

**Секция «Математическое и программное обеспечение  
информационно-исследовательских систем и интернет-ресурсов»,  
научный руководитель – Воронова Л.И., д-р физ.-мат. наук, профессор**

**МЕТОД РАВНОМЕРНОЙ ЗАГРУЗКИ ВЫЧИСЛИТЕЛЕЙ  
ДЛЯ РАСПРЕДЕЛЕННОГО МД-МОДЕЛИРОВАНИЯ  
КОРРЕЛИРОВАННОЙ СИСТЕМЫ N-ЧАСТИЦ**

Трунов А.С., Дворянчикова А.А.

Российский государственный гуманитарный университет,  
Москва, e-mail: dvorjanchikova@ro.ru

Активно развивающиеся в последние годы модели и методы высокопроизводительных вычислений имеют широкую область применения, в том числе и для поддержки научного компьютерного эксперимента.

В рамках компьютерного моделирования можно выделить важный класс задач, в которых возможно распределять вычисления для совокупности объектов, находящихся в определенных отношениях друг с другом. К этому классу относятся и задачи моделирования коррелированных систем N-частиц.

В настоящее время разработан ряд программных комплексов реализующих методы распределенного расчета задач класса N-частиц [1-3]. Эти методы основаны на расчете двухобъектных отношений [4, 5]. Предметом этой статьи являются методы, основанные на двух объектных отношениях с учетом трехобъектных и многообъектных отношений [6, 7].

Для возможности параллельного расчета коррелированной системы N-частиц, авторами разработан метод равномерной загрузки вычислителей в однородной вычислительной среде, в которой каждый вычислитель обладает одинаковой производительностью и имеет свою независимую память.

Равномерная загрузка подразумевает разделение множества на подмножества с мощностью равной  $k = N/p$ , где  $N$  количество одночастичных дескрипторов системы,  $p$  – количество вычислителей, выполняющих расчет. Эффективной считается загрузка, при которой вычислители завершают расчет дескрипторов одновременно.

Конечной целью расчета каждого вычислителя является получение новых значений элементов одночастичных дескрипторов  $\{Dlv(i)\}$ , рассчитываемых по формуле (1). Для получения новых значений элемента  $\bar{F}_i \in Dlv(\dots)$  требуется расчет элементов  $\bar{f}_{ij} \in D\sum 2(i)$ , в которых идет пересчет отношений  $i$  и  $j$  элемента, для всех фиксированных  $i$  со всеми  $j$  и где  $i \neq j$

$$\bar{F}_i \in Dlv(i) = \sum_{j \neq i}^N \bar{f}_{ij} \in D\sum 2(i). \quad (1)$$

Эта часть расчета имеет квадратную зависимость от числа дескрипторов  $\{Dlv(i)\}$  и является самой затратной по времени в процессе моделирования системы. Сократить время расчета можно за счет уменьшения обчитываемых отношений между дескрипторами.

Для этого применяется алгоритм «диагональной матрицы», в котором, элемент  $\bar{f}_{ij} \in D\sum 2(i) = -\bar{f}_{ji} \in D\sum 2(i)$ . В этом случае время расчета  $Dlv\{\}$  сокращается в два раза, а количество

обсчитываемых отношений становится равным  $(N(N-1))/2$ . На рис. 1 наглядно отображен расчет элементов  $\bar{f}_{ij} \in D\sum 2(i)$ , с использованием алгоритма «диагональной матрицы».

В этом случае количество отношений, которые нужно обчитывать для накопителя  $\sum \bar{f}^2 \in D\sum 2(1)$ , равно  $N-1$ , а для  $\sum \bar{f}^2 \in D\sum 2(N)$ , равно 0. Следовательно, если формировать рассчитываемые подмножества дескрипторов  $\{Dlv(i)\}$  для каждого вычислителя последовательными диапазонами с мощностью  $N/p$ , то загруженность вычислителей становится не равномерной. Для равномерной загрузки вычислителей разработан встречный алгоритм выборки дескрипторов в диапазон.

$i, j$	$i_1$	$i_2$	...	$i_n$
$j_1$		$-\bar{f}_{j_1 i_2}$	...	$-\bar{f}_{j_1 i_n}$
$j_2$	$\bar{f}_{i_1 j_2}$		...	$-\bar{f}_{j_2 i_n}$
...	...	...		...
$j_n$	$\bar{f}_{i_1 j_n}$	$\bar{f}_{i_2 j_n}$	...	

Рис. 1. Применение алгоритма «диагональной матрицы» для расчета элементов двухчастичного дескриптора  $D\sum 2(i)$

Подмножества одночастичных дескрипторов  $\{Dlv(i)\}$ , рассчитываемых каждым вычислителем формируются по схеме, отображенной на рис. 2.

Все множество дескрипторов разбивается на два интервала  $[Dlv(i_1), Dlv(i_{N/2})]$  и  $[Dlv(i_{N/2+1}), Dlv(i_N)]$ . Внутри каждого интервала дескрипторы распределяются по номерам, где  $i_1$  – номер первого дескриптора,  $i_N$  – номер последнего дескриптора. Количество дескрипторов содержащихся в рассчитываемом подмножестве и передаваемых каждому вычислителю равно  $k$ . Из номеров дескрипторов находящихся на интервале  $[Dlv(i_1), Dlv(i_{N/2})]$  формируется первая половина подмножества, а из номеров интервала  $[Dlv(i_{N/2+1}), Dlv(i_N)]$  формируется вторая половина подмножества.

Выборка дескрипторов происходит поочередно, сначала из первого интервала начиная с  $Dlv(i_1)$  затем из второго интервала в обратном направлении с  $Dlv(i_N)$ . Каждое подмножество получает следующий дескриптор через шаг равный  $p$ . На рис. 2 отображено распределение дескрипторов между вычислителями используя метод равномерной загрузки.

Метод равномерной загрузки вычислителей коррелированной системы N-частиц является оптимальным для однородной вычислительной среды и применяется для параллельного расчета дескрипторов в модели с распределенной памятью. Реализация данного метода в гетерогенной среде, когда совместно используются вычислители разные по типу и производительности, требует доработки. Так как из-за разницы в производительности более мощные вычислители, выполнив свои расчеты, простаивают.

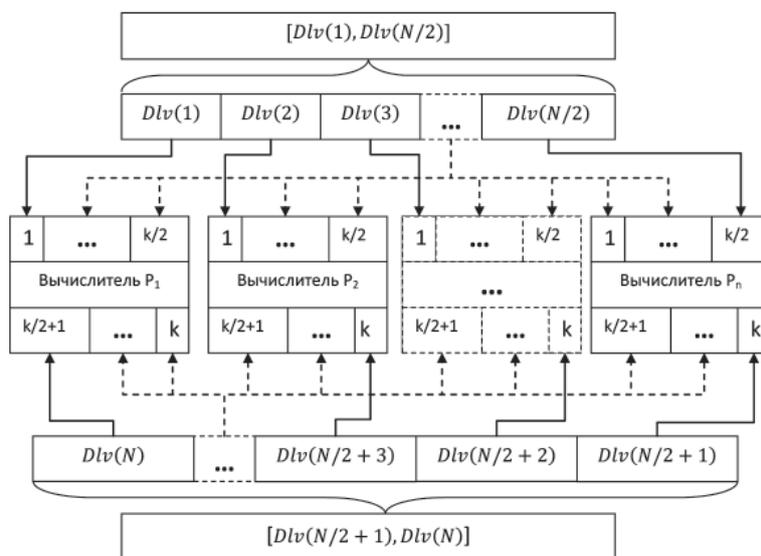


Рис. 2. Формирование подмножеств одночастичных дескрипторов  $\{Dlv(i)\}$  с применением встречного расчета

В настоящее время разработанный метод равномерной загрузки вычислителей для параллельного расчета коррелированной системы  $N$ -частиц проходит апробацию в программном комплексе «MD-SLAG-MELT»[8,9].

**Список литературы**

1. SAGE MD2 [Электронный ресурс] – Режим доступа: [http://www.sagemd.com/htmls/about\\_sagemd.htm](http://www.sagemd.com/htmls/about_sagemd.htm).
2. HyperChem. [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://www.hyper.com>.
3. XMD (Molecular Dynamics for Metals and Ceramics). [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://xmd.sourceforge.net>.
4. Brown W.M., Kohlmeyer A., Plimpton S.J., Tharrington A.N. Implementing molecular dynamics on hybrid high performance computers – Particle-particle particle-mesh // Computer Physics Communications Volume 183, Issue 3, March 2012, P. 449-459
5. Le Grand S., Götz A.W., Walker R.C. SPFP: Speed without compromise – A mixed precision model for GPU accelerated molecular dynamics simulations // Computer Physics Communications Volume 184, Issue 2, February 2013, P. 374-380
6. Voronova L.I., Grigorieva M.A., Voronov V.I. «Nanostructure computer modeling methods development for multicomponent slag melts», Fundamental researches, 8 (part 3), P. 617-622, 2011, www.rae.ru
7. Воронова Л.И., Григорьева М.А., Воронов В.И., Трунов А.С. Программный комплекс «MD-SLAG-MELT» для моделирования наноструктуры и свойств многокомпонентных расплавов // Расплавы. – 2013. – № 2.
8. Voronova L.I., Voronov V.I. The Research-Information System «MD-SLAG-MELT». Certificate of state registration of computer programs № 2012615018 from 05.06.2012. Program complex Nano-MD-Simulation. <http://www.nano-md-simulations.com>.
9. Трунов А.С., Воронова Л.И. Подсистема распределенного молекулярно-динамического моделирования информационно-исследовательской системы «MD-SLAG-MELT» Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ, № 2012615017 от 05.06.2012.

**МЕТОД ПАРАЛЛЕЛЬНОГО РАСЧЕТА  
КОРРЕЛИРОВАННОЙ СИСТЕМЫ N-ЧАСТИЦ  
НА ГРАФИЧЕСКОМ ПРОЦЕССОРЕ**

Трунов А.С., Воронова Л.И., Шалабай Т.С.

Российский государственный гуманитарный университет,  
Москва, e-mail: [tanj.shalabai94@yandex.ru](mailto:tanj.shalabai94@yandex.ru)

В статье рассматривается разработка моделей и методов для поддержки высокопроизводительных вычислений, реализуемых на сетевом вычислительном ресурсе (информационно-исследовательская система ИИС MD-Slag-Melt»)[1], позволяющем ис-

следовать структуру и свойства многокомпонентных шлаковых расплавов методами компьютерного моделирования, в том числе методом молекулярной динамики.

Принципиальное отличие систем, являющихся предметом исследования в ИИС, состоит в том, что это полимеризующиеся системы с многочастичным взаимодействием, объединяющим несколько видов взаимодействий: двухчастичные вклады (дальнедействующие ионные и ближкодействующие отталкивательные) и многочастичные (двух и трех-частичные ковалентные взаимодействия).

Моделирование полимеризующихся ионно-ковалентных систем является нетривиальной задачей, требующей учета особенностей взаимодействия частиц в расплаве, что существенно образом усложняет постановку задачи распределения. Расчет математических моделей коррелированных систем, содержащих  $10^5$ - $10^7$  частиц, требует разработки специальных методов для высокопроизводительных вычислений таких систем.

Авторами разработан ряд методов для поддержки высокопроизводительных вычислений, которые используют модель неоднородных дескрипторов для распределенного МД-моделирования коррелированной системы  $N$ -частиц [2, 3].

Основными элементами модели, обеспечивающими возможность распределения расчетов без детализации всех взаимодействий между частицами, являются объект и дескриптор. Под объектом понимается некоторая совокупность описаний частиц исходной системы, а также отношений между ними, выделяемая по определенным правилам и обеспечивающая возможность декомпозиции системы для распределения и распараллеливания расчетов.

Объекты идентифицируются с помощью неоднородных дескрипторов, которые содержат разнотипные элементы описания выделенного объекта необходимые для распределения расчетов.

Авторами, на основе концептуальной модели МД-метода и тщательного анализа программного кода локального МД-приложения [4] построен набор дескрипторов, которые можно разделить по двум классам: одночастичные дескрипторы ( $Dls(i)$ ,  $Dlv(i)$ )