



## PARALELNÍ ALGORITMY PRO MODELOVÁNÍ ATOMOVÝCH JADER

TOMÁŠ OBERHUBER, TOMÁŠ DYTRYCH, DANIEL LANGR

### Úvod

Přesné modelování struktury atomových jader a jaderných procesů představuje extrémně výpočetně náročnou oblast fyziky na samé hranici jejího současného poznání. Výsledky těchto výpočtů jsou klíčové pro mnoho aplikací v oblastech energetiky, medicíny, astrofyziky nebo čisticové fyziky. Výzkum a vývoj nových metod a masivně paralelních počítačových kódů pro jadernou fyziku vyžaduje úzkou spolupráci fyziků s aplikovanými matematiky a počítačovými vědci. Cílem tohoto výzkumného projektu je vývoj nových algoritmů a numerických metod umožňující výpočty atomových jader škálovatelné pro stovky tisíc procesorů. Tento úkol bude realizován ve spolupráci se skupinou teoretické jaderné fyziky Louisianské Státní University a skupinou paralelního počítání FIT ČVUT.

### Metoda

Úkolem je spočítat vlastní čísla a stavy lineárního Hermitovského operátora  $\hat{H}$  celkové energie, který působí na Hilbertově prostoru kvadraticky integrovatelných funkcí:

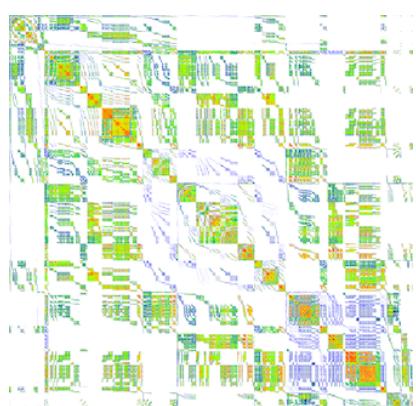
$$\hat{H}\psi(r_1, \dots, r_A) = E\psi(r_1, \dots, r_A)$$

Tato úloha je redukována na výpočet několika nejnižších vlastních čísel a vektorů řídkých hermitovských matic o velikosti  $10^6 - 10^9$ .

► Lanczosův algoritmus

Maticové elementy počítány v bázi tvořené irreducibilními reprezentacemi grupy SU(3).

► Teorie grup a jejich reprezentací

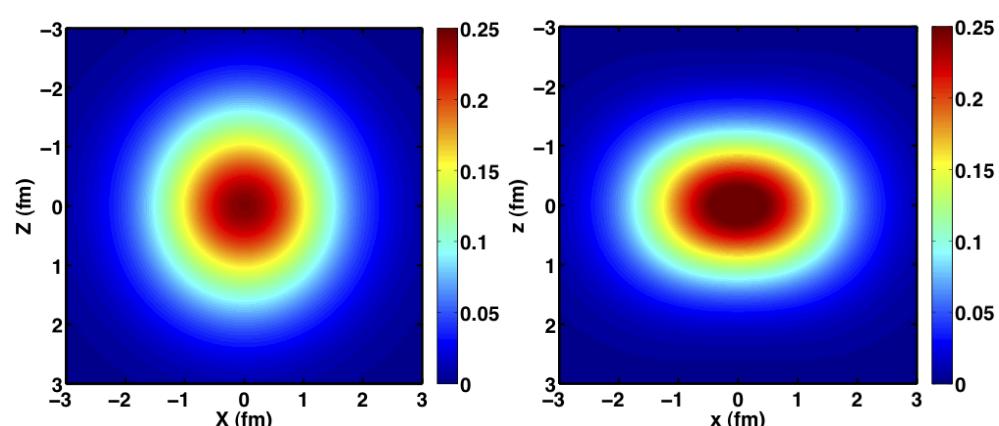


Struktura hermitovské matice pro jádro uhlíku

### Čím se můžete zabývat

- Studium a implementace pokročilých numerických metod.
- Vývoj hybridních paralelních kódů
  - knihovny MPI a openMP
  - výpočty na grafických kartách a akcelerátorech
- Zdokonalování stávajících jaderných kódů a jejich škálovatelnosti.
- Použití teorie grup a jejich reprezentací v kvantové fyzice.

### Hustota nukleonů v jádře ${}^6\text{Li}$ pro základní a excitovaný stav



### Co nabízíme

► Přístup na nejvýkonnější superpočítače současnosti



Jaderné výpočty vyžadují použití masivně paralelních počítačů. Naše/vaše kódy budou spouštěny na těchto superpočítačích:

- Hopper: 1.28 petaflopů/sec, počet procesorů - 153216, velikost paměti - 217 terabytů, disková kapacita - 2 petabyty.
- Jaguar/Titan: 20 petaflopů/sec, počet procesorů - 299004, 19000 Kepler NVIDIA Tesla GPU, velikost paměti - 600 terabytů.
- Mira: 8.1 petaflopů/sec, počet procesorů - 786432, velikost paměti - 768 terabytů.
- Zkušenosti s prací na velkém softwarovém projektu.
- Pobyty a stáže na partnerské americké univerzitě.



Téma:

Paralelní Algoritmy pro Modelování Atomových Jader

Autor:

Tomáš Oberhuber, Tomáš Dytrych, Daniel Langr

Kontakt:

[tomas.oberhuber@fjfi.cvut.cz](mailto:tomas.oberhuber@fjfi.cvut.cz)

Homepage:

<http://geraldine.fjfi.cvut.cz/~oberhuber>

MMG Homepage:

<http://mmg.fjfi.cvut.cz>

Copyright © 2010 MMG FJFI ČVUT v Praze. Všechna práva vyhrazena.

