

# § 5 МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Денисенко В.А., Соцков В.А. \_\_\_\_\_ ■

## РАЗРАБОТКА ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ РЕАЛИЗАЦИИ МОДИФИЦИРОВАННОГО АЛГОРИТМА ФРАНКА-ЛОББА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОВОДИМОСТИ ДЕФЕКТНОЙ 2D РЕШЕТКИ С РАЗДЕЛЕНИЕМ СВЯЗЕЙ

**Аннотация:** В теории перколяции достаточно подробно исследованы как задачи узлов и связей [1,2], так и смешанная задача теории перколяции [3,4]. Однако в ряде экспериментальных процессов происходит вариация вероятностей образования горизонтальной и вертикальной связи на решетчатой структуре с дефектами. В реальных физических моделях эти процессы могут происходить, например, при нанесении токопроводящего материала пульверизацией на наклонную плоскость; при постепенном отвердевании диэлектрической матрицы, в которой находятся заряженные микро и микрочастицы проводника, и которая находится в электрическом или магнитном полях и т. д.. Кроме того, можно ожидать, что наличие разнообразных дефектов в структуре влияет как на механические свойства материалов, так и на электрофизические. К сожалению, определить точную количественную взаимосвязь между количеством дефектов и физическими параметрами не всегда возможно из-за значительных экспериментальных трудностей. Моделирование зависимости физических параметров от числа дефектов при анизотропии связей представляется актуальной научной проблемой. Число подобных задач велико и может иметь большое практическое значение в случае численного решения таких задач. Целью настоящей работы является компьютерное моделирование объединенной задачи связей и узлов с разделением вероятностей образования горизонтальных и вертикальных связей и возможностью внесения в решетку дефектов по Шотки. Результатами исследования должны стать численные значения проводимости  $G$  квадратной сетки  $2d$  от величин вероятностей: вертикальной связи  $P1$ , горизонтальных связей  $P2$  и дефектов  $N$ .

**Ключевые слова:** Программное обеспечение, перколяция, проводимость, моделирование, кластер, НРС, высокопроизводительные вычисления, OpenMP, MPI, параллельные вычисления

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 12-07-00624-а, 13-07-01003-а

## Введение

В теории перколяции достаточно подробно исследованы как задачи узлов и связей [1,2], так и смешанная задача теории перколяции [3,4]. Однако в ряде экспериментальных процессов происходит вариация вероятностей образования горизонтальной и вертикальной связи на решетчатой структуре с дефектами. В реальных физических моделях эти процессы могут происходить, например, при нанесении токопроводящего материала пульверизацией на наклонную плоскость; при постепенном отверждении диэлектрической матрицы, в которой находятся заряженные микро и микрочастицы проводника, и которая находится в электрическом или магнитном полях и т. д.. Кроме того, можно ожидать, что наличие разнообразных дефектов в структуре влияет как на механические свойства материалов, так и на электрофизические. К сожалению, определить точную количественную взаимосвязь между количеством дефектов и физическими параметрами не всегда возможно из-за значительных экспериментальных трудностей. Моделирование зависимости физических параметров от числа дефектов при анизотропии связей представляется актуальной научной проблемой. Число подобных задач велико и может иметь большое практическое значение в случае численного решения таких задач.

Целью настоящей работы является компьютерное моделирование объединенной задачи связей и узлов с разделением вероятностей образования горизонтальных и вертикальных связей и возможностью внесения в решетку дефектов по Шотки. Результатами исследования должны стать численные значения проводимости  $G$  квадратной сетки  $2d$  от величин вероятностей: вертикальной связи  $P1$ , горизонтальных связей  $P2$  и дефектов  $N$ .

## Методика эксперимента

В основу разработанной программы был положен алгоритм Франка-Лобба [5,6]. Исследования проводились только для активных сопротивлений. За прототип была принята программа, разработанная в [7]. Программа [7] была скомпилирована на C/C++ и изменена под поставленную задачу.

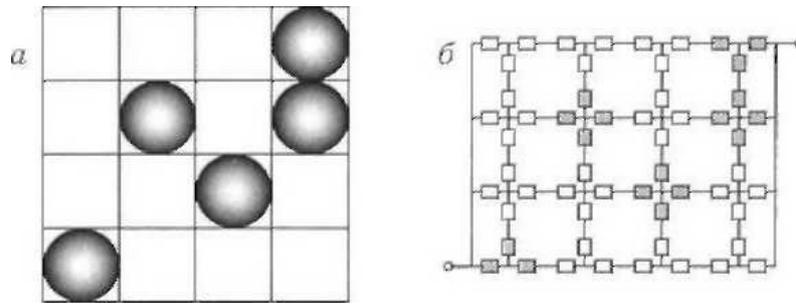


Рис.1. Схема перехода от композита (а) к решетке связей (б), которая используется для расчета его электропроводимости [7]

Стандартная схема перехода от композита к квадратной перколяционной решетке представлена на рис.1.

Разработка программного комплекса, тестирование и вычислительный эксперимент проводились на кластере ФГБОУ ВПО КБГУ им. Х.М. Бербекова. Кластер имеет гибридную архитектуру и состоит из 4 вычислительных систем на основе графических процессоров с архитектурой CUDA NVIDIA Tesla S2050, 12 модулей, каждый из которых представляет собой 2-х процессорную систему на базе четырехядерных процессоров AMD Shanghai 2.7 Ghz, 8 Gb ОЗУ и сеть Infiniband 4x 20 Gbit под управлением операционной системы CentOS release 5.4 (Final).

В рамках исследования разработаны 3 программных решения предназначенных для вычислительных систем с различной архитектурой:

- вычислительных систем с однопроцессорной, одноядерной архитектурой (для desktop);
- вычислительных систем с многоядерной архитектурой (для desktop и кластер);
- вычислительных систем с многопроцессорной архитектурой (для кластеров).

В качестве языка программирования использовался C/C++.

Среди задач, решаемых настоящей исследовательской работой в области вычислительного эксперимента основными являлись следующие задачи:

- Проведение вычислительного эксперимента;
- Анализ эффективности работы разработанных алгоритмов для различных архитектур вычислительных систем.

Следует отметить, что результаты, полученные в каждом из программных решений, совпадают, и укладываются в рамки среднестатистических погрешностей.

В этой части работы рассматриваются вопросы оценки эффективности работы созданных программных решений.

Оценивалась работа последовательной программы, программы реализованной с помощью технологии Open MP и программы использующей технологию MPI. Число расчетов для каждой из программ составляло от 1000 до 5000 испытаний. Размер решетки составляет 1000 узлов. Анализировалось время работы алгоритма, на основе которого вычислялось ускорение. Результаты исследований представлены на рис.1.

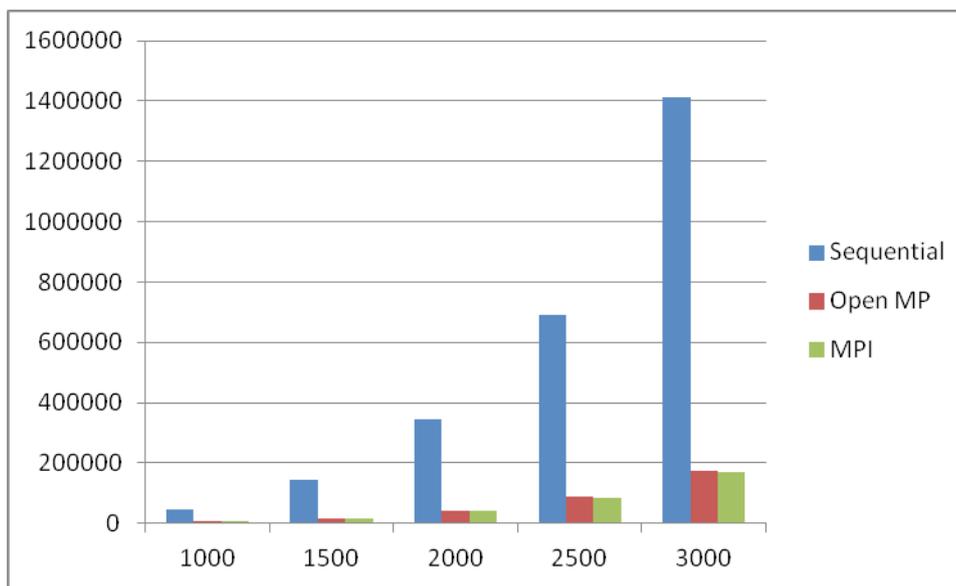


Рис. 2. Время работы программ реализованных с помощью технологий Open MP и MPI по сравнению с временем работы последовательных вычислений Sequential

Таблица 2.

Ускорение в размах, получаемое при работе алгоритмов Open MP и MPI по сравнению с Sequential для решеток с разной размерностью N.

N	Sequential	Open MP	MPI
1000	1	7.348	7.312
1500	1	8.063	7.963
2000	1	7.999	8.044
2500	1	7.965	8.095
3000	1	8.022	8.213

Из рисунка 2 и таблицы 1 видно, что применение методов параллельного программирования в значительной степени увеличивает скорость работы алгоритма и снижает время проведения вычислительного эксперимента. В зависимости от размерности решетки

## Разработка параллельной реализации модифицированного алгоритма Франка-Лобба

и архитектуры вычислительной системы оправдано применение той или иной технологии параллельного программирования. С увеличением размера решетки эффективность технологии MPI увеличивается. На решетках с малой размерностью более эффективным видится применение технологии Open MP. В эксперименте размер решетки изменялся от 10 до 1000 узлов. Этот эффект связан с необходимостью передачи между узлами сети, что замедляет работу алгоритма в целом. При проведении численного эксперимента задавалась вероятность образования горизонтальных связей  $P_2$  и вычислялась проводимость квадратной сетки  $G$  от вероятности образования вертикальной связи  $P_1$  и вероятности образования дефектов  $N$ . Проводимость единичного элемента решетки принималась равной 1 Сим. Для построения 3d графиков и их обработки использовалась программа TableCurve 3D v4.0.

### Выводы

1. Применение методов параллельного программирования в значительной степени увеличивает скорость работы алгоритма и снижает время проведения вычислительного эксперимента. С увеличением размера решетки эффективность технологии MPI увеличивается. На решетках с малой размерностью более эффективно применение технологии Open MP. Разработан программный комплекс, использующий технологии многопоточного и параллельного программирования, реализующий алгоритм Франка-Лобба в задачах проводимости.
  2. Исследована объединенная задача связей и узлов с разделением вероятностей образования горизонтальных и вертикальных связей методом компьютерного моделирования, показана возможность одновременного существования нескольких перколяционных кластеров.
  3. Построен численный эксперимент для модели 2d с анизотропией горизонтальных и вертикальных связей. Показано, что горизонтальные и вертикальные связи неравноценны и больший вес для алгоритма Франка-Лобба имеют вертикальные связи.
  4. Согласно разработанной модели, можно предположить, что для металлов образование дефектов по Шотки при температурном воздействии не может оказать существенного влияния (свыше 5%) на поверхностную проводимость объекта.
  5. Исследована динамика проводимости от вероятностей образования связей и дефектов. В рассматриваемых диапазонах  $P_1$ ,  $P_2$ ,  $N$  более эффективными оказываются процессы увеличения проводимости с ростом  $P_1$  и  $P_2$ .
- Авторы выражают благодарность проф. Н.И.Лебовко за полезные консультации.

**Библиография:**

1. Шкловский Б.И., Эфрос А.Л. Электронные свойства легированных полупроводников. М.: Наука, 1979.
2. Шкловский Б.И., Эфрос А.Л. // УФН. 1975. Т. 117 (3). С. 401.436.
3. Тарасевич Ю.Ю. Перколяция: Теория, приложения, алгоритмы. – М.: Едиториал УРСС, 2002.-112 с.
4. Tarasevich Yu.Yu., van derMarck S.C. // Int. J. of Modern Physics. C. 1999. Vol. 10 (7). PP. 1193-1204.
5. Frank D.J., Lobb C.J. Highly efficient algorithm for percolative studies in two dimensions // Phys.Rev.B. 1988.V.37.PP.302-307.
6. Lobb C.J., Frank D.J. Percolative conduction and Alexander-Orbach conjecture in two dimensions // Phys.Rev.B.1984.V.30, No.7.PP. 4090-4092.
7. Л.А.Булавин, Н.В. Выгорницкий, Н.И.Лебовка. Компьютерное моделирование физических систем: Учебное пособие/ – Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2011.-352 с.ISBN 978-5-91559-101-0.
8. Денисенко В.А., Соцков В.А. Моделирование объединенной задачи связей и узлов с разделением связей в теории перколяции.// Журнал технической физики 2009 Т79 Вып.7.-с. 154-155.
9. Орлов А. Н. Введение в теорию дефектов в кристаллах. – М.: Высшая школа. 1983. 145 с.
10. Орлов А. Н., Трушин Ю. В., Энергии точечных дефектов в металлах, – М.: 1983.80 с.
11. Физические процессы в облученных полупроводниках, под ред. Л. С. Смирнова, – Новосибирск: 1977.-с. 170-185.

**References:**

1. Shklovskii B.I., Efros A.L. Elektronnyye svoistva legirovannykh poluprovodnikov. – М.: Nauka, 1979.
2. Shklovskii B.I., Efros A.L. // UFN. 1975. T. 117 (3). S. 401.436.
3. Tarasevich Yu.Yu. Perkolyatsiya: Teoriya, prilozheniya, algoritmy. – М.: Editorial URSS, 2002.-112 s.
4. Tarasevich Yu.Yu., van derMarck S.C. // Int. J. of Modern Physics. C. 1999. Vol. 10 (7). PP. 1193-1204.
5. Frank D.J., Lobb C.J. Highly efficient algorithm for percolative studies in two dimensions // Phys.Rev.B. 1988.V.37.PP.302-307.
6. Lobb C.J., Frank D.J. Percolative conduction and Alexander-Orbach conjecture in two dimensions // Phys.Rev.B.1984.V.30, No.7.PP. 4090-4092.
7. L.A.Bulavin, N.V. Vygornitskii, N.I.Lebovka. Komp'yuternoe modelirlvanie fizicheskikh sistem: Uchebnoe posobie/ – Dolgoprudnyi: Izdatel'skii Dom «Intelekt», 2011.-352 s.ISBN 978-5-91559-101-0.

8. Denisenko V.A., Sotskov V.A. Modelirovanie ob'edinenoi zadachi svyazei i uzlov s razdeleniem svyazei v teorii perkolyatsii.// Zhurnal tekhnicheskoi fiziki 2009 T79 Vyp.7.-s. 154-155.
9. Orlov A. N. Vvedenie v teoriyu defektov v kristallakh. – M.: Vysshaya shkola. 1983.145s.
10. Orlov A. N., Trushin Yu. V., Energii tochechnykh defektov v metallakh, – M.: 1983.80s.
11. Fizicheskie protsessy v obluchennykh poluprovodnikakh, pod red. L. S. Smirnova, – Novosibirsk: 1977.-s. 170-185.