

# Различные подходы к распараллеливанию алгоритма моделирования металлических наночастиц методом Монте-Карло.

П.В. Стищенко

Метод Монте-Карло широко применяется для моделирования металлических частиц нанометрового размера. Задача распараллеливания этого метода для моделирования процесса диффузии в настоящее время не имеет общепринятого решения. Вследствие того, что алгоритм моделирования основан на марковском процессе, он по своей сути является последовательным. Существующие подходы, основанные на моделировании нескольких ансамблей (parallel tempering) [1] или пространственной декомпозиции [2] имеют определенные ограничения.

В данной работе мы предлагаем подход распараллеливанию алгоритма с помощью одновременной оценки нескольких пробных шагов диффузии. Из-за того, что расположенные в узлах кристаллической решетки атомы имеют большую энергию связи, вероятность успешного шага после того, как частица приблизится к равновесной форме, весьма низкая. Даже в случае нерешеточной модели, когда смещение атомов на каждом шаге очень мало и применяются дополнительные оптимизации для повышения числа успешных шагов, этот процент остается небольшим [3]. Столь низкая доля успешных шагов позволяет оценивать сразу несколько попыток диффузии. Наиболее дорогостоящей операцией в алгоритме, как правило, является вычисление изменения энергии, вызываемое пробным шагом. Следовательно, можно попытаться осуществить несколько шагов одновременно, оценивать их и применять лишь один из них. Конечно, возможна ситуация, когда из нескольких одновременно оцененных шагов успешными окажутся сразу несколько, но, как следует из сказанного выше, она маловероятна, и эти потери будут незначительны на большей части времени моделирования.

Для оценки разработанного алгоритма мы моделировали нанесенную частицу платины из 4033 атомов при температуре 1160К и 3000К с использованием от 1 до 4 ядер CPU.

Таблица 1. Зависимость скорости моделирования от числа потоков.

Количество потоков	1	2	3	4	1	2	3	4
Температура, К	1160				3000			
Пробных шагов в секунду	52977	78113	78872	76497	52258	71007	67974	70729
Успешных шагов в секунду	17	31	29	37	924	1278	1129	1355
Доля успешных шагов, %	0,031	0,04	0,037	0,048	1,76	1,8	1,66	1,91
Отброшено успешных шагов	-	0	0	0	-	17	40	56

Как видно из таблицы, алгоритм дает существенный прирост производительности при добавлении второго потока. Некоторый прирост производительности наблюдается при использовании до четырех ядер. Основным препятствием для дальнейшей масштабируемости алгоритма является необходимость работы с общими списками активных атомов. Мы рассматриваем возможности решения этой проблемы с помощью отложенного обновления списков или неблокирующихся алгоритмов и контейнеров.

## Литература

1. Frenkel D., Smit B. Understanding molecular simulation –San Diego: Academic Press, 2002. – 638 p.
2. Ren R., Orkoulas G. Parallel Markov chain Monte Carlo simulations // Journal of Chemical Physics. –June 2007. –Vol. 126, N. 21. –P. 211102.
3. Kim H.G., Choi S.K., Lee H.M. New algorithm in the basin hopping Monte Carlo to find the global minimum structure of unary and binary metallic nanoclusters // Journal of Chemical Physics. –April 2008. –Vol. 128, N. 14. –P. 144702.