

Адаптация пакета *spsim* для расчета дифракции отдельных молекул на графических процессорах

С.А. Бобков

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Лазеры на свободных электронах нового поколения, такие как XFEL в Гамбурге, позволят получать дифракционные изображения отдельных молекул. Однако XFEL находится в процессе строительства, и для разработки алгоритмов анализа таких изображений необходимо иметь возможность проверять новые подходы на данных моделирования. Программы для моделирования, используемые в различных институтах, разрабатываются и используются в закрытом режиме. Когда появилась необходимость в проверке гипотез на модельных данных, возникла проблема с получением необходимого количества наборов дифракционных изображений. В свободном доступе существует лишь одна программа, реализующая физически корректный расчет дифракционных изображений для лазеров на свободных электронах – *spsim* [1]. Пакет *spsim* реализует физически корректный расчет дифракции молекул в лазерах на свободных электронах, поддерживает широкий диапазон настроек эксперимента. В тоже время, *spsim* использует распространённый формат *.pdb для определения структуры. Однако данный пакет использует для расчета центральный процессор.

В данной работе алгоритмы расчета были перенесены на архитектуру CUDA, увеличив быстродействие более чем на порядок, что позволяет моделировать около 1000 дифракционных изображений в час на обычном персональном компьютере. Адаптированный код включает в себя функции расчета интеграла электронной плотности при рассеянии и расчет телесных углов для отдельных пикселей детектора. При адаптации использовались широкие возможности оптимизации, предоставляемые архитектурой CUDA в области использования памяти [2]. Кроме того, был расширен функционал программы по настройке параметров эксперимента, добавлена поддержка моделирования особенностей строения детектора и влияния защиты детектора от повреждения лазером (*beamstop*). Также появилась возможность для последовательного моделирования серий изображений для случайных ориентаций частицы или равномерного поворота в течение серии.

Результат работы будет использоваться для моделирования наборов дифракционных изображений для проверки гипотез и подходов по анализу результатов экспериментов. Важно, что повышенная производительность сопутствует сохранению полной функциональности по вводу/выводу информации, повторно используется существующий код для работы с широко распространенными форматами молекулярных данных, таких как *.pdb. Адаптация кода затрагивает лишь небольшую часть, которая занимается непосредственным расчетом. Благодаря этому, поведение программы для пользователя и получаемые результаты полностью совпадают с оригинальной программой.

Полученная в результате программа позволит быстро создавать необходимые наборы данных для проверки алгоритмов обработки дифракционных изображений, и, в итоге, значительно ускорит создание систем по анализу результатов экспериментов на лазерах на свободных электронах. Также важно, что данная программа будет доступна для широкого использования, что позволит ускорить исследования перспективной области для новых групп ученых.

Литература

1. Single particle diffraction simulator, SPSIM, Filipe Maia, 2008, <http://xray.bmc.uu.se/hawk/?q=hawk/spsim>
2. Shane Ryoo et al, Optimization principles and application performance evaluation of a multi-threaded GPU using CUDA, Proceedings of the 13th ACM SIGPLAN Symposium on Principles and practice of parallel programming, February 20-23, 2008, Salt Lake City, UT, USA, p. 73-82