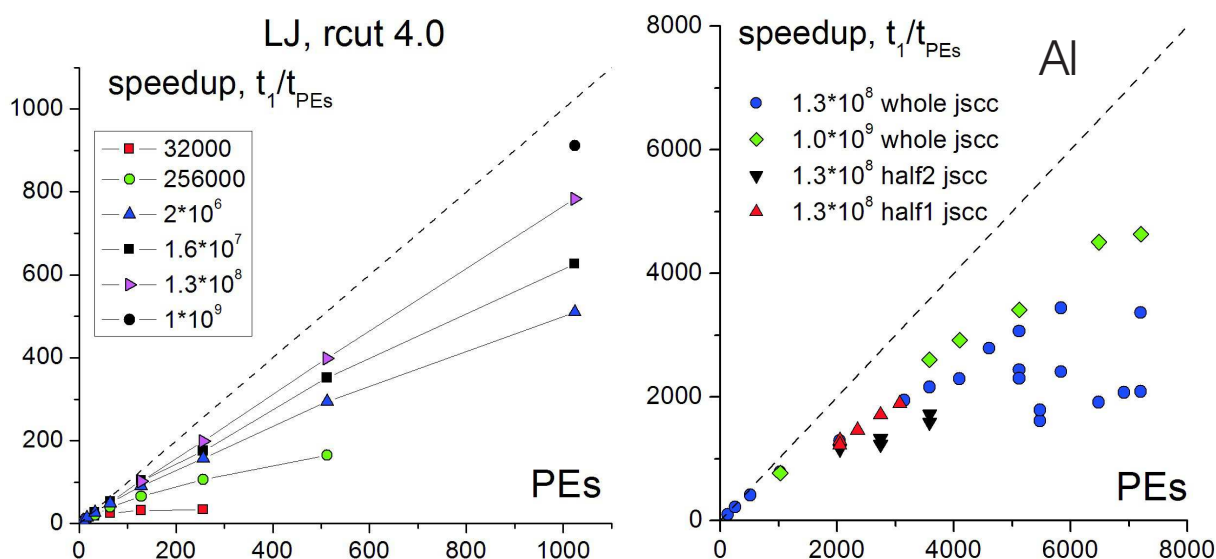


Рис. 1. Зависимость ускорения от числа ядер для различных размеров систем: точки - алюминий (EAM), пунктир - идеальное ускорение.

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 критерии эффективного использования. В данном случае мы использовали критерий, основанный на времени обмена $t_{comm}/t_{full} = 20\%$, где t_{comm} - время обмена, t_{full} - общее время расчета. В соответствии с этим критерием для данного размера системы (числа атомов) определена область эффективного использования рис.2.

Таким образом, кривая эффективности определяет нижнюю границу по используемому числу атомов. С другой стороны увеличение числа частиц требует все больший объем оперативной памяти. В связи с этим возникает вторая кривая, ограничивающая число атомов сверху. В нашем случае 1Гбайт 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: 10^{12} атомов, взаимодействующих по потенциалу LJ. Расчет был проведен на суперкомпьютере BlueGene. Сравнение показывает, что существующая архитектура позволяет проводить подобные расчеты

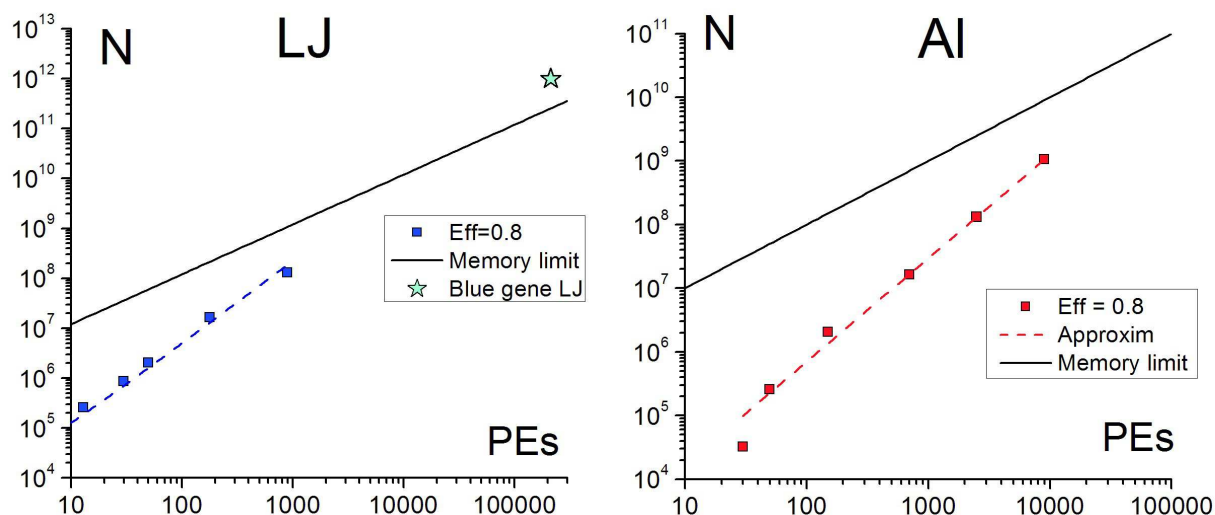


Рис. 2. График число частиц - число ядер. Точками показаны расчеты с эффективностью 80%. Сплошная кривая - ограничение по оперативной памяти. Для сравнения приведен максимальный на сегодняшний день расчет на суперкомпьютере BlueGene.

с высокой эффективностью, но требует увеличения объема оперативной памяти.

2.2. Время расчета

Отдельный интерес для планирования расчетов представляет время расчета одного шага интегрирования (рис.3).

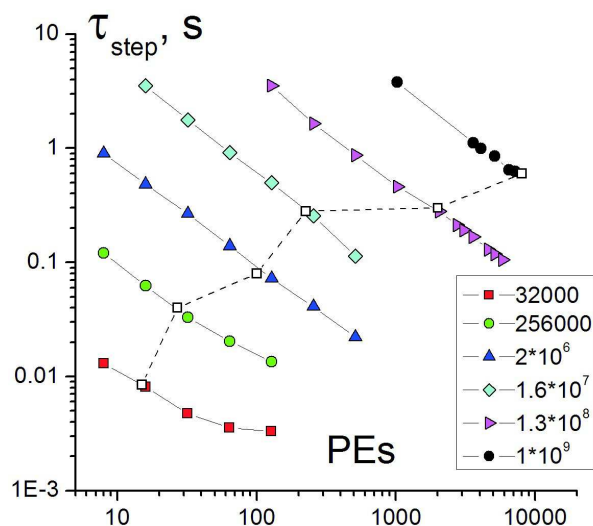


Рис. 3. Зависимость времени расчета одного шага от числа используемых ядер для различных размеров систем. Открытыми точками и пунктиром показана граница области эффективности расчета 80%.

На основании такого графика 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 $\tau_{step} = 1$ сек. Большинство физических процессов, рассматриваемых с помощью классического метода молекулярной динамики, протекают за времена, значительно больше 1 пс, поэтому будем рассматривать эту величину как наименьшую. Длительность стан-

дартного шага интегрирования составляет 1 фс или 0.001 пс. Тогда за один час машинного времени (3600 сек) при полной загрузке можно посчитать 3.6 пс для 1 млрд. частиц. Тогда 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 $r_{c1} < r_{c2} < r_{c3} < \dots$, которой соответствует иерархия $N_1 < N_2 < N_3 < \dots$, где $N_i = nr_{ci}^3$, где 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: фононов 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.

Наряду с иерархией радиусов корреляций, существует 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 , τ_c , λ 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 проведение исследования выбранного свойства, явления и процесса именно в рамках этого соотношения.

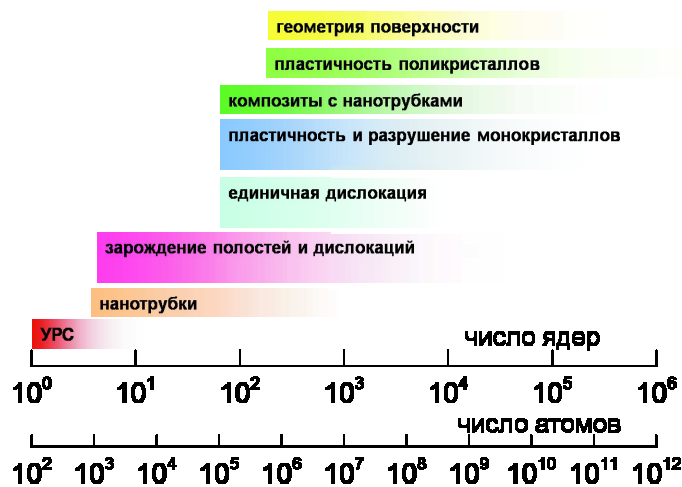


Рис. 4. Число частиц для различных структур и процессов.

Выбор числа частиц определяется рассматриваемым физическим явлениями и структурой. Применительно к физическим задачам, рассматриваемым в данной работе, можно

выделить следующие требования на размер системы рис.4

3. Применение высокопроизводительных расчетов в физике пластичности и прочности

3.1. Пластическое деформирование металлов

Основным механизмом пластической деформации кристаллических материалов 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, препятствия дальнейшему движению. При увеличении приложенных напряжений дислокация отрывается от медного включения. Такой механизм наблюдается для препятствий в виде полости.

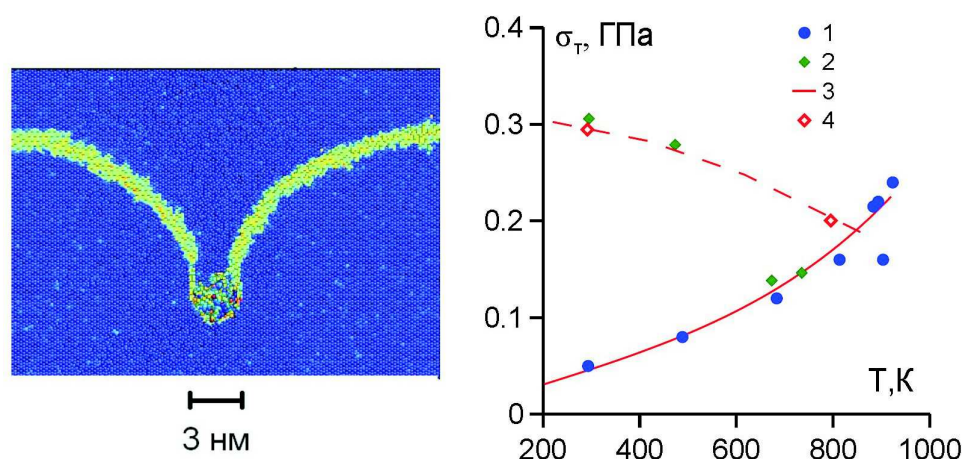


Рис. 5. Показан изгиб дислокации (светлые атомы) в МД модели при ее захвате нановключением в процессе сдвиговой деформации. Размер системы 2 млн. атомов. На графике показана зависимость динамического предела текучести от температуры. Экспериментальные данные: 1 – монокристалл Al, 2 – сплав Д16Т. Данная работа: 3 – монокристалл Al, 4 – сплав Al – 4%Cu.

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 температуры 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 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.

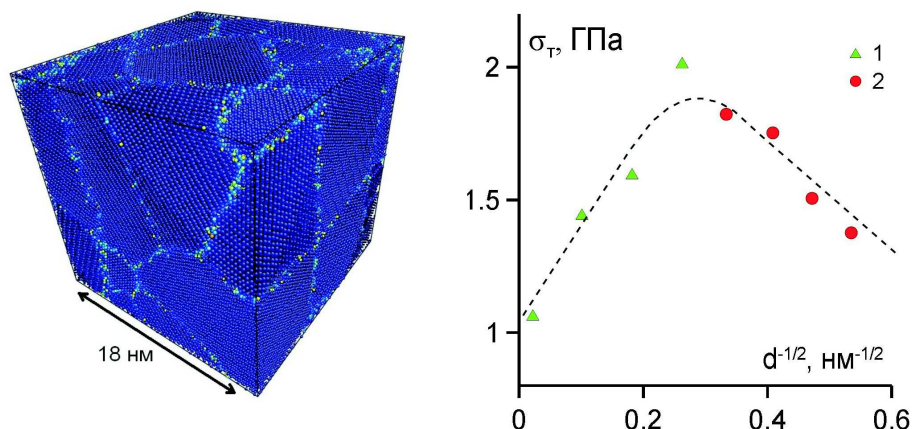


Рис. 6. Показан пример расчетной ячейки МД модели нанокристаллической меди. Светлый цвет атомов выделяет межзеренные границы. На графике показана зависимость предела текучести от размера зерна: 1 – эксперимент, 2 – данная работа (максимум предела текучести при $d = 10$ нм).

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 зернограничным 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).

3.2. Разрыв жидкости

Произведено моделирование разрыва растянутой жидкости (рис.7). Рассмотрен режим растяжения с постоянной скоростью деформирования. Расчеты проводились с использованием пакета LAMMPS. Межатомные взаимодействия описывались потенциалом Леннарда-Джонса (радиус обрезания потенциала 4σ , скин-радиус для списка Верле 0.3σ , число соседей в сфере взаимодействия 125). Параметры потенциала подобраны, чтобы моделировать жидкий гексан: $\epsilon/k = 413$ К, $\sigma = 5.9\text{\AA}$. Моделируемая система содержала 64 млн. частиц.

Важным требованием для моделирования разрыва является то, чтобы за время 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 с⁻¹ в системе, содержащей 512 тыс. частиц, успевает зародиться ≈ 100 полостей. Чтобы такое же число полостей образовалось при скорости растяжения $2 \cdot 10^8$ 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 $5 \cdot 10^8$ с⁻¹. Таким образом, для моделирования разрыва жидкости при скоростях растяжения $10^8 - 10^9$ с⁻¹ необходимы

молекулярно-динамические расчёты очень длинных траекторий (сотни тысяч шагов при шаге интегрирования ≈ 1 фс) для очень большого числа частиц.

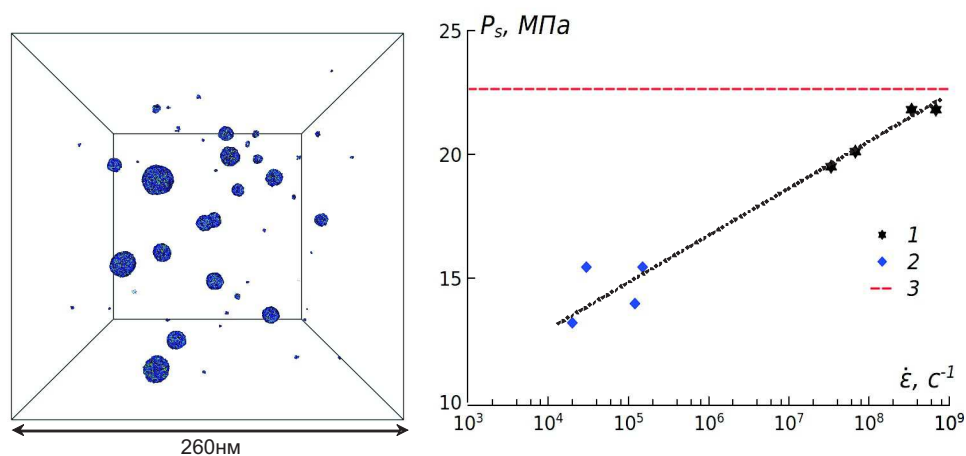


Рис. 7. Снимок расчётной ячейки (показаны только частицы на поверхности полостей). Зависимость прочности жидкого гексана от скорости растяжения. 1 - МД, 2 - эксперимент, 3 - спинопаль жидкость-пар.

Расчеты проводились в выделенном режиме на суперкомпьютерном кластере МВС-100К МСЦ РАН. Для расчетов использовались до 3400 вычислительных ядер. Расчёт 20 тыс. шагов занимал около 6000 сек. при использовании 3000 ядер. 1 ядро, таким образом, выполняет около 60 тыс. 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 расчётах с таким числом частиц проблемой является большой размер файлов конфигурации. Так, в наших расчётах 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 3 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 тыс. частиц на каждом шаге, файлы при этом имеют размер несколько мегабайт для каждого запуска (каждый файл содержит конфигурацию на 20 различных шагах интегрирования). Полная конфигурация сохранялась только в двух файлах, которые использовались для запуска новых расчётов.

4. Заключение

В заключение обращается 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 их перспективную архитектуру. Обсуждается предсказательная сила молекулярного моделирования и его соотношение с натурными испытаниями в инженерной практике.

Литература

1. Plimpton S.J. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. // J.Comp.Phys. -1995. -Vol. 117, -P. 1-19.
2. Germann T.C., Kadau K. Trillion-atom molecular dynamics becomes a reality. // International Journal of Modern Physics C -2008. -Vol. 19, -P. 1315-1319.
3. Куксин А.Ю., Стегайлов В.В., Янилкин А.В. Молекулярно-динамическое моделирование динамики краевой дислокации в алюминии // Доклады Академии Наук. -2008. -Т. 420, -P. 467-471.
4. Куксин А.Ю., Янилкин А.В. Кинетическая модель разрушения при высокоскоростном растяжении на примере кристаллического алюминия // Доклады Академии Наук. -2007. -Т. 413, -С. 615-619.
5. Kuksin A. Yu., Norman G. E., Stegailov V. V., and Yanilkin A. V. Molecular Simulation as a Scientific Base of Nanotechnologies in Power Engineering // Journal of Engineering Thermophysics. -2009. -Vol. 18, -P. 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 // In Shock Compression of Condensed Matter - 2009, Ed. By M.D. Furnish et al. American Institute of Physics, New York. 2009.