



# Gases de Rede 2D: uma abordagem com computação em paralelo

Aluno: Luis Carlos Fagundes Latoski Orientador: Heitor C. M. Fernandes

## Introdução

Com o objetivo de otimizar simulações computacionais de modelos estatísticos para sistemas físicos, neste trabalho abordamos a paralelização de algoritmos que utilizam o método de Monte Carlo. A ideia básica por trás deste método é simular as flutuações térmicas aleatórias do sistema de estado para estado durante um experimento [1]. Certamente, o modelo de Ising, tem sido o de maior interesse pela comunidade científica em toda a mecânica estatística, isto o torna um modelo bem completo, com suas soluções já conhecidas [2]. Por este motivo, nossa primeira paralelização foi aplicada a este.

## Modelo de Ising

O Modelo de Ising é um modelo estatístico para um ímã real. A premissa por trás deste, e da maioria dos modelos magnéticos, é que o magnetismo de um material é formado pela combinação dos momentos de dipolo magnéticos de muitos spins atômicos dentro do material.

O modelo, postula uma rede com um spin por sítio. No modelo de Ising, estes spins assumem a forma mais simples possível, -1 (spin down) ou +1 (spin up). Supondo apenas interações entre primeiros vizinhos, todas estas com mesma intensidade  $J$ , e também desconsiderando o campo magnético externo, o Hamiltoniano do sistema toma a forma:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j \quad (1)$$

onde  $\langle ij \rangle$  significa que para cada sítio  $i$  com spin  $s_i$ , se faz uma soma sobre os spins  $s_j$  de seus  $j$  vizinhos.

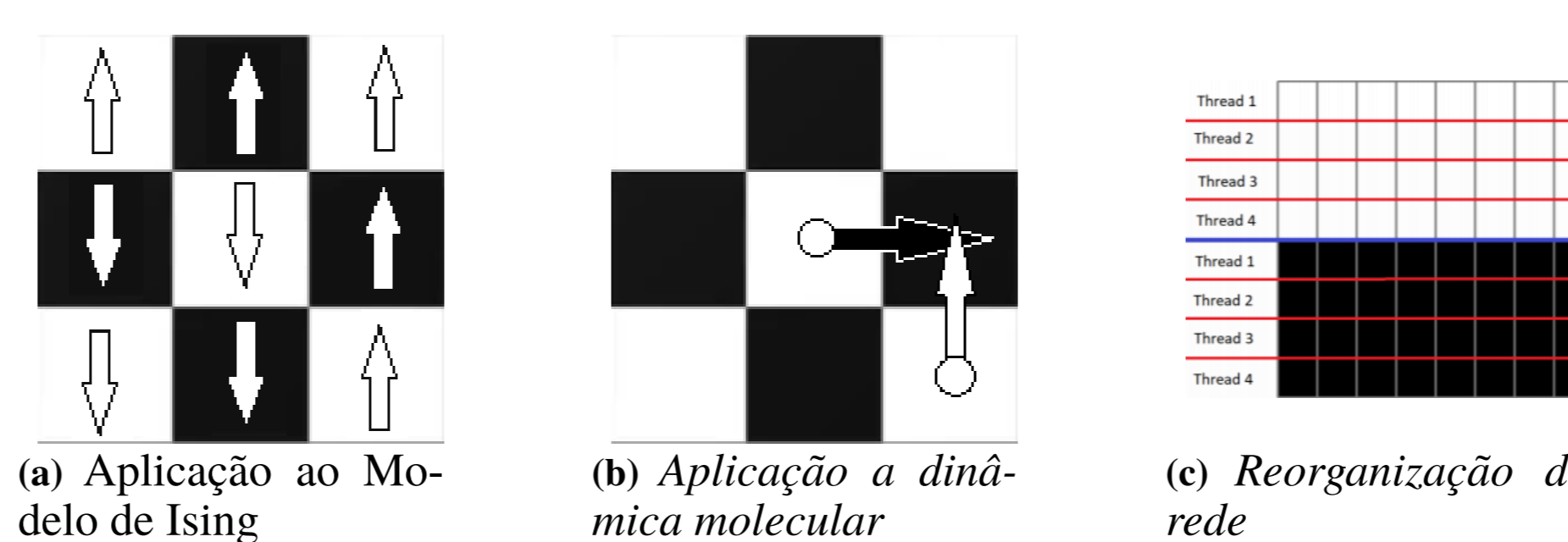
A evolução do sistema foi feita a partir do Algoritmo de Metropolis, onde calcula-se apenas a variação de energia devido à mudança de estado de um sítio, escolhido aleatoriamente, e através deste valor a transição pode ou não ser aceita, conforme a condição abaixo.

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} \exp\left(\frac{-\Delta E}{k_B T}\right), & \text{se } \Delta E > 0 \\ 1, & \text{se } \Delta E < 0 \end{cases} \quad (2)$$

Onde  $A(\mu \rightarrow \nu)$  é a probabilidade de transição do estado  $\mu$  com energia  $E_\mu$  para um outro estado  $\nu$  com energia  $E_\nu$ , e  $T$  a temperatura sob a qual o sistema está submetido. Se a diferença de energia ( $\Delta E = E_\nu - E_\mu$ ) for positivo, gera-se um número aleatório que deve ser menor do que  $\exp\left(\frac{-\Delta E}{k_B T}\right)$  para a transição ser aceita.

## Estratégia de Paralelização

A parte mais complexa da paralelização é o desenvolvimento de uma estratégia de evolução onde variáveis compartilhadas entre os *threads* não sejam atualizadas simultaneamente (alterando os resultados esperados). Através de estudos da ferramenta *multithreading* OpenMP [3], dos algoritmos seriais (não paralelizados) escritos pelo aluno, e de pesquisas prévias na área [4, 5], aplicamos a estratégia de paralelização chamada *checkerboard* (ver figura 1), que consiste basicamente em criar uma estrutura onde vizinhos não fazem parte do mesmo conjunto (similar a um tabuleiro de xadrez onde casas pretas nunca são vizinhas, igualmente para as brancas).



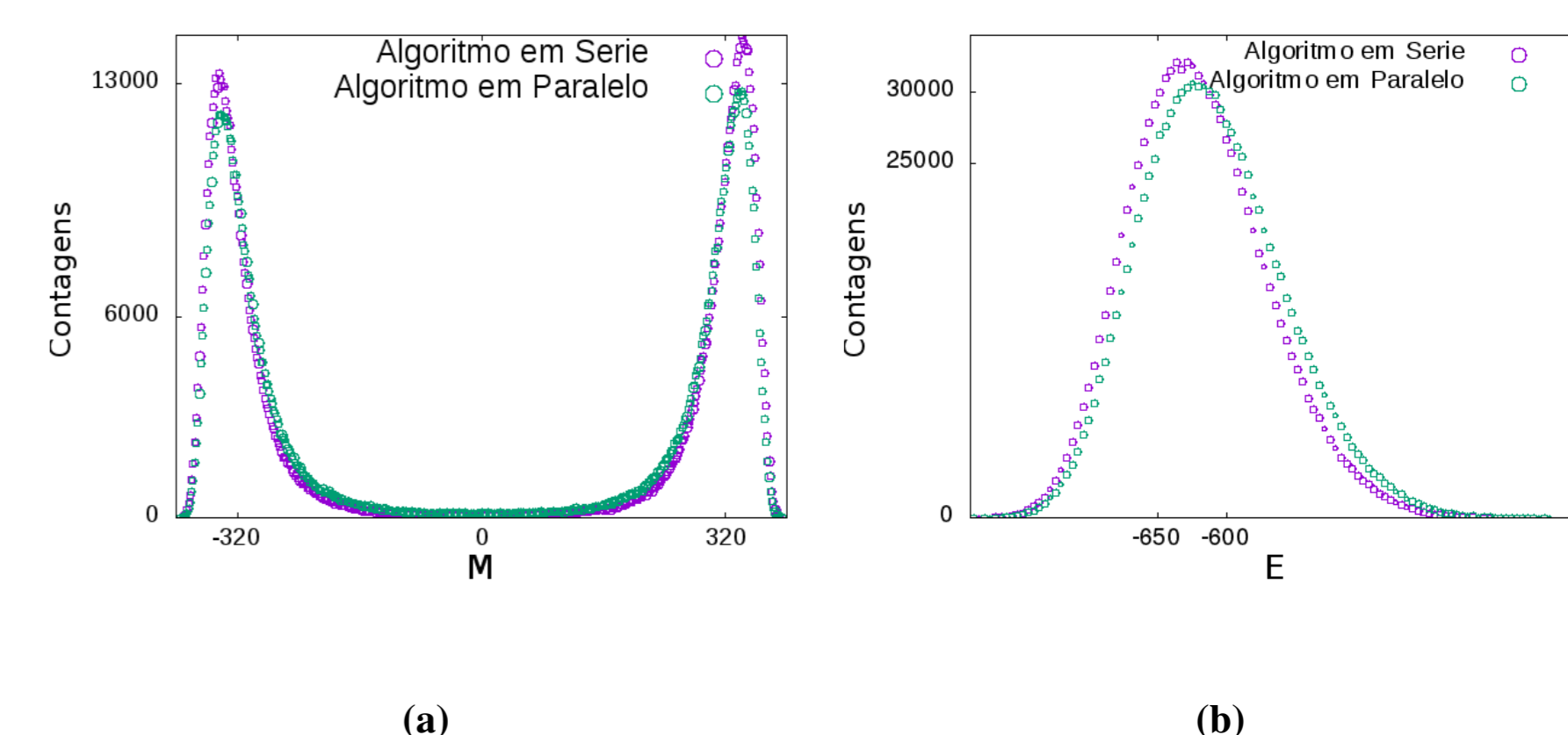
**Figura 1:** A aplicação do método de checkerboard para paralelização da evolução. Enquanto em (a), a paralelização da evolução de células de mesma cor é possível, já que a dinâmica não altera o estado dos sítios vizinhos, no caso (b) como o movimento de uma partícula deve alterar o estado de seus vizinhos (já que esta se desloca) podemos ter competição entre threads na atualização de um sítio. A imagem (c) mostra a reorganização final das células, impedindo dois threads de atualizarem o mesmo sítio simultaneamente.

## Resultados

Utilizando a estratégia de checkerboard para a paralelização do algoritmo de Metropolis aplicado ao Modelo de Ising, como podemos ver na tabela 1, obtivemos um aumento consideravelmente grande no desempenho computacional das simulações, principalmente quando comparamos a velocidade de processamento do algoritmo paralelizado em 8 threads com o algoritmo em série. Neste caso temos uma redução de aproximadamente 5x no tempo de simulação.

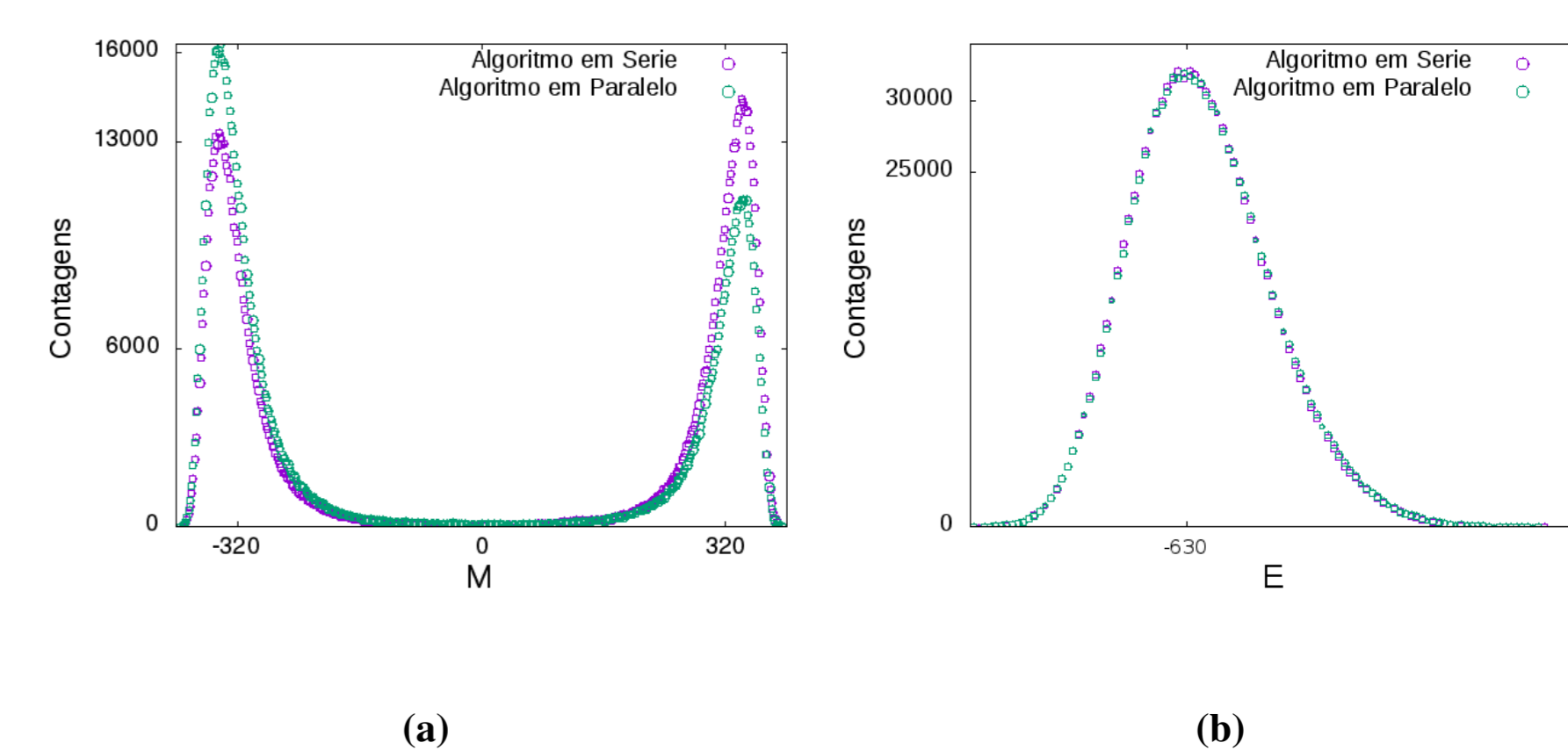
Lado	Tempo para completar $2 \cdot 10^5$ passos (s)				
	Série	1 thread	2 thread	4 thread	8 thread
20	$5,5 \pm 0,5$	$6,2 \pm 0,5$	$4,0 \pm 0,5$	$2,7 \pm 0,5$	$2,2 \pm 0,5$
40	$22 \pm 1$	$24 \pm 1$	$14 \pm 1$	$8 \pm 1$	$5 \pm 1$
100	$144 \pm 5$	$162 \pm 5$	$92 \pm 5$	$51 \pm 5$	$29 \pm 5$
250	$1032 \pm 10$	$1195 \pm 10$	$626 \pm 10$	$330 \pm 10$	$218 \pm 10$
500	$4447 \pm 50$	$5238 \pm 50$	$2878 \pm 50$	$1457 \pm 50$	$900 \pm 50$

**Tabela 1:** Os resultados foram obtidos simulando 200 000 passos em cada uma das redes. O aumento do tempo de simulação entre o algoritmo em série e paralelo com 1 thread é esperada devido à necessidade da criação da região em paralelo que não é utilizada.



**Figura 2:** As figuras mostram histogramas para magnetização ( $M$ ) e energia total ( $E$ ) gerados com os resultados das simulações em paralelo usando 8 threads comparadas com o algoritmo em série para rede de lado 20. Foram utilizados 100 000 passos até o equilíbrio e efetuadas 1 000 000 medidas por simulação à temperatura 2.2K tomando  $k_B = 1$ .

Utilizando então o número de threads que otimiza o tempo, foram realizadas primeiramente as medidas referentes às figuras 2 (a) e (b). Devido ao deslocamento da Gaussiana para à direita em (b), foi definida outra estratégia de paralelização (Figura 1(c)), onde threads não possam atualizar o mesmo sítio simultaneamente.



**Figura 3:** Simulações análogas às anteriores, porém, utilizando a nova estratégia de paralelização. Em (b) verifica-se que a nova estratégia se fez suficiente para reproduzir os resultados esperados para a simulação.

## Conclusões e Perspectivas

Através da análise dos dados dispostos na figura 3, vemos que, para o caso simples da rede de lado 20, o algoritmo paralelizado se mostra tão eficiente em tempo de execução quanto em precisão de dados. Simulando sistemas maiores e estudando os tempos de correlações entre as medidas destes, confirmaremos a eficiência estatística do algoritmo desenvolvido. Então, as técnicas desenvolvidas serão aplicadas ao estudo da difusão em gases de rede.

## Referências

- [1] M. Newman and G. Barkema, *Monte carlo methods in statistical physics chapter 1-4*. Oxford University Press: New York, USA, 1999.
- [2] W. Janke, "Statistical analysis of simulations: Data correlations and error estimation," *Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms*, vol. 10, pp. 423-445, 2002.
- [3] T. Mattson and L. Meadows, "A 'hands-on' introduction to openmp," *Intel Corporation*, 2014.
- [4] D. W. Heermann and A. N. Burkitt, "Parallelization of the ising model and its performance evaluation," *Parallel Computing*, vol. 13, no. 3, pp. 345-357, 1990.
- [5] M. Weigel, "Simulating spin models on gpu," *Computer Physics Communications*, vol. 182, no. 9, pp. 1833-1836, 2011.