

Параллельные вычисления при моделировании процессов электрон-атомного рассеяния

К.Н. Карелин, А.В. Флегель

Одной из фундаментальных проблем современной физики взаимодействия лазерного излучения с веществом является исследование нелинейного отклика отдельного атома на интенсивное электромагнитное излучение. В данной работе изучается процесс рассеяния электрона на атоме в присутствии сильного светового поля. Взаимодействие электрона с короткодействующим потенциалом нейтрального атома описывается потенциалом нулевого радиуса [1] или рассматривается в рамках нестационарной теории эффективного радиуса [2], в то время как сильное лазерное поле учитывается точно.

Расчет амплитуды рассеяния сводится к вычислению ряда по обобщенным функциям Бесселя, с коэффициентами Фурье периодической функции $f(t)$, удовлетворяющей неоднородному одномерному интегро-дифференциальному уравнению. Наиболее эффективным методом численного решения уравнения является переход к системе линейных неоднородных алгебраических уравнений для коэффициентов Фурье f_k ($f(t) = \sum_k f_k \exp(ik\omega t)$, ω – частота лазерного поля): $\sum_{k'=-\infty}^{\infty} M_{k,k'} f_{k'} = c_k$, где элементы матрицы M представляют собой одномерные несобственные интегралы от быстро осциллирующих медленно затухающих функций. Хотя формально количество уравнений системы неограниченно, фактически необходимо учитывать их конечное число k_{max} ввиду затухания c_k с ростом k ($k_{max} \sim 100$ для интенсивностей CO_2 -лазера $\sim 1.4 \times 10^{11} \text{Вт/см}^2$ и энергий электрона $\sim 2 \text{эВ}$). Симметрия матрицы M такова, что вычисление множеств элементов $M_j \equiv M_{k,k+j}$ на прямых $j = 0, \pm 1, \dots$ может быть выполнено независимо друг от друга. При этом большая часть времени работы расчетной программы затрачивается именно на вычисление элементов матрицы M . Указанные свойства системы обосновывают использование параллелизма в коде программы.

Вычисления проводятся на кластере Воронежского госуниверситета, расчетными узлами которого являются четырехядерные процессоры Intel Core Quad 2.4 ГГц. Проанализированы три подхода к распараллеливанию вычислений: 1) с использованием технологии OpenMP для параллельных расчетов на одном узле; 2) с помощью функций библиотеки MPI для загрузки нескольких узлов кластера; 3) комбинированный MPI + OpenMP-подход. В рамках первого подхода с помощью OpenMP-директив компилятора вычисление M_j распараллеливается между ядрами одного узла. Во втором случае расчет M_j динамически распределяется между свободными ядрами всего кластера. Основой третьего подхода является комбинированное использование технологии OpenMP для распределения работы внутри одного многоядерного узла и функций MPI для передачи информации между узлами кластера (на каждый узел передается блок из четырех множеств M_j с разными j).

Вычислительный эксперимент показал, что во втором способе распараллеливания наблюдается наибольший коэффициент ускорения S_p работы программы, например, для 12 ядер ($p = 12$) $S_{12} = 10.7$ при времени счета последовательной программы $T_1 \sim 72$ минуты (для фиксированных параметров лазерного поля и энергии). На одном узле кластера время вычислений в рамках первого и второго подходов отличается не более чем на несколько процентов. Третий вариант менее эффективен из-за различного времени вычислений множеств M_j внутри блока и ожидания завершения работы самой “медленной” нити.

В результате вычислений удалось проанализировать зависимости спектров рассеянных электронов от параметров лазерного излучения и энергии налетающих электронов.

Литература

1. Манаков Н.Л., Старас А.Ф., Флегель А.В., Фролов М.В. Письма в ЖЭТФ. — 2002. — Т. 76. — С. 316.
2. Frolov M.V., Manakov N.L., Pronin E.A., Starace A.F. Phys. Rev. Lett. — 2003. — V. 91. — P. 53.