

ПРИМЕНЕНИЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ДЛЯ РАСЧЁТА МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОСТРУКТУР

Сафонов Иван

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Дана система атомов, каждый из которых обладает:

- Радиус-вектором $\mathbf{r}_i$
- Вектором скорости $\mathbf{v}_i$

Каждая частица относится к конкретному материалу(никель, медь, тантал).

Основной интерес представляет потенциал взаимодействия частиц, который основан на модели погруженного атома.

СХЕМА РАСЧЁТА ВЕРЛЕ

$$\mathbf{F}_i^{int} = \sum_{j \neq i} -\frac{\partial U_i}{\partial \mathbf{r}_{ij}}; \quad \mathbf{F}_i^{ext} = m_i \mathbf{g}_i, \quad \lambda^n = \lambda(T^n), \quad \mu^n = \mu(P^n).$$

$$\mathbf{v}_i^{n+1/2} = \lambda^n \left[\mathbf{v}_i^n + \frac{\mathbf{a}_i^{n,int} + \mathbf{a}_i^{n,ext}}{2} \Delta t \right],$$

$$\mathbf{r}_i^{n+1/2} - \mathbf{r}_i^M = \mu^n \left[\mathbf{r}_i^n - \mathbf{r}_i^M + \mathbf{v}_i^{n+1/2} \Delta t \right],$$

$$\mathbf{v}_i^{n+1} = \mathbf{v}_i^{n+1/2} + \frac{\mathbf{a}_i^{n+1/2,int} + \mathbf{a}_i^{n+1/2,ext}}{2} \Delta t.$$

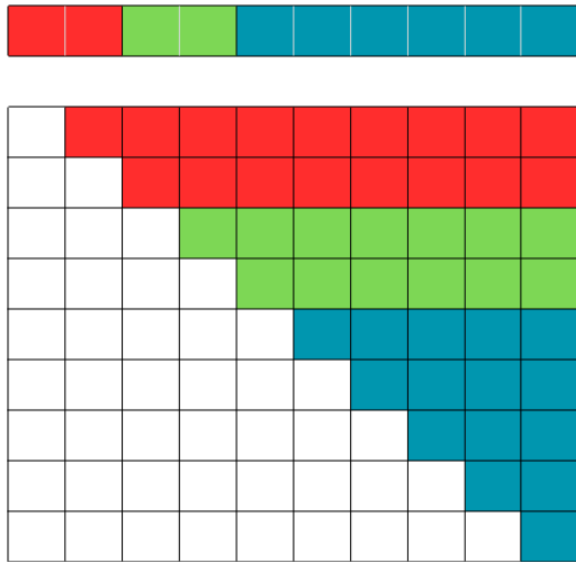
ОПТИМИЗАЦИИ

- $r_{ij} = r_{ji}$. Экономит $\frac{N(N-1)}{2} \cdot 6$ операций.
- Наличие кинетического члена $(\sum_i |\mathbf{v}_i^n - \langle \mathbf{v} \rangle^n|^2)$ в P^n, T^n . Расчёт его отдельно экономит $\approx 7N$ операций.
- Учет симметрий в вычислении частных производных потенциала экономит $\approx 40N^2$ операций.

РЕАЛИЗАЦИЯ РАВНОМЕРНОЙ НАГРУЖЕННОСТИ

После генерации системы, основной процесс вычисляет общее количество атомов и приблизительно равномерно распределяет их данные по процессам.

Рассмотрим пример.



Пояснения

- Система состоит из 10 атомов
- Работа делится на 3 процесса
- Верхний список - принадлежность атомов
- Матрица - принадлежность $r_{i,j}$

ОЦЕНКА ОПЕРАЦИОННЫХ ЗАТРАТ

Этап вычисления	Примерное количество операций	Сложность
$\mathbf{T}^n$	$\approx 8N$	$O(N)$
$\mathbf{P}^n$	$\approx 6N^2 + 12N$	$O(N^2)$
$\mathbf{V}^n$	$\approx 6N$	$O(N)$
$\langle \mathbf{r}^n \rangle = \mathbf{r}_M^n, \langle \mathbf{v}^n \rangle$	$\approx 9N$	$O(N)$
$\mathbf{v}_i^{n+1/2}, \mathbf{r}_i^n, \mathbf{v}_i^n$	$\approx 18N$	$O(N)$
$\mathbf{F}_i$	$\approx 34N^2$	$O(N^2)$

ОЦЕНКА ОБЪЕМА ОБМЕНОВ И ХАРАКТЕРИСТИКИ ПАРАЛЛЕЛИЗМА

Общая оценка объема обменов в зависимости от N, p

$$V_{comm} \Big|_{p>0} = \underbrace{8N}_{\rho} + \underbrace{24N}_F + \underbrace{24 \left(1 - \frac{1}{p}\right) N}_{r_{ij}} = \left(56 - \frac{24}{p}\right) N + O(1)$$

$$V_{comm}(p, N) = \begin{cases} 0, & p = 1, \\ \left(56 - \frac{24}{p}\right) N + O(1), & p > 1. \end{cases}$$

- $\tau_0 = 0$
- $\tau_c = 50 \text{ ns}$
- $\tau_a = 3 \text{ ns}$

ФОРМУЛЫ ДЛЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ОЦЕНКИ $S(p), E(p)$

$$L_a = 40.5N^2 + 34N$$

$$L_c = \left(56 - \frac{24}{p}\right)N$$

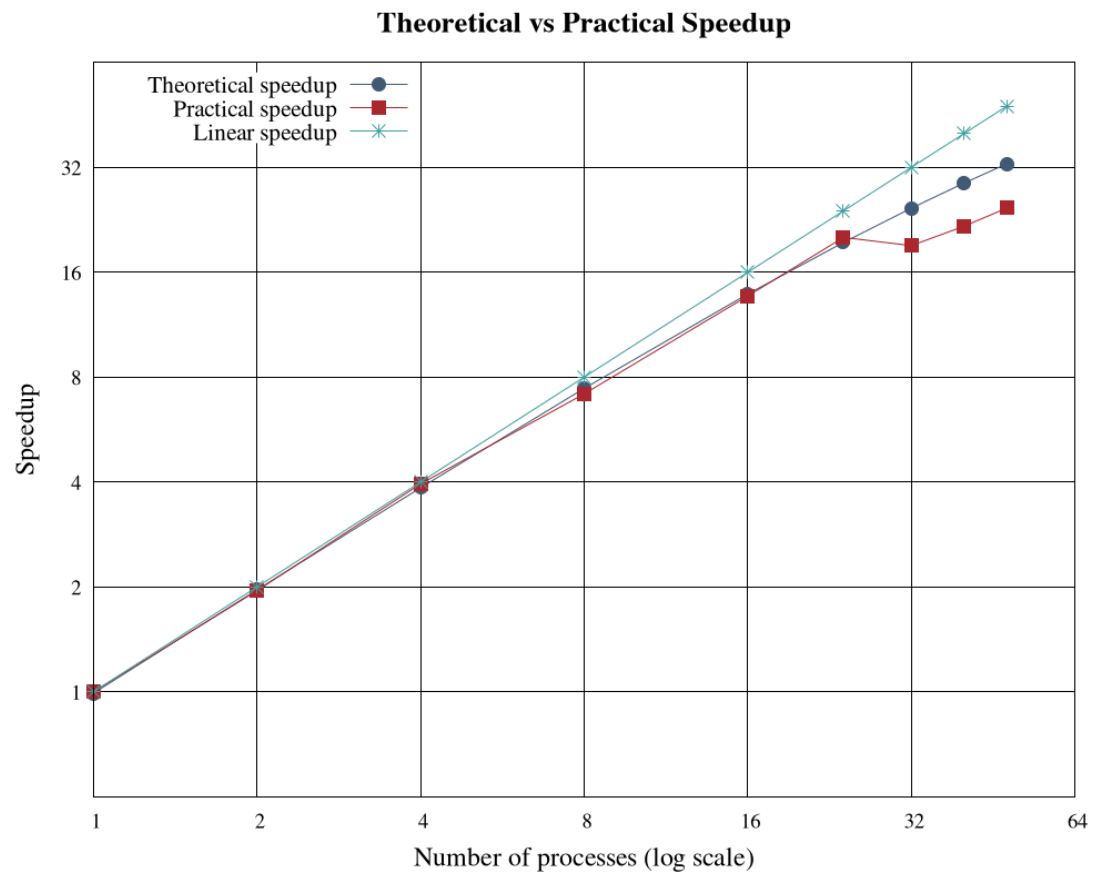
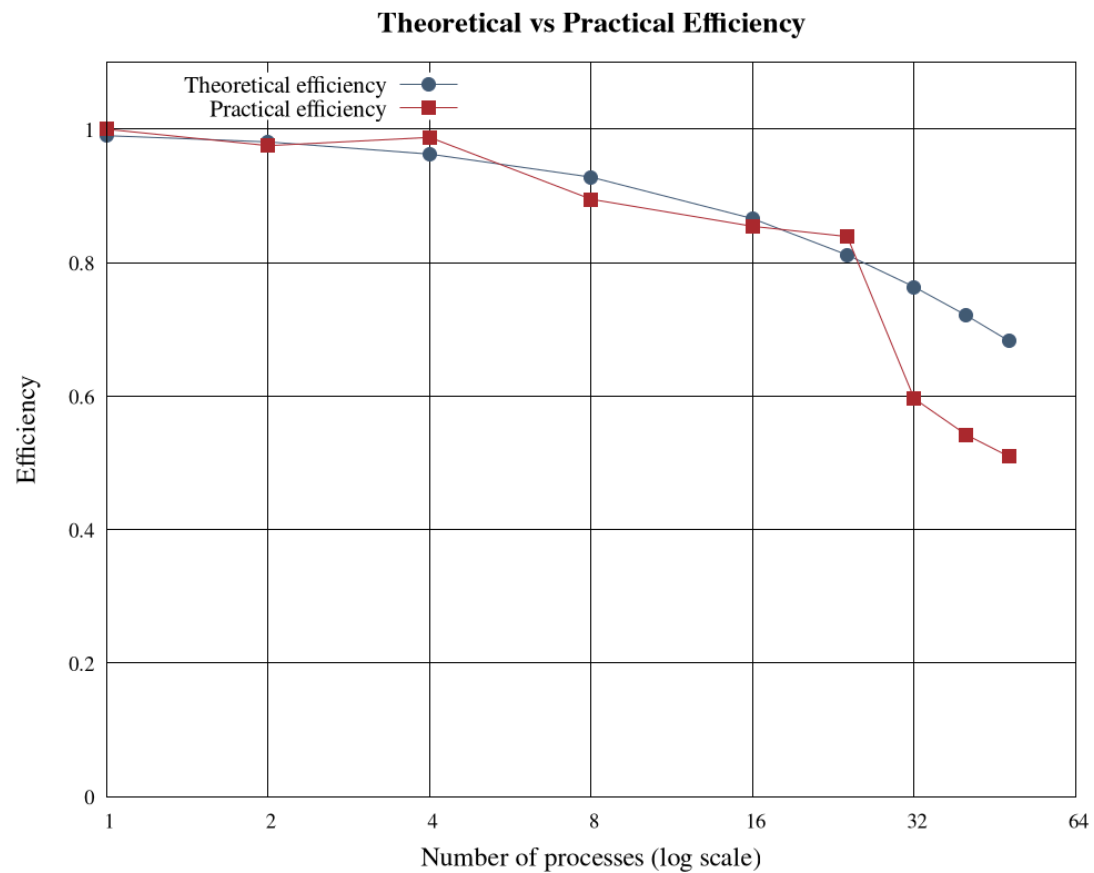
$$S(p) = \frac{T(1)}{T(p)} = \frac{\tau_a L_a}{\frac{\tau_a L_a}{p} + \tau_c L_c} = \frac{121.5N^2 + 102N}{\frac{121.5N^2 + 102N}{p} + 50 \left(56 - \frac{24}{p}\right)N}$$

$$E(p) = \frac{S(p)}{p} = \frac{121.5N^2 + 102N}{121.5N^2 + 102N + 50 \left(56 - \frac{24}{p}\right)Np}$$

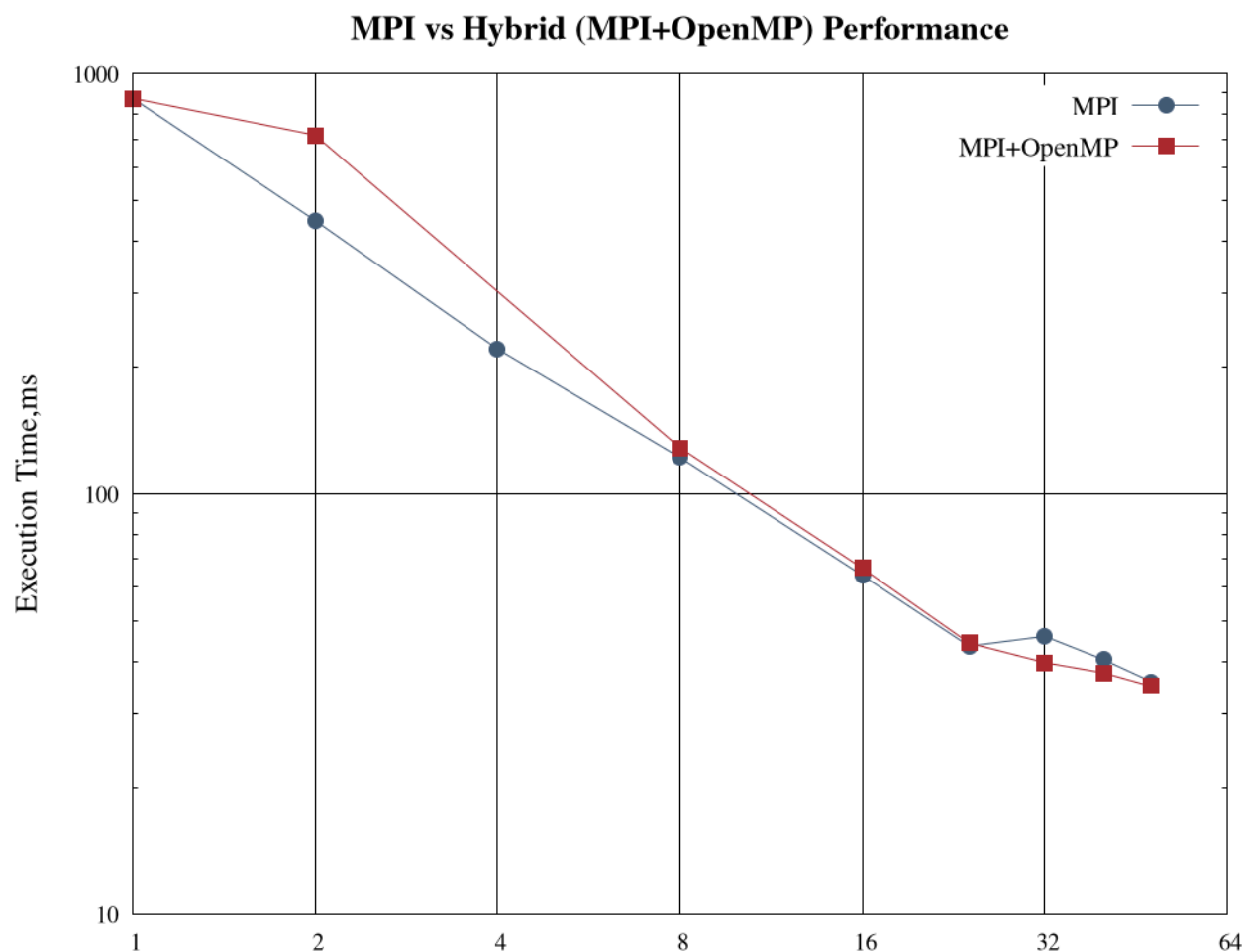
СРАВНЕНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ОЦЕНКИ С ПРАКТИЧЕСКОЙ

Количество процессов p	$S(p)$	$\hat{S}(p)$	$E(p)$	$\hat{E}(p)$
1	1	1	1	1
2	1.96	1.95	0.98	0.98
4	3.85	3.95	0.96	0.96
8	7.41	7.16	0.92	0.89
16	13.75	13.68	0.85	0.85
32	24.0	19.08	0.75	0.60

СРАВНИТЕЛЬНЫЕ ГРАФИКИ

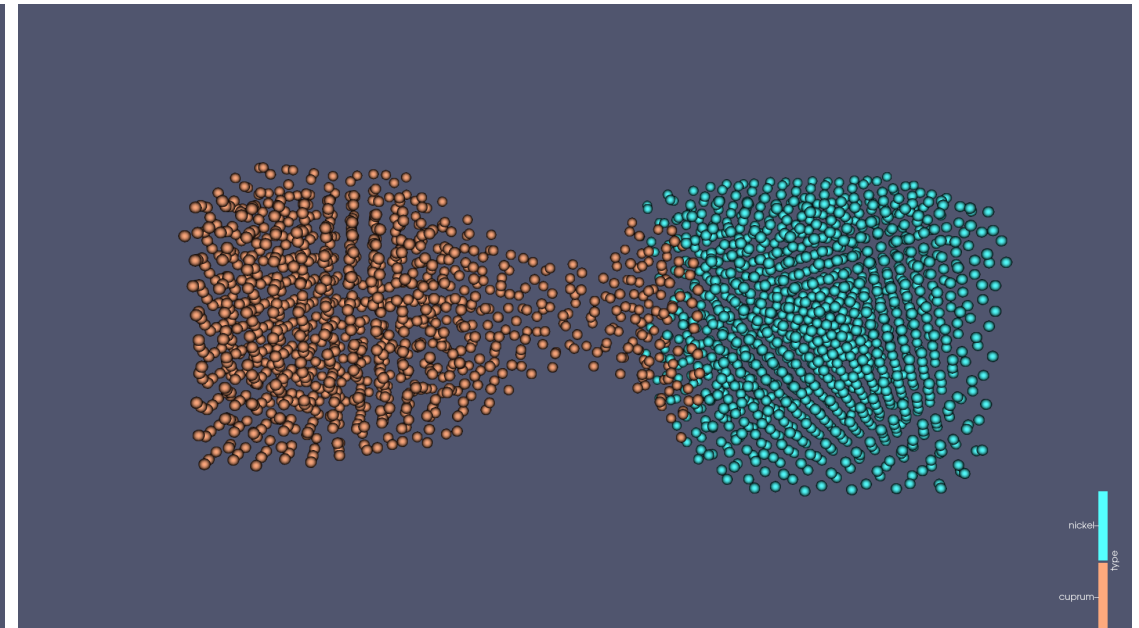
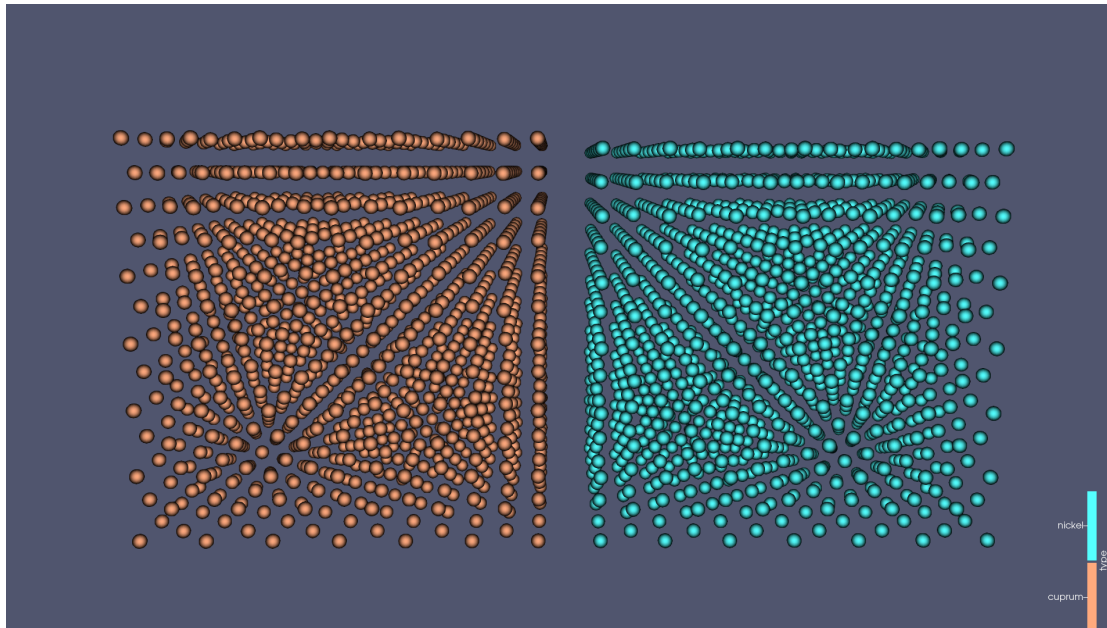


PURE MPI VS MPI+OPENMP. ХАРАКТЕРИСТИКА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО УЗЛА



- Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2680
- 2 сокета по 14 ядер
- 2 треда на ядро = 56 ядер
- ≈ 5.6 GFlops

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА



ВЫВОДЫ

- Созданы MPI, MPI+OpenMP реализации поставленной задачи.
- Построены теоретические оценки ускорения и эффективности.
- Проведены расчёты и построены сравнительные графики.

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ