

Применение суперкомпьютера для решения задач магнитодинамики и исследования когерентных процессов в наномагнитных структурах

А.Г. Деменев, Т.С. Белозёрова, П.В. Харебов, В.К. Хеннер, Е.К. Хеннер

Аннотация. Многомасштабная молекулярная динамика систем наноманитов исследуется путем численного моделирования с параллельными алгоритмами. Создана параллельная версия моделирующего программного кода, который обеспечивает проведение исследований регулирования времени переключения магнитного момента наноструктуры, влияния фактора геометрии нанокристалла, магнитодинамики наноточки. Получены оценки ускорения и эффективности реализованных алгоритмов по сравнению с последовательными алгоритмами. Показано, что применение суперкомпьютерных технологий при решении указанных задач спиновой динамики позволяет моделировать системы, состоящие из тысяч магнитных наночастиц.

Ключевые слова: высокопроизводительные вычисления, параллельные алгоритмы, математическое моделирование, когерентные эффекты, магнитные наноструктуры.

Введение

Данная работа связана с созданием высокопроизводительных и надежных программных систем и компьютерных технологий компьютерного моделирования спиновой динамики магнитных наноструктур. Элементами таких структур могут быть наномолекулы, нанокластеры, молекулярные кристаллы и т.д. Рассматриваемые системы похожи тем, что элементарные составляющие структуры имеют магнитные моменты («спины»; в физике магнитных явлений понятие «спин» по существу отождествляется с понятием «магнитный момент»).

Основные трудности описания коллективного поведения многоспиновых систем коренятся в необходимости учета дальнедействующих межчастичных взаимодействий. Учитывая

квантовую природу магнетизма элементов магнитных наноструктур, решение задачи в принципе желательно вести на языке квантовой механики. Но для систем, состоящих из большого числа (тысяч) частиц, нахождение спектра собственных значений (диагонализация) квантового гамильтониана невозможна, т.к. вычислительная сложность решения задачи растет экспоненциально с числом частиц. Однако при больших значениях спинов индивидуальных частиц хорошо работает квазиклассическое приближение, в котором спины могут трактоваться как классические векторы. Тем не менее, и в таком приближении численное исследование моделей спиновой динамики сопровождается нелинейным ростом вычислительной сложности по отношению к числу структурных элементов и времени наблюдения за системой.

¹ Работа выполнена на базе Научно-образовательного центра «Параллельные и распределенные вычисления» (НОЦ ПиРВ) ПГНИУ с использованием оборудования, приобретенного по гранту РФФИ № 10-01-05021 и Программы развития ПГНИУ при частичной финансовой поддержке РФФИ и Пермского края (проекты 10-02-96023 - p_урал_a, 11-07-96007 - p_урал_a).

Члены авторского коллектива начали заниматься численным моделированием спиновой динамики в 80-х годах XX века. Моделирование термодинамических [1] и динамических [2] свойств систем взаимодействующих спинов, включая моделирование когерентных процессов [3], приводящих к т.н. сверхизлучению, было начато на майнфреймах третьего поколения и продолжено на персональных компьютерах; оно было доступно для систем со сравнительно небольшим числом магнитных моментов. Однако для адекватного отражения реальных процессов спиновой динамики необходимо моделирование систем состоящих из тысяч частиц, и проблема нехватки вычислительных мощностей продолжает существовать. Распараллеливание алгоритмов и использование суперкомпьютеров потенциально сулит возможность значительного увеличения числа структурных элементов моделирования и диапазона времен эволюции исследуемых систем, доступных для изучения. Однако при этом приходится учитывать, что параллельные вычислительные методы требуют специальных исследований на предмет обеспечения корректности результатов и эффективности отображения параллельных вычислительных алгоритмов на современные компьютерные архитектуры.

1. Постановка задачи

Физическое явление, на примере которого в данной работе изучаются возможности распараллеливания процесса моделирования задач магнитодинамики – когерентная релаксация, в частности задачи сверхизлучения. Технически когерентизация реализуется путем помещения образца в пассивный резонатор. В результате время релаксации может стать обратно пропорционально числу спинов [3-6] – необычный феномен для макроскопической физики.

Динамику частиц, составляющих ансамбль, можно описать с помощью системы уравнений для магнитного момента каждой частицы $\mu^{(k)}$:

$$\frac{d\mu^{(k)}}{dt} = -|\gamma_s|(\mu^{(k)} \times \mathcal{H}^{(k)}) - \frac{\alpha|\gamma_s|}{\mu}(\mu^{(k)} \times (\mu^{(k)} \times \mathcal{H}^{(k)})) \quad (1)$$

Здесь α – безразмерный параметр спин-решеточной релаксации, γ_s – гиромагнитное отношение для электронов. Поле $\mathcal{H}^{(k)}$ в урав-

нении (1) – это магнитное поле, действующее на k -ый спин; в рассматриваемом случае оно включает: (1) постоянное внешнее поле $H_0 \parallel Oz$; (2) одноосное анизотропное поле $H_A = (H_A / \mu) (\mu n) n$, $H_A = 2E_A / \mu$, где n – единичный вектор оси легкого намагничивания, E_A – энергия анизотропии; (3) поле обратной связи $H = (H, 0, 0)$, наведенное в резонансной катушке, ось которой направлена по оси Ox ; (4) дипольное магнитное поле $H_d^{(k)}$ индуцируемое парными диполь-дипольными взаимодействиями k -ой частицы со всеми остальными.

Введем безразмерные параметры

$$p_A = \frac{\omega_A}{\omega_0} = \frac{H_A}{H_0}, p_H = \frac{\omega_H}{\omega_0} = \frac{H}{H_0}, p_D = \frac{\omega_D}{\omega_0} = \frac{\mu}{a^3 H_0}, \quad (2)$$

где $\omega_0 = |\gamma_s| H_0$, $\omega_H = |\gamma_s| H$, $\omega_D = |\gamma_s| \mu / a^3$, $\omega_A = |\gamma_s| H_A$ – частоты, относящиеся к внешнему полю H_0 (Ларморовская частота), к полю обратной связи и к дипольному (локальному) магнитному полю; a – среднее расстояние между частицами.

В результате уравнение (1) для единичных векторов $e^{(k)} = \mu^{(k)} / \mu$ запишется в виде

$$\begin{aligned} \dot{e}_x^{(k)} = & -(1 + \omega_i + p_A e_z^{(k)}) e_y^{(k)} - \\ & - p_{di} (e_y^{(k)} \tilde{H}_{dz}^{(k)} - e_z^{(k)} \tilde{H}_{dy}^{(k)}) + \\ & + \alpha (p_H + p_{di} \tilde{H}_{dx}) \times (e_y^{(k)2} + e_z^{(k)2}) - \\ & - \alpha (1 + p_A e_z^{(k)} + p_{di} \tilde{H}_{dz}) e_x^{(k)} e_z^{(k)} - \\ & \alpha p_{di} \tilde{H}_{dy} e_x^{(k)} e_y^{(k)} - \Gamma_2 e_x^{(i)}, \\ \dot{e}_y^{(k)} = & (1 + \omega_i + p_A e_z^{(k)}) e_x^{(k)} - p_H e_z^{(k)} - \\ & - p_{di} (e_z^{(k)} \tilde{H}_{dx}^{(k)} - e_x^{(k)} \tilde{H}_{dz}^{(k)}) - \alpha (p_H + p_{di} \tilde{H}_{dx}) \times \\ & \times e_x^{(k)} e_y^{(k)} - \alpha (1 + p_{di} \tilde{H}_{dz} + p_A e_z^{(k)}) e_y^{(k)} e_z^{(k)} + \\ & + \alpha p_{di} \tilde{H}_{dy} (e_x^{(k)2} + e_z^{(k)2}) - \Gamma_2 e_y^{(i)}, \\ \dot{e}_z^{(k)} = & p_H e_y^{(k)} - p_{di} (e_x^{(k)} \tilde{H}_{dy}^{(k)} - e_y^{(k)} \tilde{H}_{dx}^{(k)}) - \\ & - \alpha (p_H + p_{di} \tilde{H}_{dx}) e_x^{(k)} e_z^{(k)} + \\ & + \alpha (1 + p_A e_z^{(k)} + p_{di} \tilde{H}_{dz}) (e_x^{(k)2} + e_y^{(k)2}) - \\ & - \alpha p_{di} \tilde{H}_{dy} e_y^{(k)} e_z^{(k)}. \end{aligned} \quad (3)$$

Дифференцирование ведется по безразмерному времени $\tilde{t} = \omega_0 t$. Здесь $p_{di} = p_d(1 + \delta_i)$, p_d – безразмерная частота дипольного (локального) магнитного поля; δ_i – дисперсия частоты прецессии i -го спина (нормально распределенная случайная величина с нулевым средним и дисперсией σ_δ), ω_i – зеемановская частота прецессии i -го спина (нормально распределенная случайная величина с нулевым средним и дисперсией σ_ω). Добавленные релаксационные слагаемые $-\Gamma_2 e_{x,y}^{(k)}$ могут, в некоторых случаях, происходить из короткодействующих дипольных взаимодействий.

Уравнения для магнитного поля, создаваемого в резонаторе в процессе спиновой релаксации имеет вид [4]:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{d\tilde{t}^2} p_H + 2 \frac{\gamma_r}{\omega_0} \frac{d}{d\tilde{t}} p_H + \left(\frac{\omega_r}{\omega_0} \right)^2 p_H = \\ = -4\pi\beta \left(\frac{1}{N} \frac{d^2}{d\tilde{t}^2} \sum_{i=1}^N e_x^{(i)} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

Коэффициенты в левой части уравнения (4) выражаются через параметры контура $2\gamma_r = R/L = \omega_r/Q$ и $\omega_r = 1/\sqrt{LC}$, где Q – добротность. Выражение, заключенное в круглые скобки в правой части уравнения (4), имеет смысл среднего по ансамблю значения второй производной x -проекции единичного вектора намагниченности. Величина $\beta = \eta N \mu / (VH_0)$ определяет интенсивность магнитной связи между ансамблем частиц и катушкой.

2. Метод численного моделирования

Для решения уравнений движения использовался гибридный метод численного моделирования, к которому часто прибегают при изучении динамических спиновых систем. В этом методе спины рассматриваются как «классические» (обычные трехмерные векторы), их распределение, определяемое начальными условиями, задается с помощью техники Монте-Карло, а система дифференциальных уравнений

(3), (4) решается численно с помощью метода типа Рунге-Кутты.

В процессе моделирования рассматривалась система из $N = n_x \times n_y \times n_z$ спинов, образующих:

- а) трехмерную решетку при $n_x, n_y, n_z > 1$,
 - б) двумерную решетку, если единице равно только одно число из n_x, n_y, n_z ;
 - в) одномерную цепочку, если единице равны два числа из набора n_x, n_y, n_z .
- Асимптотическая оценка размера входных данных задачи моделирования.

Моделирование системы спинов с заданной начальной поляризацией p_0 выполняется с помощью техники Монте-Карло. Для этого строится случайная конфигурация равновероятных направлений спинов, образующая первый член выборки из ансамбля Гиббса. Направление характеризуется единичным вектором $\vec{e}(\vec{x}) = (\vec{i}e^x + \vec{j}e^y + \vec{k}e^z)$, где $(e^x)^2 + (e^y)^2 + (e^z)^2 = 1$.

Нас интересует такой случайный вектор $\vec{e}$, что для любого телесного угла Ω : $P\{\vec{e} \in \Omega\} = \Omega/4\pi$. Легко видеть, что если x – случайная точка, равномерно распределенная в шаре, то направление ее радиуса-вектора обладает нужным нам свойством. Поэтому, полагаем $\cos\theta = 2\gamma_1 - 1$, $\varphi = 2\pi\gamma_2$, где γ_1 и γ_2 – независимые случайные величины, равномерно распределенные в интервале $[0,1)$. Декартовы координаты вектора $\vec{e}$ вычисляются по обычным формулам $e^x = \cos\varphi\sqrt{1 - \cos^2\theta}$, $e^y = \sin\varphi\sqrt{1 - \cos^2\theta}$, $e^z = \cos\theta$.

Для полученной конфигурации находится суммарная намагниченность $p_{нач}$. Затем для некоторого случайно выбранного узла определяется новое случайное направление (описанным выше способом) и вычисляется изменение суммарной намагниченности p' , производимое изменением направления этого единственного спина. Если при этом $|p' - p_0| < |p_{нач} - p_0|$, то массив с измененным спином выбирается в качестве нового члена ансамбля, иначе, отбраковывается. После нахождения очередного члена ансамбля Гиббса он принимается за отправной для построения описанным выше способом

следующего члена ансамбля. Таким образом, находится массив, поляризация которого лежит достаточно близко к заданной. Этот массив выбирается в качестве начальной конфигурации для решения уравнений движения.

Интегрирование уравнений движения дает значения спиновых векторов $\vec{e}_j(n\Delta t)$, и параметра $p_H(n\Delta t)$, где Δt – шаг по времени. Величина шага по времени Δt определяется, главным образом, частотой сильного постоянного внешнего поля ω_0 . Начальное значение шага выбиралось так, чтобы типичный спин обращался вокруг направления постоянного внешнего поля в течение времени $50\Delta t$. Асимптотическая оценка размера задачи моделирования в течение физического времени t_{mod} : общее число арифметических операций $W(N, \Delta t, t_{\text{mod}}) \in \Theta(N^2 t_{\text{mod}} / \Delta t)$.

Предлагаемый для данного метода конструктивный подход для проверки корректности результатов основывается на использовании контроля сохранения интегралов (квазинтегралов) движения, характерных для решаемой задачи. В процессе вращения каждый индивидуальный спин должен сохранять свою длину $l = \sqrt{(e^x)^2 + (e^y)^2 + (e^z)^2} = 1$. Это условие использовалось для контроля точности вычислений и автоматической корректировки длины шага интегрирования. Если после выполнения одного шага интегрирования величина l отклонялась от значения 1 больше, чем на заданную величину погрешности $\mathcal{E}$, то шаг уменьшался в два раза. Если в течение десяти шагов величина Δt не менялась, то шаг увеличивался в два раза (но $\Delta t \leq 0.05$).

3. Анализ потенциала распараллеливания существующих исходных кодов

К началу 2011 года авторский коллектив имел исходные программные коды, моделирующие магнитодинамику и когерентные процессы спиновой динамики, созданные в среде Borland C++ Builder (программа Spins) и среде Borland Delphi (программа MagnetoDynamics). Эти программные коды реализовывали только

последовательные алгоритмы и компилировались только под MS Windows. Эти ограничения не позволяли эффективно использовать высокопроизводительные вычислительные системы в исследованиях магнитодинамики и когерентных процессов в наноманитных структурах.

При анализе потенциала распараллеливания исходных кодов программного обеспечения Spins и MagnetoDynamics, были использованы методы анализа информационной структуры алгоритмов [7] и асимптотического анализа вычислительной сложности [8-10].

Вычислительная сложность алгоритма — это функция, определяющая зависимость от размера входных данных (число частиц N) потребляемых алгоритмом ресурсов, таких как объем оперативной памяти Mem и машинного времени $Cost$ (стоимость вычислений). Для асимптотических ($N \geq N_0 \gg 1$) оценок вычислительной сложности алгоритмов было показано, что:

1) с ростом числа частиц N объем необходимой оперативной памяти растет:

- асимптотически квадратично у алгоритма, реализованного в Spins:

$$Mem(N) \approx Mem(N_0) \cdot \frac{N^2}{N_0};$$

- асимптотически линейно у алгоритма, реализованного в MagnetoDynamics:

$$Mem(N) \approx Mem(N_0) \cdot \frac{N}{N_0};$$

2) стоимость алгоритмов, реализованных в Spins и в MagnetoDynamics, растет обратно пропорционально размеру шага интегрирования Δt по времени.

3) стоимость вычислений алгоритмов, реализованных в Spins и в MagnetoDynamics, растет асимптотически квадратично по N при постоянном Δt , но может расти асимптотически кубично при автоматическом выборе Δt .

Теоретические (по Амдалу) формулы для асимптотической оценки зависимостей максимальных ускорения (коэффициента ускорения) S_{max}^A и эффективности E_{max}^A параллельных версий алгоритмов, реализованных в программах Spins и MagnetoDynamics, имеют вид

$$S_{\max}^A(p) \leq \frac{1}{f + (1-f)/p}, \quad (5)$$

$$E_{\max}^A(p) \leq \frac{1}{pf + (1-f)},$$

где f – доля последовательных вычислений, p – число используемых процессорных ядер. Соответствующие полуэмпирические оценки таковы (τ – удельная доля накладных расходов на поддержку многопоточности на каждое ядро мультиядерных процессоров):

$$S^{MT}(p) \approx \frac{1}{\tau \cdot p + f + (1-f)/p}, \quad (6)$$

$$E^{MT}(p) \approx \frac{1}{\tau \cdot p^2 + pf + (1-f)}.$$

Максимум ускорения получается при $p_{\max} \approx \sqrt{(1-f)/\tau}$. Было показано, что если полные накладные расходы многопоточного распараллеливания с ростом N (числа моделируемых частиц) асимптотически растут так же, как требования к оперативной памяти в программе MagnetoDynamics, то удельная доля накладных расходов падает $\tau(N) \approx \tau(N_0) \cdot N_0/N$. Поэтому возможен рост масштабируемости. Оценку масштабируемости алгоритма даёт функция изоэффективности [7] – такая зависимость $W = W(p)$ между размером задачи W и числом ядер p процессора, при которой эффективность постоянна ($E = \text{const}$).

Векторное ускорение S^{vec} рассматриваемого алгоритма с долей векторизованных операций равной f^{vec} при L операндов в векторном регистре можно примерно оценить по формуле

$$S_L^{vec} \approx \frac{1}{(1-f^{vec}) + f^{vec}/L}. \quad (7)$$

Поскольку внешние циклы алгоритма целесообразно распараллеливать, а внутренние циклы могут быть векторизованы, то полное ускорение можно оценивать по формуле:

$$S(p) \approx S_L^{vec} \cdot S^{MT}(p). \quad (8)$$

4. Создание параллельной версии моделирующего программного кода

Нами анализировалась практика аналогичного переноса программного обеспечения из одной среды программирования в другую. Опыт показал, что потенциал распараллеливания исходных кодов моделирующего программного обеспечения трудно реализовать на практике. Причина – среды и библиотеки программирования, использованные при разработке Spins и MagnetoDynamics, работают только в Windows, а большинство суперкомпьютеров использует операционную систему Linux. Перенос Spins на языке C++ в кросс-платформенную среду разработки трудно реализовать из-за того, что используется не кросс-платформенная библиотека Microsoft .NET 4.0. Перенос MagnetoDynamics на языке Borland Delphi в кросс-платформенную среду разработки трудно реализовать из-за того, что язык Borland Delphi не имеет международного стандарта. Поэтому была создана программа MagnetoDynamics-F – параллельная версия соответствующего моделирующего программного кода на языке Fortran.

Программа состоит из двух частей. Первая (последовательная) часть включает ввод параметров, создание выходных файлов и моделирование системы спинов, характерной для заданной поляризации p_z (построение ансамбля Гиббса с помощью техники Монте-Карло). Вторая (подлежащая распараллеливанию) часть включает интегрирование системы уравнений движения и вычисление интенсивность магнитодипольного излучения.

Для распараллеливания использован интерфейс прикладного программирования OpenMP. В программе используется пять двумерных массивов размера $3 \times N$ и два одномерных массива размера N : Элементы этих массивов – вещественные числа двойной точности.

$Spins(3, N)$ – массив координат спинов $\vec{e} = (e^x, e^y, e^z)$;

$Feqn(3, N)$ – массив для правых частей уравнений (6) $\vec{F} = (F^x, F^y, F^z)$;

$OmRnd(N)$ – массив частот случайных неоднородных полей ω_i , определяющих частоты прецессии каждого спина;

$DelRnd(N)$ – массив для дипольных взаимодействий δ_i (дисперсия частоты прецессии i -го спина);

$SpinsPr(3, N)$, $FeqnPr(3, N)$, $DE(3, N)$ – вспомогательные массивы для метода Рунге-Кутты.

При числе спинов $N_0 \gg 1$ объем занимаемый этими массивами памяти много больше объема остальных переменных программы, поэтому $Mem(N_0) \approx 17 \cdot N_0 \cdot \text{sizeof}(\text{double})$.

В алгоритме были распараллелены внешний цикл вычисления правых частей уравнений движения и цикл по вычислению интенсивностей магнитодипольного излучения.

OpenMP-распараллеливание цикла вычисления правых частей уравнений движения (процедура *EqnRightParts*):

```
!$OMP PARALLEL SHARED(/Spins/, /Feqn/, /DelRnd/, /FieldPH/)
PRIVATE (Mi, Hdx, Hdy, Hdz, PiD, WR)
!$OMP DO
DO 40 Mi = 1, Neqn
! тело внешнего цикла
40 CONTINUE
!$OMP END DO
!$OMP END PARALLEL

! Вычисляем правые части уравнений
для WH и PH
SumD2x = 0
!$OMP PARALLEL
SHARED(/Spins/, /Feqn/, /DelRnd/, /FieldPH/, SumD2x) PRIVATE (Mi, Hdx,
Hdy, Hdz, dHdx, dHdy, dHdz, PiD,
Wr, d2eX)
!$OMP DO
DO 50 Mi = 1, Neqn
! тело цикла
! Вычисляем сумму производных d2eX
!$omp atomic
SumD2x = SumD2x + d2eX
50 CONTINUE
!$OMP END DO
!$OMP END PARALLEL
```

OpenMP-распараллеливание циклов вычисления интенсивностей магнитодипольного излучения (процедура *CalcIntensities*):

```
!$OMP PARALLEL
SHARED(/Spins/, /Feqn/, /DelRnd/, /OmR
```

```
nd/, /FieldPH/, dFeqn) PRIVATE
(Mi, Hdx, Hdy, Hdz, dHdx, dHdy,
dHdz, PiD, Wr, Wr1)
!$OMP DO
DO 10 Mi = 1, Neqn
! тело цикла
10 CONTINUE
!$OMP END DO
!$OMP END PARALLEL
```

5. Примеры применения программы

В программе MagnetoDynamics-F были реализованы важные применения для исследований когерентных процессов [9, 10]:

- возможности регулирования времени переключения магнитного момента наноструктуры, используя большую скорость когерентных процессов;
- роли фактора геометрии нанокристалла для свойств сверхизлучения с 1-, 2- и 3-мерными объектами;
- частных решений системы уравнений для описания магнитодинамики наноточки, индуктивно связанной с пассивным резонатором для случаев слабой (стационарная прецессия) и сильной (инверсия намагниченности) неравновесности;
- зависимости нелинейного решения (сильная неравновесность) от начальной ориентации магнитного момента наноточки, чтобы найти конфигурации, в которых сверхизлучение и радиационное затухание максимальны.

Рассмотрим две типичных задачи исследования когерентных процессов в магнитных нанокристаллах.

1. Значения параметров:

- $\alpha = 0.02$ (параметр спин-решеточной релаксации);
- $p_A = 0.01$ (параметр анизотропии);
- $p_d = 0.01$ (безразмерная частота дипольного локального магнитного поля);
- $\omega_R = 1$ (собственная частота резонатора);
- $\beta = 0.001$ (параметр, определяющий интенсивность связи между ансамблем частиц и катушкой);
- $Q = 265$ (добротность контура);
- $\Gamma_2 = 0$ (параметр спин-спиновой релаксации);

- $\sigma_\omega = 0.05$ – параметр нормального распределения для частот случайных неоднородных полей;
- $\sigma_\delta = 0.05$ – параметр нормального распределения для частот прецессии спинов;
- $p_z = -0.85$ – требуемая поляризация ансамбля спинов (проекция суммарной намагниченности на ось z);
- размер моделируемого ансамбля спинов: $n_x = 10, n_y = 10, n_z = 10$:
 $N_0 = n_x \times n_y \times n_z = 1000$;
- число уравнений системы:
 $N_{eqn} = 3 \times N_0 + 2 = 3002$.

Интегрирование уравнений движения выполнялось на интервале $[0, t_{\text{mod}}]$, где полагалось $t_{\text{mod}} = 1000$. Начальное значение шага интегрирования $\Delta t = 0.05$. Данные полностью помещаются в кэш-память процессора, т.к. объем данных, оцененный по формуле (7), $Mem(N_0) \approx 0,14$ Мбайт. Результаты моделирования представлены на Рис.1.

2. Отличие от первой задачи состоит в том, что параметр связи $\beta = 7.2 \cdot 10^{-11}$ на 7 порядков меньше, чем в задаче №1, а параметр $\Gamma_2 = 2 \cdot 10^{-9}$ (в единицах ω_0) ненулевой, и начальная поляризация ансамбля спинов $p_z = -0.43$ в два раза меньше, чем в первом случае.

При таких параметрах всплески поляризации становятся видимыми при времени расче-

тов больше, чем $\tilde{t} = 10^7$. Счет велся с заданным шагом $\Delta t = 0.05$ до времен $\tilde{t}_{\text{max}} \approx 10^8 \div 10^9$. Для достижения такого большого времени мы ограничим $N=90$ (в данном моделировании спинов на порядок меньше, чем в задаче №1). В этом случае полное время счета на 12-ядерном вычислительном узле суперкомпьютера «ПГУ-Тесла» одного эксперимента с распараллеленной и векторизованной моделирующей программой занимает от 10 до 20 суток. Очевидно, что необходимо добиваться увеличения реальной производительности еще на порядок.

6. Априорная оценка ускорения параллельного алгоритма

Сделаем априорную оценку потенциала распараллеливания, используя основной закон Амдала для максимального ускорения параллельного алгоритма для первого из рассмотренных выше примеров. Обозначим полное время выполнения последовательного алгоритма $T_1(N_0, t_{\text{mod}}, \Delta t)$, а чисто последовательной части параллельного алгоритма – $T_{\text{seq}}(N_0)$.

Последовательная программа выполнялась для 10 различных распределений начальных ориентаций спинов. Времена выполнения (в секундах) последовательного алгоритма $T_1(N_0, t_{\text{mod}}, \Delta t)$ при использовании одного процессора и времена выполнения последовательной части алгоритма $T_{\text{seq}}(N_0)$ приведены в Табл. 1.

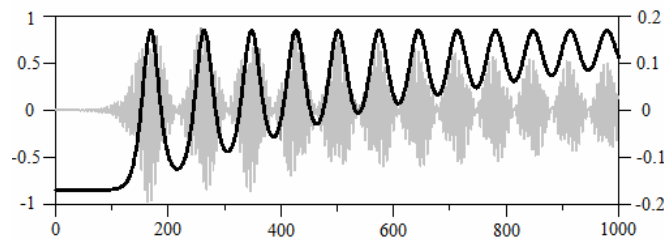


Рис. 1. Зависимость поляризации e_z (левая шкала) и поля обратной связи p_H (правая шкала) от времени $\tilde{t}$, для

$$\alpha = 0.02, p_A = 0.01, p_d = 0.01, \omega_R = 1, \beta = 0.001, Q = 265, \Gamma_2 = 0$$

Табл. 1

I	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$[T_{\text{seq}}(N_0)]_i$	0,16	0,16	0,15	0,15	0,16	0,15	0,16	0,15	0,18	0,16
$[T_1(N_0, t_{\text{mod}}, \Delta t)]_i$	10211	10115	10239	10106	10119	10111	10108	10106	10129	10107

Среднее время выполнения расчета для $N_0 = 1000$, $t_{\text{mod}} = 1000$, $\Delta t = 0.05$ равно

$$T_1(N_0, t_{\text{mod}}, \Delta t) = \frac{1}{10} \sum_{i=1}^{10} [T_1(N_0, t_{\text{mod}}, \Delta t)]_i = 10135.1 \text{ с}$$

Вычисляем коэффициент α формулы

$$T_1(N_0, t_{\text{mod}}, \Delta t) = \alpha \cdot \frac{t_{\text{mod}}}{\Delta t} :$$

$$\alpha(N_0) = \frac{T_1(N_0, t_{\text{mod}}, \Delta t) \cdot \Delta t}{t_{\text{mod}}} \approx 0.508.$$

Отсюда получаем время выполнения последовательного алгоритма при использовании одного ядра процессора

$$T_1(N) = T_1(N_0, t_{\text{mod}}, \Delta t) \cdot \frac{N^2}{N_0^2} =$$

$$= \alpha \cdot \frac{t_{\text{mod}}}{\Delta t} \cdot \frac{N^2}{N_0^2} \approx 1.014 \cdot 10^{-2} \cdot N^2 \text{ с}$$

Оценим величину f – долю последовательных вычислений при $N \geq N_0 \gg 1$.

$$T_{\text{seq}}(N_0) \approx \frac{1}{10} \sum_{i=1}^{10} [T_{\text{seq}}(N_0)]_i = 0.1584,$$

$$f(N_0) = \frac{T_{\text{nosl}}(N_0)}{T_1(N_0)} \approx 1.563 \cdot 10^{-5},$$

$$\text{Получаем } f(N) \approx f(N_0) \cdot \frac{N_0}{N} = \frac{1.563}{N} \cdot 10^{-2}.$$

Максимальное ускорение параллельной версии алгоритма практически линейно растет при росте p ($p \ll N \cdot 10^2$), т.к. согласно основному закону Амдала (5):

$$S_{\text{max}}(p) \leq \frac{N \cdot p}{1.563 \cdot 10^{-2}(p-1) + N} \quad (9)$$

Например, при $p = 12$, $N > N_0 = 3000$:
 $S_{\text{max}}(12) \leq 12.00$.

7. Апостериорная оценка ускорения параллельного алгоритма

Был проведен вычислительный эксперимент на 12-ядерном вычислительном узле суперкомпьютера «ПГУ-Тесла» с параллельной программой MagnetoDynamics-F. При создании машинного кода транслятор распараллеливал вычисления, используя директивы OpenMP для внешних циклов, и векторизовал вложенные циклы при $L=2$ операндов вещественных чисел двойной точности в векторном регистре (используя расширение SSE4.1 набора команд процессора).

Распараллеленная и векторизованная программа выполнялась для 10 различных распределений начальных ориентаций спинов. При использовании 12 потоков, задействующих все процессорные ядра, времена выполнения параллельного алгоритма $T_{12}(N_0)$ и времена выполнения последовательной части алгоритма $T_{\text{nosl}}(N_0)$ приведены в Табл. 2 ($N_0 = 1000$, $t_{\text{mod}} = 1000$).

Полное ускорение:

$$S(12) = \frac{T_1(N_0, t_{\text{mod}}, \Delta t)}{T_{12}(N_0)} \approx 15.67. \quad \text{Очевидно,}$$

полное ускорение превзошло максимальное ускорение от многопоточности более чем на 30% за счет векторизации вложенных циклов. Векторное ускорение $S_2^{\text{vec}} \geq \frac{S(12)}{S_{\text{max}}(12)} \approx 1.306$.

Распараллеленная и векторизованная программа выполнялась для одной и той же конфигурации начальных ориентаций спинов. Количество доступных для использования ядер процессора ограничивалось заданием количества параллельных потоков от 1 до 12.

Табл. 2

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	Σ $\frac{\quad}{10}$
$[T_{\text{nosl}}(N_0)]_i$	0,15	0,13	0,10	0,19	0,12	0,13	0,10	0,12	0,10	0,13	0,13
$[T_{12}(N_0)]_i$	646	649	648	648	648	648	647	647	649	648	648

Табл. 3.

p	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
$[T_{\text{посл}}(N_0)]_i$	0,14	0,13	0,10	0,09	0,10	0,09	0,19	0,09	0,09	0,12	0,14
$[T_p(N_0)]_i$	7244	3645	2437	1836	1519	1267	1091	956	857	768	702

Времена выполнения параллельного алгоритма $T_p(N_0)$ и выполнения последовательной части алгоритма $T_{\text{посл}}(N_0)$ для $N_0 = 1000$, $t_{\text{mod}} = 1000$, $\Delta t = 0.05$ приведены в Табл. 3.

Для того чтобы апостериори оценивать ускорение векторизованного параллельного алгоритма на компьютерах с другим числом процессорных ядер, можно использовать полуэмпирическую формулу (8). Удельные накладные расходы многопоточного распараллеливания оценены, учитывая формулу (6) и результаты эксперимента в Табл. 3. Методом наименьших квадратов подошлись $S_2^{\text{vec}} = 1.353$ и $\tau(N_0) = 2.71 \cdot 10^{-4}$ так, чтобы минимизировать отклонение от эксперимента значений ускорений, рассчитанных по полуэмпирической формуле (8).

Доля векторизованных операций, с учетом формулы (7), составляет немногим более половины, т.е. предел при росте L — примерно двукратное векторное ускорение. Полученная оценка доли векторизованных операций указывает на то, что увеличение размера векторного регистра не приводит к многократному повышению производительности.

Апостериорная оценка показывает, что максимум ускорения на задаче 1 достигается при $p_{\text{max}}(N_0) \approx 61$, т.е. целесообразно использовать сопроцессоры Intel Xeon Phi. Полученная оценка удельных накладных расходов на многопоточное распараллеливание указывает на потенциальную возможность эффективного использования многоядерных процессоров.

Заключение

Применение суперкомпьютерных технологий для компьютерного моделирования процессов спиновой динамики в магнитных наност-

руктурах является эффективным. При тех конкретных решениях, которые были использованы в данной работе, среднее время выполнения программы сократилось по сравнению с альтернативным моделированием, не использующим распараллеливания, более чем в 15 раз. Целесообразно использовать суперкомпьютеры с многоядерными ускорителями.

Литература

1. Белозерова Т.С., Хеннер Е.К. Дипольные спиновые стекла: исследование методом Монте-Карло. ФТТ, 26, №1, 1984. С. 83-88.
2. Деменев А.Г., Хеннер Е.К. Метод численного моделирования спиновой динамики в магнитоизлучающих твердых телах. Межвузовский сборник Радиоспектроскопия №21, Пермь, 1993. С. 6-16.
3. Belozeroва T. S., Davis C. L., and Henner V. K. Role of inhomogeneous widening in radiofrequency coherent superradiation from highly polarized spin systems. Phys. Rev. B 58, 3111-3116 (1998).
4. Yukalov V. I., Henner V. K., Kharebov P. V., Yukalova E. P. Coherent spin radiation by magnetic nanomolecules and nanoclusters. Laser Phys. Lett. 5, 887-893 (2008).
5. Yukalov V. I., Henner V. K., Kharebov P. V. Coherent spin relaxation in molecular magnets. Phys. Rev. B 77, 134427 (2008).
6. Davis C. L., Henner V. K., Tchernatinsky A. V., Kaganov I. V. Spin-system radio-frequency superradiation: a phenomenological study and comparison with numeric simulations. Phys. Rev. B 72, 054406-054415 (2005).
7. Kumar V., Gupta A. Analyzing scalability of parallel algorithms and architectures // Journal of Parallel and Distributed Computing., 22(2), 1994, p.379-391.
8. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. — СПб.: БХВ-Петербург, 2002. — 608 с.
9. Миллер Р. Последовательные и параллельные алгоритмы: Общий подход / Р. Миллер, Л. Боксер; Пер. С англ. — М.БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. — 406 с.
10. Деменев А.Г. Анализ параллельных вычислительных алгоритмов: Учеб.-метод. пособие/ А.Г. Деменев; Перм. ун-т. — Пермь, 2007. 43 с.

Деменев Алексей Геннадьевич. Директор Научно-образовательного центра «Параллельные и распределенные вычисления», доцент кафедры прикладной математики и информатики механико-математического факультета Пермского государственного национального исследовательского университета. Окончил Пермский государственный университет в 1991 году. Кандидат физико-математических наук, доцент. Автор более 40 печатных работ. E-mail: a-demenev@mail.ru.

Белозёрова Татьяна Сергеевна. Ведущий программист Компьютерного центра механико-математического факультета Пермского государственного национального исследовательского университета. Окончила Пермский государственный университет в 1971 году. Кандидат физико-математических наук. Автор 35 печатных работ. Область научных интересов: спиновая динамика, математическое моделирование. E-mail: tsbelozeroval@yandex.ru

Харёбов Петр Владимирович. Старший преподаватель кафедры компьютерных систем и телекоммуникаций физического факультета Пермского государственного национального исследовательского университета. Окончил Пермский государственный университет в 2008 году. Автор 12 печатных работ. Область научных интересов: математическое моделирование физических явлений, магнитные явления, специализированные системы обработки и анализа изображений и сигналов. E-mail: kharebov.p@yandex.ru

Хеннер Виктор Карлович. Профессор кафедры теоретической физики физического факультета Пермского государственного национального исследовательского университета; профессор физического факультета Университета Луисвилля (США). Окончил Пермский государственный университет в 1971 году. Автор более 100 печатных работ, в т.ч. 2 монографий. Область научных интересов: физика магнитных явлений, физика твердых тел, физика элементарных частиц. E-mail: vkhenner@yandex.ru

Хеннер Евгений Карлович. Заведующий кафедрой информационных технологий механико-математического факультета Пермского государственного национального исследовательского университета. Окончил Пермский государственный университет в 1968 году. Доктор физико-математических наук, профессор, член-корреспондент Российской академии образования. Автор более 150 печатных работ, в т.ч. 4 монографий. Область научных интересов: информационные технологии, компьютерное математическое моделирование, информатика, теория и методика обучения. E-mail: ehennerv@psu.ru