

Использование различных технологий распараллеливания при вычислении спектров ЭПР

С.К. Черников, И.В. Русских, А.В. Рябинин

В настоящее время большинство доступных пользователю вычислительных ресурсов позволяют реализовывать параллельные вычисления. Рассмотрим особенности распараллеливания алгоритма вычисления спектра электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) реакционного центра (РЦ) фотосинтеза на SMP-компьютерах, кластерах и графических процессорах.

В алгоритме определения спектра ЭПР РЦ значение интенсивности спектра находится как некоторая комбинация элементов матрицы плотности $\rho(t)$, определяемой из системы уравнений

$$\dot{\mathcal{E}}_{eff} |\rho(t)\rangle = |\rho(0)\rangle. \quad (1)$$

Матрица \mathcal{E}_{eff} , имеющая порядок 16x16, формируется из гамильтониана, описывающего взаимодействие между электроном и дыркой, взаимодействие электрон-дырочной пары с внешним магнитным полем и магнитными ядрами РЦ (сверхтонкое взаимодействие). Для оценки влияния сверхтонкого взаимодействия на наблюдаемое значение интенсивности спектра используется метод Монте-Карло. Наблюдаемое значение находится как математическое ожидание $\rho(t)$, получаемое в результате многократного решения системы (1). Так как при любом эксперименте мы одновременно имеем дело с большим числом произвольно ориентированных относительно внешнего поля РЦ, найдем интенсивность спектра как среднее по всем возможным направлениям. При исследовании РЦ методами ЭПР-спектроскопии наиболее важной характеристикой является форма спектра, поэтому интенсивность спектра приходится вычислять многократно для различных значений напряженности внешнего магнитного поля B_0 из некоторого заданного диапазона. Таким образом, в процессе вычислений приходится многократно (до 10^{11} раз) формировать и решать систему уравнений (1), что при использовании однопроцессорных компьютеров занимает существенное время. В тоже время задача сравнительно легко распараллеливается.

Для многоядерных и многопроцессорных персональных SMP-компьютеров с общей памятью распараллеливание приведенного выше алгоритма наиболее просто обеспечить воспользовавшись технологией OpenMP. Для этого в последовательную программу достаточно добавить пару директив, автоматически распараллеливающих любой из циклов вычислений (например, по ориентации поля).

При использовании для вычислений многопроцессорных вычислительных систем с распределенной памятью (кластеров) для распараллеливания алгоритмов можно воспользоваться технологией MPI. Эта технология потребует несколько большей переделки последовательного алгоритма, и будет заключаться в разделении между узлами кластера процесса вычисления среднего значения интенсивности спектра по направлениям ориентации РЦ.

При вычислениях на графических процессорах компании Nvidia воспользуемся технологией CUDA, обеспечивающей два уровня параллелизма: параллелизм выполнения блоков вычислений и параллелизм потоков в каждом блоке. Параллельный алгоритм вычисления спектра можно построить, положив число блоков равным числу различных значений B_0 , и распределив между потоками вычисления среднего значения интенсивности спектра по направлениям ориентации РЦ.

В таблице 1 для различных вариантов программ приведено время, необходимое для расчета спектра, сопоставимого по точности с экспериментальным.

Таблица 1. Время, необходимое для расчета спектра, на различных устройствах.

Вычислительное устройство	Количество процессоров (ядер)	Технология распараллеливания	Время решения, мин
Персональный компьютер (процессор Intel PIII Xeon 2.83GHz)	(4)	OpenMP	220
Кластер (процессоры IBM PowerPC 970 1.6 GHz)	30	MPI	210
Графический процессор NVidia GTX 260	(216)	CUDA	220