

Интегральные уравнения в физике частиц: вычислительные аспекты

- ❑ Как считали в 90е
- ❑ Что сейчас
- ❑ Фронт работ



Земляная Е.В. (ЛИТ ОИЯИ, Дубна)
elena@jinr.ru

Ю.Л. Калиновский, А.В. Волохова,
В.С. Рихвицкий, А.В. Хмелев и др.

ЧТО БЫЛО в 90е годы (1/2)



- ШД: система уравнений вида

$$f(x) = \int \Phi(f(x), x) dz$$

Метод простых итераций:

$$f_{n+1}(x) = \int \Phi(f_n(x), x) dz$$

- ✓ надо задать начальное приближение для f и критерий завершения итерационного процесса
- ✓ используем квадратурную формулу для аппроксимации интеграла

- БС: система уравнений вида

$$L(x) + \lambda L(x) = F, \text{ где } F = \int \Phi(L, x, f) dz$$

- ✓ модифицированный метод простых итераций (можно сделать).
- ✓ **НЬЮТОНОВСКИЕ** итерации (то, что реально использовали):

$$z_{n+1} = z_n - [F'(z_n)]^{-1} \cdot F(z_n)$$

В нашем случае $z=(L, \lambda)$ – функция & собственное значение.

$$y(x)=0$$

$$x_{n+1}=x_n+y(x_n)/y'(x_n)$$

ЧТО БЫЛО в 90е годы (2/2)



- ❑ **Проблема:** расчет $[F']^{-1}$ на каждой итерации в случае интегрального уравнения требует обращения заполненной матрицы размерности, соответствующий числу узлов дискретной сетки по координате (N).
- ❑ **Модификация** ньютоновской схемы с заменой обращения матрицы двумя перемножениями вспомогательных матриц.
- ❑ Объем вычислений и при обращении матрицы, и при перемножении матриц – пропорционален N^2 .



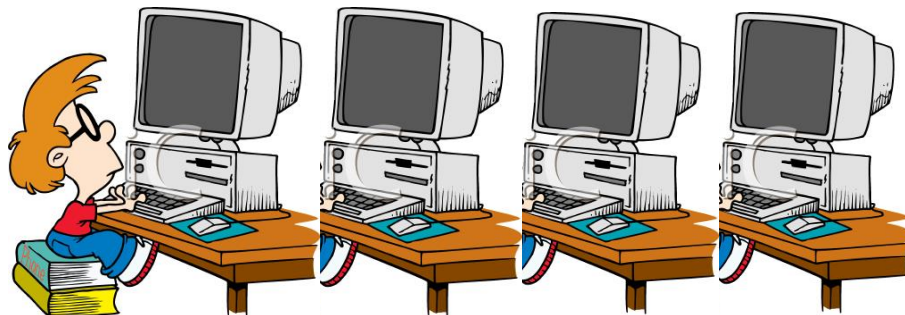
ВЕКТОРНАЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ СИСТЕМА CONVEX C120\220

Векторизация при умножении матриц работает эффективнее!

- ✓ Ускорение для задачи ШД – до 30 раз
- ✓ Ускорение для задачи БС:
 - 1.5 раза для «классической» схемы
 - до 20 раз для модифицированной схемы



30 лет спустя



Что новенького имеем в смысле возможностей вычислений:

- Многоядерные и многопроцессорные системы, графические ускорители + технологии программирования таких систем
- Технологии программирования сверхвысокого уровня (MATLAB, Maple, Python et al)
- SIMD-расширения наборов машинных инструкций современных процессоров (включая AVX-512)- современное воплощение идеи векторизации вычислений

Что и как сделали к настоящему моменту:

- Maple-реализация численного решения задач ШД и БС с потенциалом Юкавы
- ШД: простые итерации
- БС: Использование средств Maple для решения полной задачи на собственные значения

Некоторые результаты

(расчет А.В.Волоховой, В.С.Рихвицкого)

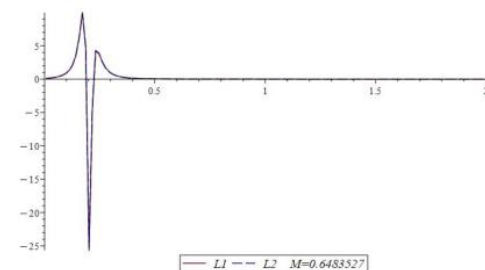
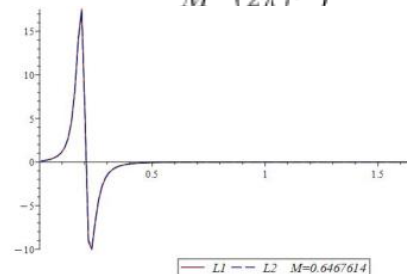
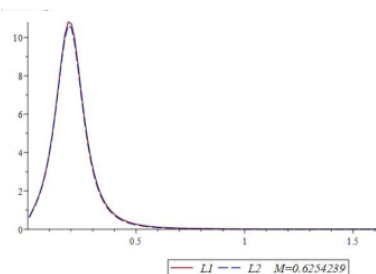
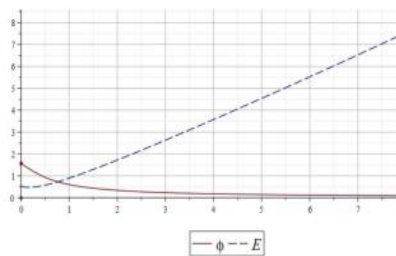
ШД

$$\begin{cases} E(k) \sin \phi(k) = m^0 - \int dq \int_{\cos \alpha = -1}^{\cos \alpha = 1} d \cos \alpha \frac{q^2 2\pi}{(2\pi)^3} \frac{4\pi \alpha^0}{k^2 + q^2 - 2kq_j \cos \alpha} \sin \phi(q) \\ E(k) \cos \phi(k) = |k| - \int dq \int_{\cos \alpha = -1}^{\cos \alpha = 1} d \cos \alpha \frac{q^2 2\pi}{(2\pi)^3} \frac{4\pi \alpha^0}{k^2 + q^2 - 2k_j q \cos \alpha} \cos \alpha \cos \phi(q) \end{cases}$$

БС

$$\begin{cases} M L_2(p) = E(p) L_1(p) - \int dq \int_{\cos \alpha = -1}^{\cos \alpha = 1} d \cos \alpha \frac{q^2 2\pi}{(2\pi)^3} \frac{4\pi \alpha^0}{p^2 + q^2 - 2pq \cos \alpha} (c_p^- c_q^- + s_p^- s_q^- \cos \alpha) L_1(q) \\ M L_1(p) = E(p) L_2(p) - \int dq \int_{\cos \alpha = -1}^{\cos \alpha = 1} d \cos \alpha \frac{q^2 2\pi}{(2\pi)^3} \frac{4\pi \alpha^0}{p^2 + q^2 - 2pq \cos \alpha} (c_p^+ c_q^+ + s_p^+ s_q^+ \cos \alpha) L_2(q) \end{cases}$$

$$c_{p_i}^{\pm} = \cos(\phi_1(p_i) \pm \phi_2(p_i)), \quad s_{p_i}^{\pm} = \sin(\phi_1(p_i) \pm \phi_2(p_i)), \quad \frac{4N_C}{M} \frac{1}{(2\pi)^3} \int L_1(p) L_2(p) dp = 1,$$



Фронт работ

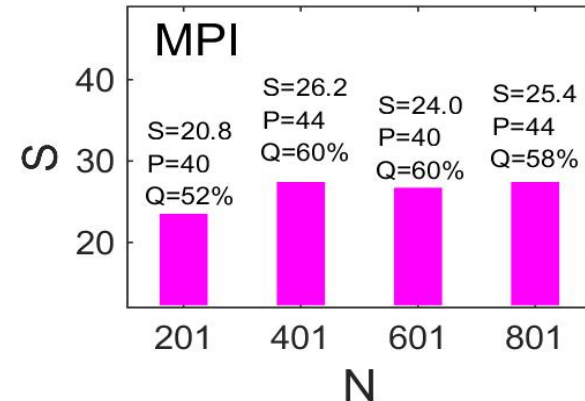


- Реализация на C++
- Параллельная реализация на основе MPI и/или OpenMP (расчет интегралов в простых итерациях и перемножение матриц – классические задачи для параллельной реализации)
- Проверка эффекта использования векторизации на базе SIMD-расширений машинных инструкций

PS1: интегральные уравнения бывают не только в физике частиц!!

PS2: решать придется не только интегральные уравнения!!

Микроскопический ядро-ядерный потенциал в модели двойного фолдинга (пример к PS1)



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

$$K^2(r) = \frac{2mM}{\hbar^2} [E_{c.m.} - V(E, r) - U_C(r)] \quad v_{NN}^{D, EX}(E, \rho, \mathbf{r}_{pt}) = g(E) F(\rho) v(r)$$

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

БИБЛИОТЕКА ПРОГРАММ JINRLIB



DFM-POTM - параллельная реализация расчета ядро-ядерного потенциала в рамках модели двойного фолдинга

Авторы: К.В. Лукьянов, Е.В. Земляная, М.В. Башашин

Eng

Вы

797

посетитель.

Язык: C++

Комплекс программ DFM-POTM реализует построение ядро-ядерного оптического потенциала упругого рассеяния на основе модели двойного фолдинга (МДФ) и включает три составляющие:

- написанную на языке C++ последовательную версию dfm-potm.cpp,
- параллельную версию dfm-potm_mpi.cpp, разработанную с использованием технологии MPI,
- параллельную версию dfm-potm_openmp.cpp, разработанную с использованием технологии OpenMP.

**СПАСИБО
ЗА
ВНИМАНИЕ!**

