

УДК:519.876.5

Д. О. Москвин, В. В. Соцкий, Н. В. Усольцева

**АЛГОРИТМЫ РАСЧЕТА ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ
ДЛЯ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ НА ГРАФИЧЕСКИХ УСТРОЙСТВАХ.
ОЦЕНКА ИХ ЭФФЕКТИВНОСТИ**

НИИ наноматериалов, Ивановский государственный университет,
ул. Ермака, 39, 153025 Иваново, Россия. E-mail: Moskvin1987@mail.ru

В настоящей работе рассматривается проблема переноса алгоритма списков Верле и алгоритма присоединенных списков расчета ван-дер-ваальсовых взаимодействий для метода молекулярной динамики на графические устройства, оценивается эффективность адаптированных алгоритмов. Показано, что алгоритмы списков Верле и присоединенных списков, выполняющие вычисления на графических устройствах в 39,5 и 10 раз, соответственно, эффективнее алгоритмов, рассчитывающих ван-дер-ваальсовы взаимодействия на 4-х центральных процессорах (распределение вычислений выполнено при помощи библиотеки OpenMP).

Ключевые слова: ван-дер-ваальсовы взаимодействия, молекулярная динамика, списки Верле, присоединенные списки, графические устройства.

D. O. Moskvin, V. V. Sotsky, N. V. Usol'tseva

**ALGORITHMS FOR CALCULATION OF VAN DER WAALS INTERACTIONS
ON GRAPHICS PROCESSING UNITS FOR MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION.
EVALUATION OF THEIR EFFECTIVENESS**

Nanomaterials Research Institute, Ivanovo State University,
Ermak str., 39, 153025 Ivanovo, Russia. E-mail: Moskvin1987@mail.ru

The problem of transfer of the Verlet neighbour lists algorithm and the linked lists algorithm (cell method) for calculation of van der Waals interactions to graphics processing units for molecular dynamics simulation is examined. The effectiveness of the adapted algorithms is evaluated. It is shown that the Verlet list and linked list algorithms adapted for graphics processing units are more effective (in 39.5 and 10 times, correspondingly) than the algorithms working on four central processing units (distribution of calculations is performed using the OpenMP library).

Key words: van der Waals interactions, molecular dynamics, Verlet neighbour lists, linked lists, graphics processing units.

Введение

В настоящее время жидкие кристаллы (ЖК) находят широкое применение во многих областях деятельности человека: устройства отображения информации, медицина (препараты), научные исследования (хроматография) и др. В связи с этим актуальна проблема получения ЖК с заданным набором свойств. Синтез мезогенов в силу его высокой стоимости, большой трудоемкости и негативного влияния на экологию целесообразно предварять компьютерным моделированием, способным дать прогноз относительно надмолекулярной организации соединений. Существуют несколько подходов моделирования, предназначенных для идентификации мезоморфных свойств: теория среднего поля Майера – Заупе [1], методы, основанные на аппроксимации молекул поверхностями анизотропной формы (эллипсоиды, сфероцилиндры и др.) [2, 3], метод, основанный на идентификации мезоморфизма при помощи набора молекулярных параметров (геометрические параметры, параметры, зависящие от молекулярной массы, и др.) [4], метод Монте – Карло [5–10], метод молекулярной динамики (МД) с параметрами молекулярной механики (ММ), заключающийся в интегрировании уравнений движения Ньютона для каждой частицы (атома) [5–13]. Один из недостатков первых двух подходов состоит в том, что элементарной частицей является молекула. Таким образом, не учитываются внутримолекулярные взаимодействия и гибкие алкильные заместители, которые играют важную роль в формировании мезоморфизма. Третий метод не учитывает как внутри, так и межмолекулярные взаимодействия, кроме того, для его применения необходим ряд соединений, схожих по строению с исследуемым соединением, обладающих мезоморфизмом (для определения интервалов значений молекулярных параметров). Недостаток метода Монте – Карло заключается в том, что он (в отличие от метода МД) не позволяет отслеживать эволюцию моделируемой системы во времени [5]. Недостатком метода МД с параметрами ММ является сложность подбора данных параметров, однако, на сегодняшний день существуют множество силовых полей (наборов параметров ММ) [8], позволяющих решить эту проблему. Кроме того, параметры ММ могут быть рассчитаны с помощью квантово-механических методов (этот путь является более затратным с точки зрения времени по сравнению с первым) [12]. Таким образом, метод МД с параметрами ММ

представляется наиболее оптимальным для моделирования надмолекулярной организации соединений с целью идентификации у них мезоморфных свойств, так как позволяет наблюдать за системой на атомном уровне в субнаносекундных интервалах времени.

Однако, так как мезоморфизмом обычно обладают сложные многоатомные молекулы, МД-моделирование даже в субнаносекундных интервалах времени характеризуется большой вычислительной сложностью. Решение вопроса видится в том, что самые затратные вычисления метода МД (расчет ван-дер-ваальсовых и электростатических взаимодействий) могут быть распределены на многопроцессорные вычислительные системы (МВС). В настоящее время самыми эффективными МВС, по причине наличия у них большого количества параллельных процессоров (что обеспечивает высокую производительность) и относительно низкой стоимости, являются графические устройства (GPU) [14–23] (например, производительность GPU nVidia GeForce GTX 580 в 15 раз выше производительности CPU Intel Xenon 5000 westmere-EP, в то же время стоимость GPU в два раза ниже стоимости CPU). Возможность переноса расчетов на GPU появилась относительно недавно, в связи с чем актуальной является проблема разработки (адаптации) алгоритмов для выполнения вычислений на GPU: выбор наиболее оптимального метода и способа его реализации (например, существует несколько методов расчета ван-дер-ваальсовых взаимодействий: полный перебор частиц, списки Верле и присоединенные списки, кроме того, алгоритм нужно реализовать таким образом, чтобы максимально эффективно использовать ресурсы GPU [14–21, 23]).

Материалы и методы

В настоящей работе для расчета ван-дер-ваальсовых взаимодействий использован потенциал Леннард-Джонса, определяемый формулой (1)

$$U(r) = \varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

где ε – глубина потенциальной ямы, σ – диаметр частицы, r – расстояние между центрами масс частиц.

Как отмечено ранее, существуют три метода расчета ван-дер-ваальсовых взаимодействий

вий: полный перебор частиц (где рассчитываются взаимодействия между каждой парой частиц), списки Верле и присоединенные списки [6, 9].

Количество операций, затрачиваемое на расчет ван-дер-ваальсовых сил методом полного перебора частиц системы растет пропорционально N^2 (N – количество частиц). Однако, вид потенциала, задаваемого формулой (1), такой, что силы ван-дер-ваальсовых взаимодействий убывают пропорционально r^6 и близки к нулю при удалении частиц друг от друга на некоторое расстояние (порядка $2,5\sigma$). Данный факт позволяет использовать для расчета ван-дер-ваальсовых взаимодействий методы, основанные на выделении области пространства, в которой взаимодействия отличны от нуля и области, где ими можно пренебречь. Этот принцип реализуют методы списков Верле и присоединенных списков.

Идея метода со списками Верле состоит в том, что для каждого атома выделяется сфера (радиусом около $2,5\sigma$), где силы воздействия на нее со стороны других частиц существенны и буферная зона радиусом около σ (рис. 1), где σ — диаметр атома.

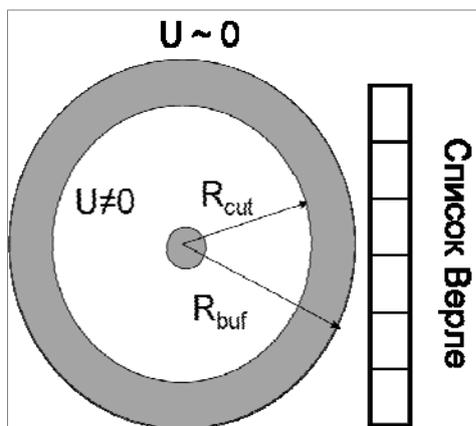


Рис. 1. Построение списков Верле:

R_{cut} – радиус обрезания, R_{buf} – радиус буферной зоны,
 U – энергия ван-дер-ваальсовых взаимодействий

Далее для каждой частицы составляется список частиц (список Верле), в который попадают частицы, находящиеся в сфере, центр которой совпадает с положением данной частицы, радиусом, равным R_{buf} (см. ниже).

При вычислении сил, действующих на частицу, рассчитываются только силы, действующие со стороны частиц, попавших в составленный для данной частицы список Верле. Обновление списков Верле осуществляется в

соответствии с некоторыми критериями: смещение какой-либо частицы на заданное расстояние (обычно половина ширины буферной зоны) относительно своего предыдущего положения, прохождение алгоритмом заданного числа итераций [6, 9].

Количество операций, затрачиваемое на расчет ван-дер-ваальсовых взаимодействий методом списков Верле, растет пропорционально $C_1 \cdot N \cdot K + C_2 \cdot N^2 / W$ (первое слагаемое – количество операций, необходимое на расчет сил ван-дер-ваальсовых взаимодействий, второе – для заполнения списков Верле), где C_1 , C_2 – коэффициенты пропорциональности, N – количество частиц, K – максимальная из длин списков Верле, W – частота обновления списков Верле. Несмотря на то, что C_2/W – величина порядка 0,1, при больших значениях N второе слагаемое суммы превалирует над первым, таким образом, количество операций, необходимое для расчета ван-дер-ваальсовых взаимодействий, растет пропорционально N^2 . В то же время заполнение списков Верле (как и расчет ван-дер-ваальсовых сил) может быть выполнено независимо (а следовательно, одновременно) для каждой частицы моделируемой системы. Это значит, что, выполняя расчеты на устройствах с большим количеством параллельных процессоров (современные графические устройства имеют порядка 1000 параллельных процессоров), можно добиться того, что количество операций, необходимое для заполнения списков Верле (и процедуры расчета взаимодействий в целом), будет расти пропорционально N .

Идея метода с присоединенными списками заключается в разбиении моделируемого пространства на кубические ячейки одинакового размера (каждая такая ячейка нумеруется, а принадлежность частицы заданной ячейке определяется координатами частицы) и суммирование при расчете сил ван-дер-ваальсовых взаимодействий проводится внутри текущей ячейки и между соседними ячейками (рис. 2).

Для работы данного метода составляются два списка: главный (размер которого равен количеству ячеек) и присоединенный (его размер равен количеству частиц системы), обновляемые на каждом шаге метода МД. Процедура заполнения списков выглядит следующим образом [6, 9]:

1. Делаем все ячейки списков пустыми (можно записать в них -1 , при условии, что частицы и ячейки пронумерованы неотрицательными числами);

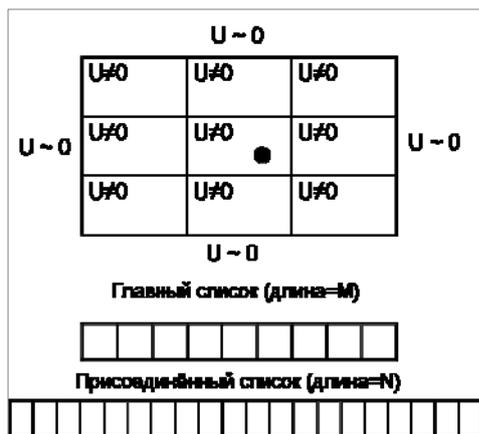


Рис. 2. Метод с присоединенными списками.

U – энергия ван-дер-ваальсовых взаимодействий,
 M – количество ячеек, N – количество частиц системы,
 черной точкой обозначена частица

2. Помещаем частицу в списки. Если данная частица является первой, попавшей в фиксированную ячейку – ее номер заносим в элемент главного списка, совпадающий с номером ячейки, выполняем шаг 2) для следующей частицы, иначе выполняем шаг 3);
3. Переходим в ячейку присоединенного списка, номер которой совпадает с номером первой частицы попавшей в главный список;
4. Если данная ячейка присоединенного списка пуста – помещаем в эту ячейку номер частицы и выполняем шаг 2) для следующей частицы, иначе переходим к шагу 5);
5. Выполняем шаг 4) пока не будет найдена пустая ячейка, помещаем в эту ячейку номер текущей частицы, выполняем шаг 2) для следующей частицы.

Перебор списков при расчете сил межатомных взаимодействий выполняется аналогично процедуре их заполнения.

Количество операций, затрачиваемых данным методом на расчет сил ван-дер-ваальсовых взаимодействий, пропорционально $N+M$, где N – количество частиц системы, M – количество ячеек разбиения пространства моделируемой системы. Как правило, M много меньше N , поэтому можно считать, что количество операций, необходимое для расчета сил ван-дер-ваальсовых взаимодействий растет пропорционально N .

Что касается интегрирования уравнений движения Ньютона, алгоритмы, рассматриваемые в настоящей работе, выполняют эту процедуру с помощью метода Эйлера [6–9].

Экспериментальная часть

В рамках настоящей работы выполнено сравнение эффективности алгоритма со списками Верле и алгоритма с присоединенными списками (для краткости условимся называть так алгоритмы, реализующие методы списков Верле и присоединенных списков), адаптированных для расчета ван-дер-ваальсовых взаимодействий на GPU, и алгоритмов, выполняющих расчеты теми же методами на четырех центральных процессорах (CPU). Распределение расчетов на несколько CPU выполнено при помощи библиотеки OpenMP [24].

Адаптированный для графических устройств алгоритм со списками Верле реализован следующим образом:

1. Задаем начальные скорости и координаты частиц и другие параметры (диаметр атомов, глубину потенциальной ямы, радиус обрезания, радиус буферной зоны, массу атомов и др.) моделируемой системы.
2. Отправляем координаты частиц на GPU.
3. Заполняем списки Верле для частиц системы; пока время t меньше $t_{\text{кон}}$, где $t_{\text{кон}}$ – конечное значение времени.
4. Для каждой частицы рассчитываем сумму сил, действующих на нее со стороны частиц, попавших в соответствующий список Верле.
5. Передаем рассчитанные силы на CPU.
6. Рассчитываем новые скорости и новые координаты частиц (интегрируем уравнения движения).
7. Выполняем шаг 2).
8. Если есть необходимость, выполняем шаг 3), в противном случае переходим к шагу 4).

Отметим, что графическим устройством выполняются только шаги 3) и 4), все остальные шаги алгоритма выполняются на центральном процессоре. Кроме того, отметим, что распределение вычислений на GPU выполнено по принципу: один поток GPU заполняет список Верле для одной частицы и рассчитывает сумму сил, действующую на нее со стороны других частиц (эти операции могут быть выполнены независимо для каждой частицы моделируемой системы). Обновление списков Верле осуществляется в том случае, если какая-либо из частиц системы сместилась относительно своего предыдущего положения на расстояние, равное половине ширины буферной зоны ($(R_{\text{buf}} - R_{\text{cut}})/2$).

Алгоритм с присоединенными списками, адаптированный для графических устройств, отличается от приведенного выше алгоритма со

списками Верле только тем, что заполнение главного и присоединенного списков осуществляет CPU и происходит это на каждой итерации алгоритма.

Распределение данной процедуры на графическое устройство может быть выполнено только на уровне ячеек пространства моделируемой системы (фиксированный поток GPU заполняет элементы списков, соответствующие фиксированной ячейке). Однако в результате ранее проведенных исследований [18] установлено, что перенос процедуры заполнения списков с центрального процессора на графическое устройство ведет к снижению производительности алгоритма в среднем в 2,6 раза. Это вызвано неэффективным использованием ресурсов GPU, а также медленной скоростью записи в память GPU [23].

Отметим, что рассмотренные выше алгоритмы со списками Верле и присоединенными списками в процессе расчета выполняют чтение данных из текстурной памяти GPU [14, 17, 20], этот прием делает их наиболее эффективными по сравнению с рядом других алгоритмов, адаптированных для GPU [21, 23]. Если сравнивать два алгоритма между собой, можно сделать вывод, что их эффективности близки (алгоритм со списками Верле работает в 1,06 раза быстрее). Однако выбор конкретного из двух алгоритмов неоднозначен. Несмотря на то что алгоритм со списками Верле работает быстрее и он более удобен с точки зрения расчета не только ван-дер-ваальсовых, но и электростатических взаимодействий (при разделении электростатических взаимодействий на ближкодействующую и дальнедействующую части), он накладывает более жесткие ограничения на размер моделируемой системы, поскольку для хранения списков Верле требуется намного больше места, чем для хранения главного и присоединенного списков ($N \cdot K$ против $N + M$ ($M < N$), где N – количество частиц системы, K – максимальная из длин списков Верле, M – количество ячеек пространства, при этом K и M – величины одного порядка). Реализации алгоритмов, выполняющих расчеты на центральных процессорах, аналогичны реализациям алгоритмов для графических устройств, за исключением того, что в них отсутствуют шаги 2) и 5). Отметим, что плотность моделируемой системы в процессе расчета поддерживается за счет расчета объема системы по количеству частиц и применения зеркальных граничных условий (если частица выходит за границу заданной области, то соответствующая проекция её вектора скорости меняет направление на противоположное, т. е. частица отражается от «стенки») [8].

Вычислительный эксперимент по оценке эффективности разработанных алгоритмов был выполнен по следующей схеме: количество частиц моделируемой системы варьировали от 16 384 до 98 304 с шагом в 16 384 частицы, каждым алгоритмом было выполнено 10 000 итераций при одних и тех же начальных условиях. По завершении расчета замерялось время, затраченное на него.

В экспериментах были задействованы графическое устройство GeForce 580GTX и центральный процессор Intel Core i7.

Результаты и выводы

По завершении вышеописанного вычислительного эксперимента были получены следующие результаты (рис. 3, 4): алгоритм со списками Верле, адаптированный для графических устройств обладает в 39,5 раза большей эффективностью, чем алгоритм, выполняющий расчеты на четырех центральных процессорах; эффективность алгоритма с присоединенными списками, адаптированного для GPU, в среднем в 10 раз выше по сравнению с алгоритмом, выполняющим расчеты на четырех CPU.

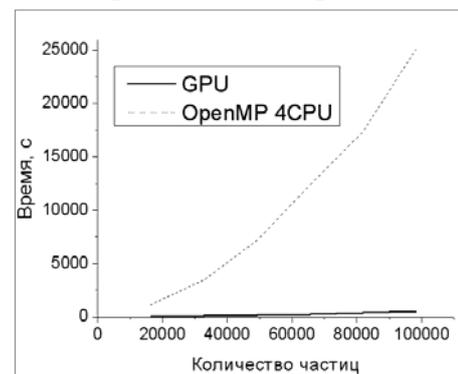


Рис. 3. Зависимость времени, затрачиваемого на вычисления алгоритмами со списками Верле, выполняющими расчеты на GPU и CPU

Из того, что адаптированные для графических устройств алгоритм со списками Верле и алгоритм с присоединенными списками имеют приблизительно одинаковую эффективность, и в то же время алгоритмы для GPU в 39,5 раза и в 10 раз, соответственно, эффективнее алгоритмов, выполняющих расчеты на четырех CPU, можно сделать вывод, что алгоритм с присоединенными списками, рассчитывающий ван-дер-ваальсовы взаимодействия на CPU, является в 4 раза более эффективным по сравнению с алгоритмом со списками Верле, также выполняющим расчеты на GPU.

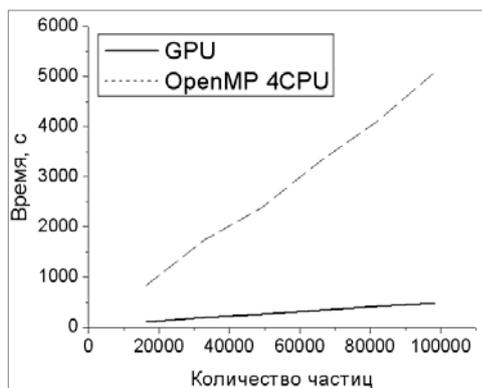


Рис. 4. Зависимость времени, затрачиваемого на вычисления алгоритмами с присоединенными списками, выполняющими расчеты на GPU и CPU

Отметим, что рассматриваемые в настоящей работе алгоритмы, адаптированные для GPU, вошли в состав системы расчета ван-дер-ваальсовых взаимодействий «VDWForceCompMD» [25], позволяющую рассчитывать ван-дер-ваальсовы взаимодействия методами полного перебора частиц, списков Верле и присоединенных списков с возможностью наложения на систему как зеркальных, так и периодических граничных условий.

Благодарности

Работа поддержана программой Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках государственного задания Ивановскому государственному университету для выполнения научно-исследовательских работ на 2014–2016 гг. и грантом на выполнение научно-исследовательских работ студентами, аспирантами и молодыми учеными по заказу Ивановского государственного университета в 2014 г. «Разработка методов анализа пространственной структуры и фазового состояния химических соединений».

Список литературы / References

1. Чандрасекар С. Жидкие кристаллы. М.: Мир, 1980. 344 с. [Chandrasekar S. *Zhidkie kristally* (Liquid crystals). Moscow, Mir, 1980. 344 p. (in Russian)].
2. Zannoni C. Molecular design and computer simulations of novel mesophases // *J. Mater. Chem.* 2001. Vol. 11. P. 2637–2646.
3. Berardi R., Muccioli L., Orlandi S., Ricci M., Zannoni C. Computer simulations of biaxial nematics // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2008. Vol. 20, № 463101. P. 1–16.
4. Аконова О. Б., Пестов С. М. Успехи в конструировании и синтезе хиральных дискотических мезогенов //

Жидкие кристаллы и их практическое использование. 2012. Вып. 4. С. 20–33. [Аконова О. Б., Пестов С. М. *Uspekhi v konstruirovanii i sinteze khiral'nykh diskoticheskikh mezogenov* (Progress in the design and synthesis of chiral discotic mesogens) // *Zhidkie kristally i ikh prakticheskoe ispol'zovanie* (Russ. J. Liq. Cryst. & Appl.). 2012. Iss. 4. P. 20–33. (in Russian)].

5. Hockney R. W., Eastwood J. W. Computer simulation using particles. London: Taylor & Francis Group, 1988. 540 p.
6. Alen M. P., Tildesley D. J. Computer simulations of liquids. Oxford: Larendon press, 1991. 385 p.
7. Demus D., Goodby J., Gray G. W., Spiess H.-W., Vill V. Handbook of liquid crystals. Willey-VCH, 1998. Vol. 1. 914 p.
8. Соцкий В. В., Усольцева Н. В. Методы моделирования мезоморфных систем / Иваново: Иван. гос. ун-т, 2007. 58 с. Деп. в ВИНТИ. 03.12.2007, № 1116–B2007. [Sotsky V. V., Usol'tseva N. V. *Metody modelirovaniya mezomorfnnykh sistem* (Mesomorphic systems simulation methods). Ivanovo: Ivanovo State University, Paper deposited in VINITI, 2007. 58 p. № 1116 – V2007. (in Russian)].
9. Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров / под ред. В. А. Иванова, А. Л. Рабиновича, А. Р. Хохлова. М.: КД Либрком, 2009. 696 с. [Metody komp'yuternogo modelirovaniya dlya issledovaniya polimerov i biopolimerov (Computer simulation methods for research of polymers and biopolymers). Ed. by V. A. Ivanov, A. L. Rabinovich, A. R. Khokhlov. Moscow: KD Librkom, 2009. 696 p. (in Russian)].
10. Аксенова Е. В., Киевецкий М. С. Вычислительные методы исследования молекулярной динамики. СПб.: СПбГУ, 2009. 50 с. [Aksenova E. V., Kshevetskiy M. S. *Vychislitel'nye metody issledovaniya molekulyarnoy dinamiki* (Computational methods for investigating of molecular dynamics). Saint-Petersburg, SPbGU, 2009. 50 p. (in Russian)].
11. Усольцева Н. В., Ясинский Ф. Н., Соцкий В. В., Костин М. С. Получение стереографических изображений в задачах молекулярной динамики // Вестник ИГЭУ. 2009. Вып. 4. С. 45–48. [Usol'tseva N. V., Yasinsky F. N., Sotsky V. V., Kostin M. S. *Poluchenie stereograficheskikh izobrazheniy v zadachakh molekulyarnoy dinamiki* (The obtaining of stereographic images in molecular dynamics simulations) // *Vestnik IGEU.* 2009. Iss. 4. P. 45 – 48. (in Russian)].
12. Ибрагимов И. М., Ковшов А. Н., Назаров Ю. Ф. Основы компьютерного моделирования наносистем: учеб. пособие. СПб.: Лань, 2010. 386 с. [Ibragimov I. M., Kovshov A. N., Nazarov Yu. F. *Osnovy komp'yuternogo modelirovaniya nanosistem: ucheb. posobie* (Fundamentals of computer simulations of nanosystems: training manual). Saint-Petersburg, Lan', 2010. 386 p. (in Russian)].

13. Москвин Д. О., Соцкий В. В. Подходы к моделированию надмолекулярной организации мезогенных соединений / Иваново : Иван. гос. ун-т, 2012. 83 с. Деп. в ВИНТИ 21.03.2012. № 101–В2012. [Moskvin D. O., Sotsky V. V. *Podkhody k modelirovaniyu nadmolekulyarnoy organizatsii mezogennykh soedineniy* (Approaches to the modeling of the supramolecular organization of mesogenic compounds). Ivanovo : Ivanovo State University, 2012. 83 p. Paper deposited in VINITI, 21.03.2012. № 101–V2012. (in Russian)].
14. CUDA Documentation. Available at: <http://docs.nvidia.com/cuda/index.html#axzz38TXoWYK9>.
15. Giupponi G., Harvey M.J., De Fabritis G. The impact of accelerator processors for high-throughput molecular modeling and simulation // Drug discovery today. 2008. Vol. 13. P. 1052–1058.
16. Anderson J. A., Lorenz C. D., Travesset A. A. General purpose molecular dynamics simulations fully implemented on graphics processing units // Journal of Computational Physics. 2008. Vol. 227. P. 5342–5359.
17. Боярченков А. С., Поташиников С. И. Использование графических процессоров и технологии CUDA для задач молекулярной динамики // Вычислительные методы и программирование. 2009. Т. 10. С. 9–23. [Boyarchenkov A. S., Potashnikov S. I. *Ispol'zovanie graficheskikh protsessorov i tekhnologii CUDA dlya zadach molekulyarnoy dinamiki* (Using of graphics processing units and CUDA technology to problems of molecular dynamics) // Vychislitel'nye metody i programmirovaniye. 2009. Iss. 10. P. 9–23. (in Russian)].
18. Боярченков А. С., Поташиников С. И. Параллельная молекулярная динамика с суммированием Эвальда и интегрированием на графических процессорах // Вычислительные методы и программирование. 2009. Т. 10. С. 158–175. [Boyarchenkov A. S., Potashnikov S. I. *Parallelnaya molekulyarnaya dinamika s summirovaniem Eval'da i integririrovaniem na graficheskikh protsessorakh* (Parallel molecular dynamics with the Ewald summation and integration on graphics processing units) // Vychislitel'nye metody i programmirovaniye. 2009. Iss. 10. P. 158–175. (in Russian)].
19. Боресков А. В., Харламов А. А. Основы работы с технологией CUDA. М. : ДМК Пресс, 2010. 232 с. [Boreskov A. V., Harlamov A. A. *Osnovy raboty s tekhnologiyey CUDA* (Basics of working with CUDA technology). Moscow, DMK Press, 2010. 232 p. (in Russian)].
20. Соцкий В. В. Опыт применения графических контроллеров к решению задач молекулярной динамики // Жидкие кристаллы и их практическое использование. 2011. Вып. 3. С. 77–84. [Sotsky V.V. *Opyt primeneniya graficheskikh kontrollerov k resheniyu zadach molekulyarnoy dinamiki* (Experience in GPU applying to molecular dynamics) // Zhidkie kristally i ikh prakticheskoe ispol'zovanie (Russ. J. Liq. Cryst. & Appl.). 2011. Iss. 3. P. 77 – 84. (in Russian)].
21. Москвин Д. О., Соцкий В. В., Усольцева Н. В. Исследование производительности различных алгоритмов расчёта ван-дер-ваальсовых взаимодействий в задачах молекулярной динамики на графических устройствах // Вестник ИГЭУ. Иваново. 2012. Вып. 2. С. 75–79. [Moskvin D. O., Sotsky V. V., Usol'tseva N. V. *Issledovanie proizvoditel'nosti razlichnykh algoritmov rascheta van-der-vaal'sovykh vzaimodeystviy v zadachakh molekulyarnoy dinamiki na graficheskikh ustroystvakh* (Productivity investigation of different algorithms for calculating of van der Waals interactions in molecular dynamics problems on graphics units) // Vestnik IGEU. Ivanovo. 2012. Iss. 2. P. 75–79. (in Russian)].
22. Москвин Д. О., Сотский В. В., Усольцева Н. В. Studying the possibility of predicting the supramolecular organization of disk-like mesogens by molecular dynamics simulation // Russian Physics Journal. 2013. Vol. 55, № 10. P. 1143–1146.
23. Москвин Д. О., Соцкий В. В., Усольцева Н. В. Оценка производительности двух реализаций алгоритма с присоединёнными списками для расчёта ван-дер-ваальсовых взаимодействий в задачах молекулярно-динамического моделирования с использованием графических устройств // Вестник ИГЭУ. Иваново. 2013. Вып. 2. С. 71–74. [Moskvin D. O., Sotsky V. V., Usol'tseva N. V. *Otsenka proizvoditel'nosti dvukh realizatsiy algoritma s prisoeдинennymi spiskami dlya rascheta van-der-vaal'sovykh vzaimodeystviy v zadachakh molekulyarnodnamicheskogo modelirovaniya s ispol'zovaniem graficheskikh ustroystv* (Productivity evaluation of two cell method algorithms for Van der Waals interactions calculation in molecular dynamics modeling with using of graphics units) // Vestnik IGEU. 2012. Iss. 2. P. 71–74. (in Russian)].
24. OpenMP Application Program Interface. Version 3.1. July 2011. Available at: www.openmp.org.
25. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2012660998 «Система расчета ван-дер-ваальсовых взаимодействий VDWForceCompMD» / Москвин Д. О., Соцкий В. В.; заявка № 2012619203; зарег. в Реестре программ для ЭВМ 5.12.2012. М., 2012. [Moskvin D. O., Sotsky V. V. *Svidetel'stvo o gosudarstvennoy registratsii programmy dlya EVM № 2012660998 "Sistema rascheta van-der-vaal'sovykh vzaimodeystviy VDWForceCompMD"* (Certificate № 2012660998 about official registration of "Van der Waals interactions calculation system VDWForceCompMD" software). Right holders – Moskvin D. O., Sotsky V. V.; registered in the Software registry of the Russian Federal Institute of Industrial Property 5.12.2012. (in Russian)].

Поступила в редакцию 21.03.2014 г.