

透过 NAG 协助制造更好的核反应堆

英国伦敦大学玛丽皇后学院与英国科学和技术设施委员会 (STFC) 达斯伯里 (Daresbury) 实验室使用英国超算中心 (HECToR) 的研究人员。与超算中心内的 NAG HPC 软件工程专家 (<http://www.nag.com/hpc/index.asp>) 研究核子反应堆与放射性废弃容器的辐射损害。经由 NAG 的协助，他们已经能生成大系统的模型，让他们探索原先无法碰触到但却是最实际的问题。

玛丽皇后学院的研究员 Kostya Trachenko 与 Eva Zarkadoula，一起与达斯伯里实验室的 Ilian Todorov 执行 HECToR 内的 DL_POLY_4 分子动力学模型，用来建构在金属中因高能原子破坏的原子结构模型。原子的破坏可能导致固体的晶体结构转变成非晶体 - 也就是所谓的没有长程秩序 (long-range order) - 会导致材料受损，及依此材料生成的大型物体 (例如核子舰艇) 也将变得脆弱。图 1 表示模拟锆石的辐射损害；一个 30 keV 的铀原子通过 3 维晶体扩散，引起大量的原子破裂。

若要尽可能真实的进行原子破坏模型的研究，就需要非常大的系统；尤其是研究人员要使用成千上万的原子进行模拟。一般来说，DL_POLY_4 程序的性能在处理器增加 (HECToR 中的 Cray XT4 机器有 12,000 的核) 时扩展性相当好，但是问题会发生在若要将各原子的配置细节周期性的输出时，就会影响到整个程序的性能，且限制了能研究的模型大小。

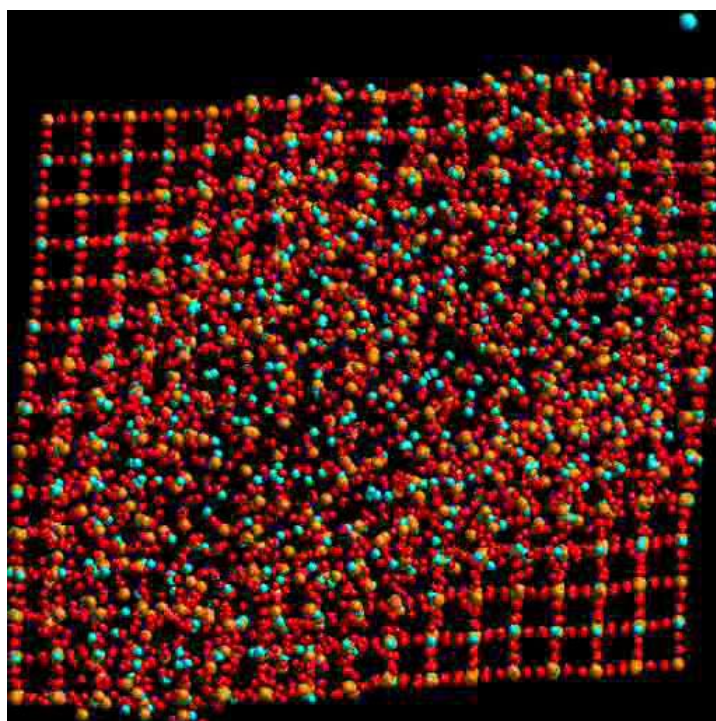


图 1. 锆石中模拟辐射损害。一个 30 keV 的铀原子 (右上角) 通过三维的晶体结构。

研究人员转而求助达斯伯里实验室的 DL_POLY_4 作者与 NAG 的 HPC 专家 – 他们提供 HECToR 中计算科学与工程的技术支持。NAG 的 Ian Bush 与达斯伯里实验室的 Ilian Todorov 共同合作了四年的时间处理相关的输入输出问题，他们设计了一种新方法来处理原子配置文件的输出。他们的方法是将原子排成适当的顺序，依赖输出函数的通讯与计算工作平衡 (利用 HECToR 的文件系统结构)，利用处理器并行处理输出。同样的也以相同的策略并行同步读取输入文件。将这些方法结合到 DL_POLY_4 后，彻底的消除了 I/O 的瓶颈，让程序具备灵活弹性 (图 2)，并提升 20 倍的性能。

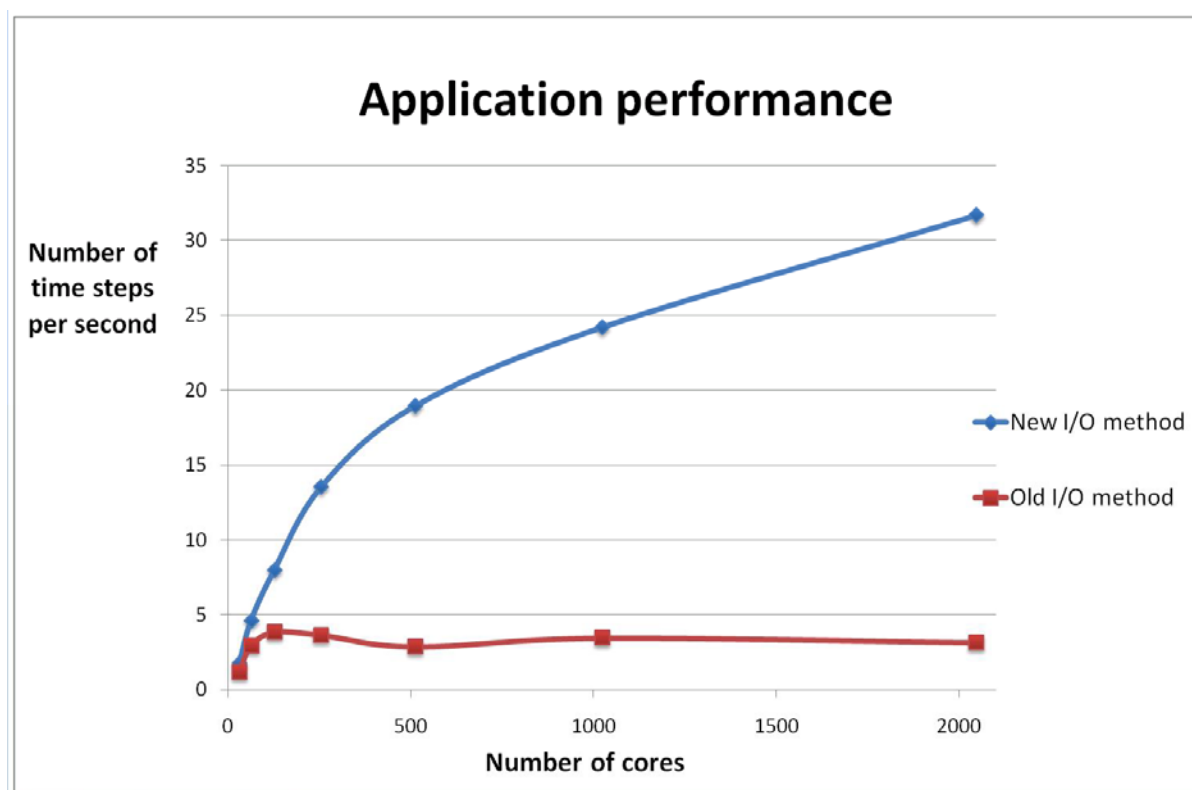


图 2. DL_POLY_4 性能 (每秒模拟次数)，坐标轴是 HECToR 的核心数，蓝色为新的输出方法，红色为旧方法。

这些改良，让研究人员能够在 HECToR 的大型系统中进行仿真任务，并获得更多科学研究上的细节。因此，图 3 显示在铁的仿真系统中，100,000,000 个原子的原子结构受辐射损害的模式；在承受 200 keV 能量后其中一个铁原子的回弹状况。回弹导致了原子位移的状况 (维持在晶格位置的原子并没有显示出来)。取得这些的成功后，研究员将改善大型系统中多碰撞事件的模型。我们注意到模拟那么多数量的原子将很快的就达到 32 位整数能表示的上限了。

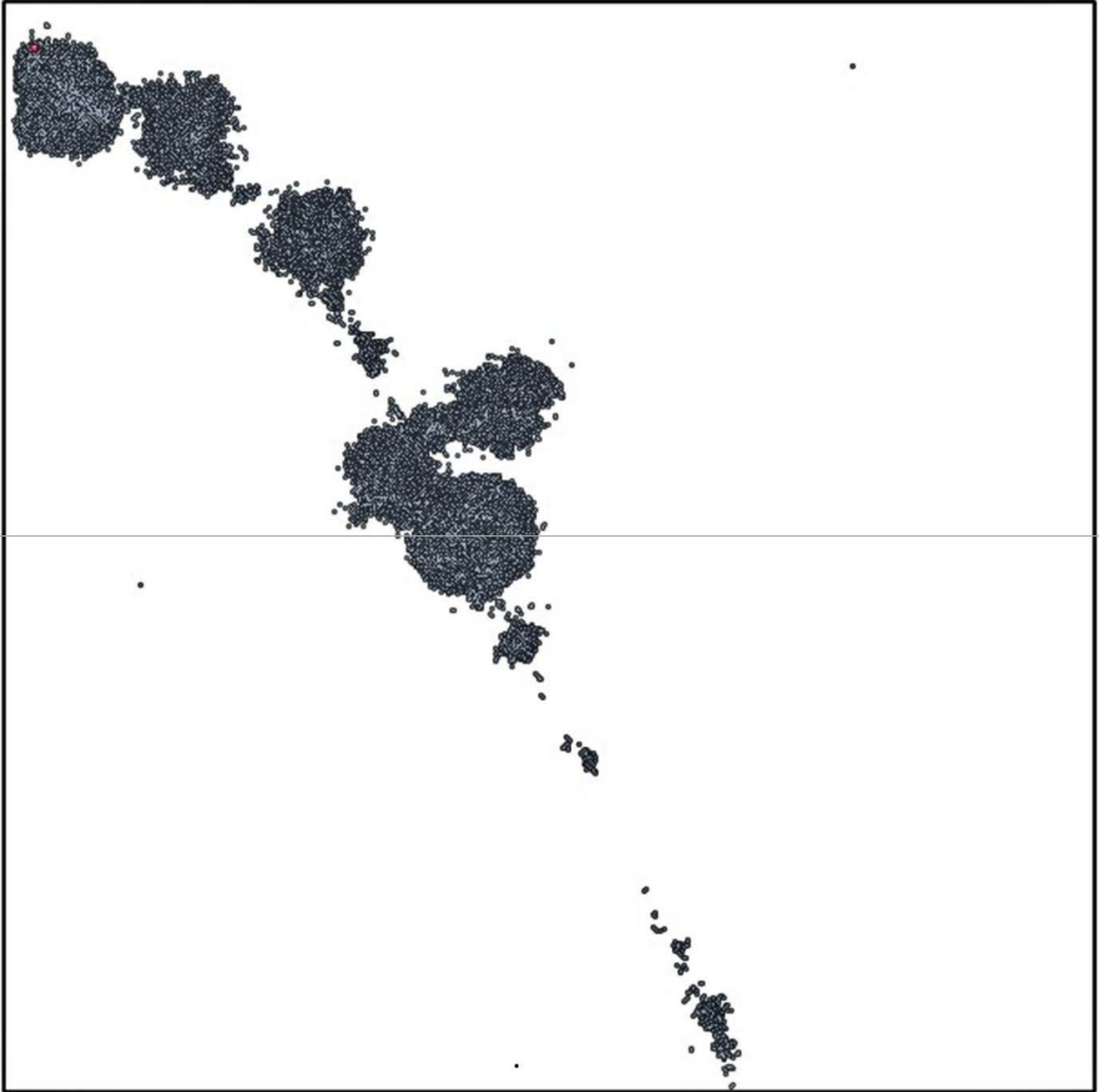


图 3. 铁中受辐射损害的模拟图，承受 200 keV 能量后其中一个铁原子回弹状况 (影像中左上角的红点)。只有节点间原子 (并没有落在晶格 (crystalline lattice) 中) 显示出来。

伦大大学玛丽皇后学院的物理与天文学系的 Kostya Trachenko 教授说到：“由 NAG 开发出的输出方法，让我们在 HECToR 中执行的大尺度模拟时有明显的性能提升。从前，这个输出瓶颈让我们无法顺利的使用 HECToR 进行我们的研究，但是现在我们能做出真正的贡献，能够明了建构核子反应炉与储存设备的材料若受辐射损害的微观过程。”

若您想要了解更多讯息，请参考：*Atomistic simulations of resistance to amorphization by radiation damage*. K. Trachenko, I.T. Todorov, M.T. Dove, E. Artacho and W. Smith. *Physical Review B* 73, 174207 (2006)