

ЛАБОРАТОРИЯ
ИНФОРМАЦИОННЫХ
ТЕХНОЛОГИЙ
им. М.Г. Мещерякова

Осенняя школа по информационным технологиям ОИЯИ

Параллельные реализации алгоритмов для численного моделирования физических процессов в плотной и горячей ядерной среде

Д. Годеридзе
Ю.Л.Калиновский
А.В.Фризен

Задача

Мотивация: вычисление времени жизни мезона в горячей и плотной ядерной среде

Задача: Вычисление 5-мерного интеграла со сложной подынтегральной функцией с помощью метода интегрирования Монте-Карло

Цель: Оптимизировать интеграл для вычислений.
Распараллелить вычисления

Ширина мезона (Гамма)

$$\Gamma = \frac{1}{2p_0} (\Sigma^>(p_0) - \Sigma^<(p_0))$$

$$\Sigma^{>(<)}(p) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\Omega \int \frac{\vec{p}_1}{2E_1} \frac{1}{8\pi} \int_{-1}^1 d(\cos\alpha) \frac{|\vec{p}_3|^2}{|\vec{p}_3|^2(\sqrt{s_2}+m_1)-|\vec{p}_1|E_3\cos\alpha} |A|^2 F^{>(<)}$$

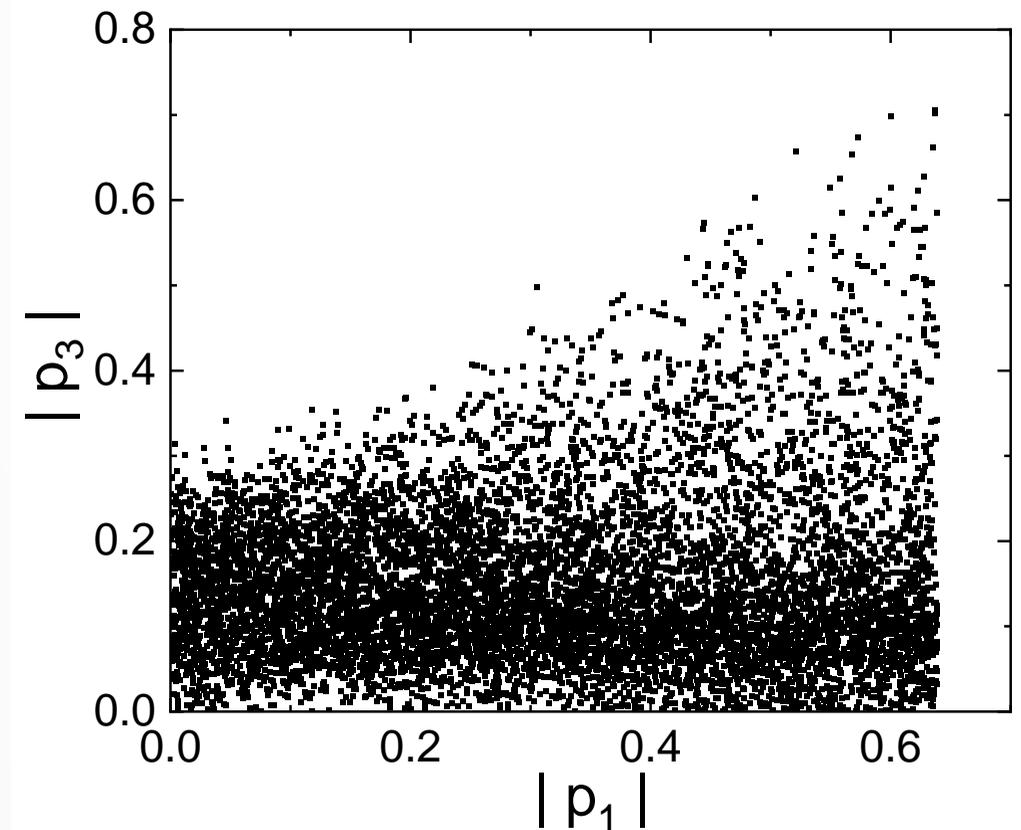
$$d\Omega = \frac{1}{(2\pi)^3} \int ds_1 A(s_1) ds_3 A(s_3) ds_4 A(s_4), \quad \text{where } A(s_i) = 2 \frac{M_i \Gamma_i}{(s_i - M_i^2)^2 + M_i \Gamma_i^2}$$

$$F^> = n_1 (n_3 + 1) (n_4 + 1),$$

$$F^< = (1 + n_1) n_3 n_4$$

$$|\vec{p}_3| = \frac{|\vec{p}_1| \cos\alpha a \pm \sqrt{|\vec{p}_1|^2 \cos^2\alpha a^2 + ((\sqrt{s_2} + E_1)^2 - |\vec{p}_1|^2 \cos^2\alpha)(a^2 - 4s_3(\sqrt{s_2} + E_1)^2)}}{2((\sqrt{s_2} + E_1)^2) - |\vec{p}_1|^2 \cos^2\alpha}$$

Ширина мезона (Гамма)



$$|\vec{p}_3| = \frac{|\vec{p}_1| \cos \alpha \left[a \pm \sqrt{|\vec{p}_1|^2 \cos^2 \alpha a^2 + \left((\sqrt{s_2} + E_1)^2 - |\vec{p}_1|^2 \cos^2 \alpha \right) (a^2 - 4s_3 (\sqrt{s_2} + E_1)^2)} \right]}{2 \left((\sqrt{s_2} + E_1)^2 \right) - |\vec{p}_1|^2 \cos^2 \alpha}$$

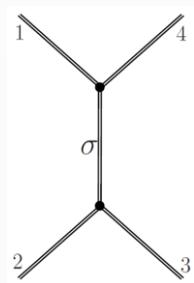
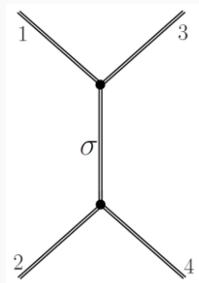
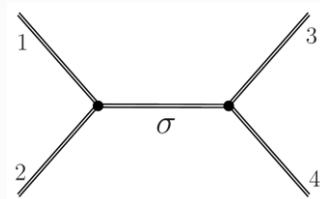
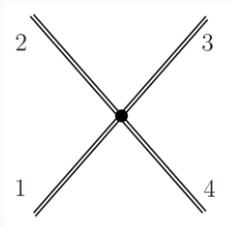
Амплитуда

$$\langle cp_c; dp_d | T | ap_a; bp_b \rangle = \delta_{ab} \delta_{cd} A(s, t, u) + \delta_{ac} \delta_{bd} B(s, t, u) + \delta_{ad} \delta_{bc} C(s, t, u)$$

$$A_0 = 3A + B + C$$

$$A_1 = B - C$$

$$A_2 = B + C$$



$$\begin{aligned} \pi^\pm \pi^\pm &\rightarrow \pi^\pm \pi^\pm = A_2 \\ \pi^\mp \pi^\pm &\rightarrow \pi^\mp \pi^\pm = \frac{1}{6} A_2 + \frac{1}{2} A_1 + \frac{1}{3} A_0 \\ \pi^\pm \pi^0 &\rightarrow \pi^\pm \pi^0 = \frac{1}{2} A_2 + \frac{1}{2} A_1 \\ \pi^\pm \pi^\mp &\rightarrow \pi^0 \pi^0 = \frac{1}{3} A_2 - \frac{1}{3} A_0 \\ \pi^0 \pi^0 &\rightarrow \pi^0 \pi^0 = \frac{2}{3} A_2 + \frac{1}{3} A_0 \end{aligned}$$

$$\mathbf{A} = (\pi^0 \pi^0 \rightarrow \pi^0 \pi^0) + (\pi^\pm \pi^\mp \rightarrow \pi^0 \pi^0) + 2(\pi^\pm \pi^0 \rightarrow \pi^\pm \pi^0)$$

Численное интегрирование методом Монте-Карло

Метод интегрирования Монте-Карло

$$I = \int_{\Omega} f(x) dx \approx F_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

N — число независимых случайных значений x_1, x_2, \dots, x_N

x_i — точки из многомерного куба $[0,1]^\alpha$ с размерностью α

Монте-Карло. Сходимость. Погрешность.

Для определения сходимости метода интегрирования Монте-Карло необходимо считать дисперсию, для получения значения которой используется практическая эмпирическая оценка:

$$V[Y] \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Y_i^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Y_i \right)^2, \text{ где } Y - \text{случайное значение } (Y = f(x_i))$$

Получить строгую границу абсолютной погрешности, можно использовать предельную теорему, которая утверждает, что $F[N]$ сходится к нормальному распределению при $N \rightarrow \infty$

$$P \left\{ |F_N - I| < x_\beta \sqrt{\frac{V[Y]}{N}} \right\} \approx \Phi(x), \text{ где } \Phi(x) \text{ функция Лапласа.}$$

Это оценка содержит целое семейство оценок, определяемых параметром x_β

Шаг увеличения количества точек

\sum_N – sum of integral with calculating N points

\sum_M – sum of integral with calculating M points

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{(b-a)}{(N+M)} \left(\sum_{i=1}^N f(x_i) + \sum_{j=1}^M f(x_j) \right)$$

Вычисления

$T:$	0.14
$M_{\pi}:$	0.1420947
$m_q:$	0.5450886
$g_{\sigma\pi\pi}$:	1.65789
$g_{\sigma qq}:$	2.198875



Время вычисления в однопоточном режиме с $\varepsilon=1\%$ (верхняя граница погрешности)
Количество случайных точек: $216 \cdot 10^6$
Time = 382 sec



Уменьшение времени вычислений. Оптимизация интеграла

Различия интегралов

$$\Gamma = \frac{1}{2p_0} (\Sigma^>(p_0) - \Sigma^<(p_0))$$

$$\Sigma^{>(<)}(p) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\Omega \int \frac{\vec{p}_1}{2E_1} \frac{1}{8\pi} \int_{-1}^1 d(\cos\alpha) \frac{|\vec{p}_3|^2}{|\vec{p}_3|^2(\sqrt{s_2}+m_1)-|\vec{p}_1|E_3\cos\alpha} |A|^2 \mathbf{F}^{>(<)}$$

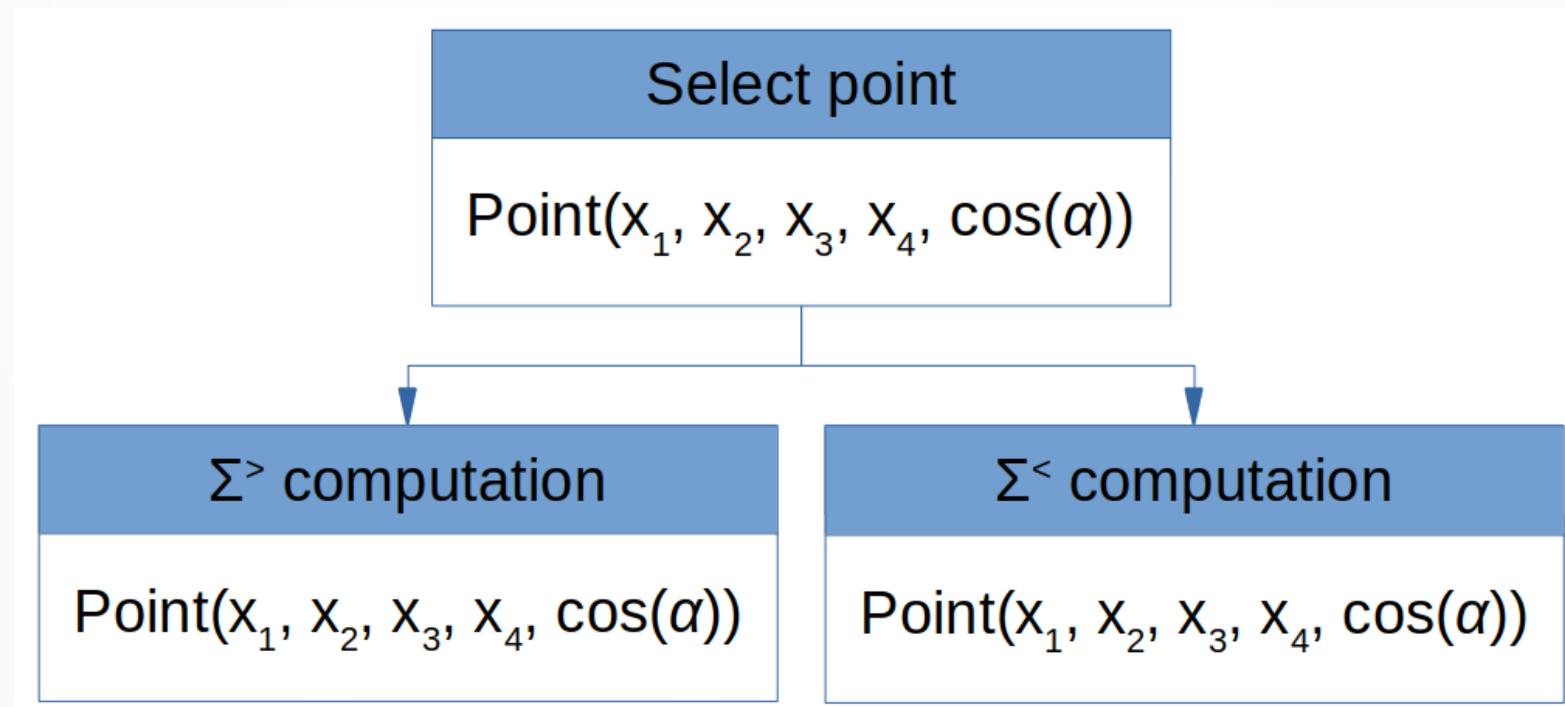
$$d\Omega = \frac{1}{(2\pi)^3} \int ds_1 A(s_1) ds_3 A(s_3) ds_4 A(s_4), \quad \text{where } A(s_i) = 2 \frac{M_i \Gamma_i}{(s_i - M_i^2)^2 + M_i \Gamma_i^2}$$

$$\mathbf{F}^> = \mathbf{n}_1 (\mathbf{n}_3 + 1) (\mathbf{n}_4 + 1),$$

$$\mathbf{F}^< = (1 + \mathbf{n}_1) \mathbf{n}_3 \mathbf{n}_4$$

$$|\vec{p}_3| = \frac{|\vec{p}_1| \cos\alpha a \pm \sqrt{|\vec{p}_1|^2 \cos^2\alpha a^2 + ((\sqrt{s_2} + E_1)^2 - |\vec{p}_1|^2 \cos^2\alpha) (a^2 - 4s_3 (\sqrt{s_2} + E_1)^2)}}{2((\sqrt{s_2} + E_1)^2) - |\vec{p}_1|^2 \cos^2\alpha}$$

Получение точек из области интегрирования



$$\int_{-1}^1 d(\cos\alpha)$$

$$\Gamma = \frac{1}{2p_0} (\Sigma^>(p_0) - \Sigma^<(p_0))$$

$$\Sigma^{>(<)}(p) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\Omega \int \frac{\vec{p}_1}{2E_1} \frac{1}{8\pi} \int_{-1}^1 d(\cos\alpha) \frac{|\vec{p}_3|^2}{|\vec{p}_3|^2(\sqrt{s_2}+m_1)-|\vec{p}_1|E_3\cos\alpha} |A|^2 F^{>(<)}$$

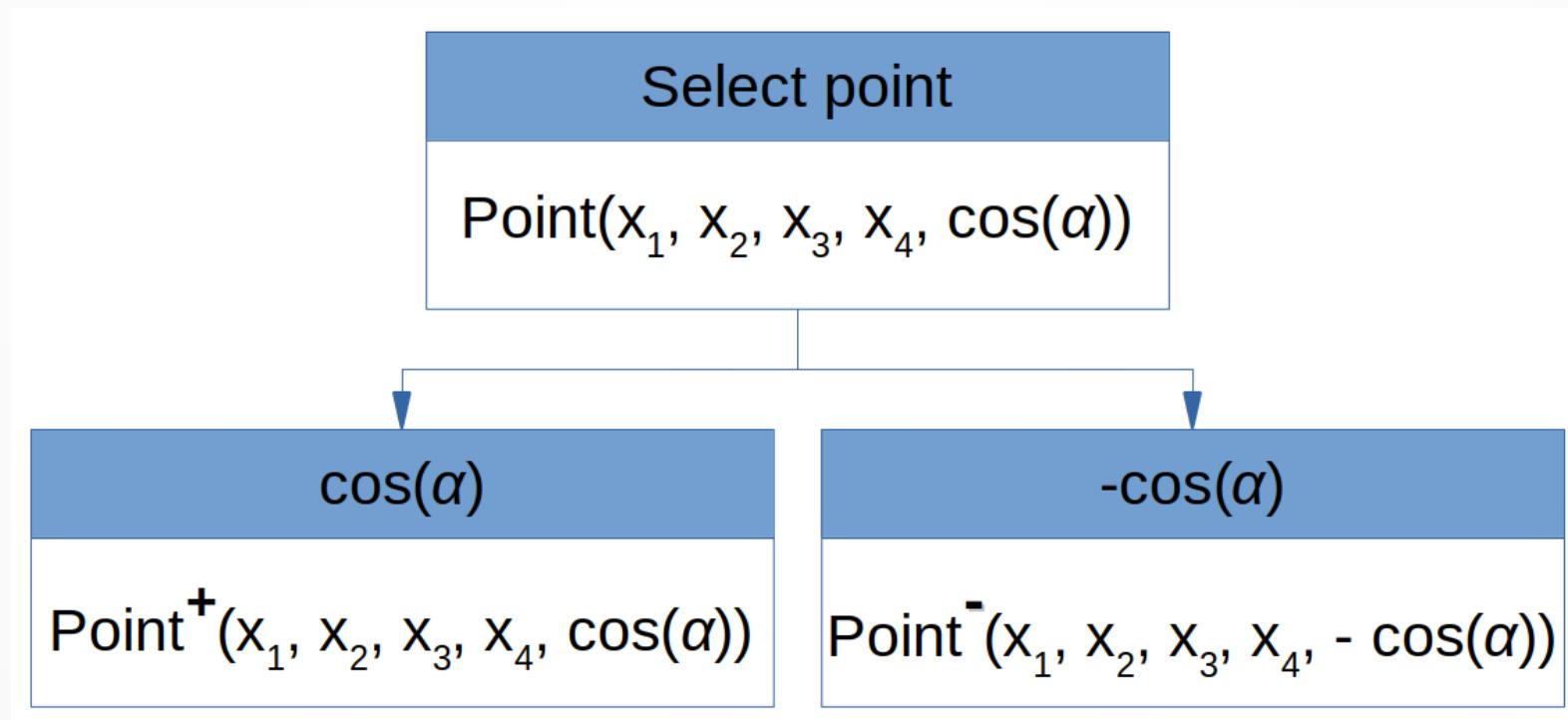
$$d\Omega = \frac{1}{(2\pi)^3} \int ds_1 A(s_1) ds_3 A(s_3) ds_4 A(s_4), \quad \text{where } A(s_i) = 2 \frac{M_i \Gamma_i}{(s_i - M_i^2)^2 + M_i \Gamma_i^2}$$

$$F^> = n_1 (n_3 + 1) (n_4 + 1),$$

$$F^< = (1 + n_1) n_3 n_4$$

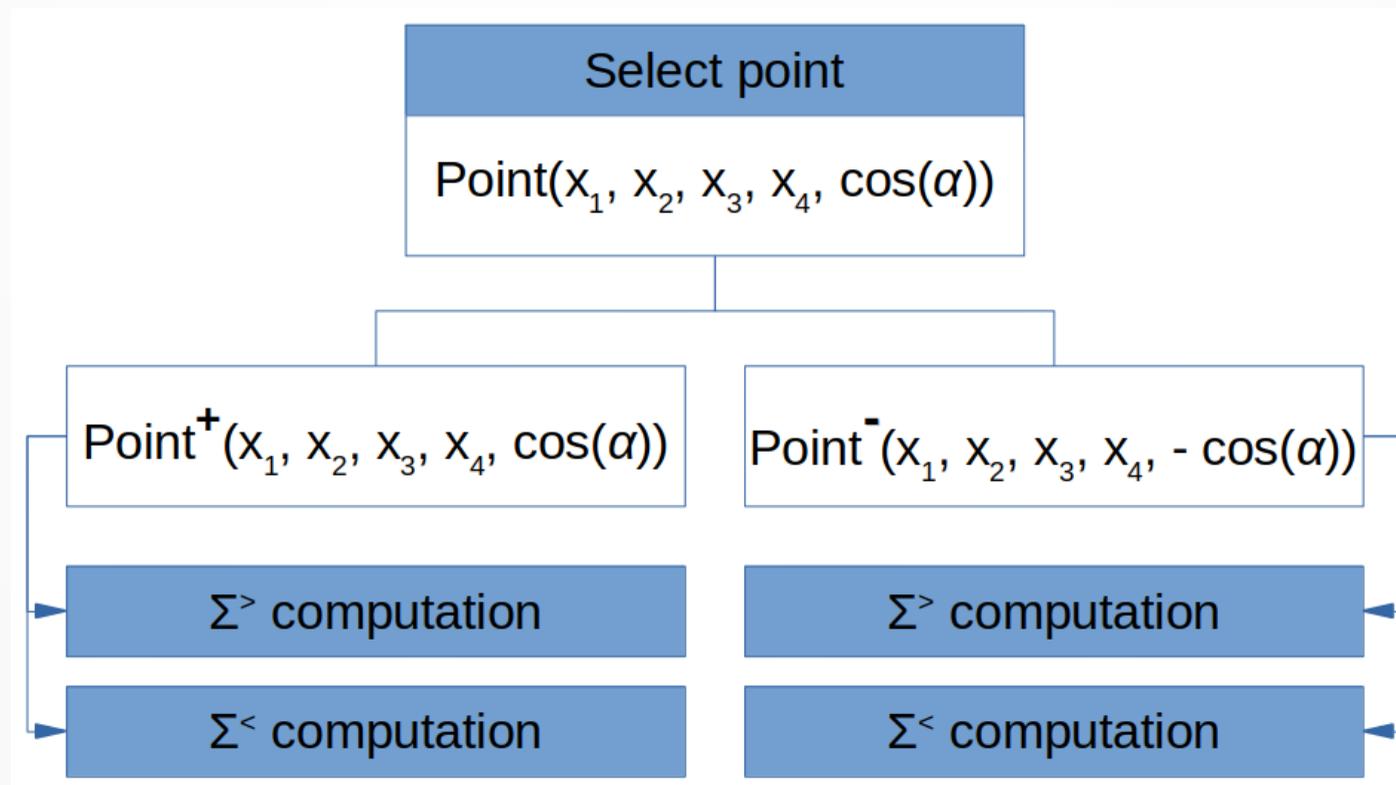
$$|\vec{p}_3| = \frac{|\vec{p}_1| \cos\alpha a \pm \sqrt{|\vec{p}_1|^2 \cos^2\alpha a^2 + ((\sqrt{s_2} + E_1)^2 - |\vec{p}_1|^2 \cos^2\alpha)(a^2 - 4s_3(\sqrt{s_2} + E_1)^2)}}{2((\sqrt{s_2} + E_1)^2) - |\vec{p}_1|^2 \cos^2\alpha}$$

Отображение точек по $\cos\alpha$



По итогу

Оба подхода снижают общее количество генерируемых. Количество необходимых вычислений так же сокращается. Всё это приводит к уменьшению времени вычислений

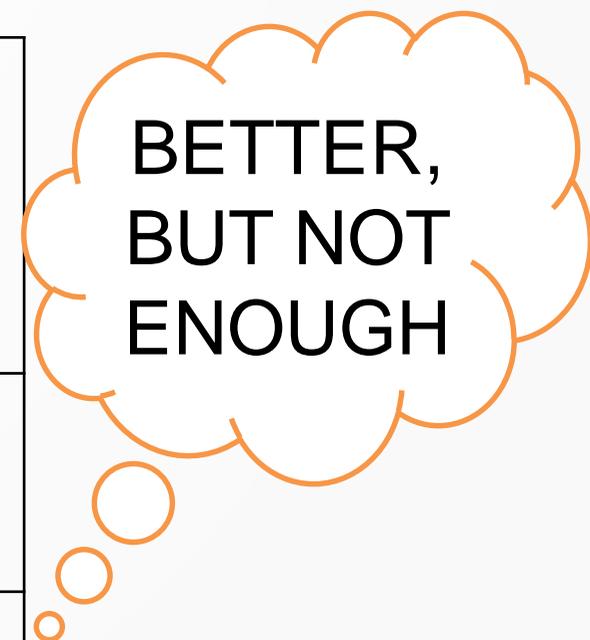


Вычисления

$T:$	0.14
$M_{\pi}:$	0.1420947
$m_q:$	0.5450886
$g_{\sigma\pi\pi}:$	1.65789
$g_{\sigma q q}:$	2.198875



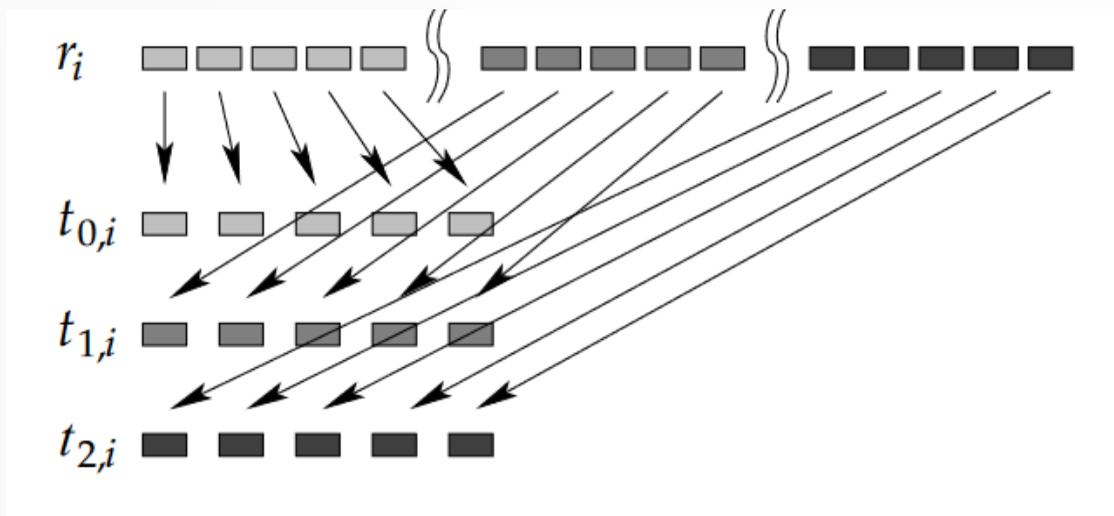
Время вычисления в однопоточном режиме с $\varepsilon=1\%$ (верхняя граница погрешности)
Количество случайных точек: $55 \cdot 10^6$
Time = 154 sec



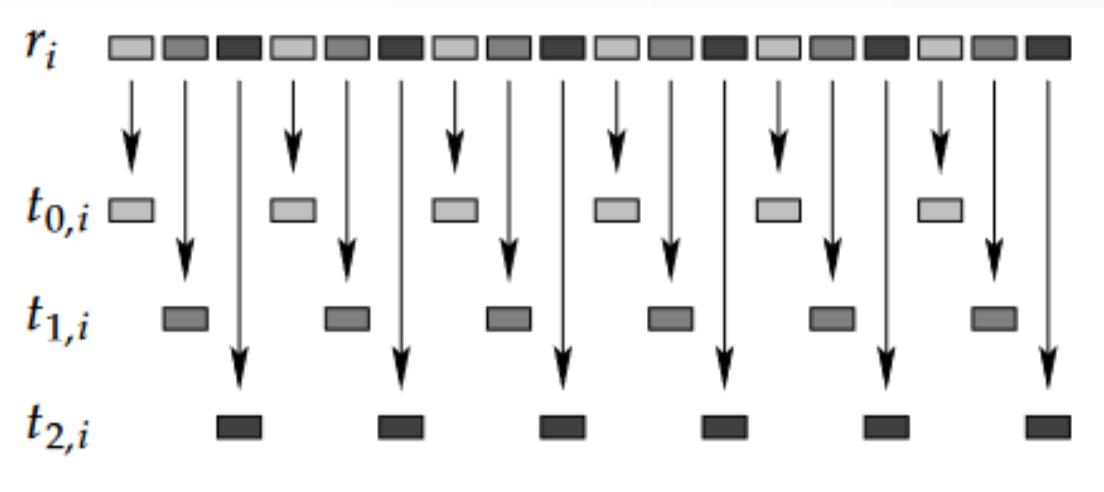
Распараллеливание

ГСЧ - TRNG

Разделение последовательности псевдослучайных чисел между потоками между потоками



Block splitting



Leapfrogging

Равномерное распределение задач между потоками

$x_1, x_2, x_3, \dots, x_{N-1}, x_N$

$$P_1 \rightarrow \frac{P}{N}, P_2 \rightarrow \frac{P}{N}, \dots, P_M \rightarrow \frac{P}{N}, \quad P_{M+1} \rightarrow \frac{P}{N} + 1, \dots, P_P \rightarrow \frac{P}{N} + 1$$

Реализация

Однопоточный

OpenMP

NVIDIA CUDA

CUDA + OpenMP

Время вычисления

Шаг точек: 100к

OpenMP

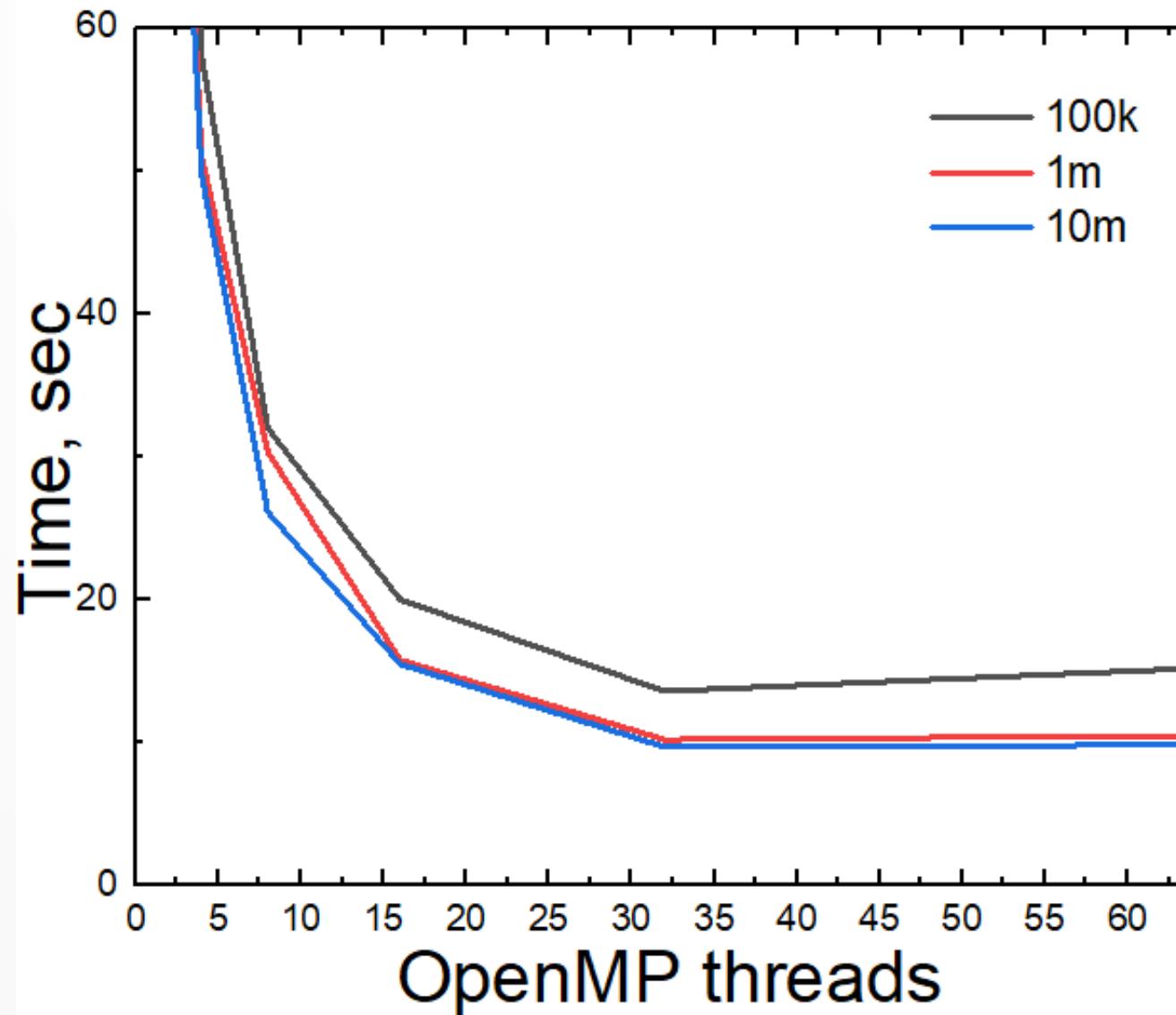
	Single thread	4 threads
Раздельный счёт	382 sec	182 sec
Оптимизированный	154 sec	82 sec

Время вычисления

OpenMP

Шаг: 100к точек		Шаг: 1m точек		Шаг: 10m точек	
N threads	Time	N threads	Time	N threads	Time
x2	138 sec	x2	97 sec	x2	95 sec
x4	58 sec	x4	51 sec	x4	50 sec
x8	32 sec	x8	30.5 sec	x8	26.4 sec
x16	20 sec	x16	15.7 sec	x16	15.5 sec
x32	13.56 sec	x32	10.2 sec	x32	9.73 sec
x64	15.23 sec	x64	10.47 sec	x64	9.84 sec

Время вычисления



Время вычисления

20 миллионов точек

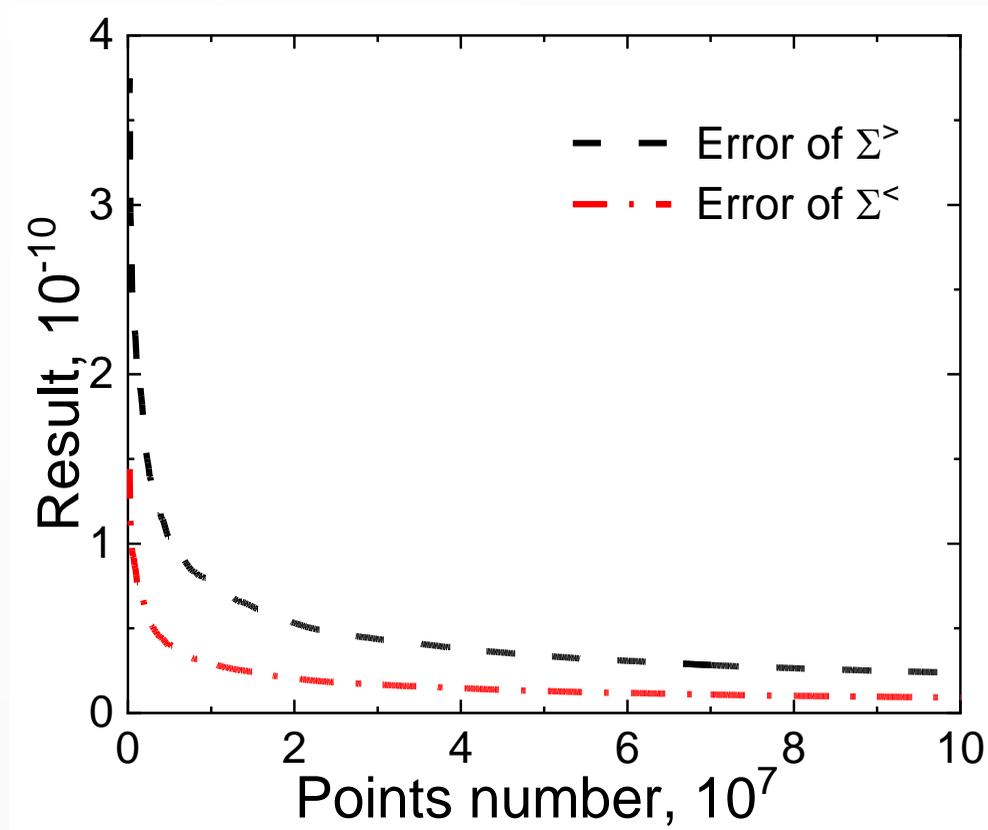
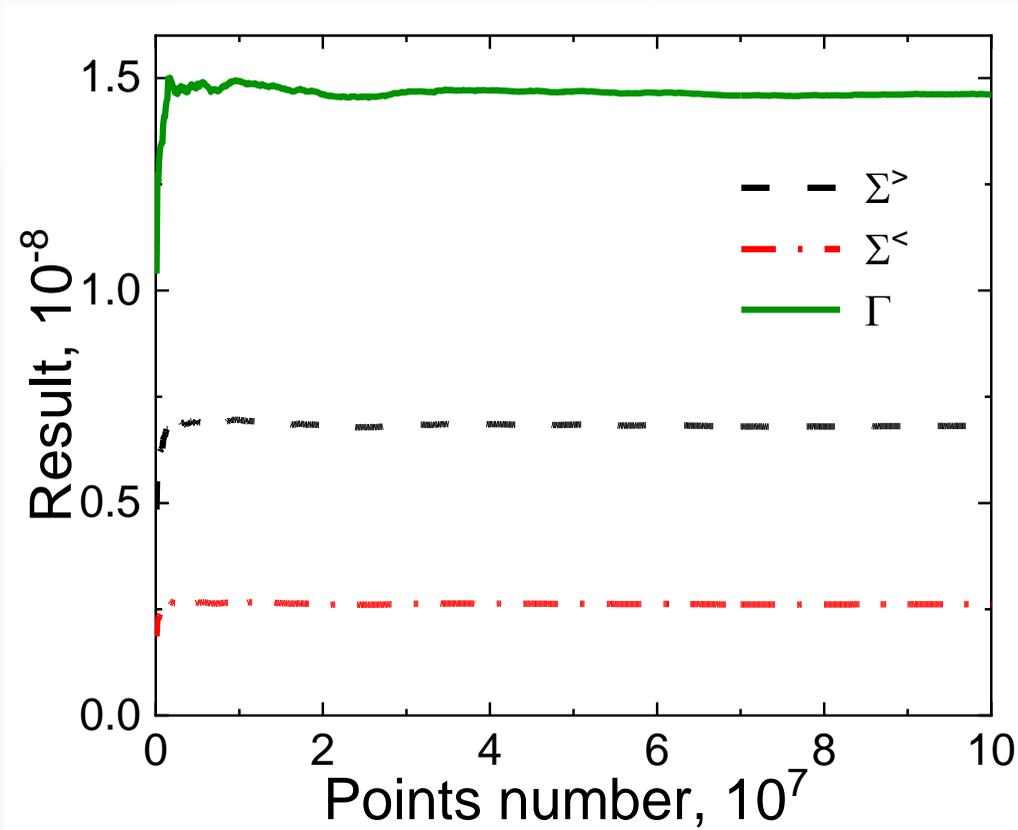
	None	OpenMP			CUDA			CUDA+OpenMP		
Threads	-	4	32	64	8/64	16/128	32/256	8/64+4	16/128+16	32/256+32
Time, sec	42	8.95	2.09	1.89	3.21	0.83	0.51	2.01	0.79	0.50

The calculations performed on the HybriLIT heterogeneous platform of the Meshcheryakov Laboratory of Information Technologies, JINR, Dubna.

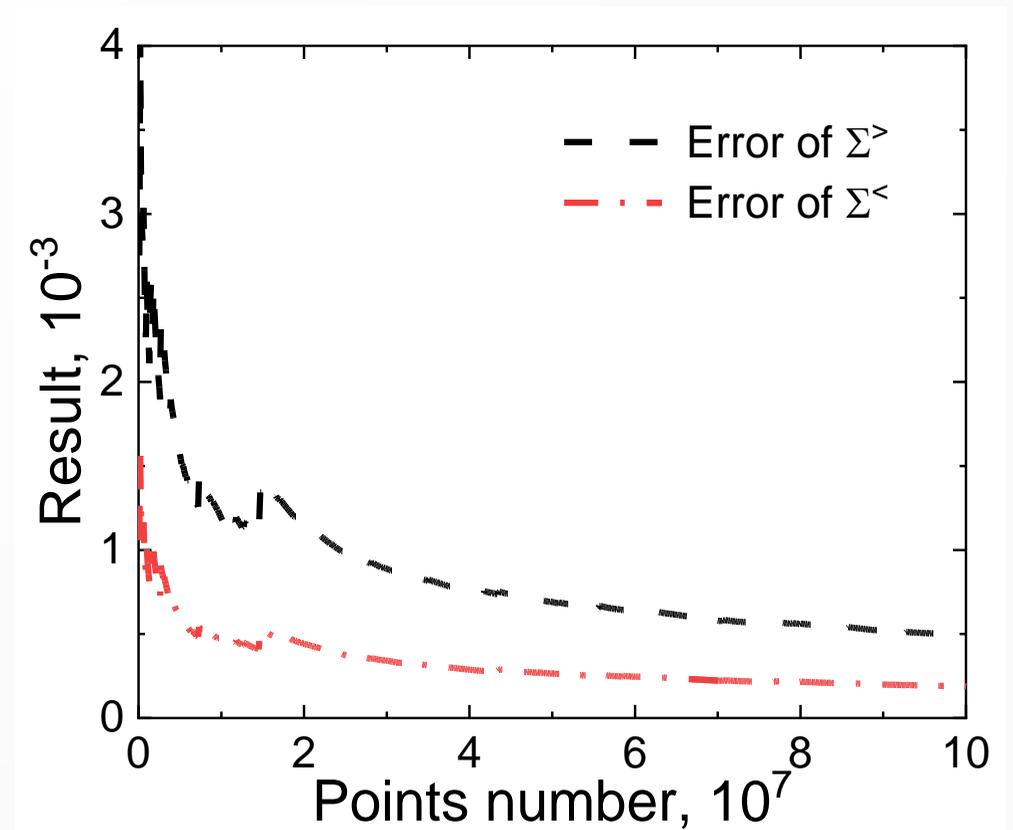
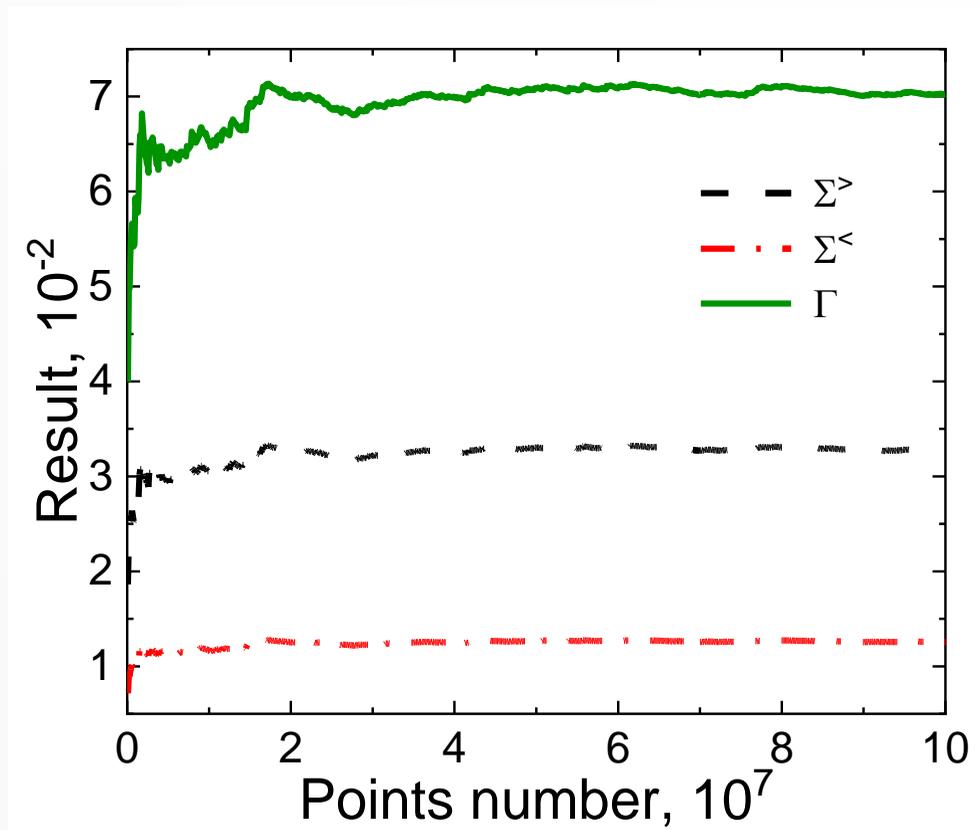
CPU: Intel Xeon Phi
GPU: Tesla K40

Результаты вычислений

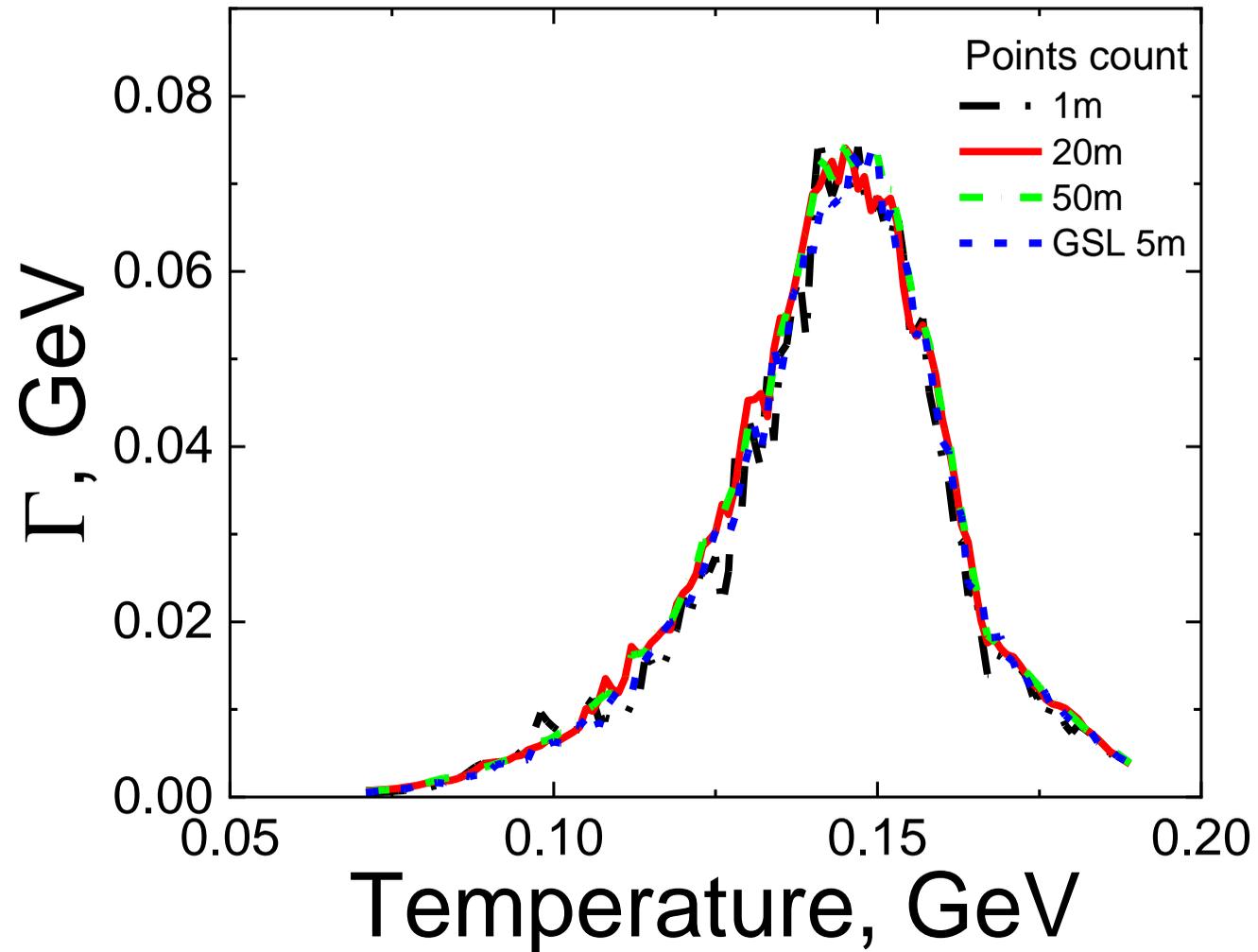
Сравнение верхней границы погрешности без амплитуды. $T=0.15$



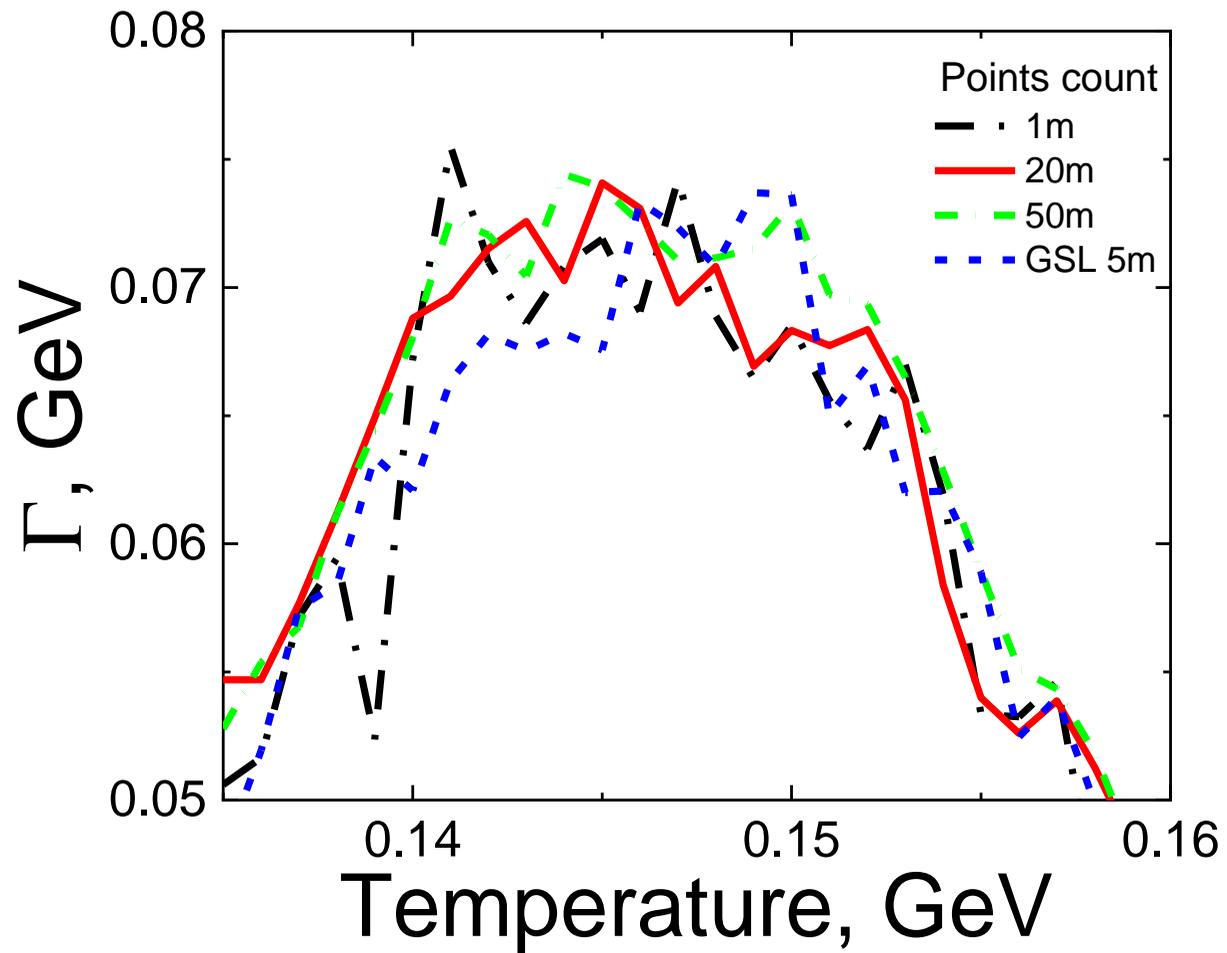
Сравнение верхней границы погрешности с амплитудой. $T=0.15$



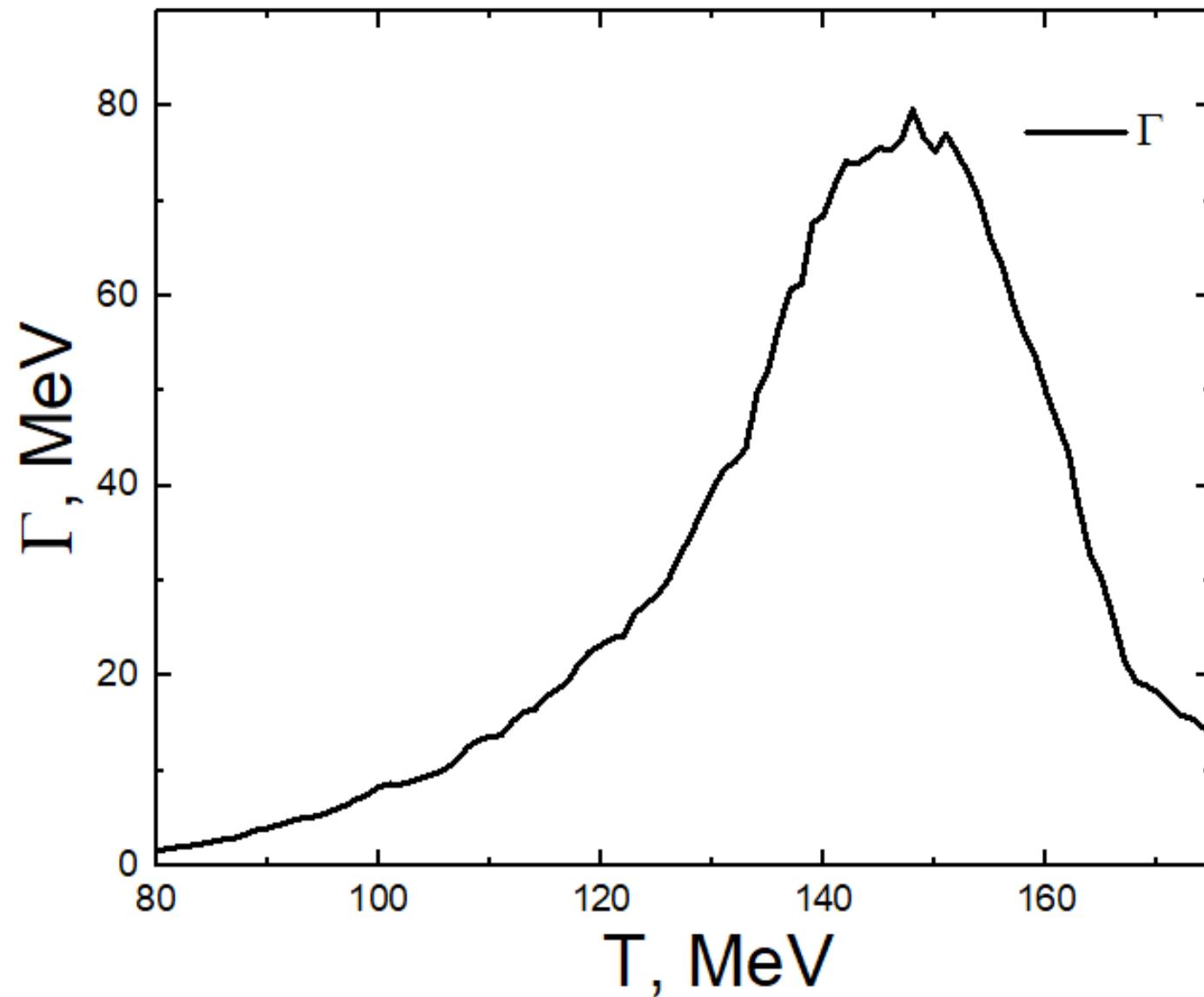
Ширина мезона



Ширина мезона



Ширина мезона



Итог

- Задача состояла в решении 5-кратного интеграла
- В следствии размерности интеграла и его особенности был выбран и изучен метод интегрирования Монте-Карло
- Для уменьшения количества генерируемых точек и общего числа вычислений оптимизировали интеграл
- Использовали технологии распараллеливания для уменьшения времени вычислений

heterogeneous platform to reduce calculation time

