

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.
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

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 ($Dls(i)$, $Dlv(i)$)

и агрегаторы (двух- и трех-частичные $D\Sigma 2(i)$, $D\Sigma 3(i)$ дескрипторы).

Таким образом, предложенный подход позволяет отвлечься от конкретного наполнения элементов дескрипторов, перенести акцент с описания физических взаимодействий в системе на информационное описание перераспределения потоков данных между дескрипторами. На основе этого подхода построена вычислительная модели распределенных вычислителей.

Для модели распределенных вычислителей, разработан метод равномерной загрузки вычислителей в однородной вычислительной среде [3].

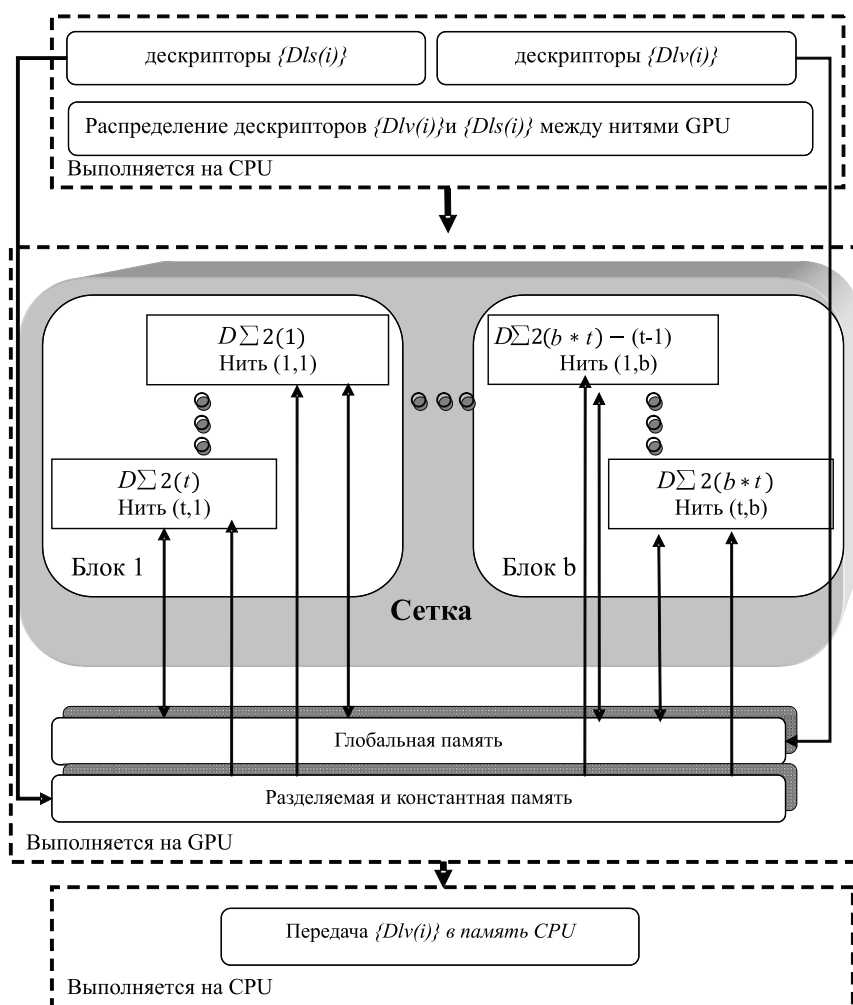
Ниже описывается метод параллельного расчета коррелированной системы N-частиц на графическом процессоре, развивающий описанные подходы.

Применение вычислителей на основе графических процессоров (GPU) при параллель-

ном расчете дескрипторов, позволит существенное уменьшить время моделирования системы N-частиц.

В методе учитываются особенности архитектуры графических процессоров NVIDIA, и технологии CUDA. Параллельный расчет выполняется большим числом нитей, сгруппированных в блоки. В отличие от вычислителей, реализующих расчеты на центральных процессорах, GPU содержит семь видов памяти, различающихся по размеру, возможности записи и скорости чтения. Графический процессор не выполняет параллельный расчет самостоятельно, функции запуска расчета, отслеживания хода выполнения расчета и передачи дескрипторов в память GPU, выполняет центральный процессор.

На рисунке представлен алгоритм параллельного расчета одночастичных дескрипторов на GPU.



Все множество значений элементов дескрипторов $\{Dlv(i)\}$ передается в глобальную память (обладает большой вместимостью) GPU, из-за большого количества передаваемых данных. В константную и текстурную память передаются дескрипторы $\{Dls(i)\}$, что позволяет разгрузить глобальную память.

Центральный процессор формирует специальную сетку, состоящую из блоков (b), в которых определяется количество нитей (t) необходимых для расчета. Разделение множеств дескрипторов на подмножества

и передача их на нити реализуется с помощью метода равномерной загрузки вычислителей.

Каждая нить производит расчет одного двухчастичного $D\Sigma 2(i)$ агрегатора и на основе полученных результатов обновляет значения элементов одночастичных векторных дескрипторов.

Для расчета двухчастичных $\{D\Sigma 2(i)\}$ агрегаторов на графическом процессоре применяется алгоритм «диагональной матрицы». Так как память для всех вычислителей одна, то возможны конфликты записи,

когда вычислители обращаются к одному и тому же значению элемента дескриптора. Для этого на каждой итерации результат расчета значений элемента $f_{ij} \in D \sum 2(i)$ передаются в специальный двумерный накопитель. Так же на каждой итерации цикла производится синхронизация. Расчет будет возобновлен только после прохождения одной итерации расчета значений элемента $f_{ij} \in D \sum 2(i)$ всеми нитями.

Для оценки эффективности разработанного метода проведен ряд экспериментов связанных с рас-

четом коррелированной системы N -частиц. В экспериментах сравнивается время, затраченное на проведение локального варианта расчета коррелированной системы N -частиц и параллельного расчета с использованием технологии CUDA. Дескрипторы заполняются тестовыми значениями элементов. Тестирование модели, в основе которой заложен расчет с использованием технологии CUDA, проведено на графическом процессоре GeForceGTS 450. Результаты компьютерных экспериментов представлены в таблице.

Результаты компьютерных экспериментов коррелированной системы N -частиц

Количество частиц в системе	Локальный вариант			CUDA		
	50176	250880	401408	50176	250880	401408
Время расчета в секундах	7,6	180,4	548,2	0,14	3,53	9,11

Согласно результатам тестирования серьезное ускорение наблюдаются при расчете системы на графическом процессоре GTS 450. Так же в модели параллельного расчета коррелированной системы N -частиц для графического процессора заложены процедуры позволяющие хранить данные в быстрой разделяемой и константной памяти GPU, что существенно сокращает время проведения моделирования.

В настоящее время модель распределенных вычислителей проходит апробацию в программном комплексе ИИС «MD-SLAG-MELT»[5]

Список литературы

1. Информационно-исследовательская система «MD-SLAG-MELT». [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://nano-md-simulation.com>.

2. Voronova L.I., Trunov A.S., Voronov V.I. The distributed calculators model for molecular-dynamic simulation of strong interaction systems // European journal of natural history, 2013.

3. Программный комплекс «MD-SLAG-MELT» для моделирования наноструктуры и свойств многокомпонентных расплавов / Л.И. Воронова, М.А. Григорьева, В.И. Воронов, А.С. Трунов // Расплавы. – 2013. – № 2.

4. Трунов А.С., Дворянчикова А.А. Метод равномерной загрузки вычислителей для распределенного мд-моделирования коррелированной системы n -частиц // Студенческий научный форум: V международная студенческая электронная конференция.

5. 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

6. Воронова Л.И., Григорьева М.А., Воронов В.И., Трунов А.С. Программный комплекс «MD SLAG MELT» информационно-исследовательской системы «Шлаковые расплавы» версии 10.0 // Деп. в ВИНТИ РАН, 2012. № 29-B2012. С. 16

Философские науки

ПРОБЛЕМА БЕССМЕРТИЯ В ДУХОВНОМ ОПЫТЕ ЧЕЛОВЕЧЕСТВА

Оганова М.Е.

Академия управления при Президенте Республики Беларусь, Минск, e-mail: maryaog@yandex.by

На сегодняшний день существует три основные точки зрения на проблему бессмертия: философская, религиозная и научная. Их анализ показывает, что в каждой из них существуют как сторонники бессмертия, так и его противники.

Учение о бессмертии было развито у Платона. Под бессмертием человека он понимал бессмертие души, четыре доказательства которого приводит в диалоге «Федон». Они вытекают из его общефилософской концепции, стержнем которой является учение о мире идей [2, с. 5]. Впоследствии ее критиковал в своих трудах Аристотель, который придерживался позиций материалистического учения.

При рассмотрении религиозной точки зрения на проблему бессмертия, следует обратить внимание на то, что она была широко освещена еще в древних религиозных концепциях египтян и римлян. Самой старой концепцией жизни за смертью можно назвать египетскую, которая содержится в «Книге мертвых» с полными инструкциями того, что следует сделать, чтобы жизнь в потустороннем мире была счастливой. Также древние египтяне оставили нам «Тексты Пирамид», которые должны были помочь благополучному переходу умерших фараонов в следующий мир, и в них говорится о двух сущностях – Ка и Ба, переживающих физическое тело. Римляне почитали

души умерших как божественные существа и торжественность погребальных обрядов свидетельствовала об уважении живых к умершим, переселявшимся для продолжения жизни в другой мир [3, с. 570].

Христианство учит своих последователей, что они обретут бессмертие во время воскресения Иисуса Христа, который вернет им жизнь, тем самым обеспечив им вечное существование. В буддизме идея бессмертия души содержится в положении о том, что тело презренно и должно быть передано огню сразу после смерти. А бессмертная душа перейдет в новое тело, и этот процесс будет повторяться до тех пор, пока душа не исчезнет и не сольется с душой вселенской [4, с. 13]. В отличие от христианства и буддизма ислам полностью отвергает идею бессмертия, признавая примат земной жизни.

В науке проблеме бессмертия также уделяется значительное внимание. Так, имеются такие научные направления, как геронтология и ювенология, которые ставят своей целью увеличение срока жизни человека и продление его молодости соответственно. Их имеет в виду Г.Д. Бердышев, говоря о биологическом бессмертии [1, с. 19]. Социальное бессмертие он подразумевает, когда подчеркивает роль человеческих деяний, достижений человека в материальной и культурной сферах жизни народа [1, с. 29].

В медицинской практике имеется несколько фактов, свидетельствующих о возможности жизни после жизни. В качестве примера можно привести исследование Р. Моуди, описанное им в книге «Жизнь после жизни», суть которого состоит в том, что человек после признания факта его смерти ощущает себя