

Корнич В.Г.¹, Кудерметов Р.К.², Корнич Г.В.²

¹ Санкт-Петербургский государственный университет; ² Запорожский национальный технический университет

Оптимизация ускорения параллельного молекулярно-динамического алгоритма

Построен параллельный алгоритм молекулярно-динамического (МД) моделирования физических процессов, возникающих при столкновении бомбардирующей низкоэнергетической частицы с поверхностью кристалла меди. На базе сети рабочих станций, объединенных сетью Fast Ethernet, исследовалась его эффективность для различных начальных условий задачи. Алгоритм реализован на языке C++ с использованием коммуникационной библиотеки MPI, пакет MPICH версии 1.2.4 с коммуникационным интерфейсом TCP/IP. В компьютерной сети использовались два 16-портовых коммутатора LG L53116A. Все рабочие станции имели одинаковую конфигурацию: AMD Athlon(tm) XP 2000+ 1,67 GHz; DIMM DDR SDRAM 256MB; 40 Gb; Realtek Semiconductor Co., Ltd. RTL-8139; nVidia GeForce2 MX. Операционной средой была выбрана ОС GNU/Linux на основе дистрибутива Red Hat 7.2 с файловой системой NFS. Результаты ускорения параллельного алгоритма сопоставлялись с экспериментами, выполненными на кластере НТУУ «КПИ» [1].

В основе разработанного МД алгоритма положено численное решение классических уравнений движения атомных частиц [2]. Оптимальным алгоритмом для решения поставленной задачи был выбран вариант с переменным шагом по времени, который определяется по скорости перемещения наиболее быстрой в данный момент времени частицы в столкновительном каскаде. Шаг по времени для каждого отдельного процесса для новой итерации изменялся одинаково, поскольку он вычислялся в основном процессе и рассылался всем процессам [3].

Для распараллеливания задачи был использован метод дублирования данных. Полное количество атомов системы было разделено на равные по числу атомов группы, уравнения движения которых решались на различных узлах. Массивы, содержащие координаты частиц, рассылались и собирались по вычислительным узлам в рамках алгоритма с помощью функций MPI_Scatter() и MPI_Gather(), соответственно [3]. Для массивов сил и скоростей удобным оказалось не использовать функции пересылки данных, а организовать вычисление разных частей одного и того же массива на разных вычислительных узлах, а потом просуммировать одноименные результирующие массивы, взятые со всех узлов, и получить единый результат, который сохранялся в главном процессе.

Ускорение вычислений на кластере НТУУ практически не зависело от числа атомов в модели кристалла в отличие от результата, полученного на кластере учебного класса, где такая закономерность наблюдается только до четырех вычислительных узлов. Несмотря на несомненное преимущественное ускорение работы программы на кластере НТУУ, при увеличении числа вычислительных узлов больше 8 на обоих кластерах наблюдается падение ускорения.

Список литературы

1. Суперкомпьютерный кластер НТУУ «КПИ»: <http://www.hpcc.org.ua>
2. Экштайн В. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела / Пер. с англ. М.Г. Степановой / Под ред. Е.С. Машковой. – М.: Мир, 1995. – 321 с.
3. Воеводян В.В., Воеводян Вл. В. Параллельные вычисления. – СПб.: БХВ-Петербург, 2004. – 608 с.