

Перспективы эксафлопсных вычислений в разработке новых технологий энергетики*

Н.Д. Кондратюк, Н.Д. Орехов, Г.Э. Норман, В.В. Писарев, Г.С. Смирнов,
В.В. Стегайлов

Объединенный институт высоких температур РАН

Развитие новых технологий в энергетике в значительной степени основано на многомасштабном моделировании, успех которого, в свою очередь, зависит от прогресса суперкомпьютерных технологий. В данной работе мы рассматриваем несколько ярких примеров задач, которые решаются нами с использованием атомистических и многомасштабных моделей на лучших суперкомпьютерах России: фазовые переходы в газовых гидратах и газоконденсатных смесях, расчет реологических свойств органических жидкостей и создание новых полимерных материалов. Данные исследования представлены в широком контексте примеров задач из американской программы INCITE и европейской программы PRACE. На основе рассмотренных примеров мы обсуждаем вопросы эффективности аппаратного обеспечения, масштабируемости алгоритмов, проблемы ввода-вывода и обработки данных. Мы рассматриваем основанную на практических соображениях метрику «время решения — пиковая производительность». В этой метрике мы сравниваем различное аппаратное обеспечение (как современное, так и вышедшее из употребления) на примере тестов программного обеспечения LAMMPS, GROMACS, NAMD и CP2K, широко используемых для атомистического моделирования. Показано, что рассмотренная метрика может служить для однозначного сравнения различных комбинаций центральных процессоров, ускорителей и интерконнекта.

Введение

Развитие суперкомпьютерных технологий в США и других передовых странах встало на путь радикального наращивания числа вычислительных элементов. Серия систем IBM BlueGene/L [1] была с самого начала задумана для развития технологии массового параллелизма. В 2006 году, когда системы IBM BlueGene прошли начальную апробацию и появились суперкомпьютеры Cray XT3/4, для развития алгоритмов параллельного решения математических задач на этих новых системах Департамент энергетики США (DOE) расширил уже существовавшую ранее программу Innovative and Novel Computational Impact on Theory and Experiment (INCITE) [2]. Так в 2012 году на 60 проектов было выделено 1672 миллиона процессор-часов на суперкомпьютерах IBM BlueGene/P и Cray XT5. Тот факт, что в программе INCITE участвуют системы только с тороидальной топологией, свидетельствует, что данная топология рассматривается в качестве вероятного кандидата для суперкомпьютеров эксафлопсной эры [3].

Как показано на рис. 1, тематика проектов INCITE охватывает практически все области науки и техники. Исходя из доступного краткого описания, все проекты с некоторой долей условности разделены на следующие тематики: атомистические модели (Ab initio-расчеты из первых принципов и MD-молекулярная динамика), модели в рамках механики сплошных сред (CFD), астрофизические модели (Astrophys), физика плазмы (Plasma), квантовая хромодинамика (QCD), физика ядра (Nuclear), computer science (CS). Атоми-

*Работа частично поддержана грантами программ фундаментальных исследований Президиума РАН № 43 (координатор ак. Бетелин В.Б.), РФФИ 13-01-12070-офи_м. Отдельные авторы частично поддержаны грантами РФФИ 13-08-01428-а (Смирнов Г.С., Стегайлов В.В.), 14-08-31550-мол_а (Смирнов Г.С., Орехов Н.Д.), 14-08-31587-мол_а (Писарев В.В.), стипендией Президента РФ для молодых учёных (Писарев В.В.). Расчеты выполнены в МСЦ РАН, на кластерах K-100 ИПИМ им. М. В. Келдыша РАН и «Ломоносов» МГУ им. М. В. Ломоносова.

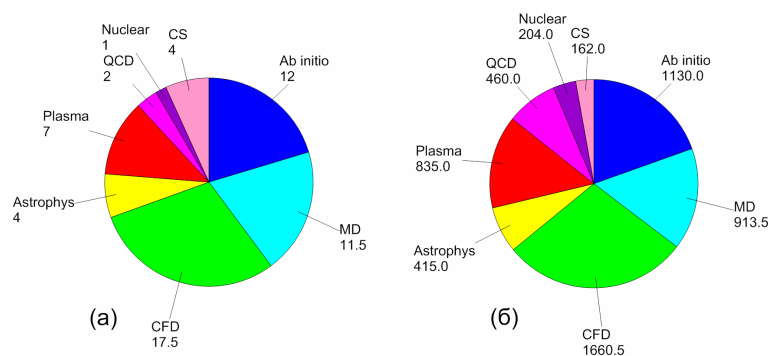


Рис. 1. Деление проектов INCITE 2014 г. по тематикам: (а) число проектов по каждой тематике и (б) выделенное на каждую тематику вычислительное время в миллионах процессорно-часов

стические модели (Ab initio и MD) охватывают очень широкие приложения от механики ударно-волнового разрушения до химических реакций и систем биомолекул. В программу INCITE принимаются проекты с международным участием, даже без партнера из США.

Обязательным условием получения расчетного времени по программе INCITE является использование массового параллелизма. При этом задачи, связанные с одновременным запуском большого числа однотипных задач (тривиальный параллелизм для набора статистики), рассматриваются, однако не являются приоритетными [2]. От алгоритма решения прикладной задачи требуется демонстрировать параллельную эффективность на вычислительном поле порядка 20% используемой машины. В 2011 году это соответствовало размеру вычислительного поля порядка 20 тысяч ядер, а в 2013–14 гг. – 200 тысяч ядер!

Как для задач крупномасштабного суперкомпьютерного физико/математического моделирования, так и для задач обработки больших объемов данных второй важнейшей технической задачей на пути в «эру эксафлопса» является организация параллельного ввода/вывода с сотен тысяч и миллионов ядер.

Эти цифры демонстрируют переход к новой эре использования вычислительных методов в науке и технике. В этой работе мы приводим примеры атомистических моделей для решения задач, предполагающих, в перспективе, использование вычислительных полей эксафлопсного уровня производительности. Вместе с тем, ученые не всегда представляют себе, как надо выбирать суперкомпьютер для задачи, которой они занимаются. Тем более, неясной остаётся архитектура требуемых компьютеров.

Гибридные вычислительные системы, использующие несколько различных вычислительных устройств, получили широкое распространение в последние годы. Анализ списка Топ-500 [20] лучших суперкомпьютеров мира показывает, что наибольшей популярностью на сегодняшний день пользуются машины, использующие в качестве ускорителей видеокарты NVIDIA архитектуры Kepler или сопроцессоры Intel Xeon Phi архитектуры MIC (Many Integrated Core).

Резкий рост количества машин с гибридной архитектурой связан в первую очередь с перспективой существенного увеличения производительности суперкомпьютера без значительного увеличения затрат. Пиковая производительность современных ускорителей достигает нескольких ТФлопс (10^{12} операций с плавающей точкой в секунду). Однако использование значительной доли пиковой вычислительной мощности R_{peak} в реальных приложениях не всегда возможно. Это связано с необходимостью полного переписывания исходного кода для обычных CPU, решения проблем с доступом к памяти ускорителя, шириной канала передачи данных между центральным процессором и ускорителем, а также особенностями работы АЛУ ускорителей.

Предпринимаются попытки создания специализированных суперкомпьютеров для конкретных приложений, однако они не входят в список Топ-500. Для задач молекулярной

динамики можно выделить суперкомпьютеры на программируемых пользователем вентильных матрицах (разновидность ПЛИСов) [21], MDGRAPE [22] и ANTON [23] на интегральных схемах специального назначения. Использование специальной архитектуры позволяет добиться наиболее эффективного использования вычислительной мощности для конкретной задачи.

При этом «классические» многопроцессорные суперкомпьютеры, использующие для вычислений только центральные процессоры, продолжают доминировать в списке Топ-500. На них проводятся рекордные по числу частиц молекулярно-динамические расчеты [7].

В сложившейся ситуации при наличии большого разнообразия аппаратного обеспечения для высокопроизводительных суперкомпьютерных расчетов особенную актуальность приобретает вопрос сравнения между собой различных альтернативных решений [8, 9]. Целью анализа должна быть эффективность связи 1) аппаратного обеспечения, 2) конкретной математической модели или класса моделей и 3) численных алгоритмов, в том числе с учетом уже существующего программного обеспечения (ПО) и сложности их адаптации на новые типы аппаратного обеспечения.

Популярный тест LINPACK, использующийся для ранжирования суперкомпьютеров, не отражает особенностей многих современных алгоритмов, в том числе и алгоритмов атомистического моделирования, являющихся предметом этой статьи. Для данного класса задач это приводит к существенному отличию между реальной и теоретически максимальной производительностью [3, 10]. Отсюда следует, что необходим анализ эффективности работы конкретных программ и алгоритмов на различных архитектурах. В качестве примеров аппаратного обеспечения рассматриваются лучшие суперкомпьютерные системы России. Анализируемые математические модели соответствуют стандартным примерам: леннард-джонсовская жидкость (типичная система для задач статистической физики, физики конденсированных сред и физической химии), белковая молекула в водном растворе и квантовый расчет молекул воды. В качестве примера ПО мы используем популярные пакеты для классических и квантовых задач атомистического моделирования: LAMMPS, GROMACS, NAMD, CP2K.

1. Атомистические модели вещества

Повышение эффективности существующих технологий и разработка новых в значительной мере связана с использованием более точных представлений о строении вещества и его свойствах на микроуровне. Соответствующие атомистические модели основываются на математическом описании межатомного и межмолекулярного взаимодействия [4]. Расчет сил, действующих на атомы, обычно занимает большую часть (более 80%) МД расчета. Задачи молекулярно-динамического (МД) моделирования являются одними из наиболее хорошо масштабируемых на параллельные вычислительные системы [5–7, 10, 25]. В рамках программы INCITE с задачами МД моделирования связано почти 2/3 всех проектов (Ab initio и MD на рис. 1). Далее рассмотрим несколько характерных примеров подобного рода.

1.1. Вода

В связи с тем, что вода является важнейшим примером для молекулярного моделирования, имеющим отношение практически ко всем областям науки и техники, использующиеся для ее моделирования модели представляют большой интерес. По своей природе взаимодействие между атомами и молекулами является квантовым эффектом. Однако вычислительная сложность квантового описания даже при использовании таких подходов, как теория функционала электронной плотности (ТФП), обуславливает необходимость использования эмпирических потенциалов для классического «механического» описания межмолекулярного взаимодействия. На рис. 2 показана зависимость времени расчета на 1 шаг МД интегрирования в классической МД модели воды с 4-х точечным потенциалом TIP4P и в

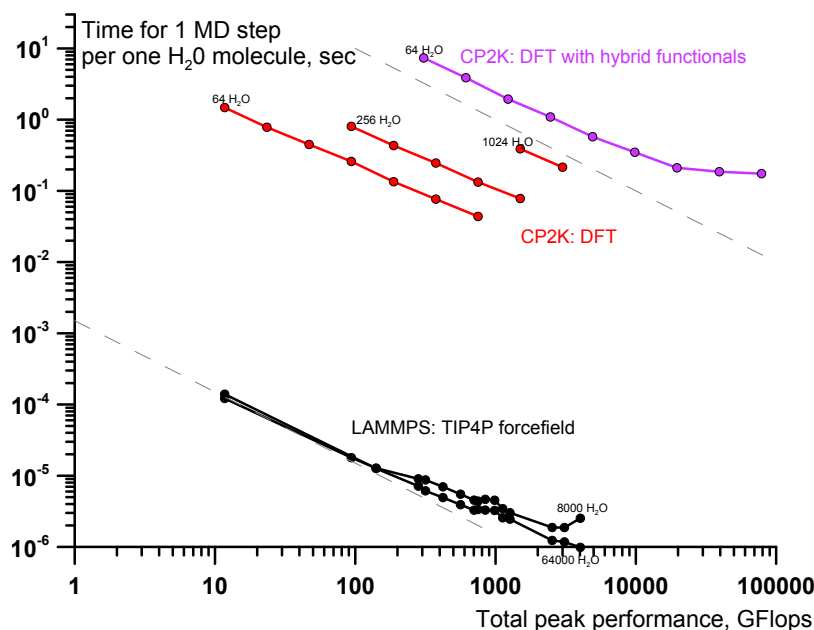


Рис. 2. Сравнение времени расчета на 1 шаг МД интегрирования в классических (TIP4P) и квантовых МД моделях при различных пиковых мощностях вычислительного поля. Приведены данные для пакетов LAMMPS и CP2K.

квантовых моделях на основе ТФП и гибридной ТФП, более точно учитывающей эффекты обменного взаимодействия. Классические МД модели воды имеют вычислительную сложность ~ 1.5 МФлоп на 1 молекулу на 1 МД шаг (Флоп — операция с плавающей точкой), которая растет с увеличением числа частиц как $O(N)$ или $O(N \log(N))$ при явном учете дальнегодействующего электростатического взаимодействия. В случае ТФП модели время расчета растет квадратично по отношению к числу молекул: $\sim 300N$ МФлоп на 1 молекулу на 1 МД шаг.

Гидраты природных газов или газовые гидраты — это нестехиометрические соединения включения, в которых молекулы газа (молекулы-гости) заключены в полостях трехмерной решетки из молекул воды (каркас хозяина). Стабилизация водных клатратных каркасов, термодинамически менее стабильных, чем лед или жидкая вода при тех же условиях, обеспечивается за счет ван-дер-ваальсовых взаимодействий гость-хозяин.

Месторождения природных газовых гидратов встречаются на шельфе и в зоне вечной мерзлоты. Они активно изучаются уже более сорока лет, так как содержат большое количество метана и рассматриваются как перспективный источник топлива. Вместе с тем газовые гидраты, существующие при температурах и давлениях, близких к условиям их разложения, представляют экологическую опасность — в случае смещения теплового равновесия освободившийся метан может внести значительный вклад в парниковый эффект. Поэтому знание динамических, термодинамических и механических свойств газовых гидратов важно для оценки их поведения при разработке газогидратных месторождений.

За последние годы было проведено множество теоретических, экспериментальных и компьютерных исследований газовых гидратов. Проведенные исследования месторождений на Аляске, в Канаде и Японии показывают, что добыча метана из природных гидратов может быть выполнена с использованием существующих технологий. Более того, около побережья Японии недавно была произведена первая в мире пробная добыча газа из месторождения в желобе Нанкай.

Молекулярная динамика позволяет исследовать свойства вещества на микроскопиче-

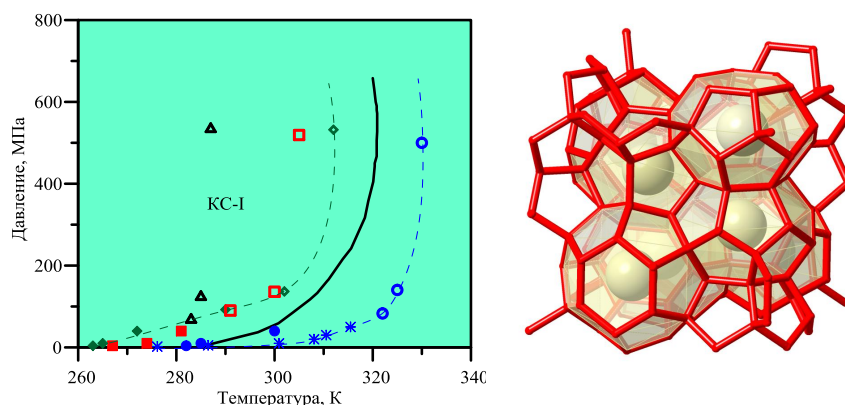


Рис. 3. Фазовая диаграмма гидрата метана (см. [11]). Черной кривой показана экспериментальная линия плавления [21]. Заполненные синие, красные и зеленые символы и синие снежинки — литературные данные. Незаполненные символы — наши результаты для тех же моделей межмолекулярного взаимодействия. Синие символы — модель воды TIP4P/Ice; красные — TIP4P/2005 ($\chi=1$); зеленые — TIP4P/2005 ($\chi=1.07$); черные — SPC/E. Область между пунктирными линиями (интерполяциями результатов расчетов в рамках моделей TIP4P/Ice и TIP4P/2005 ($\chi=1.07$)) иллюстрирует текущую точность определения кривой плавления по результатам моделирования. Справа показана визуализация молекулярной модели гидрата метана КС-I структуры. Красным показаны направления водородных связей между молекулами воды в клатратном каркасе (сами молекулы воды не показаны), шары соответствуют молекулам метана.

ском уровне, поэтому ее развитие привело к пониманию ряда фундаментальных свойств газовых гидратов. МД модели для газовых гидратов существенным образом зависят от точности описания взаимодействия между молекулами воды. Точность таких моделей сильно возросла за последнее десятилетие. Наиболее сложные модели, учитывающие поляризацию, лучше описывают структурные свойства и растворимость молекул газа, тогда как модели без поляризации лучше подходят для описания фазовой диаграммы [11, 12] (см. рис. 3).

1.2. Органические жидкости

Модели межатомных потенциалов для органических жидкостей представляют собой хороший пример иерархии огрубления модельных представлений для расширения возможностей прямого численного счета.

Ключевым фактором для достоверности результатов атомистического моделирования является выбор потенциала взаимодействия в модельной системе. Моделирование органических соединений чаще всего производится в рамках концепции “силового поля” (англ. forcefield), когда суммарная энергия E_{mol} взаимодействия молекул вещества представляется в виде суммы вкладов ненаправленного парного взаимодействия E_{pair} , энергии напряжения связей E_{bond} и углов E_{angle} в молекулах и энергии вращения по двугранным углам E_{dihed} . Различные параметризации этих взаимодействий позволяют моделировать вещества от простейших углеводородов до белков и ДНК.

Для углеводородов разработан ряд различных наборов параметров силового поля, из них наиболее широко применяются наборы OPLS, DREIDING и TraPPE. Параметризация межатомных потенциалов OPLS позволяет точнее воспроизвести теплофизические свойства жидкой фазы, а параметризация TraPPE предназначена для точного предсказания фазовых диаграмм. DREIDING занимает промежуточное положение (рис. 4). Эти параметризации позволяют с высокой точностью описывать наблюдаемые фазовые диаграммы чистых углеводородов и их смесей (рис. 5).

Особый интерес представляет расчет методом МК свойств жидкостей, взаимодейству-

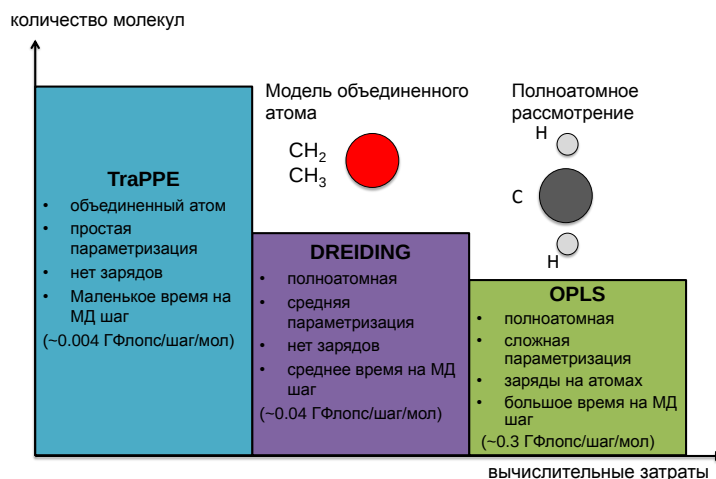


Рис. 4. Сравнение различных моделей молекулярного взаимодействия для органических жидкостей.

ющих с поверхностью, например, в порах. Потенциал TraPPE позволяет воспроизвести экспериментальные теплоты адсорбции углеводородов на силикатных материалах [13], таким образом, представляется целесообразным его использование для расчета фазовых диаграмм газов в порах горных пород. В силу необходимости моделирования системы на атомарном уровне метод ограничен размерами систем до нескольких десятков нанометров, чего, однако, обычно оказывается достаточно для расчета фазовых диаграмм и равновесных плотностей веществ.

Метод МД, в силу универсальности подхода (прямое интегрирование уравнений движения) позволяет вычислить не только фазовые диаграммы материала с заданным потенциалом взаимодействия, так и фазовые проницаемости различных сред (рис. 5).

1.3. Полимеры

В последнее десятилетие в индустрии конструкционных материалов наблюдается заметный рост интереса к сфере полимерных нанокомпозитов. В первую очередь это обусловлено их необычными механическими свойствами при сравнительно небольшой плотности и высокой коррозионной стойкости. В качестве наполнителя в полимерной матрице могут выступать углеродные волокна, нанотрубки, фуллерены, металлические или иные наночастицы.

Свойства полимерных нанокомпозитов существенным и не вполне очевидным образом зависят от целого ряда параметров: типа, концентрации, ориентации, упругих свойств наполнителя, пластических и термических свойств самой полимерной матрицы. Описание подобной многопараметрической задачи на микроуровне с использованием сугубо экспериментальных методов крайне затруднительно и пока во многом носит эмпирический характер. Свойства полимерных цепей, находящихся в контакте с поверхностью наполнителя, неизбежно отличаются от свойств чистого полимера. В случае нановключений, ввиду большой величины площади их эффективной поверхности, уже при малых концентрациях (порядка нескольких массовых процентов), область интерфейса может охватить существенную часть полимерной матрицы. При этом на свойства материала влияет множество параметров – форма и размер наночастиц, распределение частиц в полимерной матрице, тип и сила взаимодействия полимерной матрицы с наночастицами, температурный режим, запутывание полимерных цепочек и т.д.

Одной из основных особенностей полимерных систем является их четко выраженная иерархическая структура. Последовательный подход описания при этом должен охватывать ряд пространственных масштабов начиная от размеров отдельного мономера (субна-

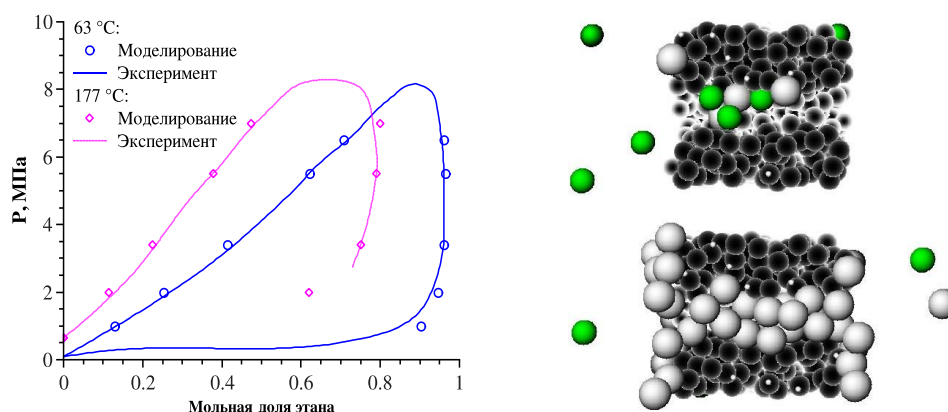


Рис. 5. (Слева) Фазовые диаграммы смеси этан-н-гептан при температурах 63 С и 177 С. Сопоставление атомистического моделирования с потенциалом TraPPE [14] с экспериментом. (Справа) Течение смеси этан-азот через пору в мембране из аморфного оксида кремния. Иллюстрация из работы [15]. Диаметр поры 0,8 нм, длина 2,85 нм, перепад давления 0,1 МПа. Течение при -13 С смесей этан-азот с мольной долей этана 5% (сверху) и 90% (снизу). Серым цветом обозначены молекулы этана, зеленым — молекулы азота, черным — атомы кремния мембраны.

нометровый масштаб) до структуры цельной молекулы (десятки-сотни нанометров) и конфигураций, образующихся в системе многих молекул (субмикронные масштабы) (рис. 6). Аналогичная иерархия масштабов может быть построена и для шкалы времен протекания процессов в высокомолекулярных системах. Если характерное время переориентации отдельного мономера составляет $t \sim 10^{-11}$ с, то время релаксации цепи, содержащей N звеньев, согласно модели Рауза, будет составлять $T = tN^2$. В случае цепи из $N=1000$ звеньев характерное время релаксации макромолекулы может достигать 10^{-5} с. В связи с этим даже МД-расчеты с участием достаточно простого полимера, как, например, полиэтилен, требуют задания начальной конфигурации, максимально близкой к равновесной при рассматриваемых условиях. Более сложные конформационные перестройки полимерных систем как, например, стеклование или кристаллизация из расплава, как правило, лежат далеко за пределами временных масштабов, доступных МД.

Активное использование МД для задач моделирования нанокомпозитов началось немногим более десятилетия назад. Первые работы в этой области [16] были нацелены на изучение аспектов взаимодействия полимера с участками поверхности наполнителя, поскольку вычислительные возможности не позволяли размещать в расчетной ячейке наночастицы характерных размеров. Классическая полноатомная МД, будучи достаточно ресурсоемким методом, накладывает серьезные ограничения на линейные размеры исследуемой системы, которые обычно не превышают сотен нанометров, и на времена расчета. На помощь в этом случае приходят методы огрубленной (т.н. coarse-grained) молекулярной динамики (см., например, [17]). В огрубленной модели составные части полимеров и полимерных композитов представляются в упрощенной геометрии. Основной идеей метода является объединение нескольких маленьких частиц (групп атомов) в один большой блок (супер-атом) и использование общих силовых постоянных и геометрических параметров, основанных на простых соображениях гибридизации. При таком упрощении функциональной формы описания межатомных взаимодействий важно следить за сохранением физических свойств материалов. Для сложных полимерных систем не существует универсального алгоритма задания структуры супер-атома (т.н. mapping). Для каждой конкретной задачи методика огрубления атомарной структуры (определение групп атомов, которые в дальнейшем сформируют супер-атомы), как правило, выявляется путём рассмотрения нескольких наиболее уместных вариантов. От выбора варианта огрубления напрямую зависит описательная спо-

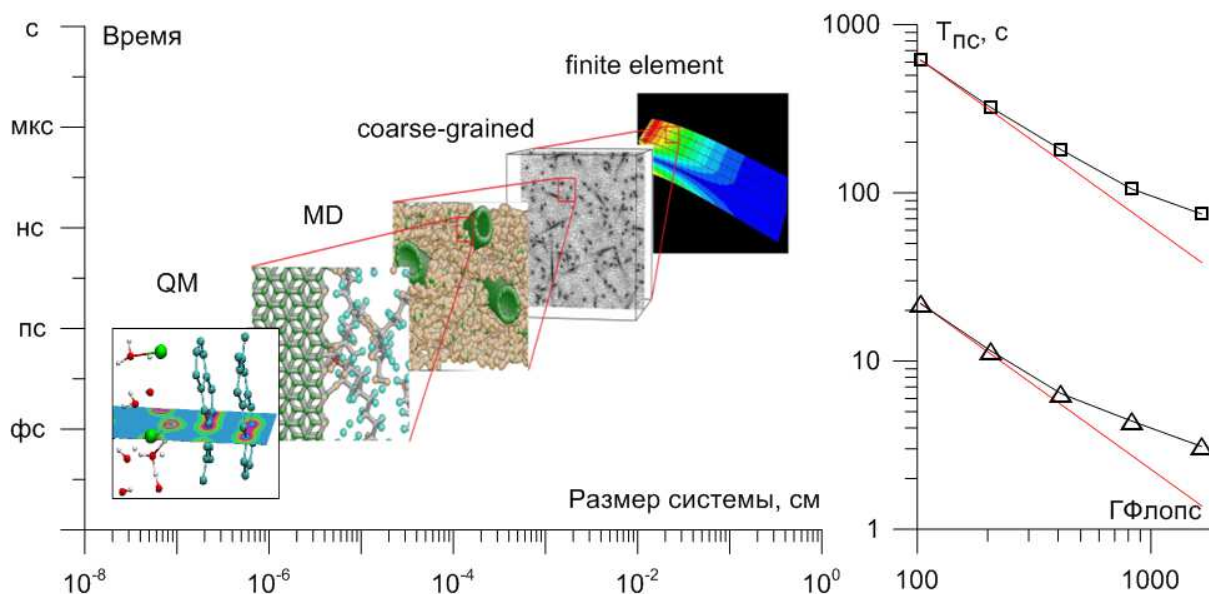


Рис. 6. а) Принципиальная схема многомасштабного моделирования полимерных композитов. б) зависимость вычислительного времени, требуемого на расчёт траектории длительностью в одну пикосекунду (T_{ps}), от величины задействованных вычислительных ресурсов. Квадраты соответствуют полноатомной модели, треугольники – огрубленной. Красными линиями обозначено идеальное масштабирование задач.

способность создаваемой упрощённой модели. Среди стохастических методов описания эволюции атомистических систем стоит также выделить метод диссипативной динамики частиц (DPD). DPD, так же как и классическая МД, основан на интегрировании систем уравнений движения Ньютона. Благодаря меньшей вычислительной сложности он позволяет рассматривать крупные системы, включающие в себя группы из наночастиц субмикронного размера, и широко используются для изучения процессов агломерации наночастиц и их влияния на свойства полимерных матриц [17].

2. Сравнение современных ускорителей

2.1. NVIDIA GPU

Распространение графических процессоров для научных вычислений произошло за счет появления специальных технологий программирования CUDA и OpenCL. В настоящее время наиболее распространены две архитектуры компании NVIDIA: Fermi и Kepler. Пик популярности архитектуры Fermi пришелся на 2012 год, теперь она вытесняется более новой архитектурой Kepler. Архитектура Kepler обеспечивает большее быстродействие, имеет больший объем памяти, а также поддерживает последние версии спецификации CUDA. В работе исследовалась работа видеокарт NVIDIA X2070 архитектуры GF100 (Fermi) и NVIDIA K40 архитектуры GK110 (Kepler). Задачи на видеокартах выполняются по принципу SIMD (одиночный поток команд и множественный поток данных single instruction multiple data). Базовой единицей при запуске задачи является поток (thread), выполняемый на одном ядре. Потоки объединяются в блоки (block), запускаемые на одном мультипроцессоре. При этом они имеют доступ к одним и тем же данным в регистрах и разделяемой памяти. Потоки запускаются группами из 32 единиц, называемых варпами (warp). Принцип SIMD подразумевает, что одна команда применяется ко всем потокам в варпе.

Видеокарты архитектуры GF100 имеют 14 потоковых мультипроцессоров, каждый состоит из 32 вычислительных ядер, 4 устройств для расчета трансцендентных функций с

одинарной точностью. Вычислительные ядра работают на частоте 1150 МГц, только половина из них может выполнять операции с двойной точностью. Развитие производительности видеокарт идет по пути увеличения вычислительной мощности мультипроцессоров. Мультипроцессор архитектуры GK110 имеет 192 вычислительных ядра, 64 из них могут выполнять операции с двойной точностью. Ядра работают на частоте 745 МГц. На видеокарте установлено 15 таких мультипроцессоров. Число ядер увеличилось более чем в 6 раз, для работы с ними число одновременно запускаемых потоков на мультипроцессоре также увеличено. Вдвое увеличено число регистров на поток для повторного использования переменных. Также появилась поддержка динамического параллелизма — потоки GPU могут генерировать новые потоки без обращения к CPU, что может давать преимущества на некоторых задачах.

Тестирование видеокарт поколения Fermi и более старого Tesla на алгоритмах молекулярной динамики проводилось в работе [26]. Показано, что относительная производительность видеокарт от числа ядер хорошо описывается законом Амдала, то есть имеет место ограничение роста производительности из-за невозможности обеспечить стопроцентную параллелизацию алгоритма.

2.2. Intel Xeon Phi

Сопроцессоры Intel Xeon Phi впервые были представлены в 2012 году, на сегодняшний день представлено три серии сопроцессоров. В зависимости от модели сопроцессор имеет 57, 60 или 61 ядро. В данной работе рассматривалась модель Intel Xeon Phi SE10X с 61 ядром, установленная на суперкомпьютере МВС-10П МВС РАН. Каждое ядро имеет кэш инструкций и кэш данных по 32 КБ (первый уровень); инклюзивный кэш 512 КБ (второй уровень) и 512-битное векторное АЛУ. Все ядра соединены между собой двунаправленной кольцевой шиной. В отличие от GPU, на сопроцессоре запускается отдельная операционная система, что уменьшает на единицу число реально выделенных для расчетов ядер. Пиковая производительность сопроцессора при работе с двойной точностью достигает 1.0736 ТФлопс.

Существует три способа использования сопроцессора Intel Xeon Phi: 1) режим разгрузки (offload mode), 2) «родной» режим (native mode) сопроцессора и 3) симметричный режим (symmetrical mode). В режим разгрузки основная программа запускается на обычном процессоре, на сопроцессоре выполняются определенные участки программного кода. Это можно делать автоматически при использовании библиотеки Intel Math Kernel Library (MKL), либо в явном виде при использовании директив компилятора путем модификации исходного кода. В «родном» режиме программа запускается исключительно на сопроцессорах, и, наконец, в симметричном режиме одна программа одновременно запускается на CPU и сопроцессоре. Однако из-за различной частоты процессора (~2–4 ГГц для Intel Xeon) и сопроцессора (~1 ГГц для Intel Xeon Phi) в симметричном режиме могут возникнуть серьезные трудности с балансировкой нагрузки. В «родном» режиме можно добиться ускорения за счет оптимизации кода, однако при использовании суперкомпьютеров в данном случае будут простаивать CPU на занятых узлах.

При начале производства Intel Xeon Phi основной упор в рекламе новой технологии делался на возможность запуска программ без переписывания исходного кода. Однако многочисленная практика показывает, что это не приводит к ускорению работы конкретных приложений [27–30]. Для получения хотя бы минимального ускорения затраты на переписывание исходного кода программ становятся сравнимыми с аналогичными затратами на видеокартах.

Хотя с точки зрения производительности ускорители GPU и сопроцессоры Intel Xeon Phi довольно близки, использование их вычислительных возможностей на 100%, не всегда возможно. В литературе обсуждаются сложности, возникающие при портировании молекулярно-динамических кодов на архитектуру Intel Xeon Phi [31].

Таблица 1. Сравнение ускорителей, используемых для расчетов в данной работе

Ускоритель	NVIDIA X2070	NVIDIA K40	Intel Xeon Phi SE10X
Число ядер	448	2880	61
Объем памяти, Гб	6	12	8
Тактовая частота, ГГц	1.15	0.745	1.1
R_{peak} с двойной точностью, ТФлопс	0.515	1.43	1.0736
R_{peak} с одинарной точностью, ТФлопс	1.03	4.29	2.1472
Потребляемая мощность, Вт	247	235	300

2.3. Особенности реализации операций с плавающей точкой на ускорителях

Как на ускорителях NVIDIA GPU, так и на сопроцессорах Intel Xeon Phi, операции двойной точности с плавающей точкой поддерживают набор инструкций умножения-сложения с однократным округлением (fused multiply-add — FMA). При этом за один такт может выполняться одна операция сложения и одна операция умножения вида $y=a*x+b$ без потери точности. Это позволяет добиться ускорения в алгоритмах, требующих суммирования произведений, например, перемножение матриц или вычисление значения многочлена по схеме Горнера.

Некоторые особенности возникают при расчете пиковой производительности в режиме одинарной точности. Производительность Intel Xeon Phi увеличивается в 2 раза за счет того, что в каждый регистр помещается в 2 раза больше данных. Видеокарты NVIDIA имеют ядра, которые работают только в режиме одинарной точности (single precision units — SPU), и ядра, поддерживающие режим двойной точности (double precision units DPU). Рост производительности в этом случае зависит от отношения SPU к DPU. Каждый SPU за 1 такт может выполнять одну операцию FMA и одну операцию умножения, то есть три операции с плавающей точкой на один такт. Также есть ядра, поддерживающие на аппаратном уровне вычисление трансцендентных функций с одинарной точностью. Их обычно не учитывают при расчете пиковой производительности.

В алгоритмах молекулярной динамики большую часть времени расчета занимает построение списка соседей и вычисление сил взаимодействия между атомами. Однако доля операций, в которых можно использовать инструкции FMA, ничтожна. В результате выполнения любой одиночной операции сложения/умножения фактически приводит к тому, что половина вычислительной мощности ускорителя или сопроцессора остается незадействованной. В отличие от ускорителей процессоры Intel поколения Sandy Bridge и Ivy Bridge, установленные сегодня на большинстве современных суперкомпьютеров, не поддерживают набор инструкций FMA на аппаратном уровне.

Используемые в работе ускорители сравниваются в таблице 1.

3. Реализация атомистических алгоритмов на ускорителях

В данной работе для тестов использовались популярные пакеты программ для атомистического моделирования LAMMPS [32], GROMACS [33], NAMD (классические задачи) и CP2K (квантовые задачи).

Таблица 2. Поддерживаемые архитектуры различных модулей пакета программ LAMMPS

Гибридная архитектура	USER-CUDA	GPU	KOKKOS	USER-INTEL
GPU	+	+	+	-
Intel Xeon Phi, «родной» режим	-	-	+	-
Intel Xeon Phi, режим разгрузки	-	-	-	+

Модули предназначены для расширения базового функционала, часть из них позволяет проводить расчеты на гибридной архитектуре. Для расчетов с использованием GPU-ускорителей существует 3 разных модуля, которые имеют названия «GPU» [35], «USER-CUDA» и «KOKKOS» [36]. Они отличаются особенностями реализации и могут давать различные результаты по производительности в зависимости от задачи и от используемого оборудования. Стоит отметить, что модуль «KOKKOS» разрабатывался для карт NVIDIA Kepler последнего поколения и может работать медленно на картах предыдущего поколения NVIDIA Fermi. Поддержка ускорителей Intel Xeon Phi в стадии активной разработки, она частично реализована в модулях «KOKKOS» («родной» режим) и «USER-INTEL» (режим разгрузки) для небольшого числа межатомных потенциалов. Данные по указанным выше модулям приведены в таблице 2.

В пакетах GROMACS, NAMD и CP2K также существует возможность запуска задач на видеокартах. Реализована поддержка Intel Phi в «родном» режиме (GROMACS, CP2K) и режиме разгрузки (NAMD).

Создание эффективных алгоритмов для сложных многочастичных потенциалов не всегда тривиально, как показывает опыт разработки на GPU [18, 37, 38]. Одной из основных проблем является неоднородный доступ к памяти. В результате либо приходится использовать более ресурсоемкие атомарные операции, либо усовершенствовать имеющиеся алгоритмы. Стоит отметить, что для эффективного использования многопроцессорных вычислительных систем также приходится оптимизировать алгоритмы, в частности, для обеспечения динамической балансировки нагрузки на ядра [39].

4. Результаты тестов

4.1. Леннард-джонсовская жидкость

В данном разделе приводится анализ производительности пакета программ LAMMPS на различных гибридных архитектурах. Задачи запускались на суперкомпьютере МГУ им. М.В. Ломоносова «Ломоносов» [40] (видеокарты NVIDIA X2070) и суперкомпьютере МСЦ РАН МВС-10П (сопроцессоры Intel Xeon Phi). Видеокарта K40 исследовалась на тестовом компьютере, предоставленном компанией NVIDIA. Для оценки эффективности алгоритмов рассматривалась леннард-джонсовская жидкость из 10^6 атомов, длина траектории составляла 100 шагов. В качестве критерия сравнения использовалось время расчета одного шага на один атом, так как оно слабо зависит от полного числа атомов и служит объективным критерием быстродействия. Производительность гибридных архитектур соотносилась с производительностью обычных процессоров в метрике их пиковой производительности R_{peak} .

Рассмотрим подробнее данные на рисунке 7. В части а) приведено сравнение обычной версии LAMMPS (без векторизации кода) и с ручной векторизацией (модуль «USER-INTEL») на суперкомпьютерах МВС-10П и «Ломоносов». Для сравнения приведены данные однопроцессорных тестов на некоторых вышедших из эксплуатации машинах начала 2000-

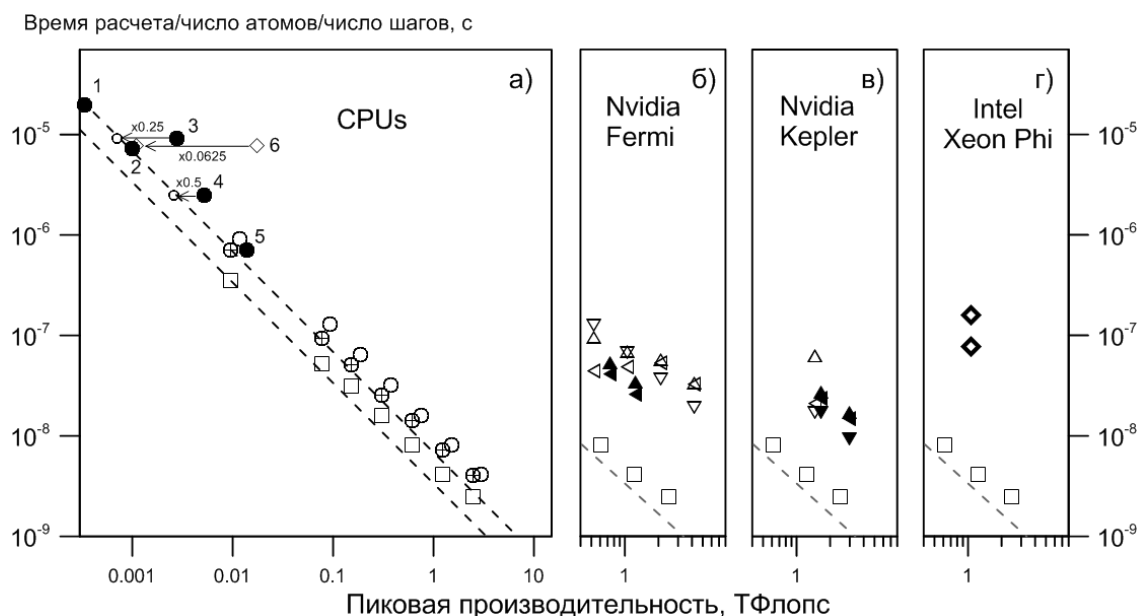


Рис. 7. Сравнение быстродействия МД-пакета LAMMPS на различных платформах: а) Расчеты на суперкомпьютере МВС-10П без ($\oplus$) и с векторизацией ($\square$) кода с использованием модуля USER-INTEL; на суперкомпьютере «Ломоносов» без векторизации кода ($\circ$). Для сравнения приведены данные однопроцессорных тестов с сайта LAMMPS [41] ($\bullet$, 1 — Pentium II 333 МГц, 2 — DEC Alpha 500 МГц, 3 — PowerPC 440, 4 — Power4 1.3 ГГц, 5 — Intel Xeon 3.47 ГГц). Точка 6 — время расчета на одном ядре Intel Xeon Phi; б) сравнение модулей USER-CUDA ($\triangleleft$), GPU ($\triangle$) и KOKKOS (∇) на видеокартах NVIDIA X5670 GPU (суперкомпьютер Ломоносов). Также приведены данные тестов на видеокартах C2075 с сайта LAMMPS (заполненные символы); в) сравнение модулей USER-CUDA ($\triangleleft$), GPU ($\triangle$) и KOKKOS (∇) на NVIDIA K40 GPU. Заполненные символы — данные тестов с сайта LAMMPS для видеокарт Tesla K20x; г) быстродействие ускорителя Intel Xeon Phi на МВС-10П ($\diamond$). Верхняя точка — запуск в native-mode без оптимизации, нижняя — использование оптимизации модуля KOKKOS.

х гг. (таблица 3). Пиковая производительность рассчитывалась как произведение тактовой частоты на число ядер и на число операций с плавающей точкой на один такт (в соответствии со значениями, приводящимися в списке Топ-500). Крайние левые точки для МВС-10П и «Ломоносова» соответствуют одному вычислительному ядру, крайние правые — 256 ядрам. Пунктиром показана идеальная масштабируемость, когда увеличение вычислительного поля в два раза приводит к уменьшению времени расчета в 2 раза для той же задачи. Видно, что оптимизация «USER-INTEL» позволяет добиться двукратного роста скорости расчета.

Рост производительности современных суперкомпьютеров идет как по пути наращивания вычислительных ядер, так и наращивания сложности самого ядра, внедрения операций FMA и поддержки векторных инструкций. Это приводит к увеличению теоретической пиковой производительности, которая зачастую не может использоваться на 100% для многих алгоритмов.

Эту ситуацию можно проиллюстрировать на примере процессоров Power4 и PowerPC 440 (точки 3 и 4 на рис. 7а), которые выбиваются из обратной пропорциональности времени расчета от пиковой производительности ядра. Однако эти точки ложатся на общую линию, если уменьшить реальное число операций на такт с 4 до 2 для Power4 и с 4 до 1 для PowerPC 440 (и, соответственно, пиковую производительность ядра). В первом случае 4 операции на такт обеспечиваются двумя операциями FMA, во втором случае — двойной операцией FMA (одна операция FMA применяется к двум сегментам данных). Таким образом, в данном случае реальная производительность составляет 50% и 25% от R_{peak} даже

Таблица 3. Сравнительная характеристика некоторых процессоров

Компьютер	Модель процессора	Тактовая частота, ГГц	Число операций с двойной точностью на такт	Пиковая производительность одного ядра, ГФлопс
МВС-10П	Xeon E5-2690	1.2	8	9.6
Ломоносов	Xeon X5570	2.93	4	11.73
Ross	DEC Alpha	0.5	2	1
BlueGene/L	PowerPC 440	0.7	4	2.8
Cheetah	Power4	1.3	4	5.2
Настольный	Xeon X5690	3.47	4	13.88

на одном ядре. Аналогичный результат справедлив и для ускорителя Intel Xeon Phi (точка 6 на рис. 7а), теоретически можно выполнять операции FMA над векторами из 8 элементов (16 операций на такт), при этом время расчета ложится на общую зависимость при уменьшении числа операций на такт с 16 до 1.

В части б) рисунка 7 показано сравнение времен расчета на кластере «Ломоносов» с использованием различных модулей LAMMPS. Аналогичное исследование для видеокарты NVIDIA Tesla K40 показано в части в) рисунка 7. Программная реализация алгоритмов на GPU сильно влияет на скорость расчета, для одних и тех же данных она может отличаться в несколько раз. Например, модуль «USER-CUDA» хорошо оптимизирован для запусков задач на одной видеокарте, но увеличение их числа не дает соответствующего увеличения скорости расчета. Несмотря на указанный разброс, во всех случаях их производительность существенно уступает производительности CPU в метрике R_{peak} . При этом использование видеокарт требует больших временных затрат на оптимизацию кода. Аналогичный вывод справедлив и при запуске задач на всех ядрах ускорителя Intel Xeon Phi SE10X в «родном» режиме, данные приведены в части г) рисунка 7. Аналогично одноядерному случаю сопроцессоры проигрывают обычным CPU по эффективности использования R_{peak} (к тому же выводу приходят авторы работы [?]). Таким образом, из одинаковых значений R_{peak} не следует одинаковое время решения задач. На это влияют два фактора, упоминавшихся ранее. Во-первых, в алгоритмах, не требующих операций FMA, фактически невозможно использовать более половины заявленной величины R_{peak} . Во-вторых, рост вычислительной мощности современных ускорителей не сопровождается соответствующим ростом каналов передачи данных, что может приводить к простоям из-за ожидания новых данных для дальнейших вычислений.

4.2. Белок в водной системе

Аналогичное сравнение суперкомпьютеров по эффективности использования пиковой вычислительной мощности R_{peak} сделано для задачи расчета свойств белка в водной системе. В сравнение по данной метрике включены и специализированные архитектуры типа ANTON.

Суперкомпьютер ANTON-2 основан на интегральной схеме специального назначения (ASIC), разработанной для численной реализации алгоритма классической молекулярной динамики в моделях с межчастичными потенциалами, ориентированными на биомолекулярные задачи. Суперкомпьютер содержит 512 узлов, объединенных специализированным

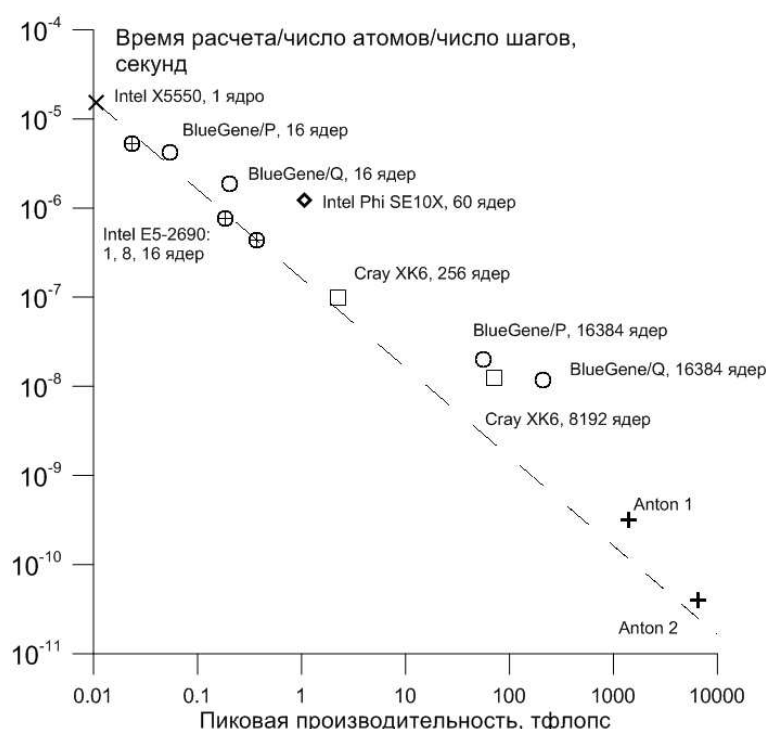


Рис. 8. Сравнение быстродействия теста АроА1 на классической и специализированной архитектуре. Символы $\oplus$ и $\diamond$ показывают производительность ПО Gromacs на суперкомпьютере MBC-10П, остальные — ПО NAMD на различных суперкомпьютерах.

интерконнектом с топологией 3-х мерного тора. При создании соответствующих специализированных микропроцессоров ASIC и интерконнекта разработчики преследовали цель реализации максимально возможного уровня параллелизации молекулярно-динамического алгоритма [23].

На рисунке 8 сравниваются расчетные времена для стандартного теста АроА1 (белок аполипротеин А-1, 92244 атома, 500 и более шагов). Приведены данные тестов ПО NAMD на суперкомпьютерах Cray XK6 [42], IBM BlueGene/P и BlueGene/Q [43], специализированной платформы ANTON первого и второго поколения (512 узлов) [23] и ПО Gromacs на суперкомпьютере MBC-10П. Несмотря на различную архитектуру, число ядер и программную реализацию молекулярно-динамического кода, данные хорошо согласуются между собой. Однако на суперкомпьютерах IBM BlueGene хорошо заметна вышеуказанная проблема с невозможностью полноценного использования операций FMA. Также на суперкомпьютерах IBM BlueGene и Cray при использовании большого числа ядер заметно увеличение времени расчета из-за обмена данными между узлами.

Полученный график показывает универсальность числа R_{peak} для сравнения различных архитектур, а также показывают перспективность узкоспециализированных суперкомпьютеров (типа ANTON-2) для задач классической молекулярной динамики.

4.3. Квантовый МД-расчет молекул воды

Метрика «время решения — пиковая производительность» пригодна и при рассмотрении квантовых МД-задач. Для сравнения различных суперкомпьютеров использовался стандартный тест воды из пакета программ CP2K. На рисунке 9 приведены времена расчета для различного числа молекул воды на суперкомпьютерах Cray XT3 и XT5, IBM BlueGene/P и K-100 ИПМ РАН.

Для одного узла производительность в секундах на 1 шаг довольно близка для различных систем. Роль интерконнекта становится очевидной при использовании нескольких

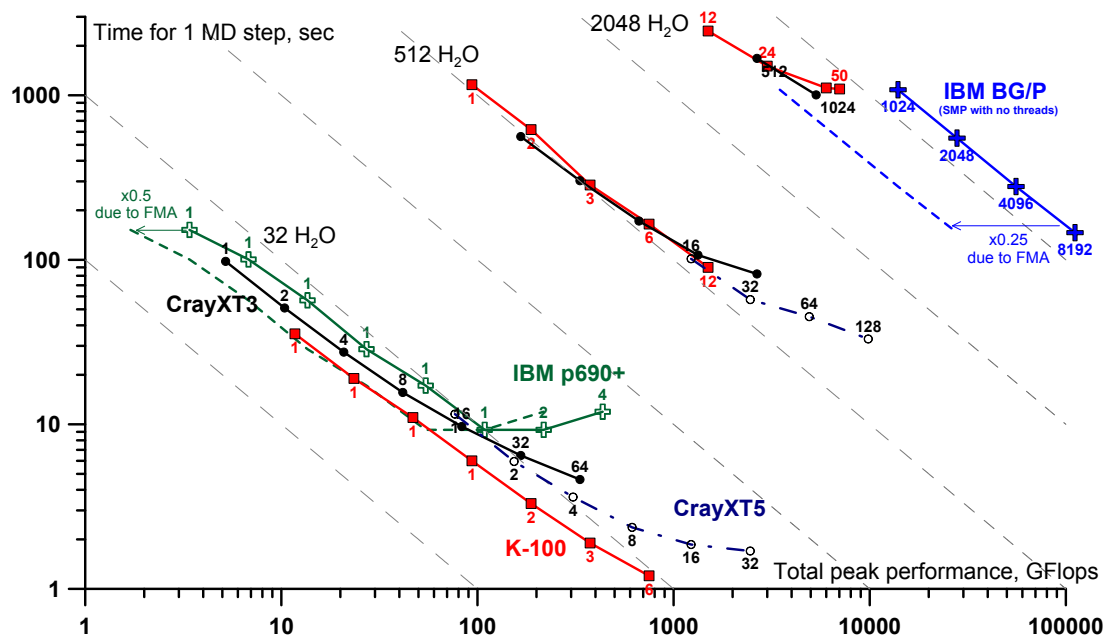


Рис. 9. Квантовый МД-расчет молекул воды (от 32 до 2048) с использованием пакета CP2K на различных суперкомпьютерах

узлов, когда происходит падение производительности из-за интенсивного обмена данными. Для суперкомпьютера IBM BlueGene/P также заметна потеря значительной доли пиковой производительности из-за операций FMA.

5. Заключение

Рассмотрены примеры задач, обладающих масштабируемостью на суперкомпьютеры экзафлопсного класса, для перспективных задач энергетики, физики, химии и других естественных наук. Развивается подход, который позволяет определить, может ли решение той или иной задачи загрузить одновременно сотни тысяч или даже миллионы вычислительных ядер в одном расчете и нужно ли это. Основная идея заключается, с одной стороны, в проверке масштабируемости алгоритмов при переходе к большему числу вычислительных ядер, а, с другой, в теоретической оценке размеров физической системы, рассмотрение которой требуется для решения поставленной задачи. Развиваемый подход позволяет установить перспективу нарастания сложности задач, принадлежащих к одному научному направлению, возможность решения которых будет открываться с прогрессом развития суперкомпьютеров.

В новой редакции Топ-500 от ноября 2014 в верхней десятке 7 тороидальных систем. Это связано с тем, что суперкомпьютеры в США создаются под определённые классы задач с учетом мнения пользователей. Два примера из практики IBM многих десятилетий.

Введена очевидная, но ранее не используемая метрика для ранжирования высокопроизводительных вычислительных систем «время решения — пиковая производительность (в единицах флопс)». Данная метрика использована для сравнения гибридных, специализированных и других систем на примерах моделей классической молекулярной динамики. Наилучшую эффективность в данной метрике на модели леннард-джонсовской жидкости показывают процессоры Intel Xeon с использованием алгоритмов с ручной векторизацией из пакета «USER-INTEL» в LAMMPS. Эффективность аппаратного обеспечения NVIDIA GPU повышается в моделях последнего поколения с использованием новейших программ-

ных решений (пакета «KOKKOS» в LAMMPS), однако на сегодняшний день значительно проигрывает эффективности Intel Xeon. Таким образом, при одинаковой вычислительной мощности наименьшее время расчета достигается на классических процессорах, хотя они проигрывают NVIDIA GPU по энергопотреблению и стоимости. Ускорители Intel Xeon Phi на текущий момент не эффективны для ускорения молекулярно-динамических расчетов и не оправдывают своей стоимости.

Результаты тестов показывают, что предложенная метрика выявляет аппаратное обеспечение, оптимизированное под тесты типа LINPACK и являющееся существенно менее эффективным для приложений иного типа. В частности, подобный результат был ожидаем для архитектур NVIDIA GPU и Intel Xeon Phi, однако и для процессоров IBM Power оказалось, что максимальная эффективность операций с плавающей точкой для задач молекулярной динамики соответствует лишь половине декларируемой пиковой производительности.

Показано, что архитектура таких специализированных решений, как ANTON и ANTON-2, обеспечивает близкое к 100% использование полной пиковой производительности этих суперкомпьютеров даже на молекулярно-динамических задачах малого размера.

Литература

1. IBM Journal of Research and Development, 2005:
URL: <http://www.research.ibm.com/journal/rd49-23.html> (дата обращения: 14.06.2015).
2. INCITE program: URL: <http://www.doeleadershipcomputing.org/> (дата обращения: 14.06.2015).
3. Стегайлов В.В., Норман Г.Э. Проблемы развития суперкомпьютерной отрасли в России: взгляд пользователя высокопроизводительных систем // Программные системы: теория и приложения: электрон. научн. журн. 2014. Т. 5, N. 1(19). С. 111–152.
URL: http://psta.psiras.ru/read/psta2014_1_111-152.pdf (дата обращения: 14.06.2015).
4. Норман Г.Э., Стегайлов В.В. Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // Математическое моделирование. 2012. Т. 24, N. 6. С. 3–44.
5. Янилкин А.В., Жилиев П.А., Куксин А.Ю., Норман Г.Э., Писарев В.В., Стегайлов В.В. Применение суперкомпьютеров для молекулярно-динамического моделирования процессов в конденсированных средах // Вычислительные методы и программирование. 2010. Т. 11, С. 111–116.
6. Жилиев П.А., Стегайлов В.В. Ab initio молекулярная динамика: перспективы использования многопроцессорных и гибридных суперЭВМ // Вычислительные методы и программирование. 2012. Т. 13, С. 37–45.
7. Eckhardt W. et al. 591 TFLOPS multi-trillion particles simulation on SuperMUC // Supercomputing. Vol. 7905, Springer Berlin Heidelberg, 2013. P. 1–12.
8. Stegailov V.V., Orekhov N.D., Smirnov G.S. HPC Hardware Efficiency for Quantum and Classical Molecular Dynamics // Lecture Notes in Computer Science (Proceedings of PaCT-2015 ed. by V. Malyshkin). 2015. V. 9251. P. 469–473.
DOI: 10.1007/978-3-319-21909-7_45
9. Смирнов Г.С., Стегайлов В.В. Эффективность алгоритмов классической молекулярной динамики на суперкомпьютерном аппаратном обеспечении // Математическое моделирование. 2016. Т. 28.
10. Куксин А.Ю., Ланкин А.В., Морозов И.В., Норман Г.Э., Орехов Н.Д., Писарев В.В., Смирнов Г.С., Стариков С.В., Стегайлов В.В., Тимофеев А.В. ЗАЧЕМ и КАКИЕ

нужны суперкомпьютеры эксафлопсного класса? Предсказательное моделирование свойств и многомасштабных процессов в материаловедении // Программные системы: теория и приложения: электрон. научн. журн. 2014. Т. 5, N. 1(19). С. 191–244.
URL: http://psta.psiras.ru/read/psta2014_1_191-244.pdf (дата обращения: 14.06.2015).

11. Smirnov G.S., Stegailov V.V. Melting and superheating of sI methane hydrate: Molecular dynamics study // Journal of Chemical Physics. 2012. V. 136, N. 4, P. 044523.
12. Smirnov G.S., Stegailov V.V. Toward Determination of the New Hydrogen Hydrate Clathrate Structures // Journal of Physical Chemistry Letters. 2013. V. 4, P. 3560-3564.
13. Bai P., Tsapatsis M., Siepmann J.I. TraPPE-zeo: Transferable potentials for phase equilibria force field for all-silica zeolites // J. Phys. Chem. C. 2013. V. 117, P. 24375-24387.
14. Chen B., Siepmann J.I. Transferable potentials for phase equilibria. 3. Explicit-hydrogen description of normal alkanes // J. Phys. Chem. B. 1999. V. 103, P. 5370-5379.
15. Yoshioka T., Tanaka J., Tusru T., Asaeda M. Transport Properties of Condensable and Non-condensable Gas Mixtures through Microporous Silica Membranes Studied with Molecular Dynamics Simulation // Asian Pacific Confederation of Chemical Engineering congress program and abstracts. 2004. P. 741.
16. Frankland S.J.V et al. The stress-strain behavior of polymer-nanotube composites from molecular dynamics simulation // Compos. Sci. Technol. 2003. V. 63, N. 11, P. 1655-1661.
17. Gavrilov A. A., Chertovich A. V., Khalatur P. G., Khokhlov A. R. Effect of nanotube size on the mechanical properties of elastomeric composites // Soft Matter. 2013. V. 9, N. 15. P. 4067.
18. Morozov I.V., Kazennov A.M., Bystryi R.G., Norman G.E., Pisarev V.V., Stegailov V.V. Molecular dynamics simulations of the relaxation processes in the condensed matter on GPUs // Computer Physics Communications. 2011. V. 182, P. 1974–1978.
19. Collaboration of Oak Ridge, Argonne, and Livermore (CORAL):
URL: <http://energy.gov/downloads/fact-sheet-collaboration-oak-ridge-argonne-and-livermore-coral> (дата обращения: 14.06.2015).
20. Список 500 лучших суперкомпьютеров. URL: <http://top500.org> (дата обращения: 16.04.2015).
21. High-Performance Computing Using FPGAs / Ed. Vanderbauwhede W., Benkrid K. —New York: Springer Verlag, 2013, 803 p.
22. Ohmura I., Morimoto G., Ohno Y., Hasegawa A., Taiji M. MDGRAPE-4: a special-purpose computer system for molecular dynamics simulations // Phil Trans R Soc A, 2014, vol. 372, p. 20130387.
23. Shaw D.E. et al. Anton 2: Raising the Bar for Performance and Programmability in a Special-Purpose Molecular Dynamics Supercomputer // SC14 Int. Conf. High Perform. Comput. Networking, Storage Anal. —Piscataway:IEEE Press, 2014, p. 41–53.
24. Подрыга В.О., Поляков С.В. Молекулярно-динамическое моделирование установления термодинамического равновесия в никеле // Математическое моделирование, 2015, т. 27, № 3, с. 3–19.

25. Подрыга В.О., Поляков С.В., Пузырьков Д.В. Суперкомпьютерное молекулярное моделирование термодинамического равновесия в микросистемах газ-металл // Вычислительные методы и программирование, 2015, т. 16 , №. 1, с. 123–138.
26. Пестряев Е.М. Тестирование многоядерных графических процессоров на алгоритме молекулярной динамики // Математическое моделирование, 2014, т. 26, №1, с. 1–12.
27. Reid F., Bethune I. Optimising CP2K for the Intel Xeon Phi. URL: <http://www.prace-ri.eu/IMG/pdf/wp140.pdf> (дата обращения: 16.04.2015).
28. Jeong H. et al. Performance of Kepler GTX Titan GPUs and Xeon Phi System. URL: <http://arxiv.org/abs/1311.0590> (дата обращения: 16.04.2015).
29. Chan E.Y.K. Benchmarks for Intel MIC Architecture. URL: <http://www.clustertech.com/wp-content/uploads/2014/01/MICBenchmark.pdf> (дата обращения: 16.04.2015).
30. URL: <http://www.nvidia.ru/object/gpu-computing-facts-ru.html> (дата обращения: 16.04.2015).
31. Pennycook S.J. et al. Exploring SIMD for molecular dynamics, using Intel Xeon processors and Intel Xeon Phi coprocessors // IPDPS-13 Proceedings, 2013, 1338 c.
32. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comput. Phys., 1995, vol. 117, № 1, p. 1–19.
33. Pronk, S. et al. GROMACS 4.5: a highthroughput and highly parallel open source molecular simulation toolkit. // Bioinformatics, 2013, vol. 29, № 7, 845–854
34. Phillips J.C. et al. Scalable molecular dynamics with NAMD // J. Comput. Chem. 2005. Vol. 26, № 16. P. 1781–1802.
35. Brown W.M. et al. Implementing molecular dynamics on hybrid high performance computers–short range forces // Comput. Phys. Commun, 2011, vol. 182, № 4, p. 898–911.
36. Carter Edwards H., Trott C.R., Sunderland D. Kokkos: Enabling manycore performance portability through polymorphic memory access patterns // J. Parallel Distrib. Comput., 2013, vol. 74, № 12, p. 3202–3216.
37. Brown W.M., Kohlmeyer A., Plimpton S.J., Tharrington A.N. Implementing molecular dynamics on hybrid high performance computers – Particle–particle particle-mesh // Comput. Phys. Commun., 2012, vol. 183, № 3, p. 449–459.
38. Brown W.M., Yamada M. Implementing molecular dynamics on hybrid high performance computers - Three-body potentials // Comput. Phys. Commun., 2013, vol. 184, № 12, p. 2785–2793.
39. Begau C., Sutmann G. Adaptive dynamic load-balancing with irregular domain decomposition for particle simulations // Comput. Phys. Commun, 2015, vol. 190, p. 51–61.
40. Воеводин Вл.В., Жуматий С.А., Соболев С.И., Антонов А.С., Брызгалов П.А., Никитенко Д.А., Стефанов К.С., Воеводин Вад.В. Практика суперкомпьютера “Ломоносов” // Открытые системы. 2012. т. 7, с. 36–39.
41. URL: http://lammps.sandia.gov/bench/lj_one.html (дата обращения: 16.04.2015).
42. Sun Y., Zheng G., Mei C., Bohm E.J., Phillips J.C., Kale L. V., Jones T.R. // In proc. Int. Conf. High Perform. Comput. Networking, Storage Anal, 2012.

43. Kumar S., Sun Y., Kale L. V. Acceleration of an asynchronous message driven programming paradigm on IBM Blue Gene/Q // IPDPS-13 Proceedings, 2013, 1338 p.