

**VYTAUTO DIDŽIOJO UNIVERSITETAS
MATEMATIKOS IR INFORMATIKOS INSTITUTAS**

Svajonė BEKEŠIENĖ

**LYGIAGREČIŲJŲ SKAIČIAVIMŲ
SISTEMA SPROGSTAMŲJŲ MEDŽIAGŲ
STRUKTŪRAI TIRTI**

DAKTARO DISERTACIJOS SANTRAUKA

Fiziniai mokslai (P 000)
Informatika (09 P)
Informatika, sistemų teorija (P 175)

Vilnius 2008

Disertacija rengta 2002-2007 metais Matematikos ir informatikos institute.
Doktorantūros teisė suteikta kartu su Vytauto Didžiojo universitetu 2004 m. gruodžio mėn.
13 d. Lietuvos Respublikos Vyriausybės nutarimu Nr. 1285.

Mokslinis vadovas:

doc. dr. Vytautas KLEIZA (Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir informatikos institutas, fiziniai mokslai, informatika – 09 P).

Disertacija ginama Vytauto Didžiojo universiteto Informatikos mokslo krypties taryboje:

Pirmininkas

prof. habil. dr. Vytautas KAMINSKAS (Vytauto Didžiojo universitetas fiziniai mokslai, informatika – 09 P).

Nariai:

habil. dr. Saulius BALEVIČIUS (Puslaidininkų fizikos institutas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P),

prof. dr. Romas BARONAS (Vilniaus universitetas, fiziniai mokslai, informatika – 09 P),

prof. habil. dr. Feliksas IVANAUSKAS (Vilniaus universitetas, fiziniai mokslai, informatika – 09 P),

prof. habil. dr. Mifodijus SAPAGOVAS (Matematikos ir informatikos institutas, fiziniai mokslai, matematika – 01 P).

Oponentai:

dr. Jelena TAMULIENĖ (VU Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P),

prof. habil. dr. Laimutis TELKSNYS (Matematikos ir informatikos institutas, fiziniai mokslai, informatika – 09 P).

Disertacija ginama viešame Fizinių mokslų, Informatikos mokslo krypties tarybos posėdyje 2008 m. birželio mėn. 18 d. 11 val. Matematikos ir informatikos instituto konferencijų ir seminarų centre.

Adresas: Goštauto g. 12, LT-01108, Vilnius, Lietuva.

Disertacijos santrauka išsiuntinėta 2008 m. gegužės mėn. 18 d.

Disertaciją galima peržiūrėti M. Mažvydo nacionalinėje bibliotekoje, Matematikos ir informatikos instituto ir Vytauto Didžiojo universiteto bibliotekose.

© Svajonė Bekešienė, 2008

**VYTAUTAS MAGNUS UNIVERSITY
INSTITUTE OF MATHEMATICS AND INFORMATICS**

Svajonė BEKEŠIENĖ

**PARALLEL COMPUTATION SYSTEM
FOR MATHEMATICAL MODELING
OF ELECTRONIC STRUCTURE
OF EXPLOSIVE MATERIALS**

SUMMARY OF DOCTORAL DISSERTATION

Physical Sciences (P 000)
Informatics (09 P)
Informatics, System Theory (P 175)

Vilnius 2008

Doctoral dissertation prepared 2002-2007 at the Institute of Mathematics and Informatics, Lithuania.

The right for the doctoral studies in informatics was granted to the Institute of Mathematics and Informatics together with Vytautas Magnus University by Government of the Republic of Lithuania, Decree No. 1285, issued on the 13 th of December 2004.

Scientific supervisor:

Doc. Dr. Vytautas KLEIZA (Kaunas University of Technology, Institute of Mathematics and Informatics, physical science, informatics – 09 P).

Council of Scientific field:

Chairman

Prof. Dr. Habil. Vytautas KAMINSKAS (Vytautas Magnus University, physical science, informatics– 09 P).

Members:

Dr. Habil. Saulius BALEVIČIUS (Semiconductor Physics Institute, physical science, physics– 02 P),

Prof. Dr. Romas BARONAS (Vilnius University, physical science, informatics–09 P),

Prof. Dr. Habil. Feliksas IVANAUSKAS (Vilnius University, physical science, informatics– 09 P),

Prof. Dr. Habil. Mifodijus SAPAGOVAS (Institute of Mathematics and Informatics, physical science, mathematics – 01 P).

Opponents:

Dr. Jelena TAMULIENĖ (Institute of Theoretical Physics and Astronomy, physical science, physics – 02 P),

Prof. Dr. Habil. Laimutis TELKSNYS (Institute of Mathematics and Informatics, physical science, informatics – 09 P).

The official defense of the dissertation will be defended at the Scientific Council in the field of Informatics in the Conference and Seminars Center of the Institute of Mathematics and Informatics at 11 a.m. on June 18, 2008.

Address: Goštauto str. 12, LT-01108, Vilnius, Lithuania.

The summary of the doctoral dissertation was distributed on 18 May, 2008.

A copy of the doctoral dissertation is available for review at the M. Mažvydas National Library of Lithuania, the Library of the Institute of Mathematics and Informatics and the Library of the Vytautas Magnus University.

© Svajonė Bekešienė, 2008

Temos aktualumas

Viena rimčiausių žmonijos problemų – įvairios terorizmo apraiškos. Aktualia tampa teroro aktų prevencija ir užkarda, kurią sprendžiant būtina sutelkti įvairių kryptių mokslininkus. Norint sėkmingai spręsti šiuos uždavinius, būtina tobulinti esamas ir kurti iš esmės naujas pažangias sprogstamųjų medžiagų aptikimo priemones. Išskyla poreikis turėti tokias technines priemones, kurios leistų greitai, selektyviai ir pageidautina nuotoliniu būdu aptikti ir identifikuoti pavojingas nuodingąsias medžiagas.

Sprogstamųjų medžiagų buvimą, lokalizaciją, identifikavimą galime realizuoti cheminės analizės metodais (specifiškos reakcijos su testinėmis medžiagomis). Tačiau, kai medžiagos kiekiai maži, medžiagos lokalizacija nežinoma – cheminiai metodai yra nereprezentatyvūs. Praktikoje tokiais atvejais dažniausiai taikomi fizikiniai spektroskopijos metodai, pagrįsti tuo, kad medžiagos molekulės pasižymi tik joms būdingais spektrais, o tiksliau, spektro dalimis. Kai kurios spektroskopijos rūšys, tokia kaip Ramano spektroskopija, leidžia pagal žinomus spektrus registruoti labai mažus medžiagų kiekius (iki nedaugelio molekulių). Tačiau ir šiuo būdu galimybė iš karto detektuoti medžiagą realiai esančią aplinkoje, o ne vakuume, yra labai sudėtinga, dėl aplinkoje esančių kitų medžiagų, kurių spektrai persiklodami iškraipo informaciją. Žinant, kad spektrai yra unikalūs, dažnai taikoma idealizacija, ir medžiagos detektuojamos neatsižvelgiant į jų superpoziciją su fonine aplinka.

Daugiatomių molekulių spektrai apima plačią infraraudonojo (IR) spektro sritį. Norint tokias molekules detektuoti, reikia atlikti IR spektrų klasifikavimą, nustatant svyravimų modas ir savuosius dažnius. Tai sudėtingas uždavinys. Todėl ab initio kvantiniai-cheminiai skaičiavimai naudojami nustatant molekulių elektroninės struktūros ypatumus: molekulių geometriją, jų svyravimų modas, dažnius, šuolių intensyvumus, izotopinių spektrų slinktis, savaiminio terminio skilimo reakcijų kanalų, aktyvacijos energiją ir rotacines konstantas.

Sprogstamųjų medžiagų, tokių kaip trinitrotoluenas (TNT), izomerai yra daugiatomiai azoto junginiai, sudarantys nemažai darinių su viena ar dviem NO₂ grupėmis, įvairiai susijungusiomis su benzolo žiedu. Šių darinių, nors visi jie TNT izomerai, spektrai skiriasi, todėl būtina ištirti visus junginius. Tarp jų trinitrotolueną arba trotilą, jo skilimo produktus dinitrotolueną (DNT) ir nitrotolueną (MNT) bei heksahidro-1.3.5-trinitro-1.3.5-triaziną (RDX).

Ta pati medžiaga gali turėti įvairių darinių, kurių spektrai yra skirtingi. Norint detektuoti visus junginius atsirandančius dėl reakcijos (sprogimo), būtina ištirti jų stabilumą ir spektrus. Eksperimentas negali parodyti, su kuriomis molekulės dalimis susijusi ta ar kita spektro linija, tad taikomas kitas būdas – nagrinėjama teoriškai. Šiuo metu kvantinės chemijos tyrimai yra tapę standartu, o siekiant teorinio tyrimo rezultatus gauti kaip lyginamuosius skaičiavimus su eksperimento rezultatais, naudojami superkompiuteriai arba asmeninių kompiuterių klasteriai.

Šiuo tikslu Lietuvos karo akademijoje ir buvo iš asmeninių kompiuterių sukurtas klasteris TAURAS, realizuotas sprogstamųjų medžiagų molekulių tyrimui. Klasteryje, įdiegus ir modifikavus kompiuterinį paketą GAMESS, atliktas išsamus sprogstamųjų medžiagų molekulių skaitmeninis modeliavimas, padėjęs realizuoti specifinę TAURO aplinką kvantcheminiams tyrimams.

Atlikus klasteryje sudėtingus ir daug išteklių reikalaujančius skaičiavimus, molekulių geometriniai parametrai surasti Hartrio ir Foko artinyje panaudojus 6-311G Gauso atominių orbitalių bazę su poliarizacinėmis funkcijomis (2d,2p,3d,1f,3p). Siekiant patikslinti gautus skaičiavimus, atsižvelgiant į elektronų koreliaciją, molekulių geometriniai parametrai optimizuoti trikdžių metodu MP2 artinyje, t. y. buvo ieškoma tokių geometrinių parametru, kuriems esant molekulės pilnoji energija mažiausia, nes tada sistema stabiliausia.

Klasteryje TAURAS atlikti skaičiavimai sprogstamųjų medžiagų detektavimui nustatantys spektrų charakteringąsias sritis. Harmoniniame artinyje apskaičiuoti tiriamų molekulių vibracinių šuolių dažniai ir santykiniai IR spektro intensyvumai. Teoriškai nustatyta NO₂ grupių įtaka molekulių junginių elektronei sandarai ir IR spektrams.

Darbo tikslai ir uždaviniai

Sukurti, pagrįsti ir pateikti naudoti asmeninių kompiuterių klasterį (AKK), skirtą kvantinės chemijos lygiagretiesiems skaičiavimams, taikomiems sprogstamųjų medžiagų savybėms tirti, ir atlikti programinį tokių skaičiavimų realizavimą. Palyginti gautus skaičiavimo rezultatus su eksperimentiniais ir kitų autorių gautais skaičiavimo rezultatais.

Svarbiausi spęstini uždaviniai:

1. Sukurti Beowulf tipo klasterį ir atlikti pastarojo aplinkos lygiagretinimo analizę, siekiant nustatyti šios aplinkos skaičiavimo pajėgumus.
2. Sukurti AK klasterį naudojant SCORE programinę įrangą ir atlikti šios aplinkos analizę, siekiant sukurti adaptuotą lygiagrečiųjų skaičiavimų sistemą.
3. Remiantis atlikta analize, pasiūlyti aplinką, naudojančią naują lygiagretinimo technologiją.
4. Realizuoti pasiūlytą naują technologiją integruojant GAMESS programinį paketą šioje aplinkoje.
5. Išplėsti GAMESS galimybes naudojant biblioteką MPI-2.
6. Pritaikyti sukurtą aplinką realioms skaičiavimams, nustatant sprogstamųjų medžiagų (TNT, TNP) molekulių elektroninės struktūros ir virpesių spektrų ypatumus.

Mokslinis naujumas

1. Pasiūlyta ir realizuota nauja lygiagretinimo aplinka, kuri gali būti taikoma kvantiniams-cheminiams skaičiavimams, t. y. medžiagų tyrimui *ab initio* metodu. Šioje aplinkoje integruotas ir realizuotas paketas GAMESS, leidžiantis atlikti didelių išteklių reikalaujančius molekulių spektrų skaičiavimus, lyginamus su eksperimentu.
2. Atlikta GAMESS programinio paketo modifikacija adaptuota SCores klasterių aplinkai.
3. Naudojantis MPI-2 biblioteka, sukurta programa, leidžianti atlikti klasteryje tokio pat tipo skaičiavimus, kaip ir lygiagrečiuoju bendrosios atminties kompiuteriu – Cray T3E.
4. Taikant SCore lygiagretinimo aplinką, atlikti sudėtingi tiriamieji skaičiavimai, t. y. nustatyti molekulių elektroninės struktūros ypatumai, molekulių geometrija, jų svyravimų modos ir dažniai, šuolių intensyvumai, izotopinių spektrų poslinkiai.
5. Pasiūlyta lygiagrečioji aplinka, sudaranti galimybę modeliuoti ir atlikti efektyvius lygiagrečiuosius skaičiavimus.

Tyrimų metodika

Apima lygiagrečiųjų skaičiavimų efektyvumo ir sudėtingumo analizę, įvairių lygiagretinimo priemonių lyginamąją analizę, siekiant kokybiškai realizuoti specifiniams skaičiavimams skirtą aplinką.

- Lyginamoji analizė, užtikrinanti sukurto klasterio pajėgumų įvertinimą, oficialiai lyginant jį su pasaulyje esančių klasterių pajėgumais, užregistravus jį duomenų bazėje <http://clusters.top500.org/db>.
- Detali skaičiavimų pajėgumo analizė ištirianti dvi klasterio aplinkas: Beowulf tipo ir SCores. Šių tyrimų pagrindu taikyti NAS NPB etaloninius testus, naudojamus superkompiuterių ir klasterių pajėgumui įvertinti.
- Lyginamoji analizė, kurios tikslas maksimaliai adaptuoti sukurta klasterį kvantcheminiams skaičiavimams ir jo aplinkoje įdiegti molekulių elektroninių struktūrų skaičiavimo programą GAMESS naudojant *ab initio* būdą.

- Sprogstamųjų medžiagų molekulių testinių skaičiavimų lyginamoji analizė tiek Beowulf lygiagrečioje aplinkoje, naudojant TCP/IP sockets ir MPI-1, tiek ir SCores lygiagrečioje aplinkoje, realizavus MPI-1-PM technologiją, lygiagrečiųjų skaičiavimų efektyvumui ir GAMESS programos pajėgumui įvertinti klasteryje.
- Sukurto klasterio lyginamoji analizė nustatanti pastarojo skaičiavimų efektyvumą, keičiant tinklo kortų skaičių ir naudojanti SCore programinės įrangos Trunking technologiją.
- MPI-2 bibliotekos taikymas GAMESS paketo veikimo principų klasteryje efektyvumui tirti.
- Gautų skaičiavimo rezultatų lyginamoji analizė su kitų autorių skaičiavimo rezultatais, gautais atlikus skaičiavimus su pripažintais superkompiuteriais, ir su kitų autorių eksperimentiniais rezultatais.

Praktinė vertė

Sukurta asmeninių kompiuterių klasteris įdiegus SCore programinę įrangą. Gauti rezultatai yra aktualūs norintiems lygiagrečiąją aplinką realizuoti SCore programinės įrangos pagrindu.

Efektyvūs lygiagretieji skaičiavimai atlikti naudojant patogesnę ir spartesnę, lyginant su šiuo metu taikomomis, SCore aplinkos lygiagretinimo priemone. Vadinasi, siekiant padidinti klasterio produktyvumą ir našumą, duomenų perdavimą AKK tinkle galima spartinti pritaikant Trunking technologiją.

Sukurtasis asmeninių kompiuterių klasteris leidžia vartotojui patogiai ir efektyviai atlikti tiriamuosius skaičiavimus pasirinkus *ab initio* būdą ir panaudojus adaptuotą skaičiavimų programą GAMESS. Gauti rezultatai aktualūs tiriant sprogstamųjų medžiagų molekulių savybes ir jų spektrus.

Ginamieji teiginiai

- Nauja lygiagrečiųjų skaičiavimų sistema – klasteris realizuota kvantinės chemijos tyrimams.
- GAMESS paketo galimybių gautų MPI-2 bibliotekos pagrindu išplėtimas ženkliai sumažinantis išteklių naudojimą atliekant sudėtingus skaičiavimus klasteriuose, dirbančiuose Linux OS.

- Klasterio patikimumo lygio patvirtinimas, lyginant su jame ištirtų sprogstamųjų medžiagų molekulių struktūrų ypatumus su paskelbtais spaudoje kitų autorių darbais ir eksperimentų rezultatais.
- Sprogstamųjų medžiagų molekulių elektroninės struktūros ypatumų (svyravimų modų, jų dažnių, šuolių intensyvumų, izotopinių spektrų poslinkių ir molekulių geometrijos) nustatymo būdas.

Darbo aprobavimas

Disertacijos darbo rezultatai pristatyti ir aptarti šiose mokslinėse konferencijose ir seminaruose:

- 34-ojoje Lietuvos nacionalinės fizikos konferencijoje, Vilnius, VPU, 2001.
- Tarptautiniame moksliniame seminare „Lygiagrečios skaičiavimo sistemos ir jų programinė įranga“, Vilnius, LKA, 2001.
- На XV-том международном семинаре „Лазеры и оптическая нелинейность“ 6–8 июня 2002 г., Минск, Беларусь.
- IX tarptautinėje konferencijoje „Laser applications in life science“, Vilnius, VU, 2002.
- XLIII Lietuvos matematikų draugijos konferencijoje, Vilnius, LKA, 2002.
- At the 6th World Congress of Theoretically Oriented Chemists WATOC 02, Lugano, Switzerland, 2002.
- Tarptautiniame moksliniame seminare „Baltic-Norwegian Defence Research seminar“, Norvegija, 2003.
- 35-ojoje Lietuvos nacionalinės fizikos konferencijoje, 2003.
- XLIV Lietuvos matematikų draugijos konferencijoje, Vilnius, VPU, 2003.
- Seminare „AK klasterio tobulinimo ir panaudojimo perspektyvos“, Vilnius, LKA, 2003.
- Seminare „Lygiagrečiųjų skaičiavimų architektūros optimizavimas sprogstamųjų medžiagų savybėms tirti“, MII, 2003.

- Seminare „Nuotolinės teršalų ir sprogstamųjų medžiagų detekcijos lazeriniais metodais tyrimų analizė“, LKA, 2003.
- XLV Lietuvos matematikų draugijos konferencijoje, Kaunas, ZUU, 2004.
- IV mokslinėje praktinėje konferencijoje „Informacinės technologijos 2005: aktualijos ir perspektyvos“, Alytus, Alytaus kolegija, 2005.
- XLVI Lietuvos matematikų draugijos konferencijoje, Vilnius, VU, 2005.
- Konferencijoje „Sprogstamųjų medžiagų ir šaudmenų, naudojamų poligonuose karinių pratybų metu, sprogimo produktų poveikio aplinkai vertinimas“, Vilnius, LKA, 2005.

Disertacijos tema publikuoti straipsniai

Disertacijos tema paskelbti moksliniai straipsniai:

1. Cicėnas S., Rakauskas R. J., Vošterienė S., Šulskus J. Theoretical Investigation of the Vibrational Spectra of Trinitrotoluene And 2,4,6-Trinitrophenol Molecules // Lietuvos fizikos žurnalas. ISSN 1392-1932. 2001, Vol. 41, No. 3, p. 221–225.
2. Šulskus J., Rakauskas R. J., Vošterienė S. Parallel Algorithms for Solving of Multidimensional Vibrational Schrödinger Equation // Lietuvos matematikos rinkinys. ISSN 0132-2818. 2002, T. 42, spec. nr., p. 345–350.
3. Šulskus J., Rakauskas R. J., Vošterienė S. PC Cluster Possibilities in Mathematical Modeling in Quantum Mechanical Molecular Computations // Nonlinear analysis: Modelling and Control. ISSN 1392-5113. 2002, Vol. 7, No. 2, p. 113–121.
4. Rakauskas R. J., Šulskus J., Vošterienė S. Simulation of Vibrational Spectra Peculiarities of Trinitrotoluene Molecule Using Parallel Calculations // Материалы XV международного семинара „Лазеры и оптическая нелинейность“ 6–8 июня 2002 г., Минск, Беларусь. с. 162–168.
5. Pankevičius E., Šulskus J., Rakauskas R. J., Vošterienė S. Investigation of PC Cluster Productivity in Quantum Mechanical

Molecular Computations // Lietuvos matematikos rinkinys. ISSN 0132-2818. 2003, T. 43, spec. nr., p. 190–193.

6. Vošterienė S., Šulskus J. GAMESS Calculations in Parallel Environment // Lietuvos matematikos rinkinys. ISSN 0132-2818. 2005, T. 45, spec. nr., p. 190–193.
7. S. Bekešienė, S. Sėrikovienė. Quantum Chemical Calculations by Parallel Computer from Commodity PC Components // Nonlinear Analysis: Modelling and Control. ISSN 1392-5113. 2007, Vol. 12, No. 4, p. 461–468.

Disertacijos apimtis

Disertaciją sudaro 156 puslapiai, 45 iliustracijos ir 38 lentelės.

Disertacijos struktūra yra tokia: įvadas, keturi pagrindiniai skyriai (įskaitant teorinę apžvalgą), darbo išvados, literatūros sąrašas, publikacijų sąrašas ir priedai. Disertacija parašyta anglų kalba.

Disertacijos turinys

Pirmame įvadiniam skyriuje aptariamas ir pagrindžiamas disertacijos temos aktualumas, nurodomi darbo tikslai ir jų sprendimo metodai, mokslinis naujumas ir ginamieji disertacijos teiginiai. Pateikiamas autoriaus mokslinių publikacijų ir pranešimų konferencijose sąrašas.

Antrame skyriuje pateikiamas matematinis sprendžiamo uždavinio modelis, supažindinama su kvantinės chemijos tyrimų metodais, kuriais rėmėsi sprogstamųjų medžiagų molekulių matematiniam modeliavimui taikyti skaičiavimai.

Trečiame skyriuje aprašomas sprogstamųjų medžiagų molekulių tyrimui naudojamas Lietuvos karo akademijoje sukurtas asmeninių kompiuterių klasteris TAURAS. Pirmoje šio skyriaus dalyje aprašoma panaudota klasterio kūrimui aparatinė įranga ir klasterio veikimo principai. Antroje dalyje pateikiama išsami apžvalga klasteryje naudotos SCORE programinės įrangos, kuri ypač svarbi disertacijoje iškeltiems uždaviniams spręsti. Taip pat pateikiami klasterio TAURAS pajėgumų lyginimai su kitais klasteriais, atlikus NAS NPB testus.

Ketvirtame skyriuje pateikti lygiagrečių skaičiavimų efektyvumui ir GAMESS programos veikimui įvertinti klasteryje, atlikti sprogstamųjų medžiagų molekulių skaičiavimai Beowulf ir SCORES lygiagrečiuose aplinkose. Aprašomas atliktas klasterio su SCORE programine įranga realizavimas, maksimaliai išnaudojant esamus aparatinės įrangos išteklius ir realizuojant MPI-1-PM bei Trunking technologiją. Taip pat

aprašomos išspręstos GAMESS paketo realizavimo problemos integruojant jį klasterio TAURAS aplinkoje.

Penktame skyriuje pateikiami sprogstamųjų medžiagų molekulių tyrimų skaičiavimų rezultatai, gauti klasteryje. Šie skaičiavimai, atlikti programa GAMESS, integruota ir realizuota klasteryje, pareikalavo daug kompiuterinių išteklių, nes tai netiesiniai matematinio modeliavimo uždaviniai, suvesti į tiesinių lygčių sistemų sprendimą, susiję su matricių elementų skaičiavimu, matricių sandaugomis ir matricių diagonalizavimu.

Šiame skyriuje taip pat aptarti kitų autorių viešai publikuoti moksliniuose straipsniuose skaičiavimų ir eksperimentinių tyrimų rezultatai, patvirtinantys klasterio TAURAS patikimumą ir atliktų skaičiavimų tikslumą.

2. Sprogstamųjų medžiagų matematinis modeliavimas

Sprogstamųjų medžiagų molekulių matematiniam modeliavimui buvo panaudotas kompiuterinis paketas GAMESS integruotas ir patobulintas klasterio TAURAS aplinkoje. Iš principo, tai netiesiniai matematiniai modeliavimo uždaviniai. Pastarieji suvedami į tiesinių lygčių sistemų sprendimą, todėl jie susiję su matricių elementų, matricių sandaugų ir matricių diagonalizavimo skaičiavimais. Šie uždaviniai labai sudėtingi ir reikalaujantys daug kompiuterinių išteklių, todėl skaičiavimams atlikti reikalingi superkompiuteriai arba klasteriai.

Kvantcheminiai molekulių tyrimai Hartrio ir Foko metodu

Hartrio ir Foko metodas – tai pats populiariausias molekulių ir atomų elektroninės struktūros tyrimo nepriklausomų elektronų modelis. Elektronų banginė funkcija – determinantas, sudarytas iš orbitalių, turinčių ir sukinių dalį.

Taigi molekulių banginė funkcija:

$$\Phi = (N!)^{-\frac{1}{2}} |\psi_1(x_1)\bar{\psi}_1(x_1)\dots\psi_n(x_{N-1})\bar{\psi}_n(x_N)| \quad (1)$$

čia

$$\psi_i = \phi_i \alpha ; \quad \bar{\psi}_i = \phi_i \beta \quad (2)$$

sukininės orbitalės. Erdvinės orbitales ϕ_i laikome ortonormuotomis.

Uždarnosios sistemos Hartrio–Foko funkcija yra tikrinė operatoriaus \hat{S}^2 funkcija su tikrine verte $S = 0$. Atomo ar molekulių energija gaunama suintegruvus pagal visų elektronų erdvinės koordinatės ir susumavus pagal sukinių koordinatės

$$E = 2 \sum_i \langle \Phi_i | h | \Phi_i \rangle + \sum_{i>j} \{ 2 \langle \Phi_i \Phi_j | g | \Phi_i \Phi_j \rangle - \langle \Phi_i \Phi_j | g | \Phi_j \Phi_i \rangle \} \quad (3)$$

Sprendžiant suderintinio lauko metodu, optimizuojamos erdvinės orbitalių dalys, siekiant gauti „geriausią“ vieno determinanto banginę funkciją variacinio principo požiūriu. Variacinį principą galima suformuluoti šitaip: hamiltoniano tikrinė reikšmė bet kokiai normuotai funkcijai φ negali būti mažesnė už mažiausią

tikrinę hamiltoniano \hat{H} reikšmę E_0 :

$$E_0 \leq E = \langle \varphi^* | \hat{H} | \varphi \rangle \quad (4)$$

Paprastai orbitalės yra išreiškiamos kaip tiesinė žinomų funkcijų kombinacija

$$\phi_i = \sum_k \chi_k T_{ki} \quad (5)$$

arba matriciniu pavidalu

$$\Phi = \chi \mathbf{T} \quad (6)$$

čia \mathbf{T} – ($m \times n$) matrica; m – bazinių funkcijų skaičius.

Matricos elementai vieno elektrono operatoriui yra

$$\langle \Phi^* | \sum_p h_p | \Phi \rangle = \sum_m E_m \quad (7)$$

čia

$$E_m = \langle \varphi_m^*(\mu) | h_\mu | \varphi_m(\mu) \rangle \quad (8)$$

Elektronų tarpusavio sąveika aprašoma termiais

$$\langle \Phi^* | \sum_{p < q} \frac{1}{r_{pq}} | \Phi \rangle = \sum_{m < n} J_{mn} - \sum_{m < n} K_{mn} \quad (9)$$

Matricos elementas

$$J_{mn} = \int \varphi_m^*(\mu) \varphi_n^*(\nu) \frac{1}{r_{\mu\nu}} \varphi_m(\mu) \varphi_n(\nu) d\bar{r}_\mu d\bar{r}_\nu \quad (10)$$

yra vadinamas Kolombo (Coulomb) integralu.

Matricos elementas

$$K_{mn} = \int \varphi_m^*(\mu) \varphi_n^*(\nu) \frac{1}{r_{\mu\nu}} \varphi_n(\mu) \varphi_m(\nu) d\bar{r}_\mu d\bar{r}_\nu \quad (11)$$

yra pakaitos integralas.

Pilna molekulinė energija:

$$E = \sum_m E_m + \sum_{m < n} J_{mn} - \sum_{m < n} K_{mn} = \sum_m E_m + \sum_{m < n} \langle mn | mn \rangle - \sum_{m < n} \langle mn | nm \rangle \quad (12)$$

Bazinės funkcijos

Bazinės funkcijos naudojamos molekulių elektroninės struktūros tyrimuose.

Naudosime šiuos žymėjimus:

\bar{r}, x, y, z - elektrono koordinatės, \bar{R}_a, X_a, Y_a, Z_a - branduolio koordinatės, $\bar{r}_a = \bar{r} - \bar{R}_a$; $Y_{L,M}(\Omega_{\bar{r}_a})$ - normuota sferinė funkcija (koordinatinių centras - branduolys a).

Dekartinės Gauso funkcijos (DGF):

$$\varphi^{DGF}(\bar{r}_a) = N^{DGF}(\xi, i, j, k) \times (x - X_a)^i (y - Y_a)^j (z - Z_a)^k \exp\left(-\xi |\bar{r} - \bar{R}_a|^2\right), \quad (13)$$

$$N^{DGF}(\xi, i, j, k) = \left(\frac{2\xi}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}} \left[\frac{2^{2(i+j+k)} \xi^{i+j+k}}{(2i-1)!!(2j-1)!!(2k-1)!!} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (14)$$

Sferinės Gauso funkcijos (SGF):

$$\varphi^{SGF}(\bar{r}_a) = N^{SGF}(\xi, n, l, m) \times |\bar{r} - \bar{R}_a|^{2n+1} Y_{l,m}(\Omega_{\bar{r}_a}) \exp\left(-\xi |\bar{r} - \bar{R}_a|^2\right) \quad (15)$$

$$N^{SGF}(\xi, n, l, m) = \left(\frac{2\xi}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} 2\sqrt{2\xi} \left[\frac{2^{2(2n+1)} \xi^{2n+1}}{(4n+2l+1)!!} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (16)$$

Sleiterio funkcijos (SF):

$$\varphi^{SF}(\bar{r}_a) = N^{SF}(\xi, n, l, m) \times |\bar{r} - \bar{R}_a|^{n-1} Y_{l,m}(\Omega_{\bar{r}_a}) \exp\left(-\xi |\bar{r} - \bar{R}_a|\right), \quad (17)$$

$$N^{SF}(\xi, n, l, m) = (2\xi)^{n+\frac{1}{2}} \left[\frac{1}{(2n)!} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (18)$$

Harmoninio osciliatoriaus funkcijos (HOF):

$$\varphi^{HOF}(\bar{r}_a) = N^{HOF}(\xi, n, l, m) \times |\bar{r} - \bar{R}_a|^l L_n^{l+\frac{1}{2}}(2\xi r_a^2) Y_{l,m}(\Omega_{\bar{r}_a}) \exp\left(-\xi |\bar{r} - \bar{R}_a|^2\right) \quad (19)$$

$$N^{HOF}(\xi, n, l, m) = (2\xi)^{\frac{1}{2}+\frac{5}{4}} \left[\frac{n!}{\xi \Gamma\left(n+l+\frac{3}{2}\right)} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (20)$$

čia $L_n^{l+\frac{1}{2}}(2\xi r_a^2)$ – Lagerio polinomas

Vietoje kompleksinių sferinių funkcijų galima naudoti realias sferines funkcijas

$$S_l^{m,q}(\Omega_{\bar{r}_a}) = \begin{cases} \frac{1}{2}(q+1, q-1)(-1)^m \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{l,m}(\Omega_{\bar{r}_a}) + q(-1)^m Y_{l,-m}(\Omega_{\bar{r}_a})), m \neq 0 \\ Y_{l,0}(\Omega_{\bar{r}_a}), m = 0 \end{cases} \quad (21)$$

čia $(q+1, q-1)$ – kompleksinis skaičius $(q+1)+i(q-1)$; $q = \pm 1$.

Daugiakonfigūraciniame metode atsisakoma nuo viendalelio artinio ir taip atsižvelgiama į elektronų koreliaciją. Daugiakonfigūracinės sistemos banginė funkcija sudaroma kaip tiesinė kombinacija viendaleliame artinyje gautų sistemos banginių funkcijų:

$$\Psi = \sum_l C_l \Phi_l, \quad (22)$$

čia Φ_l – vieno Sleiterio determinanto banginė funkcija.

Šiuo atveju suderintinio lauko procedūros metu varijuojami tiek koeficientai C_l , tiek ir koeficientai prie viendalelių atominių funkcijų, iš kurių sudarytas Sleiterio determinantas. Šis metodas reikalauja labai didelių kompiuterio išteklių, tačiau kai skleidimo narių yra daug, įgalina apskaičiuoti fizikinių dydžių vertes eksperimentinių rezultatų tikslumu.

3. Asmeninių kompiuterių klasteris

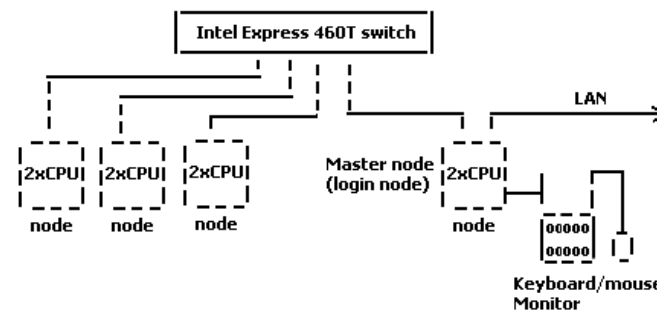
Lietuvos karo akademijoje sukurtam klasteriui buvo panaudota laisvai platinama programinė įranga ir mokomosios klasės heterogeninė aparatinė įranga – asmeniniai SMP kompiuteriai (po 2 centrinius procesorius kiekviename): 2 – AMD 1.2 GHz procesoriai, 8 – 733 MHz Pentium III procesoriai, 5 – 800 MHz Pentium III procesoriai ir 1 – 450 MHz Pentium II Celeron procesoriai; du jų turi 1024 MB RAM (tiesioginės kreipties atminties), kiti – 768 MB RAM, visi turi 20 GB diskus.

Asmeniniuose kompiuteriuose įdiegta standartinė Red Heat 7.3 – Linux operacinė sistema (OS). Žemiau, 1 pav., yra parodyta TAURO schema ir 1 lentelėje – trumpa aparatinės įrangos specifikacija.

1 lentelė. Asmeninių kompiuterių klasterio specifikacija

Klasterio kūrimo principai	Panaudota turima aparatinė įranga
Mazgų skaičius	16
Bendras procesorių skaičius	32
Bendras pajėgumas (GFlops)	30,96
Bendra atmintis (GB)	12
Bendra disko atmintis (GB)	320
Sujungimo technologija	Fast Ethernet
Operacinė sistema	Linux
Operacinės sistemos išplėtimas	SCore
Lygiagretinimo programinė įranga	SCore
Pagrindinė taikymų sritis	Balistika, medžiagų mokslas, kvantinė molekulių mechanika, chemija

Visi klasterio kompiuteriai startuoja iš asmeninių standžiųjų diskų. Bendras klasterio pajėgumas yra 30.96 Gflops; bendra atmintis – 12 GB; bendra diskų talpa – 320 GB. TAURAS užregistruotas klasterių top500 sąraše, tad jo parametrus galima palyginti su kitais klasteriais [1].



1 pav. Asmeninių kompiuterių klasterio schema.

Visi asmeniniai kompiuteriai (AK) sujungti į lokalų Fast Ethernet (100 Mb/s) tinklą naudojant Intel Express 460T komutatorių. Adresų sritis privačiam tinklui yra nuo 192.168.0.0 iki 192.168.254.0, todėl niekas negali iš išorės tiesiogiai jungtis prie šio tinklo, taip užtikrinamas normalus darbas.

Klasterio valdymui naudojamas „registracijos vardo mazgas“ su klaviatūra, vaizduokliu ir pele. Kiti mazgai gali būti be išorinių įrenginių (be vaizduoklio, klaviatūros ar pelės), bet šiuo konkrečiu atveju klasteris TAURAS yra sudarytas kaip mokomoji klasė, kur visi kompiuteriai yra ne tik klasterio mazgai, bet naudojami ir mokymo tikslams.

Klasterio įdiegimo procedūra

Klasterių įdiegimas yra sudėtingas procesas, reikalaujantis gilių žinių apie kompiuterių architektūrą, operacinę sistemą (OS) ir tam tikras klasterių technologijas. Sudėtinga procedūra yra klasterio aparatinės įrangos technologijų integracija, nes jungiant sistemų versijas atsiranda komponentų tarpusavio priklausomybė. Sudėtingiausias yra nehomogeninių klasterių kūrimas iš esamos aparatinės įrangos. Konstruojant tokio tipo klasterius pagrindinis vaidmuo tenka lygiagrečioms skaičiavimams naudojamai programinei įrangai.

Klasteris TAURAS sukurtas panaudojus SCore programinę įrangą, pasirinktai operacinei sistemai panaudojus tinkamą failą iš internetinio puslapio: <http://www.pccluster.org/score/dist/pub/>.

SCore sistema įdiegiama iš šaltinio dviem būdais – pasirenkant reikiamus komponentus individualiai arba EIT įdiegimo įrankiu.

Įdiegiant individualiai pasirinktas programinės įrangos komponentes, iš pradžių į visus mazgus ir į „pagrindinį“ mazgą įdiegiama pasirinkta Linux operacinės sistemos versija, o tik po to įdiegiama SCore programinė įranga.

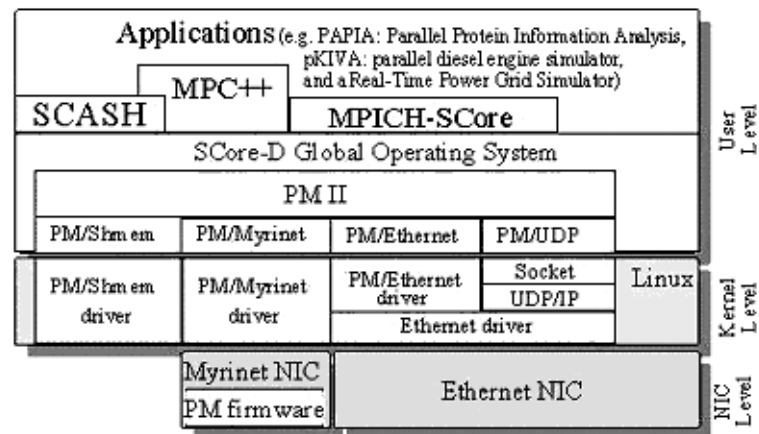
Nusprendus įdiegti klasterį EIT įrankiu, būtina įdiegti Linux OS tiksliai į „pagrindinį“ mazgą. Kitiems mazgams OS įdiegiama automatiškai. EIT įdiegimo būdas turi grafinį instaliavimo vadovą, tokiu būdu galima stebėti visą procesą, be to, tuo pačiu metu galima įdiegti iš karto 4 mazgus, todėl įdiegimas ir konfigūracija užtrunka trumpiau.

Klasteriui TAURAS iš 16 kompiuterių sukurti reikėjo 17 kompiuterių. Tačiau įdiegiant SCore programinę įrangą klasterio pagrindiniu tinklo kompiuteriu buvo paskirntas vienas iš skaičiuojamųjų mazgų, todėl užteko ir 16 kompiuterių.

Real World Computing Partnership (RWCP) projektas

Klasteris nuo tinklo kompiuterizuotų darbo vietų skiriasi: saugumu, sistemos administravimui ir lygiagrečių užduočių paleidimui naudojama programine įranga. Asmeninių kompiuterių klasteriai gali būti efektyviai panaudoti, jei programinė įranga visiškai panaudoja aparatinės įrangos architektūrą. Todėl labai svarbu pasirinkti lygiagrečiam naudojimui tinkamą programinę įrangą.

Klasteryje panaudota SCore programinė įranga buvo kuriama ir tobulinama Japonijoje RWCP nuo 1992 m. iki 2002 m. Šiuo metu ji perduota PC Cluster konsorciui [2].



2 pav. SCore sistemos programinės įrangos 5-oji versija.

SCore sistemos programinės įrangos architektūra

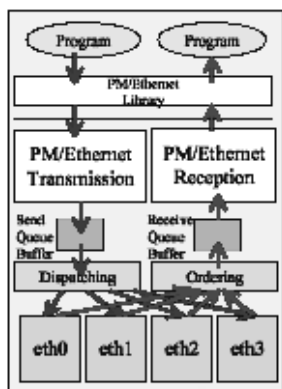
SCore sistemos programinė įranga integruota į Linux OS iš esmės nekeičiant OS branduolio, bet išplečiant jo galimybes papildomos tvarkyklės integravimu. Klasteriai su SCore programine įranga komunikacijai naudoja PM II greitą biblioteką, skirtą spartinti duomenų apsikeitimą. PM II didina duomenų srauto pralaidumą ir mažina gaisiaties laiką, tokiu būdu didindama klasterio darbo našumą. SCore sistemos programinė įranga palaiko ir sujungia skirtingų aparatinės architektūros tipų tinklus.

2 pav. pavaizduota SCore sistemos programinės įrangos veikimo schema:

- Žemiausiame lygyje yra komunikacijų biblioteka PM. **PM II** tvarkyklės Myrinet'ui, Ethernet'ui, UDP, Shmem.
- **SCore-D** vartotojo lygio pagrindinė operacijų sistema, leidžianti naudoti klasterio išteklius. Score-D pagalba daugiaprocesorinių sistemų klasteriai, heterogeniniai klasteriai palaikomi taip pat gerai kaip ir homogeniniai. Score-D palaiko programų pertraukimų registravimą, todėl visos vartotojų programos gali būti nutraukiamos ir vėl sėkmingai tęsiamos toliau.
- **SCASH** užtikrina paskirstytos bendrosios atminties naudojimą PM II pagalba.
- **MPICH** – tai MPI biblioteka, naudojanti PM II.

- MPC++ programavimui skirta aplinka su C++ bibliotekomis. Score-D parašyta MPC++ pagalba.

Trunking tinklo technologija PM/Ethernet



3 pav. Trunking tinklo technologijos veikimo schema.

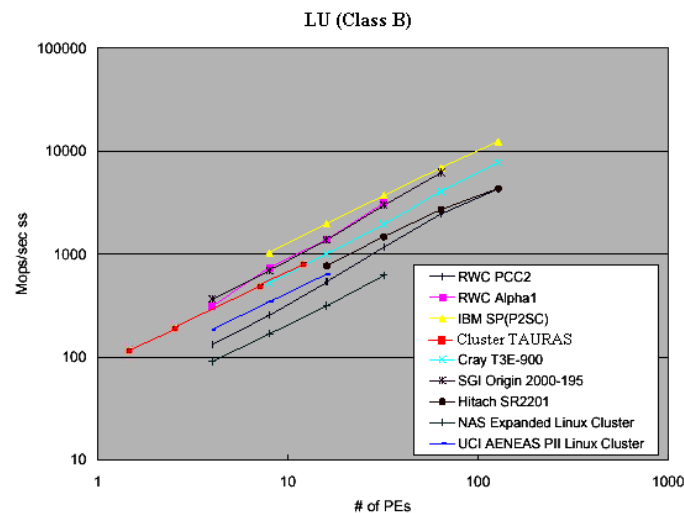
Score programinės įrangos siūloma Trunking technologija yra labai efektyviai taikoma klasterių aplinkoje, kur pastaroji sprendžia vieną iš svarbiausių šios aplinkos trūkumų – sumažina duomenų perdavimo gaisaties laiką, palaiko aukštą tinklo pralaidumą sudėtinio tinklo pagalba.

Trunking technologijos tvarkyklės darbas schematiškai pavaizduotas 3 pav. Taikant šią technologiją galima padidinti klasterio skaičiavimo pajėgumą, išplečiant kiekvieno klasterio mazgo tinklą iki 4 tinklo kortų. Pranešimo perdavimo metu sistema pati parenka automatiškai tinklo kortą (TK), pakeičia jos tinklo adresą į aparatinės įrangos prieigos kontrolės adresą (MAC adresą), kreipiasi ir pateikia pranešimą TK'os tvarkyklei. Pranešimo priėmimo metu tinklo tvarkyklė MAC adresus surūšiuoja ir sutikrina gautų pranešimų eilę.

NAS lygiagretieji testai

Numerical Aerospace Simulation (NAS) lygiagretieji etaloniniai testai, tai 8 programos, skirtos superkompiuterių ir klasterių pajėgumams įvertinti. Jie išmatuoja viską apimančių sistemos įrenginį. NPB programos skirstomos į klases: S, W, A, B, C ir D, kurios skiriasi testavimui skirtų duomenų dydžiu. Klasė S naudoja mažiausią, o klasė D didžiausią duomenų dydį. NAS testai yra dviejų tipų – branduolio arba taikomieji testai, priklausomai nuo to, ką testuoja: centrinį procesorių, atmintį ar tinklą. Branduolio etaloniniai testai yra numatyti Linux OS branduoliui įvertinti. Taikomieji etaloniniai testai daugiau skirti CPU ir RAM panaudojimui tirti.

Klasteryje TAURAS buvo atlikti 5 iš siūlomų 8 NAS NPB 2.3 versijos testų. Žemiau, 4 pav., pateikiami LU etaloninio testo rezultatai, grafiškai pavaizduoti ir palyginti su žinomų superkompiuterių rezultatais.



4 pav. Klasterio TAURAS NAS NPB skaičiavimų rezultatai sprendžiant LU (klasės B) testus ir žinomų superkompiuterių yra iš [2].

Atlikti testai patvirtina, kad kompaktiškas, sukurtas iš ribotos galios aparatinės įrangos AK klasteris, naudojantis Score programinės įrangos sistemą, gali būti plačiai naudojamas įvairiose srityse. Tokio tipo klasteriai, kaip TAURAS, gali konkuruoti su žinomais komerciniais klasteriais ir pasiekti gerų rezultatų.

4. AK klasterio našumo tyrimas

Klasterio našumo tyrimas, siekiant realizuoti klasterį, kuriame galima būtų maksimaliai išnaudoti esamus išteklius sudėtinga procedūra, reikalauja daug žinių ir gebėjimų.

Vienas iš šios disertacijos tikslų – parodyti, kad naudojant klasterių sistemoms Score programinę įrangą, kurioje yra speciali komunikacijai skirta programa PM II, galima naudoti plačiai paplitusius tinklus, tokius kaip Fast Ethernet ar Gigabit Ethernet, ir pasiekti aukštų rezultatų lyginant su kitais superkompiuteriais, ką rodo NAS NPB etaloniniai testai.

GAMESS paketas

Yra žinoma ne mažai programų ar programų kompleksų, skirtų *ab initio* skaičiavimams. Populiarsnės: Gaussian 94, Gaussian 98, Jaguar, Spartan, Ochem, InsightII, Discovery ir HyperChem. Tyrimams atlikti pasirinktas GAMESS paketas, nes jis yra laisvai platinamas ir vartotojas gali pritaikyti išeities kodą pagal poreikius. Naudojant GAMESS programų paketą, teorinius tyrimus galima atlikti taikant šiuos metodus:

1. Hartrio ir Foko (RHF, UHF, ROHF, GVB).
2. Perturbacijų (CI, MP2) banginių funkcijų pataisų apskaičiavimui.
3. Tankio funkcionalo.
4. Pusempirinius MNDO, AM1, PM3 RHF, UHF arba ROHF.

Be skaičiavimų, šiais pagrindiniais metodais GAMESS paketu optimizuojama tiriamosios molekulės geometrija, t. y. surandamas stabiliausias molekulės darinys, pilnoji molekulės potencinė energija ir pan. Taip pat galima įvertinti darinių spektrus įvairių bangų ilgių diapazonuose.

Paskirstytosios atminties sąsaja

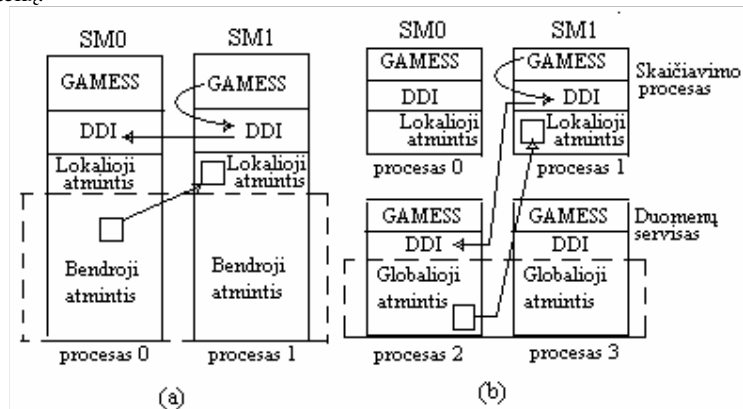
GAMESS lygiagretusis kodas naudoja paskirstytosios atminties sąsają (DDI – Distributed Data Interface). Pranešimams perduoti ši sąsaja naudojasi žemo lygio komunikaciniais protokolais: SHMEM, TCP/IP ar MPI-1.

Kvantinės chemijos programinis kodas GAMESS pakete yra atskirtas nuo pranešimų perdavimo funkcijų. Visas pranešimų perdavimo programinis kodas yra surašytas tam tikroje rinkmenoje, kuri, transliuojant programinį kodą į mašininį, yra naudojama kaip DDI (paskirstytosios atminties) biblioteka. Kiekvienos funkcijos pavadinimas paskirstytosios atminties bibliotekoje prasideda DDI raidėmis. Taip yra lengviau atskirti kvantinių uždavinių skaičiavimo kodą nuo paskirstytosios atminties bibliotekos funkcijų, naudojamų lygiagrečiojo skaičiavimo metu.

DDI bibliotekoje pačios svarbiausios funkcijos yra šios: DDI_CREATE, DDI_PUT, DDI_GET, DDI_ACC ir DDI_DESTROY. DDI_CREATE ir DDI_DESTROY funkcijos sukuria arba sunaikina globaliosios atminties matricą. Globalioji atmintis – tai bendroji atminties sritis visiems skaičiuojamiesiems mazgams, toliau – SM, kurie sudaro lygiagrečiąją sistemą. Šios atminties apdoravimo trys pagrindinės funkcijos yra DDI_GET, DDI_PUT ir DDI_ACC. DDI_GET funkcija nuskaito atminties elemento vertę, o DDI_PUT funkcija yra naudojama duomenims įrašyti į pasirinktą bendrosios atminties sritį. Prie pasirinktos bendrosios atminties ląstelės vertės galime pridėti kitos ląstelės reikšmę pasinaudoję globaliosios atminties tvarkymo funkcija DDI_ACC.

Superkompiuteryje Cray T3E, DDI biblioteka naudojasi šiais mašinai sukurtos SHMEM bibliotekos pranešimų perdavimo funkcijomis. Ši DDI bibliotekos versija vadinama DDIT3E. Cray tipo superkompiuteryje SHMEM bibliotekos pranešimų

perdavimo funkcijos yra realizuotos ir specialiai pritaikytos šio tipo mašinoms, todėl didžiausia GAMESS paketo skaičiavimo sparta pasiekama, kai jis naudoja DDIT3E biblioteką.



5 pav. GAMESS programos veikimo modeliai: (a) kai DDI sąsaja naudoja SHMEM biblioteką; (b) GAMESS programos veikimo modelis kompiuterių klasteryje.

5 a pav. vaizduoja GAMESS programos dviejų procesų modelį ir parodo, kaip bendrosios atminties bibliotekos DDI_GET funkcija nuskaito atminties „porciją“ iš bendrosios atminties srities į SM vidinę atmintį. Kai skaičiuojamajame mazge 1 (SM 1) GAMESS programa nusprendžia, kad jai reikia duomenų iš globaliosios atminties, ji iškviečia DDI_GET funkciją. Ši funkcija nustato, kuriame SM šie duomenys yra. Tai palengvina GAMESS programos projektavimą, nes programos lygmenyje nereikia žinoti, kur tie duomenys yra ir kaip juos iš ten paimti arba juos ten padėti. Visa tai atlieka DDI bibliotekoje esančios funkcijos.

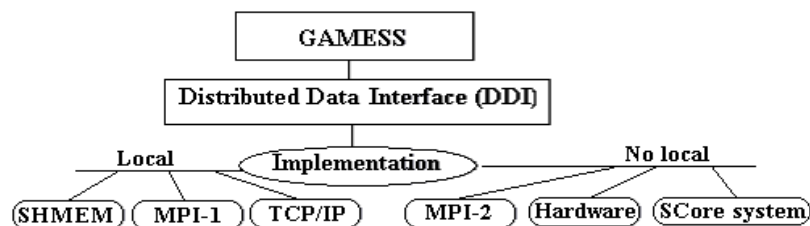
Kompiuterių klasteriuose nėra SHMEM pranešimų perdavimo bibliotekos. Norint naudoti globaliąją atmintį, būtina galimybė pertraukti skaičiuojamąjį procesą nutolusioje mašinoje, kad būtų galima atlikti skaitymo ar rašymo operacijas globaliojoje atmintyje. Šiai problemai išspręsti klasteriuose buvo pasirinktas dviejų procesų modelis. Grafinis šio modelio vaizdas parodytas 5 b pav.

Vienas procesas, pavadintas „skaičiuojamuoju“, valdo GAMESS programos lokalią atmintį tame skaičiuojamajame mazge. Antras procesas, pavadintas „duomenų servisu“, valdo globaliosios atminties dalį, kuri yra tame pačiame skaičiuojamajame mazge kaip ir „skaičiuojamasis“ procesas. Šis antrasis procesas susikuria kartu su „skaičiuojamuoju“ ir „miega“ tol, kol gauna duomenų skaitymo užklausą. Iš 5 pav. matome, kad „skaičiuojamasis“ procesas yra visiškai atskirtas nuo globaliosios atminties tvarkymo serviso ir nieko „nežino“ apie trūkius. Tik operacinė sistema pristabdo skaičiuojamąjį procesą tam tikram laikui, kai yra iškviečiama DDI funkcija. Atminties apsaugojimo funkcija realizuota kuriant vieną

„duomenų serviso“ procesą vienam „skaičiuojamajam“ procesui ir leidžia veikti tik vienam „duomenų serviso“ procesui vienu metu.

GAMESS paketo integravimas klasteryje

GAMESS paketo integravimas SMP tipo klasteriuose, naudojančiuose specifinę lygiagretinimui skirtą aplinką, yra sudėtingas, nes DDI vartojimas paskirstytos atminties (vietinės ar globaliosios) tiesiogiai susijęs su klasterio architektūra (aparatinė įranga) ir naudojamomis lygiagrečiųjų skaičiavimų bibliotekomis. Schematiškai DDI veikimo principai pavaizduoti 6 pav.



6 pav. GAMESS paketo DDI sąsajos veikimo schema.

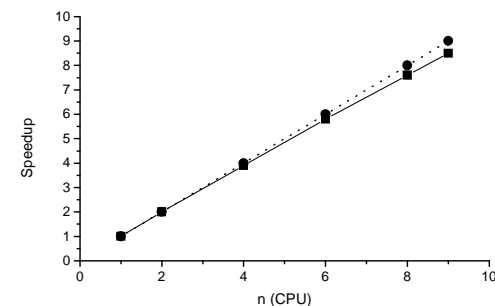
Lokalus GAMESS lygiagretusis kodas naudoja paskirstytosios atminties sąsają (DDI – Distributed Data Interface), be pakeitimų pranešimams perduoti ši sąsaja naudojami žemo lygio komunikaciniais protokolais: SHMEM, TCP/IP, ar MPI-1.

Nelokalus GAMESS lygiagretusis kodas taip pat naudoja paskirstytosios atminties sąsają (DDI), bet su padarytais pakeitimais, kurių standartinis GAMESS paketas neturi.

Siekiant paspartinti lygiagrečiuosius skaičiavimus klasteryje, panaudota SCore sistemos programinė įranga ir sumažintas duomenų perdavimo gaisaties laikas.

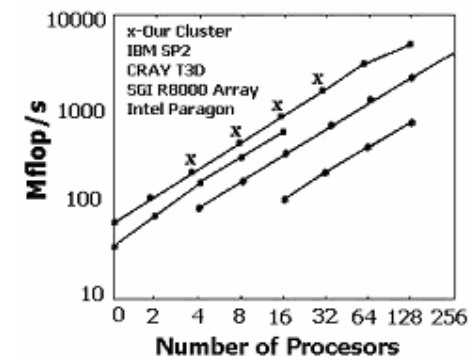
Beowulf aplinkos našumo tyrimas

Beowulf tipo klasteriuose GAMESS programa skaičiavimams atlikti naudoja MPI-1 bibliotekas, tai yra „local“ DDI integracija, palaikanti būtinas komunikacijų operacijas. Kadangi TAURAS sukurtas naudojant Linux OS, galime asmeninius kompiuterius panaudoti ir kaip Beowulf tipo klasterį. Norėdami įvertinti skaičiavimo laiko priklausomybę didinant CPU skaičių Beowulf aplinkoje, atlikome trinitrotololo molekūlės testinius skaičiavimus HF artinyje 6-31G* bazėje.



7 pav. Klasterio užduoties atlikimo laiko pagreitėjimo priklausomybė nuo CPU skaičiaus, tiriant trinitrotolueno molekūlės elektroninę struktūrą HF artinyje (6-31G* bazė). Punktyrinė linija yra užduoties atlikimo laiko pagreitėjimo tiesinė priklausomybė nuo n , išsitiesinė linija – klasterio TAURAS rezultatai.

Testavome dviejų procesorių 9 mazgus (2xCPU 733 MHz). Klasterio užduoties atlikimo laikas mažėja lyginant su laiku vienam CPU, padalytu iš būtino išspręsti tą pačią užduotį laiko su n CPU, beveik tiesiškai kaip panašiose grupėse [3]. Žinoma, fizinis tinklo pajėgumas klasteryje lėtina susisiekimo greitį, todėl negalima pasiekti tiesinio pagreitėjimo rezultato (7 pav.).



8 pav. Linpack etaloninio testo tiesinės sistemos sprendimas ($n = 25000$). Rezultatai kitų superkompiuterių yra iš [4].

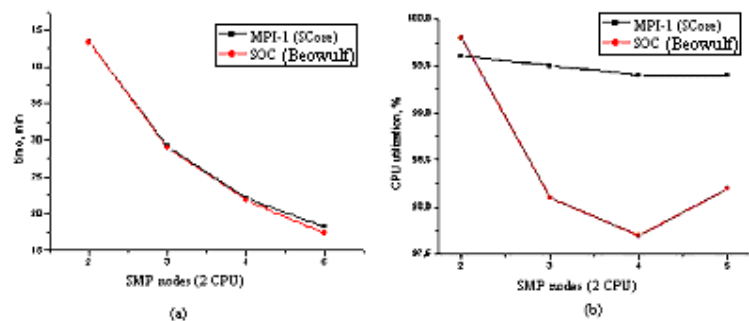
LINPACK etaloninio testo skaičiavimai, atlikti klasteryje TAURAS, leido palyginti jį su kitais superkompiuteriais. Buvo spręsta 25000 eilės tiesinė lygčių sistema (8 pav.). Šis etaloninis testas nustato slankaus kabelio operacijų per sekundę greitį. TAURAS atlikto užduotį per 2080,77 s ir buvo pasiektas – 5 007 Gflops pajėgumas. Šis rezultatas yra aukštesnis negu IBM RS/6000 SP2 superkompiuterio, nors klasterio kaina yra dešimtimis kartų mažesnė nei superkompiuterio IBM RS/6000 SP2.

Skaičiavimai su IBM RS/6000 SP2 superkompiuteriu su 4 mazgais ir 512 MB tiesioginės kreipties atmintimi rodo, kad analogiškos užduotys klasteryje yra išspręstos beveik 25 kartus greičiau. Tačiau rezultatas gali būti ir kitoks, nes klasteris yra panaudotas kaip „asmeninis“ kompiuteris, o SP2 yra daugelį vartotojų aptarnaujantis superkompiuteris.

SCore programinės įrangos našumo tyrimas

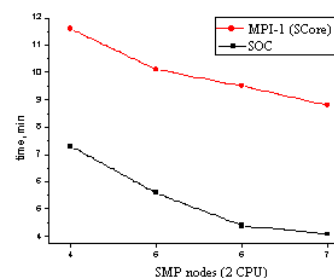
Klasterio našumui įtaką turi ir naudojamo tinklo pajėgumas. Todėl SCore programinė įranga klasteryje TAURAS buvo pasirinkta dėl komunikacijos naudojamos papildomos PM II tvarkyklės, nes ji pagreitina duomenų apsikeitimą tarp skaičiuojamųjų mazgų.

Atvirojo kodo GAMESS paketas suteikia galimybę atlikti pakeitimus, pritaikant jį individualiai aplinkai. Todėl, norint nustatyti sprendimo laiko priklausomybę nuo CPU mazgų skaičiaus klasteryje TAURAS panaudojant MPI-1 SCore aplinką, buvo padaryti pakeitimai GAMESS pakete ir atlikti testiniai skaičiavimai HF artinyje, 6-31G* bazėje. SCore programinės įrangos našumui įvertinti ir palyginti tie patys skaičiavimai atlikti ir Beowulf aplinkoje naudojant komunikacinį protokolą TCP/IP.



9 pav. Skaičiavimo laiko priklausomybė nuo mazgų skaičiaus klasteryje, (a) tiriant trinitrotolueno molekulių elektroninę struktūrą (HF artinyje 6-31G*bazė); (b) CPU naudojimas abiejose aplinkose.

9 a pav. parodyti gauti rezultatai atliktus testus abiejose aplinkose. Buvo pasiekta panaši skaičiavimų sparta, nes skaičiavimai HF metodu gali būti atliekami keliais būdais, atsižvelgiant į tai, kuriuos klasterio išteklius siekiama naudoti. Tiesioginis HF skaičiavimo metodas iš naujo apskaičiuoja integralus kiekvienam kartojimui, ir atskiri mazgai tik įvertina daugiacentrių integralų blokus, tad šiam metodui reikia labai daug CPU ir RAM išteklių, todėl pasiekiamas labai geras CPU naudojimas, kas parodyta 9 b pav. Tačiau skaičiuojant šiuo metodu tinklas yra neapkraunamas 9 a pav. Tad parenkant skaičiavimo metodą reikia žinoti, kaip jis bus atliekamas klasteryje ir kokių išteklių jam reikės.



10 pav. Skaičiavimo laiko priklausomybė nuo mazgų skaičiaus klasteryje, tiriant trinitrotolueno molekulių elektroninę struktūrą (HF+MP2 artinyje, 6-31G*bazė).

Panaudoję trikdžių teoriją (MP2), įvertinome klasterio pajėgumus SCore aplinkoje. MP2 metodas yra plačiai taikomas kvantinėje chemijoje siekiant gauti tikslią informaciją apie molekulių kinetinę energiją ir infraraudonuosius spektrus. MP2 gradientas buvo parinktas kaip etaloninis testas todėl, kad algoritmas vykdo didelį kiekį vietinių ir tolimų paskirstytų duomenų operacijų.

Skaičiuojant HF+MP2 ypač apkraunamas tinklas, bet gauti skaičiavimo rezultatai rodo, kad Beowulf aplinkoje GAMESS skaičiavimai vyksta sparčiau nei SCore aplinkoje (10 pav.). Taip yra todėl, kad SCore programinė įranga visus į mazgą atsiųstus procesus laiko vykdančiais, tai lėtina skaičiavimą nepriklausomai nuo greitesnio tinklo susisiekimo SCore sistemoje. Beowulf aplinka įvertina teisingai GAMESS paketo veikimo modelį: padalindama procesus į skaičiavimo ir „duomenų serviso“ dalis, todėl skaičiavimai atliekami daug sparčiau.

Lygiagrečiųjų skaičiavimų spartinimas

Lygiagretiesiems skaičiavimams vienas iš svarbių veiksnių yra tinklo pralaidumas, nes klasteriuose keli išvien dirbantys procesoriai, vykdydami užduotis, turi sugebėti kaip galima greičiau susisiekti ir apsikeisti informacija. Todėl lygiagretieji skaičiavimai klasteryje TAURAS buvo atlikti išplečiant GAMESS

paketo veikimo principus klasteryje ir naudojant SCore aplinkos technologijas tinklo pajėgumui didinti.

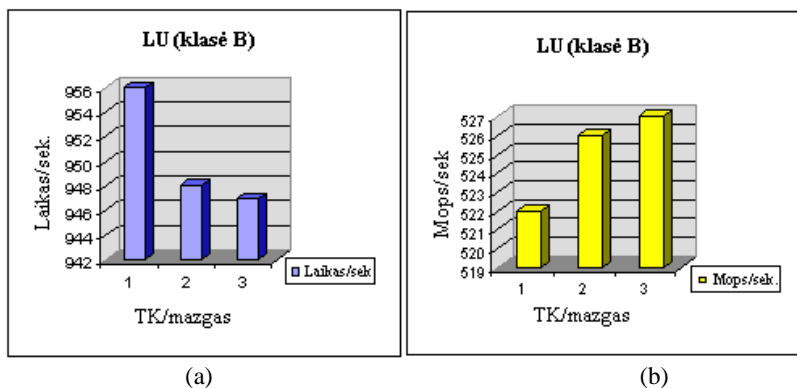
Tinklo programinės įrangos sąsaja

Kadangi tinklas yra vienas iš komponentų klasterio pajėgumui didinti, tad, siekiant paspartinti skaičiavimus klasteryje TAURAS, buvo panaudota SCores lygiagrečioji aplinka, realizuota MPI-1-PM technologija, atliekanti patikimą ir greitą duomenų susisiekimą, vietoje įprastai naudojamo TCP/IP.

Trunking tinklo technologijos įvertinimas

Siekiant padidinti pralaidumą tinkle, SCore sistemos programinė įranga siūlo naudoti Trunking technologiją, apjungiančią daugialypį tinklo kortų tinklą į vieną. Siekiant įvertinti klasterio TAURAS pajėgumo priklausomybę nuo tinklo, klasteryje buvo panaudota ir įvertinta ši technologija.

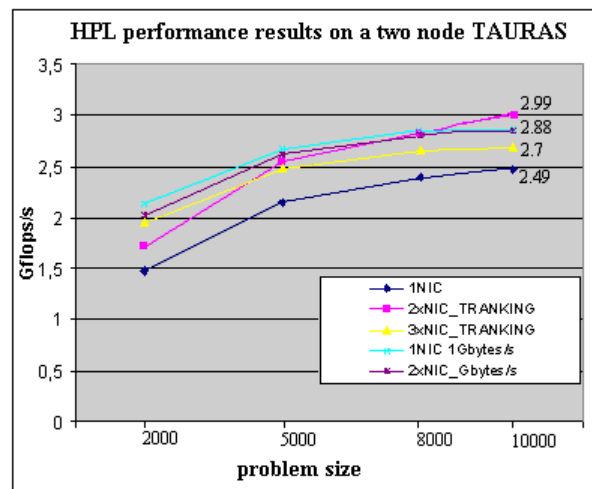
NAS NPB testai parodo Trunking technologijos efektyvumą. Klasteryje trumpėja testo atlikimo laikas, kuris tiesiogiai susijęs su persiunčiamos informacijos greičiu, ir didėja skaičiuojamieji klasterio pajėgumai (Mops/sek.). 11 a pav. parodyta, kaip keičiasi nuo panaudotų tinklo kortų (TK) skaičiaus testo atlikimo laikas, taip pat klasterio pajėgumai 11 b pav. Šie rezultatai neginčijamai patvirtina tinklo įtaką klasterio darbui. NPB testui atlikti buvo naudojamos Intel EEP-RO100 ir 3Com 3C905B tinklo kortos.



11 pav. NAS NPB testo LU klasės B(102x102x102) realizacijai naudojant skirtingą skaičių TK: (a) laiko priklausomybė nuo TK skaičiaus, (b) slankaus kablelio operacijų atlikimo per sekundę pajėgumų priklausomybė nuo TK skaičiaus klasteryje.

HPL testas

HPL testas sprendžia tiesinę n eilės lygčių sistemą. Šis testas nustato lygiagrečiosios sistemos pajėgumą atliekant slankaus kablelio operacijas.



12 pav. HPL testo rezultatai klasteryje TAURAS naudojant Trunking technologiją.

Atliekant LINPACK testą, įtaką turi tinklo pajėgumas, todėl tą patį testą atlikus klasteryje TAURAS, naudojant Trunking technologiją Fast Ethernet ir Gigabit Ethernet tinkle, buvo gauti skirtingi rezultatai, grafiškai pavaizduoti 12 pav.

HPL testai atlikti su dviem dviprocėsoriniais klasterio TAURAS mazgais. Kiekvienu atveju atliktas HPL testas didinant lygčių sistemos eilę nuo 2000 iki 10000. Rezultatai rodo, kad naudojant Trunking technologiją klasterio pajėgumas yra 5 % didesnis lyginant su testo atlikimu paprastu būdu, o naudojant Gigabit Ethernet tinklą ir tinklo kortas Intel PRO/1000MT pajėgumas padidėja 13 %.

Šis rezultatas gali būti paaiškinamas tuo, kad HPL etaloninis testas tiesiogiai susijęs su tinklo naudojimu, tad geresnis tinklo pralaidumas ir sumažintas skaičiavimų informacijos apskaitinimo gaisaties laikas leidžia klasteriui atlikti daugiau slankaus kablelio operacijų per sekundę.

MPI-2 klasteryje

Tiriant sukurto klasterio našumą, buvo naudojama GAMESS programos versija Beowulf tipo klasteriams ir sukompiliuota programos versija, pritaikyta SCore aplinkai. Tyrimų rezultatai parodė, kad specifinėse klasterių aplinkose

skaičiavimams taikant GAMESS paketą atsiranda sunkumų. Kompiuterių klasteriuose GAMESS programos DDI sąsaja sukurta naudojantis MPI-1 bibliotekomis. MPI-1 standartas nenumato globaliosios atminties tvarkymo galimybės, tad DDI bibliotekoje globaliosios atminties tvarkymo funkcijos yra „perdarytos“ naudoti MPI-1 standarte numatytomis pranešimų perdavimų funkcijomis. Dėl šios priežasties klasteriams pritaikytas GAMESS paketas susikuria po du procesus tam pačiam skaičiuojamajam mazgui. MPI-2 standarte jau yra numatytos globaliosios atminties tvarkymo funkcijos. Taigi naudojantis MPI-2 bibliotekomis, šių dviejų procesų vienam procesoriui būtų galima išvengti, tačiau kuriant DDI sąsają, MPI-2 standarto dar nebuvo.

Siekiant paspartinti klasteryje TAURAS lygiagrečiuosius skaičiavimus, buvo panaudotos MPI-2 standartinė biblioteka ir SCore sistemos aplinkos MP II ypatybės. MPI-2 susisiekimo bibliotekos palaiko vienašalį susisiekimo srautą, kad būtų galima pasiekti tolimą atminties prieigą (RMA). Programavimo modelio funkcionavimas panašus į naudojamą bibliotekos SHMEM, kurios pagrindu dirba Cray T3E sistema, nes SHMEM bibliotekos klasteriuose nėra, pritaikyta MPI-2 biblioteka.

GAMESS lygiagretusis kodas buvo realizuotas su vienu skaičiavimo procesu vienam centriniam procesoriui. Buvo įgyvendintas MPI-2 standartinės bibliotekos, globalios atminties valdymas, ko klasteriuose DDI standartas nedarė. Tokiu būdu buvo išplėstas informacijos persiuntimo standartas, kuris sumažino procesų skaičių vienam centriniam procesoriui.

Čia panaudotos tokios MPI-2 funkcijos:

- MPI_Win_create: Kolektyvinis informacijos srautas, sukuriantis bendrosios atmintinės buferį.
- MPI_Get, MPI_Put: Duomenų nuskaitymas nuo bendrosios atmintinės buferio.
- MPI_Win_fence: Vykdo kolektyvinę informacijos srauto sinchronizaciją.

Reikalavimai lygiagrečiųjų skaičiavimų klasteriui

Prieš atliekant realius tiriamuosius skaičiavimus GAMESS paketas suteikia galimybę patikrinti reikiamų išteklių poreikį suplanuotai užduočiai atlikti. Tam tik reikėtų lygiagrečiųjų skaičiavimų klasteryje pateikti įvesties failą, apibrėžtą grupėje \$CONTRL „EXETYP=CHECK“. Ši eilutė nurodo, kad reikia apskaičiuoti įvesties skyriuose numatytoms užduotims įvykdyti reikiamus išteklius, patikrinti ir įvertinti skaičiavimams pateiktus duomenis. Šis būdas, kuriuo nustatomi būtini ištekliai lygiagretiems skaičiavimams atlikti, yra labai patogus pradėdant naujus tiriamuosius darbus, nes padeda išvengti pasitaikančių klaidų ir neatitinkančių klasterio pajėgumo užduočių. Kadangi išteklių poreikis tiesiogiai priklauso nuo skaičiavimams

pasirinktų metodų ir bazinių funkcijų rinkinių tokiu būdu galima iš anksto sužinoti, kiek jų reikės. Atliekant patikslintuosius skaičiavimus ar sprendžiant modelinį uždavinį *a priori* galima žinoti klasterio mazgų skaičių bei suplanuoti darbų apimtį. Tokiu būdu ir yra sudaryta 3 lentelė.

3 lentelė. GAMESS paketo reikalavimai klasteriui TAURAS.

Bazė	Bazinių f-jų sk.	Artinys	Reikalinga RAM (MB)	Mazgų skaičius (CPU-2GB RAM)
TNT skaičiavimai				
6-311G(3d,1f,3p)	716	HF + MP2	7 320	4
6-311G(3d,1f,3p)+diffsp,+diffs	785	HF + MP2	8 776	5
6-311G(3d,1f,3p)+diffsp,+diffs	785	HF		
TZV (3d,1f,3p)	732	HF + MP2	7648	5
TZV(3d,1f,3p)+diffsp,+diffs	801	HF + MP2	9128	6
Modelinis uždavinys				
	903	HF + MP2	113 608	66
	1290	HF + MP2	492 496	224

5. Gautų rezultatų analizė

Skaičiavimų rezultatai didinant bazinių funkcijų skaičių

Įvertinant klasterio skaičiavimų pajėgumus buvo atlikta pilnas sprogstamosios 2,4,6-trinitrotoluene molekulės parametų skaičiavimas, atsižvelgiant į simetriją (C_1).

Skaičiuota Hartree-Fock metodu naudojant bazinių funkcijų aibę: 6-31G*(1d), 6-311G**(1d), 6-311G**(2d), 6-311G**(2d+1f), 6-311G**(3d+1f) ir 6-311G**(3d+1f+3p).

Atlikti skaičiavimai AKK TAURAS parodė, kad didinant bazinių funkcijų skaičių, atliekamų skaičiavimų apimtis didėja, nes jiems atlikti reikia vis didesnių klasterio išteklių. Gauti tyrimų rezultatai ir skaičiavimų trukmė, tiriant 2,4,6-trinitrotoluene molekulę, pateikti 4 lentelėje.

4 lentelė. Klasterio TAURAS skaičiavimo laikas SCORE aplinkoje atliekant 2,4,6-trinitrotolueno molekulės geometrijos optimizavimą Hartree-Fock artinyje ir didinant bazinių f-jų skaičių. Efektyvumas tirtas panaudojus 9 dviprosesorinius mazgus.

Bazė	Bazinių f-jų sk.	$E_{\text{tot.HF}}$, a.v.	Dipolinis mom., D	Skaičiavimų laikas	
				min	val.
6-31 G*(1d)	250	-880.117	1.759	146.9	2.45
6-311 G**(1d)	319	-880.326	1.785	247.4	4.12
6-311 G**(2d)	415	-880.365	1.702	555.0	9.25
6-311 G**(2d+1f)	575	-880.406	1.713	1511.7	25.20
6-311 G**(3d+1f)	671	-880.426	1.727	5349.8	89.16
6-311 G**(3d+1f+3p)	716	-880.432	1.716	6773.7	112.9

Atlikus skaičiavimus ir panaudojus skirtingą bazinių funkcijų derinį nuo 6-31 G* (su poliarizacinėmis d funkcijomis antro periodo elementams iš viso 250 bazinių funkcijų) iki 6-311 G** (su dviem poliarizacinėmis d funkcijomis antro periodo elementams) plius viena f funkcija ir difuzines s ir p funkcijas antro periodo atomams bei difuzines funkcijas vandenilio atomams (iš viso 770 bazinių funkcijų), galime daryti išvadą, kad su palyginti mažu klasteriu TAURAS, integravus SCORE lygiagretinimui skirtą programinę įrangą, galima atlikti visus būtinus molekulės tyrimui skaičiavimus Hartree-Fock lygmenyje. Todėl galima tvirtinti, kad AK klasteris, leidžiantis atlikti šiuolaikinius kvantcheminius tyrimus, yra gerai pritaikytas medžiagotyros uždaviniams spręsti.

2,4,6-trinitrophenolo molekulės tyrimas

Siekiant patvirtinti naujai sukurtos lygiagrečios aplinkos patikimumą, šiame skyriuje pateikiami klasteryje TAURAS atliktų sprogstamųjų medžiagų molekulių tiriamųjų darbų skaičiavimų rezultatai, kurie palyginti su kitų autorių gautais ir viešai publikuotais tiek skaičiavimų, tiek eksperimentų rezultatais. Skaičiavimų rezultatai patvirtina, kad realizuotas klasteris tinka sprogstamųjų medžiagų tyrimui.

Klasteryje TAURAS tirta 2,4,6-trinitrophenolo molekulė. Tyrimų tikslas – išsiaiškinti NO₂ grupių įtaką. Gauti skaičiavimo rezultatai palyginti su eksperimentu ir P. C. Chen skaičiavimų rezultatais [5]. Surasti HF/6-31* metodu TNP molekulės: ryšių ilgiai, kampai, diedraliniai kampai, dipolinis momentas ir energija yra pateikti lentelėse (5 lentelė). 2,4,6-TNP molekulės geometrija buvo optimizuota.

5 lentelė. 2,4,6-trinitrophenolo molekulės pusiausvyros ryšių ilgiai (Å) nustatyti HF/6-31G* metodu klasteriu TAURAS ir palyginti su P. C. Chen ir eksperimentu [5],[6].

Ryšys	HF/6-31G* [5]	HF/6-31G* (pakeista būseną) [5]	Eksperimentas [6]	HF/6-31G*
C1-C2	1.410	1.416	1.412	1.413
C2-C3	1.382	1.382	1.373	1.378
C3-C4	1.372	1.373	1.367	1.370
C4-C5	1.386	1.382	1.376	1.379
C5-C6	1.371	1.377	1.355	1.374
C1-C6	1.408	1.415	1.407	1.412
C1-O7	1.301	1.298	1.312	1.294
O7-H8	0.958	0.968	-	0.952
C2-X1	1.450	1.451	1.455	1.455
X1-Y1	1.206	1.206	1.227	1.200
X1-Y2	1.184	1.184	1.201	1.177
C3-X2	1.070	1.070	-	1.070
C4-X3	1.451	1.451	1.455	1.455
X3-Y5	1.192	1.192	1.214	1.186
X3-Y6	1.192	1.191	1.217	1.185
C5-X4	1.071	1.069	-	1.069
C6-X5	1.458	1.462	1.477	1.466
X5-Y9	1.195	1.196	1.183	1.189
X5-Y10	1.187	1.185	1.202	1.179
Y1-H8	1.789	1.761	-	1.750

Molekulių NT, DNT(4,6), DNT(2,4), DNT(2,6), DNT(4,5) tyrimai

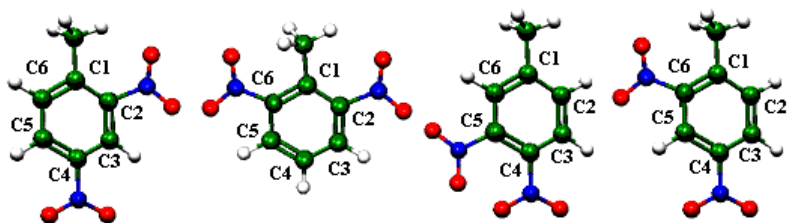
Kad iširtume klasterio TAURAS specifinės aplinkos pajėgumus atlikome sprogstamųjų medžiagų molekulių kvantcheminius tyrimus. Kadangi skaičiavimams buvo naudojama specifinė aplinka, tai reikėjo įsitikinti, kad molekulių modeliavimo skaičiavimai atliekami teisingai klasteryje TAURAS, o gauti rezultatai pakankamai artimi rezultatams, gautiems žinomais superkompiuteriais.

Skaičiavimai atlikti HF/6-31G* metodu (su poliarizacinėmis d funkcijomis antro periodo elementams). Šis tyrimas gali pateikti vertingą informaciją apie aromatinius nitro mišinius. Gauti rezultatai buvo palyginti su kitų autorių

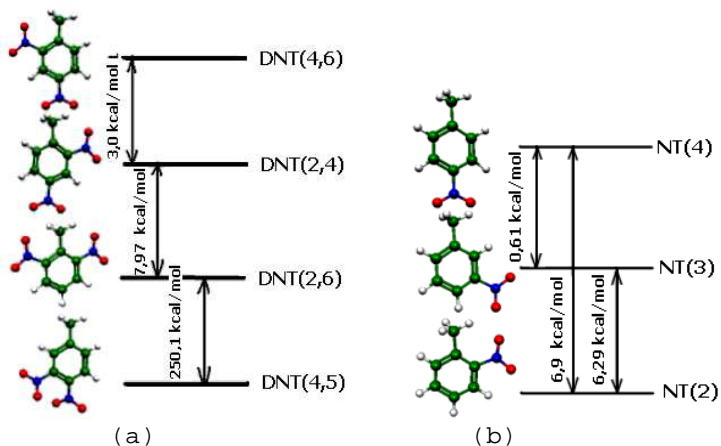
publikuotais rezultatais [5]. Tyrimams buvo pasirinkti dinitrotoluenai: 2,4-dinitrotoluenas, 2,6-dinitrotoluenas, 4,5-dinitrotoluenas, 4,6-dinitrotoluenas.

Stabiliausia molekulė turi mažiausią HF energiją. Rastos energijos dinitrotoluenų izomerų HF/6-31G* metodu sutapo su P. C. Chen [5]. Pagal tyrimo rezultatus, 2,4-dinitrotoluenas yra stabilėnis už 4,5-dinitrotolueną.

Šių molekulių geometrinė struktūra yra 13 pav., o rasti ryšių ilgiai pateikti 6 lentelėje. Palyginus buvo geri atitikmenys visos geometrinės struktūros (ryšių ilgių, kampų ir diedralinių kampų). Abiem atvejais P. C. Chen ir klasterio TAURAS skaičiavimai nustatė, kad izomerai deformuojasi benzolo žiede, tai daro įtaką metilo ir nitro grupėms [5].



13 pav. Tirtų molekulių 2,4-DNT, 2,6-DNT, 4,5-DNT ir 4,6-DNT geometrinė struktūra.



14 pav. Molekulių NT (a) ir DNT(b) stabilumo nustatymas. Skaičiavimai atlikti HF metodu 6-311G(3d.1f.3p) bazėje.

Svarbiausi šitų tyrimų rezultatai parodė, kad molekulės yra stabilėsnės, jei nitro ir metilo grupės 2,4-dinitrotolueno, 2,6-dinitrotolueno yra atskirtos viena nuo kitos. Šie rezultatai patvirtina taip pat P.C. Chen išvadą [5]. Dinitrotolueno sprogstamųjų medžiagų molekulių geometrijos analizė padeda geriau suprasti šių molekulių šiluminius irimo mechanizmus.

6 lentelė. DNT molekulės sryšių ilgiai (Å) nustatyti klasteryje TAURAS ir P. C. Chen [5].

Bond	2,4-dinitrotoluene	2,4-dinitrotoluene[5]	2,6-dinitrotoluene	2,6-dinitrotoluene[5]
C1-C2	1.3899	1.3982	1.3970	1.3964
C2-C3	1.3843	1.3831	1.3841	1.3838
C3-C4	1.3758	1.3758	1.3790	1.3793
C4-C5	1.3833	1.3827	1.3790	1.3793
C5-C6	1.3789	1.3793	1.3840	1.3839
C1-C6	1.3937	1.3948	1.3960	1.3963
C1-C7	1.5133	1.5135	1.5191	1.5189
C7-H8	1.0800	1.0810	1.0816	1.0815
C7-H9	1.0801	1.0811	1.0768	1.0770
C7-H10	1.0802	1.0812	1.0769	1.0770
C2-N10	1.4600	1.4611	1.4621	1.4624
N10-O11	1.1899	1.1932	1.2920	1.2921
N10-O12	1.1930	1.1926	1.1940	1.1937
C3-H7	1.0689	1.0691	1.0719	1.0716
C4-N13	1.4601	1.4556	1.0728	1.0730
N13-O14	1.1933	1.1921	-	-
N13-O15	1.1918	1.1933	-	-
C5-H8	1.0701	1.0712	1.0715	1.0716
C6-H9	1.0733	1.0735	1.4622	1.4624
N20-O21	-	-	1.1939	1.1937
N20-O22	-	-	1.1920	1.1921

Išplečiant tyrimą ir norint patvirtinti anksčiau minėtą pastebėjimą, buvo tiriama 4,5-dinitrotolueno molekulė, kurios nitro grupės yra labai arti. Rezultatai rodo, kad 4,5-dinitrotolueno stabilumas yra žemiausias.

Skaičiavimai patvirtino anksčiau minėtą teorinę prielaidą. Rezultatai leidžia daryti išvadą, kad sukurtas klasteris gali spręsti šiuolaikinius kvantinės chemijos uždavinius. Izomerų energija buvo apskaičiuota ieškant stabiliausio darinio. Gauti rezultatai pateikti 14 a pav. rodo, kad 4,6-dinitrotolueno yra stabiliausias izomeras. 14 b pav. pateikti rezultatai rodo, kad stabiliausias izomeras iš nitrotoluenų yra NT(4).

Sprogstamųjų medžiagų molekulių virpesių spektrai

NO grupių detekcijos spektroskopiniai metodai yra plačiai naudojami junginių, turinčių nitro grupės detekcijai. Tokiems junginiams priklauso trinitrotoluolas (trys NO₂ grupės) bei vieną ir dvi NO₂ grupes turintys atitinkami junginiai.

7 lentelė. IR ir Ramano harmoninių virpesių dažnių intensyvumai ir formos nustatytos atlikus trinitrotoluene molekulės skaičiavimus Hartrio-Foko artinyje.

Dažnis, cm ⁻¹	IR intensyvumas, D ² /(a.m.v.*A ²)	Ramano intensyvumas, A ⁴ /a.m.v.	Svyravimo forma
1306	-	16	Žiedo deformacijos
1623	-	37	NO ₂ , CH ₃ ir žiedo deformacijos
1627	11	7	NO ₂ , CH ₃ ir žiedo deformacijos
1639	-	40	NO ₂ , CH ₃ ir žiedo deformacijos
1788	-	71	Žiedo deformacijos
1885	14	-	NO ₂ valent. svyr.
3269	-	137	NO valent. svyr.
3332	-	74	NO valent. svyr.
3467	-	36	CH ₃ valent. svyr.
3470	-	29	CH valent svyr.
3496	-	29	CH valent svyr.

8 lentelė. IR ir Ramano harmoninių virpesių dažnių intensyvumai ir formos nustatytos atlikus trinitrofenolo molekulės skaičiavimus Hartrio-Foko artinyje.

Dažnis, cm ⁻¹	IR intensyvumas, D ² /(a.m.v.*A ²)	Ramano intensyvumas, A ⁴ /a.m.v.	Svyravimo forma
1474	-	142	Žiedo ir NO ₂ deformacijos
1605	9	63	Žiedo ir NO ₂ deformacijos
1651	2	33	Žiedo ir NO ₂ deformacijos
1709	-	39	Žiedo deformacijos
1747	14	120	NO valentiniai svyr.
1826	12	24	NO valentiniai svyr.
2029	21	14	NO valentiniai svyr.
2851	-	337	CH deformaciniai svyr.
2962	-	85	CH deformaciniai svyr.
3445	-	1260	CH valent svyr.
3736	-	29	CH valent svyr.
4100	10	260	OH valentiniai

Junginių virpesių spektrai ir elektroninė struktūra priklauso nuo nitro grupių skaičiaus. Atliekant trinitrotoluolo ir 2,4,6-trinitrofenolo medžiagų mažų koncentracijų kiekybinius tyrimus lazerinės spektroskopijos metodais, reikalinga išsami molekulių vibracinių spektrų analizė.

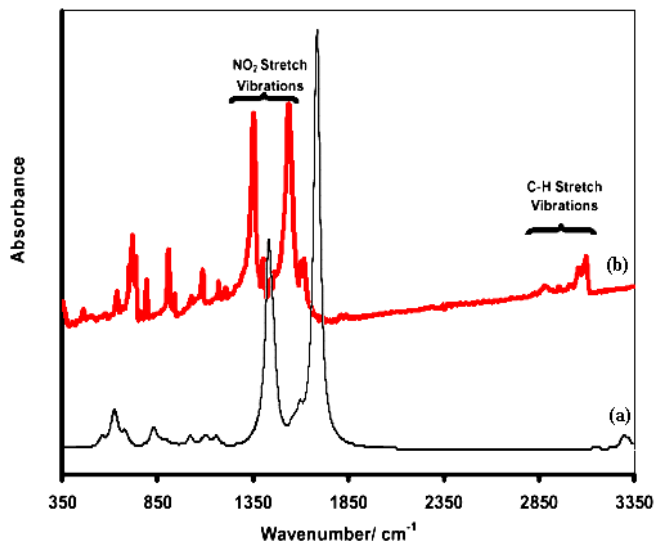
Klasteryje TAURAS ši priklausomybė ištirta *ab initio* kvantcheminiais metodais, naudojant GAMESS paketą. Hartrio ir Foko artinyje apskaičiuoti vibracinių šuolių dažniai, IR ir Ramano spektrų intensyvumai pateikti 7 ir 8 lentelėse. Iš gautų tyrimo rezultatų pateikiami tik didžiausio intensyvumo šuoliai.

Skaičiavimams buvo panaudota 6-31G* atominių orbitalių bazė (polarizacinės *d* funkcijos visiems antro periodo elementams). Visi molekulių geometriniai parametrai buvo optimizuojami, skaičiuojant Hartrio ir Foko artinyje bei daugiakonfigūraciniu Hartrio ir Foko metodu. Tiriamų molekulių vibracinių šuolių dažniai bei santykiniai infraraudonojo ir Ramano spektrų intensyvumai buvo apskaičiuoti harmoniniame artinyje, potencialinius paviršius apskaičiuojant minėtais *ab initio* metodais. Tirtoms molekulėms reikėjo 250 ir 246 bazinių Gauso funkcijų ir daugiau kaip 65 000 konfigūracijų skaičiuojant daugiakonfigūraciniu metodu.

Skaičiavimo rezultatų palyginimas su eksperimentu

IR spektroskopija yra pagrįsta atomų vibracija molekulėse. IR spektras yra gaunamas veikiant medžiagą infraraudonais spinduliais. Energija absorbcijos spektre atitinka tipinės molekulės dalies vibracijos dažnį. IR absorbcijos informacija yra pateikiama spektru, kur bangos ilgiu ar bangos numeriu yra x-ašis, o absorbcijos intensyvumas yra y-ašis. Vibraciniai dažniai priklauso nuo sąveikų tarp atomų ir atomų grupių. Klasteryje TAURAS buvo atlikti skaičiavimai ir teoriškai nustatyti 2,4,6-TNT molekulės IR ir Ramano spektrai.

Suskaičiuoti klasteryje TNT spektrai IR srityje 350-3350 cm⁻¹ pateikti 15 a pav. 15 b pav. pateikti eksperimento rezultatai gauti darbe [7]. TNT leidžia identifikuoti svyravimų formas: srityje 3000-3100 cm⁻¹, priskiriamas asimetrinei ir simetrinei C-H vibracijai, kuriai atitinkamai priklauso CH₃ grupė ir aromatinis žiedas. Kitos aukšto intensyvumo viršūnės yra 1355 cm⁻¹ (NO₂ grupės simetrinė ištempimo vibracija), 1540 cm⁻¹ (NO₂ grupės asimetrinė ištempimo vibracija), 1025 cm⁻¹ (CH₃ grupės deformacija), 1085 cm⁻¹ (C-H junginio išlinkimas), 909 cm⁻¹ (C-N grupės ištempimas), 794 cm⁻¹ (C-CH₃ ištempime) ir 720 cm⁻¹ (C-N-O išlinkimas). Išsami informacija pateikiama 7 lentelėje.



15 pav. 2,4,6-trinitrotoluene molekulės IR spektras: (a) suskaičiuotas klasteryje TAURAS; (b) gautas atlikus eksperimentą [7].

Atlikus eksperimentą negalima tiksliai nustatyti, su kuriomis molekulės dalimis susijusi ta ar kita spektro linija, todėl gautų eksperimentinių rezultatų paaiškinimui būtina atlikti ir teorinius skaičiavimus.

Šiuo metu kvantinės chemijos tyrimai tapo standartu, todėl siekiant teorinio tyrimo rezultatus palyginti su eksperimentu, skaičiavimams atlikti naudojami superkompiuteriai arba asmeninių kompiuterių klasteriai. Disertaciniame darbe skaičiavimams atlikti buvo panaudotas asmeninių kompiuterių klasteris TAURAS. Atlikus skaičiavimus buvo teoriškai nustatyta NO₂ grupių įtaka sprogstamųjų medžiagų (TNT ir TNP) molekulių elektroninei sandarai, IR spektrams bei charakteringoms spektrų sritims būtinoms tokių medžiagų identifikavimui.

Gautų modeliavimo rezultatų palyginimas su kitų autorių eksperimentiniais bei skaičiavimo rezultatais parodė pakankamai gerą atitikimą, nes maksimalios santykinės paklaidos neviršijo 2,5 % (lyginant su eksperimentu) ir 1 % (lyginant su skaičiavimų rezultatais).

Disertacinio darbo išvados

Sukūrus asmeninių kompiuterių klasterį įdiegiant SCore programinę įrangą ir pritaikius į šią aplinką integruotą GAMESS skaičiavimų programą realiems sprogstamųjų medžiagų molekulių tyrimams, suformuluotos šios mokslinės ir praktinės išvados:

1. Disertaciniame darbe pasiūlytas asmeninių kompiuterių klasteris, naudojantis ribotus išteklius ir laisvai platinamą Linux OS ir SCore programinę įrangą, leidžia ženkliai sumažinti siunčiamų duomenų apsiųkimų sąnaudas ir tokiu būdu padidina klasterio našumą ir efektyvumą. Todėl, tapo įveikti lygiagrečių duomenų persiuntimo būdų trūkumai, esantys Beowulf tipo klasteriuose.
2. Pasirinkus molekulių elektroninių struktūrų *ab initio* skaičiavimų būdą, programa GAMESS integruota sukurtame klasteryje, tinka sprogstamųjų ir kitų medžiagų molekulių struktūrai tirti.
3. Palyginus skaičiavimo rezultatus, gautus šiame darbe su turimais eksperimentiniais duomenimis ir kitų autorių rezultatais, galima teigti, kad
 - darbo rezultatai ateityje gali būti panaudoti tiriant sprogstamųjų medžiagų savybes ir kuriant SCore tipo klasterius;
 - darbo rezultatai galėtų sudominti specialistus, kurie jau nuo 1961 m. tobulina GAMESS paketą, plėtodami jo galimybes įvairaus tipo superkompiuterių ir klasterių architektūroms;
 - sprogstamųjų medžiagų molekulių *ab initio* tyrimų rezultatai gali būti panaudoti kuriant prietaisus nuotoliniam teršalų detektavimui.

Cituota literatūra

1. Basis of PC clusters. Available at: <http://clusters.top500.org/db>.
2. PC Cluster consortium. Available at: <http://www.pccluster.org/>.
3. Grimme S., Muck-Lichtenfeld C. Lyra: Construction of a Parallel Computer from Standard PC Components New Impulses for Quantum Chemical Calculations. Available at: www.uni-muenster.de/Chemie/OC/research/grime/lyra/lyra-e.html
4. The NAS Parallel Benchmarks (NPB). Available at: <http://www.nas.nasa.gov/Software/NPB/>.
5. P.C. Chen, W. Lo, K.H. Hu, „Journal of Molecular Structure, **389**, (1997) 91.
6. W.P. Carper and L.P. Davis, J. Phys. Chem., **86** (1982) 459.
7. G. M. H. Sandoval. Vibrational signatures of 2,4,6 - trinitrotoluene (TNT) in soil particles. Thesis for the degree of master of science in chemistry University of Puerto Rico Mayagüez campus, 2006.

Summary

The objective of this research work was the design, creation and realizing the PC clusters consisting of commodity hardware and using Fast Ethernet-Network for parallel calculations. Research on the evaluation of PC cluster abilities were analyzed by theoretical calculation of the signatures of explosive materials, such as TNT and TNP. The computational results are compared with the experimental ones, obtained by other authors using the spectroscopic technique. The dissertation consists of five parts.

The first part is Introduction. It presents the statement of the problem and its topicality, research issues and objectives, motivation of the research, research methodology used, research findings and results, its scientific novelty, practical importance and approbation as well as the main results of the research.

The second part presents the background and needs of computational quantum mechanical methods that are widely used for investigations. The computational quantum chemistry is a technique that helps us to resolve, predict, and study new concepts, compounds, reactions and mechanisms. This method is very helpful in compounds that require exceptional worry in their use, e.g., explosives, for reducing the risk to personnel testing and maintenance costs in service. Molecular modeling is the basis of computational quantum chemistry, concerned on predicting the behavior of individual molecules within a chemical system. The molecular modeling let us to obtain molecular characteristics. This section describes the *ab initio* quantum chemistry methods used for these theoretical investigations performed by means of *ab initio* quantum mechanical calculations using the GAMESS computer code.

The basis of these investigations is quantum mechanics; however, in order to achieve quantitative results comparable with the experimental ones we need supercomputer power or a cluster of parallel computers. In this way, the tasks have been solved during the last decade of the 20th century.

The third part describes the background and needs of parallel processing and introduces the personal computer (PC) cluster TAURAS built in the Department of Applied Sciences of Lithuanian Military Academy with SCore cluster software. This section presents an overview of the Real World Computing (RWC) project in the framework of this thesis has done. A particular attention was paid to the SCore Cluster System software developed in the RWC project, because it is the software used in this research work. The SCore Cluster System software has been installed and used as a practical parallel processing environment. This dissertation has been written as a part of development of self-made clusters from commodity hardware. This one of the goals of this thesis is to realize the self made cluster TAURAS with the SCore cluster system software in the commodity network and to demonstrate its effectiveness in practical use, as well as to demonstrate that the performance of a cluster system is equal to that of a commercially available parallel computer.

The Numerical Aerospace Simulation (NAS) Parallel Benchmarks discussed here include effective algorithms for computational and communicational performance, which were used to evaluate the PC cluster. The tasks solved were used to compare the capabilities of our cluster with other clusters and supercomputers. The cluster is registered in the list of top500 cluster [1].

The fourth part is analytical, it describes the research design. The object of analysis is the known approaches for evaluate in the quality of Beowulf and SCore type cluster environments. First, a comparative analysis has shown that, using the SCore cluster system software communication facility PM in Fast Ethernet network the performance of application programs can be comparable with the dedicated cluster network communication. Because of evaluation by the NAS parallel benchmarks, it is obvious that practical high-performance cluster systems can be built using a commodity Fast Ethernet network. Second, the comparative analysis described to show the effectiveness of created computational facilities, applied to investigate the electronic structure and vibrational spectra of explosive molecules by *ab initio* quantum mechanical computational methods. The approaches for evaluating quality of GAMESS quantum chemistry computer code implementations in Beowulf and SCore type cluster environments are studied in detail and compared using the proposed methodology of comparative analysis. It allows preparing valuable recommendations how to use the GAMESS computer code in PC clusters with the SCore cluster system software.

The fifth part is analytical as well. The object of analysis here is the known methods for evaluating the quality of calculation results in a new parallel environment and experimental characterization of explosive molecules. Unfortunately, the experiment cannot determine to which piece of molecule this or that line of spectrum belonged. Therefore, the current theoretical investigations have become as the standards. The molecular modeling by means of the PC cluster TAURAS made it possible to obtain molecular characteristics such as: heats of formation, bond and reaction energies, molecular energies and structure, energies and structures of transition states, charge distribution in molecules, vibrational frequencies (IR and Raman spectra), and electronic transitions. The analysis and evaluation of these results by experiments lead for the conclusion on that accurate *ab initio* quantum chemical computations (molecular electronic structure and vibrational spectra investigations) are essential in the development of spectroscopic methods for detection of small amounts of materials. Also the clusters based on PC's running Linux can become the cheapest "supercomputers" in the academic and commercial field.

The dissertation ends with the main conclusions of this research work. The list of references is provided; the summary in Lithuanian and Appendix are added as well.

Curriculum Vitae

Name: BEKESIENE
Forename: Svajone
Sex: female
Date of birth: January 15, 1966
Place of birth: Siauliai, Lithuania
Marital status: married
Nationality: Lithuanian
Present address:
oficce: Department of Applied Sciences, Gen. J. Zemaitis Military Academy of Lithuania, Šilo Str. 5 A, LT- 10322 Vilnius, LITHUANIA;
telephone: (+370 5) 212 69 23; fax: +(370 5) 212 73 18
E-mail: Svajone.Vosteriene@lka.lt
home: Mindaugo 19/3-51, LT-2000 Vilnius, LITHUANIA;
Certifikates of education:
Diploma of Mathematics (master's degree), Vilnius University, 1993; Microsoft Windows NT 4.0 Administer's Certificate, 2000; HTML basics, Internet Advertisement and Homepage's design Certificate, 2000.
Research and professional experience:
From 1993 teaching mathematics at school; from 1999 head of Mathematical Modelling laboratory at the Department of Applied Sciences, Gen. J. Zemaitis Military Academy of Lithuania.
Supervising teaching computing laboratory (Windows NT 4.0 and Linux RedHat 7.2 operating systems). In the basis of laboratory we have 20 IBM PC cluster (in Linux RedHat 7.2 operating system) with possibility to run and develop parallel programs using PVM, MPICH and SCORE. Have experience in installing, managing and programming in SCORE environment.
Engaged in research work on mathematical modeling and simulation of stability and physical characteristics of many-atomic molecules, their ions; of optical characteristics of molecules.
Have experience of programming on IBM PC in MS Windows and LINUX environment, programming on FORTRAN77 and computer algebra system MAPLE. Familiar with molecular electronic structure investigation computer code GAMESS. Experienced in programming in C and C++.

Field of scientific studies:

Mathematical simulation of military operations; mathematical modeling and computing of electronic structure and optical properties of molecules of explosive materials.

Other experience:

Proficient in written and spoken Lithuanian, Russian; can write and speak English.

Publications:

7 ref.

Svajonė Bekešienė

**LYGIAGREČIŲJŲ SKAIČIAVIMŲ
SISTEMA SPROGSTAMŲJŲ MEDŽIAGŲ
ELEKTRONINEI STRUKTŪRAI TIRTI**

Daktaro disertacijos santrauka

Fiziniai mokslai (P 000)

Informatika (09 P)

Informatika, sistemų teorija (P 175)

Svajonė Bekešienė

**PARALLEL COMPUTATION SYSTEM
FOR MATHEMATICAL MODELING
OF ELECTRONIC STRUCTURE
OF EXPLOSIVE MATERIALS**

Summary of Doctoral Dissertation

Physical Sciences (P 000)

Informatics (09 P)

Informatics, System Theory (P 175)

Darbas atliktas Matematikos ir informatikos institute,
Vilnius, Lietuva.

© Svajonė Bekešienė, 2008