

УДК 519.688

doi 10.26089/NumMet.v16r227

ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ МЕТОДА РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ПОЛЯРОНА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АЛГОРИТМА РАЗБИЕНИЙ

А. В. Волохова¹, Е. В. Земляная², В. С. Рихвицкий³

Разработанный ранее метод численного моделирования процесса формирования поляронных состояний в конденсированных средах модифицирован с применением алгоритма разбиений, что обеспечивает существенное ускорение вычислений при расчетах в параллельном режиме на многопроцессорных системах. Программная реализация выполнена на основе технологии параллельного программирования MPI. Проведенные методические расчеты на Центральном информационно-вычислительном комплексе лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований (Дубна) с различным количеством задействованных процессоров при выборе разных параметров вычислительной схемы подтверждают эффективность разработанного подхода для численного решения системы нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих динамическую модель полярона.

Ключевые слова: гидратированный электрон, модель полярона, конечно-разностные схемы, параллельные алгоритмы, параллельные вычисления, многопроцессорные вычислительные системы.

1. Введение. Сольватированные (гидратированные) состояния электронов образуются, согласно современным представлениям, в результате радиолиза конденсированных сред. При образовании такого состояния происходит захват избыточного свободного электрона поляризационной потенциальной ямой, образованной индуцированной им поляризацией окружающих его молекул среды. Таким образом, под действием облучения вода (или иная среда) переходит в особое состояние, характеризующееся специальными физическими и химическими свойствами. Изучение этих свойств имеет огромное теоретическое и прикладное значение. Важную информацию о гидратированном электроне и кинетике химических реакций с его участием дает динамика спектров поглощения при его образовании в облученной воде, получаемых на основе современных фемтосекундных спектроскопических методов. В работе [1] предложена поляронная модель гидратированного электрона и показано, что теоретические оценки динамики поглощения лазерного излучения в ультрафиолетовом диапазоне качественно согласуются с экспериментальными данными из [2].

В работах [3–5] разработан метод и комплекс программ для численного решения системы нелинейных уравнений, описывающей динамическую модель полярона. Проведенное на этой основе численное моделирование процесса образования гидратированного электрона подтвердило, что используемый подход обеспечивает согласие как с экспериментальными данными поглощения света поляризованной водой, так и с теоретическими оценками энергии связи и среднего радиуса гидратированного электрона. С вычислительной точки зрения расчеты сводятся к многократному численному решению упомянутой системы уравнений с различными начальными условиями, с тем чтобы найти начальное состояние, обеспечивающее согласующуюся с теорией и экспериментом динамику вычисляемых на каждом шаге по времени физических характеристик. Представленный в работе [4] комплекс программ оптимизирован для двухпроцессорной системы, что обеспечивает почти двукратное ускорение по сравнению с последовательным однопроцессорным режимом. Однако и в двухпроцессорном режиме каждый расчет с заданным начальным условием занимает примерно 2 часа. Поскольку, как уже сказано, для полного численного исследования процессов формирования сольватированных электронов в конденсированных средах требуются массовые расчеты с разными начальными условиями, задача эффективной параллельной оптимизации остается актуальной.

¹ Объединенный институт ядерных исследований, лаборатория информационных технологий, ул. Жолио-Кюри, 6, 141980, Московская обл., г. Дубна; мл. науч. сотр., e-mail: volokhova@jinr.ru

² Объединенный институт ядерных исследований, лаборатория информационных технологий, ул. Жолио-Кюри, 6, 141980, Московская обл., г. Дубна; вед. науч. сотр., e-mail: elena@jinr.ru

³ Объединенный институт ядерных исследований, лаборатория информационных технологий, ул. Жолио-Кюри, 6, 141980, Московская обл., г. Дубна; вед. программист, e-mail: rqvtsk@jinr.ru

В настоящей статье описана параллельная вычислительная схема с использованием на каждом временном слое алгоритма разбиений [8] и представлены результаты методических расчетов для различного количества параллельных процессоров и узлов дискретной сетки по пространственной и временной координатам, подтверждающие эффективность разработанного параллельного алгоритма. В разделе 2 дана математическая постановка задачи для системы нелинейных дифференциальных уравнений, описывающей динамику поляронных состояний. В разделе 3 представлена схема численного решения системы уравнений полярона. Раздел 4 посвящен алгоритму разбиений. В разделе 5 обсуждаются полученные численные результаты.

2. Система уравнений полярона. На основе функционала полной энергии оптического полярона Пекара в работе [1] сформулированы соответствующие уравнения движения, описывающие динамику волновой функции полярона, плотности распределения поляризационного заряда, индуцированного электроном, и потенциала поляризации с учетом релаксации. С использованием разложения указанных характеристик по сферическим гармоникам, переходя к безразмерным величинам и ограничиваясь рассмотрением сферически-симметричного случая, мы получаем систему пространственно одномерных нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих эволюцию заданного в начальный момент времени поляронного состояния.

Динамическая модель полярона подробно описана в [5]. Здесь мы приводим только окончательную форму уравнений, описывающих эволюцию заданного в нулевой момент времени поляронного состояния в сферически симметричном приближении:

$$\begin{cases} \left[i2\bar{m} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2\bar{m} \frac{r_{00}}{\tilde{\epsilon}} \frac{\phi(x,t)}{x} \right] \psi(x,t) = 0, \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x,t) = \Theta(x,t), \\ \left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial}{\partial t} + \omega^2 \right] \Theta(x,t) = -\omega^2 \frac{|\psi(x,t)|^2}{x}. \end{cases} \quad (1)$$

Граничные условия имеют вид

$$\phi(0,t) = \phi'(\infty,t) = 0, \quad \psi(0,t) = \psi(\infty,t) = 0, \quad \Theta(0,t) = \Theta(\infty,t) = 0.$$

Здесь $\psi(x,t)$ — безразмерная радиальная составляющая волновой функции электрона; $\phi(x,t)$ — безразмерная радиальная часть потенциала поляризации, индуцируемого электроном; безразмерная функция $\Theta(x,t)$ имеет физический смысл радиальной части плотности распределения поляризационного заряда; $\tilde{\epsilon} = 1.81$ — коэффициент диэлектрической проницаемости; $\bar{m} = 2.692$, $\gamma = 2.145$, $\omega = 1$ — безразмерные параметры эффективной массы гидратированного электрона, релаксации (трения) и частоты; r_{00} — масштабирующий множитель, введенный для того, чтобы “уравновесить” отличающиеся более чем на 10 порядков исходные значения физических параметров.

3. Конечно-разностная схема. Для численного решения система дифференциальных уравнений (1) заменяется системой разностных уравнений на равномерной дискретной сетке с узлами $x_m = m \times h_x$ и $t_n = n \times h_t$, где h_x и h_t — шаги по пространственной и временной переменным. В результате подстановки известных конечно-разностных формул [6] мы получаем систему сеточных уравнений относительно значений функций $\psi_m^n = \psi(x_m, t_n)$, $\phi_m^n = \phi(x_m, t_n)$ и $\Theta_m^n = \Theta(x_m, t_n)$ в узлах дискретной сетки:

$$\begin{cases} \frac{\psi_m^{n+1} - \psi_m^n}{h_t} = i \left\{ \sigma \left[\frac{\psi_{m+1}^{n+1} - 2\psi_m^{n+1} + \psi_{m-1}^{n+1}}{2\bar{m}h_x^2} + \frac{r_{00}}{\tilde{\epsilon}} \frac{\varphi_m^{n+1}}{mh_x} \psi_m^{n+1} \right] + \right. \\ \quad \left. + (1-\sigma) \left[\frac{\psi_{m+1}^n - 2\psi_m^n + \psi_{m-1}^n}{2\bar{m}h_x^2} + \frac{r_{00}}{\tilde{\epsilon}} \frac{\varphi_m^n}{mh_x} \psi_m^n \right] \right\}, \\ \frac{\varphi_{m+1}^{n+1} - 2\varphi_m^{n+1} + \varphi_{m-1}^{n+1}}{h_x^2} = \Theta_m^{n+1}, \quad \frac{\Theta_m^{n+1} - 2\Theta_m^n + \Theta_m^{n-1}}{h_t^2} + \gamma \frac{\Theta_m^{n+1} - \Theta_m^n}{h_t} + \omega^2 \Theta_m^{n+1} = -\omega^2 \frac{|\psi_m^n|^2}{mh_x}, \\ \sigma = 0.5, \quad \Theta_m^{-1} = -\frac{|\psi_m^0|^2}{mh_x}; \quad \Theta_m^0 = \Theta_m^{-1}; \quad \varphi_0^n = 0; \quad \varphi_l^n = \varphi_{l-1}^n; \quad m = 1, 2, \dots, l; \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{cases} \quad (2)$$

В работе [7] предложена схема численного исследования динамической модели полярона, построенная так, чтобы обеспечить возможность на каждом n -м временном слое последовательно вычислять значения

Θ^{n+1} , φ^{n+1} и ψ^{n+1} , избегая тем самым численного решения для каждого n системы трех нелинейных уравнений. Корректность схемы применительно к численному решению задачи (2) проверена путем тестовых расчетов в [3]. Итак, на каждом слое с номером n выполняется следующая последовательность действий.

На *первом шаге* из третьего уравнения системы (2) при известных ψ^n явно вычисляем Θ^{n+1} для всех m по формуле

$$\Theta_m^{n+1} = \left[-\frac{-2\Theta_m^n + \Theta_m^{n-1}}{h_t^2} - \gamma \frac{-\Theta_m^n}{h_t} - \omega^2 \frac{|\psi_m^n|^2}{mh_x} \right] \times \left[\frac{1}{h_t^2} + \frac{\gamma}{h_t} + \omega^2 \right]^{-1}. \quad (3)$$

На *втором шаге* найденные значения Θ_m^{n+1} подставляются во второе уравнение. Полученная система $N = l - 1$ линейных алгебраических уравнений

$$\hat{A}\mathbf{X} = \mathbf{D}; \quad \hat{A} = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & 0 & \dots & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & \dots & 0 \\ 0 & a_3 & b_3 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & b_N \end{bmatrix}; \quad \mathbf{D} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \dots \\ d_N \end{bmatrix}; \quad \mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \dots \\ x_N \end{bmatrix} \quad (4)$$

с коэффициентами

$$\begin{aligned} a_m &= 1, & b_m &= -2, & c_m &= 1, & d_m &= \Theta_m h_x^2, & m &= 2, \dots, N-1, \\ a_1 &= 0, & b_1 &= 1, & c_1 &= 0, & d_1 &= 0, & a_N &= -1, & b_N &= 1, & c_N &= 0, & d_N &= 0 \end{aligned}$$

решается тем или иным методом для вычисления φ_m^{n+1} .

Наконец, на *третьем шаге* полученные значения φ_m^{n+1} подставляются в первое уравнение системы (2). В результате получается система линейных алгебраических уравнений вида (4), коэффициенты которой имеют вид

$$\begin{aligned} a_m &= \frac{i\sigma}{2\bar{m}h_x^2}, & c_m &= \frac{i\sigma}{2\bar{m}h_x^2}, & b_m &= \frac{1}{h_t} + \frac{i\sigma \left(2 - 2h_x \frac{\bar{m}r_{00}\varphi_m^{n+1}}{\tilde{\epsilon}m} \right)}{2\bar{m}h_x^2}, \\ d_m &= \frac{\psi_m^n}{h_t} + \frac{i(1-\sigma) \left(2h_x \frac{\bar{m}r_{00}\varphi_m^n \psi_m^n}{\tilde{\epsilon}m} + \psi_{m+1}^n - 2\psi_m^n + \psi_{m-1}^n \right)}{2\bar{m}h_x^2}, & m &= 2, \dots, N-1, \\ a_1 &= 0, & b_1 &= 1, & c_1 &= 0, & d_1 &= 0, & a_N &= 0, & b_N &= 1, & c_N &= 0, & d_N &= 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Система решается относительно ψ_m^{n+1} , после чего процедура повторяется для следующего значения n .

Для начала расчетов необходимо задать значения φ_m^0 . В работах [3–5] начальное условие варьировалось, с тем чтобы воспроизвести теоретически предсказанное и экспериментально измеренное поведение физических характеристик гидратированного электрона в зависимости от времени. Кроме того, расчеты в методических целях проводились с начальными условиями в форме стационарных решений задачи (1).

Численное решение трехдиагональных систем уравнений (4) на втором и третьем шагах вышеописанного алгоритма может осуществляться разными способами. В начальном варианте компьютерной реализации использовался классический метод прогонки. Использование метода встречных прогонок обеспечивает возможность двукратного ускорения расчетов путем распределения вычислений на два параллельно работающих процессора. В настоящей реализации для решения алгебраических систем на втором и третьем шагах нашего алгоритма используется метод разбиений, позволяющий распределить вычисления, вообще говоря, на произвольное число процессоров [8]. Подробное описание алгоритма разбиений дано в следующем разделе нашей статьи. Естественно, расчеты на первом шаге алгоритма по формуле (3) тоже распараллеливаются по пространственной координате между задействованными параллельными процессорами.

4. Метод разбиений. Идея метода состоит в следующем. Исходная система (4) из N линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей \hat{A} разбивается на группы по числу задействованных параллельных процессоров (MPI-процессов).

Пусть P – число параллельных MPI-процессов, имеющих номера $p = 0, 1, \dots, P - 1$. Число N не обязано делиться на P нацело. Пусть $\Delta = \lfloor N/P \rfloor$. Каждому процессору с номером $p < (N \bmod P)$

назначается для дальнейшей обработки группа строк с номерами от $i_{\min} = p(\Delta + 1) + 1$ до $i_{\max} = (p + 1)(\Delta + 1)$; каждому процессору с номером $p \geq (N \bmod P)$ назначается группа строк с номерами от $i_{\min} = p\Delta + (N \bmod P) + 1$ до $i_{\max} = (N \bmod P) + (p + 1)\Delta$. В каждой группе ненулевые элементы сосредоточены в блоке размером $\Delta \times \Delta$ либо $(\Delta + 1) \times (\Delta + 1)$, расположенном в области главной диагонали исходной матрицы \hat{A} .

Над уравнениями внутри каждой группы проводятся преобразования, в результате которых ненулевыми оказываются только элементы, расположенные на главной диагонали блока и в вертикальных столбцах на левой и правой границах блока. Соответствующие арифметические операции осуществляются и над элементами вектора правой части D . После преобразований матрица \hat{A} в случае $\Delta = 5$ принимает следующий вид:

$$\begin{array}{c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c}
 b'_1 & 0 & 0 & 0 & c'_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
 a'_2 & b'_2 & 0 & 0 & c'_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
 a'_3 & 0 & b'_3 & 0 & c'_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
 a'_4 & 0 & 0 & b'_4 & c'_4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
 a'_5 & 0 & 0 & 0 & b'_5 & c'_5 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
 \hline
 0 & 0 & 0 & 0 & a'_6 & b'_6 & 0 & 0 & 0 & c'_6 & \dots \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a'_7 & b'_7 & 0 & 0 & c'_7 & \dots \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a'_8 & 0 & b'_8 & 0 & c'_8 & \dots \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a'_9 & 0 & 0 & b'_9 & c'_9 & \dots \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a'_{10} & 0 & 0 & 0 & b'_{10} & \dots \\
 \hline
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots
 \end{array} \quad (6)$$

Далее из первой и последней строк каждой группы формируется вспомогательная матрица малой размерности, которая тоже имеет трехдиагональную структуру. С помощью метода прогонки вычисляются соответствующие элементы x_i ($i = i_{\min}$ и $i = i_{\max}$ для каждой группы), на основе которых рекурсивно рассчитываются остальные элементы вектора X внутри каждой группы. Все расчеты по преобразованию матрицы и поиску решений внутри каждой группы осуществляются назначенным ей процессором (MPI-процессом) в параллельном режиме. Нераспараллеливаемая часть алгоритма включает в себя расчеты, связанные с формированием вспомогательной матрицы и вычислением соответствующих ей решений. Эти вычисления проводятся на процессоре с номером $p = 0$. Взаимодействие между процессами необходимо на этапе сборки вспомогательной матрицы и на этапе рассылки полученных решений. Используются следующие процедуры MPI: Gather, Scatter, Reduce, Send, Recv.

Для реализации алгоритма разбиений удобно записать три диагонали матрицы (4) и вектор правой части в виде четырех столбцов — a , b , c и d . Преобразование матрицы \hat{A} в форму \hat{A}' осуществляется “на месте”, т.е. новые значения замещают соответствующие старые, а те элементы, для которых замещение не указано, сохраняют прежние значения. Преобразование осуществляется независимо каждым вычислительным узлом в два этапа.

На первом этапе преобразование двух смежных уравнений с номерами i и $i + 1$ в каждом фрагменте осуществляется по формулам

$$\begin{aligned}
 a_i^{\text{new}} &= a_i/b_i, & c_i^{\text{new}} &= c_i/b_i, & d_i^{\text{new}} &= d_i/b_i, \\
 b_{i+1}^{\text{new}} &= b_{i+1} - c_i a_{i+1}, & d_{i+1}^{\text{new}} &= d_{i+1} - d_i a_{i+1}, & a_{i+1}^{\text{new}} &= -a_i a_{i+1},
 \end{aligned}$$

где i последовательно принимает значения от $i_{\min} + 1$ до $i_{\max} - 1$.

На втором этапе осуществляется преобразование строк в обратном порядке:

$$a_i^{\text{new}} = a_i - a_{i+1} c_i, \quad d_i^{\text{new}} = d_i - d_{i+1} c_i, \quad c_i^{\text{new}} = -c_{i+1} c_i.$$

Здесь i последовательно “пробегает” значения от $i_{\max} - 2$ до $i_{\min} + 1$.

Вычисление коэффициентов первого уравнения в каждом фрагменте осуществляется по формулам (здесь $i = i_{\min}$):

$$b_i^{\text{new}} = b_i - a_{i+1} c_i, \quad d_i^{\text{new}} = d_i - d_{i+1} c_i, \quad c_i^{\text{new}} = -c_{i+1} c_i.$$

Процессору с номером $p = 0$ передаются первые и последние ($i = i_{\min}$ и $i = i_{\max}$) строки каждого блока преобразованной системы (6). Получаемая в результате вспомогательная система уравнений размера $2P \times$

$2P$ имеет трехдиагональную структуру. Для $\Delta = 5$ она выглядит следующим образом:

$$\begin{bmatrix} b'_1 & c'_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ a'_5 & b'_5 & c'_5 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a'_6 & b'_6 & c'_6 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a'_{10} & b'_{10} & c'_{10} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & a'_{N-4} & b'_{N-4} & c'_{N-4} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & b'_N & c'_N \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_5 \\ x_6 \\ x_{10} \\ \dots \\ x_{N-4} \\ x_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d'_1 \\ d'_5 \\ d'_6 \\ d'_{10} \\ \dots \\ d'_{N-4} \\ d'_N \end{bmatrix}. \tag{7}$$

Решение системы (7) осуществляется методом прогонки. Вычисленные компоненты вектора \mathbf{X} нулевой процессор рассылает остальным вычислительным узлам. Используя полученные значения, все процессоры рекурсивно вычисляют остальные компоненты вектора \mathbf{X} в назначенных им блоках.

5. Обсуждение численных результатов. Программная реализация представленной вычислительной схемы выполнена на языке C++ с использованием технологии параллельного программирования MPI. Затраты времени в методе разбиений при решении системы l алгебраических уравнений (4) с использованием P параллельных MPI-процессов можно приближенно оценить как

$$T(N, P) \sim A_{\Delta}N/P + B_0P + C_t(P, N). \tag{8}$$

Первое слагаемое отражает затраты каждого MPI-процесса на обработку на каждом шаге назначенного ему фрагмента на первом и заключительном этапах метода разбиений. Второе слагаемое отражает затраты на решение процессом $p = 0$ малой системы (7) размера $2P \times 2P$, которые растут пропорционально P , а также пропорциональные P затраты на межпроцессорный обмен, объем которого в данном алгоритме имеет для каждого процесса фиксированный размер. При больших N и относительно небольших P можно ожидать уменьшения времени счета пропорционально $1/P$. Третье слагаемое в оценке (8) “отвечает” за нелинейную часть временных затрат на межпроцессорный обмен, зависящий, вообще говоря, от архитектуры конкретной вычислительной системы. Представленные в конце этого раздела расчеты подтверждают соответствие реальных временных затрат оценке (8) и незначительный вклад третьего слагаемого при $P \leq 12$.

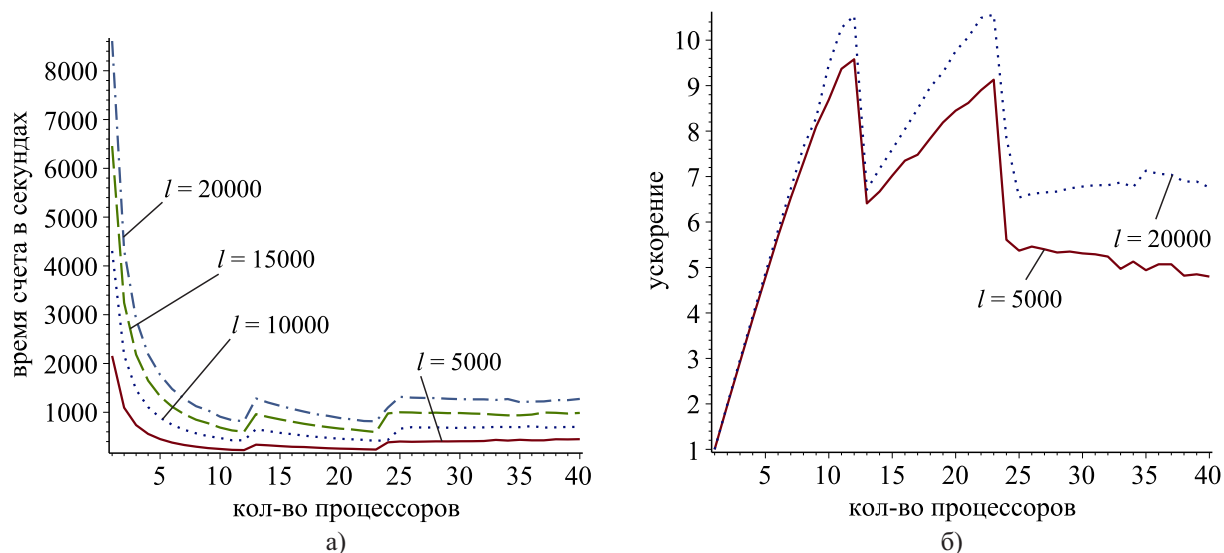


Рис. 1. Зависимость длительности вычислений от количества параллельных процессоров (MPI-процессов) при различном количестве узлов дискретной сетки по пространственной координате x (а); ускорение вычислений при увеличении числа процессоров при различном количестве узлов дискретной сетки по x (б). Количество шагов по временной координате t равно 2 000 000

В ходе вычислительных экспериментов на многопроцессорном кластере ЦИВК (Центральный информационно-вычислительный комплекс лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований, Дубна) выявлены закономерности зависимостей времени счета от количества параллельных вычислительных узлов при различном выборе параметров конечно-разностной схемы.

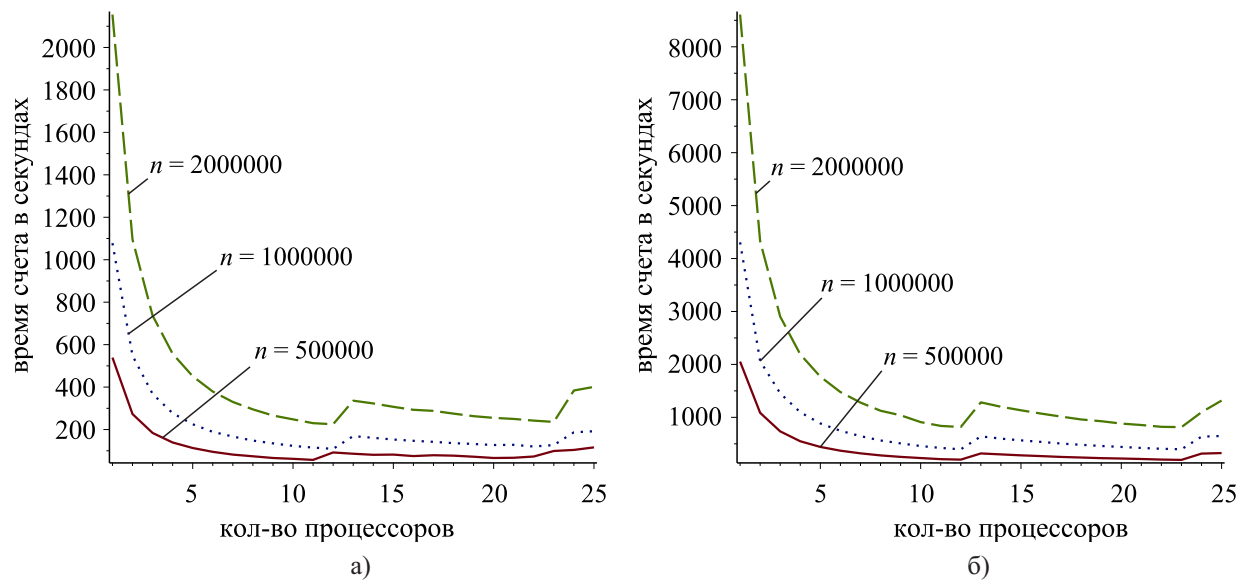


Рис. 2. Зависимость длительности вычислений от числа процессоров при различном количестве шагов по временной координате t . Количество шагов по пространственной координате $l = 5000$ (а) и $l = 20000$ (б)

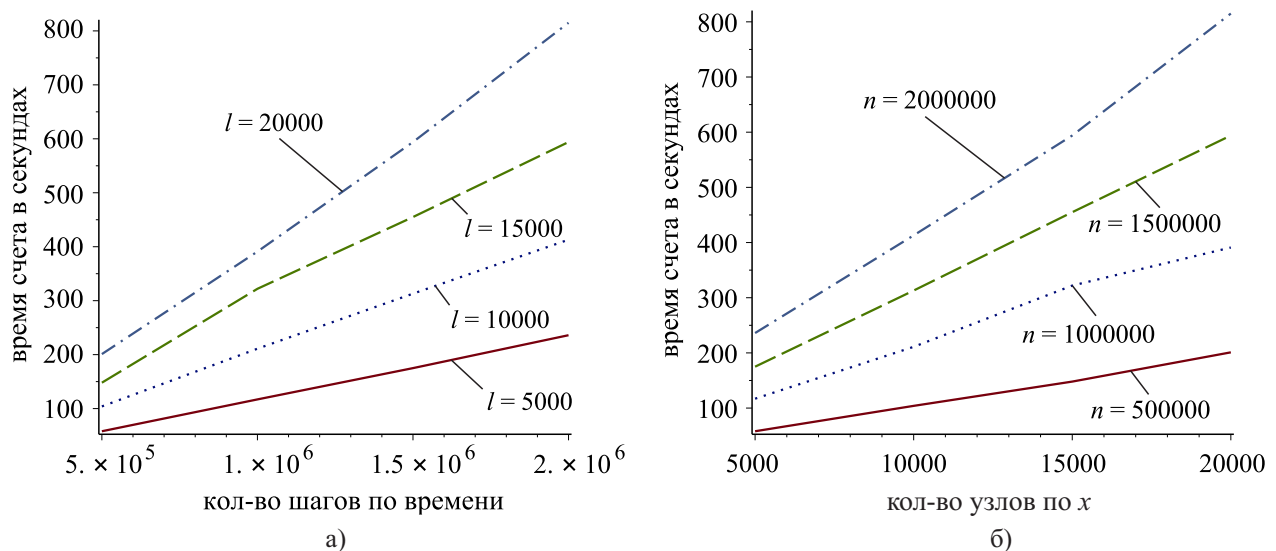


Рис. 3. Зависимость длительности вычислений от количества шагов по t при разных значениях l (а) и от количества узлов дискретной сетки по x при разных n (б). Расчеты проведены для фиксированного числа параллельных процессоров $P = 23$

Проведенные расчеты с числом процессоров от 1 до 40 при различных значениях l (число узлов дискретной сетки по x) представлены на рис. 1. Количество шагов по t здесь равно $n = 2000000$.

При изменении количества процессоров от 1 до 12 имеет место уменьшение времени счета с ростом числа параллельных вычислительных узлов по гиперболическому закону (рис. 1а). Далее уменьшение времени счета замедляется, а при $P = 13$ и $P = 24$ наблюдается скачкообразное увеличение времени счета с последующим плавным снижением. Эта закономерность прослеживается при различных значениях l . При этом для $l = 5000$ минимальное время счета достигается на 12 процессорах, в то время как для большего значения l минимум временных затрат происходит при $P = 23$.

Аналогичные скачки, по-видимому связанные с особенностями архитектуры используемого многопроцессорного кластера, видны при указанных значениях P и на графике ускорения вычислений в зависимости от числа параллельных вычислительных узлов (рис. 1б). Видно, что максимальное ускорение вычислений по сравнению с расчетами в однопроцессорном режиме составляет примерно 10.

На рис. 2 приведены результаты расчетов с $l = 5000$ (рис. 2а) и $l = 20000$ (рис. 2б) для различного числа шагов по t в зависимости от количества параллельных вычислительных узлов P (от 1 до 25). В

случае $l = 5000$ и $n = 2\,000\,000$ минимальное значение времени счета достигается при $P = 12$ (рис. 2). С уменьшением n до $500\,000$ наблюдается смещение минимума к $P = 11$. При $l = 20\,000$ наблюдается два минимума: на 12 и 23 процессорах, глубина которых незначительно варьируется при изменении n . На рис. 3 представлена зависимость времени счета от n для различных значений l и зависимость времени счета от l для различных n при фиксированном значении $P = 23$. Видно, что при увеличении количества шагов по t время расчета растет быстрее с ростом количества узлов по x , причем рост временных затрат более интенсивный при $l = 20\,000$. При увеличении l временные затраты растут быстрее с ростом n .

Подгонка параметров A_Δ и B_0 в формуле (4) в предположении $C_t(P, l) = 0$ ($l = N + 1$) по совокупности T_{lP} результатов вычислительных экспериментов при $n = 2\,000\,000$ и $P \leq 12$ путем минимизации по A_Δ и B_0 величины χ^2 , задаваемой формулой

$$\chi^2 = \sum \frac{(T_{lP} - T(l, P))^2}{T_{lP}}$$

дала значения $A_\Delta = 0.4331$ и $B_0 = 3.9995$ при доверительной вероятности (confidence level) $CL = 0.999$.

6. Заключение. Можно констатировать, что применение метода разбиений в рассмотренной здесь задаче оказалось вполне эффективным. При этом разработанная ранее и хорошо себя зарекомендовавшая вычислительная схема, описанная в разделе 3, осталась неизменной. Достигнутое ускорение в целом соответствует результатам, обычно получаемым при параллельной реализации типовых разностных методов для пространственно одномерных дифференциальных уравнений в частных производных (см., например, [9, 10]). Для сравнения приведем также работу [11], где метод разбиений реализован в рамках численного исследования известной в астрофизике системы уравнений Янга–Миллса с дилатонным полем. С точки зрения математической постановки задача представляет собой систему двух нелинейных пространственно одномерных волновых уравнений с соответствующими граничными и начальными условиями и решается на основе консервативной конечно-разностной схемы с применением итерационного метода на каждом временном слое. Решение системы линейных алгебраических уравнений на каждой итерации осуществляется с использованием алгоритма, аналогичного описанному в разделе 4. При расчетах на кластере ЦИВК при использовании семи MPI-процессов в упомянутой работе [11] достигалось приблизительно 4-кратное ускорение. В наших расчетах в этом же случае ускорение составляет 6.7 раз.

Вычисления показывают, что при числе узлов дискретной сетки по пространственной координате $l \leq 5000$ и $l > 5000$ минимальное время счета достигается соответственно при $P = 12$ и $P = 23$. При этом, поскольку разница между временами счета для случаев $P = 12$ и $P = 23$ невелика, оптимальным для данной задачи можно считать использование 12 процессоров. По результатам представленных расчетов можно сделать вывод, что использование алгоритма разбиений для параллельной оптимизации метода численного решения системы нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, описывающей динамическую модель полярона, позволяет фактически на порядок сократить затраты компьютерного времени и тем самым повысить эффективность дальнейшего численного исследования механизмов формирования сольватированных электронов в различных конденсированных средах.

Авторы признательны Стрельцовой О.И. и Зуеву М.И. за предоставленные материалы по алгоритму разбиений. Авторы благодарят Пузынина И.В. и Пузынину Т.П. за внимание к работе и полезные замечания. Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант 13-01-00060а).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Lakhno V.D.* Dynamical polaron theory of the hydrated electron // *Chem. Phys. Lett.* 2007. **437**. 198–202.
2. *Long F.H., Lu H., Eiselthal K.B.* Femtosecond studies of the presolvated electron: an excited state of the solvated electron? // *Physical Review Letters*. 1990. **64**, N 12. 1469–1472.
3. *Волохова А.В., Земляная Е.В., Лазно В.Д., Амирханов И.В., Пузынин И.В., Пузынина Т.П.* Компьютерное моделирование формирования состояний гидратированного электрона // *Вестник РУДН, серия: Математика. Информатика. Физика*. М.: Изд-во Российского университета дружбы народов, 2014. № 2. 244–247.
4. *Волохова А.В., Земляная Е.В., Лазно В.Д., Амирханов И.В., Пузынин И.В., Пузынина Т.П.* Численное исследование фотовозбужденных поляронных состояний в воде // *Компьютерные исследования и моделирование*. 2014. **6**, № 2. 253–261.
5. *Лазно В.Д., Волохова А.В., Земляная Е.В., Амирханов И.В., Пузынин И.В., Пузынина Т.П.* Поляронная модель формирования состояний гидратированного электрона // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2015. № 1. 82–87.
6. *Березин И.С., Жидков Н.П.* Методы вычислений. Т. 2. М.: Наука, 1959.

7. Амирханов И.В., Земляная Е.В., Лакно В.Д., Музафаров Д.З., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Шарипов З.А. Математическое моделирование эволюции поляронных состояний // Поверхность: рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2011. № 1. 66–70.
8. Wang H.H. A parallel method for tridiagonal equations // ACM Trans. Math. Software. 1981. N 7. 170–183.
9. Баркалов К.А. Методы параллельных вычислений. Н. Новгород: Изд-во Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского, 2011.
10. Старченко А.В., Данилкин Е.А., Лаева В.И., Проханов С.А. Практикум по методам параллельных вычислений. Серия: Суперкомпьютерное образование. М.: Изд-во МГУ, 2010.
11. Айрян Э.А., Буша Я., Донец Е.Е., Покорны И., Стрельцова О.И. Численное исследование распада возмущенных стационарных решений системы уравнений Янга–Миллса с дилатоном с использованием технологии MPI // Математическое моделирование. 2005. 17, № 6. 103–121.

Поступила в редакцию
24.03.2015

A Parallel Optimization Method for Numerical Solving the System of Polaron Equations Using the Partitioning Algorithm

A. V. Volokhova¹, E. V. Zemlyanaya², and V. S. Rikhvitskiy³

¹ Joint Institute for Nuclear Research, Laboratory of Information Technologies; ulitsa Joliot-Curie 6, Dubna, 141980, Russia; Junior Scientist, e-mail: volokhova@jinr.ru

² Joint Institute for Nuclear Research, Laboratory of Information Technologies; ulitsa Joliot-Curie 6, Dubna, 141980, Russia; Dr. Sci, Leading Scientist, e-mail: elena@jinr.ru

³ Joint Institute for Nuclear Research, Laboratory of Information Technologies; ulitsa Joliot-Curie 6, Dubna, 141980, Russia; Leading Programmer, e-mail: rqvtsk@jinr.ru

Received March 24, 2015

Abstract: The previously developed method for the numerical simulation of the formation of polaron states in condensed media is modified using the partitioning algorithm, which provides a significant speedup in the parallel computations on multiprocessor systems. The software implementation is based on the MPI technology. Numerical results obtained on the multiprocessor cluster installed at the Laboratory of Information Technologies (Joint Institute for Nuclear Research, Dubna) with various numbers of processors and with various computational parameters show that the proposed approach is efficient for the numerical solution of the system of nonlinear differential equations describing the polaron dynamical model.

Keywords: hydrated electron, polaron model, finite-difference schemes, parallel algorithms, parallel computing, multiprocessor computer systems.

References

1. V. D. Lakhno, “Dynamical Polaron Theory of the Hydrated Electron,” Chem. Phys. Lett. **437** (4–6), 198–202 (2007).
2. F. H. Long, H. Lu, and K. B. Eisenthal, “Femtosecond Studies of the Presolvated Electron: An Excited State of the Solvated Electron?,” Phys. Rev. Lett. **64** (12), 1469–1472 (1990).
3. A. V. Volokhova, E. V. Zemlyanaya, V. D. Lakhno, et al., “Numerical Simulation of the Hydrated Electron Formation,” Vestn. Ross. Univ. Druzhby Narodov, Ser.: Mat. Inform. Fiz., No. 2, 244–247 (2014).
4. A. V. Volokhova, E. V. Zemlyanaya, V. D. Lakhno, et al., “Numerical Investigation of Photoexcited Polaron States in Water,” Komp’yut. Issled. Modelir. **6** (2), 253–261 (2014).
5. V. D. Lakhno, A. V. Volokhova, E. V. Zemlyanaya, et al., “Polaron Model of the Formation of Hydrated Electron States,” Poverkhnost No. 1, 82–87 (2015) [J. Surf. Invest.: X-ray, Synchrotron Neutron Tech. **9** (1), 75–80 (2015)].
6. I. S. Berezin and N. P. Zhidkov, *Computing Methods* (Nauka, Moscow, 1959; Oxford, Pergamon, 1965).
7. I. V. Amirkhanov, E. V. Zemlyanaya, V. D. Lakhno, et al., “Mathematical Modeling of the Evolution of Polaron States,” Poverkhnost No. 1, 66–70 (2011) [J. Surf. Invest.: X-ray, Synchrotron Neutron Tech. **5** (1), 60–64 (2011)].

8. H. H. Wang, "A Parallel Method for Tridiagonal Equations," *ACM Trans. Math. Softw.* **7** (2), 170–183 (1981).
9. K. A. Barkalov, *Methods of Parallel Computing* (Lobachevsky Nizhny Novgorod Univ., Nizhny Novgorod, 2011) [in Russian].
10. A. V. Starchenko, E. A. Danilkin, V. I. Laeva, and S. A. Prokhanov, *Practical Course on Parallel Computing Techniques* (Mosk. Gos. Univ., Moscow, 2010) [in Russian].
11. E. A. Hayryan, J. Buša, E. E. Donets, et al., "Numerical Studies of Perturbed Static Solutions Decay in the Coupled System of Yang–Mills–Dilaton Equations with Use of MPI Technology," *Mat. Model.* **17** (6), 103–121 (2005).