



**ФГБОУ ВПО «Пермский государственный  
национальный исследовательский университет»  
Научно-образовательный центр  
«Параллельные и распределенные вычисления»**

**Применение облачных вычислительных сервисов Пермского государственного  
национального исследовательского университета для решения задач  
магнитодинамики и когерентных процессов в наномагнитных структурах**

*III Международная конференция «Облачные вычисления.  
Образование. Исследования. Разработка»  
(г.Москва, 6-7 декабря 2012 г.)*

- **Деменев Алексей Геннадьевич**, к. ф.-м. н., доц. , директор НОЦ ПиРВ, доцент кафедры прикладной математики и информатики;
- **Белозерова Татьяна Сергеевна**, к.ф.-м.н., ведущий программист КЦ ММФ;
- **Харобов Петр Владимирович**, к.ф.-м.н., ассистент кафедры компьютерных систем и телекоммуникаций;
- **Хеннер Виктор Карлович**, д.ф.-м.н., проф., профессор кафедры теоретической физики;
- **Хеннер Евгений Карлович**, д.ф.-м.н., чл.-корр.РАО, зав.кафедрой информационных технологий.

# Программа развития ПГНИУ

- **Тема** - «Рациональное природопользование: технологии прогнозирования и управления природными и социально-экономическими системами».
- **Направлена** на создание системы подготовки кадров, генерацию новых знаний и технологий, инновационную деятельность для реализации приоритетного направления развития науки, технологий и техники «Рациональное природопользование».
- **Сосредоточена** на вопросах технологий прогнозирования и управления природными и социально-экономическими системами, по которым Университет находится на лидирующих позициях в Российской Федерации.
- **Логическое продолжение** инновационной образовательной программы, реализованной ПГУ в 2006-2007 гг. в рамках Национального проекта «Образование».



# Научно-образовательные комплексы ПГНИУ

**Реализация программы** предполагается в рамках 4 научно-образовательных комплексов:

- «Технологии изучения, освоения, прогнозирования и управления георесурсами и геосистемами» (НОК1),
- «Моделирование и управление физическими и химическими процессами, развитие технологий» (НОК2),
- «Наукоёмкие технологии управления живыми системами» (НОК3),
- «Прогнозирование и управление процессами социально-экономического развития стран и территорий на основе современных информационных технологий» (НОК4).

**Новые высокопроизводительные сервисы** создаются по проекту «Развитие центра коллективного пользования высокопроизводительными вычислительными ресурсами – НОЦ ПиРВ» (руководитель Деменев А.Г.) в рамках НОК2





*Система ПГУ-Тесла на базе  
процессоров Intel Xeon 5670 2.93ГГц, NVIDIA Tesla S2050 и сети InfiniBand  
Научно-образовательного центра "Параллельные и распределенные вычисления"  
Пермского государственного университета*

занимает позицию

**№ 44**

в рейтинге **Top50** самых мощных компьютеров СНГ с результатом  
по производительности на тесте Linpack

**4.883 Tflop/s**

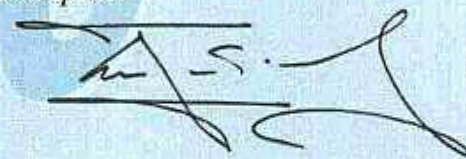
14-ая редакция рейтинга Top50 опубликована на Международной научной конференции  
"Параллельные вычислительные технологии"  
29 марта 2011 года, г. Москва

*Примите искренние поздравления от составителей Top50!*



Воеводин Вл. В.

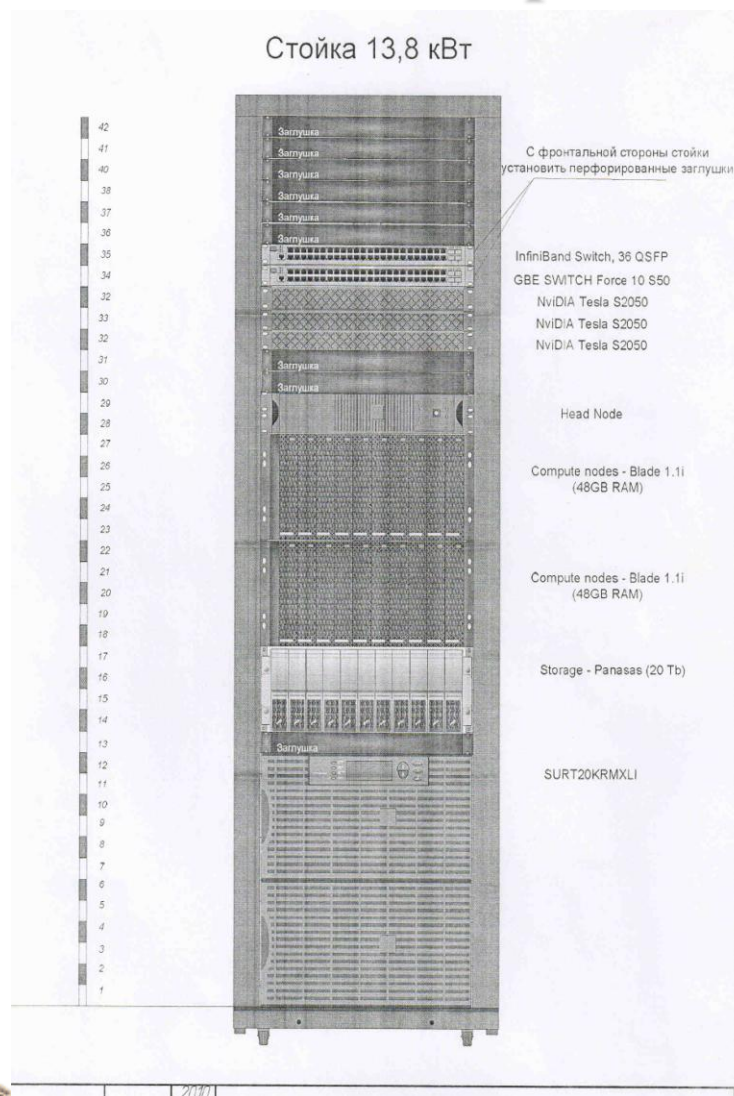
Научно-исследовательский  
вычислительный центр МГУ имени М.В.Ломоносова



Шабанов Б. М.

Межведомственный  
суперкомпьютерный центр РАН

# Высокопроизводительный вычислительный комплекс с гибридной архитектурой



## Производительность суперкомпьютера «ПГУ-Тесла» :

- до 240 задач на вычислительных ядрах CPU Intel Xeon 5670,
- до 5376 подзадач на вычислительных ядрах GPGPU Nvidia Tesla S2050;
- высокоскоростная сеть QDR Infiniband позволяет в 40 раз быстрее обмениваться информацией между задачами, чем обычная сеть Gigabit Ethernet;
- 9,0 Терафлопс – пиковая (на операциях с вещественными числами двойной точности);
- 4,9 Терафлопс – на тесте Linpack (большие задачи линейной алгебры);
- суммарный объем оперативной памяти вычислительных узлов – 960 Гигабайт;
- система хранения данных – 20 Терабайт.



# Высокопроизводительный SMP-сервер

Приобретен программно-технический комплекс  
"высокопроизводительный SMP-сервер".

- Тип компьютера – SMP, процессоров – 8, ядер - 32. Тип процессора - Opteron. ОЗУ - 128 гигабайт. ЖД - 4 терабайта. Коммуникационные интерфейсы - 3 порта GigabitEthernet. ОС - Linux (CentOS). Ускоритель CUDA - ГПУ NVIDIA GTX480.

Предназначен для применения стратегических информационных технологий при проведения исследований, поддержанных РФФИ :

- (01) математика, информатика и механика;
- (06) науки о человеке и обществе;
- (07) информационные технологии и вычислительные системы;
- (08) фундаментальные основы инженерных наук.

Созданы "облачные" вычислительные сервисы для оказания информационно-вычислительных услуг по требованию.

Комплекс вошел в состав оборудования центра коллективного пользования высокопроизводительными вычислительными ресурсами – НОЦ ПиРВ ПГНИУ.



# Облачные сервисы НОЦ ПиРВ ПГУ

## SaaS

- на базе открытых пакетов инженерного и научного анализа;
- возможность решения научных и инженерных задач;
- визуализации больших объемов научных данных;
- инструмент построения сложных расчетных сеток.

## PaaS

- на базе ОС Linux (CentOS и др.);
- средства разработки параллельного ПО (OpenMP, MPI, CUDA и др.);
- возможность создания собственного ПО и участие в проектах Open Source.

## IaaS

- на базе Xen Cloud Platform (аналог Citrix XenServer);
- возможность создания ПО для разных ОС и участие в проектах Open Source по созданию ОС.

## HPCaaS

- на базе менеджера ресурсов Torque, ПО мониторинга Ganglia;
- возможность решения задач высокой вычислительной сложности



# Введение

- **Цель** - развитие и применение стратегических информационных технологий в исследовании процессов многомасштабной динамики наномагнитов в твердых телах.
- **Направлен** на конкретную фундаментальную задачу развития и применения вычислительных и информационных технологий в моделировании многомасштабной молекулярной динамики многочастичных систем наномагнитов.
- **Барьер** - использование традиционных методов и алгоритмов компьютерного моделирования не позволяет достигнуть необходимых результатов при исследовании многочастичных систем с размерами, требуемыми практикой.
- **Ожидания** - применение суперкомпьютерных технологий при выполнении компьютерного моделирования в исследовании процессов в парамагнитных и ферромагнитных наноструктурах позволит использовать реалистичные модели из тысяч магнитных частиц.
- **Новизна** - параллельные алгоритмы многомасштабной молекулярной динамики, реализованные в виде суперкомпьютерного ПО и апробированные при математическом моделировании магнитодинамических когерентных эффектов, в т.ч. числе сверхизлучения.





# Введение

- **Сверхизлучение** — необычный феномен для макроскопической физики, когда излучаемая мощность пропорциональна не числу спинов, а их квадрату, происходит из-за когерентизации спиновых переходов.
- **Когерентные эффекты** - эффективные спин-спиновые взаимодействия не уменьшаются с расстоянием, шкала времени для процессов релаксации обратно пропорциональна числу спинов.
- **Условия проявления** – при помещении низкотемпературного образца в пассивный резонатор.
- **Практическая перспектива** - возможное использование больших скоростей когерентных процессов в высокоспиновых наномолекулах, кластерах и кристаллах, в различного рода датчиках и переключателях, особенно в наноустройствах, где традиционные механизмы релаксации выражены очень слабо.
- **Область приложения** - разработки технологий получения нанодетекторов слабых излучений и создания компактных систем быстрой магнитной записи.



# Предметная область моделирования

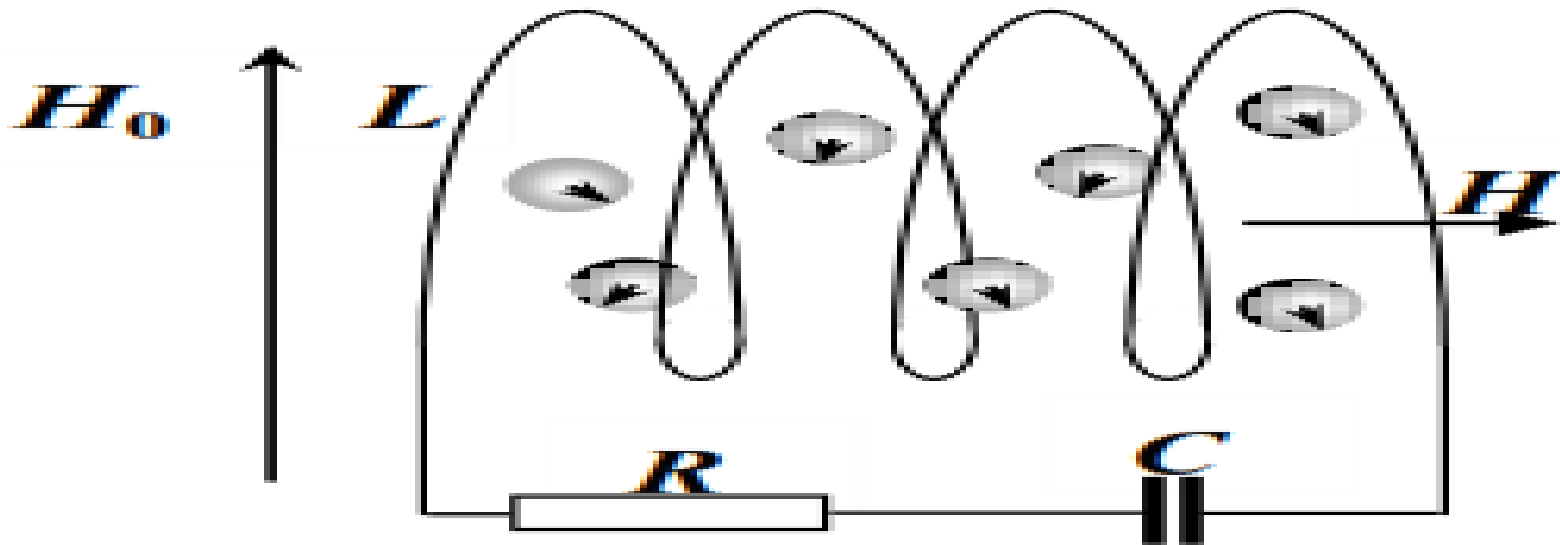
Спин (в квантовой механике) - аналог классического момента количества движения микроскопической частицы.

Спин (в физике магнитных явлений) – магнитный момент.

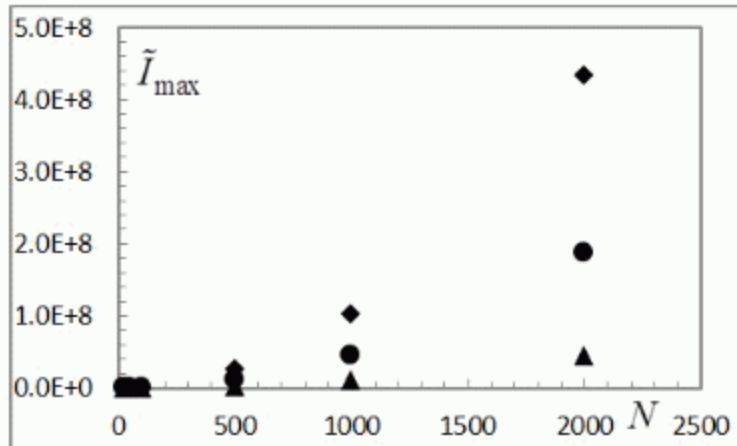
Частицы (носители спинов) помещены в резонатор (LCR контур).

В процессе релаксации спиновая прецессия наводит ЭДС в контуре.

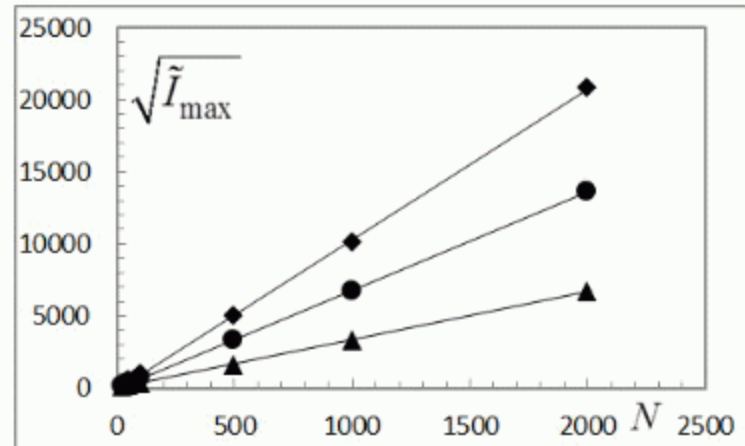
Магнитное поле индуцируемого тока (поле обратной связи) взаимодействует со спинами, влияя на процесс релаксации.



# Предметная область моделирования



а)

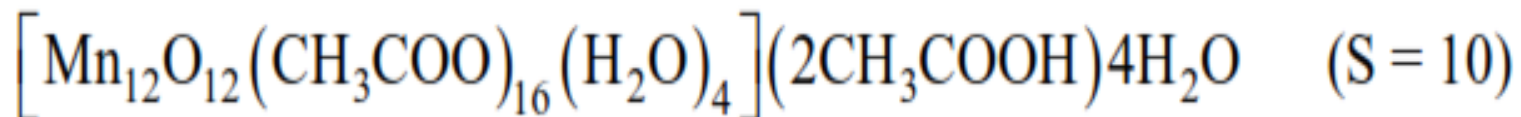
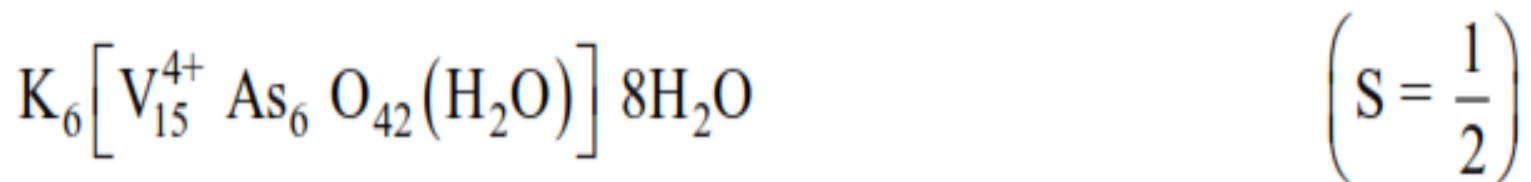


б)

Зависимость (а) максимума интенсивности  $\tilde{I}_{\max}$  и (б) квадратного корня максимума интенсивности  $\sqrt{\tilde{I}_{\max}}$  от  $N$ , при начальных поляризациях:  $S_z(0) = -0.99, -0.66, -0.33$ ; обозначены квадратными, круглыми и треугольными маркерами соответственно.



# Наномагнитные молекулы





# Математическая постановка задачи

- «Классические» спины: движение магнитного момента каждой частицы описывается одним классическим вектором.
- Динамику частиц, составляющих ансамбль, можно описать с помощью уравнения для  $k$ -той частицы, т.е. для магнитного момента :

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

- здесь  $\alpha$  – безразмерный параметр спин-решеточной  $\gamma_s$  релаксации,  $\mu$  – гиромагнитное отношение для электронов



# Математическая постановка задачи

Поле  $\mathbf{H}^{(k)}$  в уравнении (1) – это общее магнитное поле, действующее на  $k$ -тый спин;

Включает:

- 1) постоянное внешнее поле  $\mathbf{H}_0 \parallel Oz$  ;
- 2) одноосное анизотропное поле

$$\mathbf{H}_A = (H_A / \mu) (\mu \mathbf{n}) \mathbf{n}, \quad H_A = 2E_A / \mu$$

где  $\mathbf{n}$  – единичный вектор оси легкого намагничивания,

$E_A$  – анизотропная энергия частицы;

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 частиц.



# Система уравнений

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

$$\begin{aligned} \dot{e}_x^{(k)} = & -\left(1 + p_A e_z^{(k)}\right) e_y^{(k)} - p_D \left(e_y^{(k)} \tilde{H}_{dz}^{(k)} - e_z^{(k)} \tilde{H}_{dy}^{(k)}\right) + \alpha \left(p_H + p_D \tilde{H}_{dx}\right) \left(e_y^{(k)2} + e_z^{(k)2}\right) \\ & - \alpha \left(1 + p_A e_z^{(k)} + p_D \tilde{H}_{dz}\right) e_x^{(k)} e_z^{(k)} - \alpha p_D \tilde{H}_{dy} e_x^{(k)} e_y^{(k)}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \dot{e}_y^{(k)} = & \left(1 + p_A e_z^{(k)}\right) e_x^{(k)} - p_H e_z^{(k)} - p_D \left(e_z^{(k)} \tilde{H}_{dx}^{(k)} - e_x^{(k)} \tilde{H}_{dz}^{(k)}\right) - \alpha \left(p_H + p_D \tilde{H}_{dx}\right) e_x^{(k)} e_y^{(k)} \\ & - \alpha \left(1 + \tilde{H}_{dz} + p_A e_z^{(k)}\right) e_y^{(k)} e_z^{(k)} + \alpha \tilde{H}_{dy} \left(e_x^{(k)2} + e_z^{(k)2}\right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \dot{e}_z^{(k)} = & p_H e_y^{(k)} - p_D \left(e_x^{(k)} \tilde{H}_{dy}^{(k)} - e_y^{(k)} \tilde{H}_{dx}^{(k)}\right) - \alpha \left(p_H + p_D \tilde{H}_{dx}\right) e_x^{(k)} e_z^{(k)} \\ & + \alpha \left(1 + p_A e_z^{(k)} + p_D \tilde{H}_{dz}\right) \left(e_x^{(k)2} + e_y^{(k)2}\right) - \alpha p_D \tilde{H}_{dy} e_y^{(k)} e_z^{(k)}. \end{aligned}$$

$$\frac{d^2}{d\tilde{t}^2} p_H + 2 \frac{\gamma}{\omega_0} \frac{d}{d\tilde{t}} p_H + \left(\frac{\omega_r}{\omega_0}\right)^2 p_H = -4\pi\beta \left(\frac{1}{\mu N} \frac{d^2}{d\tilde{t}^2} \sum_{l=1}^N \mu_x^{(l)}\right)$$

$$\omega_r = c_0 / \sqrt{LC}$$

$$2\gamma = c_0^2 R / L = \omega_r / Q,$$

$$\beta = \eta N \mu / (V H_0)$$

# Программный код

**К началу проекта** исходные программные коды, моделирующие магнетодинамику и когерентные процессы спиновой динамики:

- 1) программа **Spins**, создана в среде Borland C++ Builder Хареговым П.В.;
- 2) программа **MagnetoDynamics**, создана в среде Borland Delphi Белозеровой Т.С.

## Ограничения кодов:

- только последовательные алгоритмы;
- компилировались только под MS Windows.

Не позволяли эффективно использовать высокопроизводительные вычислительные системы в исследованиях магнетодинамики и когерентных процессов в наноманитных структурах.

## Использованы методы:

- анализ информационной структуры алгоритмов;
- асимптотического анализа сложности алгоритмов.





# Потенциал распараллеливания алгоритмов

Асимптотической оценки ускорения и эффективности многопоточного распараллеливания алгоритмов, реализованных в программах Spins и MagnetoDynamics, на типичных задачах:

- теоретические (по Амдалу);
- полуэмпирические (с учетом накладных расходов на поддержку многопоточности на мультиядерных процессорах).

С ростом числа моделируемых наночастиц вычислительная сложность алгоритмов растет:

- при постоянном шаге интегрирования  $h(N) = h(N_0)$  - асимптотически квадратично;
- при автоматическом выборе шага интегрирования  $h(N) \approx h(N_0) \cdot N_0 / N$  - возможно асимптотически кубично.

$$T_1(N) = T_1(N_0) \cdot \frac{N^2}{N_0^2} \cdot \frac{h(N)}{h(N_0)}$$



# Потенциал распараллеливания алгоритмов

С ростом числа моделируемых наночастиц требования к оперативной памяти алгоритмов растут асимптотически:

- Spins - квадратично  $Mem(N) = Mem(N_0) \cdot \frac{N^2}{N_0}$
- MagnetoDynamics - линейно  $Mem(N) = Mem(N_0) \cdot \frac{N}{N_0}$

**Гипотеза:** пусть накладные расходы на многопоточное распараллеливание асимптотически растут также, как требования к оперативной памяти.

**Следствие:** с ростом числа моделируемых наночастиц возможен рост масштабируемости распараллеливания.



# Трудоемкость переноса на суперкомпьютер

Анализировалась практика аналогичного переноса программного обеспечения из одной среды программирования в другую.

Показано, что потенциал распараллеливания исходных кодов моделирующего программного обеспечения трудно реализовать на практике:

- среды и библиотеки программирования, использованные при разработке Spins и MagnetoDynamics, работают только в **Windows**;
- большинство суперкомпьютеров, в т.ч. «ПГУ-Тесла», использует операционную систему **Linux**.

Трудно реализовать в кросс-платформенную среду разработки:

- перенос Spins на языке Borland C++ из-за того, что используется **не кросс-платформенная библиотека Microsoft .NET 4.0**;
- перенос MagnetoDynamics на языке Borland Delphi из-за того, что язык Borland Delphi **не имеет международного стандарта**.



## Новый код на суперкомпьютер

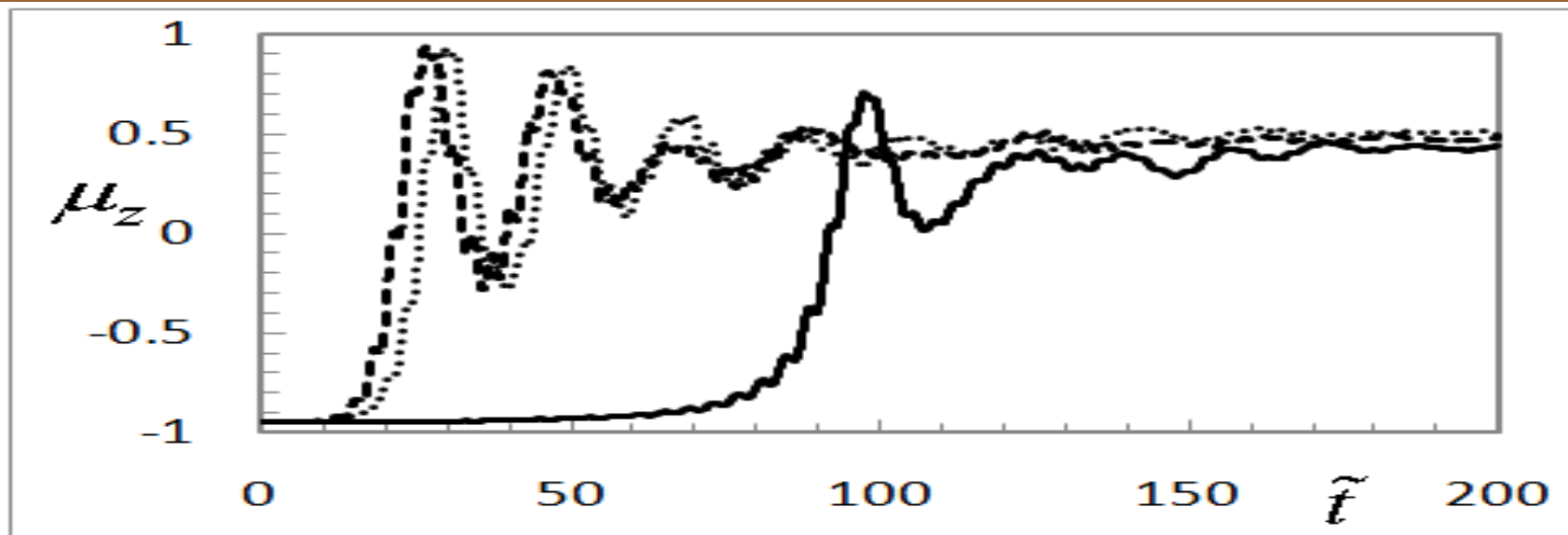
Создана программа MagnetoDynamics-F :

- параллельная версия моделирующего программного кода Белозеровой Т.С. на языке Fortran;
- для распараллеливания использован интерфейс прикладного программирования OpenMP;
- получена полуэмпирическая формула для асимптотической оценки ускорения и эффективности распараллеливания на мультиядерных процессорах;
- ведется работа по распараллеливанию с использованием OpenACC.





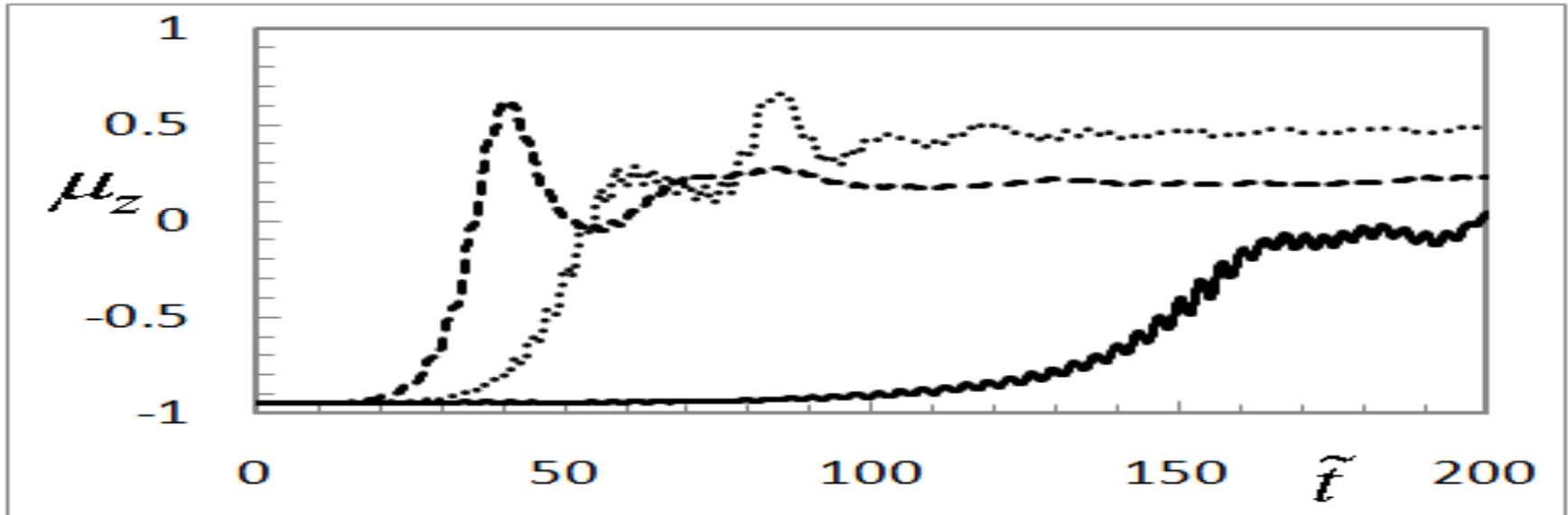
# Исследования одномерной наноструктуры



Зависимость z-компоненты общей намагниченности от безразмерного времени для 1D-мерной наноструктуры,  $p_D = 0.05$ ,  $N = 144$ : точечная линия для спинов, расположенных оси X, штриховая линия – вдоль оси Y, сплошная линия – вдоль оси Z.

$$\beta = 0.012 \quad \omega_r = \omega_0 \quad Q = 20$$

# Исследования двумерной наноструктуры



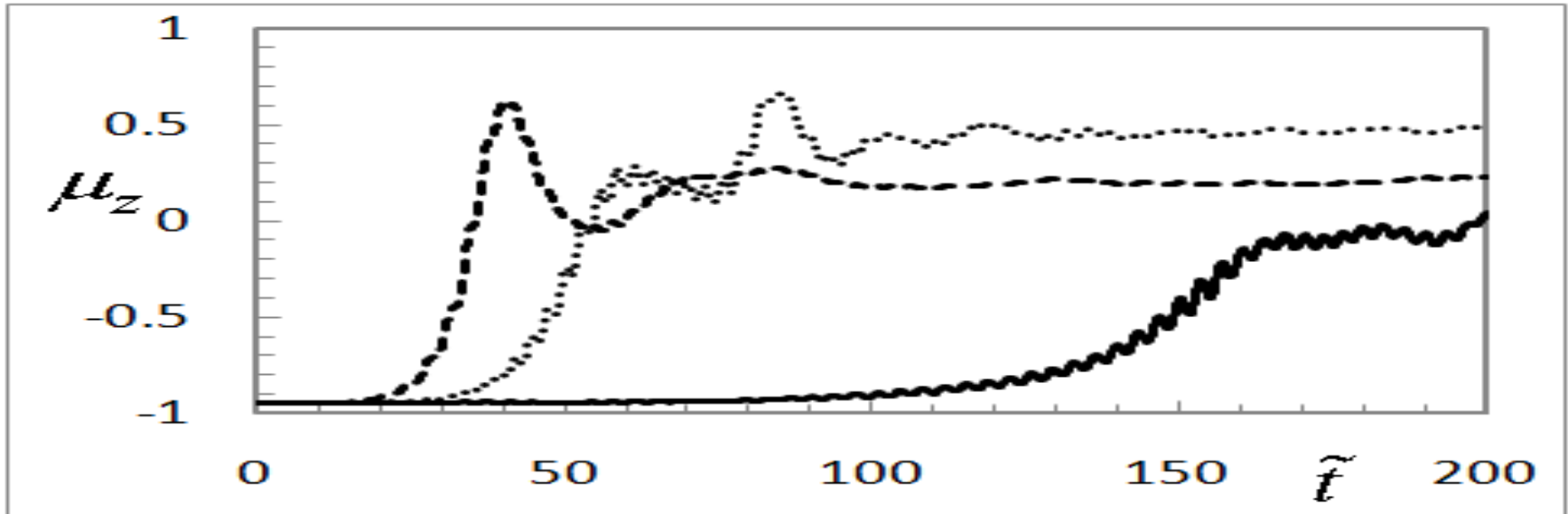
Зависимость z-компоненты общей намагниченности от безразмерного времени для 2D-мерной наноструктуры,

$p_D = 0.05$ ,  $N = 144$ : точечная линия плоская решетка спинов, расположенных перпендикулярно оси Z, штриховая линия – перпендикулярно оси Y, сплошная линия – перпендикулярно оси X.

$$\beta = 0.012 \quad \omega_r = \omega_0 \quad Q = 20$$



# Исследования трехмерной наноструктуры



Зависимость z-компоненты общей намагниченности от безразмерного времени для 3D-мерной наноструктуры, кубическая решетка спинов

$$, N = 125: \quad \omega_r = \omega_0 \quad \beta = 0.012 \quad Q = 20$$

точечная линия –  $p_D = 0.01$

штриховая линия –  $p_D = 0.05$

сплошная линия –  $p_D = 0.1$

# Заключение

Сделан анализ потенциала распараллеливания исходных кодов программного обеспечения Spins и MagnetoDynamics, предназначенных для исследования динамики многочастичных систем наномагнитов.

Создана параллельная версия программы MagnetoDynamics-F — моделирующего программного кода Белозеровой Т.С. на языке Fortran, использующая интерфейс прикладного программирования OpenMP.

Получены оценки ускорения и эффективности реализованных алгоритмов на типичных задачах.

Созданный параллельный код обеспечивает проведение исследований:

- возможности регулирования времени переключения магнитного момента наноструктуры;
- роли фактора геометрия нанокристалла в свойствах сверхизлучения с 1-, 2- и 3-мерными объектами;
- частных решений системы уравнений для описания магнитодинамики наноточки, индуктивно связанной с пассивным резонатором;
- зависимости нелинейного решения от начальной ориентации магнитного момента с целью нахождения конфигураций, в которых сверхизлучение и радиационное затухание максимальны.





# Благодарности

Работа выполнена с использованием облачных вычислительных сервисов Научно-образовательного центра «Параллельные и распределенные вычисления» (НОЦ ПиРВ) Пермского государственного национального исследовательского университета (ПГНИУ) и высокопроизводительного оборудования:

- программно-технический комплекс «Высокопроизводительный SMP-сервер» (грант РФФИ 10-01-05021);
- суперкомпьютер «ПГУ-Тесла» (проект "Развитие центра коллективного пользования высокопроизводительными вычислительными ресурсами — НОЦ ПиРВ" НОК 2 Программы развития ПГНИУ).

Работа была выполнена при поддержке грантов РФФИ:

- 10-02-96023 - р\_урал\_a (руководитель В.К. Хеннер)
- 11-07-96007 - р\_урал\_a (руководители Е.К. Хеннер, А.Г. Деменев).



# Надеюсь на плодотворное и взаимовыгодное сотрудничество!

---

## Список литературы

1. Деменев А.Г. Анализ параллельных вычислительных алгоритмов: Учеб.-метод. пособие/ А.Г. Деменев; Перм. ун-т. — Пермь, 2007. 43 с.
2. Henner, V.K., Raikher, Yu.L., Kharebov, P.V. Fast coherent relaxation in a ferromagnet nanoparticle assembly // Phys. Rev. B – 2011 – Vol. 84 – P. 144412-7.

## Контакты

*Деменев Алексей Геннадьевич*

Тел. (342)2396409                      Факс (342)2396584

*E-mail:* [A-demenev@psu.ru](mailto:A-demenev@psu.ru)

<http://Demenev.livejournal.com>

