

# Development Of Effective Algorithms and Structures For Numerical Atomistic Simulation Of Magnetics.

I. Goryachev<sup>a</sup>, E. Zipunova<sup>b</sup>, A. Ivanov<sup>c</sup>, V. Levchenko<sup>c</sup>

<sup>a</sup>KinTech Laboratory, Moscow, Russian Federation, [kvant87@gmail.com](mailto:kvant87@gmail.com)

<sup>b</sup>Moscow Institute of Physics and Technology, Moscow, Russian Federation

<sup>c</sup>Keldysh's Institute of Applied Mathematics, Moscow, Russian Federation

---

## Abstract

There is introduction of new software for numerical simulation and solution the class of problems related to the investigation of dynamic and distribution of magnetic moments in magnetic materials. Offered mathematical model involves the evolution of certain atom of crystal lattice and its magnetic moment condition, that is corresponding to atomistic model. Such-like model provides more precise description of physical processes inside the system than other models. The evolution of each atom is assigned by Landau-Lifshitz differential equations. For purpose of numerical time step increasing and computational effort decreasing modified fourth order numerical Runge-Kutta scheme was considered. Research of numerical scheme convergence, stability and approximation is presented. From the computational point of view atomistic model is the most resource-consuming, that has to provide the implementation of graphical processor units, new algorithms and data structures for calculations performance increase and full execution time of numerical simulation decrease. Statement of high performance algorithms and data structures are realized. Obtained performance and comparison with similar up-to-date code Vampire are presented.

© 2016 Published by Elsevier Ltd.

## Keywords:

Magnetism / Магнетизм,

Atomistic model / Атомистическая модель,

Finite-difference numerical scheme / Конечно-разностная численная схема,

Runge-Kutta method / Метод Рунге-Кутты,

Graphics Processing Units / Графические ускорители,

High-performance algorithms and data structures / Высокоэффективные алгоритмы и структуры данных

---

## 1. Introduction

Численное моделирование физических процессов в магнитных материалах играет существенную роль в создании спинтронных приборов таких как Magnetoresistive Random-Access Memory (MRAM) based on a single magnetic tunnel junction (MTJ) [1], spintronic magnetoresistive sensors in read heads of hard drives based on the Giant magnetoresistance (GMR) or Tunnel magnetoresistance (TMR) effect [2], Racetrack memory or domain-wall memory (DWM) based on current-induced domain-wall motion [3]. Использование теоретических оценок и численных расчетов для про-

ектирования таких устройств позволит косвенным образом повысить их качество при изготовлении и технические характеристики.

Среди существующих математических моделей для описания физических процессов в магнитных материалах основными являются атом-в-атом, микромагнитный и макроспиновый методы. Атомистический метод позволяет рассмотреть эволюцию магнитного момента отдельного атома кристаллической решетки материала. Микромагнитный подход включает в себя исследование изменения от времени среднего магнитного момента отдельных доменов, на которые делится образец. В макроспиновом приближении магнитный материал рассматривается как одна сплошная среда с единым магнитным моментом, характеризующий намагниченность слоя. Выбор конкретной модели зависит от постановки эксперимента и тех физических процессов, которые возникают в материале при данных параметрах. Например, считается, что динамику системы свободного слоя в битовых ячейках MRAM [4] адекватно описывает макроспиновое приближение, поскольку ширина доменной стенки часто имеет тот же порядок, что и размер рассчитываемой области. Но в [5] было показано, что даже в случае очень малых размеров свободного слоя в квазimakроспиновом приближении утрачивается важная информация о динамических свойствах битовой ячейки MRAM.

Среди обсуждаемых проблем теории микромагнетизма применительно к спинтронным устройствам выделяются две. Первая связана с анализом статических равновесных распределений намагниченности в области обратимого их изменения во внешнем поле. Для решения этой проблемы пригодны методы минимизации энергии системы, такие как метод градиентного спуска и метод Рунге [6], метод выравнивания намагниченности вдоль эффективного поля, предложенный Ла-Бонте [7], и его модификации [8, 9]. Вторая проблема связана с необратимым изменением состояний системы в области критических значений магнитного поля. Для решения этой проблемы используются микромагнитный метод моделирования и метод атом-в-атом.

Микромагнитное моделирование подразумевает численное интегрирование уравнений магнитодинамики Ландау-Лифшица записанных для магнитного момента каждого домена образца. Интегрирование уравнений Ландау-Лифшица-Гильберта для доменов, применяется в целом ряде работ [10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20], но в то же время не дает адекватного решения при температурах близких к температуре Кюри. Интегрирование уравнений Ландау-Лифшица-Блоха учитывает изменение модуля магнитных моментов доменов при больших температурах [21, 22, 23], при этом модуль магнитного момента отдельного домена сходится к среднему модулю магнитного момента при соответствующей температуре для отрелаксировавшей системы. Соответственно такой подход не обязан работать для сильно неравновесных систем. Кроме того, для этого подхода необходимо знание зависимостей от температуры перпендикулярной и параллельной восприимчивости и равновесной намагниченности при внешнем поле стремящимся к нулю [24]. Такие зависимости можно получить из эксперимента или предварительного моделирования атом-в-атом.

Моделирование атом-в-атом позволяет адекватно моделировать магнитные системы при температурах близких к температуре Кюри [25, 26, 27]. Так же атомистический подход, в отличие от макроспинового или микромагнитного, позволяет учесть вкрапления специальных примесей и добавок нанометрового масштаба, неоднородности и дефекты материала, влияние шероховатостей и границ сложной формы, взаимодействие магнитных моментов атомов разных материалов в приграничном смежном слое — интерфейсе. Таким образом, наиболее физически адекватным методом моделирования квазистатики и динамики процессов в широком диапазоне температур представляется численное интегрирование уравнений магнитодинамики Ландау-Лифшица, записанных для каждого атома в отдельности.

Однако с вычислительной точки зрения атомистический подход является более ресурсозатратным, что является причиной для разработки и внедрения новых подходов для увеличения производительности расчетов и сокращения полного времени моделирования. Для этих целей привлекаются и разрабатываются высокоэффективные алгоритмы, структуры данных и численные схемы, которые позволяют учесть специфику архитектуры вычислительной системы

и особенности математической модели.

Уравнения магнитодинамики Ландау-Лифшица, записанные для каждого атома, являются системой обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). При численном решении системы проводится дискретизация по времени. Так как задача является жесткой, важен выбор численной схемы и соответствующего шага по времени. Различаются явные и неявные схемы для решения системы ОДУ. Явная схема решения уравнений Ландау-Лифшица, опирающаяся на классическую схему Рунге-Кутты 4-ого порядка, часто использовалась при моделировании динамики доменных границ в магнитных пленках [10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20]. Достоинством явной схемы интегрирования уравнений Ландау-Лифшица является упрощенное решение проблемы нелинейности системы, а применение итерационной процедуры позволяет добиться желаемой точности решения. Недостатком ее является наличие сильного ограничения максимально допустимого шага интегрирования по времени из-за возникновения расходимости. Это ограничивает скорость численного моделирования. Модификация существующих численных схем позволит увеличить шаг по времени, и уменьшить время расчетов. Модифицированные для случая асимптотически большой релаксации уравнения использовались для поиска стационарных магнитных состояний малых частиц в [12]. В последнем случае предполагалось, что роль прецессии мала, поэтому этот метод расчета близок к схеме Ла-Бонте. В данной работе рассматривается явная схема в силу простоты реализации на параллельных системах. Предложенная явная схема является модификацией Рунге-Кутты 4-ого порядка и позволяет увеличить шаг по времени без потери точности. Таким образом, это позволит сократить общее время моделирования и обеспечить корректность результатов.

В главе 2 проводится математическая формулировка атомистической модели. Для ее решения в главе 3 предложена явная модифицированная схема Рунге-Кутты четвертого порядка, накладывающая менее жесткие ограничения на шаг интегрирования по времени без потери точности. Глава 4 посвящена описанию алгоритмической реализации численной схемы на параллельных гетерогенных системах. Результаты, обсуждения и дальнейшие цели обсуждения в 5 и 6 главах.

## 2. Математическое описание. Гамильтониан взаимодействия

Математическая постановка задачи опирается на уравнение Ландау-Лифшица:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{m}_i}{\partial t} &= -\gamma \mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_{\text{eff}}^i - \alpha \mathbf{m}_i \times (\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_{\text{eff}}^i) + 2\sqrt{\alpha k_B T} \mathbf{S}(t), \\ \mathbf{H}_{\text{eff}}^i &= -\frac{1}{\mu_s} \frac{\partial W_i}{\partial \mathbf{m}_i}, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $i$  — номер атома,  $\mathbf{m}_i$  — магнитный момент отдельного атома,  $\alpha$  — параметр затухания,  $\gamma$  — гиромагнитное соотношение,  $W_i$  — гамильтониан системы для атома с индексом  $i$ ,  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура системы,  $\mathbf{S}(t)$  — случайный источник единичной интенсивности с нормальным распределением, сохраняющий модуль  $\mathbf{m}_i$  и обеспечивающий в равновесном случае больцмановское распределение в ансамбле магнитных моментов  $\{\mathbf{m}_i\}$ .

$$W_i = W_{\text{exch}} + W_{\text{anis}} + W_{\text{ext}} + W_{\text{d-d}},$$

где  $W_{\text{exch}}$  — энергия обменного взаимодействия,  $W_{\text{anis}}$  — энергия анизотропии,  $W_{\text{ext}}$  — энергия взаимодействия с внешним полем,  $W_{\text{d-d}}$  — диполь-дипольное взаимодействие.

$$W_{\text{anis}} = -\sum_i \sum_j \frac{K_{ij}}{2} (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{a}_{ij})^2,$$

где  $K_{ij}$  — коэффициент анизотропии для  $i$ -го атома  $j$ -ой оси,  $\mathbf{a}_{ij}$  —  $j$ -ая ось анизотропии  $i$ -го атома.

$$W_{\text{ext}} = - \sum_i (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{H}^{\text{ext}}),$$

где  $\mathbf{H}^{\text{ext}}$  — внешнее поле.

$$W_{\text{d-d}} = - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{3(\mathbf{m}_i \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j))(\mathbf{m}_j \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)) - |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2 (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^5},$$

где  $\mathbf{r}_{i,j}$  — радиус-вектора атомов  $i, j$ .

Обменное взаимодействие среди всех слагаемых в гамильтониане является наиболее преобладающим. Связанная с этим взаимодействием энергия по порядку величины равна 1–2 эВ, что на порядок больше, чем следующее по величине слагаемое в гамильтониане взаимодействия. Обменное взаимодействие входит в математическую модель в виде соотношения:

$$W_{\text{exch}} = - \frac{1}{2} \sum_{\substack{i \neq j \\ \rho_{ij} \leq R_{\text{exch}}}} J_{i,j} (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j), \quad (2)$$

где  $\rho_{ij}$  — расстояние между локализациями магнитных моментов  $\mathbf{m}_i$  и  $\mathbf{m}_j$ .

Коэффициент обменного интеграла  $J_{i,j}$ , характеризующий взаимодействие между магнитными моментами, является скаляром в изотропном случае. Это означает, что энергия обменного взаимодействия двух магнитных моментов зависит только от их относительной ориентации, а не от направления. Для ферромагнитных материалов соседние магнитные моменты сонаправлены и  $J_{i,j} > 0$ , в случае антиферромагнитного материала магнитные моменты антиколлинеарны и  $J_{i,j} < 0$ . Влияние анизотропии в материале описывается тензором второго ранга в виде матрицы  $J_{i,j}$ , в котором внедиагональные элементы не обязательно равны нулю:

$$W_{\text{exch}} = - \sum_{\substack{i \neq j \\ \rho_{ij} \leq R_{\text{exch}}}} (M_x^i M_y^i M_z^i) \begin{pmatrix} J_{xx} & J_{xy} & J_{xz} \\ J_{yx} & J_{yy} & J_{yz} \\ J_{zx} & J_{zy} & J_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_x^j \\ M_y^j \\ M_z^j \end{pmatrix} \quad (3)$$

В формулах (2)–(3) суммирование производится по индексам ближайших соседей для атома с фиксированным  $i$ -индексом. Количество соседей и, соответственно, радиус действия обменного взаимодействия для каждого вида кристаллической решетки определяется отдельно.

### 3. Численная схема

Уравнение Ландау-Лифшица для  $i$ -го атома можно привести к следующему виду:

$$\frac{\partial \mathbf{m}_i}{\partial t} = - [\mathbf{m}_i \times \mathbf{K}(\mathbf{m})] = - [\mathbf{m}_i \times (\gamma \mathbf{H}_i^{\text{eff}}(\mathbf{m}) + \alpha [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}(\mathbf{m})])]. \quad (4)$$

Векторное уравнение (4) описывает вращение, если положить  $\frac{\partial \mathbf{K}}{\partial t} = 0$ :

$$\mathbf{m}_i(t) = \Xi(t\mathbf{K})\mathbf{m}_0,$$

где  $\Xi(\mathbf{a})$  — матрица вращения вокруг оси  $\mathbf{a}$  на угол  $|\mathbf{a}|$ ,  $\mathbf{m}_0$  — первоначальное состояние магнитного момента отдельного атома.

Таким образом, в первом порядке приближения эволюция магнитного момента состоит из вращения магнитного момента вокруг эффективного поля. Численная схема, лежащая в основе представляемого комплекса программ, была разработана исходя из этого предположения.

Для этого рассмотрим классическую схему Рунге-Кутты четвертого порядка записанную для векторного уравнения (4):

$$\mathbf{m}^{n+1} = \mathbf{m}^n + \frac{1}{6}h(\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4), \quad (5)$$

где  $h$  - шаг по времени, а  $\mathbf{k}_{1,2,3,4}$  вычисляются следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= f(t^n, \mathbf{m}^n), \\ \mathbf{k}_2 &= f(t^n + \frac{h}{2}, \mathbf{m}^n + \frac{h}{2}\mathbf{k}_1), \\ \mathbf{k}_3 &= f(t^n + \frac{h}{2}, \mathbf{m}^n + \frac{h}{2}\mathbf{k}_2), \\ \mathbf{k}_4 &= f(t^n + h, \mathbf{m}^n + h\mathbf{k}_3). \end{aligned}$$

Уравнение (5) можно преобразовать следующим образом:

$$\mathbf{m}^{n+1} = \frac{1}{6}((\mathbf{m}^n + h\mathbf{k}_1) + 2(\mathbf{m}^n + h\mathbf{k}_2) + 2(\mathbf{m}^n + h\mathbf{k}_3) + (\mathbf{m}^n + h\mathbf{k}_4)).$$

В такой записи  $\mathbf{k}_{1,2,3,4}$  соответствует частной производной по времени, а  $\mathbf{m}^n + h\mathbf{k}_{1,2,3,4}$  — приближению  $\mathbf{m}^{n+1}$  первого порядка.

Чтобы получить схему во вращениях заменим приближения первого порядка на вращение магнитного момента вокруг эффективного поля, соответствующего производным  $\mathbf{k}_{1,2,3,4}$ .

Тогда запишем схему в поворотах:

$$\mathbf{m}_i^{n+1} = \frac{1}{6}(\Xi(h\mathbf{K}_{i1})\mathbf{m}_i^n + 2\Xi(h\mathbf{K}_{i2})\mathbf{m}_i^n + 2\Xi(h\mathbf{K}_{i3})\mathbf{m}_i^n + \Xi(h\mathbf{K}_{i4})\mathbf{m}_i^n), \quad (6)$$

где  $h$  - шаг по времени, а  $\mathbf{K}_{1,2,3,4}$  вычисляются следующим образом:

$$\begin{aligned} &\textbf{stage1 :} \\ &\mathbf{H}_{i1}^{\text{eff}} = \mathbf{H}_i^{\text{eff}}(\mathbf{m}^n), \\ &\mathbf{K}_{i1} = (\gamma\mathbf{H}_{i1}^{\text{eff}} + \alpha[\mathbf{m}_i^n \times \mathbf{H}_{i1}^{\text{eff}}]), \\ &\textbf{stage2 :} \\ &\mathbf{H}_{i2}^{\text{eff}} = \mathbf{H}_i^{\text{eff}}(\Xi(\frac{h}{2}\mathbf{K}_1)\mathbf{m}^n), \\ &\mathbf{K}_{i2} = (\gamma\mathbf{H}_{i2}^{\text{eff}} + \alpha[\mathbf{m}_i^n \times \mathbf{H}_{i2}^{\text{eff}}]), \\ &\textbf{stage3 :} \\ &\mathbf{H}_{i3}^{\text{eff}} = \mathbf{H}_i^{\text{eff}}(\Xi(\frac{h}{2}\mathbf{K}_2)\mathbf{m}^n), \\ &\mathbf{K}_{i3} = (\gamma\mathbf{H}_{i3}^{\text{eff}} + \alpha[\mathbf{m}_i^n \times \mathbf{H}_{i3}^{\text{eff}}]), \\ &\textbf{stage4 :} \\ &\mathbf{H}_{i4}^{\text{eff}} = \mathbf{H}_i^{\text{eff}}(\Xi(h\mathbf{K}_3)\mathbf{m}^n), \\ &\mathbf{K}_{i4} = (\gamma\mathbf{H}_{i4}^{\text{eff}} + \alpha[\mathbf{m}_i^n \times \mathbf{H}_{i4}^{\text{eff}}]), \end{aligned} \quad (7)$$

где оператор  $\mathbf{H}_i^{\text{eff}}$  принимает на вход вектор состояний  $\mathbf{m}^n$  всех магнитных моментов и возвращает вычисленный вектор эффективного магнитного поля  $\mathbf{H}^{\text{eff}}$ .

В качестве замечания отметим, что суммирование (6) можно заменить на последовательность поворотов:

$$\mathbf{m}_i^{n+1} = \Xi(h\mathbf{K}_{i4})(\Xi(2h\mathbf{K}_{i3})(\Xi(2h\mathbf{K}_{i2})(\Xi(h\mathbf{K}_{i1})\mathbf{m}_i^n))).$$

В итоге модификация схемы Рунге-Кутты записывается с помощью формул (6) — (7)

## 4. Описание базовых программных принципов

### 4.1. Локальные структуры данных для загрузки и сохранения магнитных моментов атомов

Для описания эволюции магнитного момента каждого атома образца необходимо хранить в глобальной памяти вычислительного устройства три компоненты вектора. В целях оптимального хранения данных в локальной памяти GPU-устройства атомы кристаллической решетки магнитного образца группируются на элементарные kern-ячейки. Kern-ячейка содержит в себе различные комбинации атомов в зависимости от типа кристаллической решетки — простая (BC), объемноцентрированная (BCC) или гранецентрированная (FCC). Алгоритмическая kern-ячейка простой решетки охватывает 1 атом; объемноцентрированной — 2 соседних атома отдельных подрешеток, сдвинутых по пространству друг относительно друга на половину атомного расстояния по каждой из осей; гранецентрированной решетки — 1 атом одной подрешетки, лежащий в вершине куба, и 3 атома остальных подрешеток, лежащих в центре смежных граней (рис. 1).

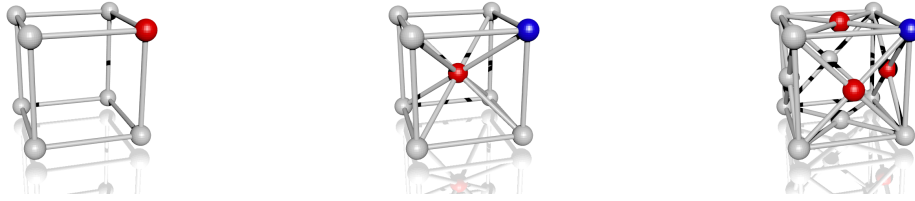


Рис. 1: Виды алгоритмических ячеек kern (выделены синим и красным цветами) в зависимости от выбора кристаллической решетки (слева направо): элементарная (SC), объемно-центрированная (BCC), гранецентрированная (FCC). Отдельный цвет соответствует отдельному сорту атомов.

Как было упомянуто, описание магнитных свойств среды проводится путем отождествления атомов элементарной kern-ячейки с её собственным магнитным моментом  $\mathbf{m} = (M_x, M_y, M_z)$ . Стандартный для CUDA тип данных `float3` не подходит для хранения трех компонент вектора  $\mathbf{m}$  по причине возникновения конфликта при обращении CUDA-варпа (CUDA-warp) в невыравненную (aligned) память. Бесконфликтный доступ в выравненную память с учетом коалесинга (coalescing) обеспечивает хранение 4 чисел с одинарной точностью, что отвечает стандартному CUDA типу `float4`. Алгоритмические kern-ячейки объединяются в grain-кубы (рис. 2). Для оптимального хранения данных с учетом выравнивания в памяти (coaleasing) четыре вектора магнитного момента помещаются в три переменные типа `float4` (рис. 3). Зафиксировав 48 байт на 4 атома, определим размер grain-куба равным  $2 \times 2 \times 2$  kern-ячейкам, что в сумме дает число кратное 128 байт — размеру одной строки в организации памяти. Одна kern-ячейка в grain-кубе обрабатывается одним CUDA-тредом. Для достижения выравненного доступа к памяти (coaleasing) размер CUDA-блока следует выбрать максимально большим. В программной реализации это соответствует 512 или 1024 CUDA-тредам в одном CUDA-блоке. Таким образом, алгоритмическая структура укрупняется, и из grain-кубов выстраивается гаре-кластер размером  $4 \times 4 \times 4$  или  $4 \times 4 \times 8$  grain-кубов. Количество kern-ячеек в гаре-кластере ограничивается сверху количеством CUDA-нитей, которые возможно

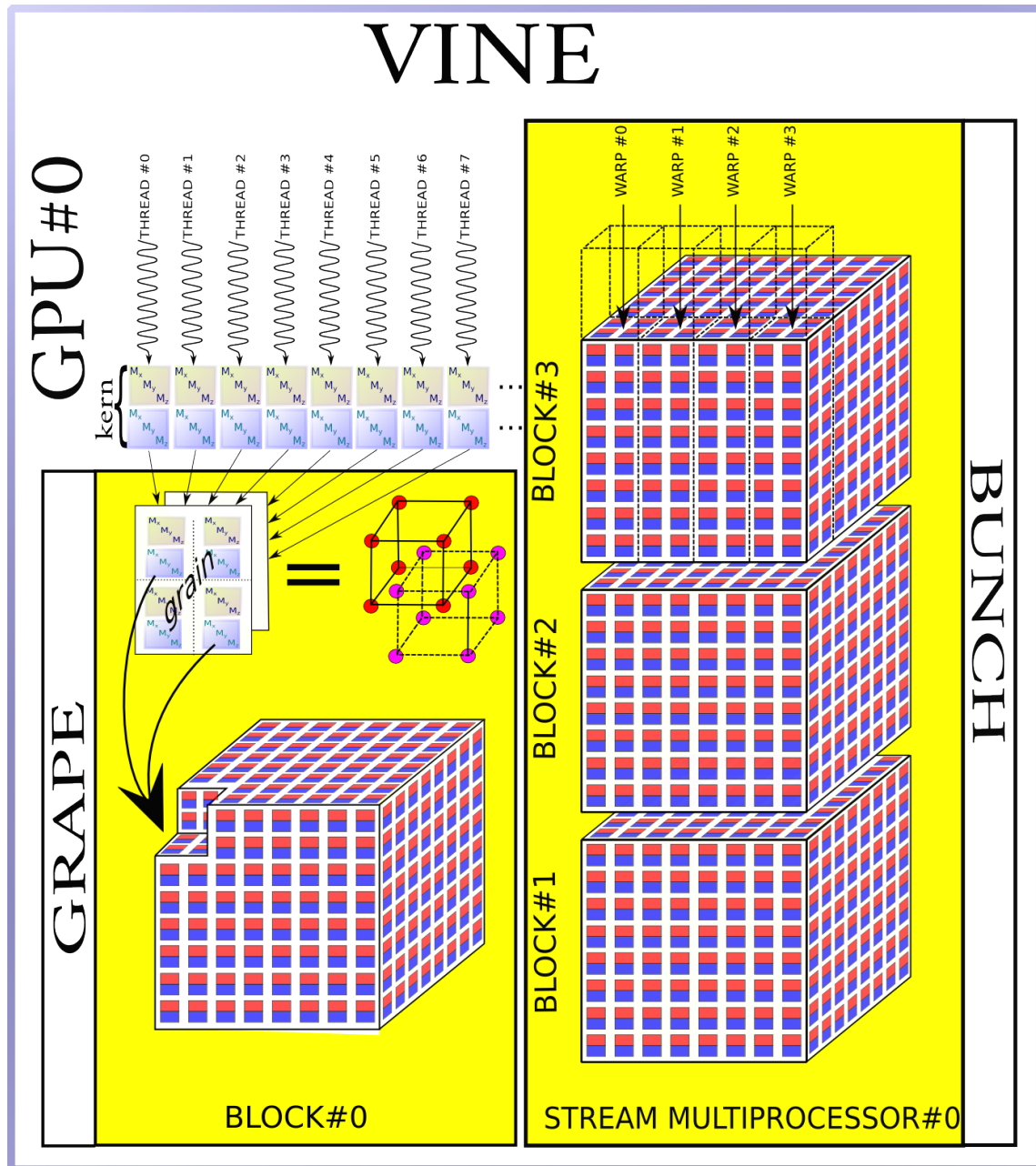


Рис. 2: Графическое представление структуры хранения данных и её взаимосвязь с программной моделью CUDA. CUDA-объекты снабжены спецсимволами '#' в целях разделения от основных алгоритмических понятий.

запустить в одном CUDA-блоке. Все grain-кубы хранятся в виде массива и обращение к каждому элементу этого массива происходит через индексы CUDA-нитей и CUDA-блоков. Соответствующие одному грапе-кластеру данные хранятся в глобальной памяти графического устройства (GPU). CUDA-нить загружает по одной kern-ячейке в регистры на основании своего собственного CUDA-индекса. Загрузка происходит через систему кэшей (рис. 3) по запросам. На один запрос происходит загрузка 128 байтового слова или одного алгоритмического

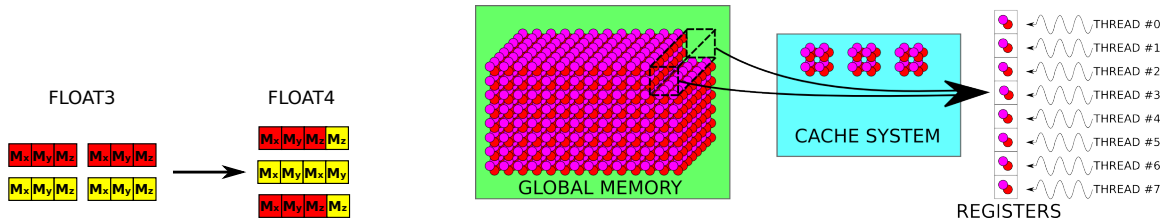


Рис. 3: Описание системы хранения граве-структур и загрузки kern-ячеек.

gain-подкуба. Помимо этого для пересчета обменного взаимодействия согласно формуле (2) каждому атому необходимо получить информацию о состоянии магнитных моментов соседних атомов. Поскольку обмен между тreads внутри CUDA-блока происходит при помощи разделяемой памяти, данные дополнительно копируются из регистров в разделяемую память. Обмен между отдельными граве-структурами происходит за счет дополнительных интерфейсных структур, описание которых проводится в последующей главе. Один граве-кластер обрабатывается одним CUDA-блоком на скалярном мультипроцессоре (SM) графического процессора. Граве-структуры, исполняемые на одном выделенном мультипроцессоре, объединяются в bunch-поток. Организация bunch-потоков осуществляется на уровне планировщика задач на одном мультипроцессоре, и их запускаемое количество на одной графической плате (GPU) определяется количеством скалярных мультипроцессоров (SM). Bunch-потоки объединяются в vine-структуры (рис. 2).

#### 4.2. Инициализация и задание физической области

Инициализация области моделирования проводится пользователем перед этапом компиляции программы. В соответствии с этим описанием каждый атом системы индексируется своим номером вместо того, чтобы хранить все физические параметры для отдельного атома. Это существенно сокращает требуемый объем памяти и позволяет использовать константную память GPU-устройства для повышения быстродействия.

Каждому номеру в сводной таблице сопоставляется набор физических параметров таких, как константы и направления осей анизотропии, параметр затухания и пр. Атом индексированный нулевым индексом по умолчанию считается отсутствующим в кристаллической решетке, и в рассмотрение не принимается. Это отвечает образованию дефектов и пустот в образце. Коэффициенты обменного взаимодействия хранятся отдельно в симметричной треугольной матрице. Значения коэффициентов обменного взаимодействия определяются на основании индексов первого атома (номер строки матрицы) и второго атома (номер столбца матрицы).

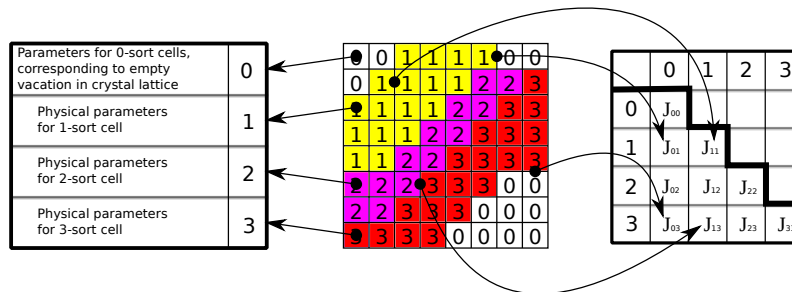


Рис. 4: Инициализация области моделирования. Каждый атом индексируется своим номером, с помощью которого по сводной таблице можно отыскать информацию о его физических параметрах. Коэффициенты для обменного взаимодействия хранятся отдельно в треугольной матрице.



### 4.3. Граф зависимостей и влияния

The figure consists of two side-by-side computational graphs. The left graph is labeled 'GRAPE' and the right graph is labeled 'GRAPE'. Both graphs show a sequence of operations from stage 1 to stage 4. The left graph has a yellow shaded region on the left side, while the right graph has a red shaded region on the left side. The graphs illustrate the flow of data and operations between different stages and components.

В целях удобства визуализации граф зависимости-влияния расщеплен на два подграфа (рис. 5). Слева и справа от подграфов обозначены необходимые для каждой стадии данные, которые предлагается рассматривать как подписи к ребрам на текущем уровне вычислений.

На правом подграфе показан порядок вычисления компонент  $\mathbf{K}_i$  на каждой стадии численной схемы. Под вершинами подразумевается пересчет  $\mathbf{K}_i$ , а под ребрами — данные, необходимые для проведения вычислений. Этими данными являются величины эффективного магнитного момента текущей стадий и компоненты вектора магнитного момента с начальной стадии, которые обозначены справа от подграфа. Компоненты вектора магнитного момента

с начальной стадии также необходимы для вычисления эффективного магнитного поля на каждом подшаге численной схемы.

В предположении блочной оптимизации данные и операции, принадлежащие желтому прямоугольнику, обрабатываются внутри одного CUDA-блока. В введенных алгоритмических терминах этот блок соответствует данным и операциям в одном ггаре-кластере. Красным цветом выделена та часть графа зависимостей, которая необходима для вычисления обменного взаимодействия на краю блока. Находящиеся в красной области операции и данные уже принадлежат соседней ггаре-структуре. Доступ к данным в красной области для проведения вычислений на краю желтого блока требуют создания дополнительных структур данных, речь о которых пойдет в следующем разделе. Заметим, что без учета части графа, находящегося в красной области, невозможно провести все четыре этапа численной схемы на правой стороне ггаре-структуры, отмеченной желтым цветом.

#### 4.4. Интерфейс обмена данных между алгоритмическими структурами

Разбиение магнитного образца на алгоритмические структуры порождает проблему согласования ггаре-кластеров между собой на этапе вычисления эффективного магнитного поля. Для вычисления одного шага численной схемы (6) — (7) внутри одного ггаре-кластера необходимо получить дополнительную информацию с соседних ггаре-кластеров.

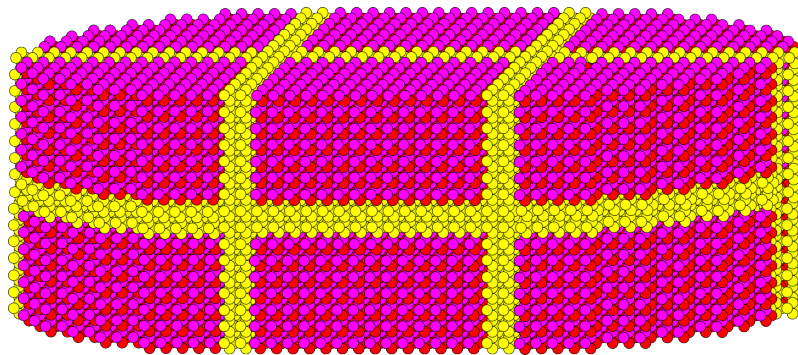


Рис. 6: Иллюстрация магнитного образца цилиндрической формы с объемноцентрированной решеткой. Красный и голубой цвета соответствуют двум сортам атомов разных подрешеток. Образец делится на ггаре-кластера. Желтым цветом обозначены атомы, лежащие в плоскостях смежных к соседним ггаре-кластерам.

На графе зависимости-влияния (рис. 5) в выделенную красным цветом область попадают алгоритмические kern-ячейки необходимые для проведения вычислений в выделенном желтым цветом ггаре-кластере. С геометрической точки зрения это соответствует тем атомам (выделены желтым цветом), которые принадлежат смежным к ггаре-кластерам плоскостям (рис. 6). На рисунке 6 в качестве иллюстрации представлен образец цилиндрической формы для объемно-центрированной решетки.

Атомы, принадлежащие пограничным трем ортогональным плоскостям, хранятся в отдельных структурах — алгоритмических интерфейсах — в глобальной памяти графического устройства. Размер интерфейсной плоскости определяется кратным размеру боковой поверхности ггаре-кластера с добавкой дополнительных gain-кубов по краям вдоль каждого направления, и определяется как  $8n \times 8m + 4$  или  $8n \times 16m + 4$  kern-ячеек, где  $m$  и  $n$  — целые числа. Толщина интерфейсной плоскости фиксирована и равна двум gain-кубам, каждый из которых принадлежит смежному ггаре-кластеру. Перед каждым шагом численной схемы вызывается дополнительное CUDA-ядро для обработки интерфейсных структур (рис. 7). CUDA-тред обрабатывает kern-ячейки с одинаковыми координатами на интерфейсной плоскости и

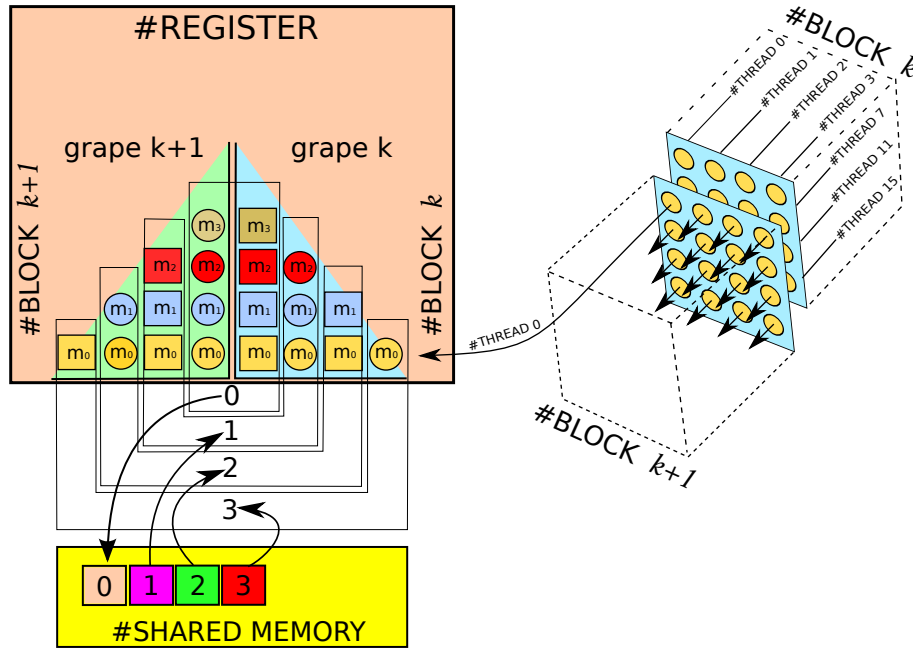


Рис. 7: Описание алгоритма согласования грейп-структур между собой. На иллюстрации справа показан вызов CUDA-ядра с количеством CUDA-нитей кратному размеру интерфейсной плоскости. На иллюстрации слева показан одномерный пример процесса расчета одним CUDA-тредом интерфейсных атомов. Рассматривается объемно-центрированная кристаллическая решетка, где атомы первой подрешетки обозначены квадратом, атомы второй подрешетки — кругом.

загружает данные из глобальной памяти в регистры на основании своего CUDA-индекса. Отдельная интерфейсная плоскость обчисляется на отдельном потоковом мультипроцессоре графического устройства. Конечным результатом выполнения CUDA-ядра является получение всех состояний магнитного момента  $\mathbf{m}_0, \mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2, \mathbf{m}_3$  граничных в грейп-кластере атомов (на рисунке 7 выделено прямоугольником с цифрой '0'). Данные о kern-ячейках CUDA-нить загружает из глобальной памяти в регистры для проведения расчета. На основании загруженных данных происходит вычисление трех стадий численной схемы. На всех промежуточных стадиях численной схемы данные копируются из регистров в разделяемую память для вычисления эффективного магнитного поля специальным образом, показанном на рисунке ???. Синхронизация CUDA-нитей происходит после окончания промежуточной стадий численной схемы. Синхронизация по CUDA-блокам происходит после согласования всех смежных областей между собой. Подготовленные состояния граничных магнитных моментов  $\mathbf{m}_0, \mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2, \mathbf{m}_3$  затем загружаются обратно из регистров в глобальную память. После синхронизации происходит вызов основного вычислительного ядра.

## 5. Результаты и обсуждения

### 5.1. Теоретические оценки

Проведем оценки теоретической пиковой производительности вычислений эволюции намагниченности образца в метрике магнитных моментов, обрабатываемых вычислительным устройством в единицу времени (секунды). Для этих целей необходимо выбрать вычислительную систему и объект вычислений. В качестве объекта рассматривается однородная по всем направлениям объемно-центрированная решетка. Примером вычислительной системы может

служить графическая видеокарта Nvidia GeForce Titan X.

Compute-bound или Memory-bound ?

Атом содержит в себе информацию о трех компонентах вектора магнитного момента. Каждая компонента требует для хранения 4 байта в случае стандартного типа `float`. В алгоритмической ячейке для объемно-центрированного случая (рис. 1) содержится 2 атома. Таким образом, размер одной алгоритмической kern-ячейки составляет 24 байта.

Согласно предоставляемой компанией Nvidia спецификации (Specifications) частота модуля памяти GDDR5 на графическом ускорителе порядка 6 GHz при учете 8 байт на канал с суммарным числом каналов равным 6. Перемножая обозначенные числа, получаем пропускную способность GDDR5 в 288 (336.5) GB/s на одном процессоре видеокарты Nvidia GeForce Titan X при двухсторонней передаче данных. Из этих рассуждений можно определить пиковую производительность вычислений:  $\frac{1}{24} = 7 \cdot 10^9$  атомов в секунду.

## 5.2. Полученная производительность

Тестовые вычисления GPU-кода проводились с учетом обменного взаимодействия внутри ггаре-структур и внешнего постоянного магнитного поля. Магнитное поле демагнетизации, влияние анизотропии, термодинамические флуктуации не рассматривались.

В численную модель вошла однородная по всем направлениям объемноцентрированная кристаллическая решетка прямоугольной формы. Размер области и количество атомов варьировалось дискретно путем добавления ггаре-структур. В начальный момент времени магнитные моменты выстраивались в плоскости перпендикулярной внешнему магнитному полю. Критерием верификации вычислений является установление равновесного состояния, при котором все магнитные моменты выстроены вдоль направления поля.

## 5.3. Производительность кода Vampire

Для проведения сравнения производительности берется сторонний открытый код `vampire`, предназначенный для численного моделирования «атом-в-атом» на штатном CPU-устройстве. В модулях данного программного комплекса внедрена специальная функция для измерения темпа вычислений. Тело функции содержит подсчет внешнего поля, обменного взаимодействия, термодинамические флуктуации и влияние анизотропии. Последние два вклада в эффективное магнитное поле были отключены при тестировании.

Код `vampire` использует схему Эйлера 2-ого порядка точности, что позволяет поднять темп вычислений в 2 раза. С другой стороны низкий порядок схемы снижает точность расчетов при проведении численного моделирования на больших временных шагах.

Тестирование (рис. 8) производительности проводилось на разных вычислительных системах без MPI-интерфейса в однопоточном режиме и с MPI-интерфейсом на многоядерном процессоре. Наиболее высокий темп вычислений код `vampire` показал на четырехядерном CPU-процессоре с архитектурой Haswell и поддержкой гипертрединг (hyper-threading) благодаря высокой частоте (4.4 GHz в Turbo Boost режиме) и подсистеме кеш-памяти. Измерения показали производительность в 0.12 миллиардов элементарных ячеек в секунду, что составляет менее 7% (рис. 9) от GPU-реализации.

## 6. Further goals and Propose

При грубой оценке отношения количества загрузок и сохранения одного вектора магнитного момента или магнитного поля к количеству загружаемых или сохраняемых данных получаем отношение 16:12. Это соответствует тому, что набор решаемых проблем относится к так называемому классу `compute-bound` задач. Но для точного ответа необходимо построить наглядную вычислительную модель, что является целью последующих исследований. Помимо

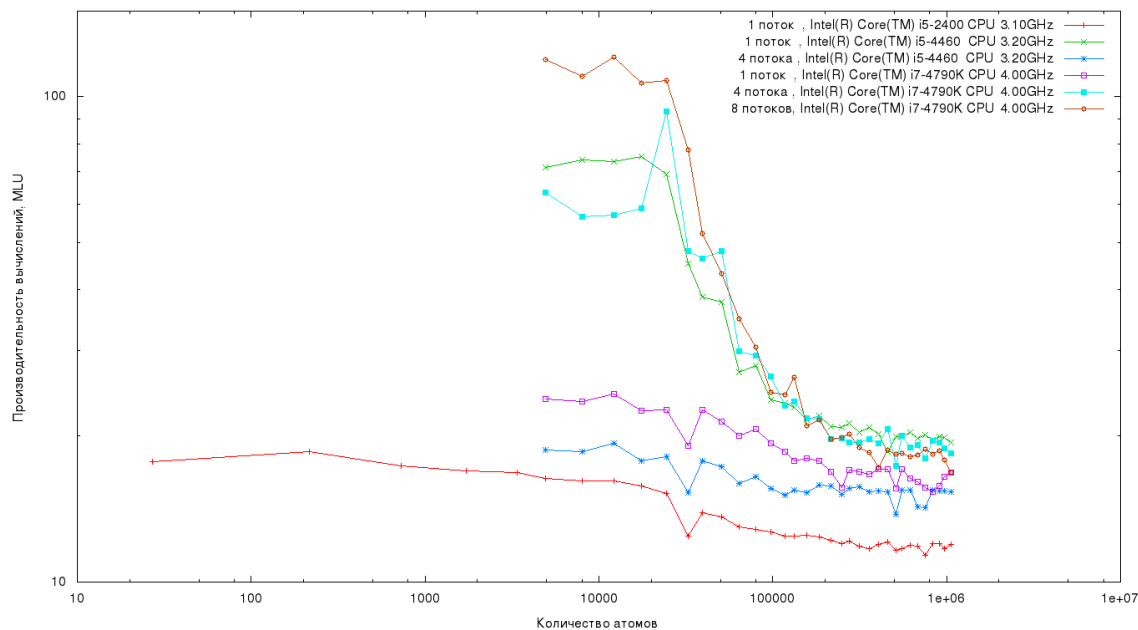


Рис. 8: Измерение производительности кода Vampire, запущенного на разных ЭВМ. Производительность измеряется как количество обработанных миллионов магнитных моментов в секунду.

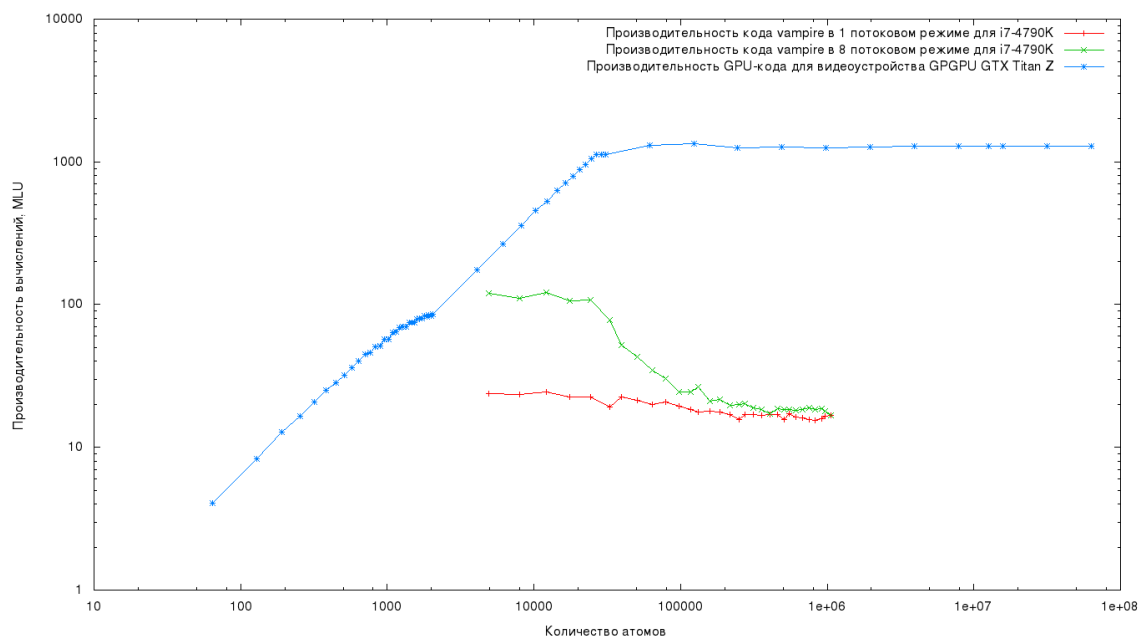


Рис. 9: Измерение производительности разрабатываемого GPU-кода на архитектуре Kepler и кода Vampire, запущенного на одном и восьми потоках. Производительность измеряется как количество обработанных миллионов магнитных моментов в секунду.

прочего в последующий шаг входит проведение стандартных физических задач для верифи-

кации кода и разработки диагностики результатов.

## 7. Acknowledgement

This study was supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (agreement 14.576.21.0023, project identifier RFMEFI57614X0023).

## Литература

- [1] A. Vansteenkiste, J. Leliaert, M. Dvornik, M. Helsen, F. Garcia-Sanchez, B. VanWaeyenberge, The design and verification of mumax3, AIP Advances 4 (2014) 107133.
- [2] 1, 2, 4 5 (3) 6.
- [3] K.-J. Kim, R. Hiramatsu, T. Koyama, K. Ueda, Y. Yoshimura, D. Chiba, K. Kobayashi, Y. Nakatani, S. Fukami, M. Yamanouchi, H. Ohno, H. Kohno, G. Tatara, T. Ono, Two-barrier stability that allows low-power operation in current-induced domain-wall motion, Nature Comm. 4.
- [4] J.Akerman, Applied physics: Toward a universal memory, Science 308 (2005) 508–510.
- [5] A. Zvezdin, K. Zvezdin, A. Chvalskiy, The generalized landau–lifshitz equation and spin transfer processes in magnetic nanostructures, UFN 178 (4) (2008) 436–442, in russian.
- [6] A. Hubert, Theory of domain walls in ordered media, Mir, 1977, in russian.
- [7] A. LaBonte, Two dimensional bloch type domain walls in ferromagnetic films, J.Appl.Phys. 40 (1969) 2450–2458.
- [8] K. Kosavisutte, N. Hayashi, Acceleration of micromagnetic calculation based on labonte’s iteration, Jpn. J. Appl. Phys.. 34 (1995) 5599–5605.
- [9] N. Hayashi, K. Kosavisutte, Y. Nakatani, Micromagnetic calculation of domain structure in thin magnetic film based on improved labonte method, IEEE Trans. On Magn. 33 (1997) 4164–4166.
- [10] A. Zvezdin, K. Zvezdin, A. Chvalskiy, The generalized landau–lifshitz equation and spin transfer processes in magnetic nanostructures, Fisica tverdogo tela [Physics of the Solid State] 43 (11) (2001) 2030–2034, in russian.
- [11] Y. Nakatani, Y. Uesake, N. Hayashi, Direct solution of the landau–lifshitz–gilbert equation for micromagnetics., Japanese Journal of Applied Physics 28 (12) (1989) 2485–2507.
- [12] R. Giles, P. Kotiuga, F. Humphrey, Three-dimensional micromagnetic simulation on the connection machine, J.Appl.Phys. 67 (1990) 5821–5829.
- [13] C. Shir, Computation of the micromagnetic dynamics in domain wall, J.Appl.Phys. 49 (1978) 3413–3421.
- [14] N. Schryer, L. Walker, The motion of 180 domain walls, J.Appl.Phys. 45 (1974) 5406–5421.
- [15] S. Yuan, H.N.Bertram, Domain wall dynamic instability, J.Appl.Phys. 69 (1991) 5974–5876.
- [16] B. Filippov, L. Korsunin, Nonlinear dynamics of vortex domain walls in magnetic films with in-plane anisotropy, Fisica tverdogo tela [Physics of the Solid State] 38 (1996) 2442–2450, in russian.

- [17] L. Antonov, S. Osipov, V. Ternovskiy, M. Hapaev, On singular solution of micromagnetic problem, *Fizika Metallov I Metallovedenie* 64 (2) (1987) 254–259, in russian.
- [18] S. Osipov, M. Khapaev, The dynamics of a two-dimensional domain wall in a ferromagnetic film with uniaxial anisotropy., *Journal of Experimental and Theoretical Physics* 90 (4(10)) (1990) 1354–1363, in russian.
- [19] N. Usov, S. Peschany, Flower state micromagnetic structure in fine cylindrical particles, *JMMM* 130 (1994) 257–287.
- [20] L. Savchenko, M. Chetkin, V. Bondarenko, Three-dimentional dynamics of solitary vertical bloch lines in domain walls on garnets, *JMMM* 183 (1998) 313.
- [21] O. Chubykalo-Fesenko, U. Nowak, R. Chantrell, D. Garanin, Dynamic approach for micromagnetics close to the curie temperature, *Phys. Rev. B* 74 (2006) 094436.
- [22] U. Atxitia, O. Chubykalo-Fesenko, D. H. N. Kazantseva, U. Nowak, R. Chantrell, Micromagnetic modeling of laser-induced magnetization dynamics using the landau-lifshitz-bloch equation, *APPLIED PHYSICS LETTERS* 91 (2007) 232507.
- [23] R. Evans, D. Hinzke, U. Atxitia, U. Nowak, R. Chantrell, O. Chubykalo-Fesenko, Stochastic form of the landau-lifshitz-bloch equation, *PHYSICAL REVIEW B* 85 (2012) 014433.
- [24] C. Vogler, C. Abert, F. Bruckner, D. Suess, Landau-lifshitz-bloch equation for exchange coupled grains, *Phys. Rev. B* 90 (2014) 214431.
- [25] A. Ivanov, Kinetic modeling of magnetic's dynamic, *Matem. Mod.* 19 (10) (2007) 89–104, in russian.
- [26] D. Bauer, P. M. S. L. S. Blugel, Thermally activated magnetization reversal in monatomic magnetic chains on surfaces studied by classical atomistic spin-dynamics simulations, *J. Phys.: Condens. Matter* 23 (2011) 394204.
- [27] E. Zipunova, A. Ivanov, Selection of an optimal numerical scheme for simulation system of the landau–lifshitz equations considering temperature fluctuations, *Matem. Mod.* 26 (2) (2014) 33–49, in russian.