

РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СХЕМЫ ДЛЯ
ИНТЕГРИРОВАНИЯ НЕСТАЦИОНАРНОГО ТРЁХМЕРНОГО
УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА НА ОСНОВЕ ДВУМЕРНОГО
DVR-БАЗИСА
В.С. МЕЛЕЖИК

QUANTUM-QUASICLASSICAL APPROACH -> FBS

VOLUME 84, NUMBER 9

PHYSICAL REVIEW LETTERS

28 FEBRUARY 2000

Quantum Energy Flow in Atomic Ions Moving in Magnetic Fields

V. S. Melezhik^{1,*} and P. Schmelcher²

PHYSICAL REVIEW A **69**, 032709 (2004)

Stripping and excitation in collisions between p and $\text{He}^+(n \leq 3)$ calculated by a quantum time-dependent approach with semiclassical trajectories

Vladimir S. Melezhik,^{1,*} James S. Cohen,² and Chi-Yu Hu¹

Hyperfine Interactions **138**: 351–354, 2001.

Recent Progress in Treatment of Sticking and Stripping with Time-Dependent Approach

VLADIMIR S. MELEZHNIK^{1,2}

PHYSICAL REVIEW A **103**, 053109 (2021)

Improving efficiency of sympathetic cooling in atom-ion and atom-atom confined collisions

Vladimir S. Melezhik *

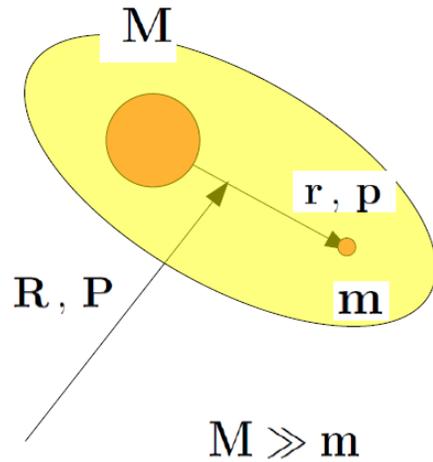
Eur. Phys. J. A (2022) 58:34
<https://doi.org/10.1140/epja/s10050-022-00684-z>

THE EUROPEAN
PHYSICAL JOURNAL A

Investigation of low-lying resonances in breakup of halo nuclei within the time-dependent approach

Dinara Valiolda^{1,2,3}, Daniyar Janseitov^{1,2,3,a} , Vladimir Melezhik^{3,4,b}

HYDROGEN ATOM IN STRONG LASER FIELD (1)



$$P = MV \gg p = mv$$

classical ideal gas perfectly describes gas laws

$$\lambda_{dB} = \frac{h}{MV} \rightarrow 0$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(\mathbf{r}, t)\rangle = [H_0(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}, \mathbf{R}(t))] |\psi(\mathbf{r}, t)\rangle$$

$$H_{cl}(\mathbf{P}, \mathbf{R}, t) = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \langle \psi(\mathbf{r}, t) | V(\mathbf{r}, \mathbf{R}(t)) | \psi(\mathbf{r}, t) \rangle$$

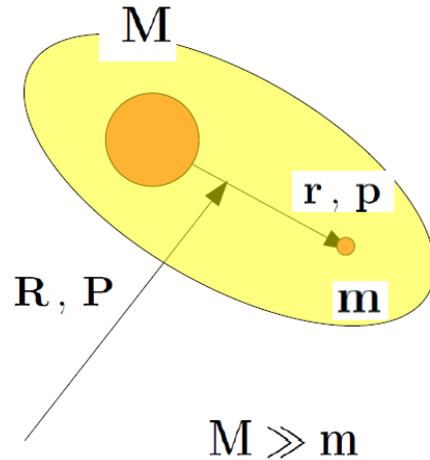
$$\frac{d}{dt} \mathbf{P} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} H_{cl}(\mathbf{P}, \mathbf{R}, t)$$

$$\frac{d}{dt} \mathbf{R} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{P}} H_{cl}(\mathbf{P}, \mathbf{R}, t)$$

$$\psi(\mathbf{r}, t = -n_T T/2) = \phi_{nlm}(\mathbf{r}),$$

$$\mathbf{R}(t = -n_T T/2) = \mathbf{R}_0, \mathbf{P}(t = -n_T T/2) = \mathbf{P}_0,$$

HYDROGEN ATOM IN STRONG LASER FIELD (2)



$$\mathbf{P} = M\mathbf{V} \gg \mathbf{p} = m\mathbf{v}$$

classical ideal gas perfectly describes gas laws

$$\lambda_{dB} = \frac{h}{MV} \rightarrow 0$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(\mathbf{r}, t)\rangle = [H_0(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}, \mathbf{R}(t))] |\psi(\mathbf{r}, t)\rangle$$

splitting method + DVR for angular variables

V. Melezhik, Phys Lett A230, 203 (1997)

V. Melezhik, EPJ Web Conf 108, 01008 (2016)

S. Shadmehri, V. Melezhik, Laser Phys. 33, 026001 (2023)

Quantum method

6D problem !!!

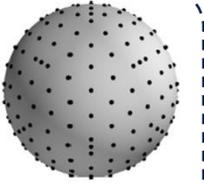
МЕТОД НА НА ОСНОВЕ ДВУМЕРНОГО DVR-БАЗИСА (1)

В работах [1-3] предложен эффективный метод интегрирования нестационарного трёхмерного уравнения Шредингера

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, \Omega, t) = \left[-\frac{1}{2M} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{L^2(\Omega)}{2Mr^2} + V_0(r) + V(r, \Omega, t) \right] \psi(r, \Omega, t)$$

решение которого ищется в виде разложения по базису Discrete-Variable Representation (DVR):

$$f_j(\Omega) = \sum_{\nu=1}^{N_\Omega} Y_\nu(\Omega) (Y^{-1})_{\nu j}$$

$$Y_{j\nu} = \sqrt{w_j} \bar{Y}_\nu(\Omega_j)$$


которое приводит к N_Ω обыкновенным дифференциальным уравнениям

$$i \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}(r, t) = [\hat{H}^{(0)}(r) + \hat{V}(r, t)] \mathbf{u}(r, t)$$

1. Melezhik, Phys. Lett. A 230(3) (1997).
2. Melezhik & Baye, PRC 59 (1999).
3. Shadmehri & Melezhik. Laser Phys. 33(2) (2023)

МЕТОД НА НА ОСНОВЕ ДВУМЕРНОГО DVR-БАЗИСА (2)

$$i \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}(r, t) = [\hat{H}^{(0)}(r) + \hat{V}(r, t)] \mathbf{u}(r, t)$$

здесь

$$H_{jj'}^{(0)}(r) = -\frac{1}{2M} \left[\delta_{jj'} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{L_{jj'}^2}{r^2} \right] + V_0(r) \delta_{jj'}$$

$$\mathbf{u}(r, t) = \{u_j(r, t)\}_1^{N_\Omega}$$

$$V_{jj'}(r, t) = V(r, \Omega_j, t) \delta_{jj'}$$

$$L_{jj'}^2 = \sum_{\nu=1}^{N_\Omega} Y_{j\nu} l(l+1) (Y^{-1})_{\nu j'}$$

L_{jj}^2 , плотная матрица размерностью $N_\Omega \times N_\Omega$.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ПОЛУЧИВШЕЙСЯ СИСТЕМЫ ОДУ (1)

Для численного интегрирования системы дифференциальных уравнений применяется метод покомпонентного расщепления

$$\mathbf{u}(r, t_n + \Delta t) = \exp \left[-\frac{i}{2} \Delta t \hat{V}(r, t_n) \right] \exp \left[-i \Delta t \hat{H}^{(0)}(r) \right] \exp \left[-\frac{i}{2} \Delta t \hat{V}(r, t_n) \right] \mathbf{u}(r, t_n)$$

Здесь первая и третья операторные экспоненты в правой части представляют собой диагональную матрицу

$$\exp \left[-\frac{i}{2} \Delta t V(r, \Omega_j, t_n) \right] \delta_{jj'}$$

не порождающую существенных вычислительных затрат, с числом операции порядка N_Ω .

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ПОЛУЧИВШЕЙСЯ СИСТЕМЫ ОДУ (2)

Промежуточная компонента выражения является наиболее затратной частью. Для его выполнения, сначала матрица $\hat{H}_{jj'}^{(0)}(r)$ диагонализуется

$$\bar{u} = \hat{S}u$$

$$S_{j\nu} = \sqrt{\omega_j} Y_\nu(\Omega_j)$$

$$\bar{H}_{\nu\nu'}^{(0)} = (\hat{S} \hat{H}^{(0)} \hat{S}^+)_{\nu\nu'} = h_\nu^{(0)}(r) \delta_{\nu\nu'} = -\frac{1}{2M} \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_\nu(l_\nu + 1)}{r^2} + V_0(r) \right] \delta_{\nu\nu'}$$

здесь ω_j – веса квадратурной формулы для численного интегрирования по узловым точкам Ω_j на единичной сфере Ω .

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ПОЛУЧИВШЕЙСЯ СИСТЕМЫ ОДУ (2)

В результате диагонализации процедура умножения вектора u на $\exp[-i \Delta t h_\nu^{(0)}(r)]$ сводится к решению N_Ω независимых краевых задач

$$\begin{aligned} & \left[1 + i \frac{\Delta t}{2} h_\nu^{(0)}(r) \right] \bar{u}_\nu \left(r, t_n + \frac{3}{4} \Delta t \right) = \\ & = \left[1 - i \frac{\Delta t}{2} h_\nu^{(0)}(r) \right] \bar{u}_{nu} \left(r, t_n + \frac{1}{4} \Delta t \right), \quad \nu = 1, 2, \dots, N_\Omega, \\ & \bar{u}_\nu \left(r = 0, t_n + \frac{3}{4} \Delta t \right) = \bar{u}_\nu \left(r = r_m, t_n + \frac{3}{4} \Delta t \right) = 0, \quad r_m \rightarrow +\infty. \end{aligned}$$

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ПОЛУЧИВШЕЙСЯ СИСТЕМЫ ОДУ (3)

В результате интегрирования N_Ω независимых краевых задач находится промежуточный вектор u на шаге $t_n + 3/4 \Delta t$, который с помощью матрицы \hat{S}^+ (обратной к \hat{S}) трансформируется в искомый на этом шаге вектор

$$u \left(r, t_n + \frac{3}{4} \Delta t \right) = \hat{S}^+ \bar{u} \left(r, t_n + \frac{3}{4} \Delta t \right)$$

Исходная краевая задача аппроксимируется по радиальной переменной r методом конечных разностей 6-ого порядка точности на квазиравномерной сетке $\{r_k\}_{N_1}^1$ и решается для каждого v методом прогонки. При этом число операций вычислительной процедуры $\sim N$. А суммарное число операций при численной реализации всей вычислительной схемы пропорционально величине

$$N_T N (2N_\Omega^2 + \alpha^2 N_\Omega + 2N_\Omega)$$

В реальных расчетах

$$N_T \sim 10^4, \quad N \sim 2 \times 10^4, \quad N_\Omega \sim 10^3$$

РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ПРОЦЕДУРЫ (1)

Нетрудно заметить, что численное решение задачи на одном временном шаге легко поддаётся распараллеливанию, поскольку состоит в интегрировании N_Ω независимых краевых задач для каждого v .

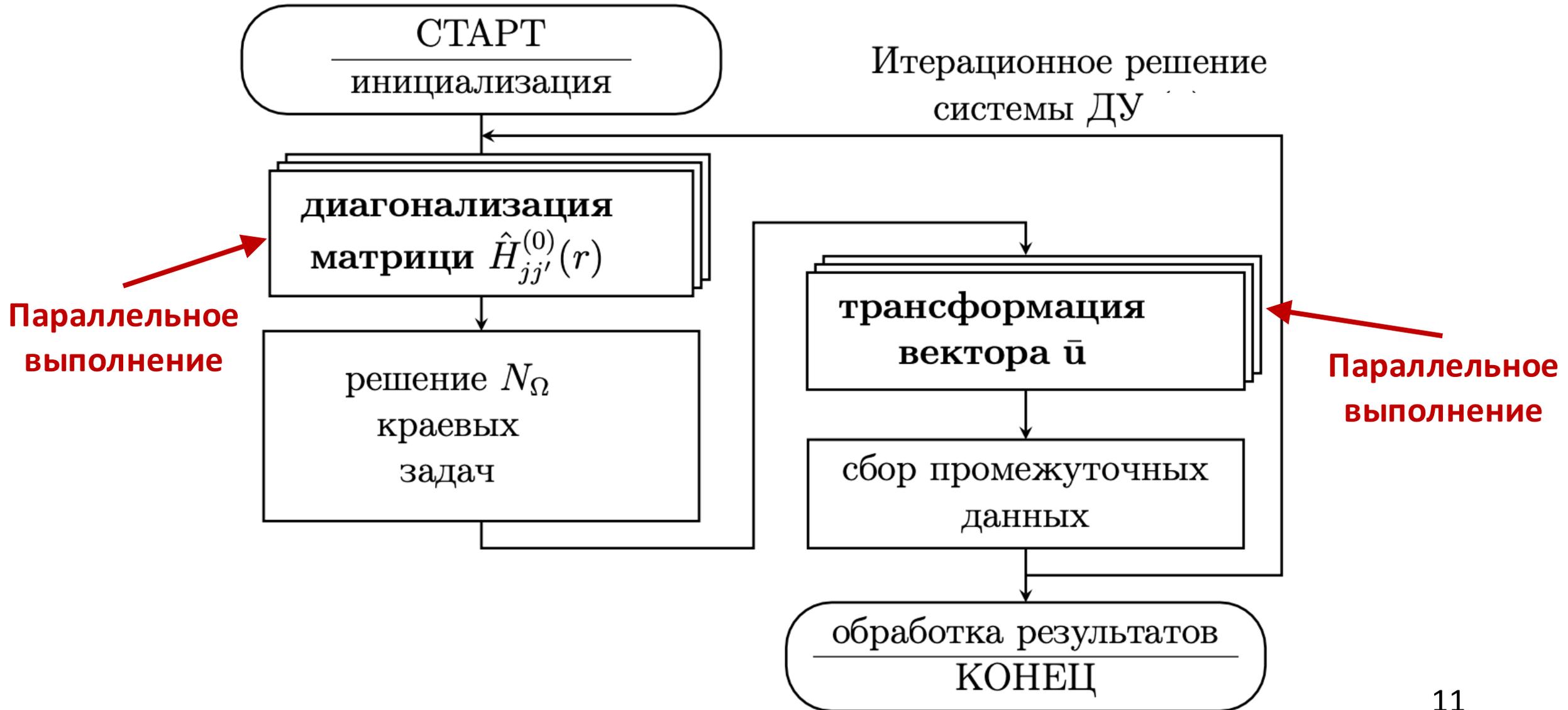
При этом было установлено, что выполнение процедур

$$\bar{\mathbf{u}} = \hat{S} \mathbf{u}$$
$$\mathbf{u} \left(r, t_n + \frac{3}{4} \Delta t \right) = \hat{S}^+ \bar{\mathbf{u}} \left(r, t_n + \frac{3}{4} \Delta t \right)$$

занимают около 95% расчетного времени из-за квадратичной зависимости от N_Ω матричных умножений. Поэтому эти элементы вычислительной схемы были оптимизированы с помощью распараллеливания вычислений.

Параллелизация состоит в простом **распараллеливании циклов** для указанных процедур как на OpenMP (с помощью стандартной директивы “OMP parallel for”), так и на CUDA.

РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ПРОЦЕДУРЫ (2)



ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОГРАММЫ

Была проведена оптимизация некоторых процедур в оригинальном (исходном) коде программы, написанной на языке FORTRAN. Основные изменения включают:

1. Табулирование значений функций

Были затабулированы значения функций для повторяющихся аргументов. Некоторые функции вызываются миллиарды раз, однако уникальных аргументов насчитывается всего порядка 2000.

2. Оптимизация решения СЛАУ

Был внедрен метод для одновременного решения СЛАУ с одинаковой матрицей, но различными правыми частями.

3. Оптимизация вычисления факториала

Функция вычисления факториала была затабулирована для $n \leq 25$, что охватывает практически все вызовы этой функции.

РЕЗУЛЬТАТЫ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ (1)

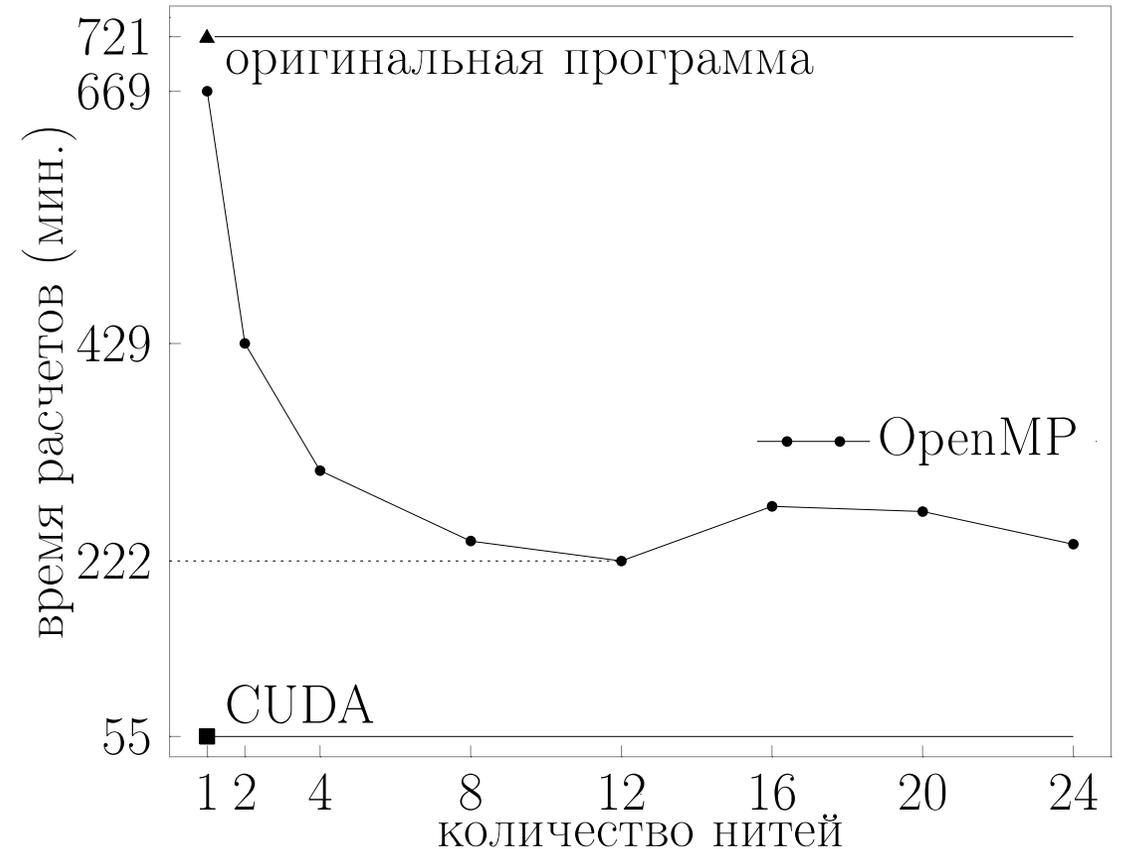
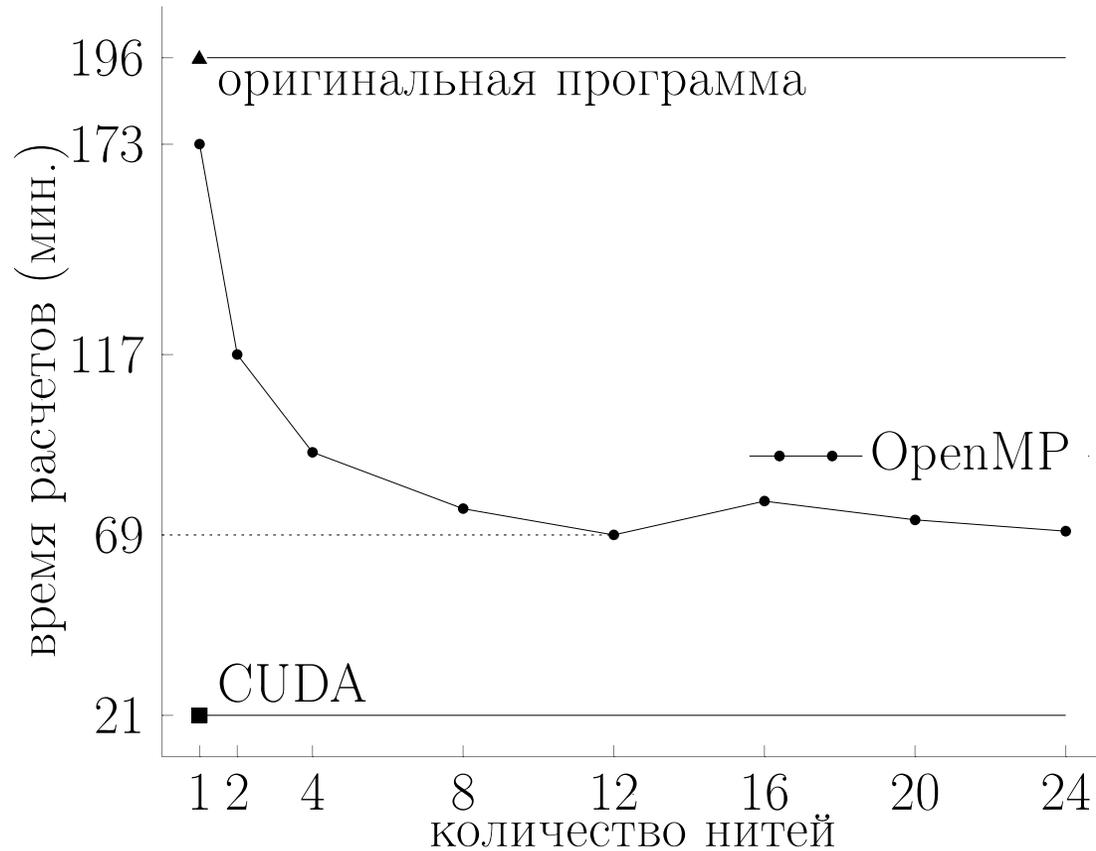
кол-во нитей	время (мин.)	ускор.	время (мин.)	ускор.
	$N_{\Omega} = 374$		$N_{\Omega} = 750$	
ориг.	196	–	721	–
1	173	1.13	669	1.08
2	117	1.68	429	1.68
4	91	2.15	308	2.34
8	76	2.58	241	2.99
12	69	2.84	222	3.25
16	78	2.51	274	2.63
20	73	2.68	269	2.68
24	70	2.80	238	3.03
CUDA	21	9.33	55	13.11

Результаты параллельных вычислений в зависимости от количества вычислительных потоков (нитей).

Расчёты проводились при фиксированном числе узлов по временной ($N_T = 10^4$) и радиальной ($N = 2 \times 10^4$) переменным для двух наборов узловых точек Ω_j на единичной сфере Ω с числом узлов $N_{\Omega} = 374$ и 750 .

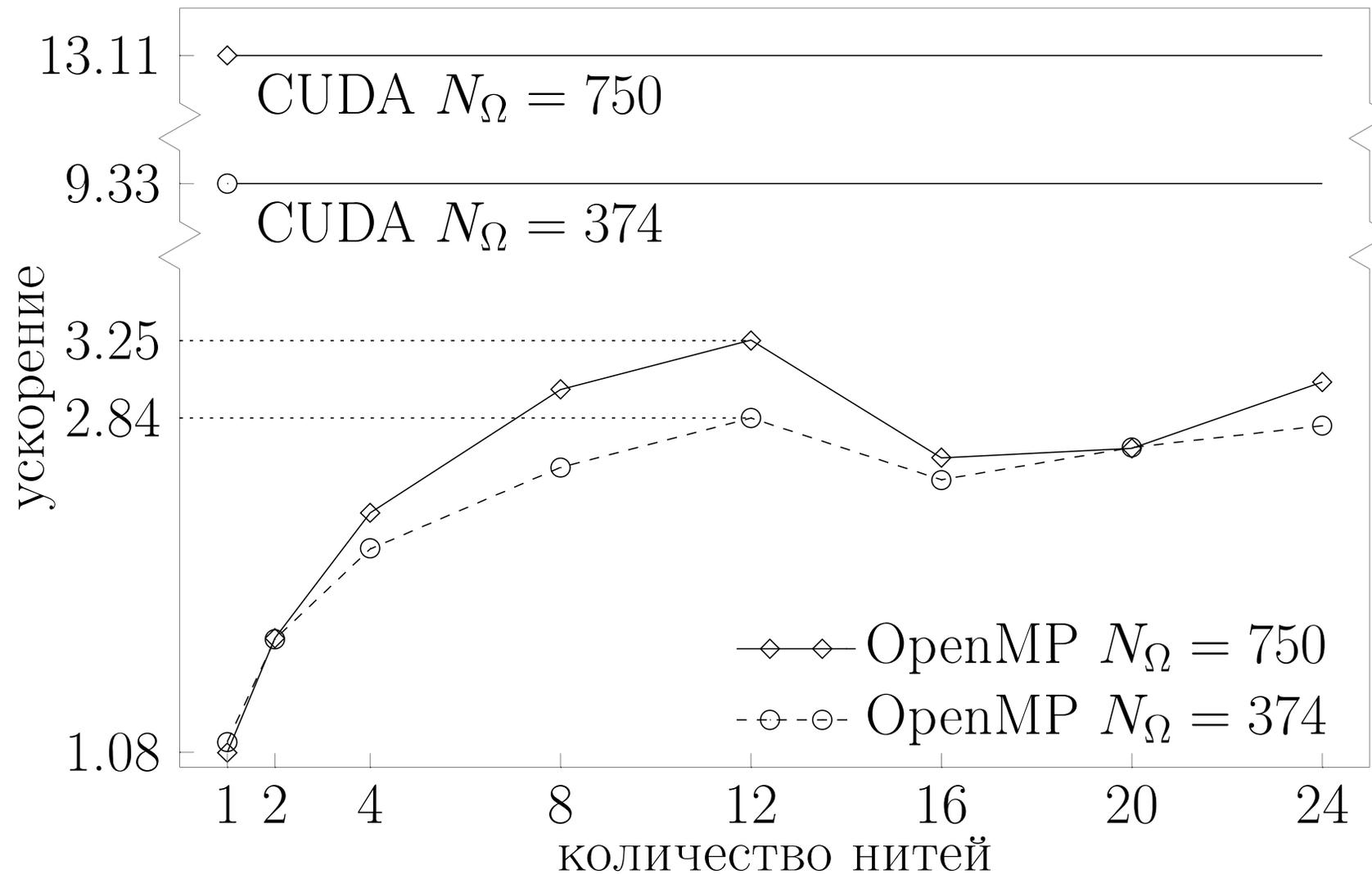
В строке “ориг.” приведены результаты, полученные с использованием оригинальной версии программы без распараллеливания и дополнительной оптимизации.

РЕЗУЛЬТАТЫ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ (2)



Расчетное время для задачи с числом узлов $N_{\Omega} = 374$ (слева) и 750 (справа)

РЕЗУЛЬТАТЫ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ (3)



ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- **Распараллеливание вычислений:** применены технологии OpenMP и CUDA для ускорения численных расчетов на многоядерных системах CPU и GPU.
- **Основные результаты:**
 - *Оптимизация:* улучшена производительность вычислительной схемы за счет распараллеливания ключевых этапов — диагонализация матрицы и трансформация вектора.
 - *Эффективность:* удалось существенно снизить время расчета, что позволяет работать с большими сетками для временных и пространственных переменных.