

ной студенческой электронной научной конференции «Студенческий научный форум» [Электронный ресурс] – Режим доступа www.scienceforum.ru/2013/183/2549 (дата обращения: 23.01.2014).

5. Википедия мультиагентная система – <http://ru.wikipedia.org/>
 6. Трунов А.С., Воронова Л.И., Воронов В.И. Разработка методов распределения для высокопроизводительных вычислений в многочастичных системах. – Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. 2013. № 10-2. С. 192-194.

ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ РАСЧЕТ СИСТЕМЫ N-ЧАСТИЦ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕХНОЛОГИИ MPI И CUDA

Пилипчак П.Е., Трунов А.С.

Филиал Российского государственного гуманитарного университета, Домодедово, Московская область, e-mail: thelastrainbow@yandex.ru

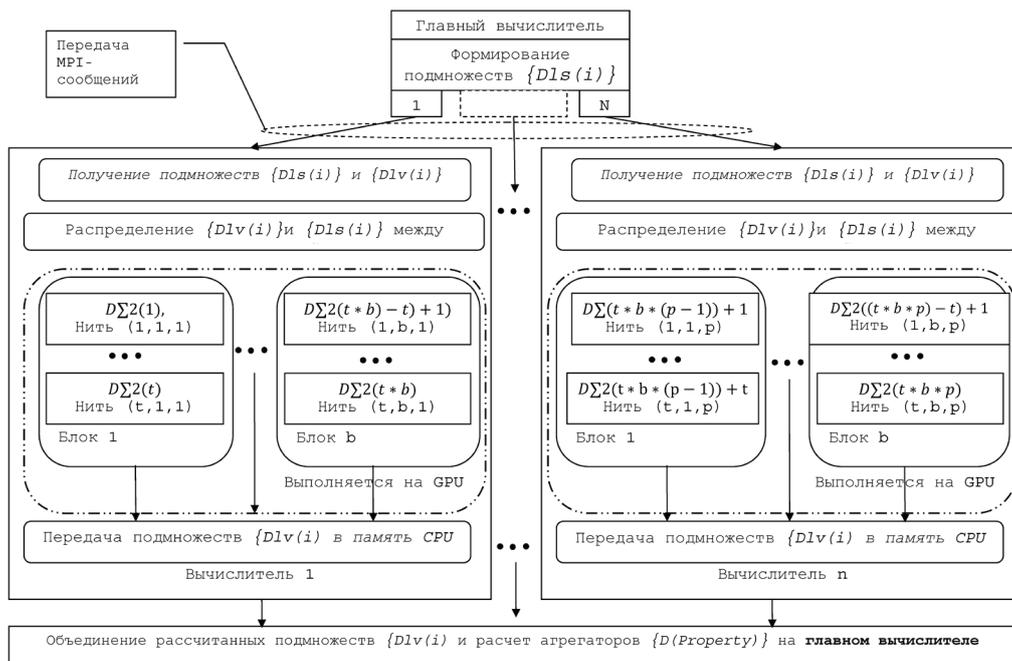
В настоящее время существует множество программных комплексов позволяющих решать задачи компьютерного моделирования с применением высокопроизводительных вычислений. Большинство таких комплексов решают задачи по моделированию систем относящихся либо к классу с дальнедействующими потенциалами, либо учитывающими только короткодействующие ковалентные взаимодействия [1-3].

Принципиальное отличие систем, являющихся предметом исследования данной работы, состоит в том, что это полимеризующиеся системы с многоча-

стичным взаимодействием, объединяющим несколько видов взаимодействий: двухчастичные вклады (дальнедействующие ионные и близкодействующие отталкивательные) и многочастичные (двух и трехчастичные ковалентные взаимодействия)[6-8]. Моделирование полимеризующихся систем является нетривиальной задачей, требующей учета особенностей ионного и ионно-ковалентного взаимодействия частиц разных типов в расплаве. Это существенным образом усложняет постановку задачи распределения.

На основе концептуальной модели и тщательного анализа программного кода локального МД-приложения [6], автором разработана модель неоднородных дескрипторов, обеспечивающая возможность распределения и распараллеливания расчетов для коррелированных многочастичных систем, на основе «свертки» детализации физического описания объектов [5].

Предметом данной работы является разработка метода позволяющего применять вычислители на основе графических процессоров для расчетов системы N-частиц, что даст возможность распределить расчет дескрипторов между миллионами нитей и серьезно сократить время КМ. На рисунке представлен алгоритм расчета дескрипторов с использованием центрального и графического процессора.



Алгоритм расчета дескрипторов с использованием центрального и графического процессора

Передание подмножеств дескрипторов каждому вычислителю производится с использованием технологии MPI, а параллельный расчет реализуется на графических процессорах с применением технологии CUDA.

На главном вычислителе формируются подмножества дескрипторов {Dls(i)}, {Dlv(i)} с мощностью $k=N/p$, где N – количество дескрипторов, p – количество вычислителей выполняющих расчет. Сформированные подмножества передаются вычислителям через интерфейс передачи сообщений MPI. Полученные подмножества дескрипторов распределяются центральным процессором между нитями, реализующими расчет на графическом процессоре, где индекс t – количество нитей в блоке, b – количество блоков. На каждой нити графического процессора, с использо-

ванием технологии CUDA, рассчитываются значения элементов одного двухчастичного агрегатора $D\Sigma 2(i)$. На основе результатов расчета подмножеств двухчастичных агрегаторов обновляются значения элементов дескрипторов {Dlv(i)}. Полученные подмножества дескрипторов {Dlv(i)} передаются на центральный процессор. После завершения расчетов всеми вычислителями рассчитанные подмножества одночастичных векторных дескрипторов объединяются на главном вычислителе для расчета агрегатора {D(Property)}.

Проведенные компьютерные эксперименты, результаты которых представлены в таблице показывают существенное сокращения времени проведения КМ за счет совместного использования технологий CUDA и MPI.

Результаты моделирования системы SiO₂ (в часах)

N	Локальный вариант	MPI-8	MPI-16	CUDA	CUDA-2
1000	3,1	0,41	0,22	0,17	0,09
4200	11,5	1,75	0,9	0,63	0,37
12000	134	21,7	10,3	7,4	4,1
100000	1456	221	87,6	77,3	39,3

В моделирование сравнилось время, затраченное на проведение эксперимента с числом частиц в системе 105 и числом шагов 5000.

Компьютерные эксперименты проводились на кластере, состоящем из 16 вычислителей Dual Core AMD Opteron с частотой 2.21 Ghz для приложения, реализованного с использованием технологии MPI. На графическом процессоре с использованием двух видеокарт NVidia GeForce GTS 450 для приложения реализующего расчет на CUDA.

Полученные результаты дают возможность говорить о целесообразности использования графических процессоров для экспериментов в области молекулярной динамики и позволяют ускорять время расчета в 36 раз по сравнению с локальным вариантом МД-приложения.

Список литературы

1. 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, Pages 449-459
2. Harvey, M.J., De Fabritiis, G. An implementation of the smooth particle mesh Ewald method on GPU hardware // Journal of Chemical Theory and Computation Volume 5, Issue 9, September 2009, Pages 2371-2377
3. Jha, P.K., Sknepnek, R., Guerrero-García, G.I., Olvera De La Cruz, M. A graphics processing unit implementation of coulomb interaction in molecular dynamics // Journal of Chemical Theory and Computation Volume 6, Issue 10, 12 October 2010, Pages 3058-3065
4. 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. № 4. С. 36-49.
5. Трунов А.С., Воронова Л.И., Шалабай Т.С. Метод параллельного расчета коррелированной системы n-частиц на графическом процессоре. – Современные наукоемкие технологии. 2013. № 6. С. 117-119.
6. Воронова Л.И., Трунов А.С., Воронов В.И. Разработка методов параллельного расчета коррелированной многочастичной системы на графическом процессоре. – Вестник Российского государственного гуманитарного университета. 2013. № 14. С. 236-247.
7. Трунов А.С., Воронова Л.И., Воронов В.И. Разработка методов распределения для высокопроизводительных вычислений в многочастичных системах. – Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. 2013. № 10-2. С. 192-194.

МОДЕЛЬ БАЛАНСИРОВКИ НАГРУЗКИ ДЛЯ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО РАСЧЕТА СИСТЕМЫ N-ЧАСТИЦ НА ГЕТЕРОГЕННОЙ КЛАСТЕРНОЙ СИСТЕМЕ

Пилипчук П.Е., Воронова Л.И., Трунов А.С.

Филиал Российского государственного гуманитарного университета, Домодедово, Московская область,
e-mail: thelastrainbow@yandex.ru

В настоящее время в различных областях современной науки широко применяется компьютерное моделирование (КМ). В физической химии, например, КМ позволяет исследовать структуру и свойства материалов. Широко применяемый в физической химии метод молекулярной динамики (МД) позволяет определить целый комплекс свойств (структурные, термодинамические, транспортные) и исследовать взаимосвязи наноструктуры и физико-химических свойств.

Важной характеристикой при МД-моделировании является размер (число частиц) моделируемой системы. С увеличением числа частиц до 106 линейные размеры модельного куба достигают нанометров, что позволяет получать результаты нового качества, обладающих практической значимостью. Увеличение числа частиц моделируемой системы требует серьезных временных затрат на проведение КМ, что делает невозможным проведение КМ без привлечения высокопроизводительных вычислений.

Для проведения параллельного расчета системы N-частиц широко применяется вычислительный кластер, состоящий из вычислительных узлов (вычислителей) объединенных каналами связи. В большинстве случаев рассчитываемое множество частиц разбивается на одинаковые подмножества между вычислительными узлами кластера для проведения параллельного расчета. Но возникают ситуации, когда на кластерных системах вычислители обладают разной производительностью. Это означает, что время проведения КМ будет равно времени завершения своего расчета самым слабым (по производительности) узлом кластера.

Для обеспечения одновременного завершения расчетов всеми вычислителями, разработана модель балансировки нагрузки для параллельного расчета системы N-частиц на гетерогенной кластерной системе, что позволит существенно сократить время КМ.

Для определения размеров подмножеств частиц используется процентная доля производительности каждого из вычислительных узлов кластера, в соответствии с которой рассчитывается число частиц, направляемое вычислителю для расчета. Формула для вычисления мощности подмножества частиц, направляемых каждому вычислителю в зависимости от его производительности:

$$k_i = \frac{N}{M_s} M_i \quad (1)$$

где k_i – подмножество частиц направляемых для расчета вычислителю P_i , N – множество частиц в системе, M_i – производительность i -го вычислителя, M_s – суммарная мощность всех вычислителей в системе.

На рисунке представлен алгоритм распределения нагрузки между вычислителями в соответствии с мощностями каждого вычислителя.

Определение мощности подмножества дескрипторов производится в тестовом режиме до начала моделирования системы N-частиц. Главный вычислитель проверяет готовность всех подчиненных вычислителей и передает для тестового расчета одинаковые подмножества дескрипторов $\{Dls(i)\}$ и $\{Div(i)\}$. С учетом времени расчета каждым вычислителем своего подмножества дескрипторов главный вычислитель определяет мощность подмножества для каждого вычислителя по формуле (1). Вновь сформированные подмножества будут передаваться вычислителям во время процесса моделирования.