Опыт использования видеоускорителей Nvidia Tesla для моделирования теплофизических свойств

Демьянов Г.С., Дождиков В.С., Минаков Д.В., Левашов П.Р.
Объединенный институт высоких температур РАН
Москва, Россия

Международная конференция
«Суперкомпьютерные дни в России 2025»
29 – 30 сентября 2025 г.

Проблемы текущего момента

- Далеко не у всех организаций есть крупные суперкомпьютеры (от 10^4 процессорных ядер)
- Квантовое моделирование обычно требует не слишком большого количества ядер (несколько сотен), но расчеты обычно длительные (минимум несколько дней) и их требуется много
- На суперкомпьютерах центров коллективного пользования относительно мало узлов с видеоускорителями, на такие узлы большие очереди
- На платных ресурсах расчеты на узлах с видеоускорителями стоят значительно выше, чем на обычных узлах
- На сегодняшний день оптимальный выход – создание собственных небольших суперкомпьютеров «для бедных»

Типичный суперкомпьютер с видеоускорителями NVidia Tesla

- 1 или 2 узла, 1 или 2 процессора на узел, 1-4 видеоускорителя на узел
- Видеоускорители Nvidia Tesla P100 и V100 с пиковой производительностью 5.3 и 7.8 Тфлопс на операциях с двойной точностью сегодня стоят достаточно дешево, особенно для сокета SXM
- Это связано с высвобождением видеоускорителей предыдущих версий, использовавшихся для высокопроизводительных вычислений и для майнинга криптовалюты
- Сегодня видеоускоритель P100 (16 Гбайт памяти) с разъемом PCIe можно купить менее, чем за 15 тыс. руб.
- Также можно приобрести готовый вычислительный модуль с 4 видеокартами V100 с поддержкой NVLink, по цене вполне можно уложиться в 500 тыс. руб.

Моделирование теплофизических свойств жидких металлов

Жидкий металл = квантовая кулоновская система

- Жидкий металл представляет собой квантовую кулоновскую систему с сильным взаимодействием
- На примере алюминия (3 электрона на атом) при температуре 1500 К и плотности 2.24 г/см^3:
  - концентрация электронов $1.5 \cdot 10^{23}$ см$^{-3}$;
  - параметр вырождения $n\lambda_e^3 =$**1068**;
  - параметр неидеальности электронов (квантовый): $\Gamma_q = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 <r_e> E_F} =$**1.2**
  - параметр неидеальности ионов: $\Gamma_i = \frac{9e^2}{4\pi\varepsilon_0 <r_i> k_B T} \approx \mathbf{600}$
- Теоретическое описание жидких металлов сильно затруднено отсутствием малых параметров и дальнего порядка

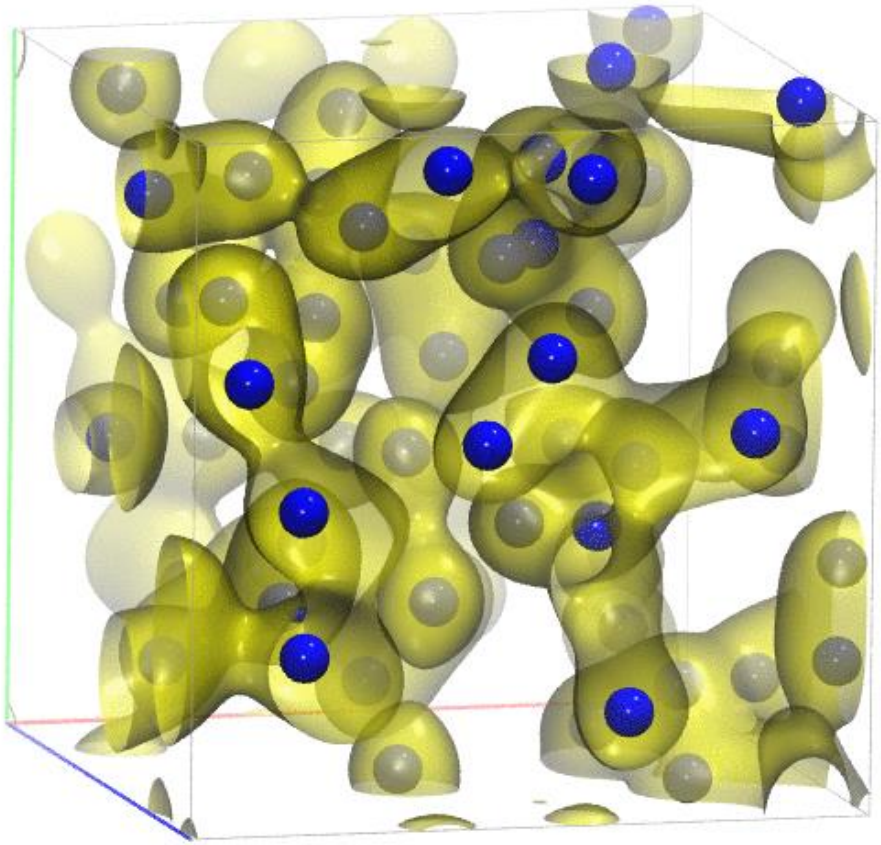
Метод квантовой молекулярной динамики (КМД)

Версия 6.4

- Адиабатическое приближение
- Электроны квантовые и описываются в рамках метода функционала плотности
- Ионы классические и движутся под действием сил со стороны ионов и других электронов

Параметры КМД-моделирования:

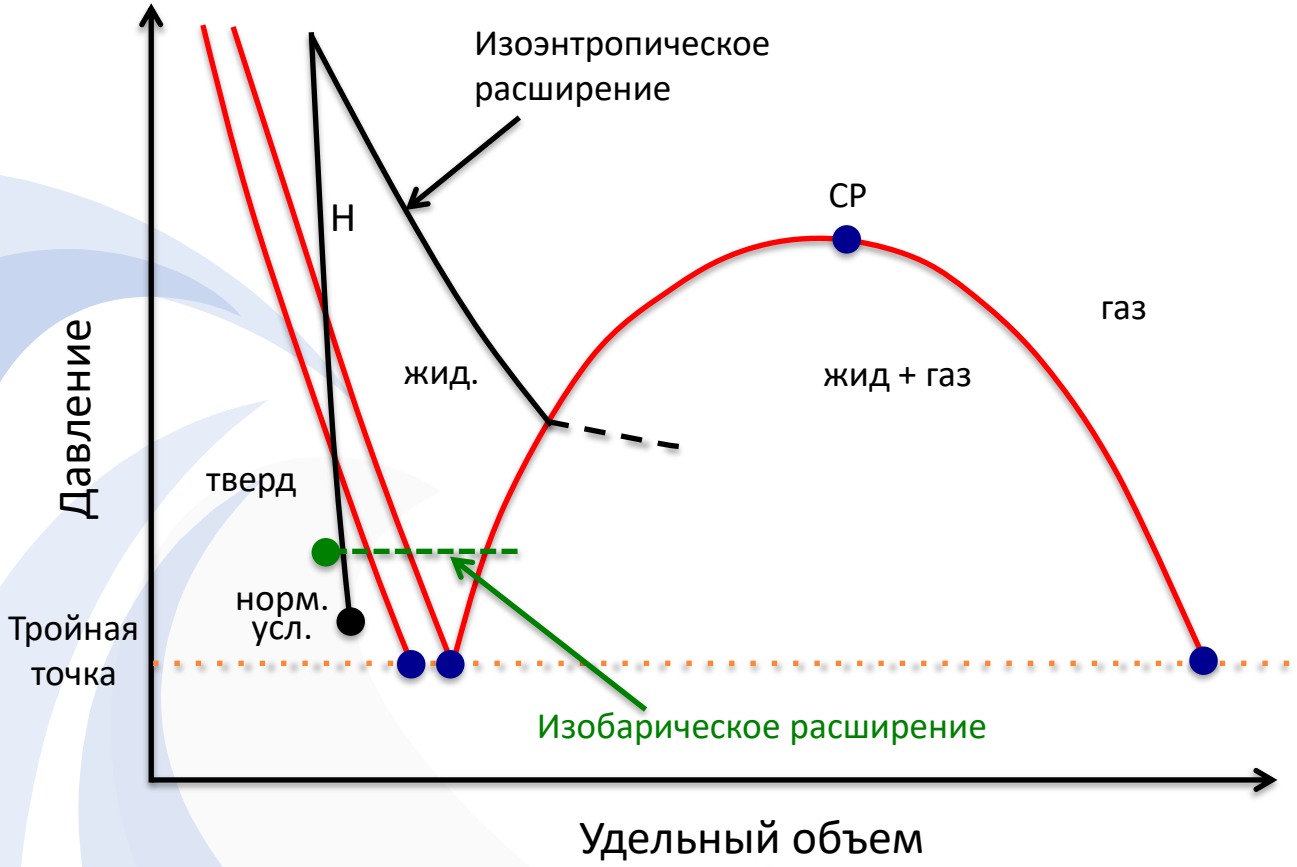
- Обменно-корреляционный функционал PBE (обобщенно-градиентное приближение)
- Псевдопотенциалы PAW с различным числом валентных электронов
- Г-точка, Baldereschi, сетка до 4x4x4 для достижения сходимости
- 54-250 атомов, ансамбль NVT



G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **47**, 558 (1993); **49**, 14251 (1994).
G. Kresse and J. Furthmuller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).

Экспериментальные методы исследования металлов

Схематическая фазовая диаграмма



Расширенные жидкие металлы можно изучать с помощью

- изоэнтропического расширения (при высоких давлениях)
- изобарического расширения (при низких давлениях)
- расширения фольг

Измеряемые величины:

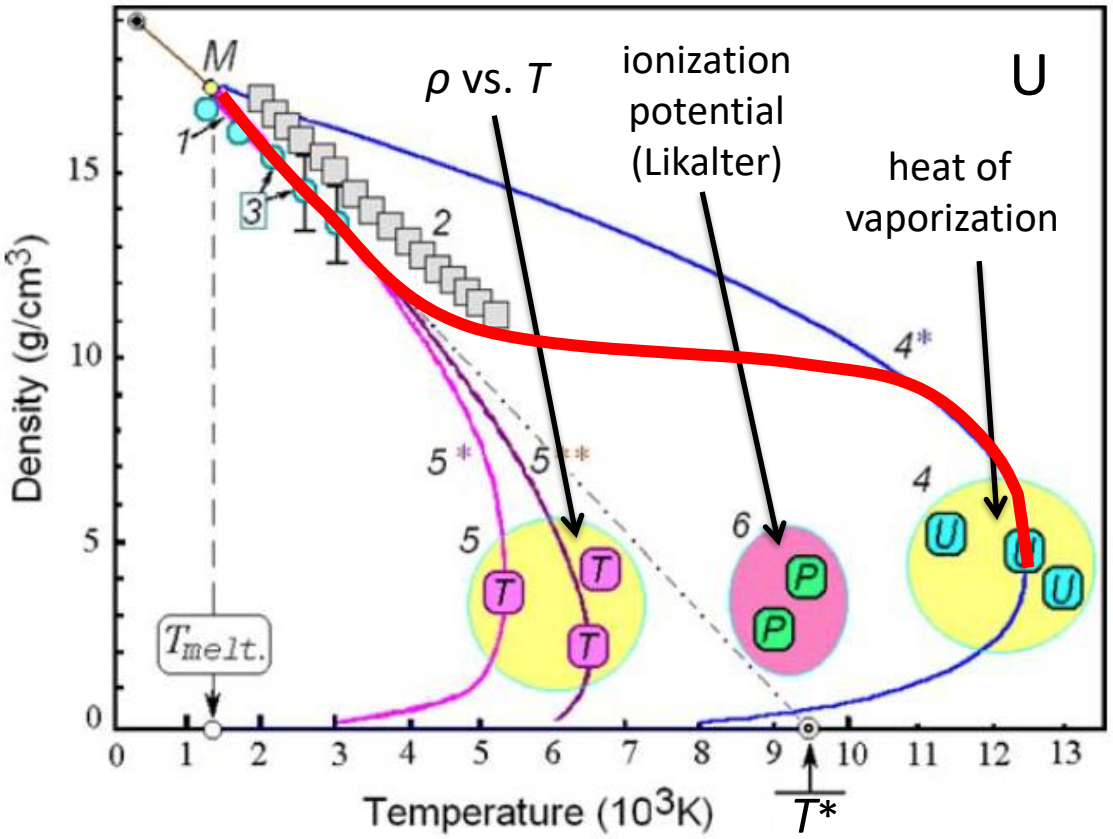
Для изоэнтропического расширения:

- давление
- скорость расширения

Для изобарического расширения:

- давление
- температура
- плотность
- энергия/энтальпия
- электросопротивление
- скорость звука

Оценка критических параметров металлов на примере урана



The same situation is valid for a number of “bad” metals for which $T^*/\Delta H_{sub}$ ≈ 0.16-0.19: V, Co, **Mo**, **W**

Analysis by Iosilevsky I.L.

Three main methods of estimation of ρ_c and T_c :

- from the heat of vaporization;
- from plasma properties, i.e., ionization potential;
- from extrapolation of density-temperature experimental dependence

The results are quite different, so some assumption should be made to explain this contradiction:

- wrong experimental data;
- the form of binodal is not convex;
- anomalously low value of critical compressibility factor PV/RT or the relation ρ_c / ρ_0

Iosilevsky I.L. and Gryaznov V.K. J. Nucl. Mat. **344**, 30 (2005)

Ударное сжатие и разгрузка Mo: *P-u*

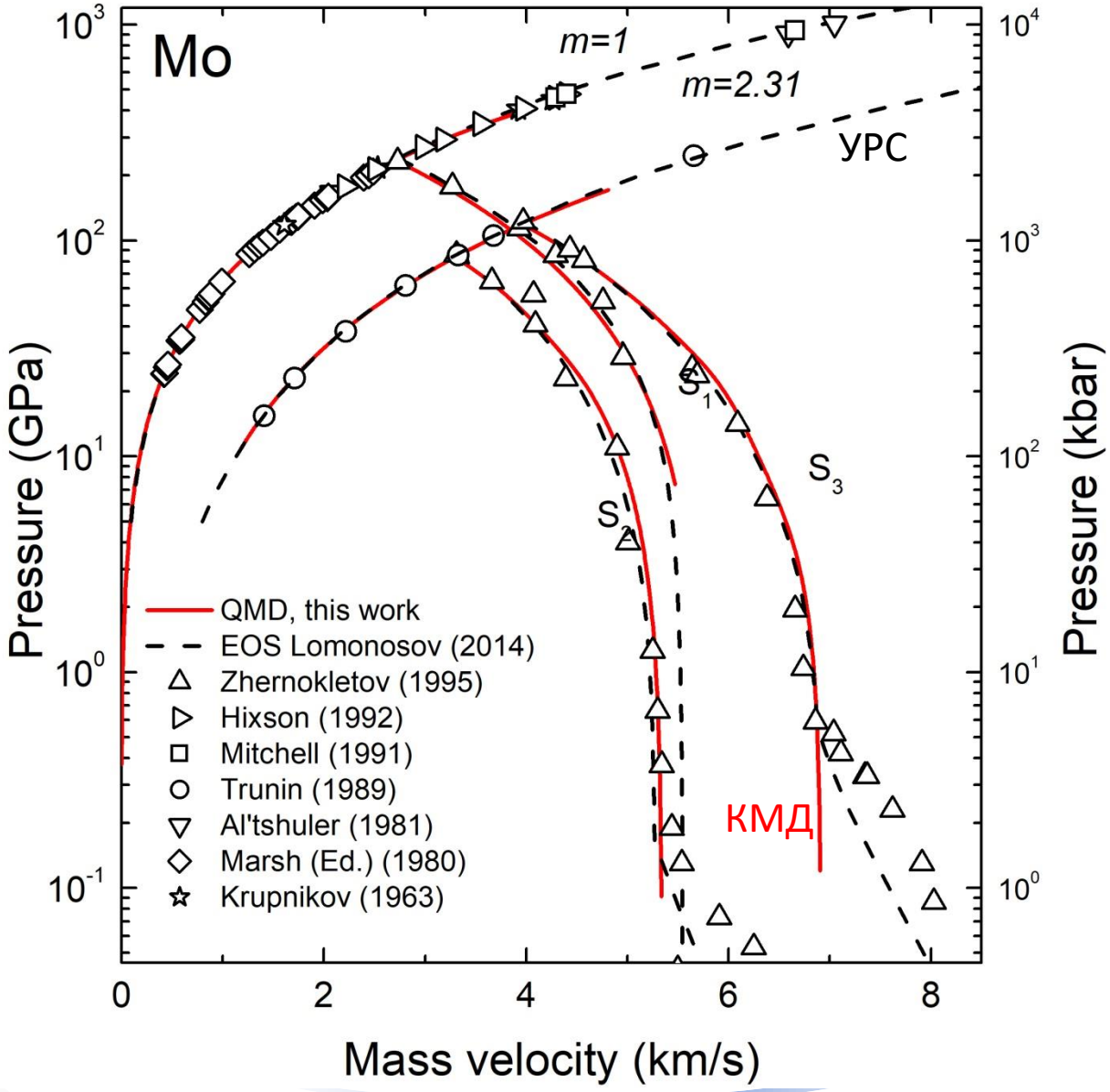
Начальные точки изоэнтроп:

m = 1:
- *U* = 2.7 км/с;
- *T* = 5.3 кК;
- *P* = 230 ГПа;

m = 2.31:

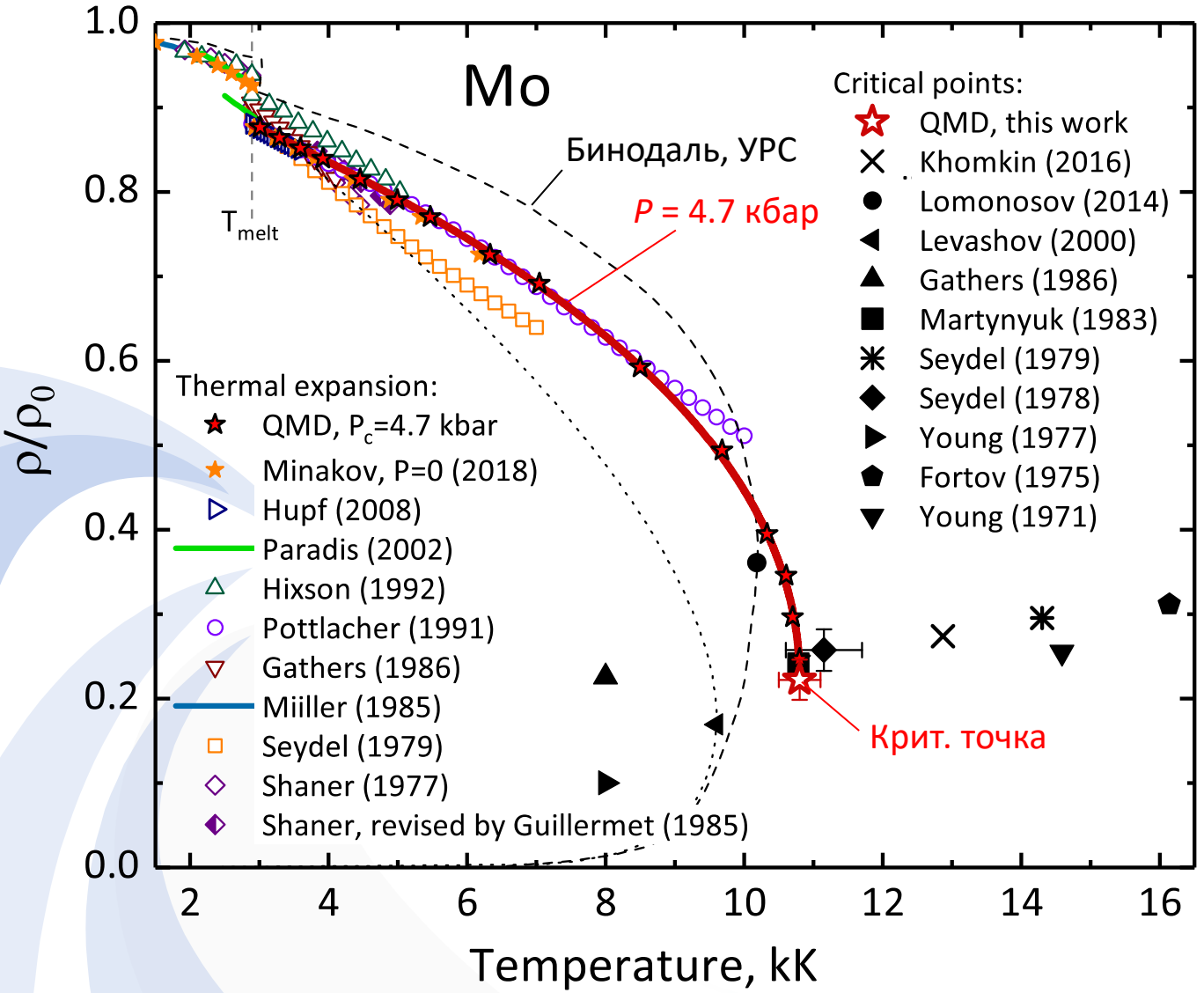
S2:
- *U* = 3.3 км/с;
- *T* = 13.3 кК;
- *P* = 83 ГПа;

S3:
- *U* = 4 км/с;
- *T* = 18.5 кК;
- *P* = 119 ГПа;



Fortov, V. E., Lomonosov, I. V. *Physics-Uspekhi* **57**, 219–233 (2014)
Жерноклетов М.В. и др., Хим. Физ. **14**, 49 (1995)
Minakov D.V. et al. Phys. Rev. B **103**, 184204 (2021)

КМД, критическая изобара Mo



Критическая точка:

T_c = 10.8 ± 0.3 кК
P_c = 4.7 ± 1.0 кбар
ρ_c = 2.25 ± 0.24 г/см^3
Z_c = 0.22 ± 0.05

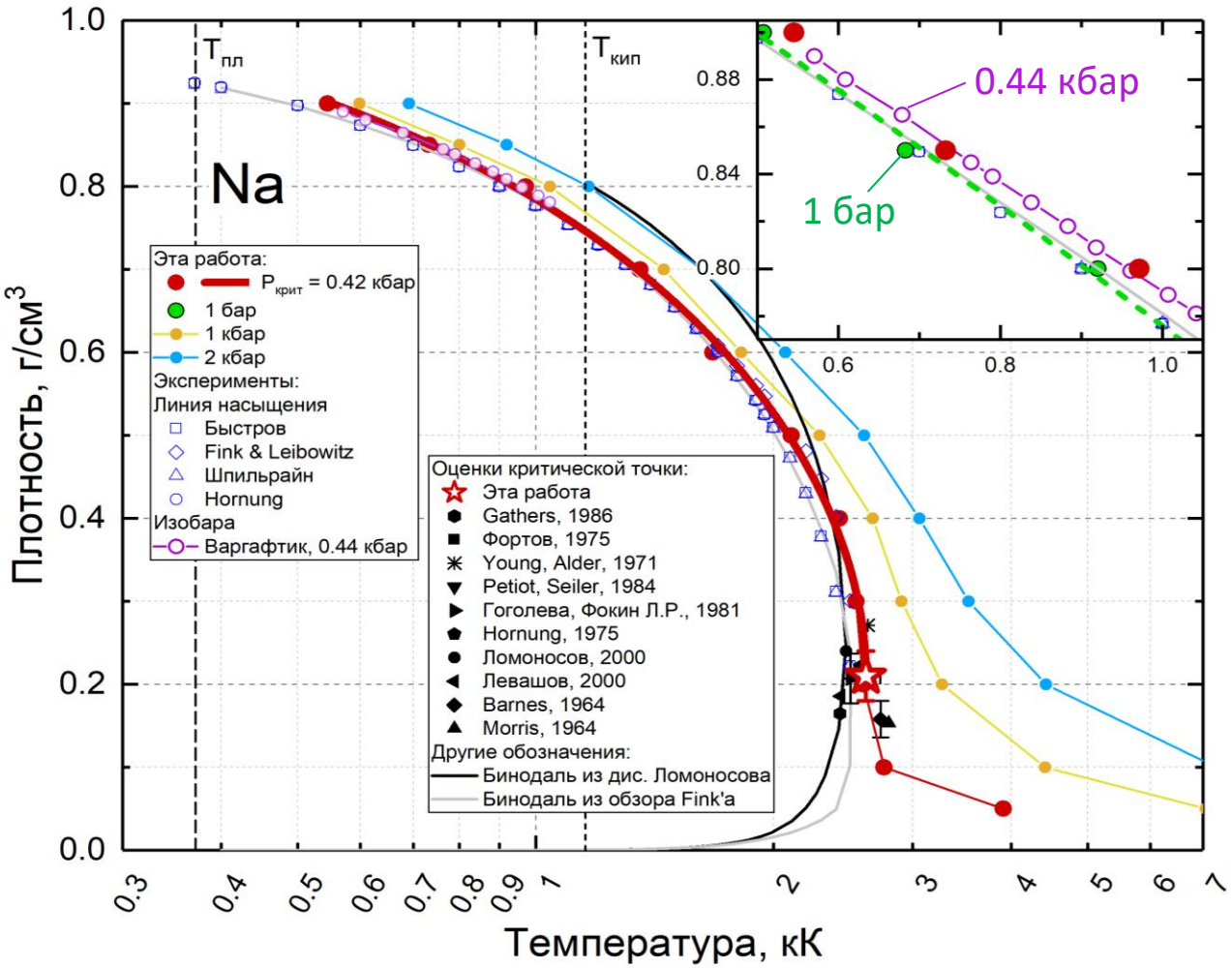
Наши расчеты близки к данным

- Paradis (ESL technique) в твердой фазе
- Hüpf & Pottlacher в жидкой фазе

Оценка критической точки близка к оценкам Seydel & Fucke и Мартынюка

Minakov D.V. et al. Phys. Rev. B **103**, 184204 (2021)

Фазовая диаграмма натрия при пониженных плотностях



Критическая точка Na:

T_c = 2.62 ± 0.12 кК
P_c = 0.42 ± 0.12 кбар
ρ_c = 0.21 ± 0.03 г/см^3
Z_c = 0.21 ± 0.07

Отличное согласие КМД с экспериментальными данными, в том числе с измеренной изобарой 0.44 кбар из справочника по ред. Варгафтика Н.Б.(1972).

Оценка положения критической точки в пределах расчетной погрешности согласуется с большинством имеющихся экспериментальных и теоретических оценок.

Ускорение при расчетах с помощью программного пакета VASP (версия 6.4)

Тестовая задача: Моделирование Cu, 108 атомов, псевдопотенциал PAW с 11 валентными электронами, T = 20 кК, ρ = 16 г/см^3

Суперкомпьютер Gauss
2 вычислительных узла
Каждый узел:
- 2 x Intel(R) Xeon(R) Gold 6240 (18 ядер на процессор)
- 2 x P100 (16 Гбайт, PCIe)

Результаты:
1 узел, 32 ядра CPU: **128 с**
2 узла, 64 ядра CPU: **60 с**
1 узел x 1 GPU: **46 с**
1 узел x 2 GPU: **35 с**
2 узла x 2 GPU: 24 с

Суперкомпьютер IRUS
40 вычислительных узлов
Каждый узел:
- 2 x Intel Xeon E5-2698 v4 (20 ядер на процессор)

Результаты:
2 узла, 72 ядра CPU: **60 с**
4 узла, 144 ядра CPU: **75 с**

Суперкомпьютер Turing
1 вычислительный узел:
- 2 x Intel(R) Xeon(R) Gold 6140 (18 ядер на процессор)
- 4 x V100 (32 Гбайт, SXM2)

Результаты:
1 GPU: **39 с**
2 GPU: **24 с**
3 GPU: **18 с**
4 GPU: 16 с

Исследование эффектов дальнодействия при моделировании однокомпонентной плазмы

Однокомпонентная плазма с дальнодействием

Brush, S. G., H. L. Sahlin, and E. Teller. "Monte Carlo Study of a One-Component Plasma. I." *The Journal of Chemical Physics* 45.6 (1966): 2102-2118

Параметр неидеальности:

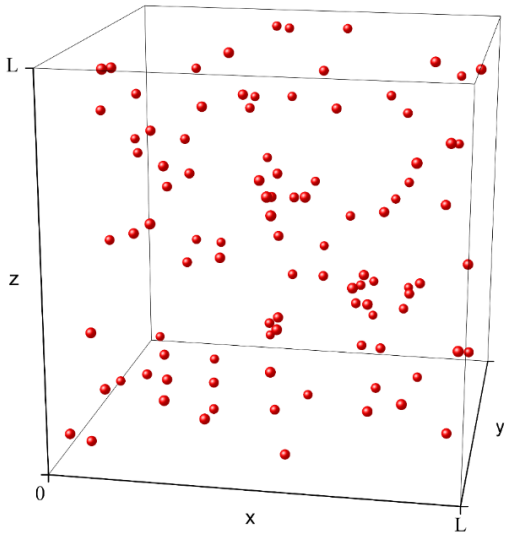
$$\Gamma = \frac{(Ze)^2}{k_B T r_a}, \quad r_a^3 \equiv \frac{3}{4\pi\rho}, \quad \rho = N/L^3 \qquad (1)$$

Решение уравнения Пуассона в периодических гран. условиях ($U \equiv E/(k_B T)$, длины в ед. r_a):

$$U^{\mathrm{Ew}}(\Gamma) = -\tfrac{1}{2} N^{2/3} \Gamma M_{sc} + \frac{\Gamma}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N} v(\mathbf{r}_{ij}) \qquad (2)$$

Потенциал Эвальда:

$$Lv(\mathbf{r}) = \frac{\operatorname{erfc}(\sqrt{\pi} r/L)}{r/L} - 1 + \sum_{\mathbf{n} \neq \mathbf{0}} \left[\frac{\operatorname{erfc}(\sqrt{\pi}|\mathbf{r}/L + \mathbf{n}|)}{|\mathbf{r}/L + \mathbf{n}|} + \frac{e^{-\pi n^2}}{\pi n^2} \cos\left(2\pi \mathbf{r} \cdot \mathbf{n}/L\right) \right]$$



N точечных частиц $\boldsymbol{r}_i$, куб L^3

Выражение энергии ОКП через angular-averaged Ewald potential (AAEP):

$$U(\Gamma) = -\frac{3}{20} N^{2/3} \Gamma (N+5) + \frac{\Gamma}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_{s,i}} \tilde{v}(r_{ij}) \qquad (4)$$

$$\tilde{v}(r) = \begin{cases} \dfrac{1}{r}\left\{1 + \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{r}{r_m}\right)\left[\left(\dfrac{r}{r_m}\right)^2 - 3\right]\right\}, & r < r_m \\ 0, & r \geq r_m. \end{cases} \qquad (5)$$

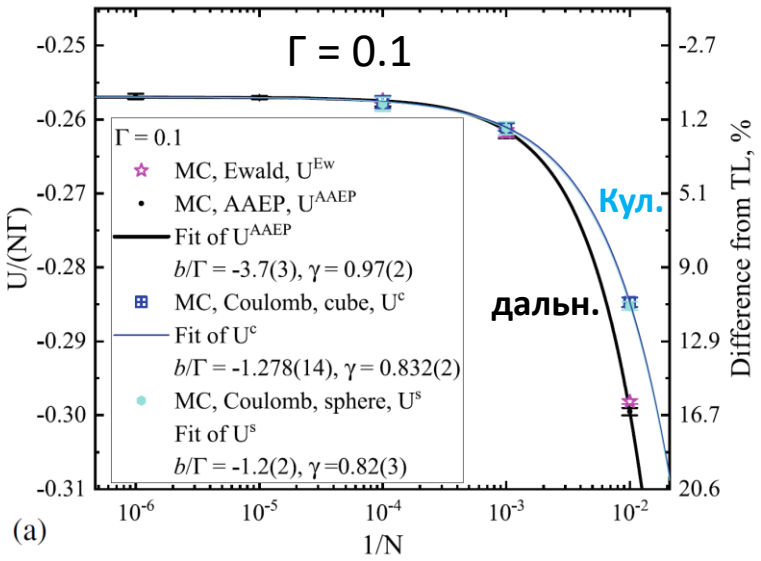
Давление ОКП:

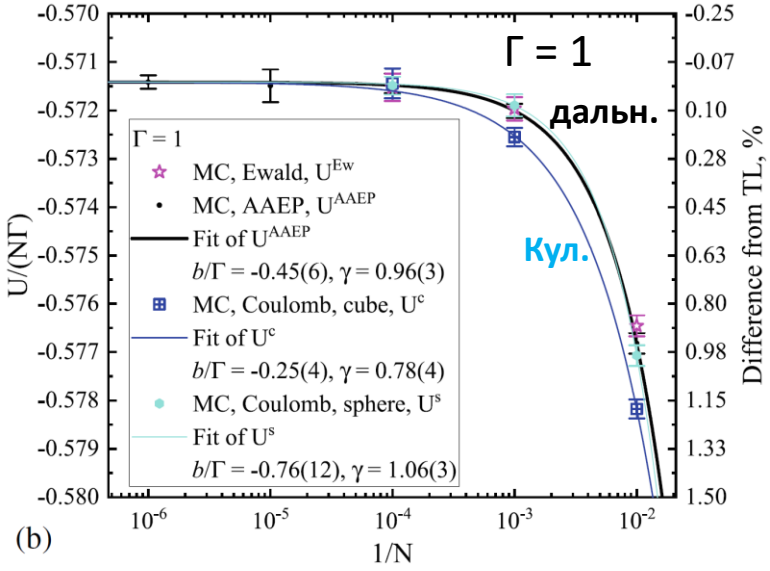
$$\mathcal{P}(\Gamma) \equiv \frac{PV}{N k_B T} = 1 + \frac{U(\Gamma)}{3N}$$

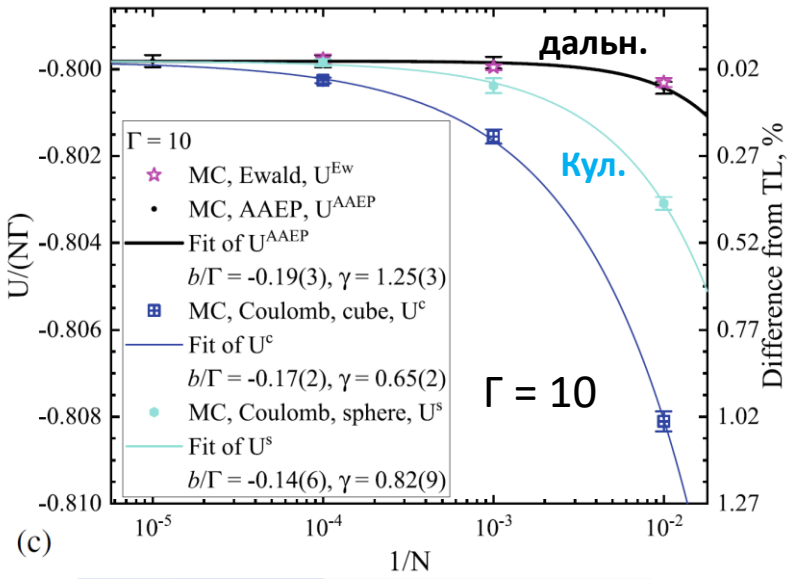
[Demyanov G. S. and Levashov P. R., **Phys. Rev. E** 106, 015204 (2022)]

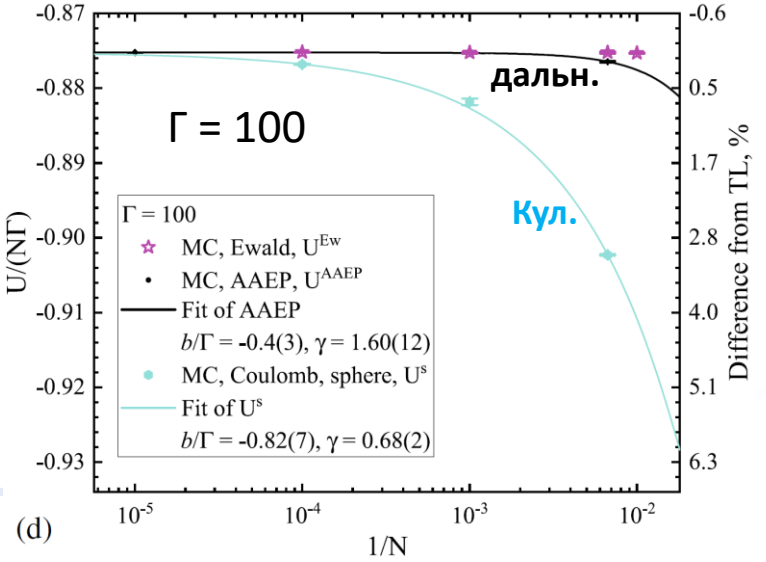
Влияние эффектов дальнодействия на сходимость

Больше $\Gamma \Rightarrow$ сильнее влияние дальнодействия









Ускорение при использовании видеоускорителей

За счет использования усредненного по углам потенциала Эвальда удалось провести моделирование однокомпонентной плазмы методом Монте-Карло с 10^6 частиц (предыдущий «рекорд» $5x10^5$ частиц).

Без видеоускорителей расчет с 10^6 частиц на 1 узле суперкомпьютера **(Intel Xeon E5-2698 v4, 36 ядер CPU)** длился **19 дней**

Программа метода Монте-Карло была модифицирована для V100 с помощью ChatGPT 5, модификации заняли 1 день. Модификации коснулись расчетов парных взаимодействий с усредненным по углам потенциалом Эвальда

В результате на одном видеоускорителе V100 аналогичный расчет занял **1 час**

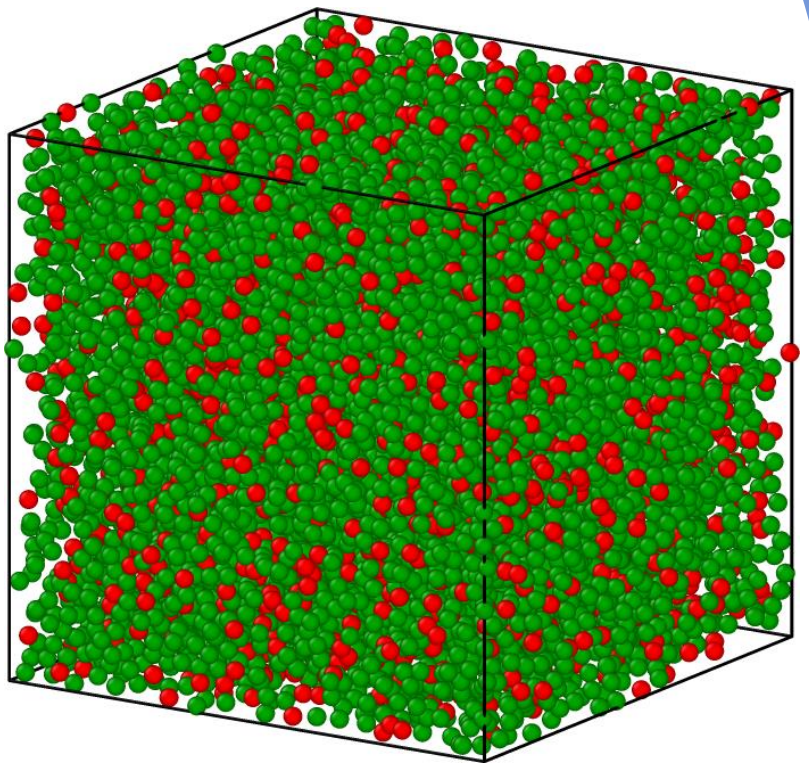
Ускорение составило 450 раз

Моделирование закалки карбида бора

Детали моделирования и ускорение

1) 8000 атомов B и 2000 атомов C, всего 10000 атомов.
2) Потенциал из семейства ReaxFF для карбида бора.
3) Шаг моделирования – 0.05 fs.
4) Ансамбль NPT – 5 ps (100000 шагов), затем ансамбль NVE – 10 ps (200000 шагов).
5) Моделирование проводилось в пакете **LAMMPS**.
6) На компьютере с видеоускорителями пакет LAMMPS был собран с подключенным пакетом **KOKKOS** (для возможности использования видеоускорителей при моделировании с потенциалом ReaxFF).

B – зеленые, C - красные



Структура после моделирования

Суперкомпьютер «Фишер»
- **4 процессора AMD Epyc7551** (32 CPU cores, 3 GHz)
- Было задействовано **128 ядер**
- Total wall time: **8:03:07**

Настольный компьютер PC 2P-100
- Intel Core i9-9940X (14 ядер, 28 потоков)
- 2 x Tesla P100 (PCIe)
- Total wall time: **2:16:32**

Выводы

- Использование видеоускорителей предыдущих поколений может существенно ускорить как квантовое, так и классическое атомистичекое моделирование
- Видеоускорители P100 вполне могут использоваться даже в не очень новых домашних компьютерах, главное – обеспечить питание и охлаждение
- Мы снова находимся в ситуации, когда дешевле и проще собрать свой собственный небольшой суперкомпьютер. По-видимому, эти тенденции будут в ближайшее время нарастать