

Сравнительный анализ производительности MPI- и OpenMP-программ на примере параллельных расчетов в рамках модели ядро-ядерного потенциала и модели Φ_0 -спинтроники

М. В. Башашин^{1,2*}, Е. В. Земляная^{1,2}

¹ Международная межправительственная организация Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Российская Федерация

Адрес: 141980, Российская Федерация, Московская область, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6

* bashashinmv@jinr.ru

² ГБОУ ВО Московской области «Университет «Дубна», г. Дубна, Российская Федерация

Адрес: 141982, Российская Федерация, Московская область, г. Дубна, ул. Университетская, д. 19

Аннотация

Представлены результаты проведенного исследования производительности проблемно-ориентированных программ, разработанных с использованием технологий параллельного программирования MPI и OpenMP и реализующих численное решение задач в рамках двух моделей, активно используемых в ядерной физике и физике сверхпроводящих структур. Первая задача – это построение потенциала ядро-ядерного рассеяния на основе модели двойного фолдинга (МДФ), которое сводится к численному решению методом последовательных приближений нелинейного интегрального уравнения с интегралами кратности 4. Вторая задача – моделирование переворота магнитного момента в джозефсоновских Φ_0 -переходах системы «сверхпроводник – ферромагнит – сверхпроводник» (СФС) на плоскости параметров модели. Расчет здесь сводится к многократному численному решению задачи Коши для соответствующей системы обыкновенных дифференциальных уравнений при значениях параметров, пробегающих с некоторым шагом заданные интервалы. Несмотря на кардинальные различия в целях и методах численного исследования, обе задачи обладают общими свойствами – относительно легко реализуемым параллелизмом и не слишком высокими требованиями к затратам компьютерных ресурсов. Для обеих задач представлены результаты сравнительных расчетов MPI- и OpenMP-версий, полученные на разных вычислительных системах при использовании разных компиляторов и разного количества MPI-процессов и OpenMP-потоков. Показано, что для задач подобного типа обе технологии в целом обеспечивают сопоставимые характеристики по ускорению вычислений и минимально достигаемому времени счета при увеличении числа задействованных параллельных MPI-процессов и OpenMP-потоков. Расчеты проводились на вычислительных ресурсах Многофункционального информационно-вычислительного центра Лаборатории информационных технологий имени М.Г. Мещерякова Объединенного института ядерных исследований.

Ключевые слова: параллельные вычисления, ядро-ядерный потенциал, модель спинтроники, MPI, OpenMP



Контент доступен под лицензией Creative Commons Attribution 4.0 License.
The content is available under Creative Commons Attribution 4.0 License.



Финансирование: исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках научного проекта № 22-71-10022 «Математическое моделирование сверхпроводящих наноструктур с магнетиком для исследования возможностей контроля намагниченности и магнитных возбуждений с использованием высокопроизводительных вычислительных систем».

Конфликт интересов: авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Для цитирования: Башашин М. В., Земляная Е. В. Сравнительный анализ производительности MPI- и OpenMP-программ на примере параллельных расчетов в рамках модели ядро-ядерного потенциала и модели φ_0 -спинтроники // Современные информационные технологии и ИТ-образование. 2022. Т. 18, № 3. С. 545-557. doi: <https://doi.org/10.25559/SITITO.18.202203.545-557>

© Башашин М. В., Земляная Е. В., 2022



Comparative Performance Analysis of MPI- and OpenMP- Programs on the Example of Parallel Calculations in the Framework of the Nucleus-Nucleus Potential Model and the ϕ_0 -Spintronic Model

M. V. Bashashin^{a,b*}, E. V. Zemlyanaya^{a,b}

^aJoint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russian Federation

Address: 6 Joliot-Curie St., Dubna 141980, Moscow Region, Russian Federation

* bashashinmv@jinr.ru

^bDubna State University, Dubna, Russian Federation

19 Universitetskaya St., Dubna 141980, Moscow Region, Russian Federation

Abstract

The results of a study of the performance of problem-oriented programs developed using the MPI and OpenMP parallel programming technologies which implement the numerical solution of problems in the framework of two models that are actively used in nuclear physics and the physics of superconducting structures are presented. The first task is the construction of the nucleus-nucleus scattering potential based on the double folding model (MDF), which is reduced to the numerical solution of the non-linear integral equation with integrals of multiplicity 4 by the fix point method. The second task is the simulation of the magnetic moment reversal in the Josephson ϕ_0 -junctions of the system "superconductor – ferromagnet – superconductor" (SFS) on the plane of model parameters. The calculation here is reduced to a multiple numerical solution of the Cauchy problem for the corresponding system of ordinary differential equations for the values of the parameters running over the specified intervals with some step. Despite the cardinal differences in the goals and methods of numerical research, both problems have common properties - relatively easy to implement parallelism and not too high requirements for computer resources. For both tasks, the results of comparative calculations of MPI and OpenMP versions on different computing systems using different compilers and different numbers of MPI processes and OpenMP threads are presented. It is shown that for problems of this type, both technologies generally provide comparable characteristics in terms of a speedup of calculations and the minimum achievable computation time with an increase in the number of involved parallel MPI processes and OpenMP threads. The calculations were carried out using the computing resources of the Multifunctional Information and Computing Center of the Mescheryakov Laboratory of Information Technologies of the Joint Institute for Nuclear Research.

Keywords: parallel computing, nucleus-nucleus potential, spintronics model, MPI, OpenMP

Funding: The study was financially supported by the Russian Science Foundation within the framework of the scientific project No. 22-71-10022 "Mathematical Modeling of Superconducting Nanostructures with a Magnet for Research of the Possibilities of Controlling Magnetization and Magnetic Excitations Using High-Performance Computing Systems".

Conflict of interests: The authors declare no conflict of interest.

For citation: Bashashin M.V., Zemlyanaya E.V. Comparative Performance Analysis of MPI- and OpenMP-Programs on the Example of Parallel Calculations in the Framework of the Nucleus-Nucleus Potential Model and the ϕ_0 -Spintronic Model. *Modern Information Technologies and IT-Education*. 2022;18(3):545-557. doi: <https://doi.org/10.25559/SITITO.18.202203.545-557>



Введение

Параллелизм является в настоящее время неотъемлемой частью архитектуры практически всех современных вычислительных систем. Это делает необходимым применение специализированных технологий параллельного программирования для эффективной организации высокопроизводительных вычислений на таких системах. Наряду с набирающими популярность инструментами, ориентированными на конкретные архитектуры, включая векторные и графические процессоры, продолжают активно использоваться и более традиционные системы параллельного программирования, разработанные для архитектур, представляющих объединение параллельно работающих вычислительных устройств (процессорных элементов, ядер, потоков). Из технологий этого типа наиболее распространенными можно считать MPI и OpenMP¹ [1-3].

Достоинствами обеих систем являются их универсальность и доступность: обе технологии входят в состав программного обеспечения практически любого кластера или суперкомпьютера, имеется также возможность работы с MPI и OpenMP на персональных и мобильных компьютерах. При этом в большинстве случаев разработанная MPI- или OpenMP-программа будет работоспособной как на высокопроизводительном вычислительном кластере, так и на ноутбуке. MPI имеет реализации для языков Java, Fortran, C, C++. OpenMP в свою очередь имеет реализацию на языках Fortran, C, C++.

Изначально технология MPI разрабатывалась для систем, состоящих из параллельно работающих однородных вычислительных устройств (MPI-процессов) с распределенной памятью. Данная технология реализуется как библиотека MPI-функций для различных вариантов обмена данными между локальной памятью MPI-процессов, что позволяет учитывать особенности конкретных алгоритмов. В настоящее время MPI активно используется на многоядерных архитектурах, относящихся к системам с общей памятью, при этом концепция распределенной памяти продолжает оставаться моделью программирования.

Что касается OpenMP – эта технология является вариантом многопоточного программирования, ориентирована на вычислительные архитектуры с общей памятью и основана на использовании директив компилятору с целью реализации параллельных областей в программе для параллельного выполнения циклов и независимых фрагментов компьютерного кода. Отсутствие необходимости явных пересылок данных в целом упрощает разработку программы. С другой стороны, технология имеет свои «подводные камни», связанные с вероятным снижением производительности

параллельных вычислений при возрастающем количестве потоков, а также с возможной неоднозначностью получаемого результата при некорректной организации доступа к общей памяти.

Априорно считается, что технология MPI является приоритетной для параллельной реализации «больших» задач при их решении на суперкомпьютерах, в то время как для многоядерных систем технология OpenMP более эффективна. Однако в настоящее время подавляющее число высокопроизводительных суперкомпьютерных систем имеют гибридную архитектуру и имеют в своем составе вычислительные узлы с таким большим количеством ядер, что при решении многих задач все параллельные потоки или MPI-процессы могут быть размещены на ядрах одного узла. Например, суперкомпьютер Frontier – HPE Cray EX235a, находящийся на момент написания данной статьи, на первом месте рейтинга самых мощных суперкомпьютеров мира TOP 500, имеет в основе своих узлов процессоры AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, имеющие 64 физических и 128 виртуальных вычислительных ядер.

В указанных случаях преимущества той или иной технологии неочевидны и трудно заранее предсказать производительность параллельной программы и дать рекомендации по выбору технологии параллельного программирования применительно к конкретной задаче. В этой связи интересным и практически полезным представляется сравнительное тестирование MPI- и OpenMP-приложений, реализующих параллелизм в одной и той же проблемно-ориентированной программе.

В данной работе представлены результаты такого тестирования на примере двух конкретных задач. Первая – построение ядро-ядерного потенциала в рамках модели двойного фолдинга [4]; вторая – исследование переворота магнитного момента в модели ϕ_0 -спинтроники [5]. Соответствующие компьютерные программы написаны на языке C++, алгоритмы обладают достаточно очевидным параллелизмом, легко реализуемым как с помощью MPI, так и с использованием OpenMP. Задачи относятся к «эконом-классу» с точки зрения затрат компьютерного времени и памяти. Все эти факторы делают их удобными для тестирования.

Расчеты проводились на вычислительных ресурсах Многофункционального информационно-вычислительного центра Лаборатории информационных технологий имени М.Г. Мещерякова ОИЯИ [6]:

- кластер HブリLIT, используемый в настоящее время в качестве учебно-тестового полигона (УТП)²;
- суперкомпьютер «Говорун»³;

Для каждой задачи дано краткое описание формульной основы, вычислительной схемы и особенностей параллельной

¹ Антонов А. С. Технологии параллельного программирования MPI и OpenMP : учеб. пособие. М. : Московского ун-та, 2012. 339 с. URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=19599614> (дата обращения: 19.07.2022); Гергель В. П. Современные языки и технологии параллельного программирования. М. : Изд-во Московского ун-та, 2012. 408 с. URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=19599711> (дата обращения: 19.07.2022); Воеводин В. В., Воеводин Вл. В. Параллельные вычисления. СПб : БХВ-Петербург, 2002. 608 с.; URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=22517654> (дата обращения: 19.07.2022).

² Учебно-тестовый полигон : сайт Гетерогенной платформы HブリLIT [Электронный ресурс]. Дубна : ЛИТ ОИЯИ, 2022. URL: http://hlit.jinr.ru/education_and_testing_polygon (дата обращения: 19.07.2022).

³ Суперкомпьютер «Говорун» : сайт Гетерогенной платформы HブリLIT ЛИТ ОИЯИ [Электронный ресурс]. Дубна : ЛИТ ОИЯИ, 2022. URL: http://hlit.jinr.ru/supercomputer_govorun (дата обращения: 19.07.2022).



реализации. Обсуждаются результаты методических расчетов, полученные при возрастающем количестве MPI-процессов и OpenMP-нитей для различных параметров вычислительной схемы, определяющих размерность задачи.

Основные формулы, алгоритмы, параллельная реализация Потенциал ядро-ядерного рассеяния в рамках модели двойного фолдинга

Построение потенциала ядро-ядерного рассеяния на основе модели двойного фолдинга (МДФ) [7] сводится к численному решению нелинейного интегрального уравнения итерационным методом. Подробное описание численного метода расчета МДФ-потенциала V^F дано в [8]. V^F строится как сумма изоскалярной и изовекторной составляющих, каждая из которых включает прямую V^D и обменную V^{EX} части. Изоскалярный потенциал имеет вид:

$$V^F(r) = V^D(r) + V^{EX}(r) \quad (1)$$

$$V^D(r) = \int d^3 r_p d^3 r_t \{\rho_p(\vec{r}_p) \rho_t(\vec{r}_t) v_{NN}^D\} \quad (2)$$

$$V^{EX}(r) = \int d^3 r_p d^3 r_t \{\rho_p(\vec{r}_p, \vec{r}_p + \vec{s}) \rho_t(\vec{r}_t, \vec{r}_t - \vec{s}) v_{NN}^{EX} \times \exp[i\vec{K}(r)\vec{s}/M]\} \quad (3)$$

где $M=A_p A_t / (A_p + A_t)$. Каждая функция плотности налетающего ядра ρ_p и ядра-мишени ρ_t с атомными массами A_p и A_t есть сумма нейтронной и протонной плотности (в выражении для V^{EX} – матрицы плотностей). $\vec{K}(r, V^F)$ – локальный импульс относительного движения

$$K^2(r) = \frac{2m_0 M}{\hbar} [E - V^F(E, r) - U_C(r)]. \quad (4)$$

Эффективные нуклон-нуклонные потенциалы v_{NN}^D и v_{NN}^{EX} в формулах (2) и (3) зависят от энергии и плотности сталкивающихся объектов, соответствующие выражения даны, например, в [9]. U_C – кулоновский потенциал, см. например работу⁴. Изовекторная часть потенциала получается из (1-3) заменой суммы нейтронной и протонной плотностей на их разность, а также другими выражениями эффективных NN -потенциалов.

Поскольку, как видно из (4), локальный импульс ядро-ядерного движения K зависит от потенциала V^F , выражение для обменного потенциала V^{EX} представляет собой нелинейное интегральное уравнение, которое схематично можно записать в форме

$$V^{EX}(r) = \int_0^\infty db [\Phi(V^{EX}(b), r)], \quad (5)$$

где Φ в свою очередь представляет собой интегральное выражение кратности 4.

Для численного решения уравнения (5) используется метод простых итераций. В качестве начального приближения V_0^{EX} выбирается заранее рассчитанный прямой потенциал V^D , вычисление которого не представляет трудностей и сводится к расчету кратного интеграла (4) с использованием стандартных квадратурных формул на равномерной дискретной сетке (в наших расчетах используется формула Симпсона).

На каждой итерации с номером k рассчитывается правая часть уравнения и, тем самым, получается $(k+1)$ -е приближение:

$$V_{k+1}^{EX}(r) = \int_0^\infty db [\Phi(V_k^{EX}(b), r)]. \quad (6)$$

Итерации завершаются, когда для заранее заданного малого положительного числа ε выполнено условие

$$\max_r |V_{k+1}^{EX} - V_k^{EX}| < \varepsilon. \quad (7)$$

Вычисления показывают, что при выборе $V_0^{EX} = V^D$ и $\varepsilon = 0.0001$ достаточно 6–8 итераций. Естественно, вместо сингулярного интервала интегрирования $[0, \infty)$ при расчетах выбирается конечный интервал $[0, R_{\max}]$. Здесь R_{\max} – достаточно большое число, обеспечивающее правильное асимптотическое поведение потенциала и его близость к 0 в области R_{\max} .

Идея параллельной реализации основана на разбиении интервала интегрирования по координате r на подинтервалы по числу участвующих в расчете параллельных вычислительных узлов (MPI-процессов). На практике такое разбиение сводится к распределению по процессам числа N узлов дискретной сетки по r . Тогда на каждой итерации каждый MPI-процесс рассчитывает значение V_{k+1}^{EX} по формуле (6) в назначенных ему узлах r_k ($k=1, \dots, N$). Для продолжения итерационного процесса необходима «сборка» и рассылка всем MPI-процессам полученных значений V_{k+1}^{EX} для всей совокупности узлов дискретной сетки, которые осуществляются с помощью функций MPI_Allreduce и MPI_Bcast [10, 11]. Аналогичная методика с поправкой на особенности технологии была применена в OpenMP-версии программы. Отметим. Что расчет МДФ-потенциала необходим для вычисления наблюдаемых физических характеристик ядро-ядерного рассеяния (см., например, [12, 13] и цитируемую в этих работах литературу).

Модель ϕ_0 -спинтроники

В структурах «сверхпроводник – ферромагнит – сверхпроводник» (СФС) спин-орбитальная связь в ферромагнитном слое без инверсионной симметрии обеспечивает механизм прямой связи между магнитным моментом и сверхпроводящим током [14]. Джозефсоновские переходы в структурах такого типа, называемые ф-переходами, привлекают внимание в связи с перспективами возможности управления магнитными свойствами с помощью сверхпроводящего тока и влияния магнитной динамики на сверхпроводящий ток [15, 16].

Динамика магнитного момента и разности фаз в СФС-модели описывается уравнением Ландау – Лившица – Гилберта:

$$\frac{d\vec{m}}{dt} = -\frac{\omega_F}{1+M\alpha^2} (\vec{m} \times \vec{H}) + \alpha \vec{m} (\vec{m} \cdot \vec{H}) - \vec{H}, \quad (8)$$

где α – параметр диссипации, ω_F – нормализованная частота ферромагнитного резонанса, \vec{m} – вектор магнитного момента с компонентами m_x, m_y, m_z , M – абсолютное значение магнитного момента. Компоненты эффективности магнитного поля \vec{H} определяются как

$$\begin{cases} H_x = 0 \\ H_y = Gr \sin(\varphi(t) - rm_y(t)), \\ H_z = m_z(t) \end{cases} \quad (9)$$

⁴ Давыдов А. С. Квантовая механика. 2-е изд. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1973. 704 с. URL: <https://ikfia.ysn.ru/wp-content/uploads/2018/01/Davydov1973ru.pdf> (дата обращения: 19.07.2022).



где G – отношение джозефсоновской энергии к энергии магнитной анизотропии, r – параметр спин-орбитальной связи. Джозефсоновская разность фаз φ может быть найдена с использованием данного уравнения

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{1}{\omega} (I_{pulse}(t) - \sin(\varphi - rm_y)), \quad (10)$$

где ω – джозефсоновская частота, выражение для импульсного тока имеет вид:

$$I_{pulse} = \begin{cases} A_s, & [t_0 - 1/2\Delta t, t_0 + 1/2\Delta t,] \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}. \quad (11)$$

Здесь A_s – амплитуда импульсного тока, и Δt – временной интервал, в течение которого подается импульсный ток. Таким образом, система уравнений (8) с эффективным полем (9), (10) и импульсным током (11) описывает динамику φ_0 -перехода в СФС-модели. Все величины переведены в безразмерные [17]. В расчетах используются следующие начальные условия:

$$m_x(0) = 0, m_y(0) = 0, m_z(0) = 1, \varphi_0 = 0. \quad (12)$$

Задача (8-12) представляет собой задачу Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$(x, \bar{y}), \quad \bar{y} = \bar{y}_0, x \geq 0, \quad (13)$$

где $\bar{y} = (m_x, m_y, m_z, \varphi)$, $\bar{y}_0 = (0, 0, 1, 0)$, $x = t$, и \bar{f} соответствует правой части системы. Для ее решения в [18] использован неявный метод Рунге-Кутты (также известный как метод Гаусса – Лежандра и метод Хаммера – Холлингворта⁵). На каждом шаге по времени с номером n и размере временного шага h неявной схемы мы получаем следующую систему нелинейных уравнений относительно неизвестных коэффициентов $\bar{k}_i, i = \overline{1, 2}$:

$$\bar{k}_1^{(m+1)} = \bar{f}(x + c_1 h, \bar{y}^{(n)} + h(a_{11}\bar{k}_1^{(m)} + a_{12}\bar{k}_2^{(m)})) \quad (14)$$

$$\bar{k}_2^{(m+1)} = \bar{f}(x + c_2 h, \bar{y}^{(n)} + h(a_{21}\bar{k}_1^{(m)} + a_{22}\bar{k}_2^{(m)})) \quad (15)$$

где $c_1 = \frac{1}{2} - \frac{1}{6}\sqrt{3}$, $c_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{6}\sqrt{3}$, $a_{11} = \frac{1}{4}$, $a_{12} = \frac{1}{4} - \frac{1}{6}\sqrt{3}$, $a_{21} = \frac{1}{4} + \frac{1}{6}\sqrt{3}$, $a_{22} = \frac{1}{4}$.

Эта система решается численно методом простых итераций. После определения коэффициентов \bar{k}_1 и \bar{k}_2 , вычисляется значение $\bar{y}^{(n+1)}$ для следующего шага с помощью формулы:

$$\bar{y}^{(n+1)} = \bar{y}^{(n)} + \frac{h}{2}(\bar{k}_1 + \bar{k}_2) \quad n = \overline{0, N-1}, \quad (16)$$

где N – количество узлов дискретной сетки по времени.

Одной из целей численного исследования является изучение перемагничивания магнитного поля (инверсия магнитного поля) в φ_0 -переходах под действием сверхпроводящего тока. Имеется ввиду ситуация, когда m_z – компонента магнитного поля в ходе численного моделирования на достаточно протяженном интервале времени принимает значение -1 при заданном начальном значении $+1$. Помимо фундаментального интереса, такой эффект имеет перспективы практических приложений в устройствах сверхпроводящей электроники. В работе [17] представлены результаты такого исследования в зависимости от параметров G , r , α и демонстрируется периодичность интервалов перемагничивания на плоскостях параметров (G, α) и (G, r) . Исследования сводятся к массовым расчетам задачи Коши (8-11) с начальным условием (5) с параметрами G , α или G , r , пробегаящими с определенным шагом заданный диапазон физически интересных значений.

Поскольку для каждого набора параметров расчет происходит независимо – задача довольно просто распараллеливается путем разбиения соответствующих циклов по параметрам на блоки [19] в соответствии с количеством задействованных MPI-процессов или OpenMP-нитей.

При использовании обеих технологий распределение точек между вычислительными узлами производится относительно параметра G . Каждый вычислительный узел путем решения задачи (8-12) в интервале времени от $t=0$ до $t=t_{max}$ с некоторым шагом h вычисляет значение m_z – компоненты магнитного поля, и если это значение при $t=t_{max}$ меняет свой знак, то параметры, при которых получено это значение сохраняются. Определенную проблему представляет тот факт, что мы не знаем заранее, сколько точек в заданном диапазоне параметров будет удовлетворять условию отбора. При решении этой проблемы проявляются принципиальные различия, обусловленные особенностями конкретной технологии параллельного программирования.

Из-за того, что технология MPI работает с распределенной памятью, первоначальное сохранение данных происходит в локальной памяти каждого процесса. Для объединения данных мы применяем функцию MPI_Gatherv. Однако в нашем случае перед ее применением приходится создать два вспомогательных массива, содержащие количество точек, удовлетворяющих условию отбора относительно каждого параллельного процесса и номер элемента итогового массива, с которого будут начинаться данные того или иного процесса. Для этого применяется функция MPI_Allgather.

Поскольку технология OpenMP работает с объединенной памятью, схема сохранения данных, описанная в предыдущем абзаце нецелесообразна. Сохранение данных здесь происходит напрямую в итоговый массив, но для обеспечения корректного сохранения используется синхронизация с помощью директивы `omp critical`, которая не позволяет вести потокам одновременную запись в итоговый массив. Особенностью данной реализации также является то, что очередность записывающих данные потоков не регламентируется, там самым данные не упорядочены, в отличие от MPI реализации. Но на итоговый результат данный фактор влияния не оказывает.

Обсуждение численных результатов

Было проведено тестирование параллельных программных MPI- и OpenMP-версий описанных выше задач, направленное на проверку и сопоставление их эффективности. Как уже сказано во Введении, расчеты производились на двух платформах: кластер HybriLIT и суперкомпьютер «Говорун». Вычисления на HybriLIT проводились на CPU Intel Xeon E5-2695 v2 (12 cores / 24 threads). Вычисления на суперкомпьютере «Говорун» велись на CPU Intel Xeon Platinum 8268 (24 cores / 48 threads). Количество P параллельных MPI-процессов и OpenMP-потоков варьировалось от 1 до 32.

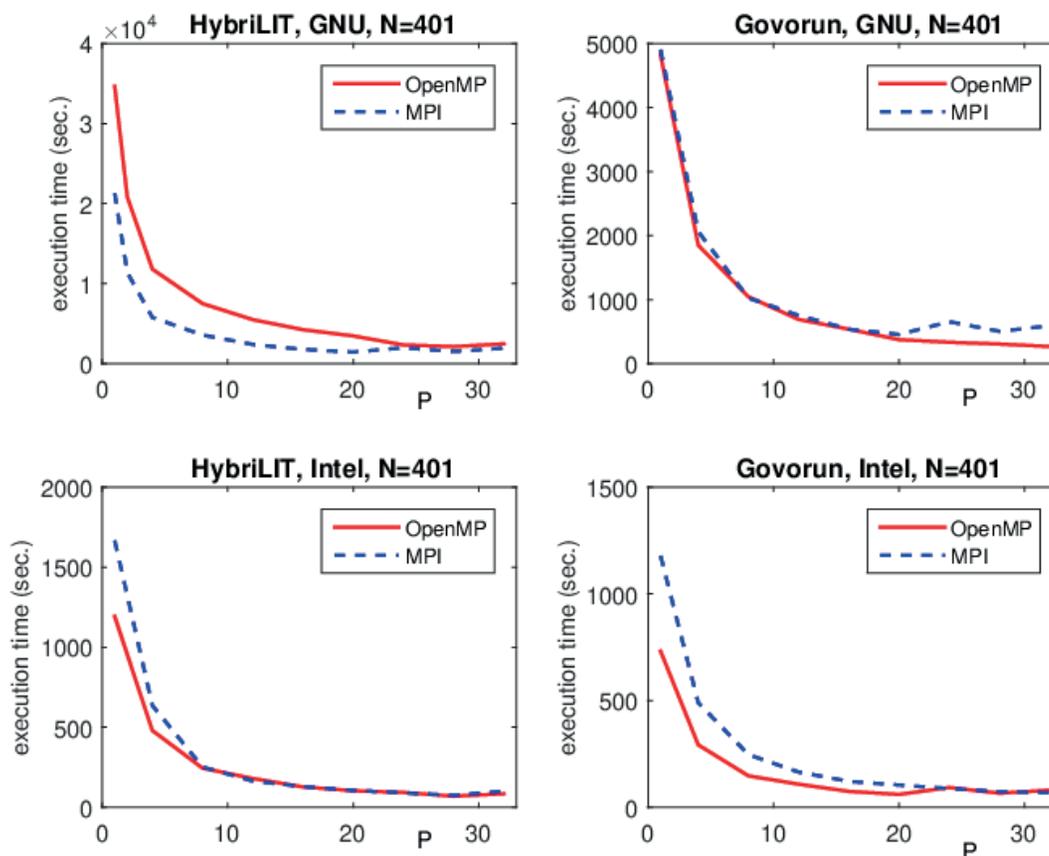
Компиляция проводилась, как и использованием платных компиляторов фирмы Intel – версии 2021.1, так и с бесплатными GNU реализациями на базе одной и той же версии компилятора (11.2.0), с использованием в обоих случаях второго уровня оптимизации кода.

⁵ Hall G., Watt J. M. Modern Numerical Methods for Ordinary Differential Equations. Oxford : Oxford University Press, 1976.



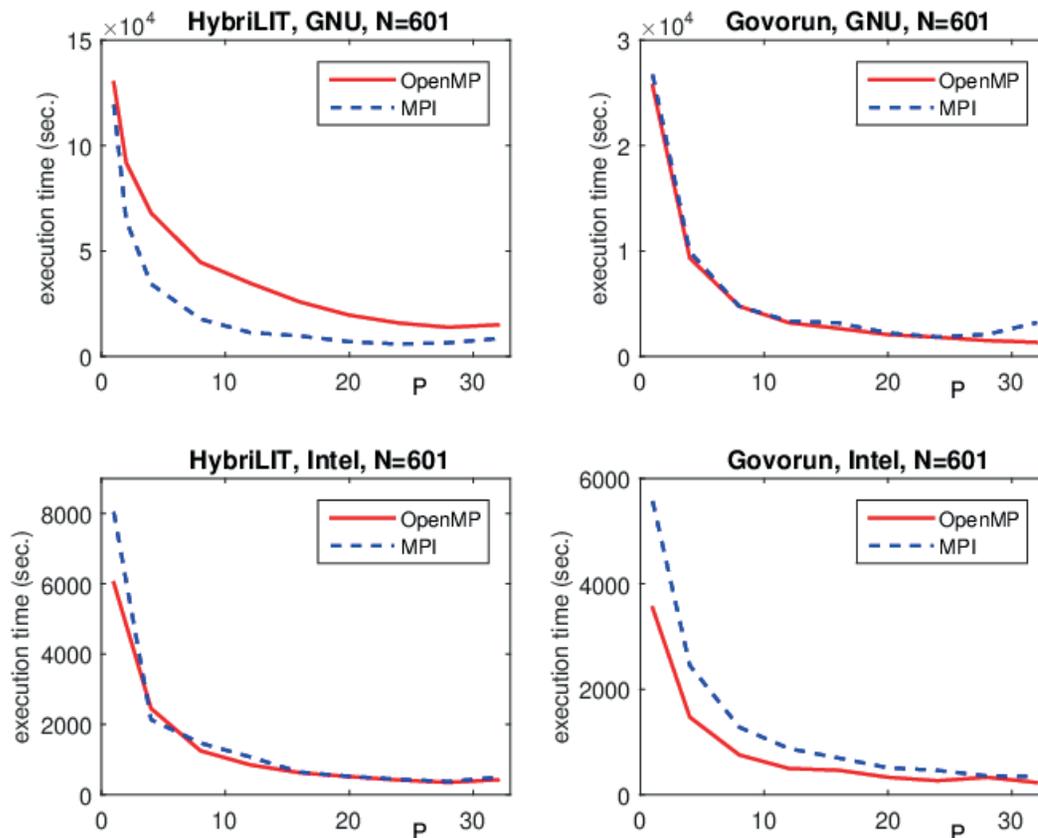
Для тестирования производительности программы расчета МДФ-потенциала были взяты варианты с числом узлов равномерной дискретной сетки по координате $N=401$ и $N=601$. На рисунках 1 и 2 представлены времена выполнения MPI- и OpenMP-версий МДФ-программы в зависимости от значения P , означающего количество задействованных в расчете MPI-процессов или OpenMP-потоков. Расчеты выполнены для случая упругого рассеяния экзотического ядра ${}^6\text{He}$ с кинетической энергией 50 МэВ/нуклон на ядре-мишени ${}^{28}\text{Si}$. В качестве плотностей ρ_{pt} использованы выражения из работы [20]. Как видно из рисунков, для всех случаев при относительно небольших значениях P сохраняется тенденция превосходства фирменных компиляторов Intel над бесплатными реализациями GNU. Данный факт, естественно, объясняется адаптацией компиляторов Intel к архитектуре одноименных процессоров. При этом, при использовании разных компиляторов на двух разных системах выигрыш с точки зрения времени счета имеют разные технологии. Так, для GNU-компиляции на кла-

стере HybriLIT более быстрой оказывается MPI-версия, в то время как при GNU-расчетах на суперкомпьютере «Говорун» время счета оказывается сопоставимым для равного количества задействованных параллельных процессов/потоков. При использовании Intel-компилятора на HybriLIT разница во времени счета между MPI- и OpenMP-версиями невелика, в то время как на суперкомпьютере «Говорун» явное преимущество остается за технологией OpenMP. С ростом количества участвующих в расчете параллельных процессов/потоков разница во временах работы MPI- и OpenMP-версий сглаживается. Эта тенденция имеет место при использовании обоих компиляторов как при $N=401$, так и при $N=601$. Таким образом, для данной задачи в целом можно констатировать некоторое преимущество MPI-технологии с точки зрения производительности вычислений, хотя обе технологии в принципе обеспечивают более чем 20-кратное ускорение вычислений.



Р и с. 1. Время выполнения MPI- и OpenMP-версий программы расчета МДФ-потенциала при $N=401$ в зависимости от количества P задействованных MPI-процессов и OpenMP-потоков при использовании разных компиляторов и разных вычислительных систем
Fig. 1. Execution time of MPI- and OpenMP-versions of the program for calculating MDF-potential at $N=401$ depending on the number P of involved MPI-processes and OpenMP-threads when using different compilers and different computing systems





Р и с. 2. Время выполнения MPI- и OpenMP-версий программы расчета МДФ-потенциала при $N=601$ в зависимости от количества P задействованных MPI-процессов и OpenMP-потоков при использовании разных компиляторов и разных вычислительных систем
 Fig. 2. Execution time of MPI- and OpenMP-versions of the program for calculating MDF-potential at $N=601$ depending on the number P of involved MPI-processes and OpenMP-threads when using different compilers and different computing systems

Для СФС-модели ϕ_0 -спинтроники, численное исследование которой в нашем случае сводится к множественным расчетам по одному и тому же алгоритму, представлены результаты тестирования производительности MPI- и OpenMP-вычислений для двух вариантов: расчет на плоскости параметров G и α в 19600 точках (Рис. 3) и расчет на плоскости параметров G и r в 40000 точках (Рис. 4). Для расчетов на плоскости (G, α) использовались следующие значения параметров: параметр G пробегает значения от 0 до 400 с шагом 1; α меняется в интервале от 0.01 до 0.5 с шагом 0.01, использовался шаг по времени $h=0.01$ и максимальное значение времени $t_{max}=1000$, в формулах (8-11) полагали $A_s=1.5$; $\Delta_t=6$; $\omega_F=1$; $\omega=0$; $t_0=25$, $M=1$; параметр спин-орбитальной связи фиксировался $r=0.1$. Для расчетов на плоскости (G, r) использовались те же значения параметров модели и вычислительной схемы, за исключением значения параметра диссипации α , взятого равным 0.5. Параметр r в этом расчете принимает значения от 0 до 1 с шагом 0.01.

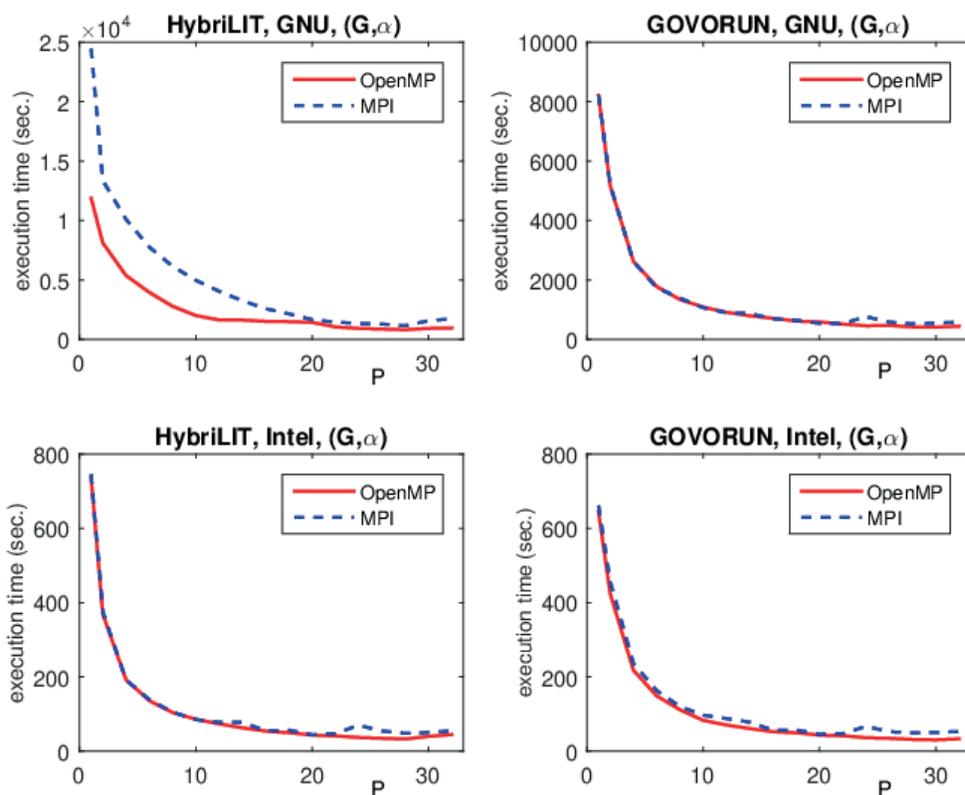
Как видно из рисунков, для этой задачи, как и в предыдущем примере, использование компиляторов Intel на одноименных процессорах дает меньшие времена счета по сравнению с GNU-компиляцией. При этом MPI- и OpenMP-программы, скомпилированные с помощью Intel компилятора, показывают

незначительную разницу во времени счета при любом P как на суперкомпьютере «Говорун», так и на кластере HybriLIT.

В случае GNU-компиляции MPI-версия оказывается существенно медленнее OpenMP-версии только в случае с расчетом 19600 точек на кластере HybriLIT на плоскости (G, α) . При расчетах на плоскости (G, r) наблюдается противоположная картина – технология MPI обеспечивает более высокую производительность вычислений. При этом сохраняется тенденция на сглаживание времени счета между MPI- и OpenMP-версиями с увеличением количества параллельных MPI-процессов/OpenMP потоков.

В табл. 1 указаны минимальные времена выполнения MPI- и OpenMP-программ, достигаемые при решении обеих задач на кластерах HybriLIT и «Говорун» при использовании разных компиляторов. Видно, что при выполнении на кластере HybriLIT с использованием GNU-компиляции более ресурсоемких тестов (расчет МДФ-потенциала с $N=601$ и расчет в рамках СФС-модели на плоскости (G, r)) минимальное время работы OpenMP-программы значительно превышает минимальное время работы MPI-версии. В остальных случаях минимальные времена работы MPI- и OpenMP-программ при использовании одного компилятора и вычислительного ресурса оказываются сопоставимыми.





Р и с. 3. Время выполнения MPI- и OpenMP-версий программы, реализующей модель спинтроники при расчете в 19600 точках на плоскости параметров (G, α) в зависимости от количества P задействованных MPI-процессов и OpenMP-потоков при использовании разных компиляторов и разных вычислительных систем

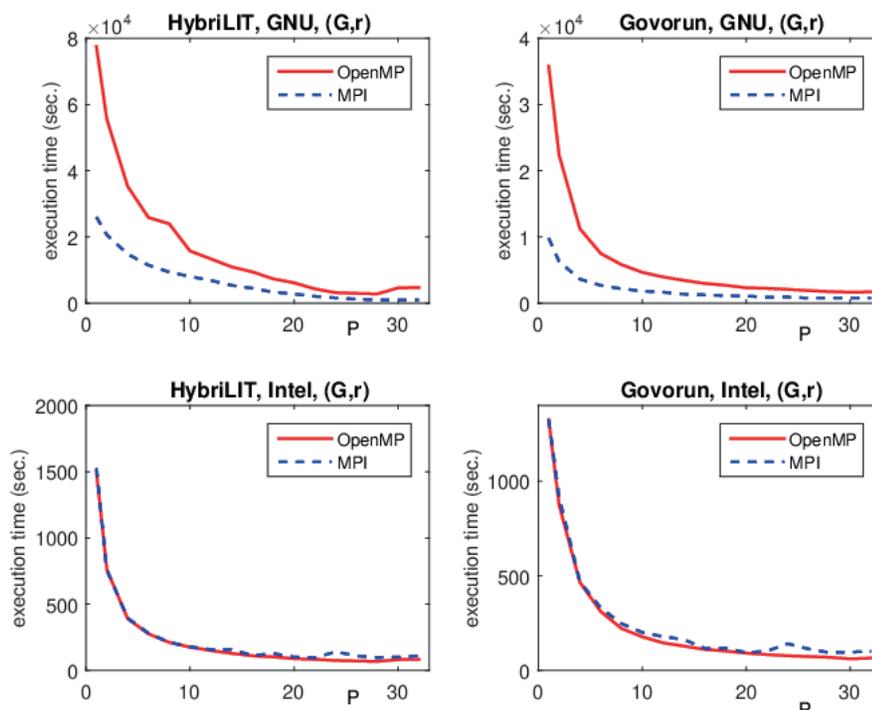
Fig. 3. The execution time of the MPI and OpenMP versions of the program that implements the spintronics model when calculating at 19600 points on the parameter plane (G, α) depending on the number P of involved MPI processes and OpenMP threads when using different compilers and different computing systems

Т а б л и ц а 1. Минимальные времена счета (в секундах) и соответствующие количества P параллельных процессов (потоков) при использовании разных типов компиляторов и разных типов вычислительных систем

Table 1. Minimum counting times (in seconds) and the corresponding number P of parallel processes (threads) when using different types of compilers and different types of computing systems

Задача	Hydra				Говорун			
	MPI GNU	OpenMP GNU	MPI Intel	OpenMP Intel	MPI GNU	OpenMP GNU	MPI Intel	OpenMP Intel
МДФ N=401	1446	2128	69	74	456	267	60	68
	P=20	P=28	P=28	P=32	P=20	P=32	P=20	P=32
МДФ N=601	5840	13770	349	375	1841	1333	231	344
	P=24	P=28	P=28	P=28	P=24	P=32	P=32	P=32
СФС (G, α)	1143	811	44	33	520	409	46	31
	P=28	P=28	P=20	P=28	P=28	P=30	P=20	P=30
СФС (G, r)	960	2963	96	67	763	1641	94	61
	P=30	P=26	P=28	P=28	P=26	P=30	P=28	P=30





Р и с. 4. Время выполнения MPI- и OpenMP-версий программы, реализующей модель спинтроники при расчете в 40000 точках на плоскости параметров (G, r) в зависимости от количества P задействованных MPI-процессов и OpenMP-потоков при использовании разных компиляторов и разных вычислительных систем

Fig. 4. The execution time of the MPI and OpenMP versions of the program that implements the spintronics model when calculating at 40000 points on the parameter plane (G, r) depending on the number P of involved MPI processes and OpenMP threads when using different compilers and different computing systems

Заключение

Из представленных результатов сравнительного тестирования MPI- и OpenMP-версий двух программ, реализующих решение двух различных задач в области ядерной физики и физики сверхпроводящих структур, можно сделать вывод, что обе технологии в целом обеспечивают эффективную реализацию параллелизма в этих задачах. Нельзя однозначно отдать предпочтение какой-либо из указанных технологий: при использовании разных компиляторов и разных вычислительных систем преимущество с точки зрения производительности вычислений имеет в одних случаях технология MPI, в других – OpenMP. Отметим, что обе тестируемые программы, хотя и реализуют кардинально разные алгоритмы, но объединены возможностью относительно простой реализации параллелизма без привязки к конкретной технологии параллельного программирования. Необходимо отметить, что для каких-либо иных алгоритмов, обладающих специфическими свойствами, конкретная технология параллельного программирования может оказаться существенно более эффективной по сравнению с остальными. В качестве примера приведем задачу расчета вольтамперных характеристик в системе длинных джозефсоновских переходов: из-за интенсивного обмена данным между задействованными параллельными процессами ускорение вычислений по

сравнению с последовательным расчетом для MPI-версии не превышало 10 раз [21], в то время как с помощью OpenMP-реализации можно получить ускорение до 40 раз [22]. Отметим также, что при решении сверхбольших задач, включая обработку больших объемов данных, требуются специальные подходы и программные инструменты для эффективной организации высокопроизводительных вычислений (см., например, [23]), выходящие за рамки данного рассмотрения. Что касается широкого круга задач с достаточно легко реализуемым параллелизмом и средней ресурсоемкостью, подобных рассмотренным в данной работе, для них выбор технологии параллельного программирования определяется лишь предпочтениями разработчика и возможностями доступа к конкретной технологии на конкретной вычислительной системе. И здесь перспективным представляется создание для востребованных проблемно-ориентированных приложений параллельных версий, опирающихся на разные технологии параллельного программирования. Так, для активно применяемой программы расчета МДФ-потенциала (см., например, в [24, 25] и цитируемую литературу) в электронной библиотеке ОИЯИ JINR-LIB доступна как стандартная последовательная программа на языке C++, так и две параллельные программы, созданные с использованием технологий OpenMP и MPI⁶.

⁶ Лукьянов К. В., Земляная Е. В., Башашин М. В. DFM-POTM - параллельная реализация расчета ядро-ядерного потенциала в рамках модели двойного фолдинга [Электронный ресурс] // Библиотека программ JINR-LIB. Дубна : ОИЯИ, 2022. URL: <http://www.info.jinr.ru/programs/jinr-lib/dfm-potm/index.html> (дата обращения: 19.07.2022).



Список использованных источников

- [1] Краева Я. А., Цымблер М. Л. Совместное использование технологий MPI и OpenMP для параллельного поиска похожих подпоследовательностей в сверхбольших временных рядах на вычислительном кластере с узлами на базе многоядерных процессоров Intel Xeon Phi Knights Landing // Вычислительные методы и программирование. 2019. Т. 20, № 1. С. 29-44. doi: <https://doi.org/10.26089/NumMet.v20r104>
- [2] Ежова Н. А., Соколинский Л. Б. Обзор моделей параллельных вычислений // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Вычислительная математика и информатика. 2019. Т. 8, № 3. С. 58-91. doi: <https://doi.org/10.14529/cmse190304>
- [3] Foster I. Languages for Parallel Processing // Handbook on Parallel and Distributed Processing. International Handbooks on Information Systems ; ed. by J. Błażewicz, K. Ecker, B. Plateau, D. Trystram. Berlin, Heidelberg: Springer, 2000. P. 92-165. doi: https://doi.org/10.1007/978-3-662-04303-5_3
- [4] Lukyanov V. K., Zemlyanaya E. V., Lukyanov K. V. Nucleus-nucleus scattering in the high-energy approximation and optical folding potential // Physics of Atomic Nuclei. 2006. Vol. 69, issue 2. P. 240-254. doi: <https://doi.org/10.1134/S1063778806020086>
- [5] Shukrinov Yu. M., Rahmonov I. R., Sengupta K., Buzdin A. Magnetization reversal by superconducting current in ϕ_0 Josephson junctions // Applied Physics Letters. 2017. Vol. 110, issue 18. Article number: 182407. doi: <https://doi.org/10.1063/1.4983090>
- [6] IT-ecosystem of the HybriLIT heterogeneous platform for high performance computing and training of IT-specialists / Gh. Adam Gh. [и др.] // CEUR Workshop Proceedings. Selected Papers of the 8th International Conference "Distributed Computing and Grid-technologies in Science and Education" (GRID 2018). 2018. Vol. 2267. P. 638-644. URL: <http://ceur-ws.org/Vol-2267/638-644-paper-122.pdf> (дата обращения: 19.07.2022).
- [7] Кхоа Д. Т., Князьков О. М. Обменные эффекты в ядро-ядерных потенциалах и ядерное радужное рассеяние // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 1990. Т. 21, № 6. С. 1456-1498. URL: http://www1.jinr.ru/Archive/PePan/1990-v21/v-21-6/pdf_obzory/v21p6_04.pdf (дата обращения: 19.07.2022).
- [8] Лукьянов К. В. Модель ядро-ядерного потенциала двойного фолдинга: основные формулы, итерационный метод и программа вычисления // Сообщение Объединенного института ядерных исследований. P11-2007-38. Дубна : ОИЯИ, 2007. 30 с. URL: [http://www1.jinr.ru/Preprints/2007/038\(P11-2007-38\).pdf](http://www1.jinr.ru/Preprints/2007/038(P11-2007-38).pdf) (дата обращения: 19.07.2022).
- [9] Khoa D. T., Satchler G. R. Generalized folding model for elastic and inelastic nucleus-nucleus scattering using realistic density dependent nucleon-nucleon interaction // Nuclear Physics A. 2000. Vol. 668, issue 1-4. P. 3-41. doi: [https://doi.org/10.1016/S0375-9474\(99\)00680-6](https://doi.org/10.1016/S0375-9474(99)00680-6)
- [10] Josephson junctions with second harmonic in the current-phase relation: Properties of ϕ junctions / E. Goldobin, D. Koelle, R. Kleiner, A. Buzdin // Physical Review B. 2007. Vol. 76, issue 22. P. 224523. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.224523>
- [11] MPI-реализация численного решения системы уравнений, описывающих модель длинных джозефсоновских переходов / М. В. Башашин, Е. В. Земляная, Ю. М. Шукринов, И. Р. Рахмонов // Системный анализ в науке и образовании. 2015. № 4. С. 6-12. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=26695118> (дата обращения: 19.07.2022).
- [12] Bashashin M., Zemlyanaya E., Lukyanov K. Double-Folding Nucleus-Nucleus Optical Potential: Parallel MPI and OpenMP Implementations // EPJ Web of Conferences. 2020. Vol. 226. Article number: 02004. doi: <https://doi.org/10.1051/epjconf/202022602004>
- [13] Analysis of the $^{12,14}\text{Be}+^{12}\text{C}$ Scattering Data within a Parallel Implementation of 4-Parameter Model / M. V. Bashashin [и др.] // AIP Conference Proceedings. 2021. Vol. 2377, issue 1. Article number: 060003. doi: <https://doi.org/10.1063/5.0063345>
- [14] Buzdin A. Direct Coupling Between Magnetism and Superconducting Current in the Josephson ϕ_0 Junction // Physical Review Letters. 2008. Vol. 101, issue 10. Article number: 107005. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.107005>
- [15] Buzdin A.I. Proximity effects in superconductor-ferromagnet heterostructures // Reviews of Modern Physics. 2005. Vol. 77, issue 3. P. 935-976. doi: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.77.935>
- [16] Kongschelle F., Buzdin A. Magnetic Moment Manipulation by a Josephson Current // Physical Review Letters. 2009. Vol. 102, issue 1. Article number: 017001. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.017001>
- [17] Periodicity in the Appearance of Intervals of the Reversal of the Magnetic Moment of a ϕ_0 Josephson Junction / P. K. Atanasova [и др.] // JETP Letters. 2019. Vol. 110, issue 11. P. 722-726. doi: <https://doi.org/10.1134/S0021364019230073>
- [18] Numerical Simulation of the Stiff System of Equations within the Spintronic Model / P. Atanasova, S. Panayotova, Yu. Shukrinov, I. Rahmonov // Numerical Methods and Applications. NMA 2018. Lecture Notes in Computer Sciences ; ed. by G. Nikolov, N. Kolkovska, K. Georgiev. Vol. 11189. Cham : Springer, 2019. P. 301-308. doi: https://doi.org/10.1007/978-3-030-10692-8_33
- [19] Микроскопический анализ энергетической зависимости полных сечений реакций $^6\text{He}+^7\text{Li}+^{28}\text{Si}$ в диапазоне $E=5-50$ А МэВ / К. В. Лукьянов, Е. В. Земляная, В. К. Лукьянов [и др.] // Известия Российской академии наук. Серия физическая. 2008. Т. 72, № 3. С. 382-386. URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=9934147> (дата обращения: 19.07.2022).
- [20] Вычислительная схема и параллельная реализация для моделирования системы длинных джозефсоновских переходов / М. В. Башашин, Е. В. Земляная, И. Р. Рахмонов [и др.] // Компьютерные исследования и моделирование. 2016. Т. 8, № 4. С. 593-604. URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=26716888> (дата обращения: 19.07.2022).
- [21] Revelation of thick neutron skins in nuclei / I. Tanihata [и др.] // Physics Letters B. 1992. Vol. 289, issues 3-4. P. 261-266. doi: [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(92\)91216-V](https://doi.org/10.1016/0370-2693(92)91216-V)



- [22] Parallel Algorithms for Studying the System of Long Josephson Junctions / M. Bashashin, A. Nechaevskiy, D. Podgainy [и др.] // CEUR Workshop Proceedings. Proceedings of the 27th International Symposium Nuclear Electronics and Computing (NEC'2019). 2019. Vol. 2507. P. 392-396. URL: <http://ceur-ws.org/Vol-2507/392-396-paper-72.pdf> (дата обращения: 19.07.2022).
- [23] Климентов А. А. Методы обработки сверхбольших объемов данных в распределенной гетерогенной компьютерной среде для приложений в области физики высоких энергий и ядерной физики // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2020. Т. 51, № 6. С. 1175-1303. URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=44498859> (дата обращения: 19.07.2022).
- [24] Microscopic analysis of quasielastic scattering and breakup reactions of the neutron-rich nuclei $^{12,14}\text{Be}$ / V. K. Lukyanov, D. N. Kadrev, E. V. Zemlyanaya [и др.] // Physical Review C. 2019. Vol. 100, issue 3. Article number: 034602. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.100.034602>
- [25] Parallel Numerical Simulation of the Magnetic Moment Reversal within the ϕ_0 -Josephson Junction Spintronic Model / S. Panayotova, M. Bashashin, E. Zemlyanaya [и др.] // EPJ Web of Conferences. 2020. Vol. 226. Article number: 02018. doi: <https://doi.org/10.1051/epjconf/202022602018>

Поступила 19.07.2022; одобрена после рецензирования 04.09.2022; принята к публикации 16.10.2022.

Об авторах:

Башашин Максим Викторович, младший научный сотрудник Лаборатории информационных технологий имени М.Г. Мещерякова, Международная межправительственная организация Объединенный институт ядерных исследований (141980, Российская Федерация, Московская область, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6); старший преподаватель Института системного анализа и управления, ГБОУ ВО Московской области «Университет «Дубна» (141982, Российская Федерация, Московская область, г. Дубна, ул. Университетская, д. 19), **ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2706-8668>**, bashashinmv@jinr.ru

Земляная Елена Валериевна, начальник сектора расчетов сложных физических систем Лаборатории информационных технологий имени М.Г. Мещерякова, Международная межправительственная организация Объединенный институт ядерных исследований (141980, Российская Федерация, Московская область, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6); профессор Института системного анализа и управления, ГБОУ ВО Московской области «Университет «Дубна» (141982, Российская Федерация, Московская область, г. Дубна, ул. Университетская, д. 19), доктор физико-математических наук, **ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8149-9533>**, elena@jinr.ru

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

References

- [1] Kraeva Ya.A., Zymbler M.L. The Use of MPI and OpenMP Technologies for Subsequence Similarity Search in Very Long Time Series on a Computer Cluster System with Nodes Based on the Intel Xeon Phi Knights Landing Many-Core Processor. *Numerical Methods and Programming*. 2019;20(1):29-44. (In Russ., abstract in Eng.) doi: <https://doi.org/10.26089/NumMet.v20r104>
- [2] Ezhova N.A., Sokolinsky L.B. Survey of Parallel Computation Models. *Bulletin of the South Ural State University. Series: Computational Mathematics and Software Engineering*. 2019;8(3):58-91. (In Russ., abstract in Eng.) doi: <https://doi.org/10.14529/cmse190304>
- [3] Foster I. Languages for Parallel Processing. In: Błażewicz J., Ecker K., Plateau B., Trystram D. (eds.). Handbook on Parallel and Distributed Processing. International Handbooks on Information Systems. Berlin, Heidelberg: Springer; 2000. p. 92-165. doi: https://doi.org/10.1007/978-3-662-04303-5_3
- [4] Lukyanov V.K., Zemlyanaya E.V., Lukyanov K.V. Nucleus-nucleus scattering in the high-energy approximation and optical folding potential. *Physics of Atomic Nuclei*. 2006;69(2):240-254. doi: <https://doi.org/10.1134/S1063778806020086>
- [5] Shukrinov Yu.M., Rahmonov I.R., Sengupta K., Buzdin A. Magnetization reversal by superconducting current in ϕ_0 Josephson junctions. *Applied Physics Letters*. 2017;110(18):182407. doi: <https://doi.org/10.1063/1.4983090>
- [6] Adam Gh., et al. IT-ecosystem of the HybriLIT heterogeneous platform for high performance computing and training of IT-specialists. *CEUR Workshop Proceedings*. 2018;2267:638-644. Available at: <http://ceur-ws.org/Vol-2267/638-644-paper-122.pdf> (accessed 19.07.2022).
- [7] Khoa D.T., Knyazkov O.M. Exchange Effects in Nucleus-Nucleus Potentials and Nuclear Rainbow Scattering. *Physics of Elementary Particles and Atomic Nuclei*. 1990;21(6):1456-1498. Available at: http://www1.jinr.ru/Archive/Pepan/1990-v21/v-21-6/pdf_obzory/v21p6_04.pdf (accessed 19.07.2022). (In Russ., abstract in Eng.)
- [8] Lukyanov K.V. Double Folding Model of Nucleus-Nucleus Potential: Formulae, Iteration Method and Computer Code. In: Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. P11-2007-38. Dubna: JINR; 2007. 30 p. Available at: [http://www1.jinr.ru/Preprints/2007/038\(P11-2007-38\).pdf](http://www1.jinr.ru/Preprints/2007/038(P11-2007-38).pdf) (accessed 19.07.2022). (In Russ., abstract in Eng.)
- [9] Khoa D.T., Satchler G.R. Generalized folding model for elastic and inelastic nucleus-nucleus scattering using realistic density dependent nucleon-nucleon interaction. *Nuclear Physics A*. 2000;668(1-4):3-41. doi: [https://doi.org/10.1016/S0375-9474\(99\)00680-6](https://doi.org/10.1016/S0375-9474(99)00680-6)
- [10] Goldobin E., Koelle D., Kleiner R., Buzdin A. Josephson junctions with second harmonic in the current-phase relation: Properties of ϕ junctions. *Physical Review B*. 2007;76(22):224523. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.224523>



- [11] Bashashin M.V., Zemlyanaya E.V., Shukrinov Yu.M., Rahmonov I.R. MPI-implementation of numerical solution of the system of equations describing the long Josephson junctions model. *System Analysis in Science and Education*. 2015;(4):6-12. Available at: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=26695118> (accessed 19.07.2022). (In Russ., abstract in Eng.)
- [12] Bashashin M., Zemlyanaya E., Lukyanov K. Double-Folding Nucleus-Nucleus Optical Potential: Parallel MPI and OpenMP Implementations. *EPJ Web of Conferences*. 2020;226:02004. doi: <https://doi.org/10.1051/epjconf/202022602004>
- [13] Bashashin M.V., Zemlyanaya E.V., Kakenov M.B., Yermekova A.Ye., Lukyanov K.V. Analysis of the $^{12,14}\text{Be}+^{12}\text{C}$ Scattering Data with a Parallel Implementation of 4-Parameter Model. *AIP Conference Proceedings*. 2021;2377(1):060003. doi: <https://doi.org/10.1063/5.0063345>
- [14] Buzdin A. Direct Coupling Between Magnetism and Superconducting Current in the Josephson ϕ_0 Junction *Physical Review Letters*. 2008;101(10):107005. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.107005>
- [15] Buzdin A.I. Proximity effects in superconductor-ferromagnet heterostructures. *Reviews of Modern Physics*. 2005;77(3):935-976. doi: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.77.935>
- [16] Konschelle F., Buzdin A. Magnetic Moment Manipulation by a Josephson Current. *Physical Review Letters*. 2009;102:017001. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.017001>
- [17] Atanasova P.K., Panayotova S.A., Rahmonov I.R., Shukrinov Yu.M., Zemlyanaya E.V., Bashashin M.V. Periodicity in the Appearance of Intervals of the Reversal of the Magnetic Moment of a ϕ_0 Josephson Junction. *JETP Letters*. 2019;110(11):722-726. doi: <https://doi.org/10.1134/S0021364019230073>
- [18] Atanasova P.K., Panayotova S.A., Zemlyanaya E.V., Shukrinov Y.M., Rahmonov I.R. Numerical Simulation of the Stiff System of Equations Within the Spintronic Model. In: Nikolov G., Kolkovska N., Georgiev K. (eds.). *Numerical Methods and Applications. NMA 2018. Lecture Notes in Computer Science*. Vol. 11189. Cham: Springer; 2019. P. 301-308. doi: https://doi.org/10.1007/978-3-030-10692-8_33
- [19] Lukyanov K.V., Zemlyanaya E.V., Lukyanov V.K., Kukhtina I.N., Penionzhkevich Yu.E., Sobolev Yu.G. Microscopic analysis of the energy dependence of the $^6\text{He}, ^6\text{Li} + ^{28}\text{Si}$ total reaction cross sections in the energy range $E = 5-50$ A MeV. *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. 2008;72(3):356-360. doi: <https://doi.org/10.3103/S1062873808030192>
- [20] Bashashin M.V., Zemlyanaya E.V., Rahmonov I.R., Shukrinov Yu.M., Atanasova P.Kh., Volokhova A.V. Numerical approach and parallel implementation for computer simulation of stacked long Josephson junctions. *Computer Research and Modeling*. 2016;8(4):593-604. Available at: <https://elibrary.ru/item.asp?id=26716888> (accessed 19.07.2022). (In Russ., abstract in Eng.)
- [21] Tanihata I., Hirata D., Kobayashi T., Shimoura S., Sugimoto K., Toki H. Revelation of thick neutron skins in nuclei. *Physics Letters B*. 1992;289(3-4):261-266. doi: [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(92\)91216-V](https://doi.org/10.1016/0370-2693(92)91216-V)
- [22] Bashashin M., Nechaevskiy A., Podgainy D., Rahmonov I., Shukrinov Yu., Streltsova O., Zemlyanaya E., Zuev M. Parallel Algorithms for Studying the System of Long Josephson Junctions. *CEUR Workshop Proceedings*. 2019;2507:392-396. Available at: <http://ceur-ws.org/Vol-2507/392-396-paper-72.pdf> (accessed 19.07.2022).
- [23] Klimentov A.A. Exascale Data Processing in Heterogeneous Distributed Computing Infrastructure for Applications in High Energy Physics. *Physics of Particles and Nuclei*. 2020;51(6):995-1068. doi: <https://doi.org/10.1134/S1063779620060052>
- [24] Lukyanov V.K., Kadrev D.N., Zemlyanaya E.V., Lukyanov K.V., Antonov A.N., Gaidarov M.K. Microscopic analysis of quasielastic scattering and breakup reactions of the neutron-rich nuclei $^{12,14}\text{Be}$. *Physical Review C*. 2019;100(3):034602. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.100.034602>
- [25] Panayotova S., Bashashin M., Zemlyanaya E., Atanasova P., Shukrinov Yu., Rahmonov I. Parallel Numerical Simulation of the Magnetic Moment Reversal within the ϕ_0 -Josephson Junction Spintronic Model. *EPJ Web of Conferences*. 2020;226:02018. doi: <https://doi.org/10.1051/epjconf/202022602018>

Submitted 19.07.2022; approved after reviewing 04.09.2022; accepted for publication 16.10.2022.

About the authors:

Maxim V. Bashashin, Junior Researcher of the Mescheryakov Laboratory of Information Technologies, Joint Institute for Nuclear Research (6 Joliot-Curie St., Dubna 141980, Moscow Region, Russian Federation); Senior Teacher of the Institute of System Analysis and Management, Dubna State University (19 Universitetskaya St., Dubna 141980, Moscow Region, Russian Federation), ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2706-8668>, bashashinmv@jinr.ru

Elena V. Zemlyanaya, Head of Sector of Computing of Complex Physical Systems of the Mescheryakov Laboratory of Information Technologies, Joint Institute for Nuclear Research (6 Joliot-Curie St., Dubna 141980, Moscow Region, Russian Federation); Professor of the Institute of System Analysis and Management, Dubna State University (19 Universitetskaya St., Dubna 141980, Moscow Region, Russian Federation), Dr.Sci. (Phys.-Math.), ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8149-9533>, elena@jinr.ru

All authors have read and approved the final manuscript.

