

# The 6th International Conference "Distributed Computing and Grid-technologies in Science and Education"



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.

**Primary 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