

ПРИМЕНЕНИЕ СУПЕРКОМПЬЮТЕРА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ МАГНИТОДИНАМИКИ И КОГЕРЕНТНЫХ ПРОЦЕССОВ В НАНОМАГНИТНЫХ СТРУКТУРАХ

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

Пермский государственный национальный исследовательский университет, 614990,
ул.Букирева, 15, ПГНИУ; a-demenev@mail.ru

Сведения об авторах

- ◆ Деменев Алексей Геннадьевич, ПГНИУ, к.ф.-м.н., доц.
- ◆ Белозерова Татьяна Сергеевна, ПГНИУ, к.ф.-м.н.
- ◆ Харебов Петр Владимирович, ПГНИУ, к.ф.-м.н.
- ◆ Хеннер Виктор Карлович, ПГНИУ, д.ф.-м.н., проф.
- ◆ Хеннер Евгений Карлович, ПГНИУ, д.ф.-м.н., проф.

Аннотация

Сделан анализ потенциала распараллеливания исходных кодов программного обеспечения Spins и MagnetoDynamics, предназначенных для исследования когерентных эффектов динамики многочастичных систем наномангнитов. Создана параллельная версия программы MagnetoDynamics-F — моделирующего программного кода 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.

Введение

Представленная работа направлена на проблему высокопроизводительных и надежных программных систем и компьютерных технологий многомасштабного компьютерного моделирования для исследования когерентных эффектов в наноструктурах. Наномангнитная структура — система взаимодействующих объектов, обладающих магнитным моментом. Моделируемые объекты — высокоспиновые наномолекулы, нанокластеры и молекулярные кристаллы. В физике магнитных явлений понятие «спин» по существу отождествляется с понятием «магнитный момент».

Одним из наблюдаемых явлений в наномангнитах является сверхизлучение. Причина сверхизлучения в когерентизации спиновых переходов, при которых эффективные спин-спиновые взаимодействия не уменьшаются с расстоянием. Обычно это реализуется помещением образца в пассивный резонатор. В результате из-за когерентности процессов релаксации шкала времени для таких процессов обратно про-

порциональна числу спинов — необычный феномен для макроскопической физики, а излучаемая мощность пропорциональна не числу спинов, а их квадрату.

Перспективным представляется возможное использование больших скоростей когерентных процессов таких наномагнитов в различного рода датчиках и переключателях, особенно в наноустройствах, где традиционные механизмы релаксации выражены очень слабо.

Основные трудности описания поведения многоспиновых систем коренятся в межчастичных взаимодействиях, связывающих все спины образца. Для систем, состоящих из большого числа частиц, диагонализация точного квантового гамильтониана невозможна за разумное время, т.к. вычислительная сложность решения квантомеханической задачи растет экспоненциально с числом частиц. При численном моделировании спины могут трактоваться как «классические»: движение магнитного момента каждой частицы описывается одним классическим вектором. Исследование реалистичных моделей спиновой динамики приводит к необходимости решения задач, вычислительная сложность которых нелинейно растет с увеличением числа структурных элементов и времени наблюдения за системой.

К началу 2011 года авторский коллектив имел исходные программные коды, моделирующие магнетодинамику и когерентные процессы спиновой динамики, созданные в среде Borland C++ Builder Харебовым П.В. (программа Spins) и среде Borland Delphi Белозеровой Т.С. (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 магнетодинамики и когерентных процессов в наномагнитных структурах.

Распараллеливание алгоритмов и использование суперкомпьютеров позволяет значительно увеличить число структурных элементов и диапазон времен эволюции исследуемых систем, доступных для изучения. При этом приходится учитывать, что параллельные вычисления требуют специальных исследований на предмет обеспечения:

- корректности результатов, т.к. классическая теория сходимости не применима;
- эффективности отображения вычислительных алгоритмов на современные параллельные компьютерные архитектуры.

Теория и метод

При анализе потенциала распараллеливания исходных кодов программного обеспечения Spins и MagnetoDynamics, были использованы методы анализа информационной структуры и асимптотического анализа сложности алгоритмов[1].

Были получены формулы для 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).

Было показано, что с ростом числа моделируемых наночастиц вычислительная сложность алгоритмов, реализованных в Spins и в MagnetoDynamics, растет асимптотически квадратично при постоянном шаге интегрирования по времени, но может расти асимптотически кубично при автоматическом выборе шага интегрирования по времени.

Было показано, что с ростом числа моделируемых наночастиц требования к оперативной памяти растут:

- асимптотически квадратично у алгоритма, реализованного в Spins:
- асимптотически линейно у алгоритма, реализованного в MagnetoDynamics.

Было показано, что если накладные расходы на многопоточное распараллеливание асимптотически растут также, как требования к оперативной памяти, то с ростом числа моделируемых частиц возможен рост масштабируемости распараллеливания.

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, т.к. 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 Borland 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.

Применения и результаты

При исследовании квазимолекулярных магнитных кристаллов использованы два подхода. В первом, высокоспиновая молекула (атомный кластер) рассматривается как единая (бесструктурная) парамагнитная частица. В этом случае молекулярный (кластерный) кристалл можно считать суперпарамагнетиком с невысокой магнитной анизотропией; влияние последней на сверхизлучение до нас не исследовалось. Магнитодинамика с учетом когерентных эффектов может быть исследована методами, описанными выше. Кристалл должен быть сильно поляризован магнитным полем при очень низкой температуре. Электронная спиновая система может сохранить свою поляризацию в течении часов и может быть перенесена в пассивный резонатор. Обратная связь резонатора с системой взаимодействующих спинов, пропорциональна производной по времени полного магнитного момента кристалла. Из-за когерентного движения все спины релаксируют за время, обратно пропорциональное числу спинов.

Во втором подходе квазимолекула представляется как спиновый нанокристалл с внутренними ориентационными степенями свободы. Сравнительно небольшое число (8-12) магнитных центров в квазимолекуле позволяет изучать ее поведение во внешних полях и спектр внутренних возбуждений путем прямого численного моделирования. Хотя уравнение ориентационного движения отдельной наноточки специфично именно для этого объекта, схема учета дипольного взаимодействия очень близка к расчету, планируемому для молекулярных спиновых систем.

Была 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.

В программе MagnetoDynamics-F были реализованы важные применения для исследований когерентных процессов[1]:

- 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.

Благодарности

Работа выполнена на базе Научно-образовательного центра «Параллельные и распределенные вычисления» (НОЦ ПиРВ) ПГНИУ с использованием уникального оборудования — программно-технический комплекс «Высокопроизводительный SMP-сервер» (приобретено по гранту РФФИ 10-01-05021) и суперкомпьютер «ПГУ-Тесла» (приобретен по проекту "Развитие центра коллективного пользования высокопроизводительными вычислительными ресурсами — НОЦ ПиРВ" Программы развития ПГНИУ). Работа была выполнена при поддержке грантов РФФИ 10-02-96023 - p_урал_a и 11-07-96007 - p_урал_a.

Литература

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. // Phys. Rev. B – 2011 – Vol. 84 – P. 144412-7.