

Параллельное моделирование взаимодействующих процессов

М.К. Буза, О.М. Кондратьева
Белорусский государственный университет
e-mail: bouza@bsu.by, kondratjeva@bsu.by

На сегодняшний день разработан, отлажен и апробирован огромный объем программного обеспечения (ПО). Важнейшая задача – эффективно использовать имеющееся ПО при работе на многопроцессорных и многоядерных вычислительных установках. Для трансформации ПО с целью эффективного выполнения на указанных платформах необходимо разработать механизмы декомпозиции последовательного алгоритма и организовать параллельную обработку его отдельных фрагментов на различных процессорах.

Для многоядерных процессоров очевидным является использование моделей параллельных программ с общей памятью. Как правило, технологии разработки программ в этом случае проще, а накладные расходы меньше по сравнению с использованием распределенной памяти.

Метод молекулярной динамики (МД) является одним из мощных и универсальных методов исследования в современной науке и технике. Реальные физические тела и среды состоят из большого числа взаимодействующих частиц, поэтому компьютерное моделирование методом МД относится к классу больших задач и для него разрабатываются и исследуются различные способы сокращения времени моделирования.

Сравнительный анализ доступных пакетов для молекулярно-динамического моделирования позволил нам выбрать пакет XMD (Molecular Dynamics for Metals and Ceramics), ставший практически стандартным для классической молекулярной динамики. Пакет XMD имеет большую историю и много пользователей. Очевидными преимуществами пакета являются широкий набор поддерживаемых межатомных потенциалов, сравнительная простота использования и открытый доступ к исходному коду.

Одной из целей работы является повышение эффективности функционирования пакета XMD за счет соответствующих доработок. Нами созданы параллельные версии алгоритма вычисления сил, которые позволили сократить время моделирования на многопроцессорных компьютерах с общей памятью. А именно, функционал пакета XMD расширен за счет включения многопоточных функций вычисления эмпирических потенциалов для полупроводниковых ковалентных материалов. Эффективность модифицированного пакета была исследована при моделировании типичных взаимодействующих процессов, происходящих в физике полупроводников. Получены обнадеживающие результаты.

Разработан и апробирован графический интерфейс для автоматизации запуска заданий пользователей на кластере СКИФ. Разработанная графическая система автоматизирует основные операции, выполняемые пользователями суперкомпьютера: файловые, компиляция и запуск приложений, слежение за процессом выполнения задачи. Система предоставляет исследователям

возможность работать на кластере со своими пакетами, используя привычное программное обеспечение, а программистам оказывает помощь в разработке действительно эффективных параллельных программ. Интерфейс поддерживает разработку научных параллельных программ с использованием наиболее популярных технологий: POSIX Threads, OpenMP, MPI.

Графический интерфейс целесообразно использовать как инструмент настройки параллельных программ для проведения экспериментов на кластере и при обучении. Полагаем, что разработанный графический интерфейс будет способствовать более широкому использованию отечественных многопроцессорных вычислительных систем за счет существенного упрощения доступа пользователей к кластеру.

Развернут вычислительный полигон на кластере СКИФ-БГУ для подготовки, мониторинга и обработки сложных задач в параллельном режиме и осуществлена его апробация. Апробация была выполнена при решении больших задач математического моделирования (методы молекулярной динамики и кинетического Монте-Карло) и подтвердила работоспособность и эффективность разработанной среды.

Попытка использовать возможности объектно-ориентированного программирования для написания параллельных программ, а именно MPI-программ, привела к созданию объектно-ориентированной обертки над библиотекой MPI. Сравнение производительности MPI-программ, реализованных в трех вариантах (классическом, с использованием разработанной обертки и с использованием популярной объектно-ориентированной библиотеки Boost.MPI) показало эффективность собственной реализации. Библиотека является экспериментальной и не поддерживает MPI-интерфейс в полном объеме.

Метод Монте-Карло используется для решения задач в различных областях, где эффективным подходом является компьютерное моделирование. Он относится к классу больших задач, которые требуют для своего решения применения мощных вычислительных ресурсов. В настоящее время исследователи работают над созданием эффективных Монте-Карло алгоритмов для параллельных вычислительных систем. Разработаны многопоточные версии кинетического метода Монте-Карло (КМК) для моделирования эволюции дефектов в полупроводниковом кристалле с решеткой алмаза. Проведены эксперименты на суперкомпьютере СКИФ-БГУ и персональных многоядерных компьютерах. Получены оценки эффективности разработанных параллельных программ.

Будучи сотрудниками образовательного учреждения, мы включили в учебный план проблематику суперкомпьютерных технологий и высокопроизводительных вычислений. Это закладывает необходимую основу для успешного развития системы суперкомпьютерного образования в Беларуси. Поэтому одним из направлений деятельности является создание и поддержка учебно-методического комплекса (УМК) для обучения студентов проектированию параллельных приложений для компьютеров с различными архитектурными решениями, в том числе, для широко распространенной

кластерной архитектуры. В настоящее время УМК включает два учебных пособия, программы дисциплин, набор ранжированных заданий и компьютерную поддержку (графический интерфейс и вычислительный полигон). УМК апробирован на больших задачах (моделирование методом молекулярной динамики и кинетическим методом Монте-Карло) и продемонстрировал свою работоспособность и эффективность;

Нами создана информационная система для поддержки обучения параллельному программированию, которая сопровождает все этапы разработки параллельной программы и включает: готовые проекты, заготовки и шаблоны проектов, библиотеку классов, графическую систему подготовки и управления заданиями на кластере СКИФ, а также подсистему контроля знаний.

Методика подготовки специалистов в области проектирования параллельных программ для вычислительных систем внедрена в обучение студентов специальностей «Информатика» и «Прикладная информатика» на факультете прикладной математики и информатики Белорусского государственного университета и используется с 2012 года.