

УДК: 517.958

Вычислительная схема и параллельная реализация для моделирования системы длинных джозефсоновских переходов

М. В. Башашин^{1,2,a}, Е. В. Земляная^{1,2,b}, И. Р. Рахмонов¹,
Ю. М. Шукринов^{1,2}, П. Х. Атанасова³, А. В. Волохова¹

¹Объединенный институт ядерных исследований
Россия, 141980, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6

²Государственный университет «Дубна»
Россия, 141980, г. Дубна, ул. Университетская, д. 19

³Университет «Паисий Хилендарский»
Болгария, 4003, г. Пловдив, ул. Цар Асен, д. 24

E-mail: ^a bashashinmv@jinr.ru, ^b elena@jinr.ru

Получено 12.04.2016, после доработки — 20.07.2016.

Принято к публикации 01.08.2016.

Рассматривается модель стека длинных джозефсоновских переходов (ДДП), состоящего из чередующихся сверхпроводящих слоев и слоев диэлектрика, с учетом индуктивной и емкостной связи между слоями. Модель описывается системой нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных относительно разности фаз и напряжения между соседними сверхпроводящими слоями в стеке ДДП, с соответствующими начальными и граничными условиями. Численное решение этой системы уравнений основано на использовании стандартных трехточечных конечно-разностных формул для дискретной аппроксимации по пространственной координате и применении четырехшагового метода Рунге–Кутты для решения полученной задачи Коши. Разработанный параллельный алгоритм реализован на основе технологии MPI (Message Passing Interface). В работе дана математическая постановка задачи в рамках рассматриваемой модели, описаны вычислительная схема и методика расчета вольт-амперных характеристик системы ДДП, представлены два варианта параллельной реализации. Продемонстрировано влияние индуктивной и емкостной связи между ДДП на структуру вольт-амперной характеристики в рамках рассматриваемой модели. Представлены результаты методических расчетов с различными параметрами длины и количества джозефсоновских переходов в стеке ДДП в зависимости от количества задействованных параллельных вычислительных узлов. Расчеты выполнены на многопроцессорных кластерах HybriLIT и ЦИВК Многофункционального информационно-вычислительного комплекса Лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований (Дубна). На основе полученных численных результатов обсуждается эффективность рассмотренных вариантов распределения вычислений для численного моделирования системы ДДП в параллельном режиме. Показано, что один из предложенных подходов приводит к ускорению вычислений до 9 раз по сравнению с расчетами в однопроцессорном режиме.

Ключевые слова: джозефсоновские переходы, конечно-разностные схемы, параллельные вычисления

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты 15-29-01217, 15-51-61011 и 16-52-45011) и Программы сотрудничества ОИЯИ (Дубна) с болгарскими научными центрами. П. Х. Атанасова благодарит грант NI15-FMI-004 за частичную поддержку.

UDC: 517.958

Numerical approach and parallel implementation for computer simulation of stacked long Josephson Junctions

M. V. Bashashin^{1,2,a}, E. V. Zemlyanaya^{1,2,b}, I. R. Rahmonov¹,
Yu. M. Shukrinov^{1,2}, P. Kh. Atanasova³, A. V. Volokhova¹

¹Joint Institute for Nuclear Research,
6 Joliot-Curie st., Dubna, 141980, Russia

²Dubna State University,
19 Universitetskaia st., Dubna, 141980, Russia

³University “Paisii Hilendarsky”,
24 Tzar Assen st., Plovdiv, 4003, Bulgaria

E-mail: ^a bashashinmv@jinr.ru, ^b elena@jinr.ru

Received 12.04.2016, after completion – 20.07.2016.

Accepted for publication 01.08.2016.

We consider a model of stacked long Josephson junctions (LJJ), which consists of alternating superconducting and dielectric layers. The model takes into account the inductive and capacitive coupling between the neighbor junctions. The model is described by a system of nonlinear partial differential equations with respect to the phase differences and the voltage of LJJ, with appropriate initial and boundary conditions. The numerical solution of this system of equations is based on the use of standard three-point finite-difference formulae for discrete approximations in the space coordinate, and the applying the four-step Runge-Kutta method for solving the Cauchy problem obtained. Designed parallel algorithm is implemented by means of the MPI technology (Message Passing Interface). In the paper, the mathematical formulation of the problem is given, numerical scheme and a method of calculation of the current-voltage characteristics of the LJJ system are described. Two variants of parallel implementation are presented. The influence of inductive and capacitive coupling between junctions on the structure of the current-voltage characteristics is demonstrated. The results of methodical calculations with various parameters of length and number of Josephson junctions in the LJJ stack depending on the number of parallel computing nodes, are presented. The calculations have been performed on multiprocessor clusters HybriLIT and CICC of Multi-Functional Information and Computing Complex (Laboratory of Information Technologies, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna). The numerical results are discussed from the viewpoint of the effectiveness of presented approaches of the LJJ system numerical simulation in parallel. It has been shown that one of parallel algorithms provides the 9 times speedup of calculations.

Keywords: Josephson junctions, finite difference approximation, parallel computing

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2016, vol. 8, no. 4, pp. 593–604 (Russian).

The work was funded by RFBR according to the research projects 15–29–01217, 15–51–61011 and 16–52–45011, and by the grant under the Program “JINR – Bulgaria”. The work of P. Kh. Atanasova was supported by project NI15-FMI-004.

Введение

Интерес к математическому моделированию физических процессов в стеках джозефсоновских переходов (ДП) обусловлен их многочисленными практическими приложениями в сверхпроводящей электронике [Welp, Kadovaki, Kleiner, 2013]. В том числе обсуждается возможность использования ДП в качестве элементной базы для квантовых процессоров [Михайлов, Халабия, 2010] и сверхпроводящей компьютерной памяти¹. Обнаруженный в последние годы эффект мощного когерентного электромагнитного излучения в терагерцовой области частот из системы ДП открывает дополнительные возможности использования таких систем [Welp, Kadovaki, Kleiner, 2013]. Экспериментальные и теоретические исследования слоистых джозефсоновских структур интенсивно проводятся в настоящее время в российских и зарубежных научных центрах.

В недавней работе [Рахронов и др., 2014] предложена обобщенная модель системы длинных джозефсоновских переходов (ДДП), впервые учитывающая одновременно индуктивную и емкостную связь между ДДП, а также диффузионный ток. Численное решение соответствующей системы нелинейных уравнений и исследование на этой основе физических характеристик стека ДДП в зависимости от параметров модели требуют существенных затрат компьютерного времени. Это делает актуальным развитие эффективных методов параллельной реализации для организации численного исследования на многопроцессорных вычислительных системах. Целью настоящей работы является разработка и проверка эффективности параллельной вычислительной схемы для моделирования физических процессов в системе ДДП в рамках вышеуказанной модели. Дана математическая постановка задачи, описана вычислительная схема, рассмотрены два варианта распределения вычислений при расчетах в параллельном режиме. На основе проведенных расчетов обсуждается эффективность параллельной реализации на базе технологии MPI. Показано, что разработанный подход приводит к заметному ускорению вычислений.

1. Математическая постановка задачи

Одиночный ДДП типа SIS (сверхпроводник–изолятор–сверхпроводник) представляет собой «сэндвич», состоящий из двух слоев сверхпроводящего металла, разделенных тонким слоем диэлектрика. ДП находится в однородном магнитном поле H_e , направленном перпендикулярно длине контакта L . Толщина и ширина ДП предполагаются пренебрежимо малыми по сравнению с L . Под действием внешнего тока I при определенных условиях возникает так называемый эффект Джозефсона: явление протекания сверхпроводящего тока через диэлектрический слой.

Разность фаз $\varphi(t, x)$ между сверхпроводящими слоями описывается уравнением синус-Гордона (см., например, [Гальперн, Филиппов, 1984]):

$$\varphi'' - \ddot{\varphi} - \beta\dot{\varphi} = \sin \varphi - I, \quad t > 0, \quad x \in (0, L) \quad (1)$$

с граничными условиями

$$\varphi'(t, 0) = \varphi'(t, L) = H_e. \quad (2)$$

Здесь и далее штрих означает производную по координате x вдоль длины ДП, точка — производную по времени t , β — коэффициент диссипации. Свойства сосуществующих статических режимов модели, описываемой уравнением (1), в зависимости от магнитного поля H_e исследовались, например, в [Atanasova et al., 2012].

Переходя к рассмотрению системы связанных ДДП, состоящей из $N+1$ сверхпроводящих слоев длины L с промежуточными диэлектрическими слоями, и учитывая индуктивную и емкостную связь между ДП, получаем систему N уравнений относительно разностей фаз φ_l на

¹ <https://hi-tech.mail.ru/news/force-memory>

каждом l -м ДП ($l = 1, \dots, N$), которая в матричном виде может быть записана следующим образом:

$$\mathbf{L}^{-1}\Phi'' - \mathbf{C}^{-1}\dot{\Phi} - \beta\dot{\Phi} = \sin\Phi - \mathbf{I}, \quad \Phi'(t, 0) = \Phi'(t, L) = \mathbf{H}_e, \quad (3)$$

где $\Phi = (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N)^T$, $\mathbf{I} = (I, I, \dots, I)^T$, $\mathbf{H}_e = (H_e, H_e, \dots, H_e)^T$, \mathbf{L} и \mathbf{C} — матрицы индуктивной и емкостной связи, имеющие вид

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & S & 0 & \dots & & S \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & 0 & S & 1 & S & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ S & & \dots & 0 & S & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C} = \begin{pmatrix} D_c & s_c & 0 & \dots & & s_c \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & 0 & s_c & D_c & s_c & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ s_c & & \dots & 0 & s_c & D_c \end{pmatrix}, \quad (4)$$

S — параметр индуктивной связи, принимающий значения в области $-0.5 < S \approx 0$, $s_c < 0$ — параметр емкостной связи, $D_c \approx 1 + 2|s_c|$ — эффективная электрическая толщина ДП, нормированная на толщину диэлектрического слоя.

Полагая

$$\mathbf{V} = \mathbf{C}^{-1}\dot{\Phi}, \quad \mathbf{V} = (V_1, V_2, \dots, V_N)^T, \quad (5)$$

переходим к системе

$$\begin{cases} \dot{\Phi} = \mathbf{C}\mathbf{V}, \\ \dot{\mathbf{V}} = \mathbf{L}^{-1}\Phi'' - \beta\dot{\Phi} - \sin\Phi + \mathbf{I} \end{cases} \quad (6)$$

или

$$\begin{cases} \frac{\partial\varphi_l}{\partial t} = D_c V_l + s_c V_{l+1} + s_c V_{l-1}, \\ \frac{\partial V_l}{\partial t} = \sum_{n=1}^N \left(\mathcal{E}_{l,n}^{-1} \frac{\partial^2 \varphi_n}{\partial x^2} \right) - \sin\varphi_l - \beta \frac{\partial\varphi_l}{\partial t} + I. \end{cases} \quad (7)$$

Здесь φ_l и V_l — соответственно разности фаз и напряжения на ДП с номерами $l = 1, \dots, N$, $\mathcal{E}_{l,n}^{-1}$ — элементы матрицы \mathbf{L}^{-1} , $V_0 = V_N$, $V_{N+1} = V_1$. Отметим, что в отличие от ряда других работ (см., например, [Sakai et al., 1993]) в предложенной в [Рахмонов и др., 2014] модели учитывается диффузионный ток, возникающий в присутствии емкостной связи за счет разности обобщенных скалярных потенциалов между переходами, что приводит к наличию производных $\frac{\partial\varphi_l}{\partial t}$ во втором уравнении системы (7) [Шукринов, Рахмонов, 2012].

В формулировке (7) напряжение V_l на каждом переходе с номером l вычисляется непосредственно в ходе численного решения системы (7), что упрощает вычисление зависящих от V_l физических характеристик, включая расчет вольт-амперной характеристики (см. § 2).

Все величины безразмерные. Связь с размерными физическими величинами, а также подробное изложение теоретических аспектов формирования системы (7) рассматриваются в [Рахмонов и др., 2014].

2. Расчет вольт-амперных характеристик

Одной из главных физических характеристик системы ДДП, наблюдаемых в экспериментах, является вольт-амперная характеристика (ВАХ). Она отражает динамику изменения суммированного по всем ДП напряжения, усредненного по длине ДП и по времени, при изменении внешнего тока I . Как правило, процедура расчета ВАХ основана на вычислении при каждом фиксированном значении I усредненных напряжений на каждом ДП посредством вычисления

интегралов (см., например, [Рахмонов и др., 2014; Goldobin et al., 2007] и цитируемую в этих работах литературу)

$$\bar{V}_I(t) = (1/L) \int_0^L V_I(x, t) dx \quad (8)$$

и

$$\langle V_I \rangle = 1/(T_{\max} - T_{\min}) \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \bar{V}_I(t) dt. \quad (9)$$

Далее осуществляется суммирование усредненных напряжений по всем ДП:

$$\langle V \rangle = \sum_{I=1}^N \langle V_I \rangle. \quad (10)$$

Расчеты начинаются при $I = I_{\min} \sim 0$ с нулевыми начальными условиями. Значение тока увеличивается до $I_{\max} > 1$ с шагом ΔI и затем уменьшается до нуля. При необходимости в выделенных интервалах расчет может проводиться с более мелким шагом по току. В процессе счета к току может добавляться шум порядка $\delta I = 10^{-8}$. Для каждого значения I расчет проводится до времени T_{\max} . Далее полученные значения напряжения и разности фаз используются в качестве начальных условий при расчете для следующего значения I . Из формы системы (7) легко видеть, что при указанной процедуре вычислений на этапе увеличения I от 0 до 1 $V_I(t, x)$ и, следовательно, $\langle V \rangle$ будут равны 0. При $I > 1$ происходит скачкообразное увеличение $\langle V \rangle$, далее $\langle V \rangle$ плавно растет при увеличении I до I_{\max} . При уменьшении I от I_{\max} до нуля величина $\langle V \rangle$ также уменьшается. При этом участки монотонного убывания $\langle V \rangle$ могут чередоваться с участками ступенькообразной формы, соответствующими ветвям различных состояний системы ДП [Pedersen, Welner, 1984].

Исследование ВАХ в зависимости от параметров модели представляет интерес как для получения фундаментальных знаний о свойствах слоистых сверхпроводящих структур, так и с точки зрения упомянутых во введении практических приложений. Структура ВАХ определяется параметрами системы ДП, в том числе длиной и количеством ДП. Теоретические закономерности поведения ВАХ для случая одиночного ДП ($N = 1$) рассмотрены в [Pedersen, Welner, 1984; McLaughlin, Scott, 1978; Lin, Hu, 2008]. В общем случае исследование полной структуры ВАХ может проводиться только на основе компьютерного моделирования.

3. Вычислительная схема

Для численного решения системы (7) вводится равномерная дискретная сетка по пространственной координате x с шагом Δx и по координате времени t с шагом Δt . Аппроксимация производных по пространственной координате производится с использованием стандартных трехточечных конечно-разностных формул. Полученная в результате система обыкновенных дифференциальных уравнений относительно значений разностей фаз φ_I и напряжений V_I в узлах дискретной сетки по x решается численно с использованием четырехшагового метода Рунге–Кутты (РК). Для вычисления интегралов (8) и (9) используются соответственно квадратурные формулы Симпсона и прямоугольников.

Описанная здесь вычислительная схема и соответствующий компьютерный код успешно прошли апробацию путем сравнения полученных на этой основе результатов с результатами других авторов и с расчетами в рамках другого подхода, основанного на решении задачи (3), с применением явной конечно-разностной схемы второго порядка по x и по t [Rahmonov et al., 2012].

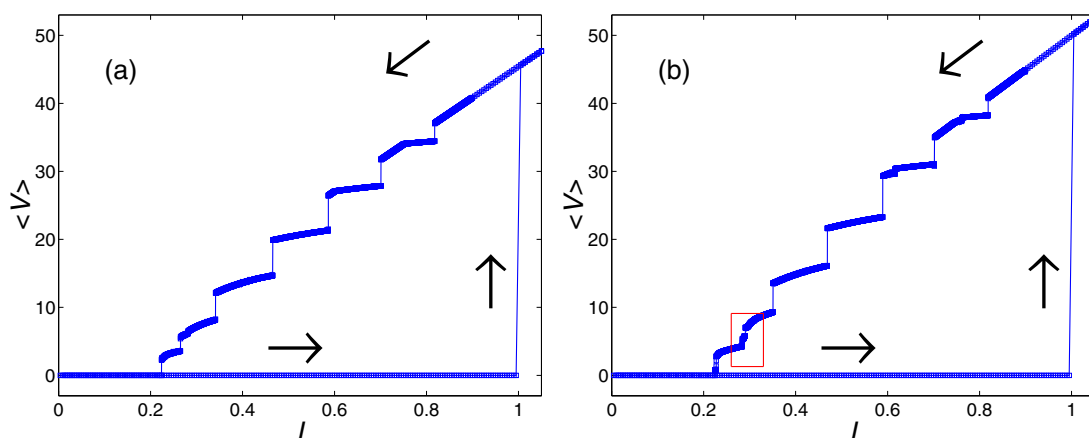


Рис. 1. ВАХ для случая системы ДП с $N = L = 10$, $\beta = 0.2$. Расчет сделан (а) без учета связи между ДП ($S = s_c = 0$) и (б) с учетом связи между ДП при $S = -0.05$, $s_c = -0.05$. Выделенная прямоугольная область демонстрирует появление новых ступеней при учете связи между ДП. Стрелки показывают последовательность изменения $\langle V \rangle$ при увеличении и уменьшении тока

Все представленные в данной работе расчеты выполнены при $H_e = 0$. Вычисления проводились при $\Delta x = 0.05$, $\Delta t = \Delta x/5$. При вычислении ВАХ использовались параметры $I_{\min} = 0.01$, $I_{\max} = 1.1$, $T_{\min} = 50$.

На рис. 1, а показана ВАХ для случая $N = L = 10$, $\beta = 0.2$, $S = s_c = 0$, т. е. без учета связи между контактами. В этом случае система (7) представляет собой совокупность независимых уравнений, моделирующих систему 10 изолированных ДП, и полученная численно структура ВАХ согласуется с оценками [Pedersen, Welner, 1984; McLaughlin, Scott, 1978; Lin, Hu, 2008] для одиночных ДП, при этом величина $\langle V \rangle$ равняется умноженному на 10 значению $\langle V \rangle$ для случая $N = 1$. Шесть ступеней на ВАХ соответствуют ветвям флюксонных решений, где функция разности фаз имеет кинкообразную форму или форму связанного состояния двух и более кинков. С включением связи между ДП структура ВАХ усложняется, появляются дополнительные ступеньки, как это видно на рис. 1, б (см. выделенный фрагмент), где представлена ВАХ для случая $N = L = 10$, $\beta = 0.2$, $S = s_c = -0.05$.

В недавней работе [Рахмонов и др., 2016] показано, что в выделенной на рис. 2, б области ступеньки соответствуют состояниям с разным числом флюксонов в ДП с четными и нечетными номерами, причем мощность излучения в этой области, рассчитанная согласно [Krasnov, 2010], более чем в 4 раза превышает мощность излучения на соседних с выделенной областью ступеньках. Подробное исследование этого и других эффектов в зависимости от параметров индуктивной и емкостной связи выходит за рамки данной работы. Здесь мы отметим только, что расчет ВАХ, представленных на рис. 1, требует более 50 часов компьютерного времени при расчете в однопроцессорном режиме. (Расчеты выполнены при $\Delta I = 0.0001$, $T_{\max} = 200$.) Поэтому разработка методов повышения производительности расчетов ВАХ с использованием параллельных вычислений является актуальной задачей.

4. Параллельная реализация

На рис. 2 схематично показаны два возможных варианта распределения вычислений при параллельной реализации расчетов для стека длинных ДП. Параллельная реализация в обоих случаях выполнена с использованием технологии MPI. Остановимся сначала на параллельном алгоритме, представленном на рис. 2, а.

Алгоритм основан на распределении по параллельным MPI-процессам узлов дискретной сетки по координате вдоль длины ДП. Каждому процессу с номером P из задействованных в расчете P_m параллельных MPI-процессов назначается порция узлов дискретной сетки по x номерами $i_{\min} < i < i_{\max}$, где $i_{\min} = P \cdot L_x / P_m$, $i_{\max} = (P + 1) \cdot L_x / P_m$, $L_x = L / \Delta x$ — количество узлов дискретной сетки по x . При фиксированном l на каждом шаге по времени каждый P -й процесс в назначенных ему узлах в параллельном режиме вычисляет рекурсивно первый, второй, третий и четвертый коэффициенты РК и затем решения V_l и φ_l системы уравнений (7). Такой расчет на каждом шаге по времени производится для каждого ДП с номером l . В ходе вычислений между соседними процессами происходит обмен необходимыми им для дальнейших расчетов значениями коэффициентов РК и решений V_l , φ_l в граничных узлах $i = i_{\max}$ и i_{\min} , рассчитанных этими процессами порций узлов дискретной сетки: каждый процесс с номером $P < P_m - 1$ посылает свои результаты, полученные в узлах $i = i_{\max}$, процессу с номером $P + 1$. Каждый процесс с номером $P > 0$ посылает свои результаты, полученные в узлах $i = i_{\min}$, процессу с номером $P - 1$. При расчете ВАХ сначала каждым процессом вычисляются частичные суммы в соответствии с формулой Симпсона, далее производится сборка в 0-ой процесс, где и осуществляются окончательные вычисления ВАХ и запись в файлы. При необходимости аналогичным образом осуществляются расчеты других физических характеристик стека ДДП [Rahmonov et al., 2016].

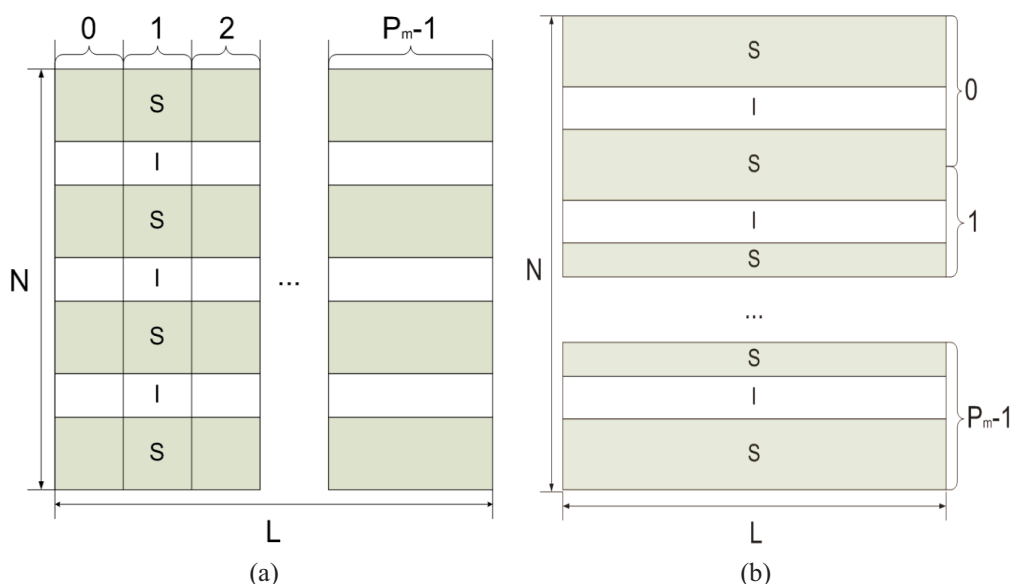


Рис. 2. Способы распределения вычислений при параллельном численном моделировании системы ДДП, состоящей из чередующихся суперпроводящих (S) и диэлектрических (I) слоев. (a) Распределение между P_m параллельными MPI-процессами узлов дискретной сетки по x . (b) Распределение между P_m параллельными MPI-процессами N джозефсоновских переходов

В таблице 1 приведена зависимость времени счета (в минутах) от числа P_m параллельных MPI-процессов при расчете с разными значениями N и L . Представленные здесь и далее расчеты выполнены при $\Delta I = 0.01$, $T_{\max} = 100$, $\beta = 0.1$, $S = -0.05$, $s_c = -0.05$. Расчеты проводились на многопроцессорном кластере ЦИВК¹ Многофункционального информационно-вычислительного комплекса Лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований. Общий объем вычислений, выполняемых каждым MPI-процессом на каждом шаге по времени, определяется количеством и длиной ДП, т. е. пропорционален $M = L_x \cdot N$. На рис. 3, а

¹ <http://lit.jinr.ru/view.php?var1=comp&var2=ccic&lang=lat&file=ccic/main&menu=ccic/menu>

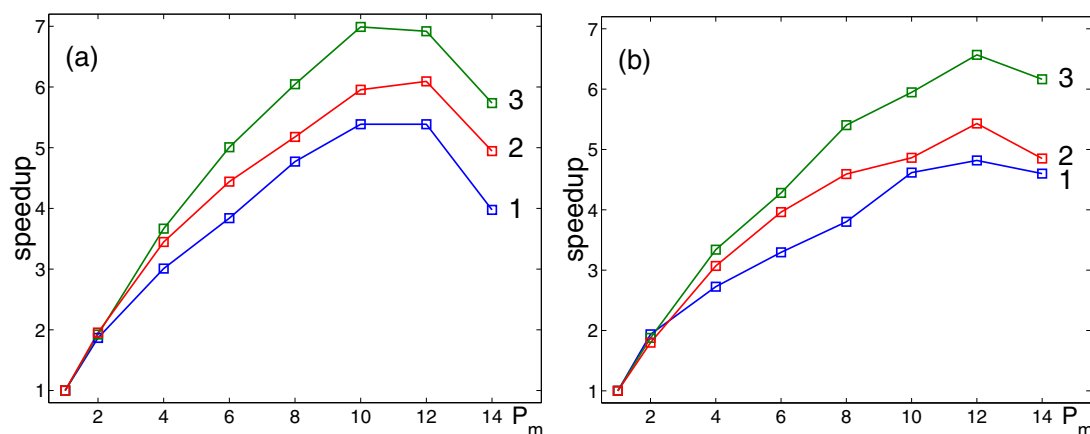


Рис. 3. Ускорение вычислений при расчетах ВАХ для модели длинных ДП с разными N и L , рассчитанное как отношение времени счета в однопроцессорном режиме ко времени счета при использовании P_m параллельных MPI-процессов. 1 — расчет для $L = 5$, $N = 10$; 2 — для $L = 10$, $N = 5$; 3 — $L = 10$, $N = 10$. (a) Расчеты на ЦИВК. (b) Расчеты на HybriLIT

показано ускорение, рассчитанное как отношение времени счета в однопроцессорном режиме ко времени счета при использовании P_m параллельных MPI-процессов.

Таблица 1. Зависимость времени счета (в минутах) от числа P_m параллельных MPI-процессов при расчете ВАХ системы ДП с разными значениями N и L . Расчеты на ЦИВК

L	N	M	$P_m = 1$	$P_m = 2$	$P_m = 4$	$P_m = 6$	$P_m = 8$	$P_m = 10$	$P_m = 12$	$P_m = 14$
5	10	5000	33.4	17.9	11.1	9	7	6.2	6.2	8.4
10	10	10000	67.1	34.9	18.3	13.4	11.1	9.6	9.7	11.7
10	5	5000	26.2	13.4	7.6	5.9	5.06	4.4	4.3	5.3

Из таблицы 1 и рис. 3, *a* видно, что ускорение вычислений составляет от 5 до 7 раз, причем его максимальное значение соответствует случаю с максимальным M , т.е. $N = L = 10$. Для каждой комбинации N и L наименьшее время счета T_{mintime} достигается на 10–12 процессорах, дальнейшее увеличение P_m не приводит к его уменьшению из-за возрастающих затрат на взаимодействие MPI-процессов. Таким образом, оптимальным является использование в расчетах $10 \leq P_m \leq 12$. Близкие значения ускорений получены при расчетах на *cpu-blade* гетерогенного кластера HybriLIT¹ Многофункционального информационно-вычислительного комплекса Лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований (см. рис. 2, *b*).

При увеличении M ускорение растет, достигая максимального значения ~ 9 , причем максимальное ускорение $T_{\text{mintime}}/T_{\text{time1}}$, где T_{time1} — время счета в однопроцессорном режиме, достигается при том же числе MPI-процессов $P_m = P_{\text{max}}$, $10 \leq P_{\text{max}} \leq 12$. Это видно в таблицах 2 и 3, где представлены зависимость максимального ускорения от длины ДП (точнее, от L_x) при фиксированном числе ДП $N = 10$ и зависимость максимального ускорения от N при фиксированной длине ДП.

С ростом длины ДП при фиксированном числе ДП объем вычислений, приходящихся на каждый процесс, растет, в то время как затраты на межпроцессорный обмен в ходе процедуры

¹ <http://hybrilit.jinr.ru>

Таблица 2. Зависимость максимального ускорения вычислений, получаемого на ЦИВК, от длины ДП при фиксированном числе ДП и число P_m параллельных MPI-процессов, на которых достигается максимум ускорения. Максимальное ускорение рассчитано как отношение времени счета в однопроцессорном режиме к минимальному времени счета, возможному для данного набора параметров при расчетах в параллельном режиме

L	N	M	P_{\max}	Максимальное ускорение
5	10	5000	10	5.4
10	10	10000	10	7.0
15	10	15000	12	8.54
20	10	20000	12	8.7
25	10	25000	12	8.92

Таблица 3. Зависимость максимального ускорения вычислений, получаемого на ЦИВК, от N при фиксированной длине ДП и число P_m параллельных MPI-процессов, на которых достигается максимум ускорения. Максимальное ускорение рассчитано как отношение времени счета в однопроцессорном режиме к минимальному времени счета, возможному для данного набора параметров при расчетах в параллельном режиме

L	N	M	P_{\max}	Максимальное ускорение
10	5	5000	12	6.09
10	10	10000	10	7.0
10	15	15000	10	7.82
10	20	20000	10	8.4
10	25	25000	10	7.64

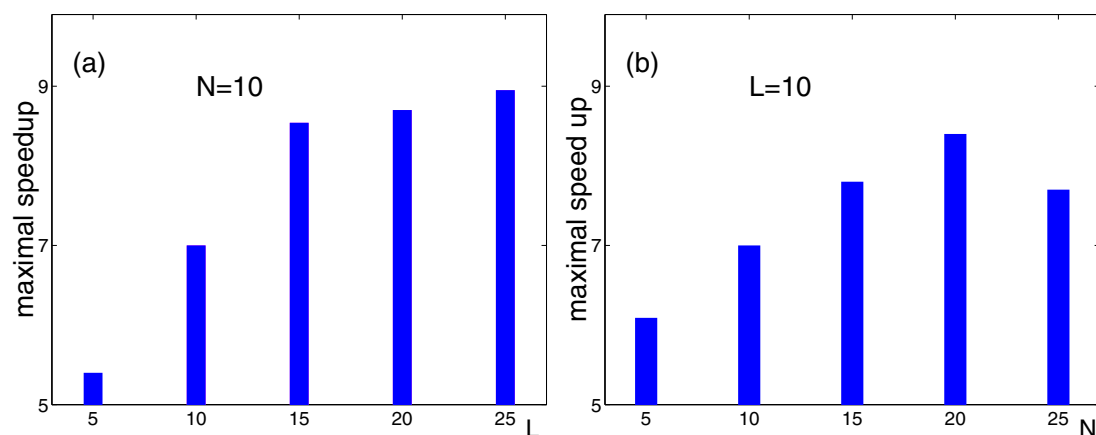


Рис. 4. Максимально достигаемое при расчетах на ЦИВК ускорение в зависимости (а) от длины ДП и (б) от числа ДП, рассчитанное как отношение времени счета в однопроцессорном режиме к минимальному времени счета, возможному для данного набора параметров при расчетах в параллельном режиме

РК остаются прежними. Поэтому, как видно рис. 4, а, максимальное ускорение сначала растет пропорционально объему вычислений M , затем рост замедляется, стремясь к некоторому предельному значению. С другой стороны, с ростом N при фиксированной длине ДП объем вычислений растет так же, как в предыдущем случае, при этом объем взаимодействий между процессами растет пропорционально N . Поэтому на рис. 4, б при увеличении N мы видим

уменьшение максимального ускорения, хотя величина M имеет в таблице 2 и таблице 3 одинаковые значения.

Для случая, когда число задействованных параллельных процессов P_m относительно невелико и не превышает N , возможен другой параллельный алгоритм, основанный на распределении между параллельными процессами с номерами P расчетов на ДП с номерами $l_{\min} \leq l < l_{\max}$ (см. рис. 2, *b*). Здесь $l_{\min} = P \cdot N / P_m$, $l_{\max} = (P + 1) \cdot N / P_m$. Каждому P -му процессу назначаются расчеты коэффициентов РК и решений V_l и φ_l системы уравнений (7) для этих номеров l . К сожалению, данный подход не слишком эффективен, поскольку коэффициенты РК рассчитываются рекурсивно, и при расчете каждого следующего коэффициента в определенном узле $x = x_i$ каждый процесс должен «знать» значения предыдущих коэффициентов в этом узле для всех $l = 1, \dots, N$. Поэтому после расчета каждого коэффициента для ДП с номером l вычисливший его процесс осуществляет рассылку всем остальным процессам, что требует существенных затрат времени на взаимодействие процессов и делает алгоритм малоэффективным. В самом деле, расчеты при $N = L = 10$ показывают, что при увеличении числа параллельных процессов время счета сокращается менее чем в два раза (см. таблицу 4), в то время как предыдущий алгоритм, подробно описанный в начале параграфа, обеспечивает при этих же параметрах ускорение в 7 раз (для сравнения эти результаты также приведены в таблице 4).

Таблица 4. Зависимость времени счета (в минутах) от числа P_m параллельных MPI-процессов при расчете ВАХ для двух разных методов параллельной реализации, показанных на рис. 2, *a* и рис. 2, *b*

алгоритм	L	N	$P_m = 1$	$P_m = 2$	$P_m = 4$	$P_m = 6$	$P_m = 8$	$P_m = 10$
рис. 2, <i>b</i>	10	10	67.1	42.6	39.2	39.3	42.9	41.5
рис. 2, <i>a</i>	10	10	67.1	34.9	18.3	13.4	11.1	9.6

Заключение

Можно констатировать, что цель работы, состоящая в корректной и максимально эффективной параллельной реализации вычислительной схемы, описанной в § 3, в целом достигнута. Расчеты показали, что параллельный алгоритм и разработанная на его основе C++/MPI-программа обеспечивают сокращение времени счета по сравнению с однопроцессорным режимом от 5 до 9 раз в зависимости от вычислительных параметров и параметров модели. В настоящее время программа активно используется для компьютерного моделирования. В частности, с ее помощью получены результаты, представленные в [Рахмонов и др., 2016; Rahmonov et al., 2016].

Необходимо отметить при этом, что рассмотренная вычислительная схема требует значительных объемов межпроцессорного взаимодействия и с этой точки зрения не является оптимальной для параллельной реализации. В самом деле, на каждом шаге по времени по рекурсивным формулам рассчитываются четыре коэффициента РК, что делает необходимыми межпроцессорные пересылки после расчета каждого из коэффициентов и решений V_l , φ_l . Поэтому остается актуальным вопрос дальнейшего повышения производительности вычислений. Можно ожидать, что использование вместо четырехшаговой схемы РК одно- или двух-шаговой процедуры позволит сократить как общий объем вычислений на каждом шаге по времени, так и объем межпроцессорных взаимодействий. Предварительные расчеты показывают, что при $\Delta x = 0.5$ и $\Delta t = 0.01$ результаты вычисления ВАХ на основе одношагового метода Эйлера и 4-шагового метода РК отличаются в пределах 5 %, в то время как время счета уменьшается примерно в 4 раза. Проверка точности расчета всех характеристик системы ВАХ на основе метода Эйлера и, следовательно,

его применимости для моделирования системы ДДП требует детальных численных исследований и является предметом дальнейшей работы. Другим направлением является проверка эффективности применения в рамках рассмотренной вычислительной схемы других технологий параллельного программирования, в том числе CUDA.

Авторы благодарны В. Рихвицкому, О. Стрельцовой, Г. Адаму за полезные обсуждения и замечания. Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты 15-29-01217, 15-51-61011 и 16-52-45011) и Программы сотрудничества ОИЯИ (Дубна) с болгарскими научными центрами. П. Х. Атанасова благодарит грант NI15-FMI-004 за частичную поддержку.

Список литературы (References)

- Гальперн Ю. С., Филиппов А. Т. Связанные состояния солитонов в неоднородных джозефсоновских переходах // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1984. — Т. 86, Вып. 4. — С. 1527–1543.
- Galpern Yu. S., Filippov A. T. Joint solution states in inhomogeneous Josephson junctions. Sov. Phys. JETP. — 1984. — Vol. 59. — P. 894–903. (Original Russian paper: Galpern Yu. S., Filippov A. T. Sviazannye sostoiania solitonov v neodnorodnyh djozefsonovski perehodah // Zhurnal eksperimental'noi i teoreticheskoi fiziki. — 1984. — T. 86, No. 4. — С. 1527–1543.)*
- Михайлов Б. М., Халабия Р. Ф. Классификация и организация вычислительных систем. — М.: МГУПИ, 2010.
- Mikhailov B. M., Halabya R. F. Klassifikacia i organizacia vychisklitel'nyh sistem [Classification and organization of computer systems]. — Moscow: MGUPI, 2010 (in Russian).*
- Рахмонов И. Р., Шукринов Ю. М., Атанасова П. Х., Земляная Е. В., Башашин М. В. Вольт-амперные характеристики и электромагнитное излучение в системе длинных джозефсоновских переходов с индуктивной и емкостной связью // Материалы XX Международного симпозиума «Нанозифика и нанозлектроника», Изд-во Нижегородского государственного университета. — 2016. — Т. 1. — С. 105–106.
- Rahmonov I. R., Shukrinov Yu. M., Atanasova P. Kh., Zemlyanaya E. V., Bashashin M. V. Volt-ampernye harakteristiki i elektromagnitnoe izluchenie v sisteme dlinnyh djozefsonovskih perehodov [The current-voltage characteristics and the electromagnetic radiation in a system of long Josephson junctions with inductive and capacitive coupling] // Proceedings of XX International simposium "Nanophysics and Nanoelectronics, University of Nizhny Novgorod. — 2016. — Vol. 1. — P. 105–106 (in Russian).*
- Рахмонов И. Р., Шукринов Ю. М., Ирие А. Параметрический резонанс в системе длинных джозефсоновских переходов // Письма в ЖЭТФ. — 2014. — Т. 99, Вып. 11. — С. 735–742.
- Rahmonov I. R., Shukrinov Yu. M., Irie A. Parametric resonance in the system of long Josephson junctions // JETP Letters. — 2014. — Vol. 99. — P. 632–639. (Original Russian paper: Rahmonov I. R., Shukrinov Yu. M., Irie A. Parametrichaskyi rezonans v sisteme dlinnyh djozefsonovskih perehodov. Pis'ma v Zhurnal Eksperimental'noi i Teoreticheskoi Fiziki. — 2014. — Vol. 99, No. 11. P. 735–742.)*
- Шукринов Ю. М., Рахмонов И. Р. Диффузионный ток в системе связанных джозефсоновских переходов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 2012. — Т. 142, Вып. 2. — С. 323–337.
- Rahmonov I. R., Shukrinov Yu. M. Diffusion Current in a System of Coupled Josephson Junctions // JETP. — 2012. — Vol. 115 — P. 289–302. (Original Russian paper: Rahmonov I. R., Shukrinov Yu. M. Diffuzionnyi tok v sisteme sviazannyh djozefsonovski perehodov. — 2012. — Vol. 142, No. 2. — P. 323–337.)*
- Атанасова П. Х., Земляная Е. В., Шукринов Е. В. Numerical study of fluxon solutions of sine-Gordon equation under the influence of the boundary conditions // Lecture Notes in Computer Sciences. — 2013. Vol. 7125. — P. 201–206.
- Goldobin E., Koelle D., Kleiner R., Buzdin A. Josephson junctions with second harmonic in the current-phase relation: Properties of junctions // Physical Review B. — 2007. — Vol. 76. — 224523.

- Krasnov V. M.* Coherent flux-flow emission from stacked Josephson junctions: Nonlocal radiative boundary conditions and the role of geometrical resonances // *Physical Review B*. — 2010. — Vol. 82. — 134524.
- Lin S., Hu X.* Possible dynamic states in inductively coupled intrinsic Josephson junctions of layered high- T_c superconductors // *Physical Review Letters*. — 2008. — Vol. 100. — 247006.
- McLaughlin D. W., Scott A. C.* Perturbation analysis of fluxon dynamics // *Physical Review A*. — 1978. — Vol. 18 — 1652.
- Pedersen N. F., Welner D.* Comparison between experiment and perturbation theory for solitons in Josephson junctions // *Physical Review B*. — 1984. — Vol. 29. — 2551.
- Rahmonov I. R., Shukrinov Yu. M., Plecenik A., Zemlyanaya E. V., Bashashin M. V.* Numerical Study of System of Long Josephson Junctions with Inductive and Capacitive Couplings // *European Physical Journal, Web of Conferences*. — 2016. — Vol. 108. — 02038.
- Rahmonov I. R., Shukrinov Yu. M., Zemlyanaya E. V., Sarhadov I., Andreeva O. Yu.* Mathematical modeling of intrinsic Josephson junctions with capacitive and inductive couplings // *Journal of Physics: Conference Series*. — 2012. — Vol. 393. — 012022.
- Sakai S., Bodin P., Pedersen N. F.* Fluxons in thin-film superconductor-insulator superlattices // *J. Appl. Phys.* — 1993. — Vol. 73. — 2411.
- Welp U., Kadowaki K., Kleiner R.* Superconducting emitters of THz radiation // *Nature Photonics*. — 2013. — Vol. 7. — P. 702–710.