

С.М. АБРАМОВ, В.А. РОГАНОВ, В.И. ОСИПОВ, Г.А. МАТВЕЕВ
**РЕАЛИЗАЦИЯ ПАКЕТА LAMMPS НА T-СИСТЕМЕ С
ОТКРЫТОЙ АРХИТЕКТУРОЙ**

С.М. Абрамов, В.А. Роганов, В.И. Осипов, Г.А. Матвеев Реализация пакета LAMMPS на T-системе с открытой архитектурой.

Аннотация. Суперкомпьютерные приложения обычно реализуются на языках программирования C, C++, Fortran с использованием различных вариантов библиотеки Message Passing Interface. В проекте "Т-система" (OpenTS) исследуются вопросы автоматического динамического распараллеливания программ. С практической точки зрения актуальна реализация приложений в смешанном (гибридном) стиле, когда часть приложения пишется в парадигме автоматического динамического распараллеливания программ и не использует никаких примитивов библиотеки MPI, а другая его часть пишется с использованием библиотеки Message Passing Interface.

В этом случае используется библиотека, которая входит в состав Т-системы и имеет название DMPI (Dynamic Message Passing Interface). Необходимо оценить эффективность реализации MPI, которая есть в Т-системе. Целью данной работы является исследование эффективности реализации DMPI в Т-системе. В классическом MPI приложении 0% кода реализовано с помощью автоматического динамического распараллеливания программ и 100% кода реализовано в виде обычной Message Passing Interface программы.

Для сравнительного анализа в начале код выполняется на стандартном Message Passing Interface, для которого он был написан изначально, и потом этот код выполняется с использованием библиотеки DMPI, входящей в состав Т-системы. При сравнении эффективности подходов оцениваются потери производительности и перспективность применения гибридного стиля программирования. В результате проведенных экспериментальных исследований для разных типов вычислительных задач удалось убедиться, что потери эффективности пренебрежимо малы. Это позволило сформулировать направление дальнейшей работы над Т-системой и наиболее перспективные варианты построения гибридных приложений.

В настоящей статье приводятся результаты сравнительных испытаний приложения LAMMPS с использованием OpenMPI и с использованием OpenTS DMPI. Результаты испытаний подтверждают эффективность реализации DMPI в среде параллельного программирования OpenTS.

Ключевые слова: параллельный алгоритм, язык программирования T++, OpenTS, Т-система, молекулярная динамика, перидинамика, Т-приложение, benchmark.

1. Введение. Работа над реализациями протокола MPI (Message Passing Interface) ведется как в коммерческих, так и в научных лабораториях. Протокол MPI был разработан группой, в которую входили сотрудники лабораторий коммерческих компаний: Аргоннской национальной лаборатории и Университета штата Миссисипи. Сегодня доступны следующие свободные реализации MPI: MPICH, MVAPICH и OpenMPI.

Аргоннская национальная лаборатория продолжает заниматься проектом MPICH при финансовой поддержке правительства США [1].

MVARCH разработан Университетом штата Огайо [2]. Крупные производители параллельных вычислительных систем имеют свои реализации MPI: Cray MPI [3], Tianhe MPI [4], Intel MPI [5], IBM Blue Gene/Q MPI [6], IBM PE MPICH [7], IBM Platform MPI [8], SGI MPI [9], Fujitsu MPI [10], MS MPI [11]. В настоящее время версия протокола MPI-3 поддерживается всеми основными реализациями MPI. Ведется разработка протокола MPI-4 [12]. MPI является одним из важных средств поддержки параллельных вычислений. Большинство суперкомпьютерных приложений опирается на MPI. От эффективности реализации MPI зависит эффективность и масштабируемость реализации приложений.

OpenTS [13-20] – система для параллельного программирования, поддерживающая динамически загружаемые адаптеры для коммуникационного уровня. В системе OpenTS реализован язык для параллельных вычислений T++, который является расширением языка программирования C++. Синтаксис языка T++ отличается от синтаксиса языка C++ добавлением в него нескольких ключевых слов.

Система OpenTS использует собственную реализацию MPI, оформленную в виде динамической библиотеки OpenTS DMPI (Dynamic MPI). Библиотека OpenTS DMPI предоставляет базовое множество функций из стандарта MPI либо за счет переадресации вызовов к локальной библиотеке MPI, установленной на целевой системе, либо поверх протокола TCP/IP. При инициализации системы OpenTS активируется подсистема DMPI. Эта подсистема динамически загружает ту локальную библиотеку MPI, которая указана в переменных окружения приложения. Некоторые из функций MPI реализованы разработчиками системы OpenTS напрямую. В OpenTS DMPI протокол MPI-2 реализован не полностью.

Язык параллельного программирования T++ разработан таким образом, что необходимости использования в нем MPI функций нет. Однако, если для достижения эффективности работы программы разработчик желает использовать MPI функции явно, то он может это сделать.

Язык T++ позволяет автоматически динамически распараллеливать приложения. Он был разработан для того, чтобы приложения писались комфортно и, вследствие, освобождали программиста от планирования процессов, распределения вычислительной нагрузки, передачи данных между процессами, а также их синхронизации. Если в приложении OpenTS выходить за рамки языка T++ и пользоваться прямыми передачами, которые реализует MPI, то есть часть работы выполнять на языке T++, а часть работы выполнять, опираясь на передачу данных

вручную, указывая те или другие пересылки данных между параллельными процессами, то это несущественно усложнит код, но может повысить эффективность.

Если это естественно, то этим следует пользоваться. Тогда код будет более прозрачным, управляемым, понятным. Это возможно, так как реализация OpenTS содержит в себе MPI – в приложении можно вызывать его функции.

Реализация протокола MPI в системе для параллельного программирования OpenTS называется DMPI. Суть подхода состоит в том, что пишется приложение на языке T++, но там, где это разумно, напрямую используются примитивы DMPI.

Решаемая в данной работе научная задача. Глобальная цель проекта OpenTS состоит в поддержке гибридной модели вычислений, когда часть приложения написана на T++, а в другой части вызываются функции MPI.

Прежде чем двигаться в сторону полной реализации глобальной цели исследования, правильно было бы ответить на вопрос: достаточно ли эффективна OpenTS DMPI? Задача, которая решается, – это показать, что использование такой гибридной модели не проигрывает в эффективности в сравнении с исходной реализацией приложения, а также имеет низкие накладные расходы, тем самым дает возможность для развития. Для этого используется известное приложение LAMMPS.

LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) — пакет для классической молекулярной динамики, написанный группой из Сандийских национальных лабораторий [21]. Для работы на многопроцессорных системах используется интерфейс MPI. В статье описывается реализация симулятора молекулярной динамики LAMMPS с использованием библиотеки OpenTS DMPI и сравнивается эффективность полученной реализации с оригинальной версией, скомпонованной с локальной библиотекой OpenMPI. Данное сравнение производится с целью продемонстрировать низкие накладные расходы DMPI, а также возможность встраивания различных готовых параллельных решателей и симуляторов в среду динамического распараллеливания OpenTS для их совместного использования с алгоритмами интеллектуального поиска, например, для оптимизации структуры и состава новых, синтетических материалов или конструкций.

В процессе исследования было разработано и добавлено в модуль DMPI несколько MPI функций, а также проведено сравнительное тестирование с реализацией на OpenMPI. Новые MPI функции были добавлены в связи с тем, что они не были реализованы в предыдущей версии OpenTS DMPI.

В таблице 1 приводятся результаты сравнительных испытаний LAMMPS с использованием OpenMPI и OpenTS DMPI. Результаты испытаний подтверждают эффективность реализации протокола MPI в системе параллельного программирования OpenTS. На каждом этапе испытаний вычислялось значение средней производительности и проводилось сравнение её значений для двух платформ.

Положительное значение отклонения производительности означает, что производительность OpenMPI выше производительности OpenTS DMPI. Если значение отклонения производительности отрицательное, то производительность OpenTS DMPI выше производительности OpenMPI.

Таблица 1. Сравнение средних значений производительности LAMMPS OpenMPI и LAMMPS OpenTS DMPI

Пример LAMMPS	Минимальное отклонение средней производительности (%)	Максимальное отклонение средней производительности (%)	Среднее отклонение производительности (%)
accelerate	-2,7	0,2	-1,2
airebo	-1,3	1,1	-0,8
ASPHERE	-1,9	3,7	1
atm	1,5	3,3	2,5
balance	-1,1	2,6	-0,1
colloid	-1,4	3,1	0,5
comb	-2,3	-0,4	-1
crack	-3,2	1,9	-0,5
deposit	-1,4	0,5	-0,6
DIFFUSE	-0,9	1,2	0,4
ELASTIC-T	-1,7	4	0,7
flow	-3,8	-0,5	-1,5
friction	-1,3	0,9	-0,3
indent	-1,5	1,1	-0,2
KAPPA	-0,8	0,8	-0,2
min	-1,5	1,1	-0,5
nemd	-2,3	4	0,4
obstacle	-3,9	0,5	-1,1
peri	-4,9	5,6	0,3
USER diffraction	-4,3	-2,6	-3,5
USER dpd	-1,1	0,6	-0,2
VISCOSITY	-0,8	5,8	2,5

Каждый из разделов статьи является описанием одного из примеров LAMMPS. Список этих примеров следующий: accelerate, airebo,

ASPHERE, atm, balance, colloid, comb, crack, deposit, DIFFUSE, ELASTIC-T, flow, friction, indent, KAPPA, min, nemd, obstacle, peri, USER diffraction, USER dpd, viscosity. С каждым примером из списка было проведено по 10 испытаний. Каждое испытание проводилось на количестве ядер процессора от 1 до 8 с шагом 1. На каждом этапе испытаний вычислялось значение средней производительности. Испытания проведены для двух платформ: OpenMPI и OpenTS DMPI.

Цель состояла в проверке текущих показателей производительности (ухудшение/улучшение) при переносе примера с платформы OpenMPI на платформу OpenTS DMPI. При этом вычисляется производительность примера LAMMPS или выбранного шага примера LAMMPS. Это связано с тем, что, если программа LAMMPS состоит из нескольких шагов, то LAMMPS вычисляет производительность каждого шага и не вычисляет производительности всей программы.

2. Модель Гея-Берне для двухосных эллипсоидных мезогенов в изотропной фазе. Пример accelerate [23]. Модель Гея-Берне [24,25] широко используется при моделировании жидкокристаллических систем. Модель Гея-Берне является анизотропной формой потенциала Леннарда-Джонса [22]. Она описывает взаимодействие между частицами, имеющими форму эллипсоидов. Модель учитывает не только расстояние между центрами частиц, но и их ориентацию. Пример состоит из двух шагов. В начале для системы атомов задается определенная температура, для каждого атома случайным образом задается скорость. На первом этапе поддерживается постоянная температура, и постепенно увеличивается давление до заданного значения. На втором этапе поддерживается постоянный объем и энергия системы частиц. Было проведено сравнительное испытание производительности примера LAMMPS accelerate OpenMPI и LAMMPS accelerate OpenTS DMPI.

3. Полиэтилен с потенциалом межчастичного взаимодействия AIREBO. Пример airebo [23]. Потенциал AIREBO (Adaptive Intermolecular Reactive Empirical Bond Order) [26,27] состоит из трех составляющих:

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \left[E_{ij}^{\text{REBO}} + E_{ij}^{\text{LJ}} + \sum_{k \neq i, j} \sum_{l \neq i, j, k} E_{kijl}^{\text{TORSION}} \right]$$

Первое слагаемое соответствует потенциалу Бреннера [28] второго поколения (REBO), который часто используется для моделирования взаимодействия между атомами углерода и водорода. Оно отвечает за короткодействующее взаимодействие, на расстоянии менее 2 ангстрем. Второе слагаемое отвечает за потенциал Леннарда-Джонса [22],

который действует на расстояниях от 2 ангстрем до величины радиуса экранирования. Третье слагаемое отвечает за определение углов между связями в конфигурациях углеводородов. Во входном файле описаны координаты атомов молекулы полиэтилена, состоящей из 20 атомов углерода и 40 атомов водорода, затем эта молекула реплицируется на систему из 32640 атомов. Задается начальная температура 300 градусов по Кельвину, случайным образом устанавливаются скорости атомов, затем в течение ста временных шагов поддерживается постоянный объем и энергия. Было проведено сравнительное испытание производительности примера LAMMPS airebo OpenMPI и LAMMPS airebo OpenTS DMPI.

4. Диффузия при использовании метода стохастической вращательной динамики (SRD) для жестких прямоугольных частиц. Пример ASPHERE [23]. При использовании метода стохастической вращательной динамики [29] частицы растворителя не взаимодействуют друг с другом, а взаимодействуют с частицами растворенного вещества, которые могут иметь разную форму, например, эллипсоиды, димеры, прямоугольники и т.д. [30, 31] (рис. 1). В частности, одной из характеристик SRD (Stochastic Rotation Dynamics) является средний путь до столкновения λ , который вычисляется по формуле:

$$\lambda = \Delta t_{SRD} \sqrt{\frac{k_B T_{SRD}}{m}},$$

где Δt_{SRD} – шаг времени, k_B – постоянная Больцмана, T_{SRD} – температура, m – масса частицы. В примере выполняется два этапа. На первом этапе создается 30 прямоугольных наночастиц, каждая из которых состоит из 14 атомов. Задается потенциал (только для первого этапа):

$$E = A \left[1 + \cos \left(\frac{\pi r}{r_c} \right) \right], \quad r < r_c,$$

где r_c – радиус отсечки, A – переменная, которая в начале этапа принимает значение 0, затем линейно по времени увеличивается к концу этапа до 30. С помощью этого потенциала близко расположенные или перекрывающиеся частицы растаскиваются друг от друга.

На втором этапе пространство между частицами заполняется раствором, задается потенциал Леннарда-Джонса, параметры которого устанавливаются таким образом, что взаимодействия через потенциал

между частицами растворителя нет. Запускается команда `fix srd`, которая обрабатывает взаимодействие между наночастицами и частицами растворителя. Было проведено сравнительное испытание производительности примера LAMMPS ASPHERE OpenMPI и LAMMPS ASPHERE OpenTS DMPI.

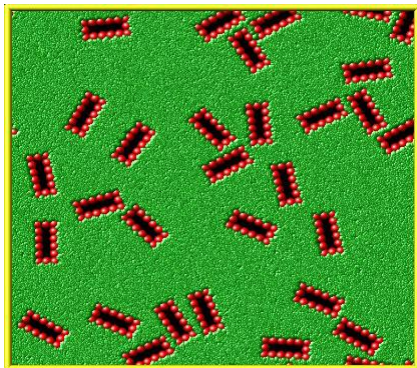


Рис. 1. Демонстрация метода стохастической вращательной динамики (SRD) для жестких прямоугольных частиц в растворителе

5. Трехчастичный потенциал Аксильрода–Теллера–Муто.

Пример atm [23]. Трехчастичный потенциал вычисляется для троек взаимно близко расположенных частиц. Наиболее известный из трехчастичных потенциалов — потенциал Аксильрода–Теллера–Муто [32,33]. Если три частицы образуют треугольник с углами $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ и сторонами r_{12}, r_{23}, r_{31} , потенциал вычисляется по формуле

$$U_{123} = C_{123} \frac{1 + 3 \cos \gamma_1 \cos \gamma_2 \cos \gamma_3}{r_{12}^3 r_{23}^3 r_{31}^3},$$

$$\text{где } C_{123} = \frac{3\hbar}{\pi} \int_0^{\infty} \alpha_1(i\omega) \alpha_2(i\omega) \alpha_3(i\omega) d\omega \quad [34],$$

$\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ – поляризуемость. В примере на атомы действуют одновременно 2 потенциала, Леннарда-Джонса и Аксильрода–Теллера–Муто при постоянном объеме и температуре. Было проведено сравнительное испытание производительности примера LAMMPS atm OpenMPI и LAMMPS atm OpenTS DMPI.

6. Балансировка. При балансировке область вычислительной системы, в которой производится симуляция, распределяются между

вычислительными узлами (процессорами, ядрами). Если во входном файле нет команд балансировки, то область симуляции распределяется между узлами с помощью грида (сетки) с равными ячейками (рис. 2).

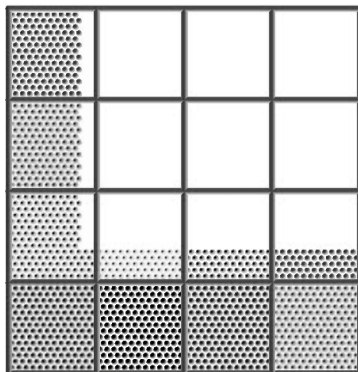


Рис. 2. Балансировка вычислительной системы, имеющей 16 процессоров в случае, когда нет команд балансировки

С помощью команды `balance` [35] область симуляции можно перераспределить один раз, например, в начале программы (рис. 3а). Область симуляции будет идеально сбалансирована, если ячейки разбиения имеют одинаковое количество частиц. Команда `balance` имеет два стиля, стиль `shift` (разбиение с помощью грида) и стиль `rgb` (плиточное разбиение) (рис. 3б).

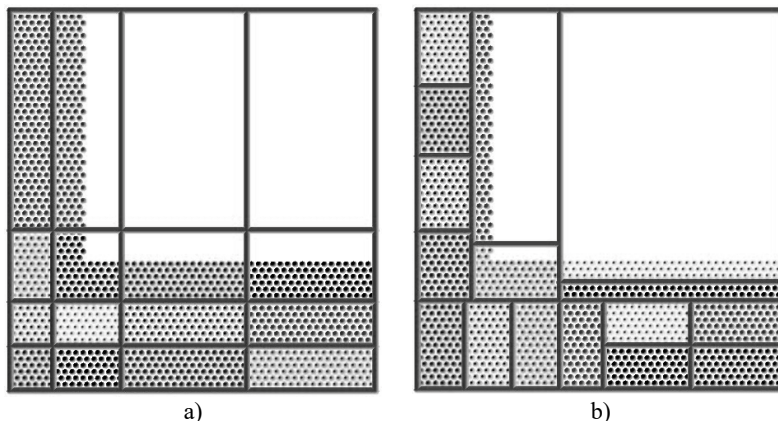


Рис. 3. Балансировка с помощью команды `balance`: а) стиль `shift`; б) стиль `rgb`

Команда `balance` производит балансировку один раз (статическая балансировка). Если балансировку следует проводить динамически несколько раз в течении работы программ, используют команду `fix balance` [36]. Визуализация симуляции представлена на рисунке 4.

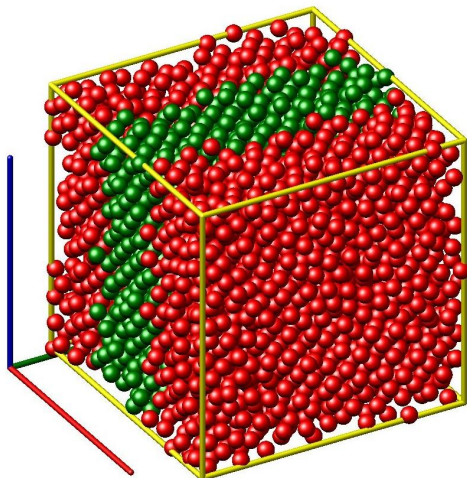


Рис. 4. Пример LAMMPS `balance`: статическая балансировка, стиль `shift`

Область симуляции является кубом. При выполнении программы куб по оси x режется на количество параллелепипедов, равное количеству процессоров. Каждая из подобластей закрепляется за определенным процессором. Поддерживается постоянный объем и энергия. Было проведено сравнительное испытание по оцениванию производительности примеров LAMMPS `balance` OpenMPI и LAMMPS `balance` OpenTS DMPI.

7. Коллоидный раствор. Пример `colloid` [23]. В примере описано 2 типа частиц, частицы растворителя, имеющие массу 1 и тяжелые частицы с массой 9 (рис. 5). Частицы растворителя взаимодействуют друг с другом по формуле Леннарда-Джонса. Формулы потенциалов взаимодействия частиц коллоида между собой и частиц коллоида и растворителя приведены в [59, 60]. Коллоидный раствор состоит из больших частиц растворенного вещества и маленьких частиц растворителя. При симуляции поддерживается постоянная температура. Давление постепенно увеличивается до заданного значения. Было проведено сравнительное испытание производительности примера LAMMPS `colloid` OpenMPI и LAMMPS `colloid` OpenTS DMPI.

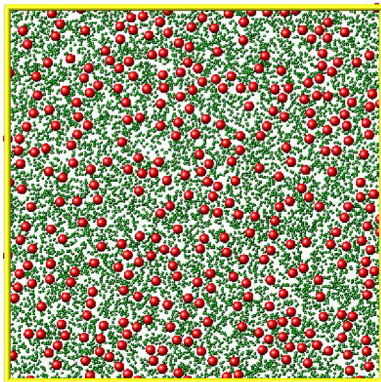


Рис. 5. Коллоидный раствор

8. Многочастичный потенциал COMB. При использовании потенциалов COMB (Charge-Optimized Many-Body) [37] и COMB3 [38] энергия системы из нескольких атомов имеет вид:

$$E_T = \sum_i [E_i^{self}(q_i) + \sum_{j>i} [E_{ij}^{short}(r_{ij}, q_i, q_j) + E_{ij}^{Coul}(r_{ij}, q_i, q_j)] + E^{polar}(q_i, r_{ij}) + E^{vdW}(r_{ij}) + E^{barr}(q_i) + E^{corr}(r_{ij}, \theta_{jik})],$$

где E_i^{self} – энергия i -го атома, включая энергию ионизации атома и энергию сродства к электрону,

E_{ij}^{short} – ВО-потенциал (Bond order potential) [39],

E_{ij}^{Coul} – кулоновское взаимодействие,

E^{polar} – поляризация (только для потенциала COMB3),

E^{vdW} – взаимодействие Ван-дер-Ваальса (только для потенциала COMB3),

E^{barr} – барьерная функция,

E^{corr} – угловая поправка.

Потенциал COMB использовался в примере LAMMPS comb [23]. Моноклинный оксид гафния был помещен в термостат Нозе-Хувера [40, 41]. Термостат используется для поддержания постоянной температуры в системе. Уравнения термостата:

$$\frac{dv}{dt} = \frac{F(t)}{m} - \zeta v(t),$$

$$\frac{d\zeta}{dt} = \frac{1}{Q} [\sum mv(t)^2 - (X+1)k_B T],$$

где Q – параметр, X – количество степеней свободы.

Термостат реализован в программе LAMMPS с помощью команды `fix nvt` [42]. Визуализация примера представлена на рисунке 6.

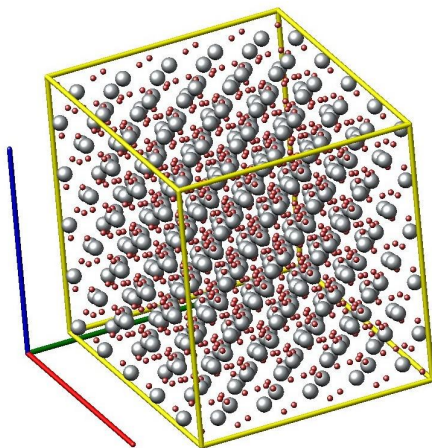


Рис. 6. Оксид гафния. Пример LAMMPS comb

Заранее заданные координаты 1500 атомов считываются из входного файла. Поддерживается постоянная температура 300 градусов по Кельвину. Было проведено сравнительное испытание производительности примера LAMMPS comb OpenMPI и LAMMPS comb OpenTS DMPI.

9. Разрыв листа из твердого материала. Пример crack [23].

Лист тянут вверх за верхнюю полоску, и он разрывается (рис. 7). Описывается 6 регионов области симуляции. Взаимодействие между левым верхним и левым нижним регионом отключают. Верхнюю часть тянут вверх с постоянной скоростью. Нижняя часть неподвижна. Скорость движения вверх частиц, находящихся между верхней и нижней частью, пропорциональна их ординате. Было проведено сравнительное испытание производительности примера LAMMPS crack OpenMPI и LAMMPS crack OpenTS DMPI.

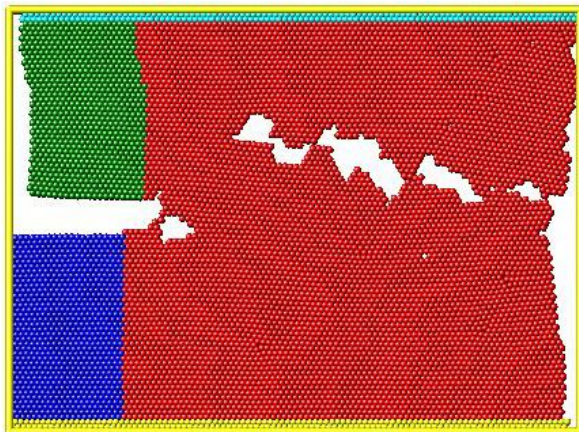


Рис. 7. Разрыв листа твердого материала

10. Нанесение молекул на поверхность. Пример deposit [23].

Гибкие димеры падают на подложку (рис. 8). Поддерживается постоянная энергия и объем. Было проведено сравнительное испытание производительности примера LAMMPS deposit OpenMPI и LAMMPS deposit OpenTS DMPI. Входной файл был модифицирован, увеличен период, с которым падают димеры сверху и количество временных шагов симуляции.

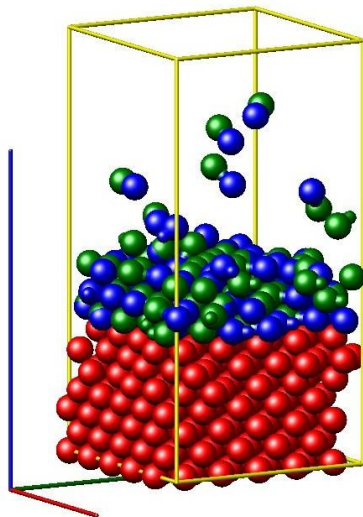


Рис. 8. Нанесение молекул на поверхность

11. Вычисление коэффициента диффузии методом средне-квадратичного смещения (Mean Squared Displacement). Пример DIFFUSE [23]. Обозначим через $MSD(t)$ функцию:

$$MSD(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |x_i(t) - x_i(0)|^2,$$

где $x_i(t)$ – положение i -й частицы в момент времени t . Если предположить, что движение частиц является броуновским, и прошло достаточно много времени, можно считать, выполняется равенство [43]:

$$MSD(t) \approx 2nDt,$$

где n – размерность пространства, D – коэффициент диффузии. С помощью последнего равенства можно вычислить коэффициент диффузии (рис. 9). Функция MSD вычисляется в LAMMPS с помощью команды `compute msd` [44]. График функции MSD для примера представлен на рисунке 10.

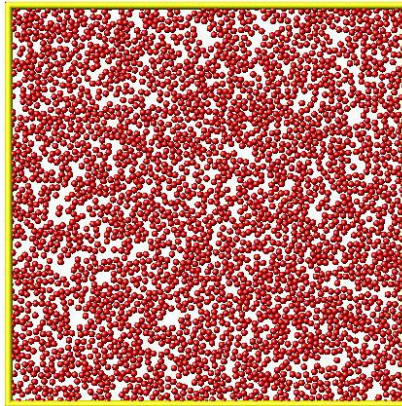


Рис. 94. Вычисление коэффициента диффузии

По горизонтальной оси откладывается время, по вертикальной – значение функции MSD . Чтобы вычислить среднеквадратичное смещение MSD , в примере используется команда `compute msd`. Было проведено сравнительное испытание производительности примера LAMMPS `diffusion OpenMPI` и LAMMPS `diffusion OpenTS DMPI` (рис. 10).

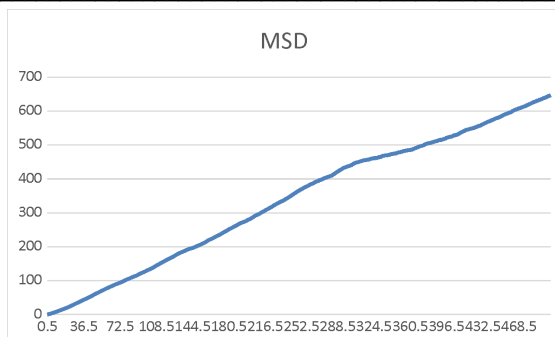


Рис. 10. График функции MSD

12. Вычисление упругих постоянных тензора упругости для кристалла. Пример ELASTIC-T [23]. Образец подвергается нагрузке, проводятся измерения, находятся упругие постоянные [45, 46]. Кристалл кремния, состоящий из 216 атомов, подвергается сжатию в разных направлениях, производится 6 испытаний. При сжатии координаты атомов меняются пропорционально величине сжатия. В примере используется трехчастичный потенциал Стиллингера-Вебера [47]. Было проведено сравнительное испытание производительности примера LAMMPS ELASTIC-T OpenMPI и LAMMPS ELASTIC-T OpenTS DMPI.

13. Течение Куэтта. Пример flow [23]. Для трехмерного пространства течение Куэтта [48] представляет собой течение между двумя параллельными стенками, когда одна из стенок движется параллельно другой стенке с постоянной скоростью. Среди примеров LAMMPS представлен 2-мерный вариант течения Куэтта, в этом случае течение жидкости происходит в канале с параллельными берегами, верхний берег движется параллельно другому с постоянной скоростью (рис. 11). Было проведено сравнительное испытание производительности примера LAMMPS flow OpenMPI и LAMMPS flow OpenTS DMPI. Входной файл был модифицирован, был увеличен размер области симуляции и, соответственно, количество частиц.

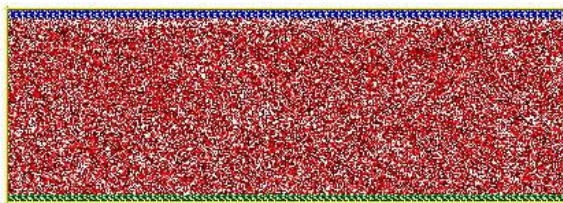


Рис. 115. Течение Куэтта. Верхний берег движется влево с постоянной скоростью

14. Фрикционный контакт полукруглых выпуклостей в двумерном пространстве. Пример friction [23]. Синяя полусфера движется в сторону зеленой (рис. 12а). Результат соприкосновения показан на рисунке 12б. Было проведено сравнительное испытание производительности примера LAMMPS friction OpenMPI и LAMMPS friction OpenTS DMPI. Входной файл был модифицирован, увеличен размер области симуляции и диаметр полусфер.

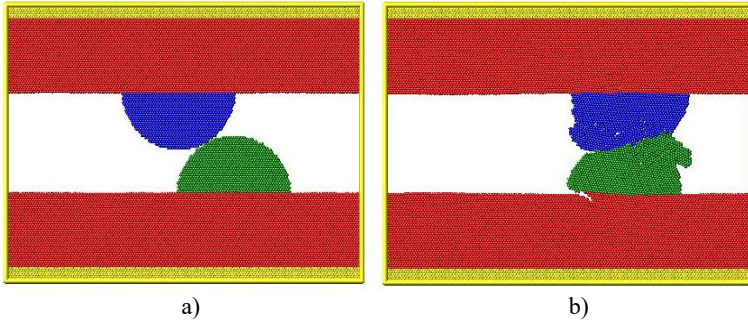


Рис. 12. Трение двух полукруглых выпуклостей: а) начало соприкосновения; б) конец симуляции

15. Испытание с использованием сферического индентора. Пример indent [23]. Сферический индентор вдавливается в двумерный твердый образец, затем убирается (рис. 13).

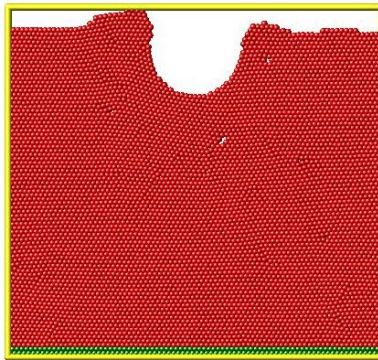


Рис. 6. Испытание с использованием сферического индентора

Для симулирования индентора используется команда `fix indent`.

Было проведено сравнительное испытание производительности примера LAMMPS indent OpenMPI и LAMMPS indent OpenTS DMPI. Входной файл был модифицирован, увеличен размер области симуляции и радиус индентора.

16. Вычисление коэффициента теплопроводности жидкости с потенциалом межчастичного взаимодействия Леннарда-Джонса. Пример KAPPA [23]. Согласно закону теплопроводности Фурье,

$$Q = -k \text{ grad}(T),$$

где Q – тепловой поток,
 k – коэффициент теплопроводности,
 T – температура.

Эту формулу используют для определения коэффициента теплопроводности. В области симуляции, которая является параллелепипедом, описываются две подобласти: холодная и горячая. В холодной части поддерживается низкая температура, в горячей – высокая. Выбор холодной и горячей подобласти осуществляют таким образом, что градиент температуры направлен по оси z . Для поддержки высокой и низкой температуры в заданных областях используется команда `fix heat` [49]. Вычисление коэффициента теплопроводности осуществляется с использованием команды `compute ke`, которая рассчитывает кинетическую энергию системы частиц. Подробности реализации описаны в [50]. Было проведено сравнительное испытание производительности примера LAMMPS KAPPA OpenMPI и LAMMPS KAPPA OpenTS DMPI.

17. Минимизация энергии. Пример min [23]. При минимизации энергии целевой функцией является потенциальная функция:

$$\begin{aligned} E(r_1, r_2, \dots, r_N) = & \sum_{i,j} E_{pair}(r_i, r_j) + \sum_{ij} E_{bond}(r_i, r_j) + \\ & + \sum_{ijk} E_{angle}(r_i, r_j, r_k) + \sum_{ijkl} E_{dihedral}(r_i, r_j, r_k, r_l) + \\ & + \sum_{ijkl} E_{improper}(r_i, r_j, r_k, r_l) + \sum_i E_{fix}(r_i), \end{aligned}$$

где E_{pair} – парное взаимодействие частиц, включая кулоновское,
 E_{bond} – энергия взаимодействия между определенными парами частиц.
 Список таких частиц определяется во входном файле,

E_{angle} – энергия взаимодействия троек атомов,

$E_{dihedral}$ – энергия взаимодействия четверок атомов в случае правильных торсионных углов,

$E_{improper}$ – энергия взаимодействия атомов в случае неправильных торсионных углов,

E_{fix} – поправка для случая дополнительных ограничений.

В процессе симуляции вектора скоростей атомов меняются таким образом, чтобы потенциальная функция уменьшалась, пока не достигнет локального минимума. Симуляция проводилась в два этапа. Начальное расположение частиц расплава с потенциалом межчастичного взаимодействия Леннарда-Джонса представлено на рисунке 14а. После того, как система поддерживалась при постоянном объеме и энергии заданное количество временных шагов, частицы перемешались (рис. 14б). После минимизации был достигнут локальный минимум потенциальной функции (рис. 14с). Минимизация энергии производится с помощью команды `minimize`. Было проведено сравнительное испытание производительности примера `LAMMPS min OpenMPI` и `LAMMPS min OpenTS DMPI`. Входной файл был модифицирован, увеличен размер области симуляции по сравнению с исходным примером.

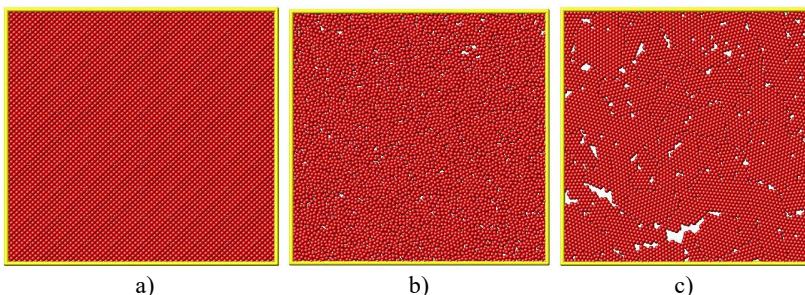


Рис. 14. Минимизация энергии: а) начало; б) первый этап; в) достигнут локальный минимум потенциальной функции

18. Неравновесная молекулярная динамика. Неравновесная молекулярная динамика [51] описывает модели неравновесных систем. Например, это могут быть молекулярные модели, в которых на систему частиц оказывается внешнее воздействие. Один из примеров неравновесной молекулярной динамики рассматривался ранее.

19. Вычисление коэффициента теплопроводности жидкости с потенциалом межчастичного взаимодействия Леннарда-Джонса). В

примере `nemd` [23] частицы находятся внутри параллелограмма, длина сторон которого не меняется, а углы изменяются (рис. 15). Изменение формы параллелепипеда происходит с помощью команды `fix deform`. Было проведено сравнительное испытание производительности примера LAMMPS `nemd` OpenMPI и LAMMPS `nemd` OpenTS DMPI. Входной файл был модифицирован, увеличены длины сторон параллелограмма.

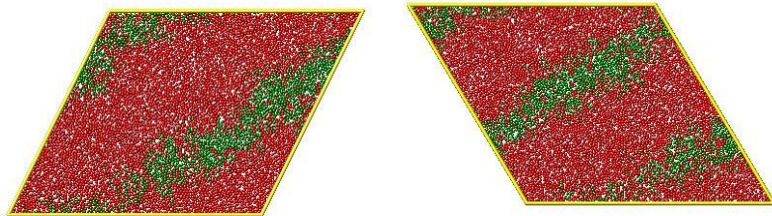


Рис. 15. Частицы находятся внутри параллелограмма, углы которого изменяются

20. Обтекание препятствий. В примере `obstacle` [23] в канале течения Пуазейля находятся две пустоты, имеющие сферическую форму. Положение пустот не меняется со временем (рис. 16). Сферические пустоты в течении поддерживаются с помощью команды `fix indent`. Было проведено сравнительное испытание производительности примера LAMMPS `obstacle` OpenMPI и LAMMPS `obstacle` OpenTS DMPI. Входной файл был модифицирован, увеличен размер области симуляции и радиус пустот по сравнению с исходным примером.

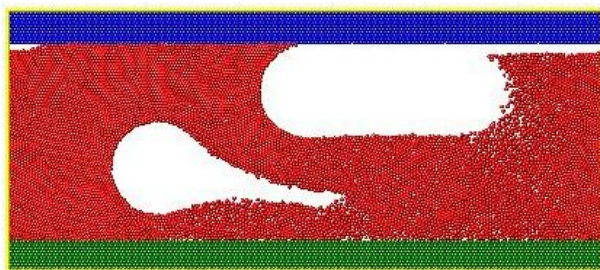


Рис. 167. Обтекание двух сферических препятствий

21. Перидинамика. Перидинамика – это нелокальное расширение механики сплошных сред, которая совместна с физической приро-

дой разрывов [52]. Основная идея перидинамики состоит в том, что локальное уравнение равновесия:

$$\operatorname{div}\sigma + b = 0$$

заменяется уравнением:

$$\int_{\mathcal{H}_x} f(q, x) dV_q + b = 0,$$

где σ – поле напряжений, b – плотность объемной силы, f – плотность силы действия точки q на x , \mathcal{H}_x – окрестность точки x радиуса δ . Если через $y(x)$ обозначить деформацию, то:

$$\rho(x)\ddot{y}(x, t) = \int_{\mathcal{H}_x} f(q, x, t) dV_q + b(x, t),$$

где ρ – плотность. [52].

В примере `peri` [23] цилиндрическая мишень из упругого пластика поражается метательным снарядом (рис. 17). Для реализации модели используются команда `atom_style peri` и потенциал межчастичного взаимодействия `peri`. Обстрел цели симулируется с помощью команды `fix indent`. Результат обстрела подсчитывается с помощью команды `compute damage`. Эта команда реализована специально для модели перидинамики. Было проведено сравнительное испытание производительности примера LAMMPS `peri` OpenMPI и LAMMPS `peri` OpenTS DMPI.

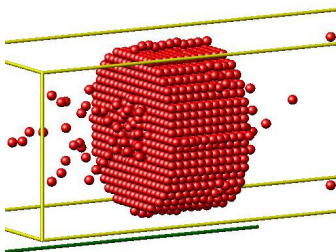


Рис. 17. В цилиндрическую мишень попал метательный снаряд

22. Дифракция электронов и рентгеновских лучей кристаллами Ni. Электронная и рентгеновская дифракция являются хорошо из-

вестными экспериментальными методами, используемыми для исследования химической структуры материала. В примере USER diffraction [23] реализован вычислительный метод облучения электронами и рентгеновскими лучами непосредственно с помощью атомистического моделирования без априорного знания элементарной ячейки. Этот метод применяется для изучения структуры (010) симметричных наклонных малоугловых и большеугловых границ зерен в Ni. Виртуальные электронные дифракционные картины и профили линий дифракции рентгеновских лучей показывают, что этот метод может различать малоугловые границы зерен с разными разориентациями и между малоугловыми границами с одинаковой разориентацией, но разными дислокационными конфигурациями. Для симметричного наклона границ зерен с совпадающими узлами $\Sigma 5$ (210), $\Sigma 29$ (520) и $\Sigma 5$ (310) для решетки совпадающих узлов (010) виртуальные дифракционные методы могут выявить разориентацию границы зерен и показать незначительные различия между границами зерен [53]. Образец никеля виртуально облучался потоком электронов и рентгеновских лучей (рис. 18). Изображение получено с использованием программы VisIt [54] Ливерморской национальной лабораторией им. Э. Лоуренса.

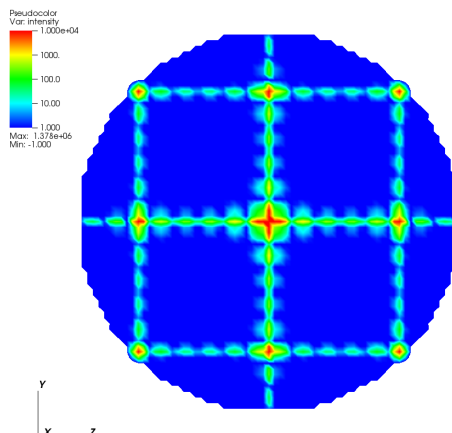


Рис. 18. Дифракция электронов и рентгеновских лучей кристаллами никеля

С помощью команды `lattice fcc` строится гранецентрированная кристаллическая решетка с длиной ребра 3.52 ангстрем. Масса каждого атома задается равной 5.71 г/моль. Создается кристалл в форме куба из 32000 атомов никеля. Потенциал межчастичного взаимодействия отсутствует. Симуляция облучения рентгеновскими лучами производится с

помощью команды `compute xrd` [55]. Симуляция облучения электронами производится с помощью команды `compute SAED` [56]. В источниках представлены соответствующие формулы и ссылки на дополнительные источники. Было проведено сравнительное испытание производительности примера `LAMMPS USER diffraction OpenMPI` и `LAMMPS USER diffraction OpenTS DMPI`.

23. Динамика диссипативных частиц. Динамика диссипативных частиц (DPD) – это метод мезомасштабных частиц, который устраняет разрыв между микроскопическим и макроскопическим моделированием. Его можно рассматривать как крупнозернистую модель молекулярной динамики, подходящую для больших масштабов времени и длины. DPD был успешно применен к различным областям приложений, особенно при моделировании гидродинамического поведения сложных жидкостей. Модель DPD разработана Хугербрюгге и Коэлменом [57]. Сила взаимодействия частиц i и j является суммой трех сил, консервативной, диссипативной и случайной:

$$F_{ij} = F_{ij}^C + F_{ij}^D + F_{ij}^R$$

Одним из примеров, приведенных для модели DPD в LAMMPS, является пример, когда в системе с постоянным количеством частиц при постоянном объеме поддерживается постоянная энергия (ансамбль NVE). Соответствующие уравнения приведены в [58]. Координаты и вектора скоростей частиц считываются из входного файла. Было проведено сравнительное испытание производительности примера `LAMMPS USER dpd OpenMPI` и `LAMMPS USER dpd OpenTS DMPI`. Входной файл был модифицирован, увеличено количество временных шагов по сравнению с исходным примером.

24. Вычисление вязкости жидкости. В примере `viscosity` [23] вычисляется коэффициент вязкости жидкости с помощью формулы Ньютона:

$$\tau = -\eta \frac{\partial v}{\partial n},$$

где τ – вязкость, η – коэффициент вязкости, $\frac{\partial v}{\partial n}$ – градиент скорости вдоль оси, перпендикулярной к плоскости сдвига слоёв жидкости. В

процессе симуляции использовался сосуд с жидкостью в форме параллелограмма с изменяющимися углами и постоянными сторонами (рис. 15). Заданная температура поддерживается с помощью термостата Нозе-Хувера. Было проведено сравнительное испытание производительности примера LAMMPS viscosity OpenMPI и LAMMPS viscosity OpenTS DMPI. Входной файл был модифицирован, увеличена область симуляции.

25. Заключение. Технология создания гибридных программ, в которых сложная интеллектуальная часть реализуется при помощи динамически распараллеливаемого перебора на языке T++, а низкий уровень вычислений – при помощи традиционных низкоуровневых средств типа MPI или CUDA, обладают, по мнению авторов, большим потенциалом, который может быть востребован, в частности, при разработке интеллектуальных систем автоматизированного проектирования.

Проведенная проверка показала, что подход, выбранный для написания гибридного приложения, не ухудшает производительности реальных приложений. Разброс относительных изменений средних значений производительности составил от -4.9% до 5.8%, в среднем -0.2%, что пренебрежимо мало и приемлемо при тех преимуществах, которые получаются в результате переноса. Дальнейшие исследования будут посвящены разработке технологии адаптации пакетов с платформы OpenMPI на платформу OpenTS DMPI.

Литература

1. MPICH: A High-Performance, Portable Implementation of MPI. Argonne National Laboratory, Mathematics and Computer Science Division. URL: <https://www.anl.gov/mcs/mpich-a-highperformance-portable-implementation-of-mpi>.
2. MVAPICH: MPI over InfiniBand, Omni-Path, Ethernet/iWARP, and RoCE. The Ohio State University, Network-Based Computing Laboratory. URL: <http://mvapich.cse.ohio-state.edu>.
3. URL: www.cray.com.
4. TianHe-2A. URL: <https://www.top500.org/system/177999>.
5. Intel MPI. URL: <https://software.intel.com/content/www/us/en/develop/tools/mpi-library.html>.
6. Blue Gene/Q MPI. URL: <http://www.redbooks.ibm.com/redbooks/pdfs/sg247948.pdf>.
7. The IBM Parallel Environment (PE) Developer Edition. URL: <http://www.redbooks.ibm.com/abstracts/tips1073.html>
8. IBM Platform MPI. URL: https://www.ibm.com/support/knowledgecenter/en/SSENRW_4.2.0/get_started_admin/getting_started_mpi.html.
9. Installing SGI MPI packages. URL: <https://downloads.linux.hpe.com/SDR/project/mpi/>
10. Application Development Environment for Supercomputer Fugaku. URL: <https://www.fujitsu.com/global/about/resources/publications/publications/technicalreview/2020-03/article07.html>

11. MS MPI. URL: <https://docs.microsoft.com/en-us/message-passing-interface/microsoft-mpi>.
12. MPI 4.0. URL: <https://www.mpi-forum.org/mpi-4/>
13. *Абрамов С.М., Васенин В.А., Мамчиц Е.Е., Роганов В.А., Слепухин А.Ф.*, Динамическое распараллеливание программ на базе параллельной редукции графов. Архитектура программного обеспечения новой версии Т-системы // Научная сессия МИФИ-2001, Сборник научных трудов. Т. 2, Москва, 22–26 января 2001 г., с. 234.
14. *Абрамов С.М., Кузнецов А.А., Роганов В.А.* Кроссплатформенная версия Т-системы с открытой архитектурой // Вычислительные методы и программирование, 8:1(2) (2007), с. 175–180, URL: http://num-meth.srcc.msu.ru/zhurnal/tom_2007/v8r203.html
15. *Кузнецов А.А., Роганов В.А.* Экспериментальная реализация отказоустойчивой версии системы OpenTS для платформы Windows CCS. // Труды Второй Международной научной конференции "Суперкомпьютерные системы и их применение (SSA'2008)" 27-29 октября 2008, г., Минск. — Минск: ОИПИ НАН Беларуси, 2008 с. 65-70 ISBN 978-985-6744-46-7
16. *Степанов Е.А.* Планирование в OpenTS — системе автоматического динамического распараллеливания. // М., МГИУ, сборник статей "Информационные технологии и программирование", выпуск 2, 2005.
17. *Абрамов С.М., Есин Г.И., Загоровский И.М., Матвеев Г.А., Роганов В.А.* Принципы организации отказоустойчивых параллельных вычислений для решения вычислительных задач и задач управления в Т-Системе с открытой архитектурой (OpenTS). // Международная конференция "Программные системы: теория и приложения (PSTA-2006)", 23-28 октября 2006 г., г. Переславль-Залесский, Институт Программных Систем РАН, сборник трудов конференции, С. 257–264.
18. *Roganov V., Slepukhin A.* Distributed Extension of the Parallel Graph Reduction. GRACE: Compact and Efficient Dynamic Parallelization Technology for the Heterogeneous Computing Systems. International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications, June 25–28, 2001, Las Vegas, Nevada, USA.
19. *Moskovsky A., Roganov V., Abramov S.* Parallelism Granules Aggregation with the T-System. Parallel Computing Technologies: 9th International Conference, PaCT 2007 Pereslavl-Zalessky, Russia, September 2007. Proceedings. Victor Malyshekin (Ed.)-Berlin etc. Springer, 2007. – Lecture Notes in Computer Science: vol. 4671, pp. 293-302.
20. *Moskovsky A., Roganov V., Abramov S., Kuznetsov A.* Variable Reassignment in the T++ Parallel Programming Language. Parallel Computing Technologies: 9th International Conference, PaCT 2007 Pereslavl-Zalessky, Russia, September 2007. Proceedings. Victor Malyshekin (Ed.). Berlin etc. Springer, 2007. – Lecture Notes in Computer Science: vol. 4671, pp. 579-588.
21. LAMMPS. URL: <https://lammps.sandia.gov>.
22. Lennard-Jones, J. E. — Proc. Roy. Soc., 1924, v. A 106, p. 463.
23. LAMMPS example scripts. URL: <https://lammps.sandia.gov/doc/Examples.html>.
24. Gay J.G., Berne B.J. Modification of the overlap potential to mimic a linear site–site potential. Journal of Chemical Physics, 1981, vol. 74 pp. 3316-3319.
25. Потенциал Гей-Берне. URL: https://lammps.sandia.gov/doc/pair_gayberne.html
26. *Stuart S.J.; Tutein A.B.; Harrison J.A.* A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions. Journal of Chemical Physics, 2000, vol. 112, Issue 14, pp. 6472-6486.

27. Потенциал AIREBO. URL:https://lammps.sandia.gov/doc/pair_airebo.html.
28. *Brenner D.W., Shenderova O.A., Harrison J.A., Stuart S.J., Ni B., Sinnott S.B.* A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons. *J Physics: Condensed Matter*, 2002, vol. 14, 783-802.
29. *Hecht M., Harting J., Ihle T., Herrmann H.* Simulation of claylike colloids. *Phys. Rev. E.*, 2005, vol. 72, 011408.
30. *Petersen M.K., Lechman J.B., Plimpton S.J., Grest G.S., Veld P.J., Schunk P.R.* Mesoscale Hydrodynamics via Stochastic Rotation Dynamics: Comparison with Lennard-Jones Fluid. *J. Chem. Phys.* 2010, vol. 132, 174106.
31. LAMMPS fix srd command. URL:https://lammps.sandia.gov/doc/fix_srd.html.
32. *Axilrod and Teller.* Interaction of the van der Waals type between three atoms. *J. Chem. Phys.*, 1943, vol. 11, 299.
33. *Muto Y.* *Nippon Sugaku.* Buturigakkwaishi 17, 629 (1943).
34. *Баран Ю.С., Гинзбург В.Л.* Некоторые вопросы теории сил Ван-дер-Ваальса. *УФН*, 1984, № 143 С. 345–389.
35. LAMMPS balance command. URL: <https://lammps.sandia.gov/doc/balance.html>.
36. LAMMPS fix balance command. URL: https://lammps.sandia.gov/doc/fix_balance.html.
37. *Shan T.R., Devine B.D., Kemper T.W., Sinnott S.B. Phillpot S.R.* Charge-optimized many-body potential for the hafnium/hafnium oxide system. *Phys. Rev. B.* 2010, vol. 81, 125328.
38. *Liang, T., Shan, T.R., Cheng, Y.T., Devine, B.D., Noordhoek M., Li Y., Lu Z., Phillpot S.R., Sinnott S.B.* Classical atomistic simulations of surfaces and heterogeneous interfaces with the charge-optimized many body (COMB) potentials. *Materials Science and Engineering R: Reports*, 2013, vol. 74(9), pp. 255-279.
39. *Horsfield P., Bratkovsky A.M., Fearn M., Pettifor D.G., Aoki M.* Bond-order potentials: Theory and implementation. *Phys. Rev. B.* 1996, vol. 53, 12694.
40. *Nose S.* A unified formulation of the constant temperature molecular-dynamics methods. *Journal of Chemical Physics.* vol. 81 (1), pp. 511–519.
41. *Hoover W.G.* Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions. *Phys. Rev. A.* 31 (3): 1695–1697.
42. LAMMPS fix nvt command URL: https://lammps.sandia.gov/doc/fix_nh.html.
43. Mean squared displacement. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Mean_squared_displacement.
44. LAMMPS compute msd command. URL: https://lammps.sandia.gov/doc/compute_msd.html.
45. *Shinoda W., Shiga M., Mikami M.* Rapid estimation of elastic constants by molecular dynamics simulation under constant stress. *Phys. Rev. B.*, 2004, vol. 69, 134103.
46. Calculate elastic constants. URL: https://lammps.sandia.gov/doc/Howto_elastic.html.
47. *Stillinger F.H., Weber T.A.* Computer simulation of local order in condensed phases of silicon, *Phys. Rev. B*, 1985, vol. 31, pp. 52-62.
48. *Peshl T., Ewald P., Prandtl L.* *Fizika uprugikh i zhidkikh tel.* [Physics of elastic and fluid bodies] Moscow, Gostekhizdat, 1933. (In Russ.).
49. LAMMPS fix heat command. URL: https://lammps.sandia.gov/doc/fix_heat.html.
50. *Plimpton S.* Sandia National Labs, Modeling Thermal Transport and Viscosity with Molecular Dynamics. LAMMPS Users and Developers Workshop International Centre for Theoretical Physics (ICTP) March 2014 - Trieste, Italy. URL: https://www.lammps.org/tutorials/italy14/italy_kappa_viscosity_Mar14.pdf.
51. *Todd B., Daivis P.* Nonequilibrium Molecular Dynamics. Theory, Algorithms and Applications. Cambridge University Press, 2017.

52. *Silling S.A.* Peridynamics: Introduction. In: Voyiadjis G. (eds) Handbook of Nonlocal Continuum Mechanics for Materials and Structures. Springer, Cham, 2018
53. *Coleman S.P., Spearot D.E., Capolungo L.* Virtual diffraction analysis of Ni [010] symmetric tilt grain boundaries. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2013, 21(5).
54. VisIt Open Source visualization software URL: <https://wci.llnl.gov/simulation/computer-codes/visit/>.
55. LAMMPS compute_xrd command. URL: https://lammps.sandia.gov/doc/compute_xrd.html.
56. LAMMPS compute_SAED command. URL: https://lammps.sandia.gov/doc/compute_saed.html.
57. *Hoogerbrugge, P.J.; Koelman, J.M.V.* A Simulating Microscopic Hydrodynamic Phenomena with Dissipative Particle Dynamics. Europhysics Letters (EPL). 1992, 19 (3): 155–160.
58. *Larentzos J.P., Brennan J.K., Moore J.D., Mattson W.D.* LAMMPS Implementation of Constant Energy Dissipative Particle Dynamics (DPD-E), ARL-TR-6863, U.S. Army Research Laboratory, Aberdeen Proving Ground, MD, 2014.
59. *Everaers R., Ejtehadi M.R.* Interaction potentials for soft and hard ellipsoids. Phys. Rev. E, 2003, 67, 041710.
60. *Veld P., Plimpton S., Grest G.* Accurate and Efficient Methods for Modeling Colloidal Mixtures in an Explicit Solvent using Molecular Dynamics. Computer Physics Communications, 2008, 179(5).

Абрамов Сергей Михайлович — д-р физ.-мат. наук, чл.-корр. РАН, директор, Исследовательский центр мультипроцессорных систем, Институт программных систем имени А.К. Айламазяна РАН. Область научных интересов: Суперкомпьютерные технологии, сетевые технологии и IoT, метавычисления. Число научных публикаций — 174. abram@botik.ru; ул. Петра Первого, 4а, 152021, Ярославская обл., Переславский р-н, село Веськово, Россия; р.т.: +74852695228; факс: +74852695228.

Роганов Владимир Александрович — научный сотрудник, Исследовательский центр мультипроцессорных систем, Институт программных систем имени А.К. Айламазяна РАН. Область научных интересов: Суперкомпьютерные технологии, сетевые технологии. Число научных публикаций — 47. val@pereslavl.ru; ул. Петра Первого, 4а, 152021, Ярославская обл., Переславский р-н, село Веськово, Россия; р.т.: +74852695228; факс: +74852695228.

Осипов Валерий Иванович — канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник, Исследовательский центр мультипроцессорных систем, Институт программных систем имени А.К. Айламазяна РАН. Область научных интересов: Суперкомпьютерные технологии, сетевые технологии. Число научных публикаций — 25. val@pereslavl.ru; ул. Петра Первого, 4а, 152021, Ярославская обл., Переславский р-н, село Веськово, Россия; р.т.: +74852695228; факс: +74852695228.

Матвеев Герман Анатольевич — научный сотрудник, Исследовательский центр мультипроцессорных систем, Институт программных систем имени А.К. Айламазяна РАН. Область научных интересов: Суперкомпьютерные технологии, сетевые технологии. Число научных публикаций — 22. gera@prime.botik.ru; ул. Петра Первого, 4а, 152021, Ярославская обл., Переславский р-н, село Веськово, Россия; р.т.: +74852695228; факс: +74852695228.

S. ABRAMOV, V. ROGANOV, V. OSIPOV, G. MATVEEV
**IMPLEMENTATION OF THE LAMMPS PACKAGE ON
THE T-SYSTEM WITH OPEN ARCHITECTURE**

Abramov S., Roganov V., Osipov V., Matveev G. **Implementation of the LAMMPS Package on the T-System with Open Architecture.**

Abstract. Supercomputer applications are usually implemented in the C, C++, and Fortran programming languages using different versions of the Message Passing Interface library. The "T-system" project (OpenTS) studies the issues of automatic dynamic parallelization of programs. In practical terms, the implementation of applications in a mixed (hybrid) style is relevant, when one part of the application is written in the paradigm of automatic dynamic parallelization of programs and does not use any primitives of the MPI library, and the other part of it is written using the Message Passing Interface library. In this case, the library is used, which is a part of the T-system and is called DMPI (Dynamic Message Passing Interface). In this way, it is necessary to evaluate the effectiveness of the MPI implementation available in the T-system. The purpose of this work is to examine the effectiveness of DMPI implementation in the T-system. In a classic MPI application, 0% of the code is implemented using automatic dynamic parallelization of programs and 100% of the code is implemented in the form of a regular Message Passing Interface program. For comparative analysis, at the beginning the code is executed on the standard Message Passing Interface, for which it was originally written, and then it is executed using the DMPI library taken from the developed T-system. Comparing the effectiveness of the approaches, the performance losses and the prospects for using a hybrid programming style are evaluated. As a result of the conducted experimental studies for different types of computational problems, it was possible to make sure that the efficiency losses are negligible. This allowed to formulate the direction of further work on the T-system and the most promising options for building hybrid applications. Thus, this article presents the results of the comparative tests of LAMMPS application using OpenMPI and using OpenTS DMPI. The test results confirm the effectiveness of the DMPI implementation in the OpenTS parallel programming environment.

Keywords: dynamic parallelization, T-system with an open architecture, OpenTS, T++ programming language, molecular dynamics.

Abramov Sergey — Ph.D., Dr.Sci., Corresponding Member of RAS, Director, Research Center for Multiprocessor Systems, The Ailamazyan Program Systems Institute of the Russian Academy of Sciences. Research interests: Supercomputing technologies, network technologies and IoT, metacomputations. The number of publications — 174. abram@botik.ru; 4a, Petra Velikogo, 152021, Yaroslavl Region, Pereslavl area, Veskovo, Russia; office phone: +74852695228; fax: +74852695228.

Roganov Vladimir — Researcher, Research Center for Multiprocessor Systems, The Ailamazyan Program Systems Institute of the Russian Academy of Sciences. Research interests: Supercomputing technologies, network technologies. The number of publications — 47. var@pereslavl.ru; 4a, Petra Velikogo, 152021, Yaroslavl Region, Pereslavl area, Veskovo, Russia; office phone: +74852695228; fax: +74852695228.

Osipov Valeriy — Ph.D., Senior researcher, Research Center for Multiprocessor Systems, The Ailamazyan Program Systems Institute of the Russian Academy of Sciences. Research interests: Supercomputing technologies, network technologies. The number of publications — 25.

val@pereslavl.ru; 4a, Petra Velikogo, 152021, Yaroslavl Region, Pereslavl area, Veskovo, Russia; office phone: +74852695228; fax: +74852695228.

Matveev German — Researcher, Research Center for Multiprocessor Systems, The Ailama-yan Program Systems Institute of the Russian Academy of Sciences. Research interests: Super-computing technologies, network technologies. The number of publications — 22. gera@prime.botik.ru; 4a, Petra Velikogo, 152021, Yaroslavl Region, Pereslavl area, Veskovo, Russia; office phone: +74852695228; fax: +74852695228.

References

1. MPICH: A High-Performance, Portable Implementation of MPI. Argonne National Laboratory, Mathematics and Computer Science Division. URL: <https://www.anl.gov/mcs/mpich-a-high-performance-portable-implementation-of-mpi>.
2. MVAPICH: MPI over InfiniBand, Omni-Path, Ethernet/iWARP, and RoCE. The Ohio State University, Network-Based Computing Laboratory. URL: <http://mvapich.cse.ohio-state.edu>.
3. URL: www.cray.com.
4. TianHe-2A. URL: <https://www.top500.org/system/177999>.
5. Intel MPI. URL: <https://software.intel.com/content/www/us/en/develop/tools/mpi-library.html>.
6. Blue Gene/Q MPI. URL: <http://www.redbooks.ibm.com/redbooks/pdfs/sg247948.pdf>.
7. The IBM Parallel Environment (PE) Developer Edition. URL: <http://www.redbooks.ibm.com/abstracts/tips1073.html>
8. IBM Platform MPI. URL: https://www.ibm.com/support/knowledgecenter/en/SSENRW_4.2.0/get_started_admin/getting_started_mpi.html.
9. Installing SGI MPI packages. URL: <https://downloads.linux.hpe.com/SDR/project/mpi/>
10. Application Development Environment for Supercomputer Fugaku. URL: <https://www.fujitsu.com/global/about/resources/publications/technicalreview/2020-03/article07.html>
11. MS MPI. URL: <https://docs.microsoft.com/en-us/message-passing-interface/microsoft-mpi>.
12. MPI 4.0. URL: <https://www.mpi-forum.org/mpi-40/>
13. Abramov S.M., Vasenin V.A., Mamchits E.E., Roganov V.A., Slepukhin A.F., [Dynamic parallelization of programs based on parallel graph reduction. Software architecture of the new version of the T-system] *Nauchnaya sessiya MIF-2001, Sbornik nauchnykh trudov*. [Scientific session MEPhI-2001, Collection of scientific papers]. vol. 2, Moscow, 22–26 jan. 2001, p. 234. (In Russ.).
14. Abramov S.M., Kuznetsov A.A., Roganov V.A. [A cross-platform version of the T-system with an open architecture] *Vychislitel'nye metody i programmirovaniye – Computational methods and programming*, 2007, vol. 8: 1(2), pp. 175-180. (In Russ.). URL: http://num-meth.srcc.msu.ru/zhurnal/tom_2007/v8r203.html.
15. Kuznetsov A.A., Roganov V.A. [Experimental implementation of a fault-tolerant version of the OpenTS system for the Windows CCS platform.] *Trudy Vtoroy Mezhunarodnoy nauchnoy konferentsii "Superkomp'yuternye sistemy i ikh primeneniye (SSA'2008)"* [Proceedings of the Second International Scientific Conference "Supercomputer Systems and Their Application (SSA'2008)"] October 27-29, 2008, Minsk. - Minsk: OIPI NAS Belarus, 2008 pp. 65-70 ISBN 978-985-6744-46-7. (In Russ.).
16. Stepanov E.A. [Scheduling in OpenTS, an automatic dynamic parallelization system] Moscow, MSIU, *sbornik statey "Informatsionnye tekhnologii i programmirovaniye"* [Collection of articles "Information technologies and programming"], 2005, issue 2 (In Russ.).

17. Abramov S.M., Esin G.I., Zagorovskiy I.M., Matveev G.A., Roganov V.A. [The principles of organizing fault-tolerant parallel computing for solving computational and control problems in the T-System with an open architecture (OpenTS).] *Mezhdunarodnaya konferentsiya "Programmye sistemy: teoriya i prilozheniya (PSTA-2006)"*, [International conference "Software systems: theory and applications (PSTA-2006)"] October 23-28, 2006, Pereslavl-Zalessky, Program Systems Institute RAS, collection of conference proceedings, pp. 257–264. (In Russ.).
18. Roganov V., Slepuhin A. Distributed Extension of the Parallel Graph Reduction. GRACE: Compact and Efficient Dynamic Parallelization Technology for the Heterogeneous Computing Systems. International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications, June 25–28, 2001, Las Vegas, Nevada, USA.
19. Moskovsky A., Roganov V., Abramov S. Parallelism Granules Aggregation with the T-System. Parallel Computing Technologies: 9th International Conference, PaCT 2007 Pereslavl-Zalessky, Russia, September 2007. Proceedings. Victor Malyshekin (Ed.)- Berlin etc. Springer, 2007. – Lecture Notes in Computer Science: vol. 4671, pp. 293-302.
20. Moskovsky A., Roganov V., Abramov S., Kuznetsov A. Variable Reassignment in the T++ Parallel Programming Language. Parallel Computing Technologies: 9th International Conference, PaCT 2007 Pereslavl-Zalessky, Russia, September 2007. Proceedings. Victor Malyshekin (Ed.)- Berlin etc. Springer, 2007. – Lecture Notes in Computer Science: vol. 4671, pp. 579-588.
21. LAMMPS. URL: <https://lammps.sandia.gov>
22. Lennard-Jones, J. E. — Proc. Roy. Soc., 1924, v. A 106, p. 463.
23. LAMMPS example scripts. URL: <https://lammps.sandia.gov/doc/Examples.html>.
24. Gay J.G., Berne B.J. Modification of the overlap potential to mimic a linear site–site potential. *Journal of Chemical Physics*, 1981, vol. 74 pp. 3316-3319.
25. LAMMPS pair_style gayberne command URL: https://lammps.sandia.gov/doc/pair_gayberne.html
26. Stuart S.J.; Tutein A.B.; Harrison J.A. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions. *Journal of Chemical Physics*, 2000, Vol. 112, Issue 14, pp. 6472-6486.
27. LAMMPS pair_style airebo command. URL: https://lammps.sandia.gov/doc/pair_airebo.html.
28. Brenner D.W., Shenderova O.A., Harrison J.A., Stuart S.J., Ni B., Sinnott S.B. A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons. *J Physics: Condensed Matter*, 2002, vol. 14, 783-802.
29. Hecht M., Harting J., Ihle T., Herrmann H. Simulation of claylike colloids. *Phys. Rev. E*, 2005, vol. 72, 011408.
30. Petersen M.K., Lechman J.B., Plimpton S.J., Grest G.S., Veld P.J., Schunk P.R. Mesoscale Hydrodynamics via Stochastic Rotation Dynamics: Comparison with Lennard-Jones Fluid. *J. Chem. Phys.* 2010, vol. 132, 174106.
31. LAMMPS fix srd command. URL: https://lammps.sandia.gov/doc/fix_srd.html.
32. Axilrod and Teller. Interaction of the van der Waals type between three atoms. *J. Chem. Phys.*, 1943, vol. 11, 299.
33. Muto Y. Nippon Sugaku. Buturigakkwaishi 17, 629 (1943).
34. Barash Y.S., Ginzburg V.L. [Some questions of the theory of van der Waals forces] *UFN – Physics-Uspeski*, 1984, no. 143 pp. 345–389 (In Russ.).
35. LAMMPS balance command. URL: <https://lammps.sandia.gov/doc/balance.html>.
36. LAMMPS fix balance command. URL: https://lammps.sandia.gov/doc/fix_balance.html.
37. Shan T.R., Devine B.D., Kemper T.W., Sinnott S.B. Phillpot S.R. Charge-optimized many-body potential for the hafnium/hafnium oxide system. *Phys. Rev. B*. 2010, vol. 81, 125328.
38. Liang, T., Shan, T.R., Cheng, Y.T., Devine, B.D., Noordhoek M., Li Y., Lu Z., Phillpot

- S.R., Sinnott S.B. Classical atomistic simulations of surfaces and heterogeneous interfaces with the charge-optimized many body (COMB) potentials. *Materials Science and Engineering R: Reports*, 2013, vol. 74(9), pp. 255-279.
39. Horsfield P., Bratkovsky A.M., Fearn M., Pettifor D.G., Aoki M. Bond-order potentials: Theory and implementation. *Phys. Rev. B*. 1996, vol. 53, 12694.
40. Nose S. A unified formulation of the constant temperature molecular-dynamics methods. *Journal of Chemical Physics*. vol. 81 (1), pp. 511–519.
41. Hoover W.G. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions. *Phys. Rev. A*. vol. 31(3), pp. 1695–1697.
42. LAMMPS fix nvt command URL: https://lammps.sandia.gov/doc/fix_nh.html.
43. Mean squared displacement. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Mean_squared_displacement.
44. LAMMPS compute msd command. URL: https://lammps.sandia.gov/doc/compute_msd.html.
45. Shinoda W., Shiga M., Mikami M. Rapid estimation of elastic constants by molecular dynamics simulation under constant stress. *Phys. Rev. B*, 2004, vol. 69, 134103.
46. Calculate elastic constants. URL: https://lammps.sandia.gov/doc/Howto_elastic.html.
47. Stillinger F.H., Weber T.A. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon, *Phys. Rev. B*, 1985, vol. 31, pp. 52-62.
48. Peshl T., Ehvald P., Prandtl L. *Fizika uprugikh i zhidkikh tel.* [Physics of elastic and fluid bodies] Moscow, Gostekhizdat, 1933. (In Russ.).
49. LAMMPS fix heat command. URL: https://lammps.sandia.gov/doc/fix_heat.html.
50. Plimpton S. Sandia National Labs, Modeling Thermal Transport and Viscosity with Molecular Dynamics. LAMMPS Users and Developers Workshop International Centre for Theoretical Physics (ICTP) March 2014 - Trieste, Italy. URL: https://www.lammps.org/tutorials/italy14/italy_kappa_viscosity_Mar14.pdf.
51. Todd B., Daivis P., *Nonequilibrium Molecular Dynamics. Theory, Algorithms and Applications*. Cambridge University Press, 2017.
52. Silling S.A. Peridynamics: Introduction. In: Voyiadjis G. (eds) *Handbook of Nonlocal Continuum Mechanics for Materials and Structures*. Springer, Cham, 2018
53. Coleman S.P., Spearot D.E., Capolungo L. Virtual diffraction analysis of Ni [010] symmetric tilt grain boundaries. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2013, 21(5).
54. VisIt Open Source visualization software URL: <https://wci.llnl.gov/simulation/computer-codes/visit/>.
55. LAMMPS compute xrd command. URL: https://lammps.sandia.gov/doc/compute_xrd.html.
56. LAMMPS compute SAED command. URL: https://lammps.sandia.gov/doc/compute_saed.html.
57. Hoogerbrugge, P.J; Koelman, J.M.V. A Simulating Microscopic Hydrodynamic Phenomena with Dissipative Particle Dynamics. *Europhysics Letters (EPL)*. 1992, 19 (3): 155–160.
58. Larentzos J.P., Brennan J.K., Moore J.D., and Mattson W.D. LAMMPS Implementation of Constant Energy Dissipative Particle Dynamics (DPD-E), ARL-TR-6863, U.S. Army Research Laboratory, Aberdeen Proving Ground, MD, 2014.
59. Everaers R., Ejtahadi M.R. Interaction potentials for soft and hard ellipsoids. *Phys. Rev. E*, 2003, 67, 041710.
60. Veld P., Plimpton S., Grest G. Accurate and Efficient Methods for Modeling Colloidal Mixtures in an Explicit Solvent using Molecular Dynamics. *Computer Physics Communications*, 2008, 179(5).