

УДК 519-642

МРІ-РЕАЛИЗАЦИЯ РАСЧЕТА МИКРОСКОПИЧЕСКОГО ОПТИЧЕСКОГО ЯДРО-ЯДЕРНОГО ПОТЕНЦИАЛА В РАМКАХ МОДЕЛИ ДВОЙНОГО ФОЛДИНГА**Земляная Елена Валериевна¹, Лукьянов Константин Валерьевич²,
Башашин Максим Викторович³**

¹ Ведущий научный сотрудник, профессор;
Объединенный институт ядерных исследований,
Лаборатория Информационных технологий;
Россия, 141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Жолио-Кюри 6;
ГБОУ ВО МО «Университет «Дубна»,
Институт системного анализа и управления;
Россия, 141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Университетская, д. 19;
e-mail: elena@jinr.ru.

² Старший научный сотрудник, доцент;
Объединенный институт ядерных исследований,
Лаборатория Информационных технологий;
Россия, 141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Жолио-Кюри 6;
ГБОУ ВО МО «Университет «Дубна»,
Институт системного анализа и управления;
Россия, 141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Университетская, д. 19;
e-mail: luku@jinr.ru.

³ Инженер-программист, ассистент;
Объединенный институт ядерных исследований,
Лаборатория Информационных технологий;
Россия, 141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Жолио-Кюри 6;
ГБОУ ВО МО «Университет «Дубна»,
Институт системного анализа и управления;
Россия, 141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Университетская, д. 19;
e-mail: bashashinmv@jinr.ru.

Представлен численный метод и параллельный алгоритм расчета оптического потенциала упругого рассеяния ядер на ядрах в рамках микроскопического подхода, определяемого моделью двойного фолдинга. В таком подходе потенциал вычисляется как сумма прямой и обменной части. Расчет прямого потенциала сводится к вычислению интегрального выражения и не представляет вычислительных трудностей. Для построения обменного потенциала необходимо численное решение нелинейного интегрального уравнения, что требует при массовых расчетах существенных затрат компьютерного времени. Разработанная параллельная вычислительная схема реализована на основе технологии MPI (Message Passing Interface). Эффективность разработанного подхода подтверждена методическими расчетами на многопроцессорных кластерах HybriLIT и ЦИВК Многофункционального информационно-вычислительного комплекса Лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований (Дубна). В работе даны основные формулы, определяющие метод двойного фолдинга для расчета микроскопического оптического потенциала упругого рассеяния ядер на ядрах. Описан итерационный процесс численного решения соответствующего интегрального уравнения и параллельный алгоритм вычисления потенциала. Представлены численные результаты, демонстрирующие значительный выигрыш во времени при расчетах в параллельном режиме по сравнению с однопроцессорными вычислениями.

Ключевые слова: ядро-ядерный оптический потенциал, итерационный процесс, параллельные вычисления.

MPI CALCULATION OF MICROSCOPIC NUCLEUS-NUCLEUS OPTICAL POTENTIAL WITHIN THE FRAME OF THE DOUBLE-FOLDING MODEL

Zemlyanaya Elena¹, Lukyanov Konstantin², Bashashin Maxim³

¹ *Leading Researcher, professor;
Joint Institute for Nuclear Research,
Laboratory of Information Technologies;
Russia, 141980, Moscow reg., Dubna, 6 Joliot-Curie st.;
Dubna State University,
Institute of the system analysis and management;
Russia, 141980, Moscow reg., Dubna, 19 University st.;
e-mail: elena@jinr.ru.*

² *Senior Researcher, associate professor;
Joint Institute for Nuclear Research,
Laboratory of Information Technologies;
Russia, 141980, Moscow reg., Dubna, 6 Joliot-Curie st.;
Dubna State University,
Institute of the system analysis and management;
Russia, 141980, Moscow reg., Dubna, 19 University st.;
e-mail: luky@jinr.ru.*

³ *Engineer-programmer, assistant;
Joint Institute for Nuclear Research,
Laboratory of Information Technologies;
Russia, 141980, Moscow reg., Dubna, 6 Joliot-Curie st.;
Dubna State University,
Institute of the system analysis and management;
Russia, 141980, Moscow reg., Dubna, 19 University st.;
e-mail: bashashinmv@jinr.ru.*

We present a method and parallel algorithm for a calculation of the optical potential of nucleus-nucleus elastic scattering on the basis of the microscopic double-folding model. In this framework, the potential consists of direct and exchange parts. Calculation of the direct potential is reduced to the relatively simple integral expression. The exchange potential is constructed by means of numerical solution of the nonlinear integral equation, which requires significant computer time. A parallel computational scheme is implemented on the basis of MPI technology (Message Passing Interface). Its efficiency is confirmed by methodical calculations on multi-processor clusters HybriLIT and CICC of the Multifunctional Information and Computing Complex in Laboratory of Information Technologies of Joint Institute for Nuclear Research (Dubna). In the paper, the formulae of the double-folding method are given. An iterative process for numerical solution of the respective nonlinear integral equation is described as well as the parallel algorithm for calculating the optical potential of microscopic nucleus-nucleus elastic scattering. The numerical results are presented to demonstrate the effectiveness of parallel calculations in comparison with serial regime.

Keywords: nucleus-nucleus optical potential, iterative process, parallel computing.

Введение

Движение налетающего ядра с кинетической энергией E в поле потенциала U описывается волновым уравнением Шредингера:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + (E - U) \Psi = 0. \quad (1)$$

Здесь $m = m_0 \frac{A_p A_t}{A_p + A_t}$ – приведенная масса сталкивающихся ядер с атомными массами A_p и A_t , m_0 –

масса нуклона, Ψ – волновая функция относительного движения ядер, \hbar – постоянная Планка.

Потенциал U включает кулоновскую U_C и ядерную U_N составляющие. Ядро-ядерный потенциал U_N имеет мнимую и вещественную части:

$$U_N(\vec{r}) = N_R V(\vec{r}) + iN_I W(\vec{r}) \quad (2)$$

и, вообще говоря, зависит от волновой функции Ψ , т.е. уравнение (1) является нелинейным. На практике задачу упрощают и сводят проблему к решению двух независимых задач, а именно – к разработке методов построения микроскопического потенциала и, независимо, к численному решению уравнения (1) с полученным потенциалом U . В последней задаче, как правило, с помощью разложения Ψ в ряд по сферическим гармоникам переходят к системе дифференциальных уравнений для одномерных радиальных волновых функций (парциальных волн) и используют стандартные программы их численного решения (см., например, [1]).

В качестве потенциала U_N могут использоваться феноменологические формы, например, потенциал Вудса-Саксона, имеющий 6 свободных параметров, требующих подгонки под экспериментальные данные. Более реалистичными являются так называемые микроскопические подходы, учитывающие структуру сталкивающихся ядер. Для получения вещественной части V потенциала U_N хорошо себя зарекомендовала микроскопическая модель двойной свертки или двойного фолдинга (МДФ) [2]. Для расчета мнимой части можно использовать микроскопический ядро-ядерный потенциал, развитый в рамках высокоэнергетического приближения (ВЭП) [3]. При известной плотности распределения ядерной материи в сталкивающихся ядрах микрopotенциалы V и W не содержат свободных параметров. Таким образом, модель, определяемая формулами (1) и (2), содержит только два подгоняемых параметра N_R и N_I перенормировки глубины вещественного и мнимого потенциалов V и W .

Как показали практические расчеты, предложенная в [1] гибридная модель потенциала U_N , сочетающая подходы МДФ и ВЭП соответственно для расчета вещественного и мнимого потенциалов, обеспечивает согласующееся с экспериментом описание дифференциальных сечений упругого рассеяния ядер ядрами [3-5] и полных сечений реакций [6] при промежуточных энергиях от 10 до 100 МэВ/нуклон. Этот подход также успешно использовался при моделировании более сложных ядерно-физических взаимодействий, таких как процессы развала (breakup), срыва (strip) и подхвата (pickup) [7-10]. Пакеты программ *DFPOT* и *HEA-TOTAL* для расчета соответственно МДФ- и ВЭП-потенциалов доступны в электронной библиотеке *JINRLIB* (<http://www.info.jinr.ru/programs/jinrlib>).

В то время как расчет ВЭП-потенциала не представляет трудностей с вычислительной точки зрения, построение МДФ-потенциала приводит к необходимости численного решения нелинейного интегрального уравнения итерационным методом и является более ресурсоемким. Для каждого заданного значения энергии E расчет МДФ-потенциала требует 5-15 минут для легких ядер и небольших энергий до нескольких часов для тяжелых ядер и энергий порядка 100 МэВ/нуклон (увеличение времени счета связано с необходимостью брать более мелкий шаг дискретной сетки по пространственной координате и более длинный интервал интегрирования). Поэтому разработка эффективной параллельной реализации метода МДФ для построения микроскопического оптического потенциала является актуальной задачей.

В данной работе дано описание параллельного алгоритма для расчета МДФ-потенциала и представлены результаты методических расчетов, подтверждающие эффективность параллельного алгоритма, реализованного на основе технологии MPI.

1. Основные формулы

Подробное описание численного метода расчета МДФ-потенциала $V=V^F$ дано в [11]. 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:

$$V^F(r) = V^D(r) + V^{EX}(r), \quad (3)$$

$$V^D(r) = \int d^3r_p d^3r_t \{ \rho_p(\vec{r}_p) \rho_t(\vec{r}_t) v_{NN}^D \}, \quad (4)$$

$$V^{EX}(r) = \int d^3r_p d^3r_t \{ \rho_p(\vec{r}_p, \vec{r}_p + \vec{s}) \rho_t(\vec{r}_t, \vec{r}_t - \vec{s}) v_{NN}^{EX} \times \exp[i\vec{K}(r)\vec{s} / M] \}, \quad (5)$$

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:

$$K^2(r) = \frac{2m_0 M}{\hbar} [E - V^F(E, r) - U_c(r)]. \quad (6)$$

Эффективные нуклон-нуклонные потенциалы v_{NN}^D и v_{NN}^{EX} в формулах (4) и (5) зависят от энергии и плотности сталкивающихся объектов. Эти функции параметризованы в [12]. Изовекторная часть потенциала получается из (3-5) заменой суммы нейтронной и протонной плотностей на их разность, а также другими выражениями эффективных NN -потенциалов.

Поскольку, как видно из (6), 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

$$V^{EX}(r) = \int_0^\infty db [\Phi(V^{EX}(b), r)], \quad (7)$$

где Φ в свою очередь представляет собой интегральное выражение кратности 3.

2. Метод расчета и параллельный алгоритм

Для численного решения уравнения (7) используется метод простых итераций. В качестве начального приближения V^{EX}_0 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:

$$V_{k+1}^{EX}(r) = \int_0^\infty db [\Phi(V_k^{EX}(b), r)]. \quad (8)$$

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

$$\max_r |V_{k+1}^{EX} - V_k^{EX}| < \varepsilon. \quad (9)$$

Вычисления показывают, что при выборе $V^{EX}_0 = V^D$ 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} по формуле (8) в назначенных ему узлах r_k ($k = 1, \dots, N$). Для продолжения итерационного процесса необходима «сборка» и доставка всем *MPI*-процессам полученных значений V_{k+1}^{EX} для всей совокупности узлов дискретной сетки.

3. Численные результаты

Эффективность параллельной *MPI*-реализации описанного выше подхода подтверждается расчетами на ЦПУ-лезвии гетерогенного кластера *HybriLIT* и на многопроцессорном кластере ЦИВК в составе Многофункционального информационно-вычислительного комплекса Лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований (ЛИТ ОИЯИ), представленными в табл. 1 и 2. Подробную информацию об архитектуре кластеров можно найти на сайте ЛИТ ОИЯИ <http://lit.jinr.ru>. 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 $\rho_{p,t}$ выбраны выражения из работы [13], представляющие собой линейную комбинацию функций гауссовского типа. Расчеты проводились на интервале интегрирования $[0,10]$ с числом узлов равномерной дискретной сетки по координате $N = 201, 401, 601$.

В табл. 1 и 2 для $N = 201, 401, 601$ представлено соответственно время счета и ускорение вычислений в зависимости от количества задействованных параллельных *MPI*-процессов. Видно, что параллельный режим обеспечивает существенный выигрыш во времени.

Таблица 1. Время расчета микроскопического оптического ядро-ядерного потенциала в рамках МДФ-подхода на кластерах *HybriLIT* и ЦИВК для ${}^6\text{He}+{}^{28}\text{Si}$ при энергии 50 МэВ/нуклон в зависимости от числа параллельных *MPI*-процессов. Число узлов дискретной сетки $N=201, 401, 601$

Число <i>MPI</i> -процессов	<i>HybriLIT</i>			ЦИВК		
	Время (сек); $N = 201$	Время (сек); $N = 401$	Время (сек); $N = 601$	Время (сек); $N = 201$	Время (сек); $N = 401$	Время (сек); $N = 601$
1	204,84	2151,7	9526,7	205,17	3234,5	18629
2	50,94	821,14	6030	86,01	1560,1	9448,8
4	35,2	350,42	1721,9	38,91	897,94	4521,8
8	18,25	280,72	1393,8	23,39	565,07	1855
12	11,34	185,14	948,92	27,97	331,58	1614,6
16	14,26	141,99	827,09	25,79	242,82	1382,6
20	7,17	111,88	580,7	24,07	300,51	1223,6
24	11,8	185,02	479,6	24,22	283,42	1144,0
28	5,12	80,48	391,75	22,09	224,23	1310,5
32	10,32	155,92	777,34	18,31	224,57	1369,2

Таблица 2. Ускорение вычислений при расчете в параллельном режиме микроскопического оптического ядро-ядерного потенциала в рамках МДФ-подхода на кластерах HybriLIT и ЦИВК для ${}^6\text{He} + {}^{28}\text{Si}$ при энергии 50 МэВ/нуклон. Число узлов дискретной сетки $N=201, 401, 601$

Число процессов	HybriLIT			ЦИВК		
	Ускорение (раз) $N = 201$	Ускорение (раз) $N = 401$	Ускорение (раз) $N = 601$	Ускорение (раз) $N = 201$	Ускорение (раз) $N = 401$	Ускорение (раз) $N = 601$
1	1	1	1	1	1	1
2	4,02	2,62	1,58	2,39	2,07	1,97
4	5,82	6,14	5,53	5,27	3,60	4,12
8	11,22	7,66	6,84	8,77	5,72	10,04
12	18,06	11,62	10,04	7,34	9,75	11,54
16	14,36	15,15	11,52	7,96	13,32	13,47
20	28,57	19,23	16,41	8,52	10,76	15,22
24	17,36	11,63	19,86	8,47	11,41	16,28
28	40,01	26,74	24,32	9,29	14,42	14,22
32	19,85	13,80	12,26	11,21	14,40	13,61

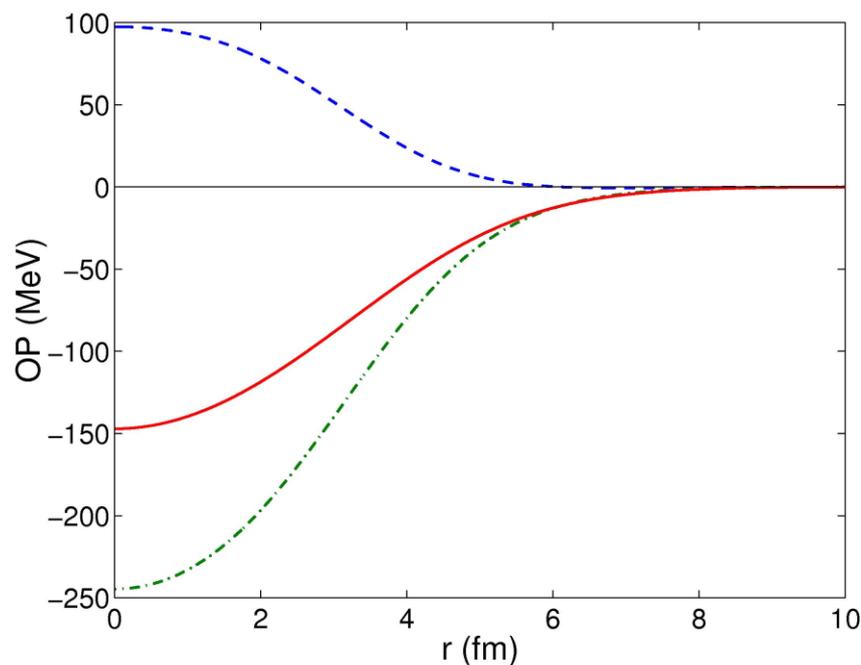


Рис. 1. Микроскопический оптический потенциал ${}^6\text{He} + {}^{28}\text{Si}$ при энергии 50 МэВ/нуклон. Штриховая кривая — прямой потенциал V^D , штрихпунктирная — обменный потенциал V^{EX} , сплошная — результирующий МДФ-потенциал V^F

На рис. 1 изображен рассчитанный потенциал, а рис. 2 демонстрирует полученные с использованием МДФ-потенциалов полные сечения реакции ${}^6\text{He} + {}^{28}\text{Si}$ в сравнении с экспериментальными данными [14]. Для вычисления сечений использовалась программа *DWUCK4* [1]. Детальное описание методики вычислений дано в [15]. Отметим, что для получения изображенной на рис. 2 теоретической кривой потребовался расчет МДФ-потенциалов при энергиях от 5 до 50 МэВ/нуклон с шагом 5, с числом узлов дискретной сетки $N = 401$. Таким образом, расчет необходимых потенциалов потребовал бы в однопроцессорном режиме около 6 часов, в то время как при использовании 28 *MPI*-процессов — около 15 минут.

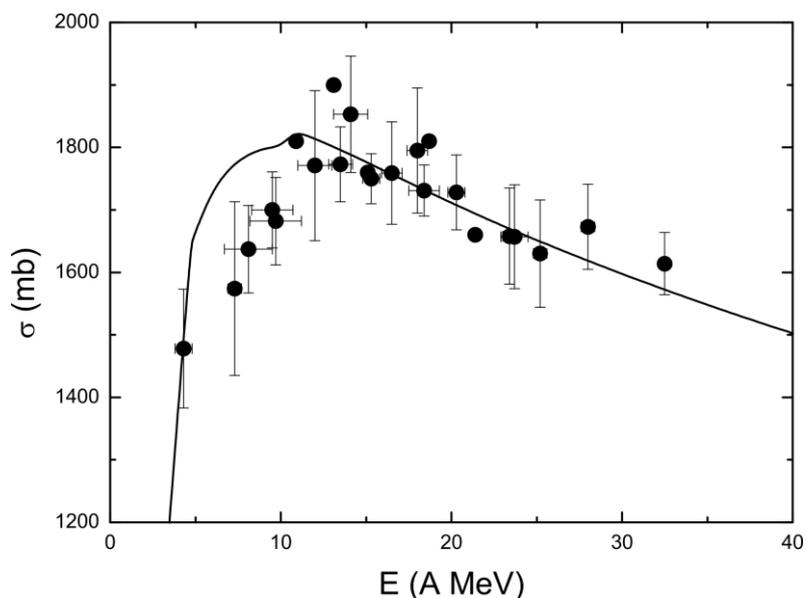


Рис. 2. Полные сечения реакции ${}^6\text{He} + {}^{28}\text{Si}$ в зависимости от энергии в сравнении с экспериментальными данными [14], рассчитанные с использованием микроскопического МДФ-потенциала

Заключение

В работе описан параллельный алгоритм расчета микроскопического оптического потенциала упругого рассеяния ядер на ядрах в рамках модели двойного фолдинга. Выполненные методические расчеты подтверждают эффективность разработанного подхода и демонстрируют значительное ускорение вычислений при расчетах в параллельном режиме. Авторы благодарны Макарову В.А., в магистерской диссертации которого были сделаны первые шаги по разработке параллельного алгоритма для расчета ОП [16].

Список литературы

1. Kunz P.D., Rost E. Computational Nuclear Physics / ed. by K.Langanke et al. – Berlin: Springer-Verlag, 1993. – Vol. 2. – Chap. 5.
2. Khoa D.T., Satchler G.R. Generalized folding model for elastic and inelastic nucleus–nucleus scattering using realistic density dependent nucleon–nucleon interaction // Nucl. Phys. A. – 2000. –Vol. 668. – Pp. 3-41.
3. Земляная Е.В., Лукьянов В.К., Лукьянов К.В. Ядро-ядерное рассеяние и оптический потенциал фолдинга // Ядерная физика. – 2006. – Т. 69. – Вып.2. – С. 262-275.
4. Lukyanov V.K., Kadrev D.N., Zemlyanaya E.V., Antonov A.N., Lukyanov K.V., Gaidarov M.K. ${}^6\text{He} + {}^{12}\text{C}$ elastic scattering using a microscopic optical potential // Physical Review C. – 2010. – Vol. 82. – 024604.
5. Lukyanov V.K., Kadrev D.N., Zemlyanaya E.V., Spasova K., Lukyanov K.V., Antonov A.N., Gaidarov M.K. Microscopic analysis of ${}^{10,11}\text{Be}$ elastic scattering on protons and nuclei, and breakup processes of ${}^{11}\text{Be}$ within the ${}^{10}\text{Be}+n$ cluster model // Physical Review C. – 2015. – Vol. 91. – 034606.
6. Лукьянов К.В., Земляная Е.В., Лукьянов В.К., Кухтина И.Н., Пенионжкевич Ю.Э., Соболев Ю.Г. Микроскопический анализ энергетической зависимости полных сечений реакций ${}^6\text{He}, {}^6\text{Li} + {}^{28}\text{Si}$ в диапазоне $E = 5\text{-}50$ АМэВ // Изв. РАН сер. физ. – 2008. – Т. 72. – Вып. 3. – С. 382-386.
7. Zemlyanaya E.V., Lukyanov V.K., Lukyanov K.V. Estimation of the breakup cross sections in ${}^6\text{He} + {}^{12}\text{C}$ reaction within high-energy approximation and microscopic optical potential // International Journal of Modern Physics E. – 2011. – Vol. 20. – Issue 9. – 2039-2047.

8. Cowley A.A., Zyl J.J. van, Dimitrova S.S., Zemlyanaya E.V., Lukyanov K.V. Mechanism of $^{93}\text{Nb}(p, ^3\text{He})$ inclusive reaction at an incident energy of 160 MeV // *Physical Review C*. – 2012. – Vol. 85. – 054622.
9. Dimitrova S.S., Cowley A.A., Zyl J.J. van, Zemlyanaya E.V., Lukyanov K.V. Inclusive reaction $^{93}\text{Nb}(p, \alpha)$ at an incident energy of 160 MeV // *Phys. Rev. C*. – 2014. – Vol. 89. – 034616.
10. Dimitrova S.S., Cowley A.A., Zemlyanaya E.V., Lukyanov K.V. Pre-equilibrium mechanisms in the $^{93}\text{Nb}(p, \alpha)$ inclusive reaction at incident energies from 65 to 160 MeV // *Physical Review C*. – 2014. – Vol. 90. – 054604.
11. Лукьянов К.В. Модель ядро-ядерного потенциала двойного фолдинга: основные формулы, итерационный метод и программа вычисления / Сообщение ОИЯИ Р11-2007-38. – Дубна, 2007.
12. Кхоа Д.Т., Князьков О.М. Физика элементарных частиц и атомного ядра. – 1990. – Т. 21. – С. 1456.
13. Tanihata I. Revelation of thick neutron skins in nuclei // *Physics Letters B*. – 1992. – Vol. 289. – С. 261.
14. Yu. G. Sobolev et al. Total reaction cross section excitation function studies for ^6He interaction with ^{181}Ta , ^{59}Co , $^{\text{nat}}\text{Si}$, ^9Be nuclei // VII Symposium on Exotic Nuclei EXON-2014. – Kaliningrad, September 8-13, 2014. – Pp. 142-147.
15. Соболев Ю.Г. и др. Энергетическая зависимость полного сечения реакции $^4,6\text{He}$, ^7Li + ^{28}Si при $E = 5:50$ МэВ/А // *Изв. РАН сер. физ.* – 2005. – Т. 69. – Вып. 11. – С. 1603-1607.
16. Макаров В.А. Магистерская диссертация «Параллельная реализация расчёта микроскопического потенциала ядерного рассеяния». – Дубна: Изд-во Университета «Дубна», 2014.