



**Уральский государственный университет
им. Н.И.Лобачевского**

Факультет Вычислительной математики и кибернетики

**Высокопроизводительный
программный комплекс для
исследования псевдосимметрии
кристаллов и атомных кластеров**

Лозгачев И. Н., Сомов Н.
В.



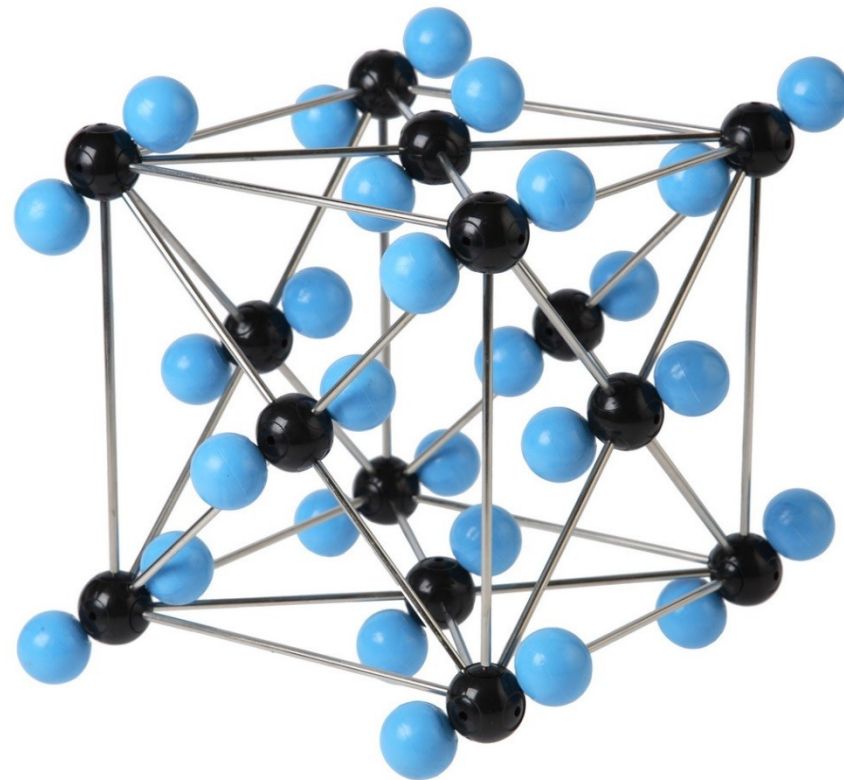
Содержание

- ❑ Введение
- ❑ Влияние симметрии на физические свойства
- ❑ Способы описания псевдосимметрии
- ❑ Методы исследования псевдосимметрии
- ❑ Атомные кластеры
- ❑ Производительность системы
- ❑ WEB-сервис



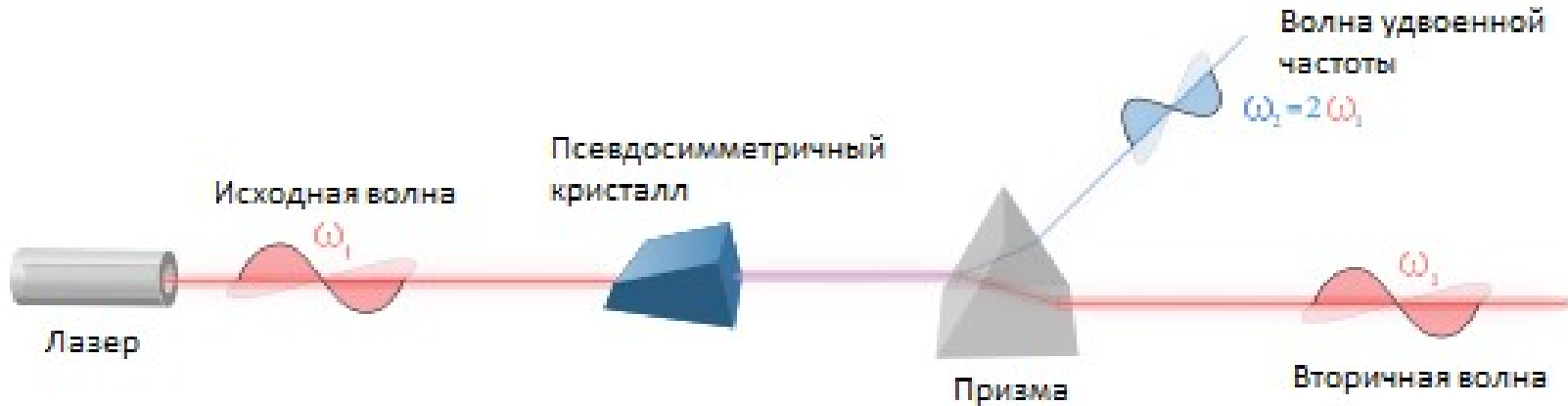
Кристаллическая решетка

- ❑ Отображает группу симметрии
- ❑ Может быть одинаковой для разных кристаллов
- ❑ Влияет на физические свойства кристаллов



Псевдосимметрия

- ❑ Пьезоэффект
- ❑ Ферроэффект
- ❑ Фазовый переход второго рода
- ❑ Генерация второй оптической гармоники



Вычисление псевдосимметрии



□ Функционал

$$\eta_{\hat{q}}[\rho(\vec{r})] = \frac{\int_V \rho(\vec{r}) \rho(\hat{q}\vec{r}) dV}{\int_V \rho(\vec{r})^2 dV}$$

□ В ряд Фурье

$$\eta_{\hat{q}}[\rho(\vec{r})] = \frac{\sum_{\vec{H}} F(\vec{H}) F(-\vec{q}^T \vec{H}) \exp(-2\pi i(\vec{H}, \vec{t}))}{\sum_{\vec{H}} |F(\vec{H})|}$$

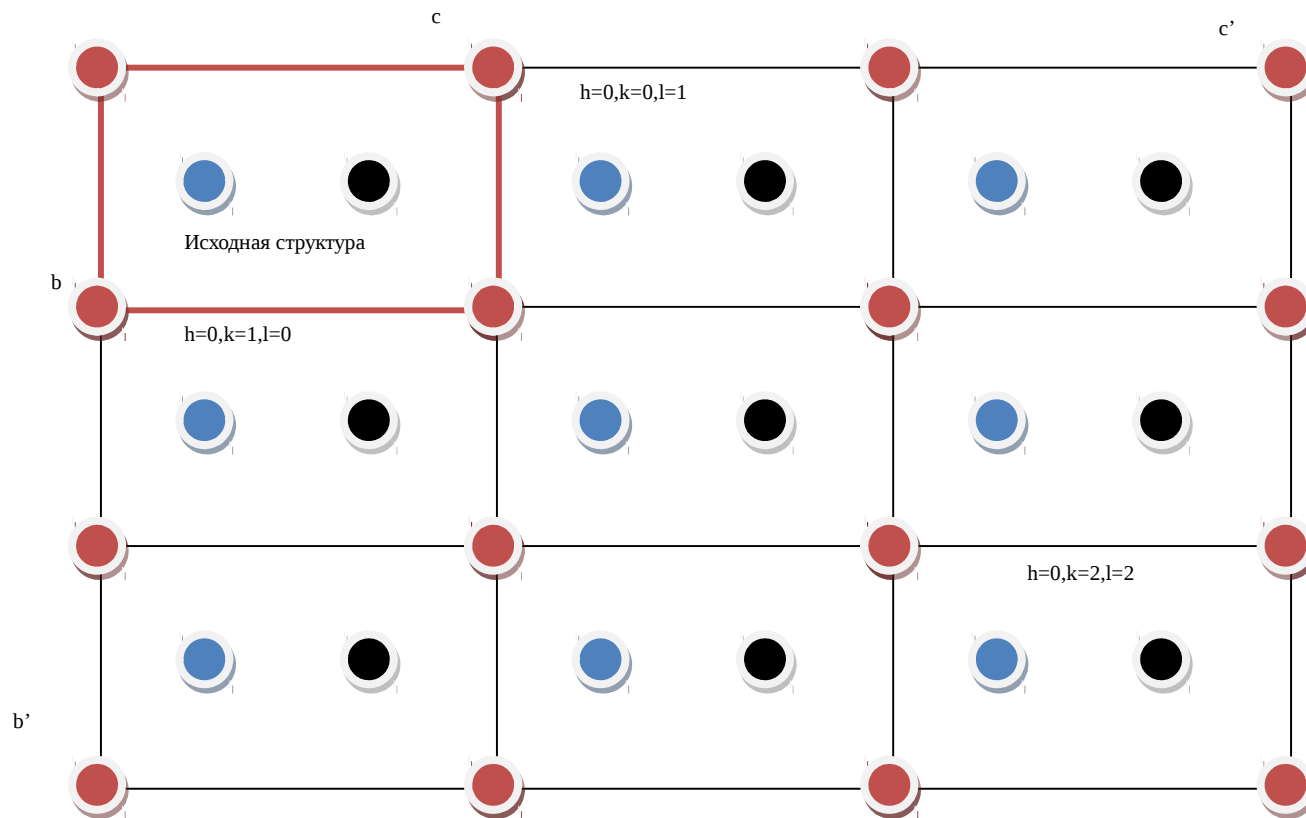
□ $\rho(\vec{r})$ - функция электронной плотности, $F(\vec{H})$ - структурная амплитуда кристалла

Программный комплекс

- ❑ Расчет степени инвариантности
- ❑ Построение карты степени инвариантности
- ❑ Поиск локальных оптимумов функционала
- ❑ Вычисление атомных смещений



Исследование атомных кластеров



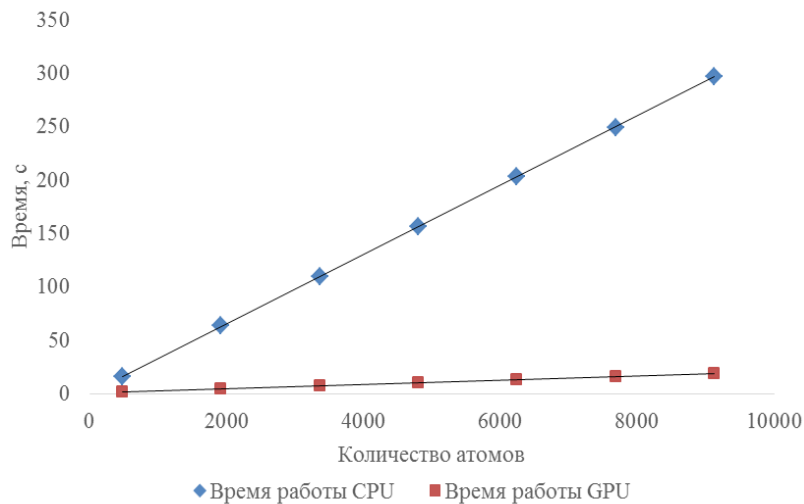
Вычислительная нагрузка

- ❑ Генерация атомного кластера с разупорядоченными позициями
- ❑ Множественные запуски для сбора статистики
- ❑ Варьирование параметров задач

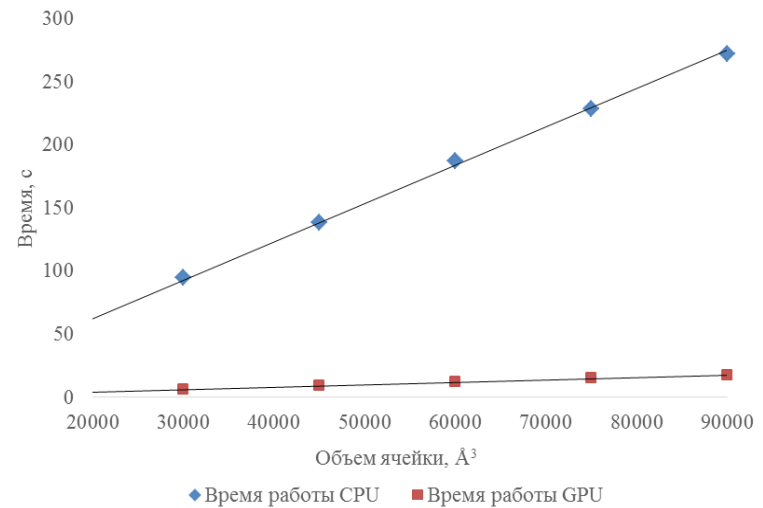


Время вычислений

- 2 CPU Intel Xeon L5630 2.13 ГГц, 4 ядра
- NVidia Tesla M2050



а

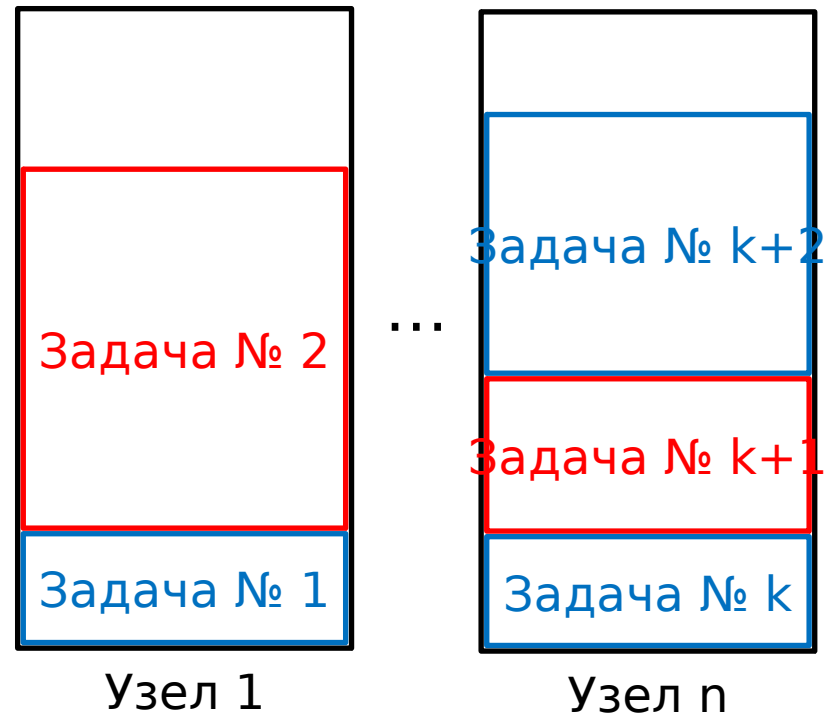


б

Время работы параллельных реализаций алгоритмов: а) зависимость времени расчетов от числа атомов в элементарной ячейке модельного кристалла ($V_{\text{яч}} = 45882 \text{ \AA}^3$, $\sin\theta/\lambda = 1 \text{ \AA}^{-1}$); б) зависимость времени расчетов от объема элементарной ячейки модельного кристалла ($\sin\theta/\lambda = 1 \text{ \AA}^{-1}$, число атомов в элементарной ячейке 4320).

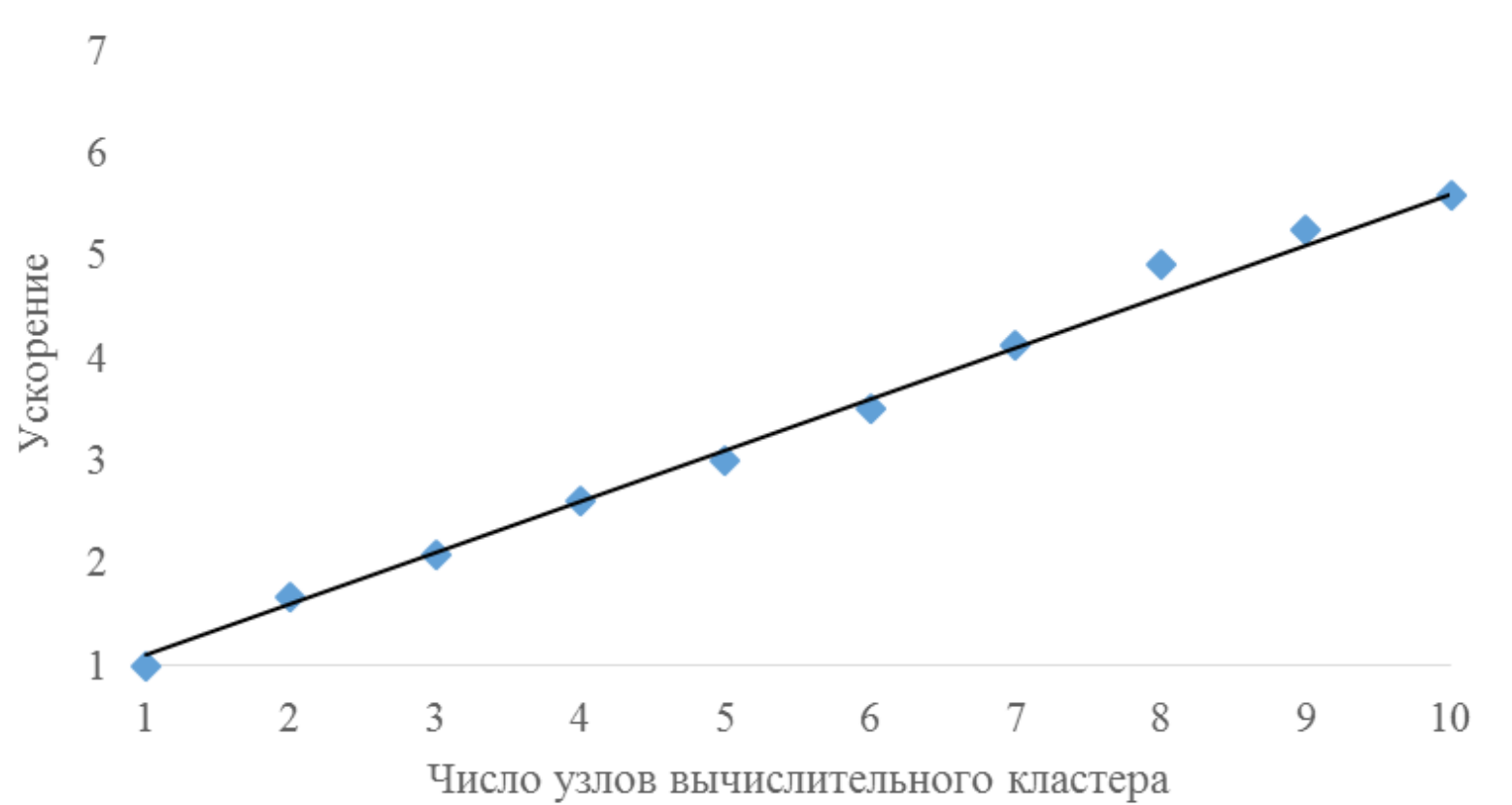


Распределение задач



- ❑ Вводится функция стоимости задачи
- ❑ Подзадачи распределяются равномерно

Ускорение

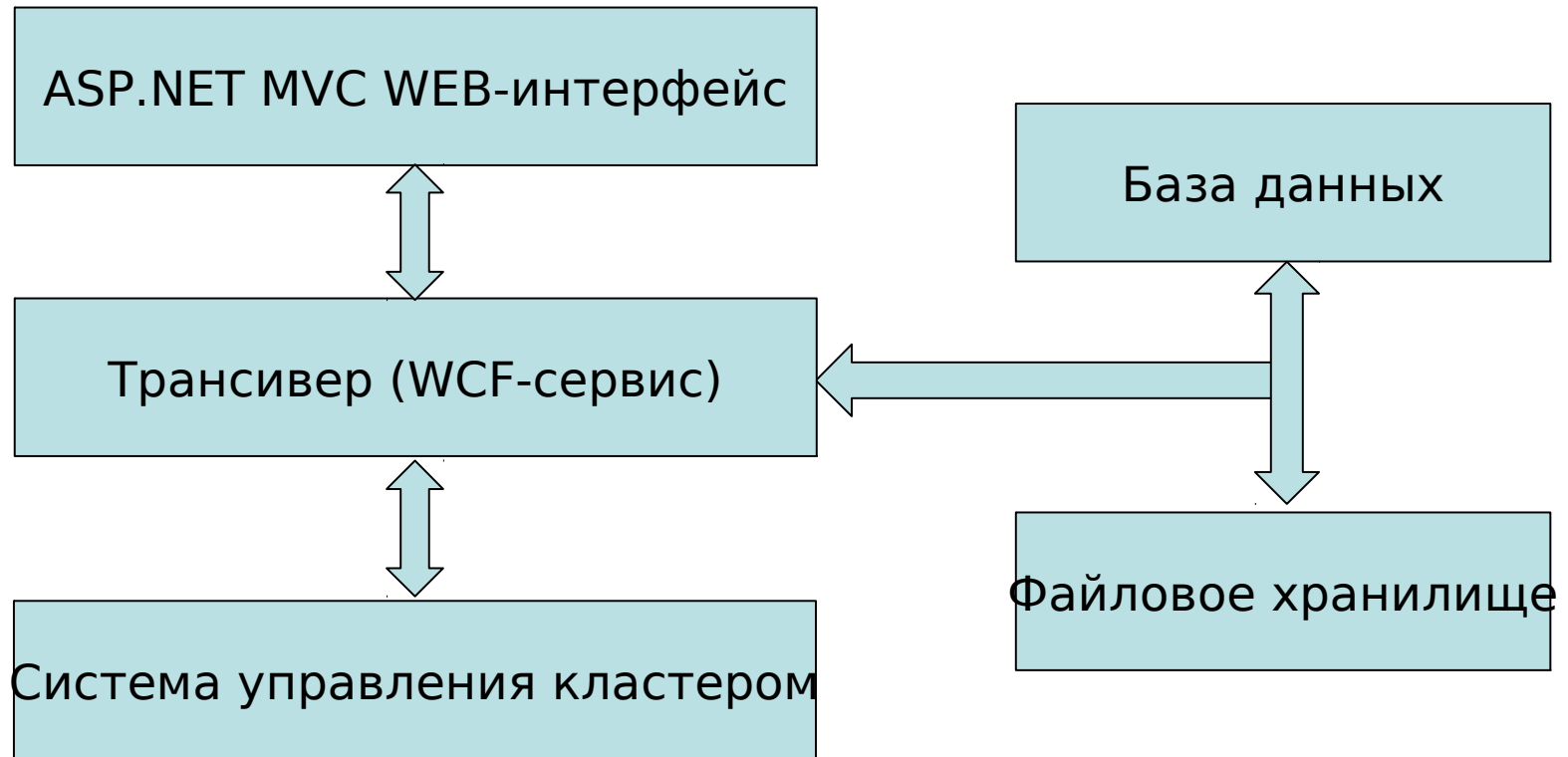


WEB-доступ к программному комплексу

- ❑ Разработка портала для запуска задач
- ❑ Собственный пул задач и планировщик
- ❑ Перенаправление запуска в реальную систему управления кластером
- ❑ Сбор статистики и ведение истории запусков



Архитектура WEB-сервиса



Результаты

- ❑ Набор параллельных алгоритмов для исследования псевдосимметрии
- ❑ Методы исследования атомных кластеров
- ❑ WEB-доступ в процессе разработки



Вопросы?

- ❑ Иван Лозгачев
- ❑ ivan.lozgachev@itlab.unn.ru

