

А. Г. Деменев, Т.С. Белозерова, В.К. Хеннер

Программная система для моделирования процессов коллективной магнитной релаксации в наноструктурах на мультиядерных процессорах с многоядерными ускорителями¹

АННОТАЦИЯ. Работа направлена на создание высокопроизводительной и надежной системы компьютерного моделирования спиновой динамики магнитных наноструктур на мультиядерных процессорах с многоядерными ускорителями.

Вычислительный эксперимент используется при разработке представлений о процессах коллективной магнитной релаксации, происходящих в различных типах синтезируемых лабораторно наноструктур. Используются реалистичные модели магнитных межчастичных взаимодействий. Показано, что применение суперкомпьютерных технологий при решении указанных задач спиновой динамики позволяет моделировать системы состоящие из тысяч магнитных наночастиц. Авторами создан параллельный код, эффективно использующий мультиядерные процессоры с многоядерными ускорителями. Получены оценки эффективности и масштабируемости реализованных параллельных алгоритмов. Показаны преимущества использования многоядерных графических ускорителей в дополнении к мультиядерным процессорам.

Ключевые слова и фразы: высокопроизводительные вычисления, параллельные алгоритмы, OpenMP, OpenACC, математическое моделирование, когерентные эффекты, магнитные наноструктуры,

Введение

Данная работа посвящена проблеме с созданием высокопроизводительных и надежных программных систем и компьютерных технологий моделирования спиновой динамики магнитных нано-

¹ Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Пермского края (проект 13-02-96018 р_урал_a).

структур. Элементами таких структур могут быть наномолекулы, нано-кластеры, 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. 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. 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. Сформулирован принцип соответствия, являющийся аналогом теоремы Эренфеста, и показали, что классические уравнения движения для системы взаимодействующих спинов имеют форму идентичную с квантовыми уравнениями. С практической точки зрения это позволяет заменить квантовые операторы на их классические средние значения и свести рост сложности вычислительной задачи от экспоненциального к полиномиальному по отношению к числу структурных элементов и времени наблюдения за системой.

(БУДЕТ текст)

1. Теория и метод

1.1. Предметная область моделирования

Когерентизация эволюции намагниченности чрезвычайно важна для экспериментального обнаружения магнетизма системы и его исследования. На ее основе мы изучаем магнетизм в наномолекулах и нанокластерах. Наноразмеры таких объектов позволят создавать очень компактные устройства, для которых когерентная релаксация является главным механизмом. Когерентное переключение намагниченности в молекулярных магнитах и магнитных нанокластерах с большим спином может произойти за время всего лишь нескольких ларморовских прецессий в сильном внешнем магнитном поле.

Теория формулируется на языке квантовых уравнений движения для индивидуальных спинов, затем, с использованием принципа соответствия, получается система микроскопических (не феноменологических) уравнений для взаимосвязанных классических магнитных моментов. Полученные и протестированные уравнения спиновой динамики позволяют моделировать магнитные свойства синтезируемых структур с учетом обменных и дипольных взаимодействий.

В части, касающейся теоретических исследований, основное внимание уделялось разработке представлений о процессах коллективной магнитной релаксации, происходящих в различных типах наноструктур, синтезируемых в экспериментах. Численное моделирование с параллельными алгоритмами применялось для исследования многомасштабной молекулярной динамики систем наноманитов. В области теории должно было быть изучено соответствие между квантовыми и классическими уравнениями спиновой динамики, продолжено изучение процессов коллективной магнитной релаксации, происходящих в различных типах наноструктур, син-

тезируемых в экспериментах, проведено численное моделирование когерентного излучения от систем магнитных наномолекул и нанокластеров. Полученные и протестированные уравнения спиновой динамики позволяют моделировать магнитные свойства синтезируемых структур с учетом обменных и дипольных взаимодействий. Динамику частиц, составляющих ансамбль, можно описать с помощью системы уравнений для магнитного момента каждой частицы $\boldsymbol{\mu}^{(k)}$:

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

Здесь α – безразмерный параметр спин-решеточной релаксации, γ_s – гиромагнитное отношение для электронов. Поле $\mathcal{H}^{(k)}$ в уравнении (1) – это магнитное поле, действующее на k -ый спин; в рассматриваемом случае оно включает: (1) постоянное внешнее поле $\mathbf{H}_0 \parallel Oz$; (2) одноосное анизотропное поле $\mathbf{H}_A = (H_A / \mu) (\boldsymbol{\mu})\mathbf{n}$, $H_A = 2E_A / \mu$, где \mathbf{n} – единичный вектор оси легкого намагничивания, E_A – энергия анизотропии; (3) поле обратной связи $\mathbf{H} = (H, 0, 0)$, наведенное в резонансной катушке, ось которой направлена по оси Ox ; (4) дипольное магнитное поле $\mathbf{H}_d^{(k)}$ индуцируемое парными диполь-дипольными взаимодействиями k -ой частицы со всеми остальными.

1.2. Версии программного кода

Имеется последовательный код и параллельные версии, созданные авторским коллективом: векторизованная многопоточная OpenMP-версия кода для мультиядерных процессоров Intel, OpenACC-версия для графических ускорителей. Достоинство нового стандарта OpenACC в том, что для автоматизированного распараллеливания на многоядерных ускорителях требуется минималь-

ное количество директив, как и для OpenMP для мультиядерных процессоров. Использовался компилятор PGI Accelerator, поддерживающий стандарты OpenACC и OpenMP. Уравнения движения для магнитных моментов частиц наноструктуры решаются численно. При постоянном шаге вычислительная сложность задачи растёт квадратично. Основные вычислительные затраты в программе Magnetodynamics-F, моделирующей когерентные процессы в наноманнитных структурах, написанной на языке Fortran-90, приходятся на расчёт методом, в котором магнитные моменты частиц рассматриваются как классические спины.

1.3. Априорные оценки

1.3.1. Априорные оценки ускорения и эффективности

При анализе потенциала распараллеливания исходных кодов программного обеспечения MagnetoDynamics, были использованы методы анализа информационной структуры алгоритмов и асимптотического анализа вычислительной сложности.

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):

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

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

Максимум ускорения получается при $p_{\max} \approx \sqrt{(1-f)/\tau}$. Векторное ускорение S^{vec} рассматриваемого алгоритма с долей векторизованных операций равной f^{vec} при L операндов в векторном регистре можно примерно оценить по формуле

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

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

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

(БУДЕТ текст и рисунки)

1.3.2. Априорные оценки масштабируемости

Оценку масштабируемости алгоритма даёт функция изоэффективности – такая зависимость $W = W(p)$ между размером задачи W и числом ядер p процессора, при которой эффективность постоянна ($E = \text{const}$). 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.

(БУДЕТ текст и рисунки)

2. Вычислительный эксперимент

2.1. Архитектуры используемых многоядерных ускорителей

(БУДЕТ текст и рисунки)

2.2. Пример вычислительного эксперимента

Проведено исследование многомасштабной молекулярной динамики систем наномангнитов с помощью численного моделирования с созданными нами параллельными алгоритмами для многоядерных компьютеров.

2.2.1. Вычислительный эксперимент на мультиядерных процессорах

(БУДЕТ текст и рисунки)

2.2.2. Вычислительный эксперимент на многоядерных процессорах

(БУДЕТ текст и рисунки)

2.2.3. Экспериментальные оценки ускорения и эффективности

Мы наблюдаем, что GPU-ускоренное моделирование когерентных процессов в магнитной наноструктуре заметно лучше, чем на CPU. Например, мы получили оценки ускорения и эффективности OpenMP-версии на двух 16-ядерных Intel Xeon Xeon E5-2680 and OpenACC-версии MagnetoDynamics-F на 2496 CUDA-ядерном NVIDIA Tesla K20 в задаче с пятью тысячами частиц.

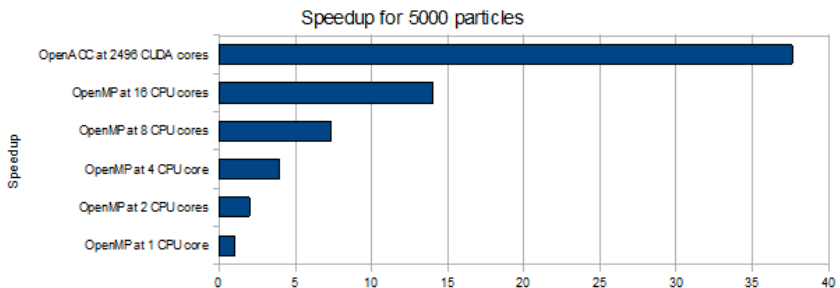


Рис. 1. Оценки ускорения моделирования на мультиядерных и многоядерных ускорителях (БУДЕТ перерисовано)

(БУДЕТ текст и рисунки)

3. Прогноз эффективности и масштабируемости

3.1. Архитектуры целевых многоядерных ускорителей

(БУДЕТ текст и рисунки)

3.2. Апостериорные оценки

3.2.1. Апостериорные оценки ускорения и эффективности

(БУДЕТ текст и рисунки)

3.2.2. Апостериорные оценки масштабируемости

(БУДЕТ текст и рисунки)

Заключение

Применение суперкомпьютерных технологий позволило проводить моделирование систем, состоящих из тысяч магнитных наночастиц. Среднее время выполнения расчетов на компьютерах с мультиядерными процессорами сократилось на порядок. Вычислительный эксперимент показывает, что многоядерные ускорители дополнительно дают возможность ускорить расчёты ещё в несколько раз. Апостериорные оценки масштабируемости показывают, что при дальнейшем увеличении числа моделируемых частиц преимущество в ускорении при расчетах на многоядерном GPU перед использованием мультиядерного CPU должно расти.

(БУДЕТ текст)

Благодарности. В работе использованы высокопроизводительные ресурсы и сервисы Научно-образовательного центра «Параллельные и распределённые вычисления» на базе оборудования и программного обеспечения, приобретённого в рамках Программы развития Пермского государственного национального исследовательского университета. Авторы благодарны А.С. Белозерову, А.В. Полякову, В.В. Полякову за программно-техническую поддержку использования суперкомпьютеров ПГНИУ.

Список литературы

- [1] Белозерова Т.С., Хеннер Е.К. Дипольные спиновые стекла: исследование методом Монте-Карло. ФТТ, 26, №1, 1984. С. 83-88.
- [2] Деменив А.Г., Хеннер Е.К. Метод численного моделирования спиновой динамики в магниторазбавленных твердых телах. Межвузовский сборник Радиоспектроскопия №21, Пермь, 1993. С. 6-16.
- [3] Belozerova 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] 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).
- [5] Kumar V., Gupta A. Analyzing scalability of parallel algorithms and architectures // Journal of Parallel and Distributed Computing., 22(2), 1994, p.379-391.
- [6] Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления.– СПб.: БХВ-Петербург, 2002.– 608 с.
- [7] Миллер Р. Последовательные и параллельные алгоритмы: Общий подход / Р. Миллер, Л. Боксер; Пер. С англ. – М.БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006.-406 с.
- [8] Деменив А.Г. Анализ параллельных вычислительных алгоритмов: Учеб.-метод. пособие/ А.Г. Деменив; Перм. ун-т. – Пермь, 2007. 43 с.
- [9] Деменив А.Г., Белозерова Т.С., Харевов П.В., Хеннер Е.К., Хеннер В.К. О решении задач магнитодинамики и когерентных процессов в наномангнитных структурах на суперкомпьютере / Высокопроизводительные параллельные вычисления

- на кластерных системах. Материалы XII Всероссийской конференции (Н. Новгород, 26-28 ноября 2012 г.). ННГУ, 2012. С.122-124.
- [10] OpenACC: [сайт].
URL: <http://www.openacc.org>
- [11] А.Г.Деменев, Т.С.Белозерова, П.В.Харегов, В.К.Хеннер, Е.К.Хеннер. *Применение суперкомпьютеров для решения задач магнитодинамики и исследования когерентных процессов в наномагнитных структурах* // Информационные технологии и вычислительные системы, Институт системного анализа РАН (Москва), ISSN:2071-8632. - 2014. - №1. С. 25-34.
- [12] Свидетельство на компьютерную программу №2014617685 MagnetoDynamics, Т.С.Белозерова, В.К.Хеннер, 2014.
- [13] GPU Technology Conference (GTC) March 24-27, 2014, San Jose, CA, USA. Abstract of the talk by A.G.Demenev, T.S.Belozerova, P.V.Kharebov, V.K.Henner, E.K.Henner. GPU-accelerated modeling of coherent processes in magnetic nano-structures.
- [14] V.I.Yukalov, V.K.Henner, E.P.Yukalova, Spin superradiance by magnetic nanomolecules and nanoclusters. Abstract of the talk at the International Workshop on Laser Physics, Sofia, Bulgaria, July 2014.

Об авторе:



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 научных работ и 6 учебно-методических 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 около 40 научных работ. Область научных интересов – спиновая динамика, математическое моделирование. E-mail: tsbelozerova@yandex.ru.

e-mail: tsbelozerova@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 научных работ, в т.ч. 2 монографий, и 20 учебно-методических (учебных) работ. Область научных интересов - физика магнитных явлений, физика твердых тел, физика элементарных частиц. E-mail: vkhenner@yandex.ru.

e-mail: vkhenner@yandex.ru

A.G. Demenev, T.S. Belozerova, V.K. Henner. (БУДЕТ Название статьи по-английски!).

АБСТРАКТ. (БУДЕТ Перевод аннотации на английский язык!).

Key Words and Phrases: (БУДЕТ Перевод ключевых слов на английский язык!).