

P11-2012-87

А. В. Мележик

**УСКОРЕНИЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ МАТРИЧНЫХ  
ЭЛЕМЕНТОВ ПРИ ПОМОЩИ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО  
ПРОГРАММИРОВАНИЯ В MPI**

Мележик А. В.

P11-2012-87

Ускорение вычисления матричных элементов  
при помощи параллельного программирования в MPI

При решении квантово-механических задач часто возникает необходимость вычисления большого числа матричных элементов — нефакторизуемых двумерных интегралов. В данной работе для сокращения времени вычисления матричных элементов некоторых операторов в осцилляторном базисе используется параллельное программирование в MPI. Нами разработаны программы Potential\_MPI и Potential\_PC для вычисления на многопроцессорном кластере и на персональном компьютере соответственно. На модельных примерах показано, что с помощью программы Potential\_MPI можно уменьшить время вычисления матричных элементов более чем на два порядка.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2012

Melezhik A. V.

P11-2012-87

Speeding Up Matrix Element Computations  
by Means of MPI Parallel Programming

The solution of some quantum-mechanical problems asks computing large sets of matrix elements involving non-factorable two-dimensional integrals. In the present paper we discuss effective means, using MPI parallel programming, for speeding up the computation of large sets of such matrix elements. To make sound comparison of the computing times, we have developed the sequential code Potential\_PC and the parallel code Potential\_MPI, able to solve the problems of interest on a personal computer and on a multi-core cluster, respectively. Investigation of case study problems involving matrix elements of specific operators over oscillatory bases showed a gain of CPU time exceeding two orders of magnitude.

The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2012

## ВВЕДЕНИЕ

В квантовой механике существует ряд задач, для решения которых используется времяемкий процесс вычисления матричных элементов различных операторов. Актуальность этой проблемы подтверждается большим числом работ, посвященных различным способам повышения скорости вычисления матричных элементов (см., например, [1]). В связи с развитием многопроцессорных систем появилась возможность разработки алгоритмов, позволяющих заметно сократить время вычисления сложных (нефакторизуемых) матричных элементов. В данной работе на примере модельной задачи по вычислению нефакторизуемых двумерных интегралов демонстрируются преимущества применения в таких расчетах высокопроизводительных многопроцессорных систем.

## 1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В качестве модельной задачи нами рассмотрено вычисление матричного элемента:

$$U_{n_x n_y}^{n_x n_y}(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \varphi_{n_x'}(x) \varphi_{n_y'}(y) V(r) \varphi_{n_x}(x) \varphi_{n_y}(y), \quad (1)$$

где  $\varphi_{n_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2^{n_x} n_x! a \sqrt{\pi}}} H_{n_x} \left( \frac{x}{a} \right) e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$  — собственные функции гармонического осциллятора (оператора  $-\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \omega x^2$ ) с квантовыми числами  $n_x = 0, 1, 2 \dots$ ;  $H_{n_x} \left( \frac{x}{a} \right)$  — полином Эрмита  $n_x$ -порядка;  $a = \sqrt{\frac{1}{\omega}}$  — размерный параметр, определяемый частотой осциллятора  $\omega$ ;  $V(r)$  — потенциал взаимодействия;  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ .

После подстановки функции  $\varphi_{n_x}(x)$  в выражение (1) оно принимает следующий вид:

$$U_{n_x, n_{y'}}^{n_x, n_y}(z) = A \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-\frac{x^2+y^2}{2a^2}} V(r) \times \\ \times H_{n_x} \left( \frac{x}{a} \right) H_{n_y} \left( \frac{y}{a} \right) H_{n_{x'}} \left( \frac{x}{a} \right) H_{n_{y'}} \left( \frac{y}{a} \right),$$

где  $A = 2^{-(n_x+n_y+n_{x'}+n_{y'})} (n_x!n_y!n_{x'}!n_{y'}!)^{-\frac{1}{2}} a^{-2} \pi^{-1}$ .

Рассмотрим случай, когда  $\omega = 1$ . Поскольку в этом случае  $\varphi_n(x)$  и  $\varphi_n(y)$  быстро убывают при  $|x|, |y| \rightarrow \infty$ , то интеграл (1) на бесконечной плоскости  $x, y$  можно с хорошей точностью аппроксимировать интегралом:

$$U_{n_x, n_{y'}}^{n_x, n_y}(z) = A \int_{-10}^{+10} dx \int_{-10}^{+10} dy H_{n_x} \left( \frac{x}{a} \right) H_{n_y} \left( \frac{y}{a} \right) \times \\ \times H_{n_{x'}} \left( \frac{x}{a} \right) H_{n_{y'}} \left( \frac{y}{a} \right) e^{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)} V(r) \quad (2)$$

на прямоугольнике  $x \in [-10, 10], y \in [-10, 10]$ . Для вычисления интеграла (2) были разработаны две программы, в которых использовался метод Симпсона, с равномерной дискретной сеткой  $N \times N$  ( $N$  — число узлов сетки):

- Potential\_PC написана на языке C++ [2] для расчетов на персональном компьютере (ПК) (процессор Intel Celeron);
- Potential\_MPI написана на языке C++ с использованием библиотеки MPI для параллельного программирования на высокопроизводительном сервере lxhub04.jinr.ru (ЛИТ ОИЯИ). Сервер имеет два 6-ядерных процессора Xeon X5650. Нами использовался один процессор, а наличие технологии Hyper-threading позволило организовать расчеты на 12 логических ядрах.

## 2. ЧИСЛЕННЫЙ ПРИМЕР

В наших расчетах использовались потенциалы взаимодействия двух видов:

1) потенциал  $V(r) = V_0 e^{-r^2}$  — допускает факторизацию двумерного интеграла (1) в виде произведения одномерных интегралов  $U_{n_x, n_{y'}}^{n_x, n_y}(z) = U_{n_x}^{n_x}(z) U_{n_{y'}}^{n_y}(z)$ ;

2) потенциалы  $V(r) = \frac{V_0}{r}$ ,  $V(r) = \frac{V_0}{\sqrt{r}}$  — не допускают такой факторизации.

**2.1. Расчет с помощью программы Potential\_PC.** Программа вычисления матричных элементов (2) Potential\_PC отлажена для всех  $n_x, n_y < 25$ .

**Таблица 1. Зависимость времени вычисления матричных элементов от количества узлов  $N$  сетки дискретизации с помощью программы Potential\_PC**

$N$ узлов	100	1000	5000	10 000	20 000
Time <sub>PC</sub> , с	0,03	2,3	57,4	235,7	1060,7

В табл. 1 представлены результаты расчета интеграла (2) для потенциала  $V(r) = V_0/\sqrt{r}$  при  $n_x = n_{x'} = n_{y'} = n_y = 0$ ,  $z = 1$ ,  $V_0 = 1$ , с помощью программы Potential\_PC для разного числа узлов  $N$  сетки дискретизации, где Time<sub>PC</sub> — время вычисления матричных элементов.

**2.2. Расчет с помощью программы Potential\_MPI.** Программа вычисления матричных элементов (2) Potential\_MPI отлажена для всех  $n_x, n_y < 25$ .

**Таблица 2. Зависимость времени вычисления матричных элементов (2) от числа узлов  $N$  сетки дискретизации с помощью программы Potential\_MPI**

$N$ узлов	100	1000	5000	10 000	20 000	$10^5$	$2 \cdot 10^5$	$3 \cdot 10^5$
Time <sub>MPI</sub> , с	0,0006	0,02	0,4	1,5	6,3	160,4	775,4	1421,7

В табл. 2 представлены результаты расчета интеграла (2) для потенциала  $V(r) = V_0/\sqrt{r}$  при  $n_x = n_{x'} = n_{y'} = n_y = 0$ ,  $z = 1$ ,  $V_0 = 1$  с помощью программы Potential\_MPI для разного числа узлов  $N$  сетки дискретизации, где Time<sub>MPI</sub> — время вычисления матричных элементов.

**2.3. Оценка точности вычисления матричных элементов.** Для оценки точности вычисления матричных элементов были проведены расчеты на последовательности сгущающихся сеток с последовательным уменьшением шага интегрирования  $h = 20/N$ ,  $h/2$  и  $h/4$  (при  $N = 10^4$ ). При этом полученное

значение отношения  $\sigma_h = \frac{U_h - U_{h/2}}{U_{h/2} - U_{h/4}} = 3,9$  (где  $U$  — значение матричного

элемента (2) при разных  $h$ ) хорошо согласуется с теоретической оценкой  $\sigma_h = 4$  [4] для второго порядка точности аппроксимации при численном интегрировании, соответствующего методу Симпсона.

Для оценки погрешности аппроксимации  $\sigma_\infty$  интеграла (1), обусловленного заменой бесконечной плоскости конечной прямоугольной областью (см. (2)), были вычислены интегралы (1), допускающие аналитическое решение при  $V(r) = e^{-r^2}$ . Оценка погрешности аппроксимации  $\sigma_\infty$  составила величину порядка  $10^{-12}$ .

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В табл. 3 приведено отношение времен вычисления матричных элементов на ПК ( $\text{Time}_{\text{PC}}$ ) и на многопроцессорном сервере ( $\text{Time}_{\text{MPI}}$ ).

**Таблица 3. Сравнение времени вычисления матричных элементов с помощью программ Potential\_PC и Potential\_MPI**

$N$ узлов	100	1000	5000	10 000	20 000
$\text{Time}_{\text{PC}}$ , с	0,03	2,3	57,4	235,7	1060,7
$\text{Time}_{\text{MPI}}$ , с	0,0006	0,02	0,4	1,5	6,3
$\text{Time}_{\text{PC}}/\text{Time}_{\text{MPI}}$	54,3	118,6	141,8	148,3	167,3

На рис. 1 (ось времени задана в логарифмическом масштабе) кривая Potential\_PC показывает зависимость времени выполнения программы Potential\_PC от числа узлов  $N$ , а кривая Potential\_MPI — зависимость времени работы программы Potential\_MPI от числа узлов  $N$ .

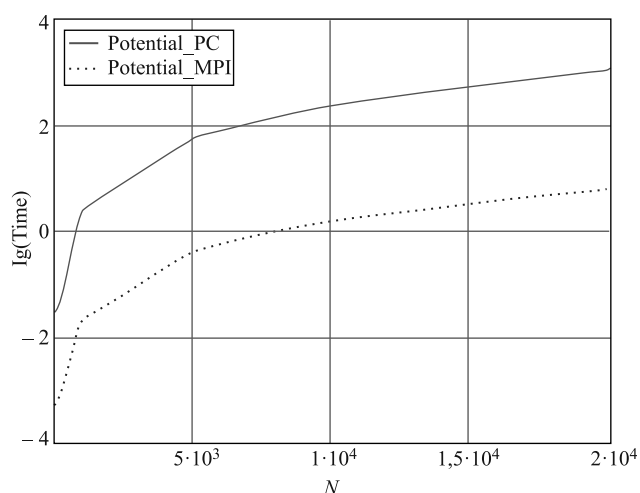


Рис. 1. Зависимость времени вычислений с помощью Potential\_PC и Potential\_MPI от числа узлов  $N$

Из результатов, приведенных в табл. 3, следует, что использование параллельных алгоритмов на многопроцессорных системах позволяет ускорить вычисление интегралов типа (2) более, чем на два порядка. Данный результат обусловлен более оптимальным использованием вычислительных ресурсов с помощью MPI по сравнению с одноядерным процессором ПК.

Далее были проведены расчеты с использованием одного и двенадцати ядер на многопроцессорном сервере кластера ЛИТ ОИЯИ. В табл. 4 представлены времена расчета при использовании одного процессора  $Time_1$  и при использовании двенадцати процессоров  $Time_{12}$ . Отношение  $Time_1/Time_{12}$  хорошо согласуется с законом Амдала [5], демонстрируя обратно пропорциональную зависимость времени решения задачи от числа процессоров.

**Таблица 4. Сравнение времени счета программы Potential\_MPI на одном и на двенадцати ядрах**

$N$ узлов	10 000	15 000	20 000	40 000	100 000
$Time_1$ , с	3,2	12,82	12,85	51,12	321,042
$Time_{12}$ , с	0,29	1,11	1,13	4,39	27,49
$Time_1/Time_{12}$	11,03	11,35	11,58	11,64	11,68

На рис. 2 кривая 1 core показывает зависимость времени выполнения программы Potential\_MPI на одном ядре  $Time_1$  от количества узлов  $N$ , а кривая 12 cores — зависимость времени выполнения программы Potential\_MPI с использованием двенадцати логических ядер  $Time_{12}$  от числа узлов  $N$ .

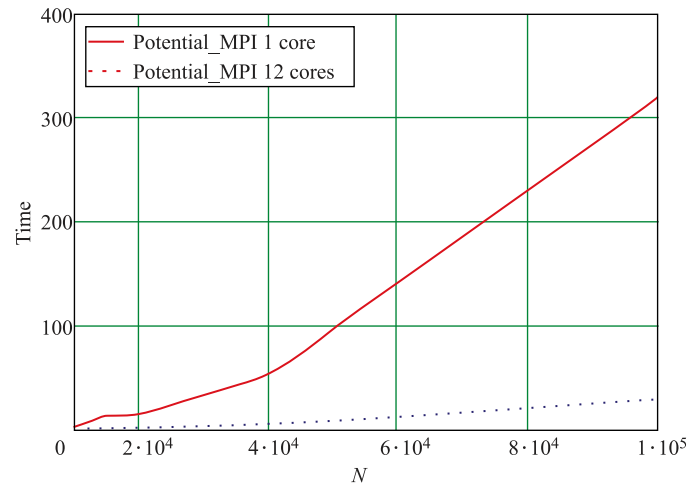


Рис. 2. Зависимость времени счета на Potential\_MPI от числа узлов  $N$  для одного и двенадцати ядер

Полученные результаты демонстрируют эффективность использования параллельного программирования и многопроцессорных ресурсов при расчете матричных элементов. Планируется использование программы Potential\_MPI

для численного решения уравнения Шредингера, описывающего в осцилля-  
торном базисе двухатомные столкновения в оптической ловушке [6].

Выражаю благодарность Виктору Владимировичу Иванову за многочис-  
ленные дискуссии и помощь в написании статьи.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Yamamoto K. et al.* // J. Chem. Phys. 1997. V. 106. P. 8769.
2. *Шилдт Г.* Как программировать на C++. 3-е изд. Пер. с англ. С.-П.: ООО «БХВ-Петербург», 2005. С. 301.
3. *Корнеев В.* Параллельное программирование в MPI. 2-е изд., испр. Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ СО РАН, 2002. С. 150.
4. *Самарский А. А., Гулин А. В.* Численные методы: Учеб. пособие для вузов. М.: Наука. Гл. ред. физ-мат. лит., 1989. С. 161.
5. *Кудин А.* Законы Амдала и Густавсона. 2007. С. 10; [www.software.unn.ru](http://www.software.unn.ru)
6. *Melezhik V. S., Shmelcher P.* // Phys. Rev. A. 2011. V. 84. P. 042712.

Получено 30 июля 2012 г.



Редактор *М. И. Зарубина*

Подписано в печать 20.09.2012.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 0,56. Уч.-изд. л. 0,62. Тираж 245 экз. Заказ № 57766.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований  
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: [publish@jinr.ru](mailto:publish@jinr.ru)

[www.jinr.ru/publish/](http://www.jinr.ru/publish/)