

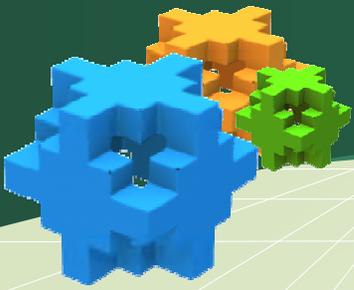


Применение параллельных вычислений в моделировании электронных и транспортных свойств жидких металлов

*Соболев А.Н., аспирант,
Воронцов А.Г., к.ф.-м.н.,
Мирзоев А.А., проф., д.ф.-м.н.
Кафедра ОТФ, ЮУрГУ*



Содержание



1

Постановка задачи

2

Тестовый пример

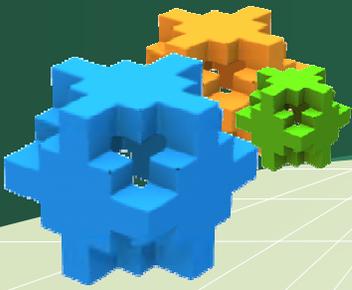
3

Производительность

4

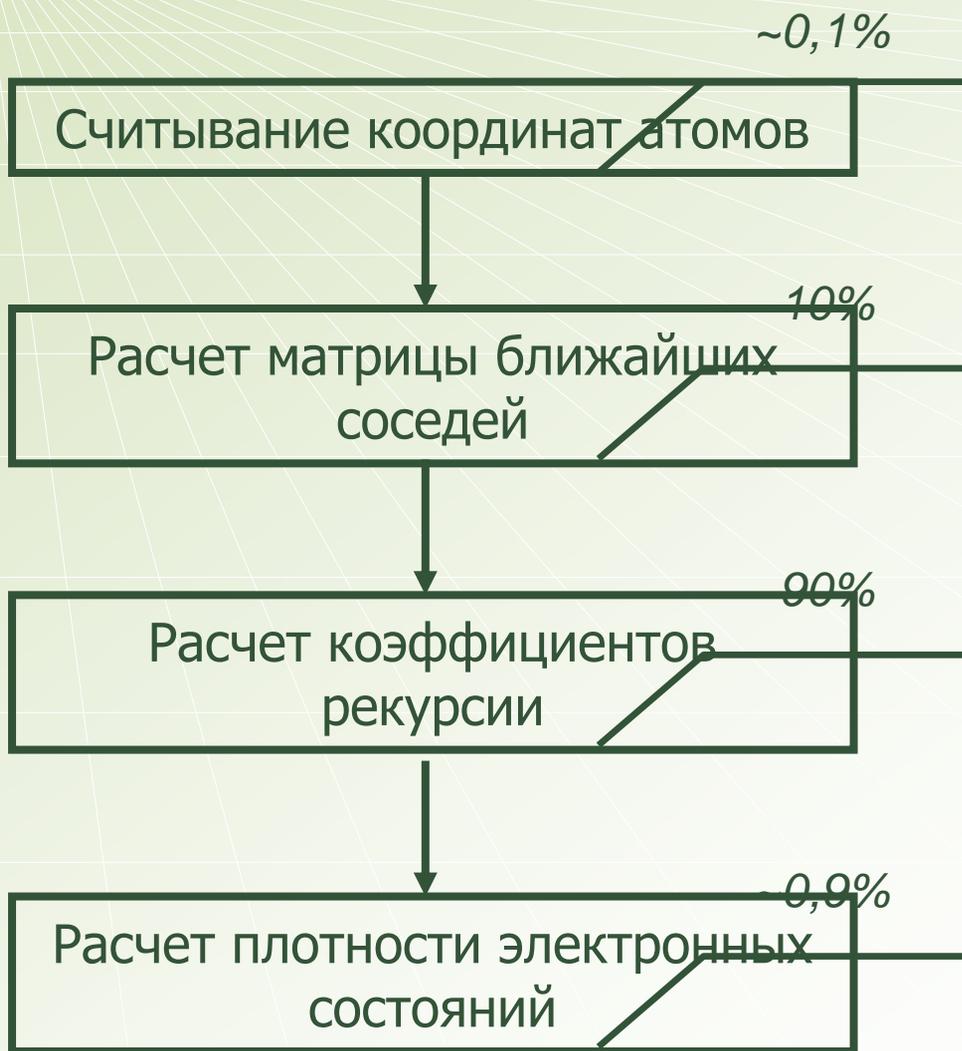
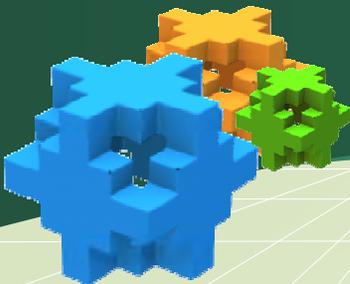
Выводы

Постановка задачи

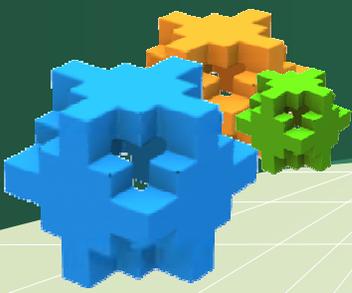


- ❖ Для вычисления электронной плотности неперiodических структур существуют мощные инструменты, например, метод рекурсии Хайдока.
- ❖ **Проблема:**
 - При расчетах свойств больших систем без симметрии, таких, как расплавы, машинное время, затрачиваемое на выполнение вычислений, увеличивается как $O(N)$.
- ❖ **Решение:**
 - Нами была написана и отлажена для MS Windows, а также портирована под ОС Linux программа для расчетов плотности электронных состояний методом рекурсии.

Блок-схема

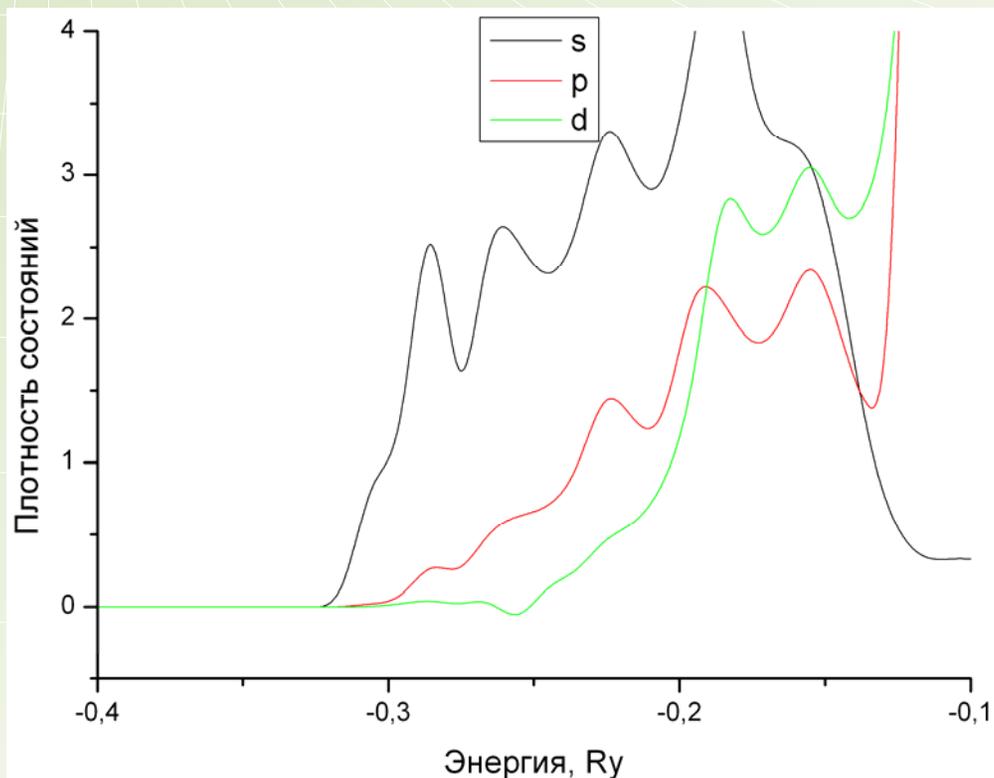


Блок-схема



Тестовый пример

- ❖ Расчет плотности электронных состояний кластера жидкого цезия из 4000 атомов при температуре 323К.



Аппаратное обеспечение

2003

Кластер кафедры ОТФ
ЮУрГУ:

8xPentium 800, 512 Мб
ОЗУ, 200 Mbps
Ethernet

Аудитория 465 ЮУрГУ:

24xPentium 800, 256 Мб
ОЗУ, Fast Ethernet, ОС
Windows

2004

Апгрейд кластера
кафедры ОТФ:

8xAthlon XP 2800+,
1 Гб ОЗУ, Gigabit
Ethernet

2005

Кластер ЮУрГУ
Infinity:

36xPentium
3000, 1 Гб ОЗУ,
Infiniband

Сравнение производительности разных версий программы

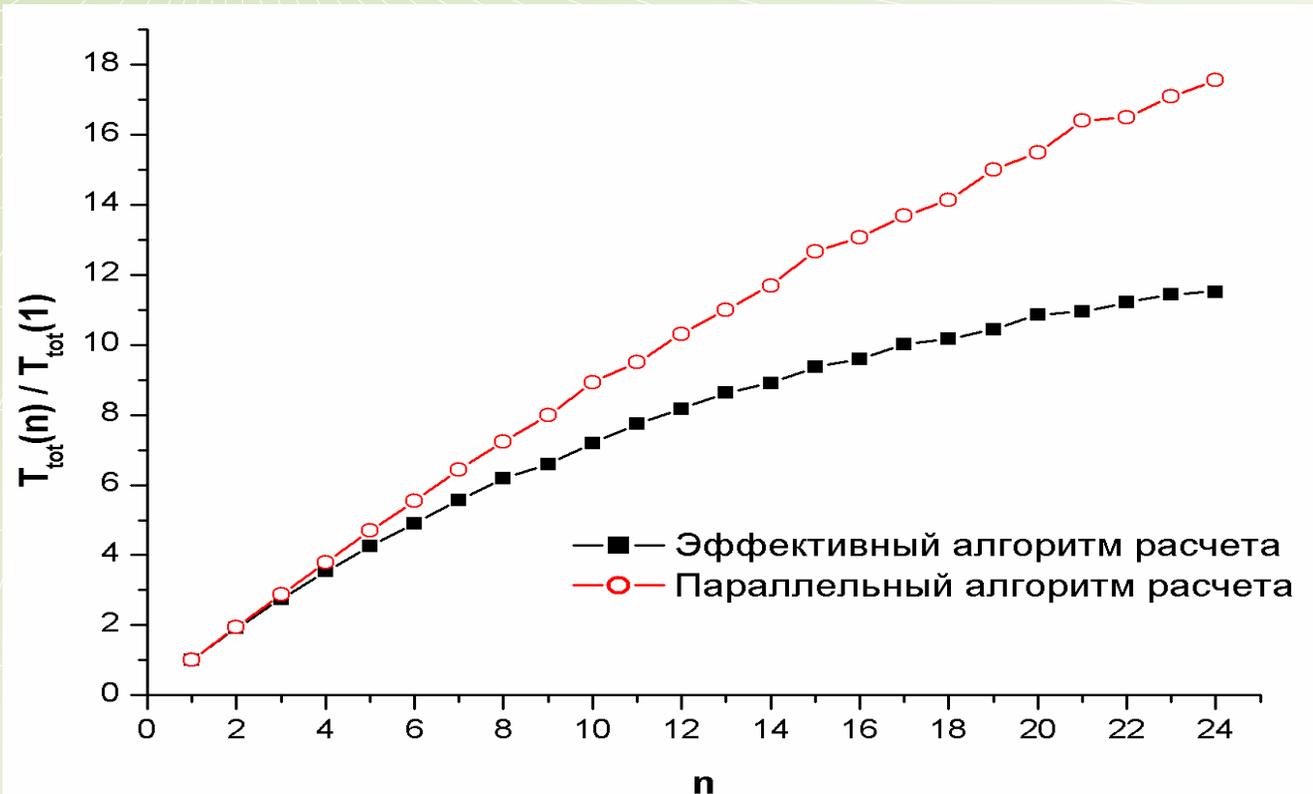
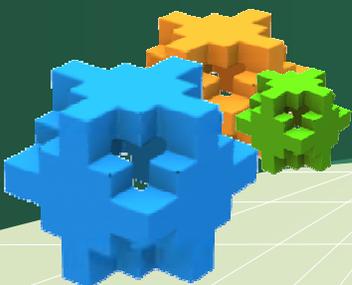


График показывает сравнение производительности программы при разных алгоритмах расчета матрицы ближайших соседей. На графике n – количество занятых процессоров, T_{tot} – общее время расчета программы.

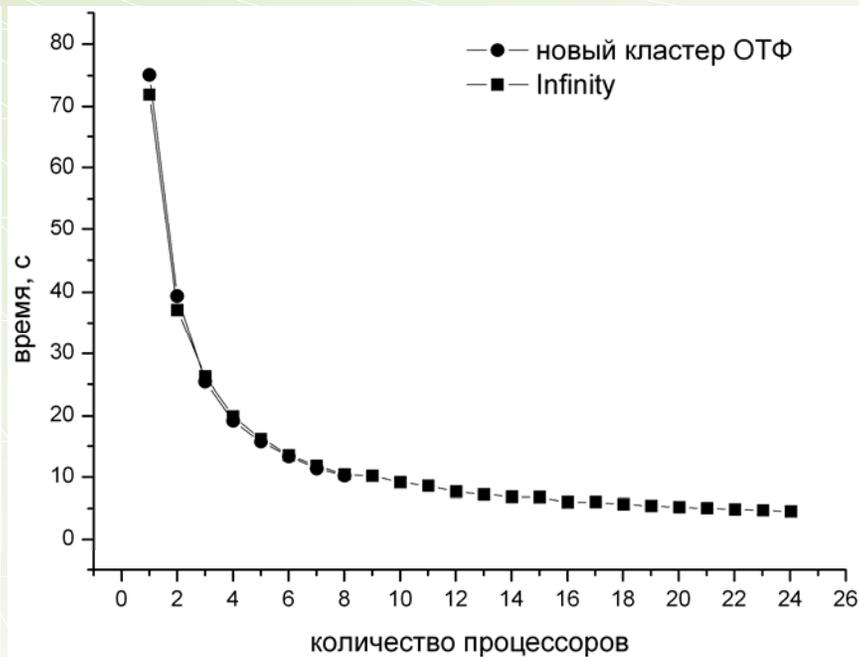
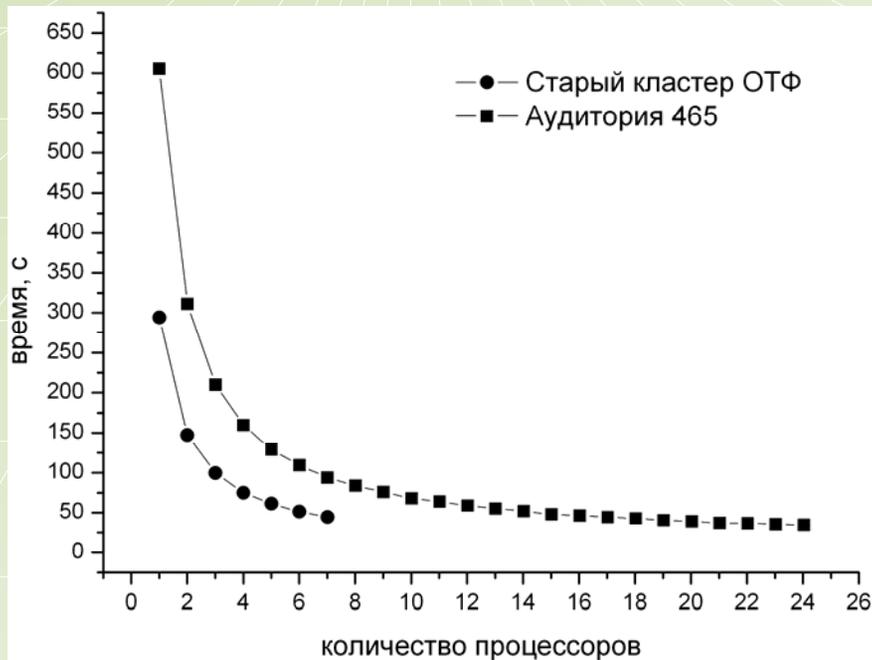
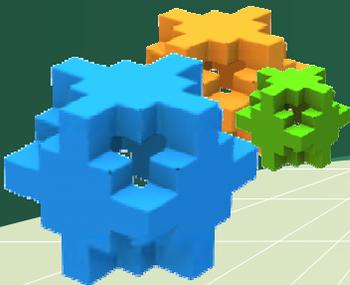


Общее время расчета

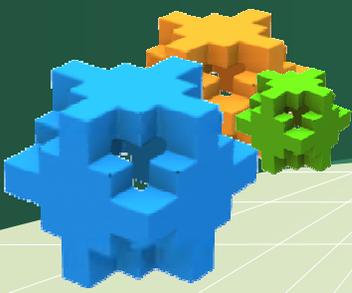
В таблице отражено общее время расчета в секундах в зависимости от выбранной платформы и алгоритма расчета.

	1	2	4	max
ОТФ (8xPentium III 800)	294,08	148,10	74,97	44,29
Windows (24xPentium III 800)	605,19	310,68	159,60	34,49
ОТФ (8xAthlon XP 2800+)	75,1	39,35	19,2	10,22
Infinity	71,9	37,12	19,9	3,99

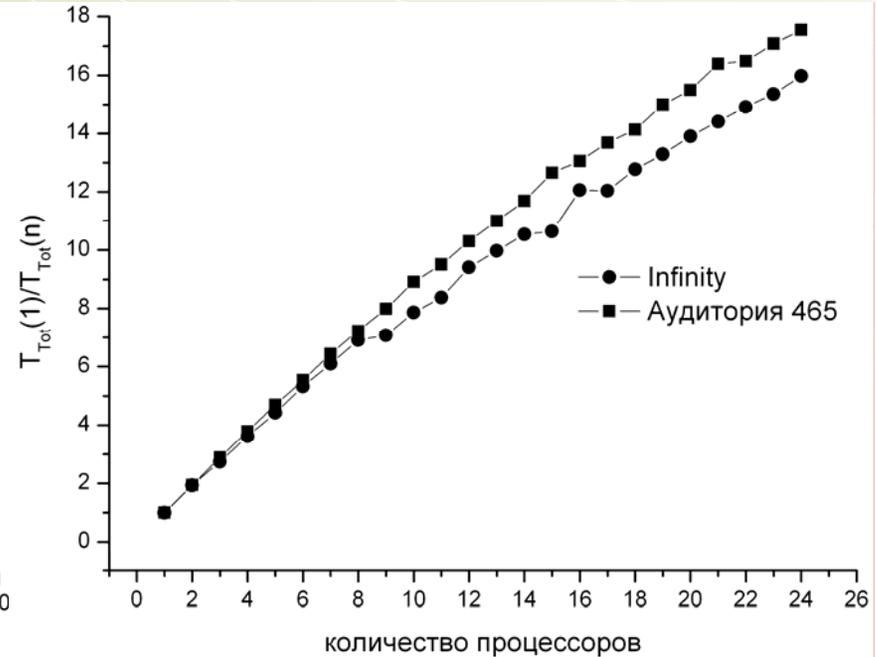
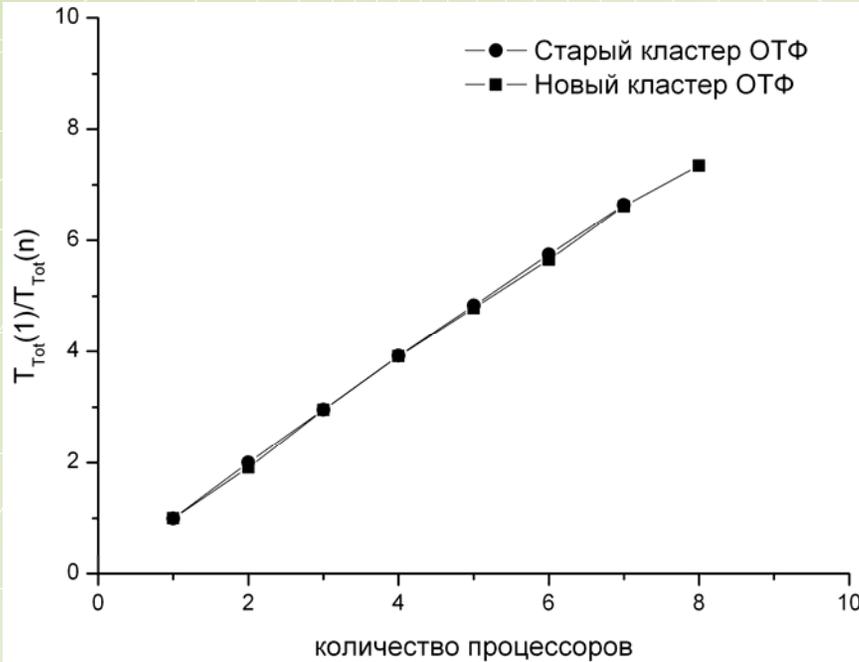
Время расчета



На рисунках изображена зависимость времени расчета от количества процессоров для старых (слева) и новых вычислительных мощностей

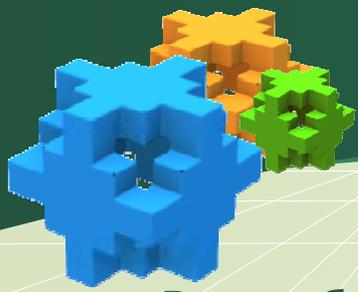


Производительность программы



На рисунках изображена зависимость производительности (масштабируемости) расчета от количества процессоров

Выводы



Разработана и протестирована работающая под двумя платформами программа, рассчитывающая плотность электронных состояний расплава.

❖ Windows

- +:

Доступность больших незанятых вычислительных мощностей;

- -:

Большое количество времени, затрачиваемое на расчет на одном процессоре вследствие потребления процессорного времени операционной системой.

❖ Linux

- +:

Высокая скорость расчета на одном процессоре, как следствие, малое время расчета на нескольких.

Планы

- ❖ Добавление поддержки MPI в пакет для расчета электронной структуры "EMTEP"
- ❖ Обновление кластера кафедры ОТФ до 8xAthlon 64 3200+, 1Гб ОЗУ, Gigabit Ethernet
- ❖ Участие в семинаре "Tools for computational Physics" в Триесте, Италия
- ❖ Приобретение коммерческого компилятора языка FORTRAN



Спасибо за внимание!

Вопросы?

