



Jānis Rimšāns, Jevgenijs Kaupužs

**Augstas veiktspējas skaitļošana fāžu pāreju
modelēšanā daudzu daļiņu sistēmām.**

**Turbulento gaisa slāņu nelineārās
problēmas un to analītiski – skaitliski
atrisinājumi.**

Zinātniskā konference "Matemātika un informātika pēc 50..."

2009. gada 9. novembris

```
01011100110110101      101000110100
10110100111010100      1011011010111001
0110111101110100001    101100010011011100
101001                    0100110      0011001
011001                    100110      010001
010111                    1010100     1101110
011101 0100000          1100001     0111000
001110010011000010     1110011     0110100
10010000001001100010  1010101     0011010
1001001                  01001001    1101000     1000110
                        0101101     0111010     0011011
                        0010110     1001101     0100111
                        1010011     0110010     1100001
                        1010001     0000001     1101100
0010000                  001110     0100110     0010001
1010100                  1110001     1001100     1000110
00000011                10010011    11100110101001110110
000010110111101100    1101100011110010
11101100101011        110110100100
```



- **Izinga spinu modelis**

Aplūkojam 3D Izinga modeli uz kubiska režģa ar periodiskiem robežnosacījumiem. Spinu sistēmas Hamiltoniāns ir

$$\frac{H}{T} = -\beta \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

kur $\sigma_i = \pm 1$ – spina mainīgie, T – temperatūra, $\beta = J/T$, J – spinu mijiedarbības enerģija. Spinu konfigurācija $\{\sigma\}$ parādās ar varbūtību ko nosaka Bolcmaņa sadalījums

$$P(\{\sigma\}) = \frac{1}{Z} e^{-H(\{\sigma\})/T}$$

Pie noteikta β (≈ 0.2216546) lielā spinu sistēmā notiek fāžu pāreja no nesakārtota uz sakārtotu stāvokli.



- **Detalizētais līdzsvars un Metropolis algoritms**

Monte Karlo modelēšanā ar noteiktām varbūtībām tiek realizētas pārejas starp dažādiem sistēmas stāvokļiem (spinu konfigurācijām $\{\diamond\}$) saskaņā ar detalizētā līdzsvara principu

$$P(1) p(1 \rightarrow 2) = P(2) p(2 \rightarrow 1)$$

jeb

$$\frac{p(1 \rightarrow 2)}{p(2 \rightarrow 1)} = \frac{P(2)}{P(1)} = e^{-\frac{H_2 - H_1}{T}}$$

kas nodrošina, ka līdzsvara sadalījums (pēc ļoti ilgas modelēšanas) ir Bolcmaņa sadalījums.

Metropolis algoritmā vienā solī var izmainīt tikai viena nejauši izvēlēta spina stāvokli (zīmi) un

$$p(1 \rightarrow 2) = 1 \quad \text{ja} \quad H_2 < H_1$$

$$p(1 \rightarrow 2) = \exp(-\Delta H / T) \quad \text{ja} \quad \Delta H = H_2 - H_1 > 0$$



- **Volfa algoritms**

Volfa algoritmā vienā solī apgriež ($\blacklozenge \star - \blacklozenge$) veselus spinu klasterus pēc sekojošas shēmas:

1. Nejauši izvēlas vienu jaunā klastera iedīgļa spinu un to apgriež.
2. Aplūko visus tā kaimiņus un tos, kas ir pretēji šim jau apgrieztajam spinam, pievieno klasterim un apgriež ar varbūtību $P_{\text{add}} = 1 - \exp(-2\delta\Omega)$.
3. Katram iepriekšējā solī pievienotajam spinam pārbauda visus tā kaimiņus un tos, kas ir vērsti pretēji, pievieno klasterim un apgriež ar varbūtību $P_{\text{add}} = 1 - \exp(-2\delta\Omega)$. Šo soli atkārto kamēr process apstājas – neviens jauns spins netiek pievienots.



- **Volfa algoritma paralēlā versija**

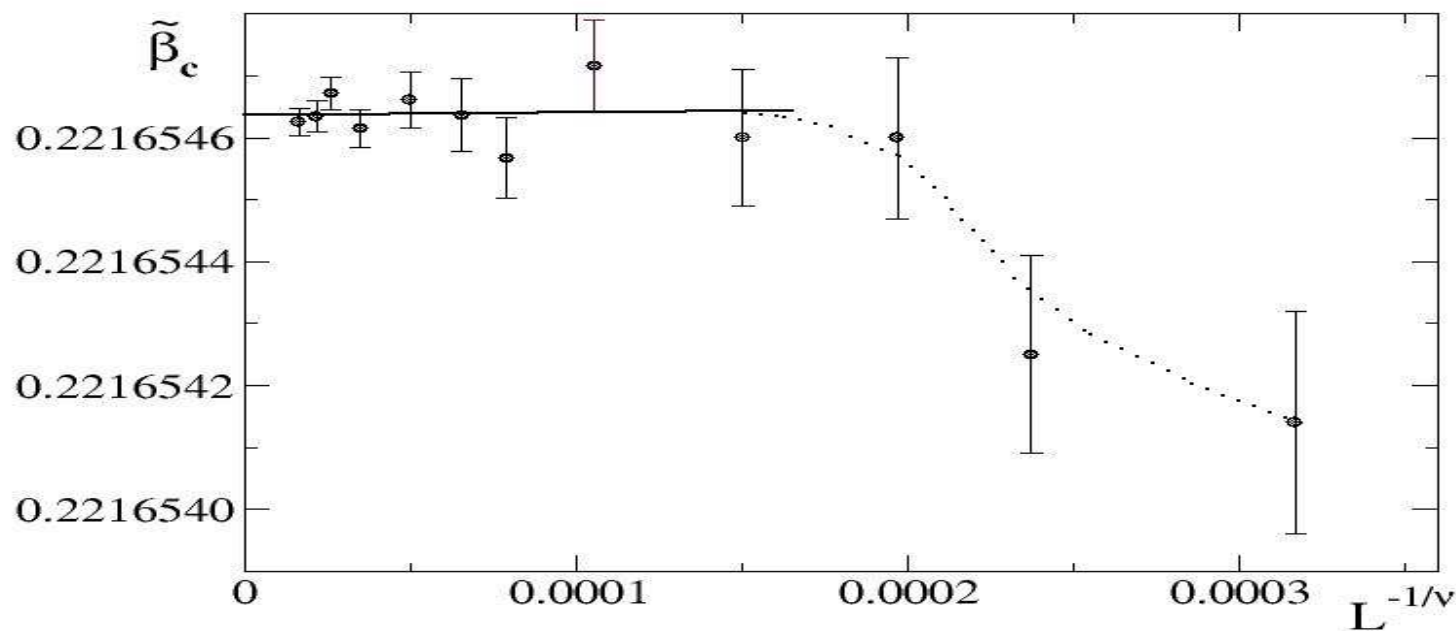
Katru Volfa klāstera audzēšanas iterāciju (3. soli) var veikt paralēli uz vairākiem procesoriem Open MP tehnoloģijā.

1. Sadala augošā klāstera virsmas spinu (to spinu, kas pievienoti iepriekšējā iterācijā) koordināšu sarakstu starp procesoriem. Šīs x, y, z koordinātes kā arī spinu vērtību masīvs glabājas kopējā atmiņā, kas pieejama visiem procesoriem.
2. Katrs procesors apstrādā savu klāstera virsmas daļu. Pie tam, vispirms tiek aplūkoti iespējamajai pievienošanai klāsterim tikai tie spini, kas atrodas vienā no 6 iespējamajiem virzieniem no klāstera virsmas spiniem. Pēc tam secīgi tiek apstrādāti atlikušie 5 virzieni. Procesoru darbība tiek sinhronizēta pēc katra no virzieniem, lai ievērotu Open MP tehnoloģijas pamatprincipu – vienlaicīgi tikai viens procesors drīkst ierakstīt informāciju noteiktā atmiņas šūnā.
3. Tiek izveidots kopējais jaunpievienoto spinu koordināšu saraksts, apkopojot informāciju no visiem procesoriem. Šis solis arī tiek paralelizēts.



- **Daži rezultāti**

Iegūts 1.79 reižu paātrinājums uz 2 procesoriem un 2.67 reižu paātrinājums uz 4 procesoriem, modelējot $L=1024$ izmēra režģi kritiskā punkta tuvumā. Ļoti precīzi novērtēts kritiskais punkts.





Problēmas formulējums

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_m \frac{\partial U}{\partial z} \right) + Tf \cos(\alpha)(V - V_g), \quad (1)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_m \frac{\partial V}{\partial z} \right) + Tf \cos(\alpha)(U_g - U), \quad (2)$$

$$K_m = \frac{T}{L} (2(kz)^2 \left| \frac{\partial}{\partial z} \left((U^2 + V^2)^{1/2} \right) \right| + \frac{V}{L}), \quad (3)$$

$$0 < z < 1, 0 < t \leq T,$$

$$U(0, z) = U_0(z), V(0, z) = V_0(z), 0 \leq z \leq 1,$$

$$U(t, 0) = 0, V(t, 0) = 0, 0 \leq t \leq 1,$$

$$U(t, 1) = V_g, V(t, 1) = 0, 0 \leq t \leq 1.$$



Problēmas formulējums

- **Vagn Ekman, Ludwig Prandtl atrisinājums**

$$K_m = \text{const} \quad \longrightarrow \quad U = C e^{-\frac{kz}{\sqrt{2}}} \sin\left(\frac{kz}{\sqrt{2}}\right)$$

- **Vispārīgā gadījumā $K_m = K_m\left(\frac{\partial U}{\partial z}, \frac{\partial V}{\partial z}\right)$ analītisks atrisinājums nav zināms**

- **Skaitliskas metodes**

- Nelinearitāte izraisa konverģences problēmas uz katra laika slāņa
- Robežslāņi nosaka nepieciešamību pielietot kustīgu daudzpunktu režģi



Variāciju formulējums

$$u(U, V) = \int_{U_0(0)}^U K_m dU_1, \quad \mathcal{G}(U, V) = \int_{V_0(0)}^V K_m dV_1,$$
$$u(t, z) = C_3 \left(1 - \frac{z}{q_1(t)} \right)^2 + Tf \cos(\alpha) (q_1(t) - V_g),$$
$$\mathcal{G}(t, z) = C_4 \left(1 - \frac{z}{q_2(t)} \right)^2 + Tf \cos(\alpha) (U_g - q_2(t)).$$

$$\frac{7}{61} C_3^2 + \frac{2}{3} q_2 q_1 Tf \cos(\alpha) V_g + \frac{36l^2 L}{5\nu} q_1^2 (q_1')^2 q_1'' + \frac{1}{2} q_1 q_1' q_1'' = 0,$$

$$\frac{7}{61} C_4^2 + \frac{2}{3} q_2 q_1 Tf \cos(\alpha) U_g + \frac{36l^2 L}{5\nu} q_2^2 (q_2')^2 q_2'' + \frac{1}{2} q_2 q_2' q_2'' = 0.$$



Variāciju formulējums

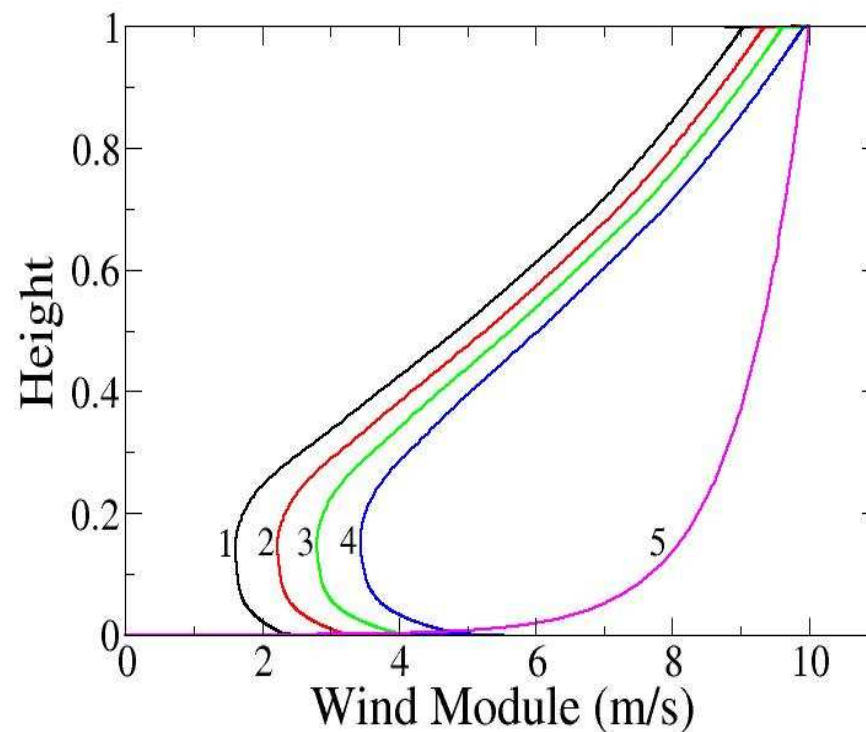


Fig.1 Wind module distributions in the different time moments: 1- $t=0.0125$, 2- $t=0.0250$, 3- $t=0.0375$, 4- $t=0.005$; 5- $t=1$, long time calculations (quasi steady-state solution) using propagator scheme



Latvijas Universitātes aģentūra
Latvijas Universitātes Matemātikas un informātikas institūts

Dalība projektos



DEISA

DEISA Extreme Computing Initiative

DISTRIBUTED EUROPEAN INFRASTRUCTURE FOR SUPERCOMPUTING APPLICATIONS

Project: *“Parallel Monte-Carlo for Critical Phenomena Description in Many Particle Systems” 2009-2010*



MUSCATEN Nordic Network

Project: *“Towards Multi-Scale Modelling of the Atmospheric Environment” 2010-2012*

Paldies par uzmanību!