



# **Paralelização do “Cálculo de Estruturas de Bandas de Semicondutores” usando o High Performance Fortran**

**Aluno** : Rodrigo Daniel Malara  
**Orientador** : Guilherme Matos Sipahi

# O Problema

- Determinar
  - Potencial Eletrônico
  - Espectros de Fotoluminescência
- Alto custo computacional
  - Diagonalização de matrizes densas (LAPACK)
  - Convolução e auto-convolução dos espectros de luminescência
- Horas para executar um problema simples



# Plataforma e Implementações

- Cluster Intel: 6 nós (2 processadores cada) rodando o Linux Fedora Core 1 (kernel 2.4)
- Cluster Development Kit 5.0 + bibliotecas PGroup
- Message Passing Interface (MPICH)
- Intel Fortran Compiler 8.0 e Math Kernel Libraries 7.0 (LAPACK e BLAS incluídos)

- Implementações
  - Seqüencial
  - Concorrente: MPI (MPICH)
  - Concorrente: HPF (este trabalho)



# Expectativas

- Facilidade de implementação/manutenção:
  - HPF usa paralelismo por dados
  - HPF paraleliza código utilizando diretivas
  - Mínimo esforço para paralelização
- Baixa Performance:
  - Paralelização feita pelo compilador
- Portabilidade entre diversas arquiteturas



# Resultados (1)

- Difícil implementação:
  - Várias tentativas até o compilador reconhecer um trecho de código paralelizável
  - Mensagens de erro não ajudam no processo
  - Pouca Documentação:
    - Nenhum grupo de usuários, fórum ou suporte dos desenvolvedores do compilador
    - Documentação não aborda qualificadores de funções (extrinsics)

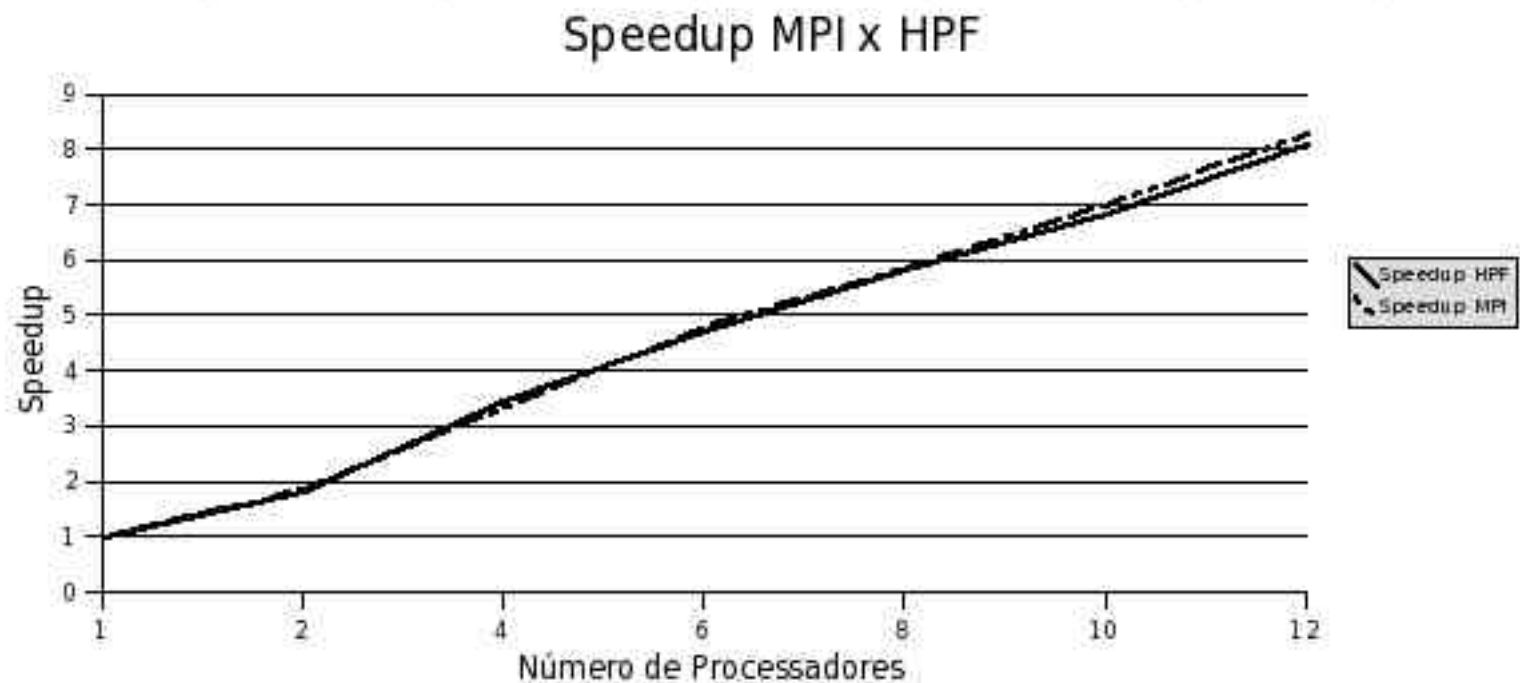


# Resultados (2)

- Performance comparável a da variante MPI
  - Espectros de fotoluminescência: speedup HPF excedeu speedup MPI
- Nos trechos que executam concorrentemente, a eficiência foi próxima a 95%.
  - $$\text{Eficiência} = \frac{\text{Speedup}}{\text{QtyProcessadores}}$$



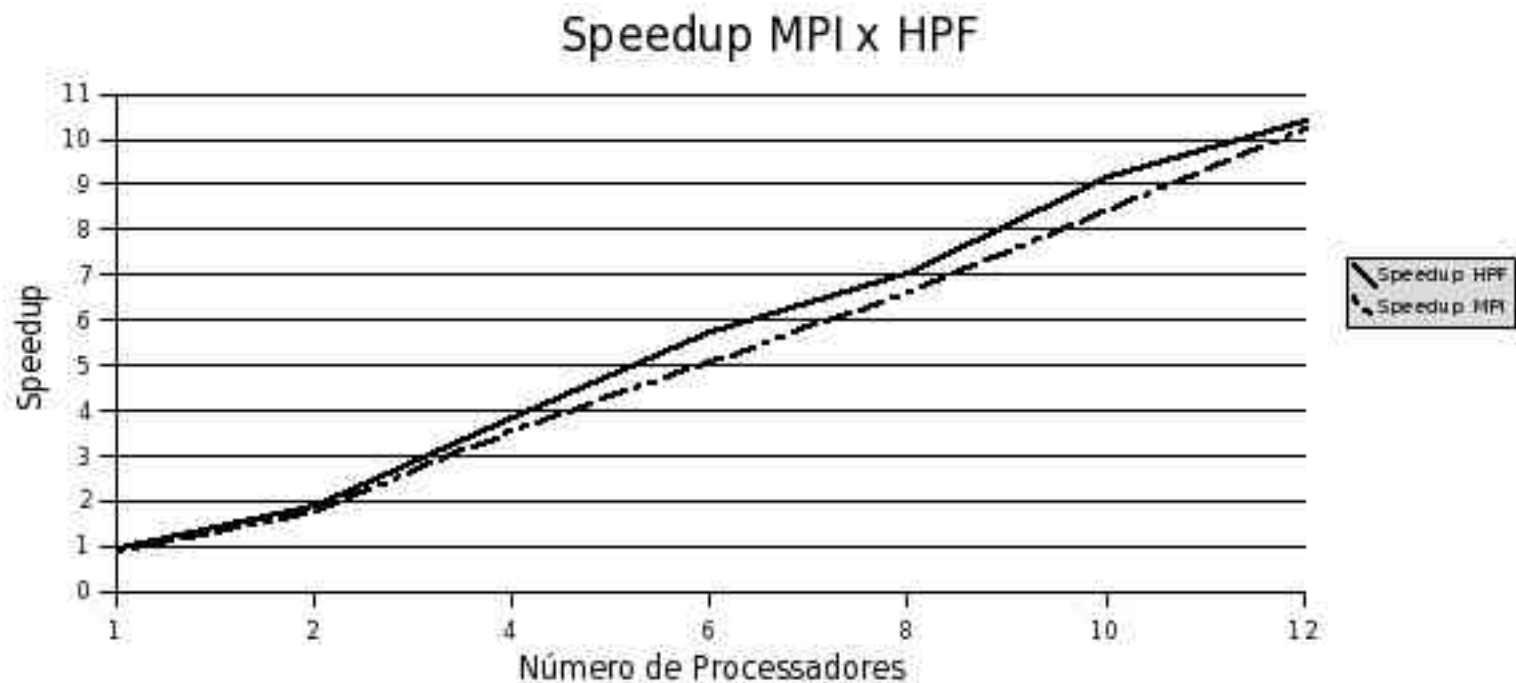
# Performance Diagonalização



- Tempo exec. seqüencial: **~206 min.**
- Tempo exec. 12P HPF: **~25 min. 30s.**
- Tempo exec. 12P MPI: **~24 min. 50s.**



# Performance Luminescência



- Tempo exec. seqüencial: ~**173 min.**
- Tempo exec. 12P HPF: ~**16 min. 30 s.**
- Tempo exec. 12P MPI: ~**16 min. 55 s.**





# Conclusões

- O HPF é uma boa ferramenta para a paralelização de programas que podem utilizar o “Paralelismo por Dados”
- Difícil aprendizado, mas após adquirir alguma experiência, a paralelização é conseguida facilmente.

