# Преимущества параллельных вычислений при моделировании основного состояния наноразмерных ферримагнетиков*

*В.А. Родионов*
Томский государственный университет

*Проведён анализ эффективности двух модификаций алгоритма Метрополиса с применением распараллеливания для моделирования спиновой конфигурации наноразмерных ферримагнитных частиц различного диаметра. Показано, что максимальный выигрыш в скорости расчётов даёт распараллеливание вычисления энергии.*

За прошедшее десятилетие был достигнут существенный прогресс в производительности вычислительной техники, а также и некоторый предел в скорости вычислений, которую можно получить при помощи одного ядра, поэтому в настоящее время основным направлением развития является увеличение числа ядер процессоров. Возросшее число ядер позволяет выполнять несколько наборов операций одновременно, что значительно ускоряет вычислительные процессы, однако требует от разработчиков программного обеспечения разбиения задачи на допускающие независимое выполнение подзадачи и контроля синхронизации потоков внутри процесса вычисления [1]. Некоторые вычислительные алгоритмы допускают возможность распараллеливания разными способами, при этом результирующее время и ресурсы, затраченные на вычисление, будут также отличаться. Таким образом, в настоящее время для обеспечения максимального быстродействия при расчетах необходимо использовать алгоритмы, которые могут быть разбиты на подзадачи оптимальным способом. Важно добавить, что невозможно точно предсказать, насколько будет эффективно то или иное разбиение алгоритма на части для данной конфигурации оборудования.

В данной работе было произведено исследование быстродействия алгоритма Метрополиса для расчета энергии сферической наноразмерной ферримагнитной частицы со структурой шпинели, элементарная ячейка которой представлена на рис. 1.

* Работа выполнена при поддержке программы АВЦП, грант №7142.

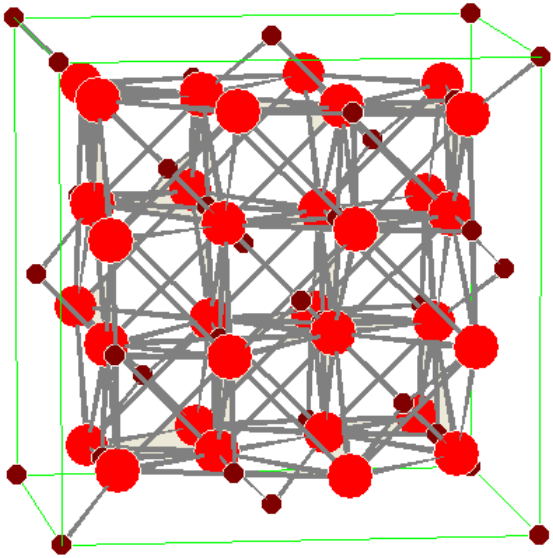

Рис. 1. Элементарная ячейка

В элементарной ячейке содержится 8 магнитоактивных ионов в тетраэдрической подрешётке и 16 в октаэдрической подрешётке, ориентированных антипараллельно. Расчёты проводились для частиц диаметром 3, 4 и 6 элементарных ячеек, содержащих 365, 838 и 2728 магнитоактивных атомов соответственно. Во всех случаях толщина возмущённого поверхностного слоя частицы бралась равной половине элементарной ячейки.

В расчётах используется модельный гамильтониан вида [2]:

$$H = -\sum_{i\neq j\in c} J^{c}_{ab}\vec{S}_i\vec{S}_j - \sum_{i\neq j\in c} J^{c}_{bb}\vec{S}_i\vec{S}_j - \sum_{i\neq j\in s} J^{s}_{ab}\vec{S}_i\vec{S}_j - \sum_{i\neq j\in s} J^{s}_{bb}\vec{S}_i\vec{S}_j -$$

$$-K_c\sum_i (S^2_{ix}S^2_{iy} + S^2_{iy}S^2_{iz} + S^2_{ix}S^2_{iz}) - K_s\sum_k (\vec{S}_k\vec{e}_k)^2 - g\mu_B\vec{H}_0\sum_i \vec{S}_i \ ,$$

где индекс ***c*** относится к атомам внутреннего ядра частицы, ***s*** – атомам её поверхностного слоя. Во всех суммах за исключением последней суммирование проводится по первой координационной сфере. Единичный вектор $e$ определяет взаимное расположение спинов в рамках первой координационной сферы рассматриваемого атома в поверхностном слое, где векторы $p_{i,k}$ – радиус-векторы рассматриваемых ближайших соседей:

$$\vec{e}_k = \sum_i (\vec{p}_k - \vec{p}_i) \Big/ \left| \sum_i (\vec{p}_k - \vec{p}_i) \right|.$$

Множители в суммах $J$ – значения соответствующих интегралов обмена; $K$ – значения констант анизотропии; $H_0$ – нормированная величина магнитного поля; $S_i$ и $S_j$ – спиновые магнитные моменты атомов подрешёток $a$ и $b$ соответственно.

Суть алгоритма Метрополиса [3] заключается в выборе случайного вектора магнитного момента и повороте его на некоторый случайный угол по каждой из трёх осей, после чего вычисляется энергия системы и в случае её уменьшения изменение принимается, алгоритм прекращает работу по совершении заданного количества нерезультативных шагов. Стоит отметить, что при увеличении количества частиц в модели для сохранения заданной точности моделирования необходимо увеличивать количество нерезультативных шагов до остановки на величину, как минимум пропорциональную увеличению числа частиц в модели.

Для сравнения было выбрано три основных варианта распараллеливания: без распараллеливания вычислительной части, с распараллеливанием только функции вычисления энергии текущей спиновой конфигурации частицы и с распараллеливанием вычисления текущей конфигурации и созданием двух конкурирующих копий с разными конфигурациями для каждого шага вычислений, где энергия каждой копии вычисляется в отдельном потоке. Для второго случая были исследованы варианты с разбиением вычислительного алгоритма на 2, 4 и 8 потоков, а для третьего – на 1, 2 и 4 потока для каждой копии, что также даёт 2, 4 и 8 потоков на вычислительный алгоритм.

Для проверки эффективности данных вариантов были выбраны 2 конфигурации ПК на базе процессоров Intel Core i7 860 и Intel Core i5 650, остальные характеристики данных ПК практически идентичны и не являются существенными, поскольку данный алгоритм не требователен к объёму оперативной памяти и не использует во время работы видеоадаптеры, жёсткие диски или периферийные устройства. Представленные процессоры отличаются по количеству ядер и тактовой частоте: 4 ядра 2,8 ГГц каждое для Core i7 860 и 2 ядра 3,2 ГГц каждое для Core i5 650, важно заметить, что данные процессоры поддерживают технологию Hyper-threading, что позволяет запускать по 2 логических процесса на каждом ядре и поднимает производительность на 10 – 30%.

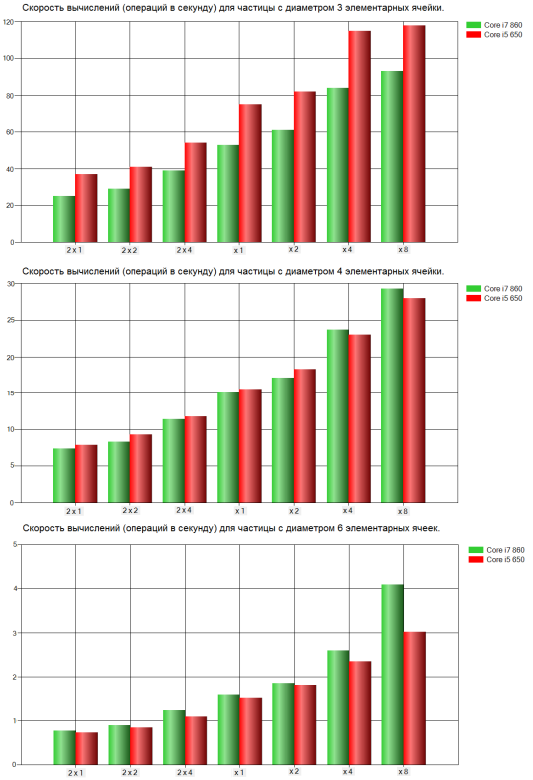


Рис. 2. Влияние размера задачи на эффективность вычислений

В ходе экспериментов было обнаружено, что процессор Core i5 на 20–30% более эффективен при обсчёте модели частицы с диаметром, равным трём элементарным ячейкам. Прирост производительности различных алгоритмов практически не отличается для обоих процессоров в тех случаях, когда число потоков для вычислительной части равно 4 или менее. При использовании 8 вычислительных потоков прирост производительности для Core i5 составляет 3–5%, а для Core i7 – около 10%, относительно варианта с 4 вычислительными потоками, что говорит о низкой целесообразности использования числа вычислительных потоков, большего, чем число потоков, одновременно обрабатываемых процессором. На моделях большего размера разница в производительности между процессорами уменьшается; так, для частицы с диаметром 4 элементарных ячейки разница уже не превышает 10%, а для частицы с диаметром 6 элементарных ячеек разница в сред-

нем 5%, но уже в пользу Core i7. Наиболее существенна разница при использовании 8 потоков для алгоритма вычисления энергии, где большее число ядер позволяет эффективно обрабатывать все потоки, что приводит к опережению по скорости вычислений уже для частицы с диаметром 4 элемент арных ячейки. Также было установлено, что шаги алгоритма с конкурирующими моделями частицы выполняются медленнее, так как содержат больше вычислений, но результирующие значения энергии при сопоставимом времени отличаются несущественно, несмотря на меньшее число выполненных шагов. Результаты экспериментов представлены на рис. 2.

Особенно важным является повышение скорости вычислений при увеличении большего числа ядер с ростом количества частиц в модели, что может быть обусловлено более эффективной загрузкой ядер процессора. Данная закономерность доказывает эффективность и целесообразность применения параллельных вычислений для моделей большого размера, что показано на рис. 3, где $a$ – обозначение размера элементарной ячейки.

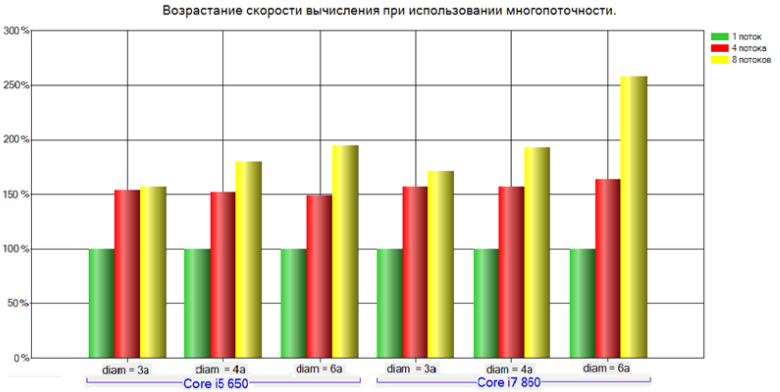


Рис. 3. Возрастание скорости вычислений при использовании многопоточности

Показано, что наиболее эффективным для моделирования на стандартном ПК является распараллеливание только вычисления энергии, так как нет дополнительных затрат на сравнение и изменение конкурирующих моделей частицы. Кроме того, с возрастанием размера используемой частицы время на создание потоков уменьшается в сравнении со временем, затраченным на вычисление энергии для текущей конфигурации, что показывает целесообразность использования параллельных вычислений для задач с большим объёмом расчетов или с

расчетами на очень больших массивах. Проведённые расчёты показывают, что для моделирования магнитных свойств реальной наночастицы диаметром 8–10 нм, что соответствует наночастицам, содержащим 12000–15000 магнитоактивнх атомов, необходимо использование суперкомпьютера, а оптимальным является алгоритм с несколькими конкурирующими моделями частицы и максимально возможным распараллеливанием алгоритма вычисления энергии.

**Литература**


1. **Albahari B., Albahari J.** C# 4.0 in a Nutshell. – O'Reilly Media, 2010. – 652 p.
2. **Mazo-Zuliaga J., Restrepo J., Munoz F., Mejia-Lopez J.** // J. of Applied Physics. – 2009. – Vol. 105. – P.123907.
3. **Биндер К.** Методы Монте-Карло в статистической физике. – М.:Мир, 1982. – 389 с.