



**МОСКОВСКИЙ АВИАЦИОННЫЙ ИНСТИТУТ
(НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)**

Факультет «Прикладная математика и физика»

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №5

Тема: Молекулярное моделирование

Выполнила: Оленева Я.А.

Группа: 08-408

проверил: Семенов С.А.

Оценка:

Дата:

Подпись преподавателя:

Москва, 2011

Содержание

1. Постановка задачи
2. Описание
3. Алгоритм
4. Результаты
5. Сравнение с CPU
6. Выводы

Постановка задачи:

Написать программу, которая реализует взаимодействие двух атомов.

Программа должна:

- Выполняться параллельно
- Распределять память
- Проверять наличие требуемого аппаратного и программного обеспечения
- Производить проверку на ошибки
- Использовать векторные операции

Описание

Для расчета сил взаимодействия будем рассматривать потенциалы атомов.

Сила взаимодействия может быть вычислена по формуле:

$$f(r) = -\frac{d\Phi}{dr}(r),$$

где r – расстояние между атомами, а $\Phi(r)$ – потенциал взаимодействия двух атомов.

Траектория движения частиц зависит от силы, с которой одна из них действует на другую. Для этого задается шаг (по времени), который зависит от частоты колебаний системы.

Потенциал Терсоффа имеет следующий вид:

$$E = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_{i,j(\neq i)} V_{i,j},$$

Где i, j – индексы частиц. E – полная потенциальная энергия; E_i – энергия, приходящаяся на одну частицу; $V_{i,j}$ – энергия, приходящаяся на пару частиц:

$$V_{i,j} = f_C(r_{ij}) \left(f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij}) \right),$$

r_{ij} – расстояние между частицами i, j , f_C – функция обрезания (cutoff function):

$$f_C(r) = \begin{cases} 1, & r < R - D, \\ \frac{1}{2} \left[1 - \sin \left(\frac{\pi(r - R)}{2D} \right) \right], & R - D < r < R + D \\ 0, & r > R + D \end{cases}$$

f_R – функция отталкивания, f_A – функция притяжения.

$$f_A(r) = -Be^{(-\lambda_2 r)},$$

$$f_R(r) = Ae^{(-\lambda_1 r)},$$

$$b_{ij} = (1 + \beta^n \zeta_{ij}^n)^{-1/(2n)},$$

$$\zeta_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_C(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) e^{(\lambda_3^3 (r_{ij} - r_{ik})^3)},$$

Коэффициенты, используемые для атомов углерода:

$$\begin{aligned} A &= 1393.6 eV, & c &= 38049 \\ B &= 346.74 eV, & d &= 4.3484, \\ \lambda_1 &= 3.4879 \text{ \AA}^{-1}, & h &= -0.57058 \\ \lambda_2 &= 2.2119 \text{ \AA}^{-1}, & R &= 1.95 \text{ \AA}^{-1}, \\ \beta &= 1.5724 \cdot 10^{-7}, & D &= 0.15 \text{ \AA}^{-1}, \end{aligned}$$

Алгоритм

- Проверка наличия необходимых устройств
- Проверка формата файла с входными данными
- Выделение необходимого количества памяти на CPU и GPU
- Загрузка данных из файла на CPU
- загрузка данных из CPU на GPU
- обработка данных на GPU, получение силы взаимодействия атомов
- копирование результата с GPU на CPU
- вывод результата
- высвобождение памяти GPU и CPU

Результаты

0: 0 atom x: 0.000000, v: 0.000000, E: 9.085289, 1 atom x: 1.800000, v: 0.000000, E: 9.085289
1: 0 atom x: 0.000000, v: 0.000010, E: 9.085294, 1 atom x: 1.800000, v: -0.000010, E: 9.085294
2: 0 atom x: 0.002000, v: 0.200010, E: 9.179539, 1 atom x: 1.798000, v: -0.200010, E: 9.179539
3: 0 atom x: 0.006356, v: 0.435611, E: 9.388376, 1 atom x: 1.793644, v: -0.435611, E: 9.388376
4: 0 atom x: 0.013109, v: 0.675316, E: 9.722050, 1 atom x: 1.786890, v: -0.675316, E: 9.722050
5: 0 atom x: 0.022333, v: 0.922366, E: 10.198053, 1 atom x: 1.777667, v: -0.922366, E: 10.198053
6: 0 atom x: 0.034137, v: 1.180399, E: 10.843209, 1 atom x: 1.765863, v: -1.180399, E: 10.843209
7: 0 atom x: 0.048674, v: 1.453678, E: 11.697178, 1 atom x: 1.751326, v: -1.453678, E: 11.697178
8: 0 atom x: 0.066148, v: 1.747406, E: 12.818210, 1 atom x: 1.733852, v: -1.747406, E: 12.818210
9: 0 atom x: 0.086830, v: 2.068176, E: 14.292709, 1 atom x: 1.713170, v: -2.068176, E: 14.292709
10: 0 atom x: 0.111076, v: 2.424649, E: 16.251581, 1 atom x: 1.688924, v: -2.424649, E: 16.251581
11: 0 atom x: 0.139362, v: 2.828599, E: 18.899397, 1 atom x: 1.660638, v: -2.828599, E: 18.899397
12: 0 atom x: 0.172329, v: 3.296643, E: 22.568895, 1 atom x: 1.627671, v: -3.296643, E: 22.568895
13: 0 atom x: 0.210861, v: 3.853194, E: 27.829565, 1 atom x: 1.589139, v: -3.853194, E: 27.829565
14: 0 atom x: 0.256219, v: 4.535831, E: 35.721115, 1 atom x: 1.543781, v: -4.535831, E: 35.721115
15: 0 atom x: 0.310276, v: 5.405744, E: 48.306747, 1 atom x: 1.489724, v: -5.405744, E: 48.306747
16: 0 atom x: 0.375975, v: 6.569842, E: 70.160088, 1 atom x: 1.424025, v: -6.569842, E: 70.160088
17: 0 atom x: 0.458305, v: 8.232997, E: 113.109970, 1 atom x: 1.341695, v: -8.232997, E: 113.109970
18: 0 atom x: 0.566719, v: 10.841396, E: 215.660767, 1 atom x: 1.233281, v: -10.841396, E: 215.660767
19: 0 atom x: 0.722429, v: 15.570991, E: 561.878601, 1 atom x: 1.077572, v: -15.570991, E: 561.878601
20: 0 atom x: 0.989312, v: 26.688391, E: 980.982849, 1 atom x: 0.810688, v: -26.688391, E: 980.982849
21: 0 atom x: 1.334714, v: 34.540199, E: 117.843552, 1 atom x: 0.465286, v: -34.540199, E: 117.843552
22: 0 atom x: 1.555169, v: 22.045492, E: 33.540569, 1 atom x: 0.244831, v: -22.045492, E: 33.540569
23: 0 atom x: 1.756504, v: 20.133469, E: 11.385162, 1 atom x: 0.043496, v: -20.133469, E: 11.385162
24: 0 atom x: 1.952337, v: 19.583256, E: 0.000000, 1 atom x: -0.152337, v: -19.583256, E: 0.000000
25: 0 atom x: 2.145262, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -0.345262, v: -19.292570, E: 0.000000
26: 0 atom x: 2.338188, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -0.538188, v: -19.292570, E: 0.000000
27: 0 atom x: 2.531114, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -0.731114, v: -19.292570, E: 0.000000
28: 0 atom x: 2.724040, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -0.924039, v: -19.292570, E: 0.000000
29: 0 atom x: 2.916965, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -1.116965, v: -19.292570, E: 0.000000
30: 0 atom x: 3.109891, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -1.309891, v: -19.292570, E: 0.000000
31: 0 atom x: 3.302817, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -1.502816, v: -19.292570, E: 0.000000
32: 0 atom x: 3.495742, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -1.695742, v: -19.292570, E: 0.000000
33: 0 atom x: 3.688668, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -1.888668, v: -19.292570, E: 0.000000
34: 0 atom x: 3.881594, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -2.081594, v: -19.292570, E: 0.000000
35: 0 atom x: 4.074520, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -2.274519, v: -19.292570, E: 0.000000
36: 0 atom x: 4.267446, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -2.467445, v: -19.292570, E: 0.000000
37: 0 atom x: 4.460371, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -2.660371, v: -19.292570, E: 0.000000
38: 0 atom x: 4.653297, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -2.853296, v: -19.292570, E: 0.000000
39: 0 atom x: 4.846223, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -3.046222, v: -19.292570, E: 0.000000
40: 0 atom x: 5.039149, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -3.239148, v: -19.292570, E: 0.000000
41: 0 atom x: 5.232075, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -3.432073, v: -19.292570, E: 0.000000
42: 0 atom x: 5.425001, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -3.624999, v: -19.292570, E: 0.000000
43: 0 atom x: 5.617927, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -3.817925, v: -19.292570, E: 0.000000
44: 0 atom x: 5.810853, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -4.010850, v: -19.292570, E: 0.000000
45: 0 atom x: 6.003779, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -4.203776, v: -19.292570, E: 0.000000
46: 0 atom x: 6.196705, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -4.396702, v: -19.292570, E: 0.000000
47: 0 atom x: 6.389631, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -4.589628, v: -19.292570, E: 0.000000
48: 0 atom x: 6.582557, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -4.782554, v: -19.292570, E: 0.000000
49: 0 atom x: 6.775483, v: 19.292570, E: 0.000000, 1 atom x: -4.975480, v: -19.292570, E: 0.000000

Сравнение с CPU

Время выполнения на GPU программы составляет 0,58ms. Эквивалентная программа, написанная на C, выполняется на CPU за примерно 0,193s, следовательно, этот фрагмент программы ускорен примерно в почти 350 раз.

Выводы: в ходе выполнения данной лабораторной работы выяснила, что молекулярное моделирование — собирательное название методов исследования структуры и свойств молекул вычислительными методами с последующей визуализацией результатов, обеспечивающие их трехмерное представления при заданных в расчете условиях. Расчеты простейших систем возможно выполнять вручную, но более сложные системы слишком трудно из-за большого объема вычислений, поэтому используются различные компьютерные методы. Также благодаря постоянно возрастающей вычислительной мощности машин становится возможным смоделировать объекты, состоящие не только из нескольких десятков и сотен атомов, но и из миллиона и даже миллиарда.