Contribution ID: **107** Type: **sectional reports**

Реализации алгоритмов межатомного взаимодействия с использованием технологии OpenCL

Monday 30 June 2014 16:45 (15 minutes)

Моделирование углеродных наноструктур на уровне отдельных атомов требует больших объемов вычислений. Одним из способов повышения скорости вычисления межатомного взаимодействия является адаптация алгоритмов для работы с SIMD-подобными архитектурами, в частности, с графическими процессорами. В данной работе рассмотрены особенности алгоритмов вычисления многочастичного взаимодействия наноструктурах на базе классических потенциалов Терсоффа и погруженного атома с использованием технологии OpenCL. Стандарт OpenCL позволяет обеспечить универсальность и переносимость алгоритмов. В данной работе сделана оценка производительности OpenCL алгоритмов вычисления межатомного взаимодействия для различных систем на базе центральных и графических процессоров. Указанный подход может быть эффективно применен для расчётов на гетерогенных вычислительных системах.

Author: Mr MINKIN, Alexander (National Research Centre "Kurchatov Institute")

Co-authors: Mr KNIZHNIK, Andrey (National Research Centre "Kurchatov Institute"); Mr POTAPKIN, Boris (National Research Centre "Kurchatov Institute")

Presenter: Mr MINKIN, Alexander (National Research Centre "Kurchatov Institute")

Session Classification: Algorithms and methods of application tasks solving in distributed computing environments

Track Classification: Section 4 - Algorithms and methods of application tasks solving in distributed computing environments