



Contribution ID: 558

Type: Sectional talk

Использование MPI for Python для организации очереди выполнения при сканировании поверхностей потенциальной энергии

Tuesday 8 July 2025 18:15 (15 minutes)

Параллелизм на уровне процессов является неотъемлемой частью расчетов на крупных вычислительных кластерах. Примером может служить моделирование процесса диффузии отдельных атомов по поверхности твердой фазы. Инструменты для полного сканирования поверхности потенциальной энергии дают исчерпывающую информацию об энергетических барьерах и путях диффузии, но вследствие больших вычислительных затрат редко входят в состав квантово-химических пакетов.

В данной работе предлагается решение этой задачи на примере моделирования диффузии атома водорода по поверхности меди в рамках исследований в области водородной энергетики. Алгоритм сканирования поверхности потенциальной энергии выполнен в виде Python-скрипта, который обеспечивает запуск, распараллеливание и контроль вычислений квантово-химических кодов. Расчеты формируются из пула точек, являющихся узлами решетки сканирования, и представляют собой индивидуальные задачи, связанные через общий набор файлов, что исключает накладные расходы на интенсивный обмен данными между процессами, позволяя минимизировать потери производительности и упростить постановку задачи в очередь выполнения высокопроизводительного кластера.

Работа является продолжением цикла исследований, проводимых в Суперкомпьютерном центре Воронежского государственного университета, представленного ранее на GRID'2023

Authors: РОМАНОВ, Александр; ПЕТРИЩЕВ, Константин; КУРГАЛИН, Сергей (заведующий кафедрой цифровых технологий факультета компьютерных наук); БОРЗУНОВ, Сергей (Воронежский государственный университет)

Presenter: РОМАНОВ, Александр

Session Classification: Application software in HTC and HPC