

# Параллельные алгоритмы в расчетах атомных фотопроцессов

А.А. Крыловецкий, С.И. Мармо

Проанализирована возможность использования параллельных алгоритмов при расчетах основных характеристик процессов взаимодействия лазерного излучения с веществом.

Одной из актуальных проблем современной физики является исследование процессов взаимодействия лазерного излучения с веществом. В их числе тормозное излучение (Bremsstrahlung, BrS), сопровождающее рассеяние заряженных частиц на силовом центре, интерес к которому определяется его ролью в потере энергии при прохождении заряженных частиц через вещество, в возникновении рентгеновского и гамма-излучения, в тепловом излучении плазмы.

Наличие высокопроизводительных многопроцессорных систем позволяет на основе параллельных алгоритмов значительно уменьшить время расчета многофотонных процессов, а также создавать виртуальные экспериментальные установки для визуализации, дающие возможность добиться существенного прогресса в понимании изучаемых явлений без постановки дорогостоящих реальных экспериментов.

Основной характеристикой процесса BrS является сечение, которое в случае двухфотонного тормозного излучения в кулоновском поле выражается через гипергеометрические функции Гаусса и интегралы от них [1].

Для расчета гипергеометрических функций используются как интегральное представление, так и представление в виде ряда. В обоих случаях можно реализовать параллельные алгоритмы, позволяющие значительно ускорить вычисления. Вычисление интегралов от гипергеометрических функций может быть также реализовано параллельным образом.

Процесс построения алгоритма параллельных вычислений состоит из нескольких этапов [2]: разбиение на минимальные независимые минизадачи; установление необходимых связей между минизадачами; кластеризация параллельной модели; распределение минизадач по конкретным процессорам модели. В нашем случае при кластеризации объединяются подзадачи, относящиеся к вычислению каждого слагаемого в выражении для сечения (как интегрального, так и внеинтегрального). Возникает проблема балансировки различных ветвей с учетом необходимости равномерной загрузки процессоров, которая может решаться в том числе путем объединения в одной нити интегрального и внеинтегрального слагаемых.

Программная реализация алгоритма возможна с использованием технологии MPI (Message Passing Interface). Интерфейс MPI обеспечивает возможность взаимодействия между ветвями приложения в многопроцессорных системах как с общей, так и распределенной памятью.

Ускорение выполнения программы по сравнению с ее последовательной версией будет во многом зависеть от эффективности распараллеливания, при этом оно может меняться в разных областях значений переменных из-за специфики задачи. Например, более медленная сходимость интегралов из-за увеличения частоты осцилляций подынтегральной функции может привести к перекосам в балансировке и значительному снижению скорости счета. Предварительный анализ таких ситуаций позволяет минимизировать потери времени.

## Литература

1. Крыловецкий А.А., Манаков Н.Л., Мармо С.И., Starace A.F. Двухфотонные тормозные процессы в атомах: поляризационные эффекты и аналитические результаты для кулоновского потенциала // ЖЭТФ. -2002. -Т. 122, N. 6. -С. 1168-1197.
2. Foster I. Designing and building parallel programs: concepts and tools for parallel software engineering. -Boston: Addison-Wesley, 1995.