

ОРГАНИЗАЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ В КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛАХ, СОДЕРЖАЩИХ НАНОЧАСТИЦЫ МЕТАЛЛОВ

К. С. Курочка, О. Д. Асенчик, Е. Г. Стародубцев

*Гомельский государственный технический университет
имени П. О. Сухого
Гомель, Беларусь
E-mail: kurochka@gstu.by*

Рассматривается задача создания программно-аппаратного комплекса для компьютерного моделирования в распределенной вычислительной среде оптических свойств нанокomпозитов и метаматериалов на основе наночастиц восстановленных металлов.

Ключевые слова: распределенные вычисления, моделирование, наночастицы, оптические материалы.

Явление плазмонного резонанса в металлических наночастицах вызывает значительный интерес в связи с возможностями его практического применения: материалы, содержащие такие наночастицы, используются в качестве преобразователей и усилителей электромагнитного излучения, управляющих оптических и оптоэлектронных элементов, химических и биологических сенсоров [1]. Математическое моделирование электромагнитных полей в данных материалах базируется на решениях системы уравнений Максвелла. При этом наиболее популярными численными методами являются: метод конечных разностей во временной области (FDTD), метод конечных элементов, реализация формализма Т-матрицы методом нулевого поля (NFM), метод приближения дискретных диполей (DDA), а также методы, использующие аналитические решения сложной формы, полученные при решении задачи однократного или многократного рассеянии на сферических частицах [1–7].

В связи с многообразием методов решения уравнений Максвелла разработано много готовых пакетов программ, реализующих эти методы [2]. Однако не существует универсального метода, пригодного для решения любых задач электродинамики. На практике для моделирования электромагнитных полей в композитных материалах приходится использовать некий набор программного обеспечения. В этом случае трудно обеспечить полное соответствие специфики возникающих расчетных задач функциям готовых компонентов программного комплекса. Поэтому программные компоненты должны быть модифицируемыми и адаптируемыми к вычислительной среде. Для внутренней верификации, надежности и стабильности результатов моделирования необходим избыточный набор программного обеспечения. В качестве базового минимального набора, реализующего расчет электромагнитных полей оптического диапазона в ближней и дальней зоне металлических наночастиц, можно пред-

ложить пакеты программ с открытым исходным кодом: Meep [3], DDSCAT [4], NFM-DS [5], MSTM [7].

С другой стороны, расчет распределения оптических полей вблизи нанобъектов и (или) в трехмерных объемах любым из широко используемых методов требует больших вычислительных затрат. Кроме того, задача моделирования материалов с заданными свойствами сопряжена с многократными повторными расчетами (например, расчет оптического отклика материала при различных длинах волн внешнего оптического возбуждения или при различных взаимных расположениях наночастиц), поэтому ее решение за разумное время при использовании одного даже высокопроизводительного компьютера весьма затруднительно. В этом случае наиболее доступное решение по показателю цена/производительность – распараллеливание задачи для одновременного решения на некотором изменяемом количестве персональных компьютеров, соединенных между собой линиями связи.

В современных условиях наибольшее распространение получили кластерные системы, позволяющие для достижения необходимой производительности объединять в единые вычислительные системы компьютеры самых разных типов, начиная от персональных компьютеров и заканчивая многопроцессорными суперкомпьютерами. Кластерные системы могут достигать производительности, равной специализированному суперкомпьютеру при относительно низких затратах.

Выделяют ряд моделей организации кластерных систем [8]:

1. Централизованные модели программирования с общедоступным состоянием обычно применяются в тесно связанных системах с синхронными языками и средствами реализации, предназначенными для машин с общей (совместно используемой) или гибридной (физически распределенной, но логически общей) памятью; модели передачи сообщений. Наиболее широкое распространение получил стандарт MPI, обеспечивающий связь между ветвями параллельного приложения [9].

2. Модели удаленного вызова процедур (RPC) и удаленного вызова методов (RMI) обеспечивают те же возможности, что и MPI, но структурируют взаимодействие между отправителем и получателем в виде конструкции языка и представляют собой механизмы для управления потоками команд и данных.

3. Гибридные модели в основном применяются в кластерах (clumps) (кластерах симметричных многопроцессорных систем) и в ГРИД-системах. Гибридные модели позволяют организовать выполнение как в пределах, так и вне непосредственно доступных адресных пространств.

4. Одноранговые вычисления (P2P) представляют собой разделение компьютерных ресурсов и сервисов путем прямого обмена между системами, которые пользуются преимуществом существующих вычислительных возможностей настольных систем и их связностью работы с сетями.

5. Объектные и компонентные модели представляют собой интерфейсы метаязыков для управления и организации взаимодействия между объектами, находящимися в распределенной системе (CORBA, Cactus, COM/DCOM и др.).

6. Модель OGSA представляет собой открытую архитектуру сервисов ГРИД в интернет и обеспечивает прозрачность размещения и многопротокольные связывания для экземпляров сервисов и поддерживает интеграцию с находящимися в основе средствами платформ (Globus).

7. Координационные модели предоставляют средства интегрирования разнородных компонентов путем их связывания с помощью интерфейсов для формирования

единого приложения, которое может выполняться на параллельной или распределенной системе.

В большинстве указанных моделей для эффективного использования предоставляемых ресурсов необходимо, чтобы программная реализация математической модели учитывала структуру распределенной среды. Такой подход не является рациональным, так как требует от разработчика определенного набора специфических знаний в области организации распределенных вычислений. При этом в большинстве случаев необходимо осуществлять адаптацию программной реализации используемых методов к заданной вычислительной среде.

При организации распределенных вычислений выделяются следующие фундаментальные этапы работ: коммуникация данных, организация управляющей структуры, статическое и динамическое распределение вычислительных ресурсов, синхронизация и оптимизация процессов. Наиболее узким местом для рассматриваемого класса задач является динамическое распределение ресурсов. Для каждого из используемых пакетов программ при заданных постановке задачи и наборе исходных данных существует некий предел по количеству вычислительных узлов. Рост числа узлов выше данного предела не увеличивает, а уменьшает производительность. Это связано с тем, что на определенном этапе работы вычислительной системы время расчета на одном узле становится сопоставимым со временем коммуникации данных. Поэтому возникает задача эффективного управления вычислительными ресурсами и разделения их между прикладными программами.

Предлагается выделить два основных класса распараллеливаемых задач: 1) распараллеливание на уровне алгоритмов; такое распараллеливание заложено в само программное обеспечение и подвержено минимальному управлению; 2) распараллеливание на уровне задач, так называемая сериализуемая обработка, когда независимые друг от друга задачи выполняются параллельно.

Для моделирования электромагнитных полей предлагается структура для вычислительной среды, которая представлена на рис. 1.

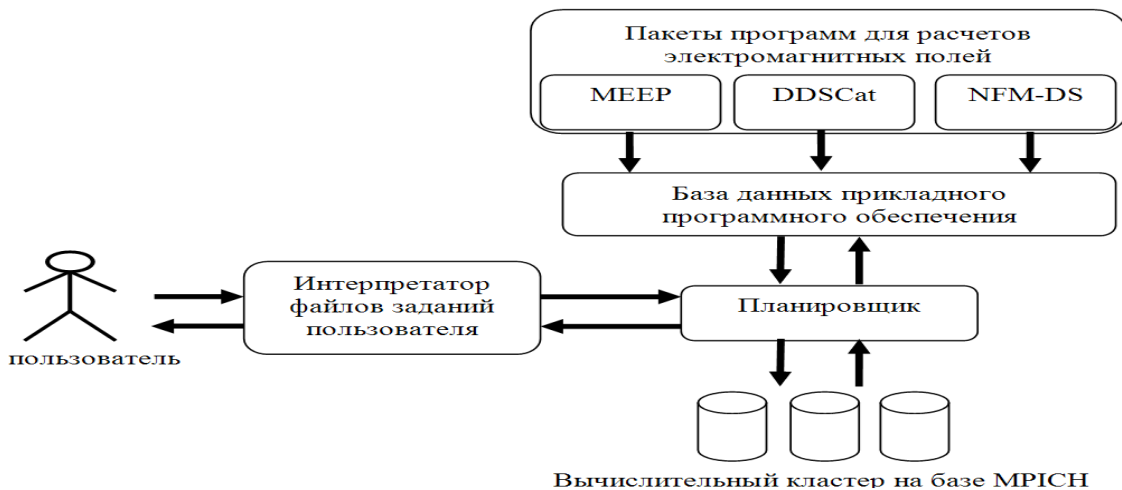


Рис. 1. Структура вычислительного комплекса

В силу разнородности применяемого для расчетов программного обеспечения необходима его унификация на уровне исходных данных и результатов. Для этих целей внутри вычислительной системы предлагается создать интерпретирующий модуль, который будет преобразовывать расчетные задания из определенного универ-

сального описания в файлы заданий соответствующих пакетов и указывать планировщику, сколько и каких ресурсов использовать. Интерпретатор принимает задания пользователя на универсальном метаязыке и транслирует их в файлы исходных данных, указанных пользователем пакетов, и в файл задания для планировщика. Планировщик запускает указанный пакет (пакеты) на свободных вычислительных узлах и передает им в качестве параметров соответствующие файлы исходных данных.

При тестовых испытаниях вычислительного кластера исследовалось влияние количества узлов в кластере на время решения тестовых задач в абсолютных (рис. 2) и относительных (рис. 3) единицах.

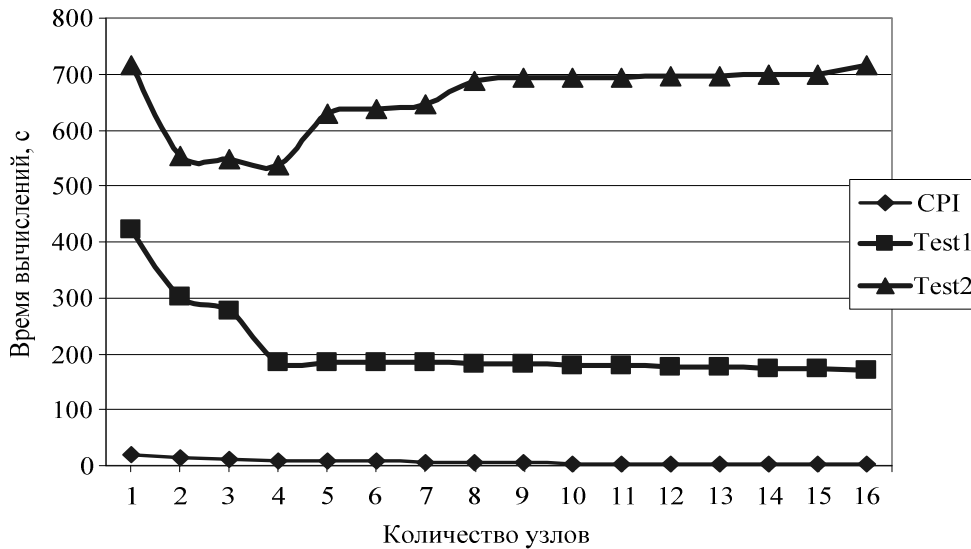


Рис.2. Время (в секундах) нахождения решения тестовых задач

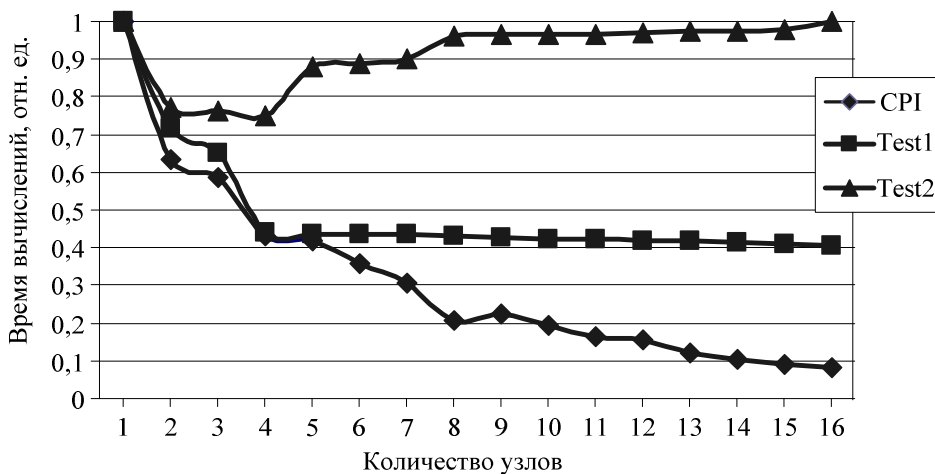


Рис.3. Время (относительно ко времени при использовании одного компьютера) нахождения решения тестовых задач

Рассматривались следующие тестовые задачи (рис. 2, 3): вычисление числа π (кривые CPI); расчет методом конечных разностей во временной области (FDTD) распределения электромагнитного поля с использованием пакета MEEP [3] при возбуждении: непрерывном (плоская монохроматическая волна) металлических нано-

объемов (кривые Test1); импульсном (гауссов временной импульс, создаваемый источником тока) двух близко расположенных сферических наночастиц (кривые Test2).

В качестве аппаратно-программной платформы для организации распределенных вычислений была выбрана локально-вычислительная сеть 100-baseTX, объединяющая 45 персональных компьютеров. В качестве операционной системы использовалась Ubuntu 10.10. Для организации распределенных вычислений использовался MPICH.

Проведенный вычислительный эксперимент показал:

1. При исследовании математических моделей распределения электромагнитных полей использование средств параллельной обработки позволяет значительно сократить время вычислений.

2. Наиболее эффективной является сериализуемая обработка.

3. При распаралеливаемой обработке для каждой задачи существует некоторое число вычислительных узлов, свыше которого время обработки перестает уменьшаться.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Климов, В. В.* Наноплазмоника / В. В. Климов. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. 480 с.
2. *Hellmers, J.* Classification of Software for the Simulation of Light Scattering and Realization within an Internet Information Portal / J. Hellmers, T. Wriedt // Journal of Universal Computer Science. 2010. Vol. 16 (9). P. 1176–1189.
3. *Oskooi, A. F.* MEEP: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method / Ardavan F. Oskooi, David Roundy, Mihai Ibanescu, Peter Bermel, J. D. Joannopoulos and Steven G. Johnson // Computer Physics Communications 2010. № 181. P. 687–702.
4. *Draine, B. T.* User Guide to the Discrete Dipole Approximation Code DDSCAT 7.1 / B. T. Draine, P. J. Flatau // arXiv:1002.1505v1 [astro-ph.IM]. 2010. Режим доступа: <http://arXiv.org/abs/1002.1505v1>, свободный.
5. *Doicu, A.* Light Scattering by Systems of Particles: Null-field Method with Discrete Sources: Theory and Programs. / A. Doicu, T. Wriedt, Y. A. Eremin. Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 2006, 337 p.
6. *Xu, Y.-I.* Electromagnetic scattering by an aggregate of spheres / Y.-I. Xu // Appl. Opt. 1995. Vol. 34. № 21. P. 4573-4588.
7. *Mackowski, D. W.* A multiple sphere T-matrix Fortran code for use on parallel computer clusters / D. W. Mackowski, M. I. Mishchenko // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, In Press, Corrected Proof, Available online 11 March 2011 (<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407311001129>).
8. *Дорошенко, А. Е.* Модели и средства программирования ГРИД-систем / А. Е. Дорошенко, А. П. Розенблат, К. А. Рухлис, Ю. М. Тырчак // Проблеми програмування. 2007. № 3. С. 16–31.
9. *Snir, M.* MPI: The Complete Reference / Marc Snir, Steve Otto, Steven Huss-Lederman, David Walker, Jack Dongarra. MIT Press, 1996.