

Сверхбыстрые вычисления в квантовой и ядерной физике на персональном компьютере (как превратить персоналку в настольный суперкомпьютер)

В.И. Кукулин, В.Н. Померанцев, О.А. Рубцова
ОФАЯ

Научный семинар по ядерной физике НИИЯФ МГУ

18 февраля 2014 г.

Современные задачи квантовой физики требуют, как правило, очень большого объема вычислений, и, как следствие, огромных вычислительных ресурсов.



Примеры

- Реалистические *ab initio* расчеты легких ядер, начиная от ${}^4\text{He}$, приводят к матрицам гамильтониана размерностью 10^6 - 10^9 (т.е. количество необходимых матричных элементов будет 10^{12} - 10^{18}), поэтому могут быть выполнены только на очень мощных современных суперкомпьютерах.
- Реалистические расчеты $3N$ - и $4N$ - рассеяния по уравнениям Фаддеева-Якубовского как правило также требуют очень мощных вычислительных ресурсов (см. рис.).
- Расчеты больших молекул в квантовой химии;
- КХД расчеты на решетках;
- Почти вся газо- и гидродинамика требует огромных вычислительных затрат;
- Моделирование горячей плазмы;
- Лазерная физика (моделирование лазерного излучения с веществом);
- и т.д.

Однако

- Доступность больших суперкомпьютеров пока ограничена, особенно в России.
- Даже в США и Германии суперкомпьютерное время очень дорогое и нужно иметь соответствующие средства на грантах для его оплаты.
- Требуется преобразование исходной задачи в форму, пригодную для распараллеливания и т.д.

Нельзя ли найти какой-то альтернативный способ выполнения очень большого объема расчетов в приемлемое время и без затрат больших денег (которых, как правило, нет) ?

В самое последнее время такие замечательные возможности появились и **это и есть тема настоящего семинара.**

Новый путь в решении квантовых задач рассеяния, и не только

Состоит из следующих шагов:

1. Дискретизация импульсного пространства. Формулировка основных уравнений теории рассеяния в дискретном пакетном представлении.
2. Прекондиционирование (фильтрация) полученных уравнений (например, на основе вейвлетов или дискретного Фурье-анализа) для получения разреженных матриц.
3. Распараллеливание матричной задачи и превращение ее в форму, подходящую для многопоточковых вычислений на графических процессорах – Graphics Processor Unit (GPU).

Мы прошли весь этот новый путь и показали очень высокую эффективность такого принципиально нового подхода к решению квантовых задач на примере численно очень громоздкой и нетривиальной квантовой задачи рассеяния трех тел, т.е. применительно к численному решению уравнения Фаддеева выше (и ниже) порога $3N$ -развала с полностью реалистическими NN -потенциалами взаимодействия.

Основные публикации

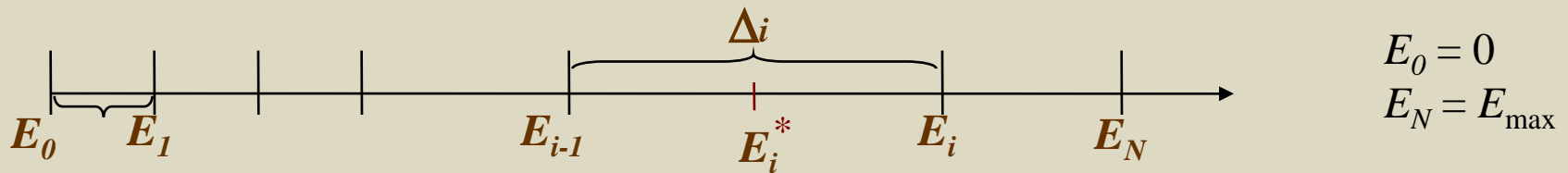
- O.A. Rubtsova, V.N. Pomerantsev, V.I. Kukulin, A. Faessler, Phys. Rev. C **86**, 034003 (2012).
O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, V.N. Pomerantsev, Phys. Rev. C **84**, 044002 (2011).
O.A. Rubtsova, V.N. Pomerantsev, V.I. Kukulin, A. Faessler, Phys. Rev. C **81**, 064003 (2010).
O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, V.N. Pomerantsev, Phys. Rev. C **79**, 064602 (2009).
V.N. Pomerantsev, V.I. Kukulin, O.A. Rubtsova, Phys. Rev. C **79**, 034001 (2009).
O.A. Rubtsova, V.I. Kukulin, A.M. Moro, Phys. Rev. C **78**, 034603 (2008).
V.I. Kukulin, O.A. Rubtsova, Phys. Rev. C **76**, 047601 (2007).
В.И. Кукулин, О.А. Рубцова, ЯФ **75**, 1447 (2012).
С.А. Кельвич, В.И. Кукулин, О.А. Рубцова, ЯФ **77** (2014) (в печати).

Доклады на международных конференциях

- International Conferences on Few-Body Problems in Physics (2009, 2012).
- Bogolybov Conference on Problems in Theoretical and Mathematical Physics (Dubna, 2009).
- Ядро-2008,2010-2012
- Few-Body Systems, International Workshop (Dubna, 2012)

Шаг 1. Дискретизация импульсного пространства с помощью L_2 базиса волновых пакетов

В этом подходе, вместо точных функций и операторов рассеяния используются их аналоги в дискретном представлении, которое строится путем разбиения непрерывного энергетического спектра на дискретные полосы.



$$|x_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Delta_i}} \int_{E_{i-1}}^{E_i} |\psi_0(\varepsilon)\rangle d\varepsilon \quad \text{- свободные стационарные волновые пакеты (СВП)}$$

$$|y_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Delta_i}} \int_{E_{i-1}}^{E_i} |\psi(\varepsilon)\rangle d\varepsilon \quad \text{- возмущенные СВП (строятся из точных (возмущенных) волновых функций рассеяния } |\psi(\varepsilon)\rangle \text{)}$$

Первоначальные идеи в этой области принадлежат Е. Вигнеру, Г. Бете и др. (30-е годы XX века).

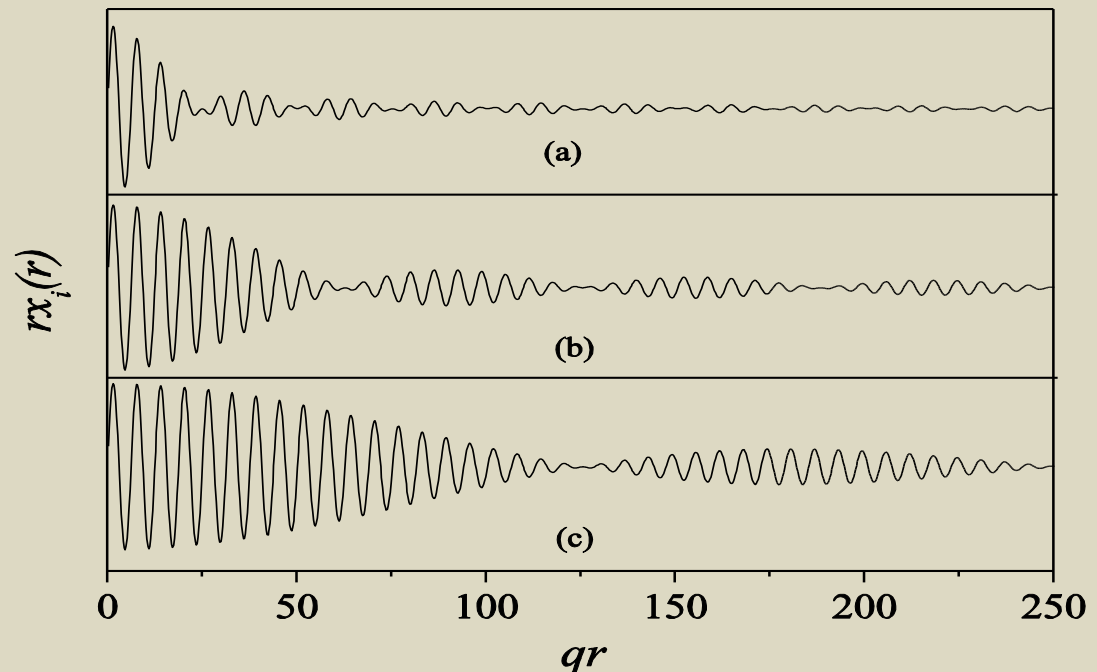
Основные свойства свободных и возмущенных волновых пакетов

$$\left. \begin{aligned} \langle x_i | x_j \rangle &= \delta_{ij} \\ \langle y_i | y_j \rangle &= \delta_{ij}, \langle y_i | \varphi_b \rangle = 0 \end{aligned} \right\} \quad \text{ортонормированность}$$

Системы $\{|x_i\rangle\}_{i=1}^{N_1}$ и $[\varphi_b, \{|y_i\rangle\}_{i=1}^{N_2}]$ образуют «почти» полные базисы в гильбертовом пространстве (при $N_1 \rightarrow \infty$ и $N_2 \rightarrow \infty$).

Поведение волновых пакетов в координатном представлении при разных соотношениях между их собственными энергиями и ширинами.

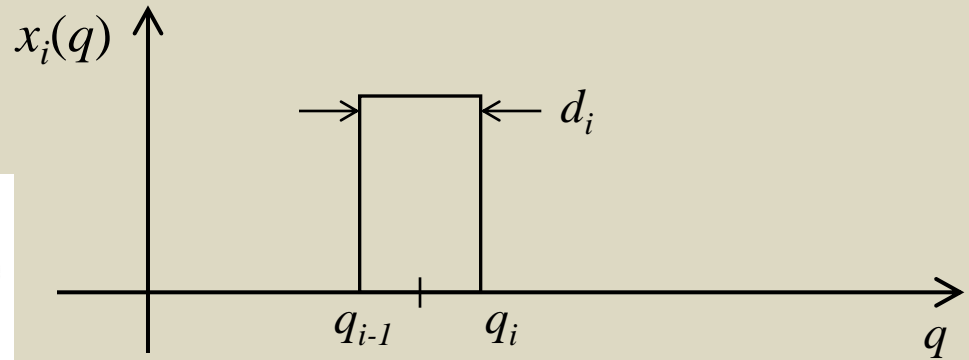
$$\frac{\Delta_i}{E_i^*} = \begin{cases} 0.5 & \text{(a);} \\ 0.2 & \text{(b);} \\ 0.1 & \text{(c).} \end{cases}$$



Дискретное импульсное представление

В импульсном пространстве свободные пакеты имеют вид прямоугольных импульсов

$$x_i(q) = \frac{\theta(q - q_{i-1}) - \theta(q - q_i)}{\sqrt{d_i}}, \quad i = 1, \dots, N.$$



Действуя проектором

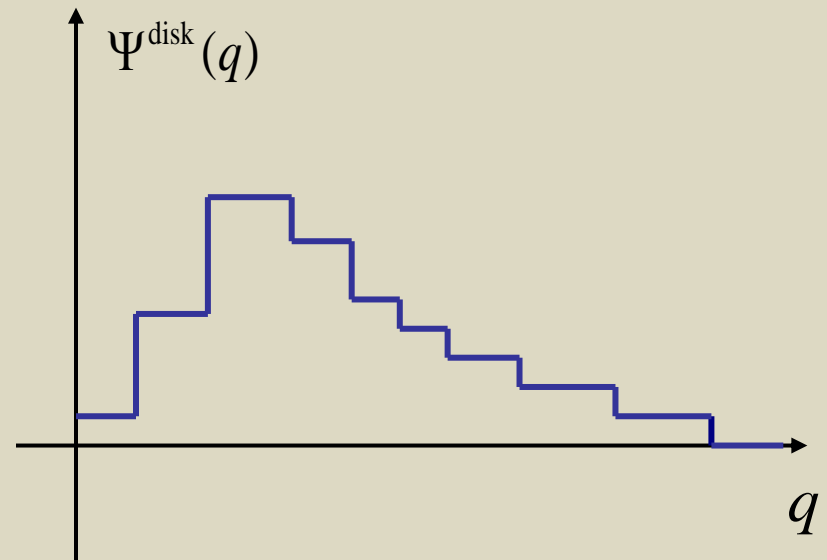
$$\mathbb{P} = \sum_{i=1}^N |x_i\rangle\langle x_i|$$

на непрерывную по q функцию,

получаем
$$|\Psi^{\text{disk}}\rangle \equiv \mathbb{P}|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^N C_i |x_i\rangle$$

Таким образом, в пакетном подходе волновые функции рассеяния представляются гистограммой по импульсу.

Проектирование в пакетный базис соответствует формулировке задачи рассеяния на решетке в импульсном пространстве.



Дискретное представление операторов

В результате такой дискретизации по энергии и по импульсам частиц мы получаем чисто дискретное, матрично-ступенчатое представление для всех операторов теории рассеяния. При этом энергетические зависимости операторов дополнительно усредняются внутри ячеек решетки.

Исходное (непрерывное по энергии и импульсам) представление:

Дискретное (пакетное) представление:

$$g_0(E; p, p')$$

свободная резольвента:



$$[\mathbf{g}_0]_k^i \delta_{k,k'}$$

$$g(E; p, p')$$

полная резольвента:



$$\mathbf{g}_{k,k'}^i$$

$$t(E; p, p')$$

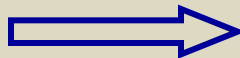
t-матрица:



$$\mathbf{t}_{k,k'}^i$$

$$\delta_L(E)$$

парциальный фазовый сдвиг:



$$\delta_L^i$$

$$\left\{ \begin{array}{l} E \in \Delta_i \\ p \in d_k \\ p' \in d_{k'} \end{array} \right.$$

Уравнения Липпмана-Швингера в дискретном представлении

Исходное УЛШ

$$t(p, p'; E) = v(p, p') + 4\pi \int_0^\infty (p'')^2 dp'' \frac{v(p, p'')t(p'', p'; E)}{E - \frac{(p'')^2}{2m} + i\eta}$$

Используя далее проектирование в пакетный базис, а также усреднение по энергии, получаем чисто матричное уравнение

$$t_{i,i'}^k = v_{i,i'} + \sum_{i''} v_{i,i''} [g_0]_{i''}^k t_{i'',i}^k \quad E \in \Delta_k$$

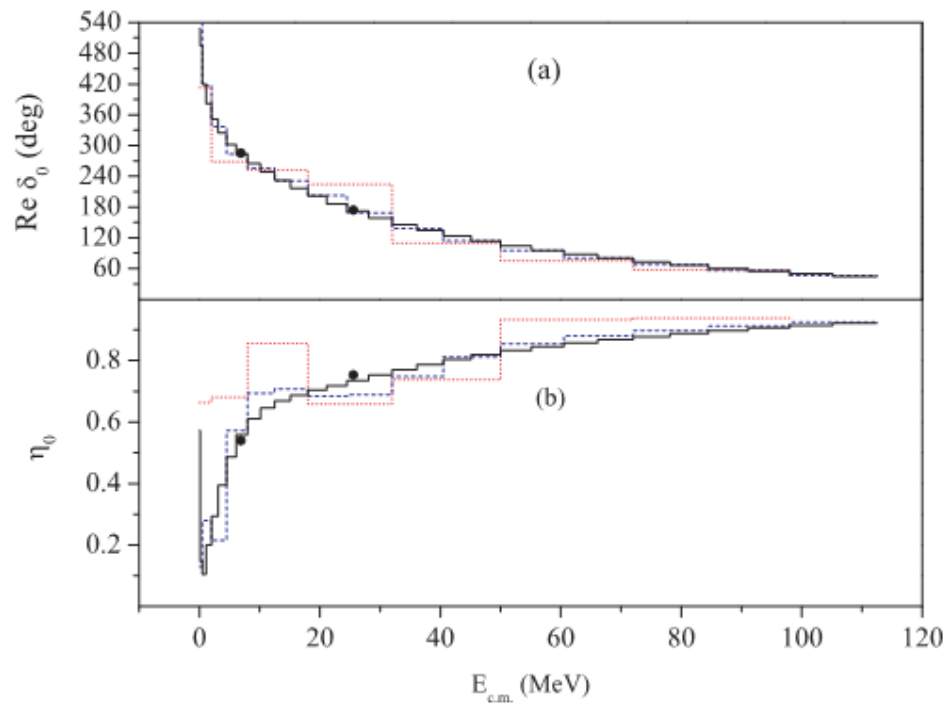
Связь с S-матрицей и парциальными фазовыми сдвигами.

$$S = e^{2i\delta(E)} \approx 1 - 2\pi i \cdot \frac{t_{k,k}^k}{\Delta_k}$$

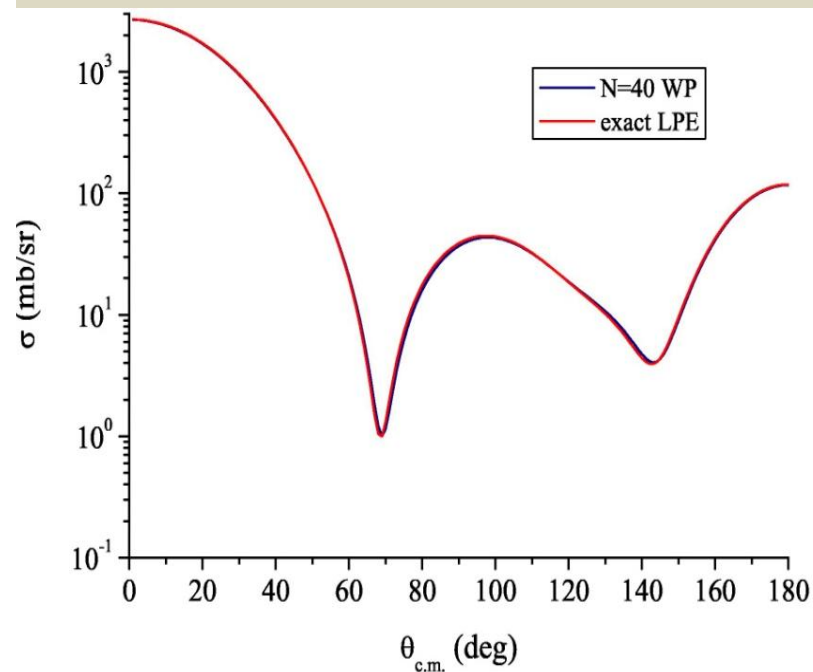
В случае заряженных частиц весь формализм остается прежним, только следует использовать базис **кулоновских** волновых пакетов.

Результаты пакетных вычислений для рассеяния $n+^{56}\text{Fe}$ (в поле нелокального оптического потенциала Перей-Бака)

S-волновые парциальные фазовые сдвиги
и параметры неупругости

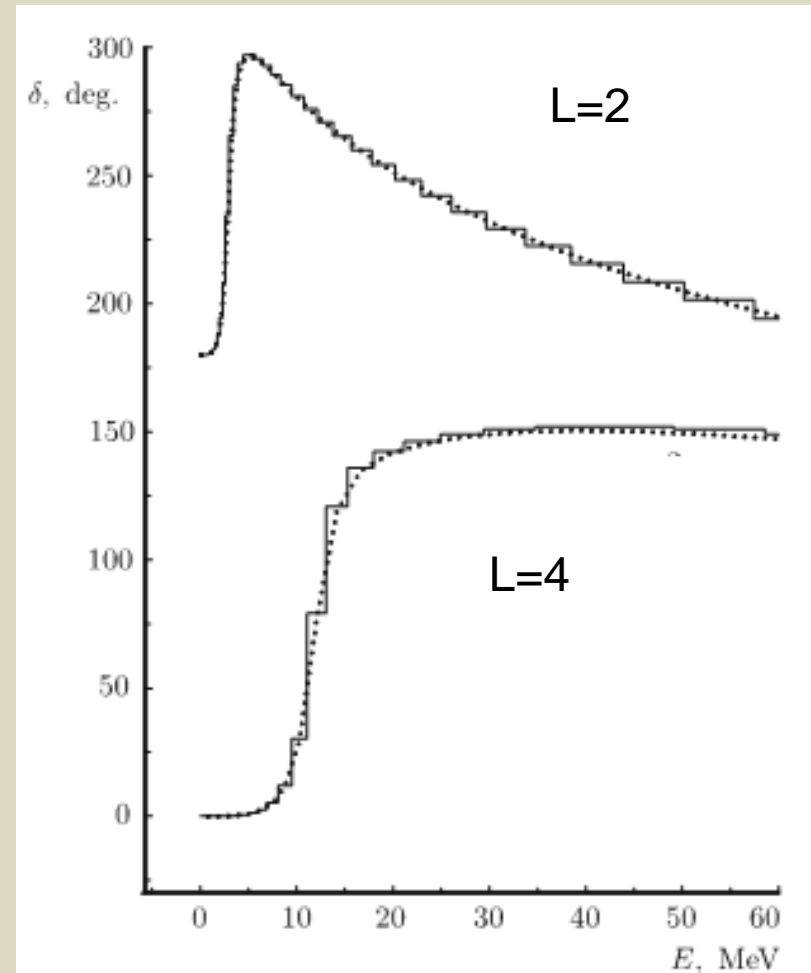
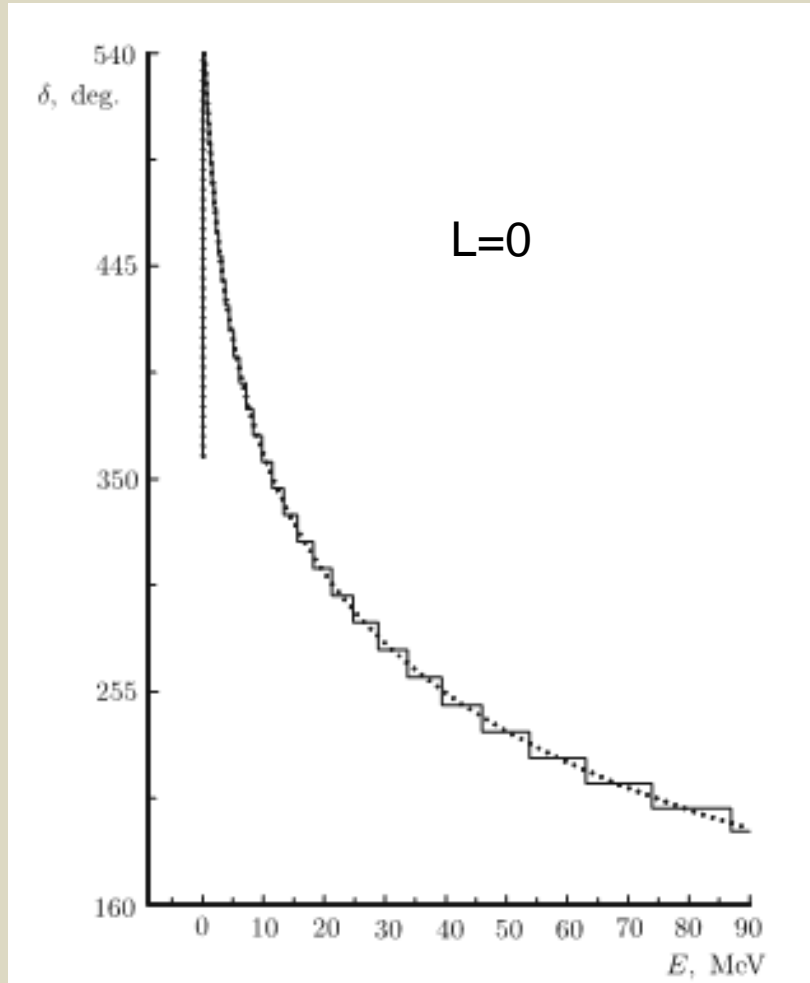


Сечение упругого рассеяния
при $E_n=7$ МэВ



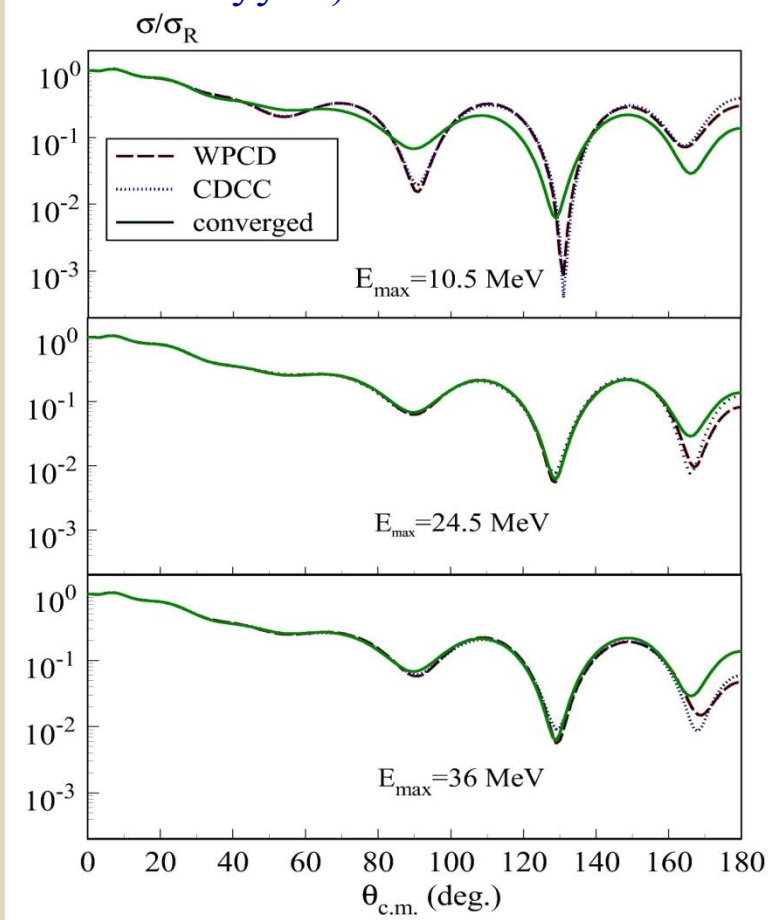
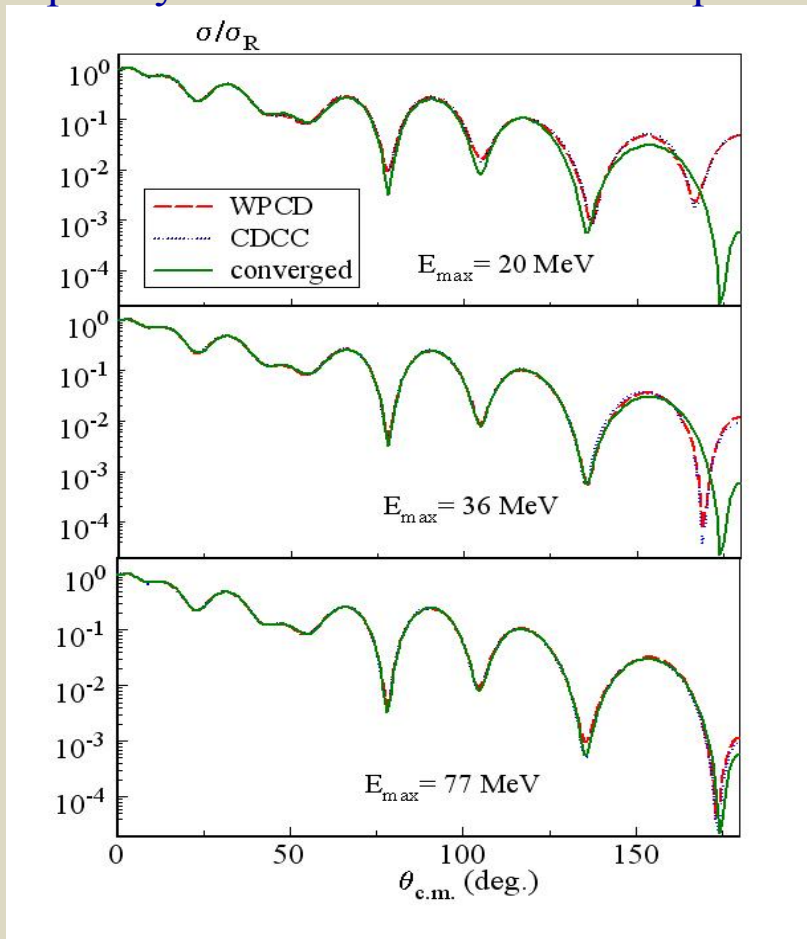
- результаты для локальных фазово-эквивалентных потенциалов при $E_n=7$ и 26 МэВ

Парциальные фазовые сдвиги α – α рассеяния



Решение трехчастичных интегральных уравнений Липпмана-Швингера в дискретном представлении

Дифференциальные сечения упругого $d+^{58}\text{Ni}$ рассеяния при энергии дейтронов 21.6 МэВ (слева) и 12 МэВ (справа). Сходимость по величине E_{max} (максимальной энергии учитываемых состояний промежуточного континуума).



Мы впервые показали (O.Rubtsova, V.Kukulin, A. Moro, PRC **78**, 034603 (2008)), что вклад закрытых каналов является существенным, особенно при больших углах рассеяния.

Применение пакетной дискретизации
трехчастичного импульсного пространства для
решения уравнений Фаддеева с
реалистическими NN -взаимодействиями

Трехчастичные уравнения Фаддеева

(E.P. Harper, Y.E. Kim, A. Tubis, PRC, **2**, 877 (1970).)

The nonrelativistic three-particle scattering matrix T for particles of mass m_1 , m_2 , and m_3 can be decomposed as^{1,8}

$$T = T^{(1)} + T^{(2)} + T^{(3)} . \quad (2.1)$$

The $T^{(i)}$'s satisfy the Faddeev equations

$$T^{(i)}(s) = T_i(s) - \sum_{j \neq i} T_i(s) G_0(s) T^{(j)}(s), \quad i = 1, 2, 3 . \quad (2.2)$$

$G_0(s)$ is the three-particle Green's function

$$G_0(s) = (H_0 - s)^{-1}, \quad (2.3)$$

(H_0 being the three-particle kinetic energy operator), s is the total energy of the three-particle system, the T_i 's are the off-shell two-body T -matrices

Уравнения Фаддеева для трех тождественных бозонов

Faddeev equation in Jacobi momenta variables has the form

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}\mathbf{q}|T|\varphi_d\mathbf{q}_0\rangle &= \varphi_d\left(\mathbf{q} + \frac{1}{2}\mathbf{q}_0\right) t_s\left(\mathbf{p}, \frac{1}{2}\mathbf{q} + \mathbf{q}_0, E - \frac{3}{4m}q^2\right) \\ &+ \int d^3q'' t_s\left(\mathbf{p}, \frac{1}{2}\mathbf{q} + \mathbf{q}'', E - \frac{3}{4m}q^2\right) \frac{\langle \mathbf{q} + \frac{1}{2}\mathbf{q}'', \mathbf{q}''|T|\varphi_d\mathbf{q}_0\rangle}{E - \frac{1}{m}(q^2 + q''^2 + \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}'') + i\varepsilon}. \end{aligned} \quad (0.1)$$

Here $t_s(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = t(\mathbf{p}, \mathbf{p}') + t(-\mathbf{p}', \mathbf{p})$ is the symmetrized t matrix and E is the total energy in the center of mass (c.m.) system

$$E = E_d + \frac{3}{4m}q_0^2 = E_d + \frac{2}{3}E_{lab}. \quad (0.2)$$

$t_s(z)$ has a pole at $z = E_d$. Extracting the residue explicitly by defining

$$t_s(\mathbf{p}', \mathbf{p}, z) \equiv \frac{\hat{t}_s(\mathbf{p}', \mathbf{p}, z)}{z - E_d} \quad (0.3)$$

and similarly for T , Eq. (0.1) can be rewritten as

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}\mathbf{q}|\hat{T}|\varphi_d\mathbf{q}_0\rangle &= \varphi_d\left(\mathbf{q} + \frac{1}{2}\mathbf{q}_0\right) \hat{t}_s\left(\mathbf{p}, \frac{1}{2}\mathbf{q} + \mathbf{q}_0, E - \frac{3}{4m}q^2\right) \\ &+ \int d^3q'' \frac{\hat{t}_s\left(\mathbf{p}, \frac{1}{2}\mathbf{q} + \mathbf{q}'', E - \frac{3}{4m}q^2\right)}{E - \frac{1}{m}(q^2 + q''^2 + \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}'') + i\varepsilon} \frac{\langle \mathbf{q} + \frac{1}{2}\mathbf{q}'', \mathbf{q}''|\hat{T}|\varphi_d\mathbf{q}_0\rangle}{E - \frac{3}{4m}q''^2 - E_d + i\varepsilon}. \end{aligned} \quad (0.4)$$

Парциально-волновое разложение трехчастичных волновых функций рассеяния

$$\begin{aligned} |p, q, \alpha\rangle_i &= |p, q, \alpha(i, jk)\rangle_i = |[p(LS)J, q(ls)j]\mathcal{G}\mathcal{G}_z; (Tt)\mathcal{T}\mathcal{T}_z\rangle_i \\ &= \sum_{m_J, m_j} \langle Jm_J jm_j | \mathcal{G}\mathcal{G}_z \rangle |p(LS)Jm_J; q(ls)jm_j\rangle_i | (Tt)\mathcal{T}\mathcal{T}_z \rangle_i \end{aligned}$$

with

$$|p(LS)Jm_J; q(ls)jm_j\rangle_i = \sum_{m_L, m_S} \sum_{m_l, m_s} \langle Lm_L Sm_S | Jm_J \rangle \langle lm_l sm_s | jm_j \rangle |pLm_L; qlm_l\rangle |Sm_S\rangle_i |sm_s\rangle$$

and

$$|Sm_S\rangle_i = |(s_j s_k)Sm_S\rangle_i = \sum_{m_{s_j}, m_{s_k}} \langle s_j m_{s_j} s_k m_{s_k} | Sm_S \rangle |s_j m_{s_j}\rangle |s_k m_{s_k}\rangle \quad (ijk \text{ cyclic}),$$

The Faddeev equation, in the J - j coupling scheme, becomes

$$\psi_s^{(1)}(p, q, \alpha) = \varphi_s^{(1)}(p, q, \alpha) - 2 \sum_{\alpha_2} \int_0^\infty p_2^2 dp_2 \int_0^\infty q_2^2 dq_2 \frac{{}^{(1)}K_2}{p_2^2 + q_2^2 - s} \psi_s^{(1)}(p_2, q_2, \alpha_2),$$

where

$$\psi_s^{(1)}(p, q, \alpha) = {}_1\langle p, q, \alpha | T^{(1)}(s) | \psi \rangle_A,$$

$$\psi_s^{(1)}(p_2, q_2, \alpha_2) = {}_1\langle p_2, q_2, \alpha_2 | T^{(1)}(s) | \psi \rangle_A,$$

$$\varphi_s^{(1)}(p, q, \alpha) = {}_1\langle p, q, \alpha | T_1(s) | \psi \rangle_A,$$

and

$${}^{(1)}K_2 = {}_1\langle p, q, \alpha | T_1(s) | p_2, q_2, \alpha_2 \rangle_2.$$

Using (4.4) in (4.9), we obtain

$$\begin{aligned} {}^{(1)}K_2 = & \sum_{\substack{\text{(all magnetic numbers} \\ \text{except } \mathcal{J}_z, \mathcal{J}_{2z})}} \langle \mathcal{J} \mathcal{J}_z | J m_J j m_j \rangle \langle J m_J | L m_L S m_S \rangle \langle j m_j | l m_l s m_s \rangle \langle J_2 m_{J_2} j_2 m_{j_2} | \mathcal{J}_2 \mathcal{J}_{2z} \rangle \\ & \times \langle L_2 m_{L_2} S_2 m_{S_2} | J_2 m_{J_2} \rangle \langle l_2 m_{l_2} s_2 m_{s_2} | j_2 m_{j_2} \rangle \int d\hat{p} \int d\hat{q} \int d\hat{p}_2 \int d\hat{q}_2 Y_{L m_L}^*(\hat{p}) Y_{l m_l}^*(\hat{q}) Y_{L_2 m_{L_2}}(\hat{p}_2) Y_{l_2 m_{l_2}}(\hat{q}_2) \\ & \times {}_1\langle \vec{p}, \vec{q}; S m_S, s m_s; (T t) \mathcal{T} \mathcal{T}_z | T_1(s) | \vec{p}_2, \vec{q}_2; S_2 m_{S_2}, s_2 m_{s_2}; (T_2 t_2) \mathcal{T}_2 \mathcal{T}_{2z} \rangle_2. \end{aligned}$$

The final result for the integral part of the Faddeev equation (4.6) is

$$\begin{aligned}
& \int_0^\infty p_2^2 dp_2 \int_0^\infty q_2^2 dq_2 \frac{{}^{(1)}K_2}{p_2^2 + q_2^2 - s} \psi_s^{(1)}(p_2, q_2, \alpha_2) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{s_1, j_1} \delta_{j j_1} \delta_{s s_1} \delta_{T_z T_{2z}} (-1)^{t_2 - T_2 - T_{2z}} \hat{T} \hat{T}_2 W(t_1 t_3 T_2 t_2; T_2 T) \sum_{T_z, t_z} \langle T T_z t t_z | T T_z \rangle \langle T T_z t t_z | T_2 T_{2z} \rangle \\
&\times \sum_{L_1} \bar{\delta}_{L_1, L} \sum_{\lambda \Lambda r r_1 r_2} \binom{2l+1}{2\lambda}^{1/2} \binom{2L_1+1}{2\Lambda}^{1/2} (\alpha_{12})^{l-\lambda+\Lambda-1} (\beta_{12})^{\lambda+L_1-\Lambda-1} (-1)^{L_1+l-\lambda} (2L_2+1)^{1/2} (2l_2+1)^{1/2} \\
&\times (2r_1+1)(2r_2+1)[2(L_1-\Lambda)+1]^{1/2} [2(l-\lambda)+1]^{1/2} \hat{r}^2 \begin{pmatrix} L_2 & r & r_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Lambda & \lambda & r_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r & l_2 & r_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_1-\Lambda & l-\lambda & r_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\times G_{J-j} \frac{1}{q^{l+1}} \int_0^\infty dq_2 q_2^{L_1-\Lambda+l-\lambda+1} \int_{|\alpha_{12} q_2 - q|/\beta_{12}}^{(\alpha_{12} q_2 + q)/\beta_{12}} dp_2 p_2^{\Lambda+\lambda+1} \frac{\tau_{L_1, L}^{J_1 S T T_z}(p^2, p_2^2 + q_2^2 - q^2; s - q^2)}{(p_2^2 + q_2^2 - s)(p_2^2 + q_2^2 - q^2)^{L_1/2}} \\
&\times P_r \left(\frac{\beta_{12}^2 p_2^2 + \alpha_{12}^2 q_2^2 - q^2}{2\alpha_{12}\beta_{12}p_2q_2} \right) \psi_s^{(1)}(p_2, q_2, \alpha_2).
\end{aligned}$$

The τ function is related to the two-body t matrix for $S=0$ and $T=0$ or 1 by the relation

$$\tau_{L, L}^{L 0 T T_z}(p^2, p_1^2; s - q^2) = -\frac{2}{\pi} t_L(p, p_1; (s - q^2)^{1/2}),$$

where G_{J-j} is the geometrical factor given by

$$\begin{aligned}
 G_{J-j} = & \frac{1}{2J+1} \sum_{\substack{\text{all } m^*s, \\ J_z}} (-1)^{m_r} \delta_{J_z J_z} \delta_{J_z J_z} \delta_{J_z J_z} \delta_{m_{L_1}+m_{S_1}, m_L+m_S} \delta_{m_\Lambda+m_\lambda, m_{L_2}-m_r} \delta_{m_r+m_{l_2}, m_{L_1}+m_l-m_\Lambda-m_\lambda} \\
 & \times \langle J_z J_z | J m_J j m_j \rangle \langle J m_J | L m_L S m_S \rangle \langle j m_j | l m_l s m_s \rangle \langle J_2 m_{J_2} j_2 m_{j_2} | J_2 J_{2z} \rangle \langle L_2 m_{L_2} S_2 m_{S_2} | J_2 m_{J_2} \rangle \\
 & \times \langle l_2 m_{l_2} s_2 m_{s_2} | j_2 m_{j_2} \rangle \langle L m_L S m_S | J_1 m_L + m_S \rangle \langle L_1 m_{L_1} S_1 m_{S_1} | J_1 m_{L_1} + m_{S_1} \rangle \langle s_3 m_{s_3} s_1 m_{s_1} | S_2 m_{S_2} \rangle \\
 & \times \langle s_2 m_{s_2} s_3 m_{s_3} | S_1 m_{S_1} \rangle \langle \lambda m_\lambda l - \lambda m_l - m_\lambda | l m \rangle \langle \Lambda m_\Lambda L_1 - \Lambda m_{L_1} - m_\Lambda | L_1 m_{L_1} \rangle \\
 & \times \begin{pmatrix} L_2 & r & r_1 \\ m_{L_2} & m_r & m_r - m_{L_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Lambda & \lambda & r_1 \\ m_\Lambda & m_\lambda & -m_\lambda - m_\Lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r & l_2 & r_2 \\ m_r & m_{l_2} & -m_r - m_{l_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_1 - \Lambda & l - \lambda & r_2 \\ m_{L_1} - m_\Lambda & m_l - m_\lambda & m_\Lambda + m_\lambda - m_{L_1} - m_l \end{pmatrix}.
 \end{aligned}
 \tag{4.19}$$

Проблемы с численным решением УФ

1. Переменные пределы интегрирования.
2. Движущиеся точки ветвления в ядре.
3. Необходимость в комплексной деформации контура интегрирования.
4. Многомерные интерполяции.
5. Очень высокая размерность матриц, получаемых в результате квадратурных аппроксимаций многомерных интегралов.

В итоге полное решение уравнений Фаддеева с реалистическими силами сталкивалось все 70-е и 80-е годы с почти непреодолимыми проблемами.

Решению этих проблем (разработке альтернативных к уравнениям Фаддеева видов уравнений, развитию эффективных сепарабельных приближений для ядер уравнений, учету кулоновских взаимодействий и т.д.) были посвящены многочисленные few-body конференции, организуемые каждый год как в СССР, так и вне его (европейские и мировые).

В этих конференциях принимали участие очень многие известные ученые, как теоретики (в основном), так и экспериментаторы.

Как иллюстрацию очень высокого уровня теоретических исследований в этой области мы приводим фотографию участников ФВ-конференции 1972 года в Киеве, в институте Теоретической Физики им. Н.Н. Боголюбова.



С чисто вычислительной стороны эти многочисленные исследования привели к выводу:

Для полностью реалистических фаддеевских расчетов выше порога $3N$ -развала при использовании стандартного подхода (с квадратурной аппроксимацией интегралов) необходимы наиболее мощные на сегодня векторные суперкомпьютеры (например, суперкомпьютер Blue Gene) с производительностью в сотни терафлоп/сек ($1\text{тфлоп}=10^{12}$ операций). Т.е. при использовании традиционных методов решения малонуклонных задач (выше $3N$ -порога развала) требуемая скорость расчетов $p \sim 10^{14}$ оп/сек!! Причем даже при таких скоростях расчет, как правило, требует многих часов суперкомпьютерного времени (очень дорогого).

Известные суперкомпьютеры

Jugene
в Юлихе



Kraken
в Университете штата
Теннесси



Ясно, что этот «прямой» путь является очень дорогим и приводит также к затрате больших человеческих усилий.

Поэтому мы выбрали совсем другой чисто дискретный путь.

Решение уравнений Фаддеева в пакетном (пиксельном) представлении

Описанная выше техника дискретизации (хотя, конечно, более сложная для трех- и более- частичного континуума), может быть применена и для решения многомерных интегральных уравнений Фаддеева-Якубовского.

Приведем в качестве примера УФ в полностью дискретном представлении для амплитуды упругого nd рассеяния U :

$$U = \mathbf{P}V_1 + \mathbf{P}V_1\mathbf{G}_1U,$$

где \mathbf{P} – матрица перестановки частиц, V_1 – матрица оператора NN взаимодействия, \mathbf{G}_1 – матрица трехчастичной канальной резольвенты трехнуклонного гамильтониана.

Усреднение сингулярного Фаддеевского ядра по импульсным ячейкам приводит к существенному сглаживанию сложных движущихся особенностей. В итоге вместо исходных интегральных уравнений впервые получаются **обычные матричные уравнения** с несингулярными матрицами, которые можно решать уже непосредственно **на персональном компьютере**.

Пакетное представление позволяет сделать ряд важных упрощений в стандартной фаддеевской схеме:

1. Все операторы и волновые функции проектируются в базис СВП. При этом можно использовать такой базис не только для свободного гамильтониана, но и для трехчастичных гамильтонианов каналов, определяющих асимптотические состояния в системе.
2. Формулировка задачи в таком «канальном» базисе позволяет использовать альтернативную (хотя и эквивалентную) форму фаддеевского ядра, в которое вместо двухчастичных t -матриц при многих энергиях входят канальная резольвента (имеющая аналитическое представление), а также двухчастичное взаимодействие. Таким образом существенно упрощается двухчастичный input трехчастичной задачи.
3. Энергетические и импульсные особенности ядра содержатся только в канальной резольвенте и могут быть выделены явно и сглажены по бинам дискретизации.

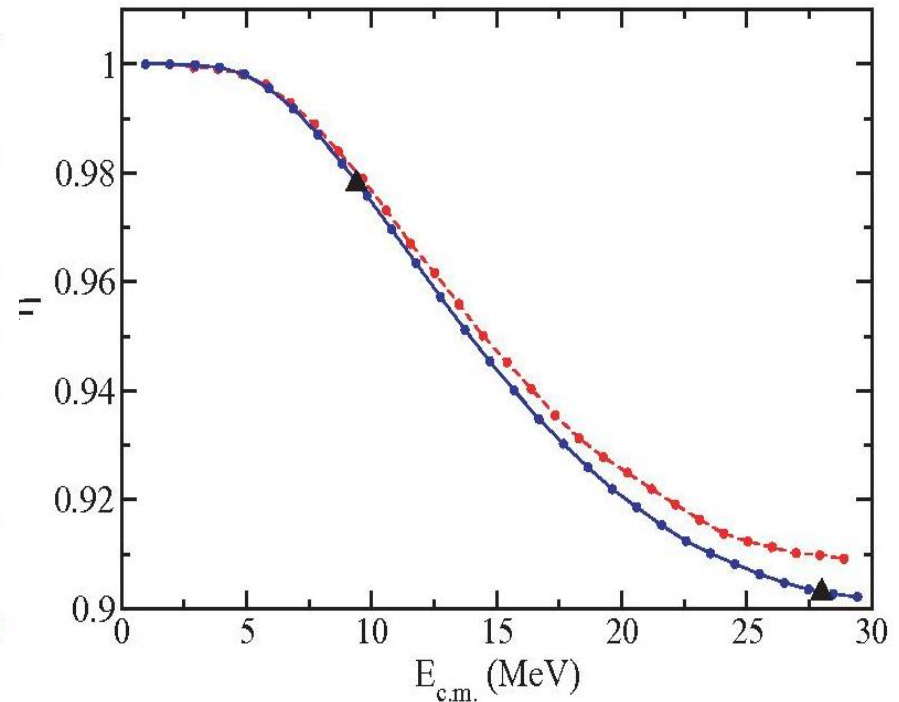
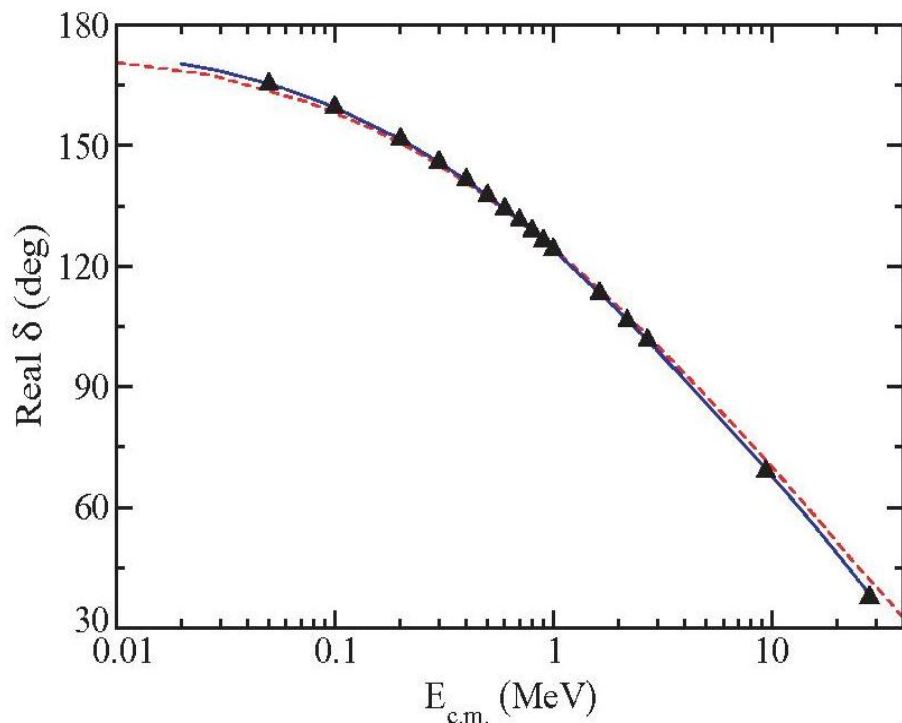
Хотя общая размерность результирующих матричных уравнений все равно получается в пакетном подходе весьма высокой, но матрица ядра представляется как произведение сильно разреженной матрицы перекрывания базисных функций, определенных в различных наборах координат Якоби (в которой в среднем отличен от нуля только 1% элементов), блочной матрицы потенциала и диагональной матрицы канальной резольвенты. Это дает возможность создать очень эффективную схему расчета даже на обычном РС.

Для проверки эффективности развитого подхода мы сравнили результаты наших расчетов в дискретном представлении для упругого nd рассеяния и трехчастичного развала (V.N. Pomerantsev et al., PRC **79**, 064602 (2009)) с результатами Бохумской группы.

Результаты расчетов для упругого nd рассеяния

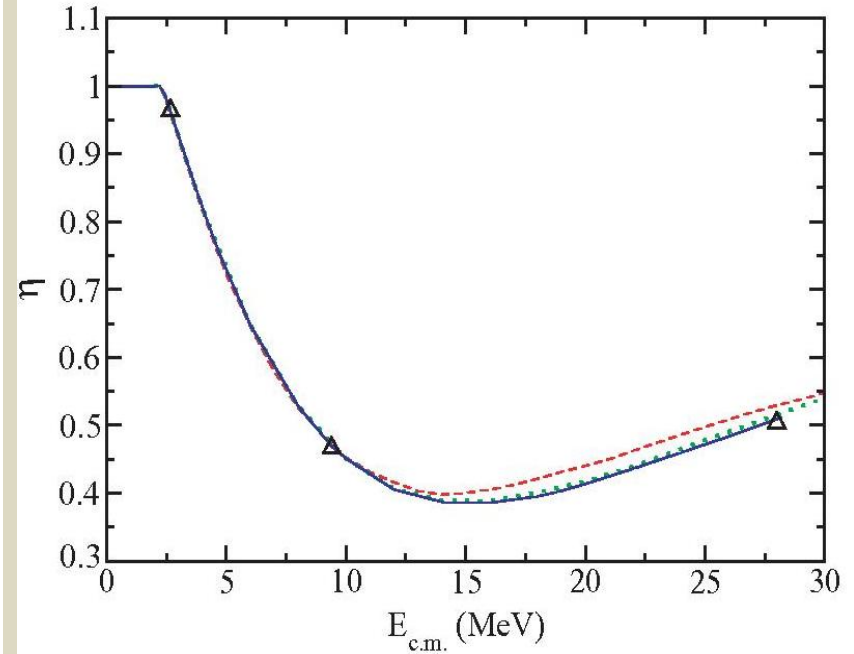
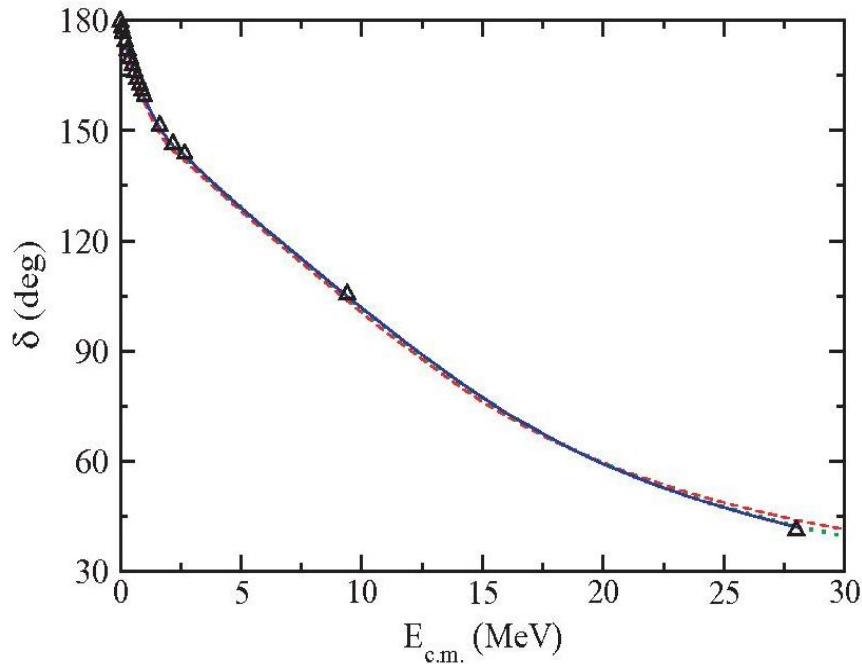
Квартетные S -волновые
фазовые сдвиги

Параметры неупругости



- WP
- ▲ Тестовое решение уравнений Фаддеева

Дублетные S-волновые фазовые сдвиги и параметры неупругости для упругого n-d рассеяния ниже и выше порога развала



↔ $N=(50+50) \times 50$
↔ $N=(100+100) \times 100$
▲ standard Faddeev calc.

Расчет амплитуд развала трехчастичного развала $n+d \rightarrow n+n+p$

Формула для амплитуды развала $T(p, q) = \langle p, q | t G_0 U | \phi_0, q_0 \rangle$

Эта же амплитуда может быть определена как матричный элемент оператора перехода U

$$T(p, q) = \langle \phi_0, q_0 | U | \psi_p^{(+)}, q \rangle$$

↖
состояние непрерывного спектра NN
гамильтониана

Таким образом, амплитуды упругого рассеяния и развала можно определить используя только собственный пакетный базис канального гамильтониана.

Амплитуда развала находится из недиагональных элементов матрицы U

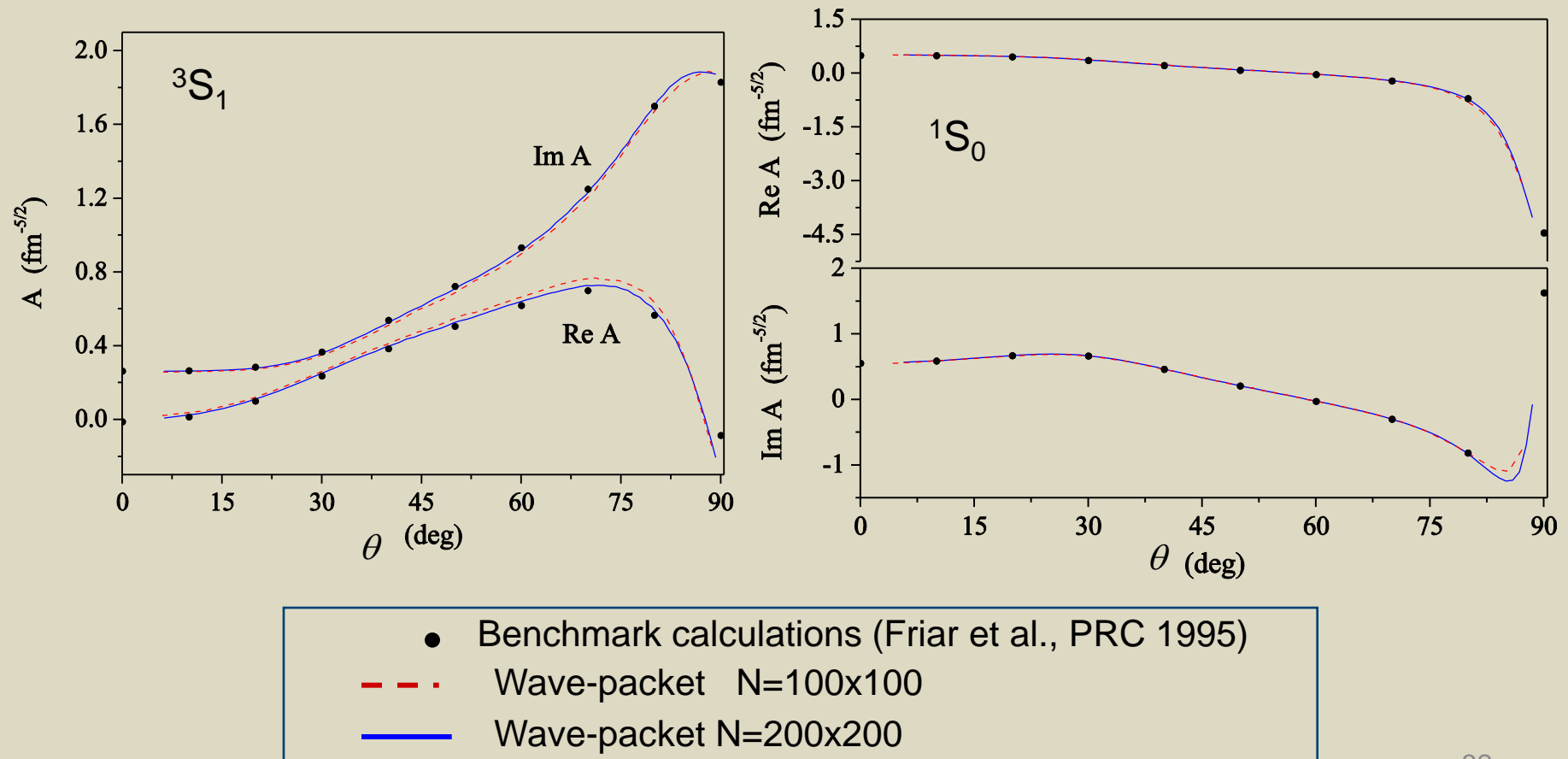
$$T(p, q) \sim e^{i\delta_{NN}(p)} \frac{U_{0j_0,ij}}{\sqrt{d_{j_0} d_i d_j}}, \quad \begin{array}{l} p \in d_i \\ q \in d_j \\ q_0 \in d_{j_0} \end{array}$$

Амплитуды $n+d \rightarrow n+n+p$ развала

Асимптотика фаддеевской компоненты волновой функции

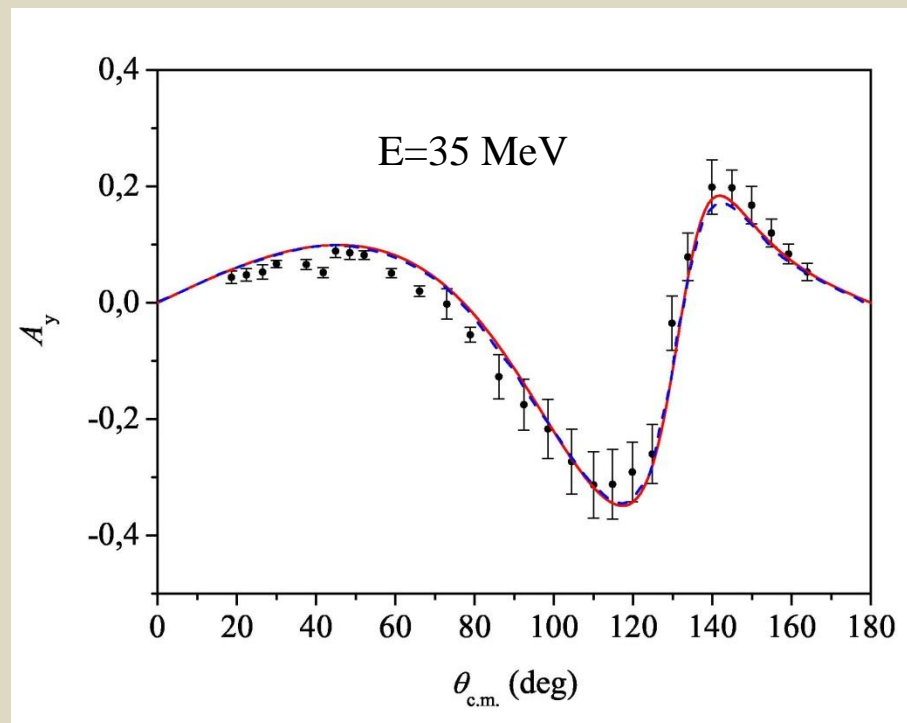
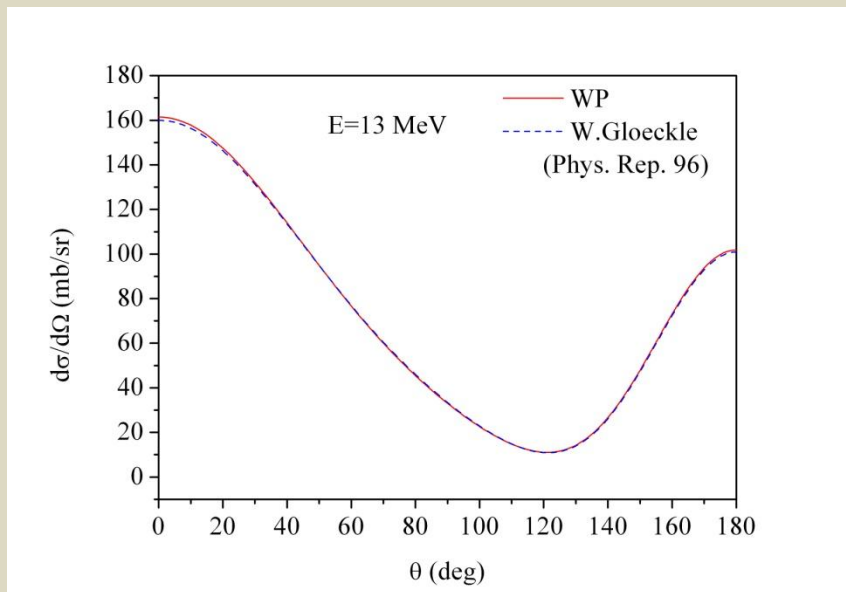
$$\psi(K, \rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{A(\theta)}{(K\rho)^{5/2}} \quad A(\theta) \sim T(p, q), \quad \operatorname{tg}(\theta) = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{q}{p}$$

Амплитуды развала в дублетном канале



Дифференциальные сечения упругого nd рассеяния выше порога трехчастичного развала (NN potential Nijm I).

В этом расчете учитывается связь 54 спин-орбитальных каналов 3N-системы



В итоге мы показали, что с новой техникой дискретизации вполне возможно делать фаддеевские вычисления как ниже, так и выше порога трехчастичного развала с полностью реалистическими 2N-силами на обычном РС.

Наша группа смогла выполнить серию полностью реалистических расчетов используя РС. Однако время полного расчета (например, для дифференциального сечения) составляло несколько часов.

Наше исследование показало:

Размерность получаемых в пакетном подходе матричных уравнений оказывается очень большой (10^4 - 10^5) и соответственно число матричных элементов в ядре уравнения $N \sim 10^8$ - 10^{10} . И поэтому даже проверка всех этих матричных элементов ядра по правилам отбора занимает очень много компьютерного времени.

Основное время счета тратится именно на вычисление этих пикселей (матричных элементов) для фаддеевских интегральных ядер, а не на решение самих уравнений.

Если теперь мы хотим двигаться дальше, например в количественном анализе прямых ядерных реакций, и учитывать дополнительно возбуждения ядра-мишени, то размерность матричных уравнений еще возрастет в 3-5 раз, и число матричных элементов (значит и время расчетов) также возрастет в 10-20 раз (!).

Тогда для реализации этой новой схемы точных расчетов нужны будут **новые вычислительные ресурсы**. Т.е. либо нужно все вычисления делать теперь на массивно-параллельных суперкомпьютерах (типа Blue Gene), либо искать какие-то совершенно новые возможности.

Шаг 2. Прекондиционирование матричного уравнения

Общая идея: использовать теорию передачи сигналов и «профильтровать» все матричные элементы через фильтры высоких и низких частот.

Пример

PHYSICAL REVIEW C 70, 034003 (2004)

Application of wavelets to singular integral scattering equations

B. M. Kessler,* G. L. Payne, and W. N. Polyzou

Department of Physics and Astronomy, The University of Iowa, Iowa City, Iowa 52242, USA

(Received 28 June 2004; published 24 September 2004)

‘One well-known use of wavelets is in the data compression algorithm used in JPEG files [5]. Our motivation for applying wavelet methods to scattering problems is based on the observation that both a digital photograph and a discretized kernel of an integral equation are two-dimensional arrays of numbers. If wavelets can reduce the size of a digital image, they should have a similar effect on the size of the kernel of an integral equation.’

Дискретное вейвлет-сжатие фотографий

1



2



3



4



- 1 исходная
- 2 обнуление 84.5%
- 3 обнуление 92.9%
- 4 обнуление 96.9%

Применение техники вейвлет-прекондиционирования к решению интегральных уравнений

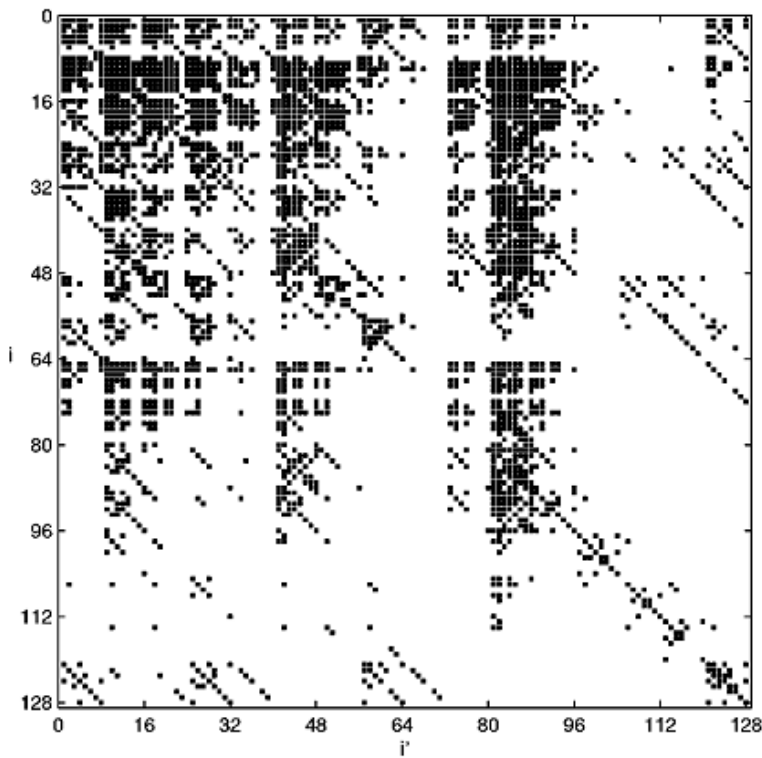


FIG. 4. Location of the nonzero of elements of \hat{A} .

B.M. Kessler et al. PRC 2004

TABLE VI. Effect of truncation on the on-shell T matrix at 800 MeV for scattering at 180° , 90° , and 0° corresponding to $T(p_0, p_0, -1)$, $T(p_0, p_0, 0)$, and $T(p_0, p_0, +1)$.

ϵ	%	$\text{Re}(T(p_0, p_0, -1))$	$\text{Im}(T(p_0, p_0, -1))$
0	100	0.249235	-0.0777091
10^{-8}	23	0.249235	-0.0777093
10^{-7}	14	0.249234	-0.0777116
10^{-6}	8	0.249217	-0.0777525
10^{-5}	1	0.248296	-0.0770660
ϵ	%	$\text{Re}(T(p_0, p_0, 0))$	$\text{Im}(T(p_0, p_0, 0))$
0	100	0.454932	0.111108
10^{-8}	23	0.454932	0.111108
10^{-7}	14	0.454932	0.111108
10^{-6}	8	0.454941	0.111117
10^{-5}	1	0.454966	0.111154
ϵ	%	$\text{Re}(T(p_0, p_0, +1))$	$\text{Im}(T(p_0, p_0, +1))$
0	100	-6.16347	-1.31548
10^{-8}	23	-6.16347	-1.31548
10^{-7}	14	-6.16347	-1.31548
10^{-6}	8	-6.16346	-1.31548
10^{-5}	1	-6.16327	-1.31559

Итог: Можно без особой потери точности (с ошибкой менее 0.001 в получаемых значениях Т-матрицы) отбросить 90-93% всех матричных элементов полной матрицы фаддеевского ядра.

Поэтому прекондиционирование должно уменьшать примерно в 10 раз число подлежащих расчету матричных элементов.

Однако, хотя такое прекондиционирование позволяет сделать большую матрицу ядра уравнения сильно разреженной и, следовательно, уменьшить время расчета, все еще необходимо сначала вычислить полную очень большую матрицу ядра, затем спроектировать ее на базис вейвлетов и затем уже сделать фильтрацию всей матрицы. В результате, учитывая, что размер матриц очень большой, этот путь не дает решающего выигрыша по скорости расчета.

Шаг 3. Распараллеливание вычисления матричных ядер и решения больших систем интегральных уравнений



Необходимость в использовании сверхбыстрых графических процессоров для параллельной обработки пикселей ядра

Что такое GPU (Graphics Processor Unit)

Ядра CPU созданы для исполнения одного потока (thread) последовательных инструкций с максимальной производительностью, а GPU проектируются для быстрого исполнения большого числа (несколько тысяч) параллельно выполняемых потоков инструкций.

GPU – это массивно-параллельные вычисления с использованием супербыстрых графических процессоров (или 3D-ускорителей). За счет чего конкретно достигается очень высокая скорость расчетов:

- Все вычисления проводятся в массивно-параллельной моде с очень высокой степенью параллелизма.
- Совмещение нескольких команд в каждом из сотен или тысяч параллельных потоков.
- Очень быстрая кэш-память в нескольких уровнях.
- Минимизация обменов данными между разными вычислительными потоками.

В отличие от современных универсальных CPU, видеочипы предназначены для параллельных вычислений с большим количеством арифметических операций. И значительно большее число транзисторов GPU работает по прямому назначению — обработке массивов данных, а не управляет исполнением (flow control) немногочисленных последовательных вычислительных потоков. Это схема того, сколько места в CPU и GPU занимает разнообразная логика.

В итоге, основой для эффективного использования мощности GPU в научных и иных неграфических расчётах является очень широкое распараллеливание алгоритмов на сотни исполнительных блоков, имеющихся в видеочипах. К примеру, множество приложений по молекулярному моделированию отлично приспособлено для расчётов на видеочипах, они требуют больших вычислительных мощностей и поэтому удобны для параллельных вычислений. А использование нескольких GPU даёт ещё больше вычислительных мощностей для решения подобных задач.

Итак, выполнение расчётов на GPU приводит к отличным результатам в алгоритмах, использующих параллельную обработку данных. То есть, когда одну и ту же последовательность математических операций применяют к большому объёму данных. При этом лучшие результаты достигаются, если отношение числа арифметических инструкций к числу обращений к памяти достаточно велико. Это предъявляет меньшие требования к управлению исполнением (flow control), а высокая плотность математики и большой объём данных отменяет необходимость в больших кэшах, как на CPU.

Некоторые примеры использования GPU вычислений в среде CUDA в медицине, военном деле, в моделировании физических процессов и др.

- Реконструкция детальной структуры объекта на основе трехмерной УЗИ-диагностики (применение в онкологии).
- Моделирование трехмерной картины кровотока в коронарных артериях (применение в ангиографии).
- On-line реконструкция устройства обороны противника на основе данных удаленной аэрофотосъемки.
- Моделирование распространения волн цунами и районов затопления побережья.
- Задачи гидродинамики вязкой жидкости.
- Расчеты в квантовой хромодинамике на основе решеток.
- Моделирование движения частиц в ускорителях.
- Нефте- и газовая разведка.

Примерная стоимость использования видеокарт для GPU-вычислений (данные 2008 года)

**Таблица 1. Видеокарты, использовавшиеся
в вычислительных экспериментах**

Модель	Стоимость (руб.)	Число мульти- процессоров	Пиковая производитель- ность (GFLOPS)	Пропускная способность памяти (Гбайт/сек.)
8500 GT	1500	2	43	13
8600 GTS	3000	4	139	32
GTX 260	7000	27	804	112

К глубокому сожалению российские разработки сильно отстают от быстрого развития GPU-вычислений.

Но, с другой стороны, развитие GPGPU-технологии должно быть особенно ценно и важно именно в России и аналогичных странах, где доступ к большим современным суперкомпьютерам сильно затруднен (особенно в провинции), и почти все вычислительные задачи, требующие очень мощных компьютерных ресурсов – не только в науке, но и в финансовой математике, в газо- и нефтеразведке, экономике и т.д. очень удобно решать именно на РС с использованием довольно дешевых современных видеокарт.

Применение сверхскоростных GPU-вычислений в квантовой физике

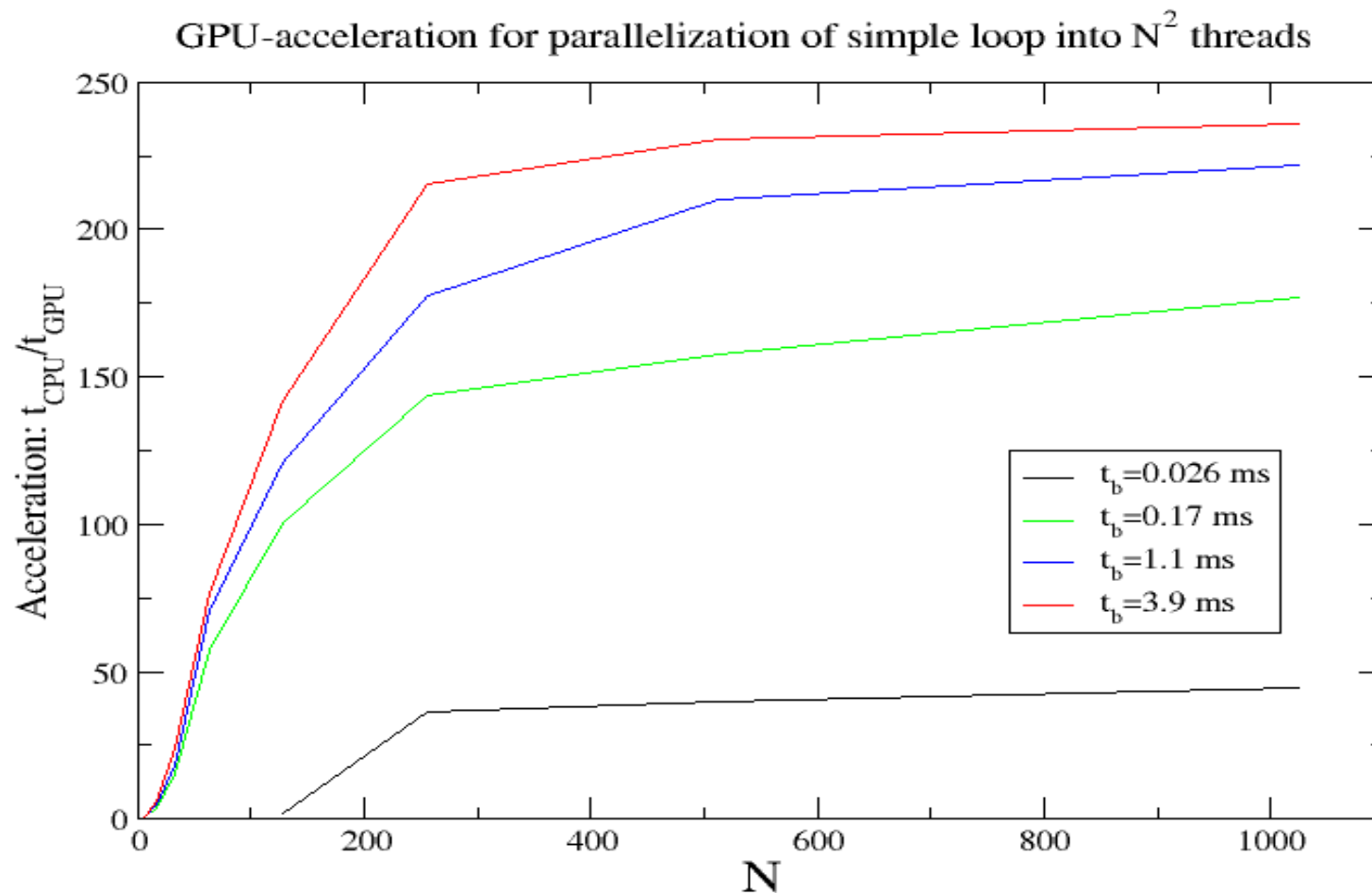
Большое количество задач в квантовой физике сводятся к вычислению матричных элементов от операторов и к последующим операциям с полученными матрицами: умножению, обращению или диагонализации. Стандартные операции с матрицами сравнительно легко поддаются распараллеливанию. Так, для широко используемых библиотек матричных операций BLAS и LAPACK имеются реализации для мультипроцессорных систем, в том числе и для графических процессоров.

В частности, задача расчета **большого числа независимых матричных элементов** представляется наиболее простой и выигрышной для параллельных вычислений.

Именно такая задача: вычисление элементов матрицы перекрывания базисных функций P , — занимает основное компьютерное время при решении уравнений Фаддеева в пакетном представлении. Поэтому мы ожидали, что использование GPU позволит получить существенный выигрыш во времени при решении наших пакетных уравнений.

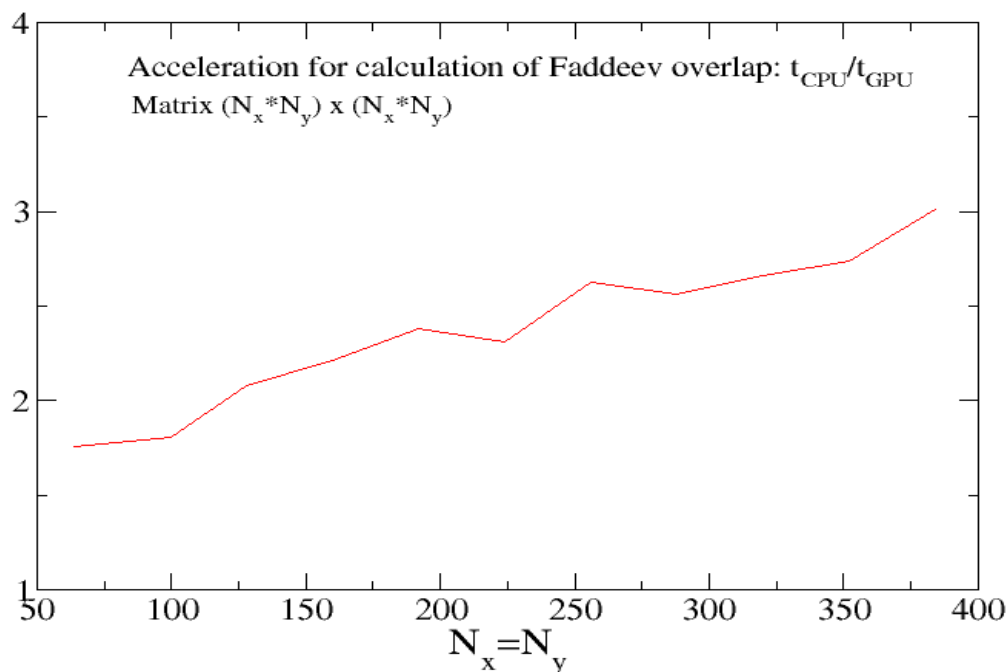
В наших расчетах использовалась видеокарта **GeForce GTX 670** с 1392 ядрами и памятью 4 ГБ.

Сначала посмотрим на что способен такой графический процессор на примере заполнения матрицы размерности $N \times N$, в которой каждый элемент представляет собой численный однократный интеграл (по 48 гауссовским узлам)



Мы видим, что в простой задаче заполнения матрицы можно получить ускорение до 230 (на нашей видеокарте), причем выигрыш растет с увеличением размерности матрицы N и с увеличением времени расчета одного элемента t_b .

Однако, при прямом распараллеливании алгоритма расчета матрицы перекрывания в Фаддеевской программе мы получили уменьшение времени расчета всего в 1.5-2.5 раза.

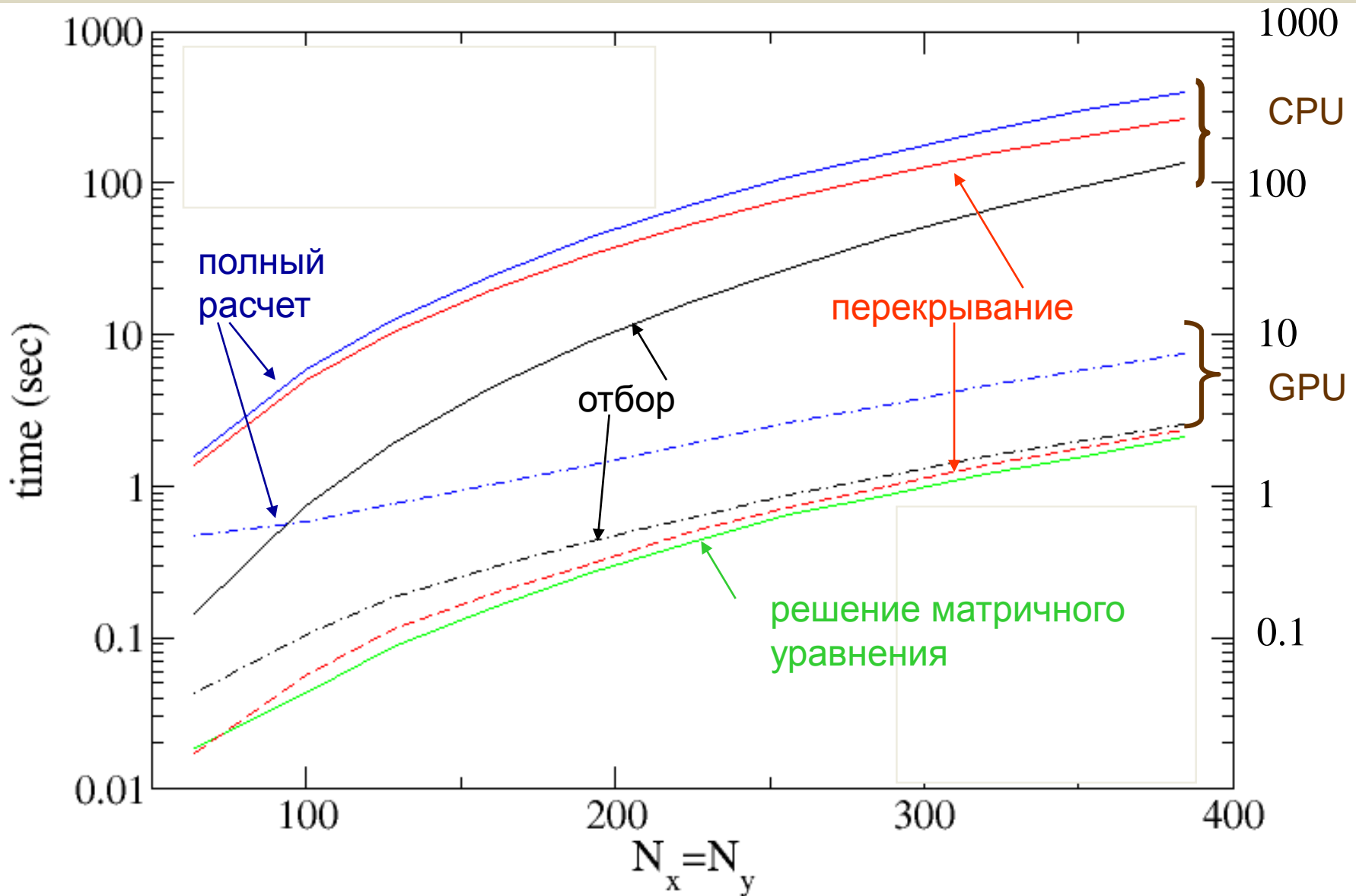


Основная причина такого малого выигрыша заключается в том, что матрица перекрывания сильно разрежена: число ненулевых матричных элементов составляет менее 1% от полного числа элементов, поэтому число выполняемых операций распределяется по потокам неравномерно. Поэтому мы переделали алгоритм так, что сначала в соответствии с достаточно простым условием отбираются ненулевые элементы, а затем выполняется их расчет сразу в N_{thr} параллельных потоках на GPU. В результате расчет всей задачи N_d рассеяния состоит из следующих этапов:

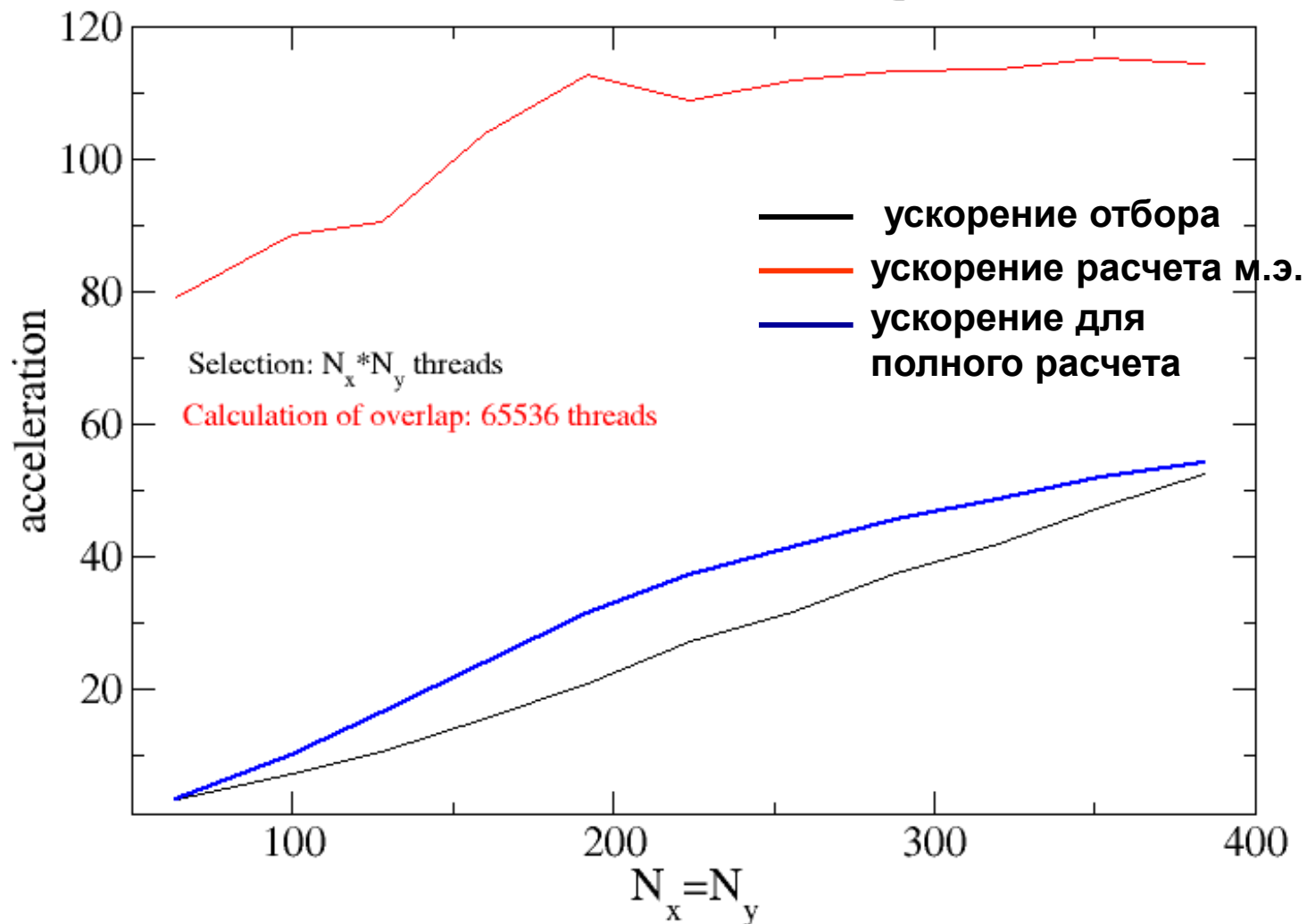
1. Построение пакетного базиса, двухчастичный input (диагонализация NN гамильтониана во всех учитываемых каналах) и расчет алгебраических коэффициентов связи.
2. Отбор ненулевых элементов матрицы перекрывания.
3. Собственно расчет элементов матрицы перекрывания.
4. Решение линейной системы уравнений и получение амплитуды.

Заметим, что первый этап занимает очень мало времени (не более 0.1 сек) и на рисунках не приводится. Собственно расчет ненулевых элементов проводится в одном и том же числе параллельных потоков и поэтому выигрыш во времени для этого этапа не зависит от размерности. Основная проблема состояла в алгоритме распараллеливания при отборе ненулевых элементов.

Время решения фаддеевской задачи в пакетном представлении
на CPU (сплошные кривые) и на GPU (штрих-пунктир)



GPU-acceleration for Faddeev code with previous selection



В результате мы получили ускорение для самого расчета элементов матрицы перекрывания **90-110 раз**, а для полной задачи **10-50 раз** в зависимости от размерности базиса, причем это «полное» ускорение продолжает расти с ростом размерности.

Подведем итоги:

В случае размерности матрицы ядра $N_x=N_y=400$, т.е. полной одномерной размерности $N_M=N_x \times N_y=160\,000$, это отвечает огромной матрице

$$160000 \times 160000 = 25,6 \cdot 10^9 \quad \text{матричных элементов}$$

Расчет **256 000 000** ненулевых элементов матрицы ядра, где каждый элемент дается интегралом, вычисляемым по 48 гауссовским узлам, занимает время на обычном компьютере с видеокартой около **2 секунд!**

Полное решение всей огромной матричной задачи (расчет амплитуд) при этом занимает около **8 секунд!**

Весь расчет идет в **160 тыс.** параллельных потоков, полное ускорение по сравнению с расчетом на CPU составляет **50 раз**, что в принципе эквивалентно использованию 50 компьютеров вместо одного с видеокартой!

Новейшее развитие GPU-индустрии: Kepler

Архитектура Kepler включает архитектуру SMX, которая обеспечивает новое строение потоковых мультимикроспроцессоров.

Динамика Kepler упрощает процесс программирования GPU, позволяя программистам с легкостью ускорять все параллельные вложенные циклы. Это приводит к тому, что GPU динамически порождает новые потоки без возврата к CPU!

Dynamic Parallelism in CUDA (DPC)

Позволяет ядру CUDA рождать и синхронизировать новую сетевую работу, используя CUDA время счета API, чтобы запустить новые ядра, опционально синхронизировать по завершению ядра, выполнить управление памятью устройства, а также создать и использовать потоки и события без всякого участия CPU!!

Пример использования DPC

Создание адаптивной сетки в компьютерной симуляции динамики жидкости, где разрешение сетки фокусируется в тех областях, где происходит наибольшие изменения.

Без такого динамического параллелизма выполнение подобной симуляции на CUDA требует дорогой предпроцессорной проверки (прогонки данных).

С DPC разрешение сетки может быть динамически адаптировано во время счета. Стартуя с крупнозернистой сетки, симуляция делает “zoom” в областях, представляющих интерес, и обходит ненужные вычисления в тех областях, где изменения слабы.

Это позволяет самому компьютеру динамически выбирать наиболее подходящую сетку для расчетов решения. В обычных CPU расчетах это вряд ли возможно.

Заключение

1. Развита полностью дискретизованная пакетная техника решения многочастичной задачи рассеяния, включая точную трактовку прямых ядерных реакций в рамках малочастичных моделей.
2. В рамках этого нового подхода удалось построить очень удобную схему решения уравнений Фаддеева-Якубовского без многомерных интерполяций и комплексной деформации контура интегрирования.
3. В итоге решение многомерных интегральных уравнений теории рассеяния резко упрощается, и становится возможным проводить все расчеты на обычном ПК.
4. Дальнейшее использование многопоточковой реализации на основе современных графических процессоров позволяет еще резко ускорить (в 50 раз) все расчеты и открывает новые пути в точном математическом моделировании огромного множества реальных процессов в ядерной, атомной и молекулярной физике.