

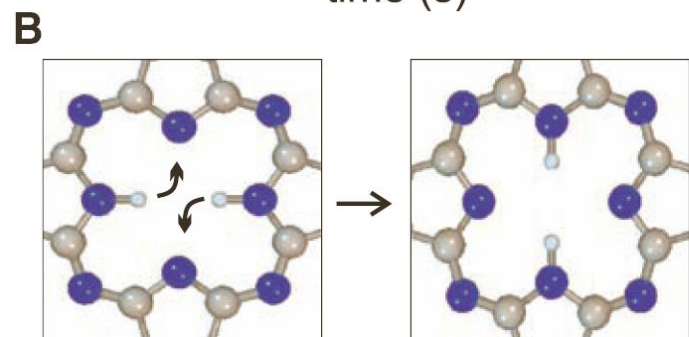
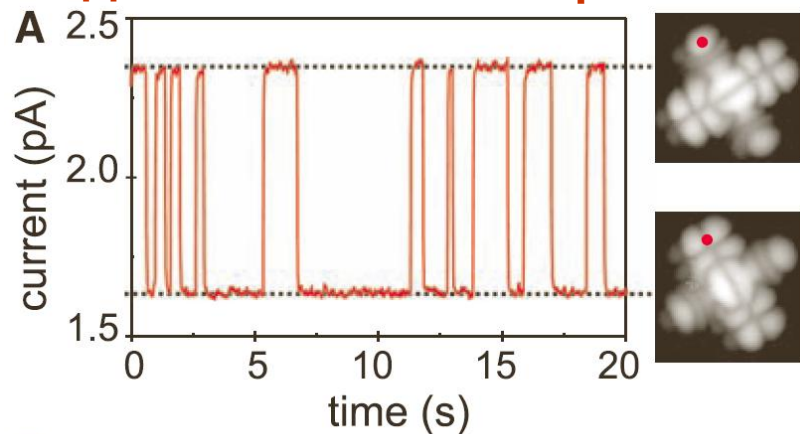
ВМК МГУ

Георгий Шумкин

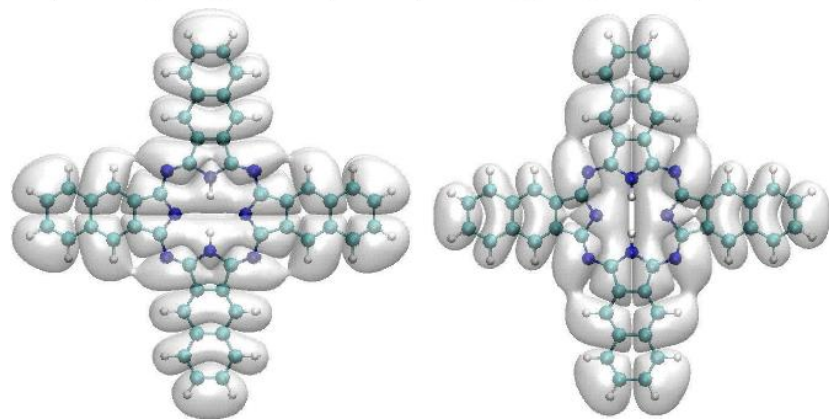
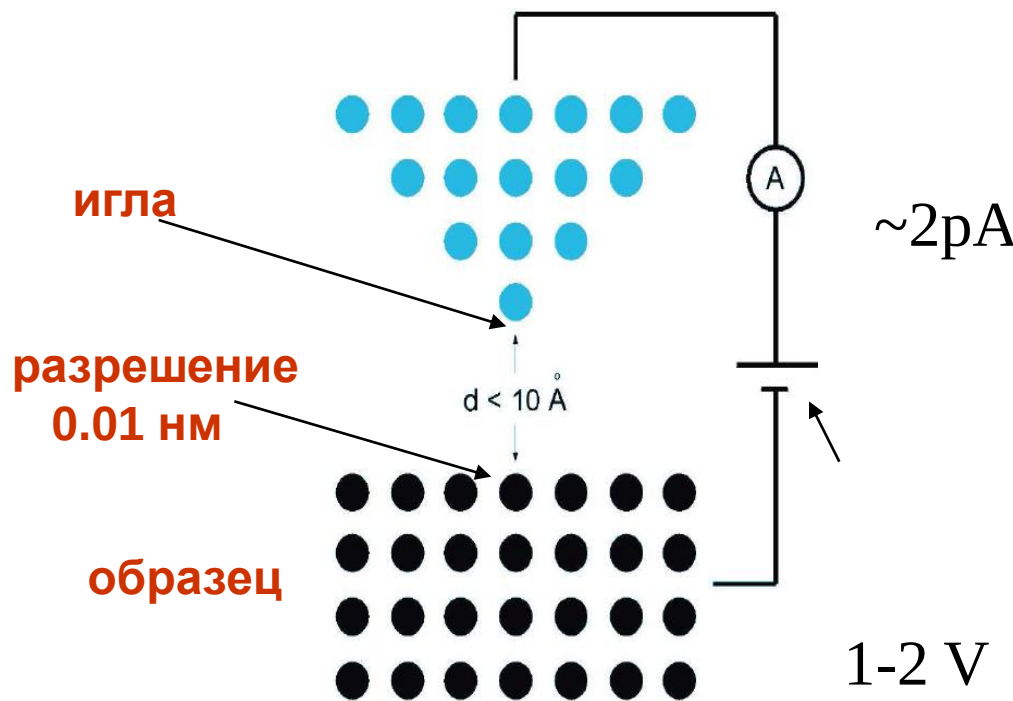
Параллельные вычисления в квантовой молекулярной динамике

Моделирование молекулярного переключателя на основе одной молекулы.
Последние эксперименты 2007 г., IBM, Цюрих.
Логический ключ с размером в молекулу.

Данные СТМ в эксперименте

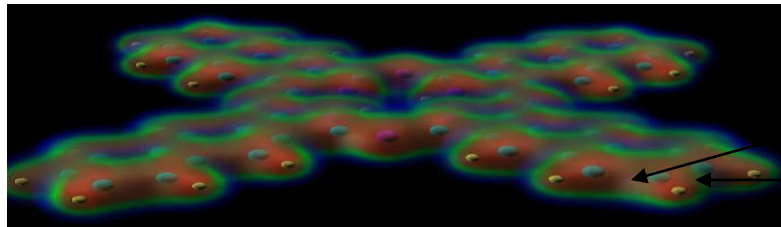


**Схема сканирующего
туннельного микроскопа (СТМ)**



Вычислительные модели “из первых принципов” для наносистем

- Молекулярная динамика из первых принципов FPMD— метод моделирования наносистем. Нет подгоночных параметров. **Проблема многих тел.**



электроны

ядра

Только

кулоновские
взаимодействия

- Вычислительная проблема. Наномасштаб - мезомасштаб (атом — спл.среда)

Куб полиэтилена - размером 100nm – $64 \cdot 10^6$ атомов

Куб железа - в 1nm – 16000 атомов

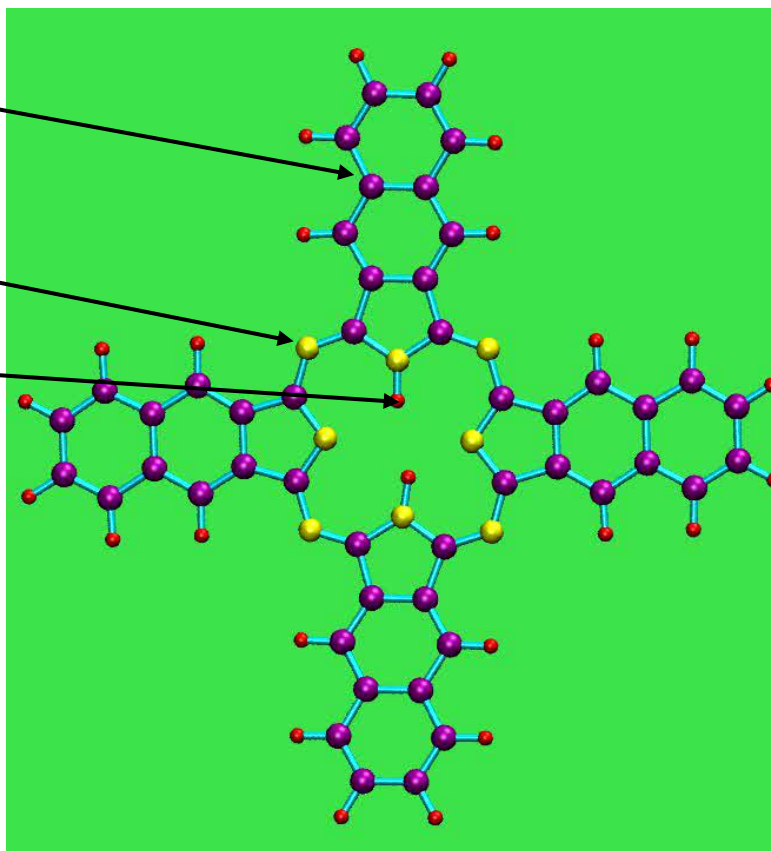
- Квантовомеханическое описание электронов и классическое описание движения атомных ядер
- Подход требует использования суперкомпьютеров и эффективных параллельных вычислений для описания больших молекулярных систем ~ 25000 атомов.
- Масштабируемость FPMD кодов.

**IBM Blue Gene/P установлен на ф-те ВМК МГУ,
имеет 2048 узлов, 27.9 Тфлопс**

Углерод
C

Азот
N

Водород
H

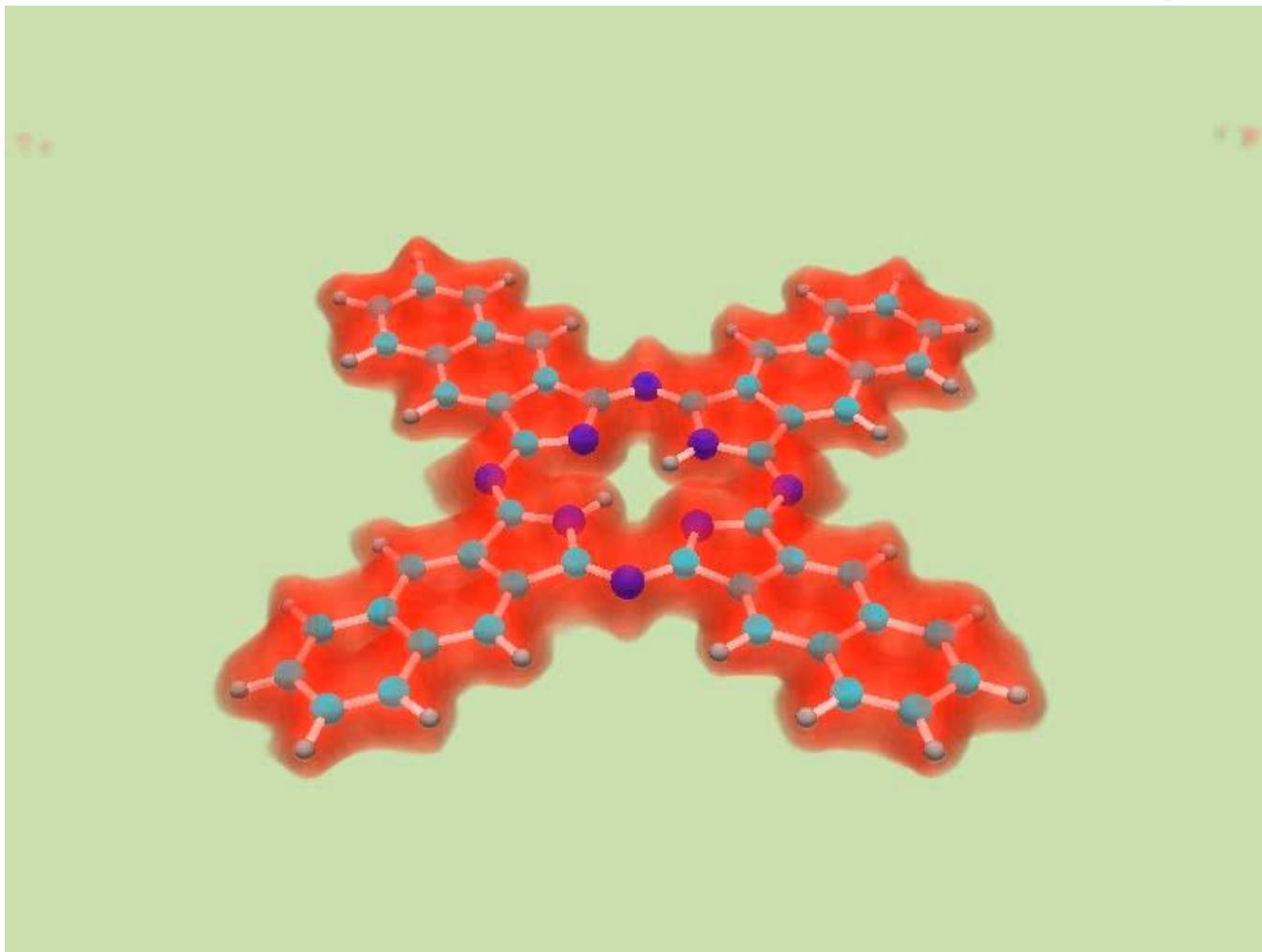


Численные характеристики:

**82 атома, 129 орбиталей,
540000 плоских волн для
каждой электронной
орбитали,
шаг по времени = 0.1125 фс,
сетка: 320x320x192
размер ячейки: 30x30x18 Å**

**Время вычислений на 512
узлах BG/P — 20 часов.**

Параллельная визуализация в реальном времени на BG/P (МГУ)



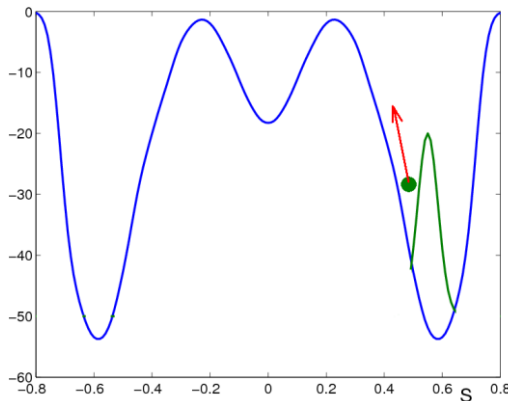
О. В. Джосан, Н. Н. Попова,
Г.Н. Шумкин (ВМК)

Вычисление профиля поверхности свободной энергии методом Метадинамики

Свободная энергия

$$F = -k_B T \ln \left(\int \exp \left(-\frac{U(\{\mathbf{R}_I\})}{k_B T} \right) d\{\mathbf{R}_I\} \right)$$

Уравнения Метадинамики



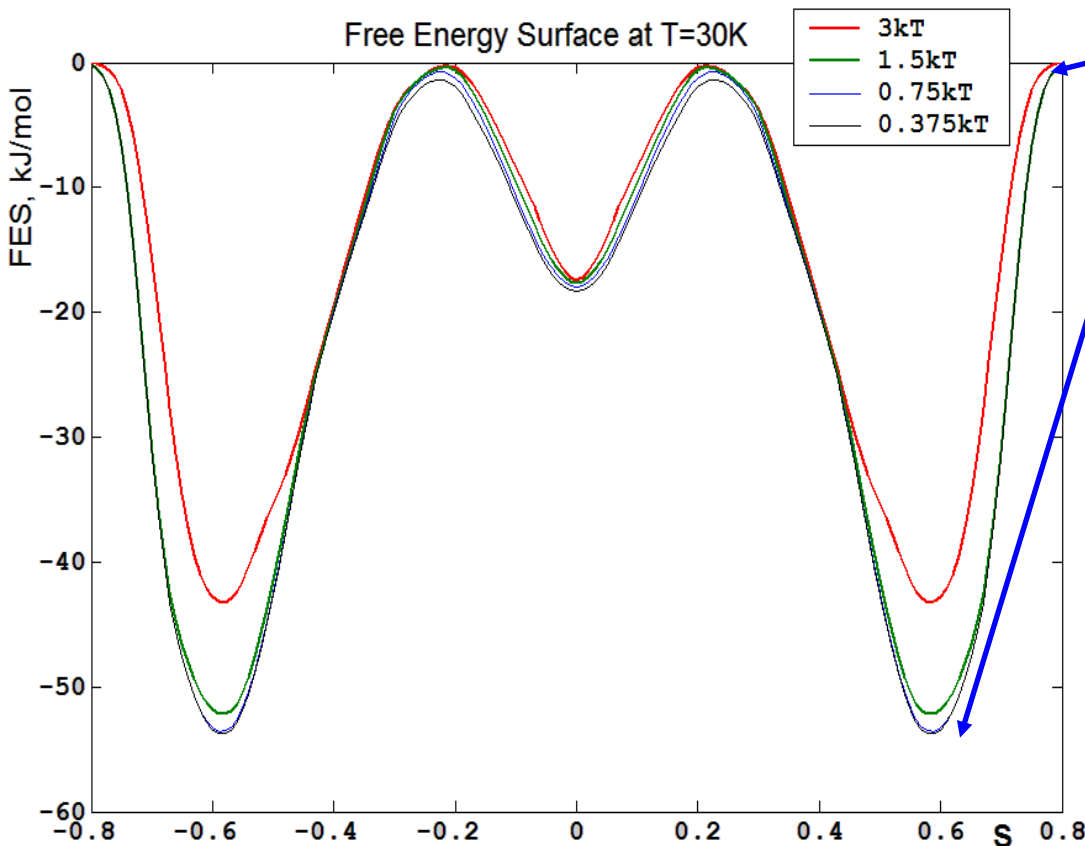
$$\mu \ddot{s} = -k(s - S(\{\mathbf{R}_J\})) - \frac{\partial}{\partial s} V(s, t)$$

$$M_I \ddot{\mathbf{R}}_I = -\nabla_{\mathbf{R}_I} U(\mathbf{R}_I) - \frac{\partial S(\{\mathbf{R}_J\})}{\partial \mathbf{R}_I} k(S(\{\mathbf{R}_J\}) - s).$$

Стохастический немарковский метод Метадинамики позволяет строить поверхность свободной энергии вдоль выбранной координационной переменной, определяющее главное направление реакции

$$V(s, t) = - \sum_{t_i < t} H_i \cdot \exp \left[-\frac{(s(t) - s^i)^2}{2W_i^2} \right] \quad s = \sum_{i,j \in A} \frac{1 - (r_{ij})^6}{1 - (r_{ij})^{12}}$$

Расчет профиля поверхности свободной энергии методом “Метадинамики”



$$H_b = 52 \text{ кДж/моль} = 0.54 \text{ эВ}$$

Профиль равен сумме гауссианов с обратным знаком.

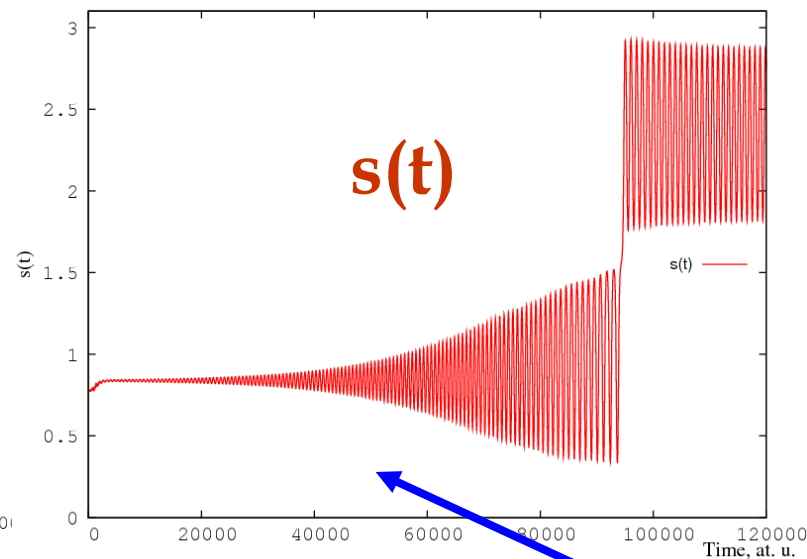
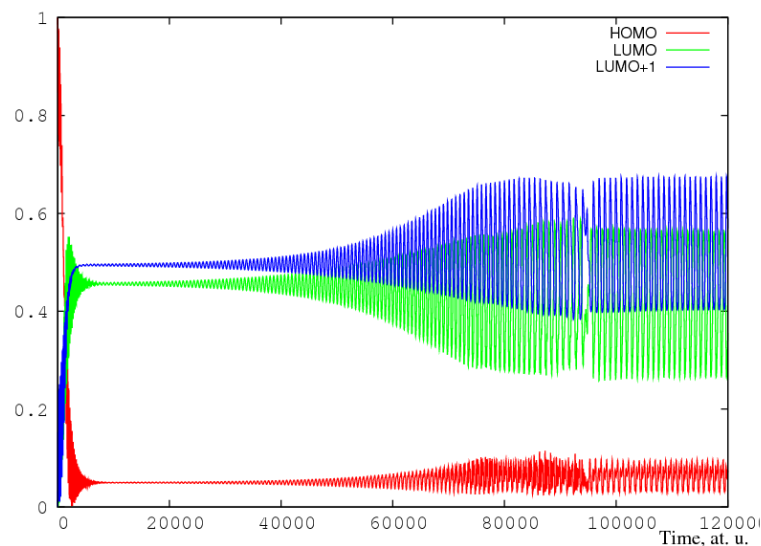
$$F(s) = - \sum_{t_i < t} H_i \cdot \exp \left[- \frac{(s(t) - s^i)^2}{2W_i^2} \right]$$

Сходимость достигнута путем проведения последовательных расчетов с уменьшающейся высотой гауссиана.

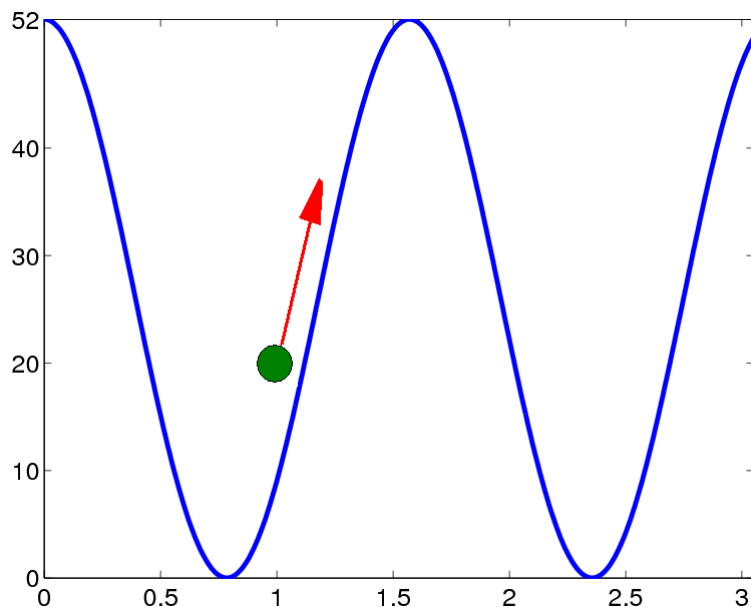
$$3kT = 0.75 \text{ кДж/моль}, T = 30\text{K}.$$

Расчеты по многомасштабной модели

Коэффициенты плотностей $|c_m(t)|^2$



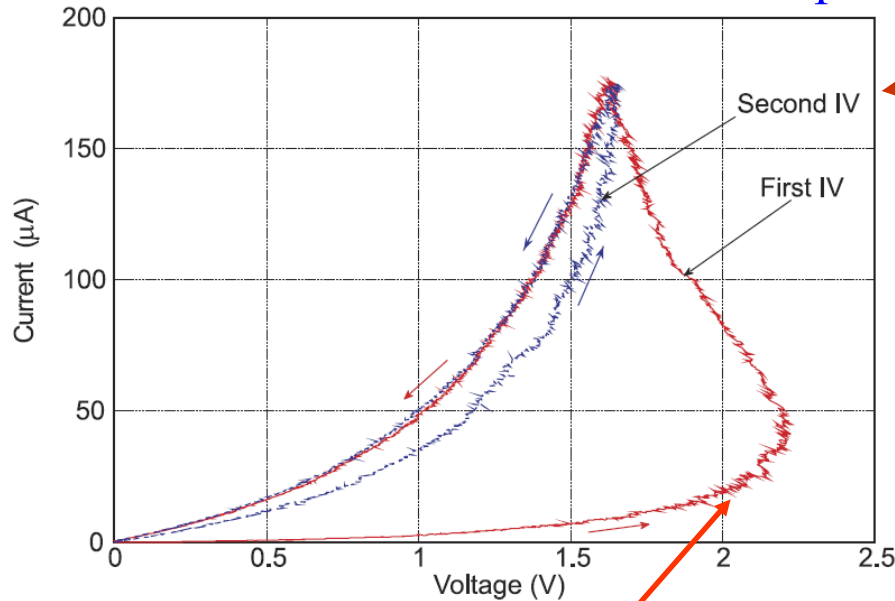
$$V_{th} = 1.5 \text{ эВ}$$



Возбуждение электронной системы внешним полем приводит к выталкиванию ядра водорода из одной ямы в другую

Глава III. Моделирование переключения электропроводности в нанопленке аморфного углерода

Под воздействием тока АСМ происходит смена аморфной структуры углерода в кристаллическую в наноточке, что ведет к переключению электропроводности



Смена сопротивления.

← Измерения атомносилового микроскопа (АСМ)

Ток
[мкА]

■ Кристалл.
● Аморфное

Чтение

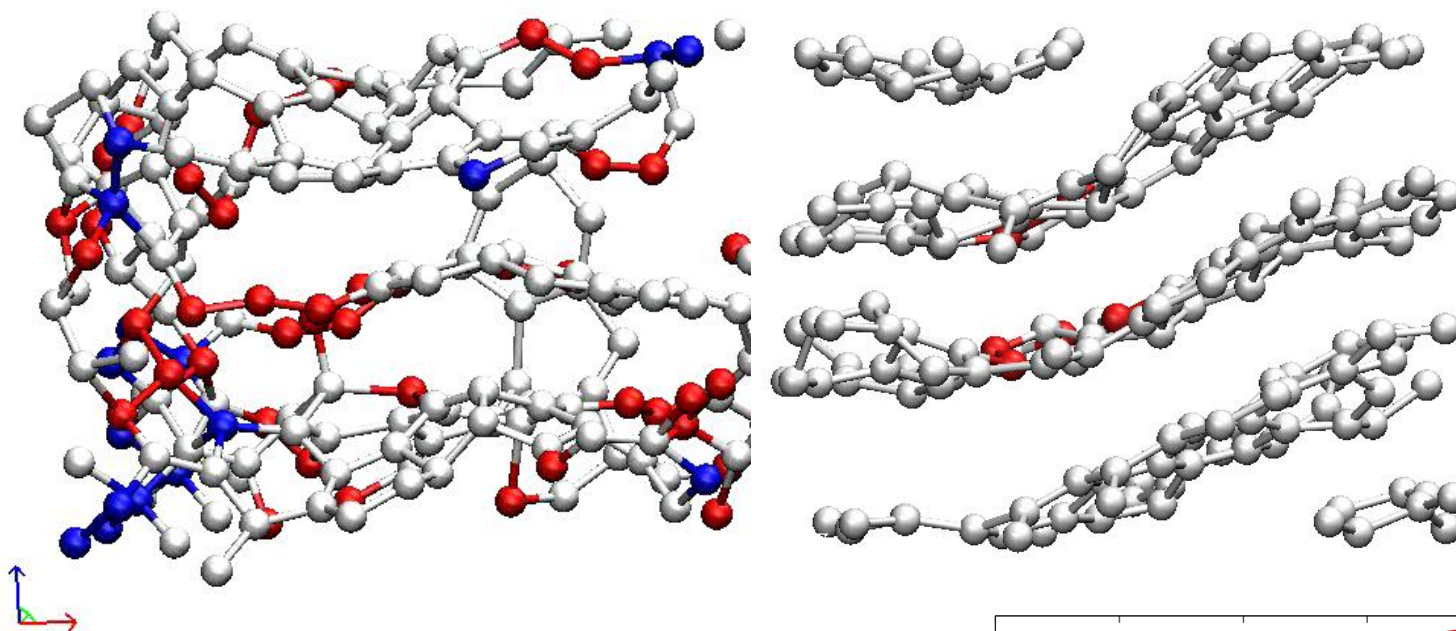
Запись

V_{th}

Напряжение [В]

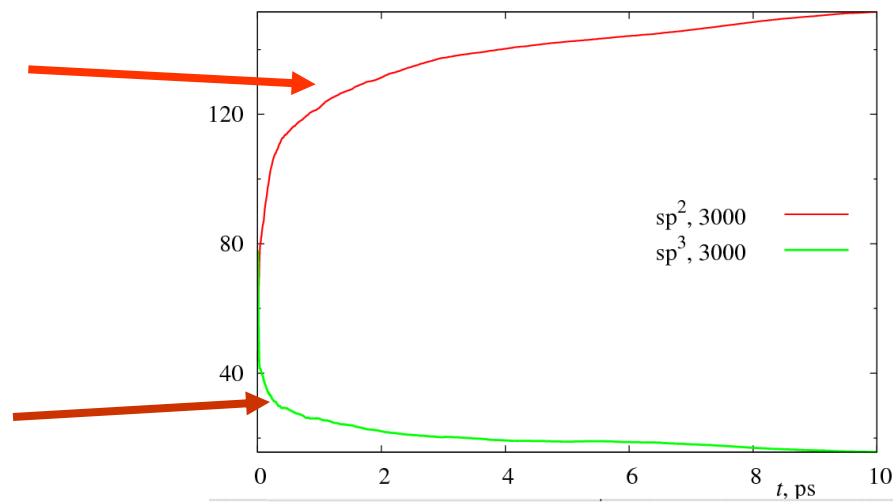
Моделирование переключения сопротивления в нанопленке аморфного углерода

Временная эволюция графитовых и алмазных атомов



Количество графитовых атомов

Количество алмазных атомов



Модели квантовой молекулярной динамики из “первых принципов”.

Уравнения движения ядер в усредненном поле электронов:

$$M_I \ddot{\mathbf{R}}_I(t) = - \sum_J \nabla_{\mathbf{R}_I} \frac{Z_I Z_J}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_J|} + \int \rho(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{R}_I} \frac{Z_I}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{r}|} d\mathbf{r}$$

Для каждого нового положения ядер требуется решать уравнение Шредингера для электронов, чтобы найти электронную плотность в *основном состоянии*.

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{N_e} |\psi_n(\mathbf{r})|^2$$

$$\left(-\frac{1}{2} \Delta + U_{eff}(\rho, \mathbf{r}) \right) \psi_n(\mathbf{r}) = \epsilon_n \psi_n(\mathbf{r})$$

$$U_{eff}(\rho, \mathbf{r}) = U_H(\rho, \mathbf{r}) + U_{xc}(\rho, \nabla \rho, \mathbf{r}) - \sum_I \frac{Z_I}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{r}|} + \sum_{I < J} \frac{Z_I Z_J}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_J|}$$

$$\Delta U_H = -4\pi \rho$$

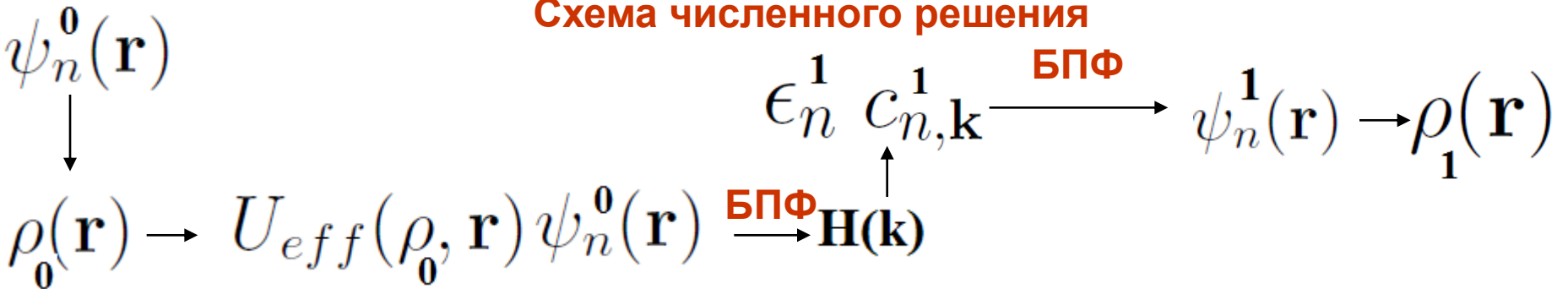
Численное решение задачи

Методы численного решения

1. Уравнения Ньютона для ядер интегрируются алгоритмом **Верлета**.
2. Уравнения для электронов – нелинейная задача на собственные значения.
3. Электронные орбитали раскладываются в **ряд Фурье**. Для преобразования величин между двумя пространствами используется **быстрое преобразование Фурье (БПФ)**.

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}} c_{n,\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$$

Схема численного решения

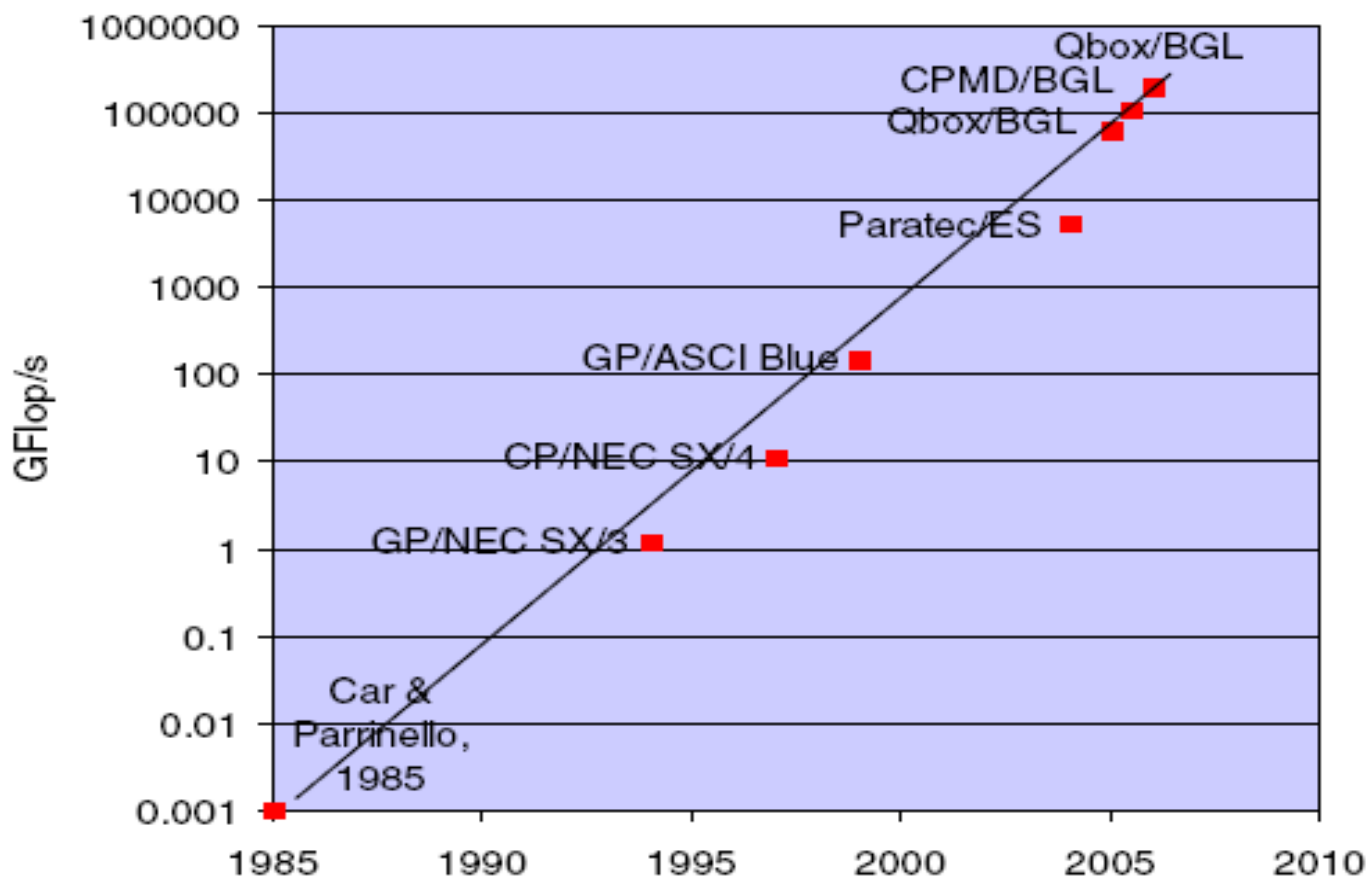


Параллельная программа на BlueGene/P.

Задача сводится к интегрированию 200 уравнений для ядер и решению 400 трехмерных задач для электронов.

Время одного расчета на 512 узлах **BlueGene/P** занимает ≈ 20 часов
Использование гибридной схемы распараллеливания MPI/OpenMP

Эволюция производительности (GFlop/s) FPMD кодов в
течении последних двух десятилетий. Удвоение
производительности каждые восемь месяцев



Параллельные стратегии. Несколько уровней распараллеливания

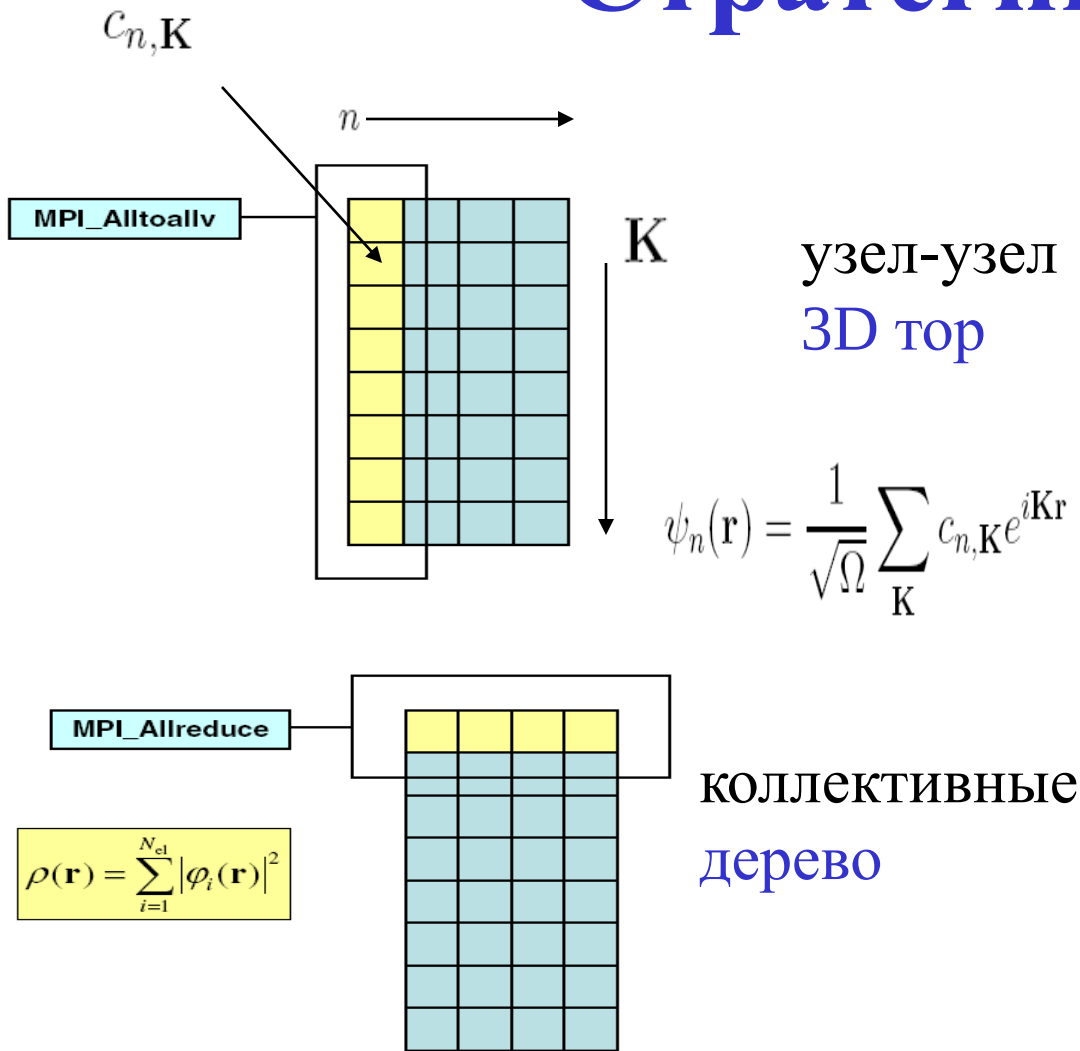
- **Крупноблочное распараллеливание** на распределенной памяти **MPI** – распределение коэффициентов волновых функций для всех электронных состояний на все процессоры.

3dFFT Реальное пространство  К-пространство

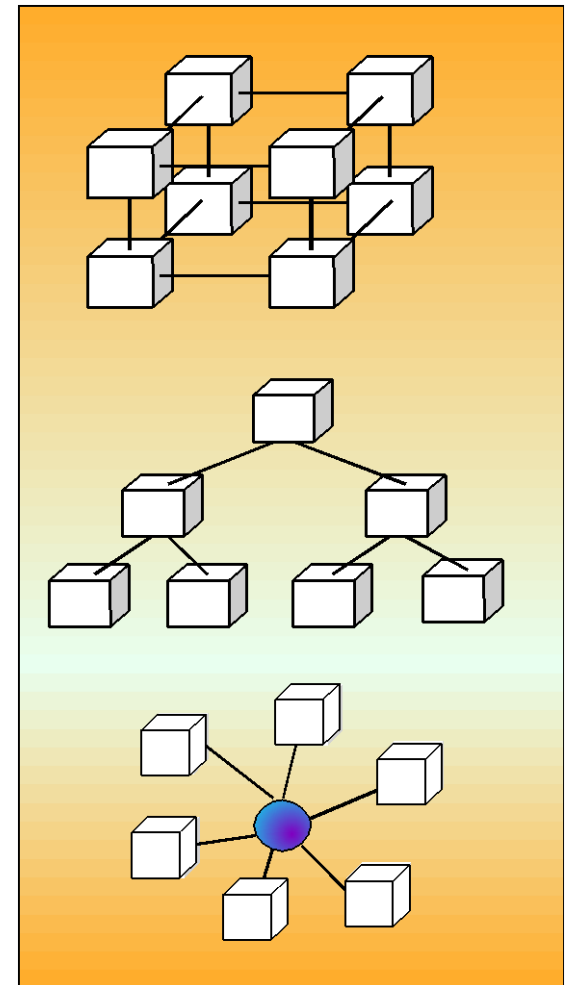
Распределение данных минимизирует число передач с поддержанием загрузки в обоих пространствах.

- **OpenMP** распараллеливание с общей памятью **на узле**. Длинные циклы.
- **Taskgroups** – группы процессоров. Процессоры организованы как двумерная сетка. Схема требует в два раза меньше коммуникаций, чем обычная схема. Процессорные группы могут быть оптимально распределены по тору.
- **Методы копирования**. Интегралы по траекториям в молекулярной динамике. Квантовые ядра. Многомерная метадинамика.

Стратегии



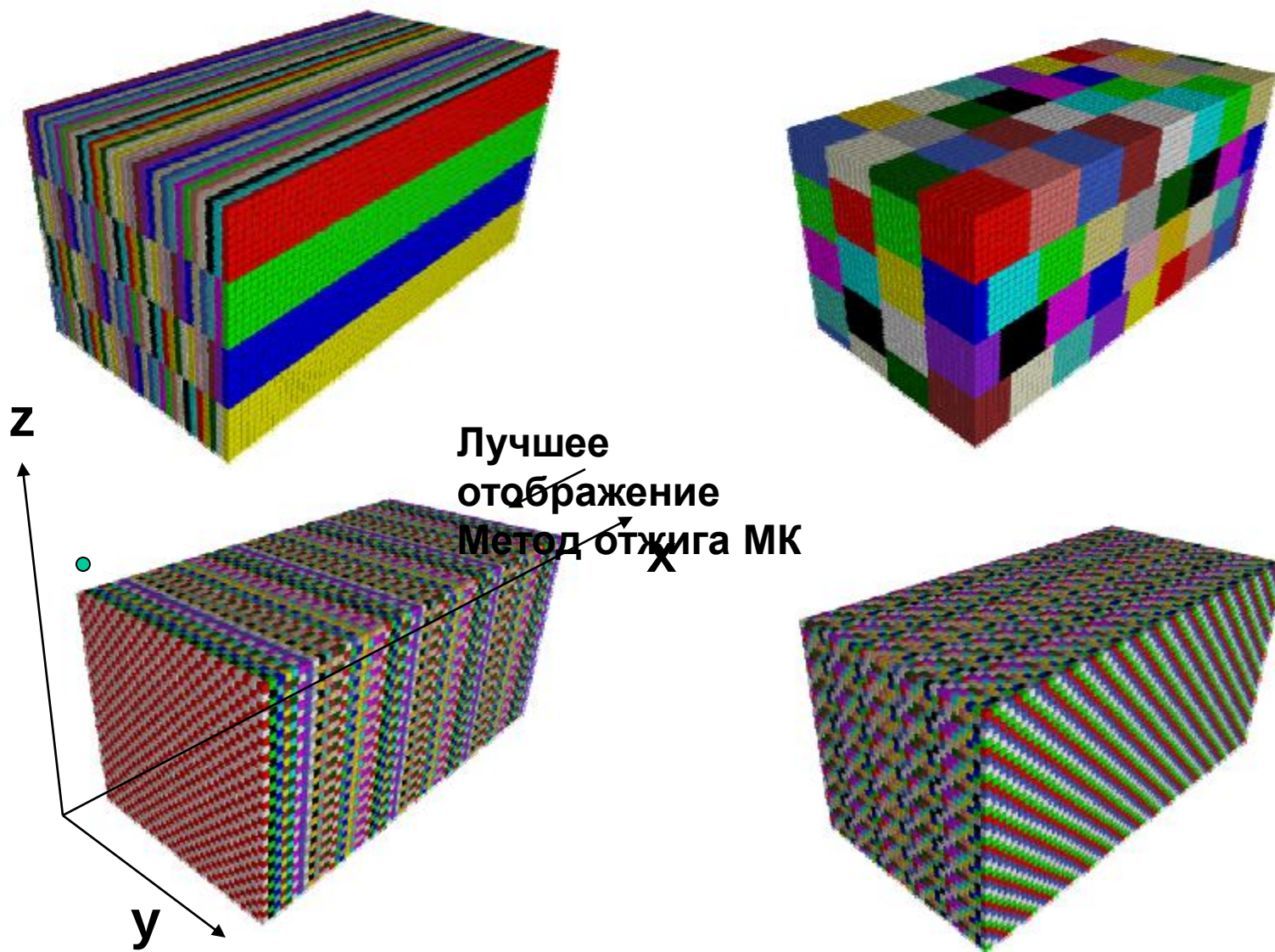
Коммуникации в BGP



Отражение задач на архитектуру суперкомпьютера

- Blue Gene/P. Архитектура трехмерного тора дополненная сетью дерева
- Возникают условия на дизайн FPMD кодов
- Для $P < 1024$ (BGP) проблема неважна
- Для $P=65536$ (BGL) хороший выбор отображения дает 60% ускорения
- Оптимизация отображения - $N!$ отображений.
- Проблема использования параллельных библиотек (ScaLAPACK). Узлы не под контролем кода моделирования
- **Оптимизация - критическая процедура для больших разбиений**
- Разработка удобных программ для визуализации трафика сообщений на сети тора. Создание автоматизированных процедур отображения
- Оптимизированный код Qbox показал производительность **207 TFlop/s** (наивысшая производительность на научных приложениях). Blue Gene/L
F. Gygi, Qbox

Блочное распределение коэффициентов Фурье волновых функций. Пространственная декомпозиция.



Производительность CPMD на Blue Gene/P

- CPMD масштабируется до **128000** процессоров
- **100** атомов масштабируются до **2000** процессоров с **70%** эффективности и длительностью производственного цикла **~ 600ps/неделя** (МГУ)
- Для систем **~1000** атомов масштабируется на **8000-16000** процессоров с эффективностью 80% и длительностью производственного цикла **~ 20 ps/неделя**
- Наибольшая система в настоящий момент **20000** атомов на 16 стойках.

A. Curioni Parallel Computing, 2006-2008

<http://www.zurich.ibm.com/deepcomputing>