

О РЕШЕНИИ ЗАДАЧ МАГНИТОДИНАМИКИ И КОГЕРЕНТНЫХ ПРОЦЕССОВ В НАНОМАГНИТНЫХ СТРУКТУРАХ НА СУПЕРКОМПЬЮТЕРЕ

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

Пермский государственный национальный исследовательский университет

E-mail: a-demenev@mail.ru

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

Наномангнитная структура обычно рассматривается как система взаимодействующих наноразмерных частиц, обладающих магнитным моментом. Перспективным представляется возможное использование больших скоростей когерентных процессов таких наномангнитов в различного рода датчиках и переключателях, особенно в наноприборах, где традиционные механизмы релаксации выражены очень слабо. Сверхизлучение является одним из наблюдаемых явлений в наномангнитах. Сверхизлучение происходит из-за 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 пропорциональна числу спинов – необычный феномен для макроскопической физики, а излучаемая мощность пропорциональна не числу спинов, а их квадрату.

Представленная работа нацелена на развитие и применение вычислительных и информационных технологий в моделировании многомасштабной молекулярной динамики многочастичных систем наномангнитов. Моделируемые объекты – высокоспиновые наномолекулы, нанокластеры и молекулярные кристаллы. В физике магнитных явлений понятие «спин» по существу отождествляется с понятием «магнитный момент».

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 слож-

ность которых нелинейно растет с увеличением числа структурных элементов и времени наблюдения за системой.

К началу 2011 года авторский коллектив имел исходные программные коды, моделирующие магнитодинамику 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 магнитодинамики и когерентных процессов в наноманнитных 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 неприменима;
- эффективности отображения вычислительных алгоритмов на современные параллельные компьютерные архитектуры.

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 кубично.

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 так же, 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.

Поэтому была создана программа MagnetoDynamics-F – параллельная версия моделирующего программного кода Белозеровой Т.С. на языке Fortran. Для распараллеливания использован интерфейс прикладного программирования OpenMP. Получена полу-

эмпирическая формула для асимптотической оценки ускорения и эффективности распараллеливания на мультядерных процессорах.

В программе MagnetoDynamics-F были реализованы важные применения для исследований когерентных процессов[2]:

- 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.

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 течение 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.

Работа выполнена на базе Научно-образовательного центра «Параллельные и распределенные вычисления» (НОЦ ПиРВ) ПГНИУ с использованием уникального оборудования – программно-технического комплекса «Высокопроизводительный SMP-сервер» (приобретено по гранту РФФИ 10-01-05021) и суперкомпьютера «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 - р_урал_а и 11-07-96007 - р_урал_а.

Литература

1. Деменев А.Г. Анализ параллельных вычислительных алгоритмов: Учеб.-метод. пособие / 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.