

# ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ЭЛЕКТРОН-АТОМНОГО РАССЕЯНИЯ В ЛАЗЕРНОМ ПОЛЕ

К. Н. Карелин, А. В. Флегель

Воронежский государственный университет

На примере задачи о рассеянии электрона на короткодействующем атомном потенциале в сильном лазерном поле рассматриваются параллельные методы численного расчета сечений многофотонных процессов на кластерных системах. Разработаны эффективные алгоритмы вычислений с использованием наиболее распространенных технологий параллельного программирования OpenMP и MPI.

## ВВЕДЕНИЕ

С быстрым развитием лазерной техники и появлением сверхинтенсивных лазерных источников с короткой длительностью импульса и частотой от инфракрасного до мягкого рентгеновского диапазона стало возможным обнаружение и изучение большого количества ранее неизвестных явлений, индуцированных лазерными полями. Теоретические исследования таких явлений обусловлены их важностью как для понимания фундаментальных законов взаимодействия электромагнитного излучения с веществом, так и для широкого практического использования. При этом даже в случае взаимодействия сильного лазерного поля с простейшими квантовыми объектами (атомами и отрицательными ионами) часто требуется проведение детального численного анализа с привлечением современных методов параллельного программирования на высокопроизводительных вычислительных системах. Это относится не только к численному решению нестационарного (четырёхмерного) уравнения Шредингера — безусловно, сложной расчетной задачи, но и к некоторым исследованиям, базирующимся на модельных, приближенных подходах.

Среди активно изучаемых в последние годы явлений взаимодействия интенсивных лазерных полей с атомами и отрицательными ионами следует отметить процессы надпороговой ионизации (НПИ) атомов, генерации высших гармоник (ГВГ) лазерной накачки, а также вынужденного тормозного поглощения (излучения) при электрон-атомном рассеянии (ЭАР). Одним из наиболее интересных нели-

нейных эффектов в перечисленных многофотонных процессах являются эффекты «плато» (то есть слабая зависимость сечений процессов от числа  $n$  поглощенных фотонов в широком интервале  $n$ ). Платообразные структуры в энергетическом спектре фотоэлектронов при НПИ и спектре генерируемого излучения при ГВГ активно исследуются уже более 10 лет (см., напр., обзор [1]), наличие плато в спектрах многофотонного тормозного поглощения при ЭАР было установлено в [2, 3]. Абсолютная величина  $n$ -фотонных сечений в области плато на несколько порядков меньше, чем в области малых  $n$ , поэтому для экспериментального наблюдения высокоэнергетических электронов и высших гармоник важное значение имеет поиск механизмов усиления сечений в области плато. Исследования в данном направлении предполагают проведение детального (численного) анализа зависимостей сечений от таких параметров как интенсивность лазерного поля, энергия электронов и т. д.

В настоящей работе развиваются методы параллельных вычислений для расчета сечений ЭАР в сильном лазерном поле и анализируются различные подходы в распараллеливании вычислений на многопроцессорном кластере: 1) с использованием технологии программирования OpenMP для систем с общей памятью [4, 5]; 2) с помощью функций библиотеки MPI (*Message Passing Interface*) [4]; 3) комбинированный MPI + OpenMP-подход.

## ФИЗИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Теория рассеяния электрона на короткодействующем потенциале  $U(\mathbf{r})$  (с радиусом действия  $r \sim r_c$ ), поддерживающем слабосвязанное состояние с орбитальным моментом  $l$  и

энергией  $E_0 = -\hbar^2 \kappa^2 / 2m$  ( $r_c \ll \kappa^{-1}$ ), в присутствии лазерного поля развита в работе [6] и состоит в обобщении теории эффективного радиуса [7] для упругого рассеяния электрона на потенциале  $U(\mathbf{r})$  на случай рассеяния во внешнем периодическом поле. При таком подходе электрон-атомное взаимодействие учитывается через длину рассеяния и эффективный радиус, а взаимодействие электрона с лазерным полем учитывается точно.

Волновая функция электрона с энергией  $E$  и асимптотическим импульсом  $\mathbf{p}$  в потенциале  $U(r)$  и световом поле с электрическим вектором  $\mathbf{F}(t) = -\mathbf{F} \cos(\omega t)$  выглядит как  $\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp(-i\epsilon t / \hbar) \Phi(\mathbf{r}, t)$ , где  $\epsilon = E + u_p$  — квазиэнергия,  $u_p = e^2 F^2 / (4m\omega^2)$  — средняя колебательная энергия электрона в поле, а периодическая по времени функция  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  есть решение уравнения Шредингера:

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \epsilon - U(r) - |e| (\mathbf{r} \cdot \mathbf{F}(t)) \right] \times \Phi(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (1)$$

Функция  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  имеет вид  $\Phi(\mathbf{r}, t) = \chi(\mathbf{r}, t) + \Phi^{(sc)}(\mathbf{r}, t)$ , где падающая волна  $\chi(\mathbf{r}, t)$  есть периодическая часть известной волновой функции  $\psi(\mathbf{r}, t)$  свободного электрона в поле:  $\psi(\mathbf{r}, t) = \exp(-i\epsilon t / \hbar) \chi(\mathbf{r}, t)$ , а асимптотика рассеянной волны  $\Phi^{(sc)}(\mathbf{r}, t)$  определяет амплитуду  $A_n(\mathbf{p}, \mathbf{p}_n)$  и сечение рассеяния с поглощением ( $n > 0$ ) или излучением ( $n < 0$ ) фотонов

$$\begin{aligned} & \Phi^{(sc)}(\mathbf{r}, t) \Big|_{r \rightarrow \infty} = \\ & = \sum_{n=n_{\min}}^{\infty} A_n r^{-1} \exp(ip_n r / \hbar - in\omega t), \quad (2) \\ & d\sigma_n / d\Omega_{\mathbf{p}_n} = (p_n / p) |A_n(p, p_n)|^2, \end{aligned}$$

где  $p_n = \sqrt{2m(E + n\hbar\omega)}$  — импульс рассеянного электрона, а суммирование в (2) включает все открытые каналы с  $E + n\hbar\omega > 0$ .

В дальнейшем рассмотрении ограничимся случаем  $l=0$  ( $s$ -рассеяние). Вне области действия потенциала  $U(r)$  (при  $r > r_c$ ) решение уравнения (1) с асимптотикой расходящейся сферической волны при  $r \rightarrow \infty$  может быть записано через запаздывающую функцию Грина  $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$  свободного электрона в поле  $\mathbf{F}(t)$  следующим образом:

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{r}, t) &= \chi(\mathbf{r}, t) - (2\pi\hbar^2) / (m\kappa) \times \\ & \times \int_{-\infty}^t dt' e^{i\epsilon(t-t')/\hbar} f(t') G(\mathbf{r}, t; 0, t'), \quad (3) \end{aligned}$$

где  $f(t) = \sum_s f_s e^{-is\omega t}$  — некоторая периодическая функция. В соответствии с нестационарной теорией эффективного радиуса [10] для определения неизвестной функции  $f(t)$  решение (3) следует сшить с поведением волновой функции в области малых  $r$  ( $r < r_c$ ):  $\Phi(r, t) \sim \sum_s (r^{-1} - B_0(\epsilon + s\hbar\omega)) f_s e^{-is\omega t}$ , где для коэффициента  $B_0(E) = -1/a_0 + r_0 m E / \hbar^2$  используется параметризация через эффективный радиус  $r_0$  и длину рассеяния  $a_0$  [9]. Используя для функции Грина  $G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$  фейнмановское представление в записи через классическое действие  $S(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$  для электрона в поле  $\mathbf{F}(t)$ , получим

$$\begin{aligned} (-ip + B_0(\epsilon)) f(t) + i \frac{r_0}{2} \frac{df}{dt} = c(t) + \frac{1}{\sqrt{4\pi i}} \times \\ \times \int_0^{\infty} \frac{d\tau}{\tau^{3/2}} e^{iE\tau} \left[ f(t - \tau) e^{iu_p \tau + iS(t, t - \tau)} - f(t) \right], \quad (4) \end{aligned}$$

где  $c(t) = \chi(\mathbf{r} = 0, t)$ ,  $S(t, t') \equiv S(0, t; 0, t')$ .

В уравнении (4) и всюду ниже используются следующие безразмерные единицы: амплитуда поля  $F$  измеряется в единицах  $F_0 = (2m |E_0|^3)^{1/2} / |e| \hbar$ , энергия и частота в единицах  $|E_0|$  и  $|E_0| / \hbar$ , а импульс и длина в единицах  $\hbar\kappa$  и  $\kappa^{-1}$ .

Решение неоднородного интегро-дифференциального уравнения (4) в общем случае может быть получено только численно. Для этих целей его удобно переписать в виде системы линейных неоднородных алгебраических уравнений для коэффициентов Фурье  $f_s$  функции  $f(t)$ . Эта система распадается на две несвязанные системы: одна для коэффициентов  $f_s \equiv f_{2k+\delta}$  с четными индексами  $s$  ( $\delta=0$ ), другая — с нечетными ( $\delta=1$ ):

$$\sum_{k'=-\infty}^{\infty} M_{k, k'}(\epsilon_\delta) f_{2k'+\delta} = c_{2k+\delta}, \quad (5)$$

где  $\epsilon_\delta = E + u_p + \delta\omega$ , величины  $c_{2k+\delta}$  являются коэффициентами Фурье функции  $c(t)$ :

$$c_s = i^s \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_{2m-s} \left( \frac{2(\mathbf{F} \cdot \mathbf{p})}{\omega^2} \right) J_m \left( \frac{u_p}{2\omega} \right), \quad (6)$$

где  $J_n(x)$  — функция Бесселя первого рода. Матричные элементы  $M_{k, k'}$  в (5) имеют вид (ср. [4]):

$$\begin{aligned} M_{k, k'}(\epsilon) &= \delta_{k, k'} (-i\sqrt{\epsilon + 2k\omega} + \\ & + B_0(\epsilon + 2k\omega) / 2) - \\ & - \frac{i^{k-k'}}{\sqrt{4\pi i}} \int_0^{\infty} \frac{d\tau}{\tau^{3/2}} e^{i(\epsilon + (k+k')\omega)\tau} \times \\ & \times \left[ e^{i(\lambda(\tau) - u_p \tau)} J_{k-k'}(z(\tau)) - \delta_{k, k'} \right], \quad (7) \end{aligned}$$

$$\lambda(\tau) = \frac{4u_p}{\omega^2\tau} \sin^2 \frac{\omega\tau}{2},$$

$$z(\tau) = \frac{u_p}{\omega} \sin \omega\tau - \lambda(\tau).$$

При известном решении системы уравнений (5) функция  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  в (3) становится полностью определенной, а ее асимптотика (2) при  $r \rightarrow \infty$  дает амплитуду  $s$ -рассеяния:

$$A_n(\mathbf{p}, \mathbf{p}_n) = \sum_{s=-\infty}^{\infty} i^{n-s} f_s \times$$

$$\times \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_{2m+n-s} \left( \frac{2(\mathbf{F} \cdot \mathbf{p}_n)}{\omega^2} \right) J_m \left( \frac{u_p}{2\omega} \right). \quad (8)$$

### АНАЛИЗ ОСНОВНЫХ СООТНОШЕНИЙ И МЕТОДЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Основной проблемой численного анализа амплитуды рассеяния  $A_n(\mathbf{p}, \mathbf{p}_n)$  (8) является расчет коэффициентов  $f_s$ , удовлетворяющих системе линейных уравнений (5). Отметим, что наиболее сложными, с точки зрения точности расчетов, являются комбинации параметров, для которых  $E = \mu\omega$  и  $E = \text{Re}[\varepsilon_0(F, \omega)] - u_p + \mu\omega$  (где  $\mu$  — целое,  $\varepsilon_0(F, \omega)$  — комплексная квазиэнергия слабосвязанного состояния электрона в поле  $U(r)$ ). В первом случае, соответствующем закрытию каналов вынужденного  $\mu$ -фотонного излучения, матрица  $M$  вычисляется в точках ветвления, для которых сходимость интегралов в (7) заметно ухудшается (корневую структуру  $M_{k,k'} = M_{k,k'} [(E - \mu\omega)^{1/2}]$  в окрестности  $E = \mu\omega$  см., например, в [6]). Второй случай соответствует резонансу на квазидискретном уровне (виртуальный захват электрона атомом в процессе рассеяния), для которого справедливо соотношение  $\det[M(\varepsilon_0(F, \omega) + \mu\omega)] = 0$ . Заметим, однако, что для вещественных  $E$  полного вырождения  $M$  не наблюдается.

Хотя формально количество уравнений в (5) неограниченно, фактически в вычислениях учитывается их конечное число, зависящее от параметров лазерного поля и энергии электрона. Зависимость функции Бесселя  $J_n(x)$  от параметра  $n$  в области  $n > |x| \gg 1$  является быстро затухающей и определяется асимптотическим выражением [9]

$$J_n(x) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\nu}} e^{v-n \text{arth}(v/n)}, \quad (9)$$

$$\nu = \sqrt{n^2 - x^2}.$$

Перепишав выражение (6) для  $c_s$  в виде

$$c_s = i^s [J_{-s}(x)J_0(y) +$$

$$+ \sum_{m=1}^{\infty} J_m(y) (J_{2m-s}(x) + (-1)^{s+m} J_{2m+s}(x))],$$

где  $x = 2(\mathbf{F} \cdot \mathbf{p}) / \omega^2$ ,  $y = u_p / (2\omega)$ , нетрудно убедиться в затухании  $c_s$  с ростом  $|s|$  в области  $|2y - s| > x$ . На рис. 1 представлена зависимость коэффициентов  $c_s$  от индекса  $s$  для параметров  $x = 40.6$ ,  $y = 6.5$  (соответствующие значения параметров поля и энергии электрона в безразмерных единицах указаны в подписи к рисунку). Видно, что для данных параметров необходимо учитывать  $s_{\text{max}} \sim 170$  ненулевых чисел  $c_s$ , а следовательно примерно такое же количество уравнений в системе (5).

Анализируя структуру матрицы  $M$ , отметим некоторые полезные для расчетов свойства. Во-первых, непосредственно из определения (7) следуют соотношения симметрии:

$$M_{k,k'}(E) = M_{k-k',0}(E + 2k'\omega), \quad (10)$$

$$M_{k,k'(E)} = M_{k',k}(E).$$

Во-вторых, с ростом  $d = k - k' > d_c$  относительный вклад  $M_{k+d,k}(E)$  в решение системы (5) резко уменьшается. Подробный анализ зависимости элементов  $M_{k,k'}$  от  $d = k - k'$  выполнен в работе [10], где с использованием асимптотики функции Бесселя (9) получена аналитическая оценка  $M_{d,0}$  для больших  $d$ :

$$M_{d,0} \approx \sqrt{\frac{\omega}{4\beta\tau_1}} |J_d(z_1)| e^{-(d+E/\omega-|z_1|)^2/(4\beta)}, \quad (11)$$

$$d > |z_1|,$$

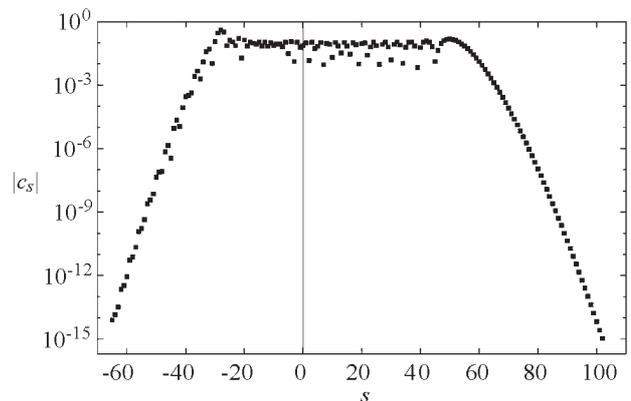


Рис. 1. Зависимость абсолютной величины свободных коэффициентов  $c_s$  системы уравнений (5) от индекса  $s$  для рассеяния электронов с энергией  $E = 16\omega = 2.48$ , направленных вдоль линейной поляризации лазерного поля с параметрами:  $\omega = 0.155$ ,  $F = 0.31$ .

где  $\tau_1 = 4.086$  — точка глобального максимума функции  $|z(\tau)|$  (7),  $z_1 = z(\tau_1)$ ,  $\beta = k|z''(\tau_1)|/(2|z_1|)$ . Из выражения (11) видно, что критическое значение  $d$ , начиная с которого  $M_{q,0}$  затухает, определяется соотношением  $d_c \approx |z_1|$ .

Таким образом, для численного решения системы уравнений (5) необходимо вычислить две симметричные матрицы  $M(\varepsilon)$  и  $M(\varepsilon + \omega)$ , состоящие из  $2k_{\max} + 1$  строк ( $2k_{\max} + 1 = s_{\max}/2$ ), в которых ненулевые (дающие вклад) элементы лежат на прямых  $|k - k'| = d$  ( $0 \leq d \leq d_{\max}$ ), параллельных главной диагонали (в дальнейшем их будем называть просто «диагоналями»).

Для численного расчета несобственного интеграла в выражении (7) от быстро осциллирующей и медленно затухающей функции используется следующий алгоритм. Представим интеграл в выражении (7) в виде

$$\begin{aligned} & \int_0^{\infty} \frac{d\tau}{\tau^{1/2}} e^{i\alpha\tau} h(\tau) = \\ & = \frac{1}{\sqrt{4\pi i}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{H(w)}{\sqrt{w - \alpha}} dw, \quad (12) \\ & H(w) = \int_{-\infty}^{\infty} h(t) e^{iwt} dt. \end{aligned}$$

Комплексная функция  $h(t)$  в выражении (12) не имеет сингулярностей во всей области определения  $(-\infty, \infty)$ , а ее Фурье-образ  $H(w)$  дает основной вклад в интеграл по  $w$  на конечном интервале. Хотя формально вычисление  $M_{k,k}$  сводится теперь к расчету двумерного несобственного интеграла, реальное время вычислений всей матрицы  $M$  заметно сокращается: во-первых, для нахождения Фурье-образа  $H(w)$  может быть использован эффективный алгоритм быстрого дискретного преобразования Фурье (FFT — Fast Fourier Transform):

$$\begin{aligned} h(t) & \rightarrow h_j = h(t_j = j\Delta t) \xrightarrow{FFT} \\ & \xrightarrow{FFT} H_n = H(w_n = n\Delta w), \quad (13) \\ j & = 0, \dots, N - 1, \quad n = -N/2, \dots, N/2, \\ \Delta w & = \pi / \Delta t, \end{aligned}$$

(заметим, что для достижения приемлемой точности расчетов в рассматриваемых задачах число вычисляемых точек в алгоритме (13)  $N \geq 2^{22}$ ); во-вторых, для всех элементов диагонали с  $k = k' + d$  функцию  $H(w)$  следует вычислять один раз. Наконец, после интерполяции функции  $H(w)$  на отдельном отрезке  $[w, w + \Delta w]$  интеграл по  $w$  в (10) сводится к вычислению суммы, не содержащей сингулярных членов.

## ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ НА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМ КЛАСТЕРЕ

Тот факт, что расчет диагоналей с  $k = k' + d$  матрицы  $M$ , определенной в (7), может быть произведен независимо друг от друга, является основой для распараллеливания вычислений. В качестве базовой подзадачи для параллельных алгоритмов, предлагаемых в работе, можно использовать расчет одной диагонали  $M_d \equiv M_{k+d,k}$  ( $-k_{\max} \leq k \leq k_{\max}$ ) с фиксированным  $d$ . Расчеты производились на кластере кафедры цифровых технологий факультета компьютерных наук ВГУ (кластер состоит из трех вычислительных узлов, содержащих по четырехядерному процессору Intel Core Quad 2.4 ГГц).

В первом подходе к распараллеливанию расчетной задачи с целью полной загрузки всех четырех ядер одного узла кластера предлагается использование технологии OpenMP, в рамках которой с помощью директив компилятора создаются дополнительные потоки внутри последовательного кода расчетной программы, и вычисление диагоналей  $M_d$  распределяется между ядрами одного узла. Преимуществами такого подхода являются относительная простота программной реализации, единство последовательного и параллельного кода, а также отсутствие необходимости подключения дополнительных библиотек. К недостаткам можно отнести невозможность выполнения программы с OpenMP директивами на вычислительных системах с распределенной памятью, то есть более чем на одном узле кластера.

Второй метод вычислений связан с использованием функций библиотеки MPI для приема-передачи сообщений между различными узлами кластера и ядрами внутри одного узла. Для обеспечения динамической балансировки вычислительной нагрузки (время вычисления диагоналей уменьшается с ростом  $d$ ) между имеющимися ресурсами кластера используется схема «менеджер—исполнители». В соответствии с ней для управления распределением нагрузки в системе выделяется отдельный процесс-менеджер, которому доступна информация обо всех имеющихся подзадачах. Остальные процессы системы являются исполнителями, которые для получения вычислительной нагрузки обращаются к процессу-менеджеру с помощью MPI-функций (отметим, что поскольку процесс-менеджер не выполняет расчетных действий, он может быть запущен на одном ядре

вместе с процессом-исполнителем). Завершение вычислений происходит в момент, когда процессы-исполнители завершили решение всех переданных им подзадач.

Основой третьего подхода является комбинированное использование технологии OpenMP для распределения работы внутри одного многоядерного узла и функций MPI для передачи информации между узлами кластера. Такая схема может быть особенно эффективна при интенсивном коммуникационном взаимодействии между процессами с передачей большого количества данных. В таком случае не требуется дублировать и передавать данные, необходимые процессам, работающим на разных ядрах одного и того же узла кластера, поскольку совместный доступ к ним обеспечивается OpenMP-директивами. В этом варианте нами используется описанная выше схема «менеджер—исполнители» с некоторыми изменениями: как и во втором подходе, в системе выделяется отдельный процесс-менеджер и процессы-исполнители, взаимодействующие с помощью MPI-функций, однако базовой подзадачей является вычисление сразу четырех (по количеству ядер в узле) диагоналей матрицы  $M$ . Процесс-исполнитель с помощью OpenMP директив создает дополнительные нити и производит параллельный расчет четырех диагоналей (см. рис. 2).

## РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

### АНАЛИЗ ЭФФЕКТИВНОСТИ МЕТОДОВ РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЯ

Как уже отмечалось, основное время расчетов ( $\approx 99\%$ ) при вычислениях амплитуды рассеяния

тратится на решение системы уравнений для коэффициентов  $f_s$  (5), причем главной вычислительной задачей является расчет элементов матрицы  $M$  (7). Для анализа эффективности описанных выше алгоритмов параллельных вычислений приведем результаты расчетов  $f_s$  для следующих параметров:  $E=2.48$ ,  $\omega=0.155$ ,  $F=0.31$ .

Время последовательной программы (работа одного процессорного ядра) является базовым параметром в анализе эффективности параллельных алгоритмов и в нашем случае составляет  $T_1=4070$  секунд. Использование технологии OpenMP для распараллеливания вычислений на четырех ядрах ( $P=4$ ) привело к существенному сокращению времени работы программы: выполнение параллельного алгоритма с OpenMP-директивами заняло  $T_4^{\text{OMP}}=1118$  секунд, а результаты для коэффициента ускорения вычислений  $S_P^{\text{OMP}}=T_1/T_P^{\text{OMP}}=3.64$  и эффективности использования процессоров  $E_P^{\text{OMP}}=S_P^{\text{OMP}}/P=0.91$  оказались близки к максимально возможным значениям  $S_{P,\text{max}}=P=4$ ,  $E_{\text{max}}=1$ . Заметим также, что для матриц  $M$  с большим количеством диагоналей (для рассматриваемых параметров  $d_{\text{max}}=40$ ) значения  $S_P^{\text{OMP}}$  и  $E_P^{\text{OMP}}$  увеличиваются.

Второй из предложенных подходов, заключающийся в динамическом распределении вычислений между ядрами всех доступных процессоров кластера с использованием функций MPI, позволяет исследовать зависимость времени выполнения программы  $T_P^{\text{MPI}}$ , коэффициента ускорения вычислений  $S_P^{\text{MPI}}=T_1/T_P^{\text{MPI}}$  и эффективности использования процессоров  $E_P^{\text{MPI}}=S_P^{\text{MPI}}/P$  от числа  $P$  задействованных процессоров-исполнителей (см. табл.).

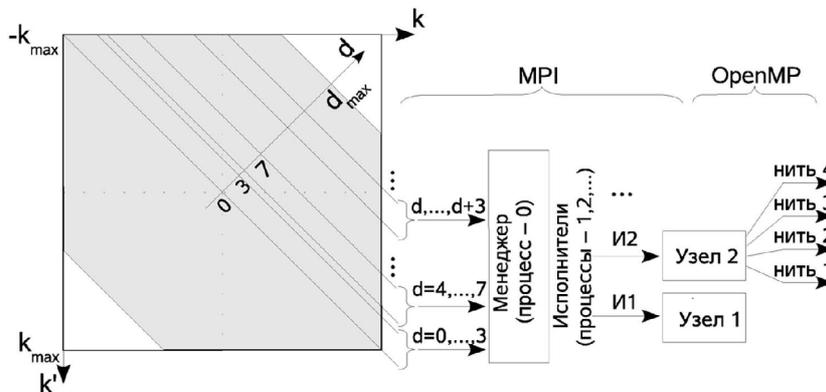


Рис. 2. Структура матрицы  $M$  и схема распределения вычислительной нагрузки между ядрами узлов кластера для гибридного OpenMP+MPI алгоритма. Серым тоном отмечена учитываемая в вычислениях часть матрицы

Таблица  
Показатели эффективности работы  
параллельного алгоритма

P	$T_p^{\text{MPI}}$ , сек.	$S_p^{\text{MPI}}$	$E_p^{\text{MPI}}$
2	2072	1.96	0.98
4	1079	3.77	0.94
6	705	5.77	0.96
8	584	6.97	0.87
10	485	8.40	0.84
12	406	10.11	0.84

Из представленных в табл. результатов видно, что для используемого кластера предложенный алгоритм вычислений оказывается весьма эффективным и позволяет сократить время вычислений более чем в 10 раз при полной загрузке 12-процессорных ядер. Уменьшение эффективности  $E_p^{\text{MPI}}$  с ростом числа используемых процессоров объясняется главным образом неравномерной загрузкой используемых процессоров и затратами времени на коммуникационные операции между менеджером и исполнителями.

Отметим, что время работы программы с четырьмя процессами-исполнителями  $T_4^{\text{MPI}}$  отличается от времени выполнения параллельного алгоритма с OpenMP-директивами на четырех ядрах  $T_4^{\text{OMP}}$  не более чем на 4 %. Поэтому при вычислениях в рамках одного многоядерного процессора (с учетом всех преимуществ в программной реализации) использование технологии OpenMP вполне обоснованно. Подчеркнем, однако, что применение MPI-функций позволяет масштабировать программу на произвольное число узлов кластера.

Исследование эффективности третьего метода вычислений, основанного на гибридном OpenMP+MPI алгоритме, показало, что при загрузке всех 12 ядер кластера время вычислений составляет  $T_{12}^{\text{OMP+MPI}} = 440$  с., что превосходит время работы «чистой» MPI-программы на том же количестве ядер  $T_{12}^{\text{MPI}} = 406$  с. на 9 %. Причиной такого увеличения времени расчетов является различное время вычислений передаваемого на узел кластера блока из четырех диагоналей и обязательная синхронизация работы нитей по окончании расчета блока, вследствие чего закончившие вычисления ядра процессора простаивают в ожидании завершения работы самой «медленной» нити. Таким образом, гибридный OpenMP+MPI алгоритм в

рамках используемой модели, не требующей интенсивной передачи больших объемов данных между ядрами кластера, представляется наименее эффективным.

### ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДЛЯ СЕЧЕНИЯ РАССЕЯНИЯ

Рассмотренные выше параллельные алгоритмы, реализующие возможности многопроцессорных кластеров по ускорению вычислений сечений ЭАР в присутствии лазерного поля существенно упрощают исследования спектров рассеянных электронов в широкой области параметров поля и энергий. В работе [6] анализируются аномальные усиления сечений рассеяния в спектрах многофотонного поглощения, связанные с пороговыми явлениями при закрытии каналов многофотонного излучения. На рис. 3 а приведен пример такого усиления для рассеяния электронов с энергиями, близкими  $16\hbar\omega$  на атоме водорода ( $a_0k=1.453$ ,  $r_0k=0.623$ ,  $|E_0|=0.755$ эВ — энергия связи иона H<sup>-</sup>) в поле CO<sub>2</sub>-лазера с интенсивностью  $I=1.44 \times 10^{11}$  Вт/см<sup>2</sup>. Из рисунка видно значительное (до порядка величины) различие сечений

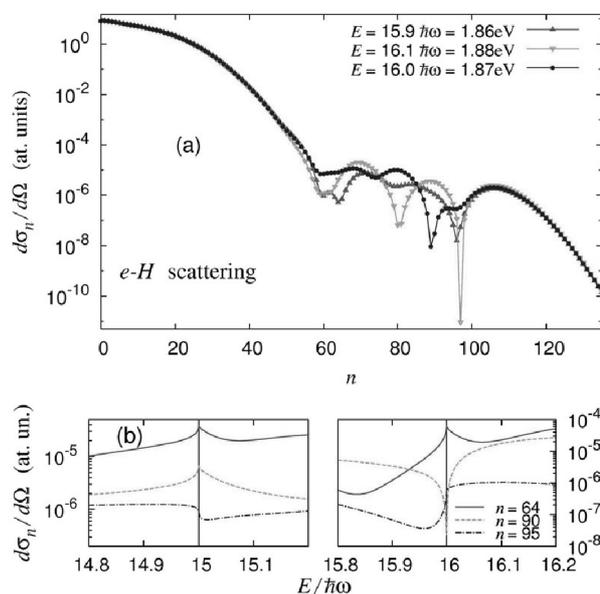


Рис. 3. Дифференциальное сечение  $d\sigma_n/d\Omega_{p_n}$   $e$ -H-рассеяния на нулевой угол (вдоль направления линейной поляризации излучения) для CO<sub>2</sub>-лазера ( $\hbar\omega=0.117$ эВ) с интенсивностью  $I=1.44 \times 10^{11}$ Вт/см<sup>2</sup>. а) зависимость от числа  $n$  поглощенных фотонов для указанных на рисунке энергий  $E$  налетающего электрона; б) зависимость  $d\sigma_n/d\Omega_{p_n}$  от энергии  $E$  в области чётного и нечётного порога вынужденного испускания для ряда значений  $n$ , указанных на рисунке

$d\sigma_n/d\Omega_{p_n}$  в области плато при изменении энергии  $E$  на  $\pm 0.01\text{эВ}$  (объяснение этого эффекта см. в [6]). На рис. 3(б) приведена пороговая структура энергетической зависимости  $d\sigma_n/d\Omega_{p_n}$  в окрестностях  $E=15\hbar\omega$  и  $16\hbar\omega$  в различных каналах  $n$ -фотонного поглощения.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследуемая в работе модель электрон-атомного рассеяния в присутствии интенсивного лазерного поля представляет собой один из примеров полуаналитического решения проблемы, когда роль вычислительных методов в анализе изучаемого явления сведена к минимуму. Однако, как показали представленные в данной статье результаты, даже в этом случае время расчетов может оказаться значительным, а алгоритмы параллельных вычислений, уменьшающие это время, весьма эффективными.

Рассмотренные в работе подходы к распараллеливанию вычислений на многоядерном кластере основаны на наиболее распространенных средствах параллельного программирования для систем с общей и распределенной памятью. В рамках проводимых расчетов, не требующих интенсивной передачи между узлами кластера больших объемов данных, наиболее эффективным оказался алгоритм динамической балансировки вычислительной нагрузки между процессорами с использованием функций библиотеки MPI. При этом, в случае вычислений на многопроцессорной системе с общей памятью (например, современные ЭВМ на базе многоядерных процессоров) может эффективно применяться технология OpenMP, автоматически распределяющая вычислительную нагрузку и не требующая значительных временных затрат на программную реализацию.

Используемые методы параллельных вычислений существенно упростили исследования спектров ЭАР в широкой области изменения параметров поля и энергий и могут использоваться для численного анализа других процессов при взаимодействии интенсивного лазерного поля с атомными системами.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Above-threshold ionization. From classical features to quantum effects / W. Becker, F. Grabson, R. Kopold et al. // *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* — 2002. — Vol. 48. — P. 35.
2. Эффекты плато в спектрах электрон-атомного рассеяния в сильном лазерном поле / Н. Л. Манаков, А. Ф. Старас, А. В. Флегель, М. В. Фролов // *Письма в ЖЭТФ.* — 2002. — Т. 76. — С. 316.
3. Circularly polarized laser field-induced rescattering plateaus in electron-atom scattering / A. V. Flegel, M. V. Frolov, N. L. Manakov, A. F. Starace // *Phys. Lett. A.* — 2005. — Vol. 334. — P. 197.
4. *Воеводин В.В.* Параллельные вычисления / В. В. Воеводин, Вл. В. Воеводин. — СПб.: БХВ-Петербург, 2002.
5. The OpenMP API specification for parallel programming / [www.openmp.org](http://www.openmp.org).
6. Пороговые явления в электрон-атомном рассеянии в лазерном поле / Н. Л. Манаков, А. Ф. Старас, А. В. Флегель, М. В. Фролов // *Письма в ЖЭТФ.* — 2008. — Т. 87. — С. 99.
7. *Ландау Л.Д.* Квантовая механика. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — М.: Физматлит, 2001.
8. Model-Independent Quantum Approach for Intense Laser Detachment of a Weakly-Bound Electron / M. V. Frolov, N. L. Manakov, E. A. Pronin, A. F. Starace // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — Vol. 91. — P. 053003.
9. *Абрамовиц М.* Справочник по специальным функциям / М. Абрамовиц, И. А. Стиган. — М.: Наука, 1979.
10. Cutoffs of high-energy plateaus for atomic processes in an intense elliptically polarized laser field / A. V. Flegel, M. V. Frolov, N. L. Manakov, A. F. Starace // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* — 2005. — Vol. 38. — P. L27.