



МОСКОВСКИЙ АВИАЦИОННЫЙ ИНСТИТУТ
(Национальный исследовательский университет)

Лабораторная работа №5
«Молекулярное моделирование»

Выполнила: Кузнецова С.А.

4 курс, группа 08-408

Руководитель: Семенов С.А.

Москва, 2011

Содержание

1. Постановка задачи.....	3
2. Описание.....	3
3. Алгоритм.....	4
4. Результат.....	5
5. Сравнение с CPU.....	7
6. Итоги, выводы.....	7

Постановка задачи

Написать программу, реализующую построение молекулярного взаимодействия двух атомов гелия. Программа должна:

- выполняться параллельно
- распределять память
- проверять наличие требуемого аппаратного и программного обеспечения
- производить проверку на ошибки
- использовать векторные операции

Описание

Благодаря использованию нитей, программа параллельно обрабатывает массивы данных в памяти видеокарты. Программа рассматривает парные потенциалы, рассчитывая силу взаимодействия 2 атомов по соответствующей формуле Леннарда-Джонса.

Траектория движения частиц зависит от силы, с которой одна частица действует на другую. Для этого задается шаг по времени, зависящий от максимальной частоты колебаний системы.

Алгоритм

В ходе работы программа:

- проверяет наличие необходимых устройств
- проверяет формат файла с входными данными
- выделяет необходимое количество памяти на CPU и GPU
- загружает данные об исходном состоянии системы на GPU
- загрузка данных из CPU на GPU
- обработка данных, получение новых состояний системы
- копирование результата с GPU на CPU
- вывод результата
- высвобождение памяти GPU и CPU

Результаты

0: 0 atom x: 0.000000, v: 0.000000, E: 44.793803, 1 atom x: 1.800000, v: 0.000000
0, E: 44.793803

1: 0 atom x: 0.000000, v: 0.000005, E: 44.793826, 1 atom x: 1.800000, v: -0.0000
05, E: 44.793826

2: 0 atom x: 0.011699, v: 2.339887, E: 56.897609, 1 atom x: 1.788301, v: -2.3398
87, E: 56.897609

3: 0 atom x: 0.036331, v: 4.926290, E: 91.690734, 1 atom x: 1.763669, v: -4.9262
90, E: 91.690734

4: 0 atom x: 0.078619, v: 8.457662, E: 198.383466, 1 atom x: 1.721381, v: -8.457
662, E: 198.383466

5: 0 atom x: 0.152445, v: 14.765122, E: 731.725704, 1 atom x: 1.647555, v: -14.7
65122, E: 731.725704

6: 0 atom x: 0.316575, v: 32.826004, E: 16675.065788, 1 atom x: 1.483425, v: -32
.826004, E: 16675.065788

7: 0 atom x: 1.694936, v: 275.672198, E: 317.015743, 1 atom x: 0.105064, v: -275
.672198, E: 317.015743

8: 0 atom x: 2.924950, v: 246.002812, E: -0.385951, 1 atom x: -1.124950, v: -246
.002812, E: -0.385951

9: 0 atom x: 4.151738, v: 245.357694, E: -0.022819, 1 atom x: -2.351738, v: -245
.357694, E: -0.022819

10: 0 atom x: 5.378531, v: 245.358434, E: -0.003346, 1 atom x: -3.578531, v: -24
5.358434, E: -0.003346

11: 0 atom x: 6.605323, v: 245.358473, E: -0.000783, 1 atom x: -4.805323, v: -24

5.358473, E: -0.000783

12: 0 atom x: 7.832115, v: 245.358479, E: -0.000243, 1 atom x: -6.032115, v: -24

5.358479, E: -0.000243

13: 0 atom x: 9.058908, v: 245.358480, E: -0.000092, 1 atom x: -7.258908, v: -24

5.358480, E: -0.000092

14: 0 atom x: 10.285700, v: 245.358480, E: -0.000039, 1 atom x: -8.485700, v: -2

45.358480, E: -0.000039

15: 0 atom x: 11.512492, v: 245.358480, E: -0.000019, 1 atom x: -9.712492, v: -2

45.358480, E: -0.000019

16: 0 atom x: 12.739285, v: 245.358480, E: -0.000010, 1 atom x: -10.939285, v: -

245.358480, E: -0.000010

17: 0 atom x: 13.966077, v: 245.358480, E: -0.000005, 1 atom x: -12.166077, v: -

245.358480, E: -0.000005

18: 0 atom x: 15.192870, v: 245.358480, E: -0.000003, 1 atom x: -13.392870, v: -

245.358480, E: -0.000003

19: 0 atom x: 16.419662, v: 245.358480, E: -0.000002, 1 atom x: -14.619662, v: -

245.358480, E: -0.000002

20: 0 atom x: 17.646455, v: 245.358480, E: -0.000001, 1 atom x: -15.846455, v: -

245.358480, E: -0.000001

Сравнение с CPU

Время выполнения на GPU программы составляет 0.434752 ms. Эквивалентная программа, написанная на C, выполняется на CPU за примерно 700 ms, следовательно, этот фрагмент программы ускорен примерно в почти 2000 раз.

Выводы

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. Эти методы используются в компьютерной химии, вычислительной биологии и науке о материалах для изучения молекулярных систем различных размеров.

Потенциал Леннард-Джонса (потенциал 6-12) — простая модель парного взаимодействия неполярных молекул, описывающая зависимость энергии взаимодействия двух частиц от расстояния между ними. Эта модель достаточно реалистично передает свойства реального взаимодействия сферических неполярных молекул и поэтому широко используется в расчётах и при компьютерном моделировании.