

SIMULIME TË QCD-SË RRJETORE ME FERMIQCD

DAFINA HYKA (XHAKO)¹, RUDINA OSMANAJ (ZEQIRLLARI)²

¹Universiteti Politeknik i Tiranës, Fakulteti i Inxhinierisë Matematike dhe Inxhinierisë Fizike, Departamenti i Inxhinierisë Fizike

²Universiteti i Tiranës, Fakulteti i Shkencave të Natyrës, Departamenti i Fizikës

e-mail: dafinaxhako@yahoo.com

Përmbledhje

Kromodinamika Kuantike Rrjetore (LQCD) është një formulim algoritmik i teorisë QCD që përshkruan kuarket dhe bashkëveprimet e tyre. Ajo bazohet në algoritme numerike të derivuar prej një analogjie matematikore midis "integralit të udhëve" në mekanikën statistike dhe "hapave" të zinxhirit të Markovit në algoritmin Monte Carlo. Simulimet numerike në LQCD me metodat Monte Carlo janë mjaft të kushtueshme dhe duhet të kryhen në njësi kompjuterike sa më të mëdha, si superkompjuterat. Llogaritjet në paralel duke shfrytëzuar superkompjuterat me fuqi procesimi të konsiderueshëm janë një alternativë për të fituar në kohë dhe kosto llogaritëse. Shpesh është e domosdoshme që llogaritjet rrjetore të kryhen në rrjeta me volum sa më të madh në mënyrë që rezultati që merret për një madhësi të caktuar fizike të jetë sa më afërt me atë të kontinuit, duke rritur më tepër koston llogaritëse. Në këtë punim kemi kryer simulime numerike të teorisë së pastër kalibruese SU(3) për të testuar softuerin FermiQCD. Rezultoi se FermiQCD është një ndër softueret e paralelizuar më të mirë sot për sot në fushën e QCD-së rrjetore. Ai shkallëzohet shumë mirë deri për numër procesorësh të përdorur $np=4$. Llogaritjet në paralel janë realizuar në superkompjuterat e projektit HP-SEE, që ndodhet në Bullgari (BG-HPC).

Fjalëkyçe: QCD rrjetore, simulime numerike, FermiQCD, llogaritje në paralel.

Abstract

Quantum Chromodynamics (LQCD) is an algorithmic formulation of QCD theory, the mathematical model that describes quarks interactions. It is based on numerical algorithms derived from a mathematical analogy between the "path integral" in the statistical mechanics and "steps" of the Markov chain in the Monte Carlo algorithm. Numerical simulations of LQCD with Monte Carlo methods can be quite costly and they have to run on larger computer units, such as supercomputers. Parallel calculations using supercomputers with considerable processing power are an option to gain time and computational cost. Also, we have to simulate larger volumes so that the result obtained for a given physical quantity is closest to the continuum one, increasing more the computational cost. In this paper, we performed numerical simulations of pure SU(3) calibration theory to test the FermiQCD. We see that FermiQCD is one of the best paralleled software available today in the field of LQCD. It scales very well up to the number of processors used $np = 4$. Parallel calculations have been carried out in one of the supercomputers of the HP-SEE project, located in Bulgaria (BG-HPC).

Key words: LQCD, numerical simulations, FermiQCD, parallel calculations.

Hyrje

Kromodinamika kuantike rrjetore (Lattice Quantum Chromo-Dynamics) është formulimi i teorisë së fushës kalibruese në një hapësirë-kohë diskrete, e propozuar nga Wilson (1974). Metoda natyrale e kuantizimit të një teorie rrjetore është e ajo e formalizimit të integralit të udhëve, sipas të cilit sistemi merr formën e një modeli statistik katër dimensional. Fushat lëndore trajtohen si variabla të vendosura në nyjet e rrjetës, ndërkohë fushat kalibruese vendosen në lidhjet që bashkojnë nyjet. Një avantazh i rëndësishëm i formulimit rrjetor është fakti se integrali i udhëve mund të llogaritet numerikisht nëpërmjet simulimeve Monte Carlo (Creutz, 1980; Barkai *et.al.*, 1984). Llogaritjet numerike në rrjetë me metodat Monte Karlo janë mjaft të kushtueshme. Ndërkohë, nga ana tjetër, rritja e precizionit për shkak të përmirësimeve teorike të teknikave është shoqëruar nga një rritje e fuqisë kompjuterike. Si rrjedhim teknikat e llogaritjeve në paralel janë një alternativë mjaft e mirë për të fituar në kohë dhe kosto llogaritëse.

Materiali dhe metodat

Llogaritjet në paralel janë realizuar duke shfrytëzuar një softuer special të quajtur FermiQCD (Di Pierro *et. al.*, 2001; Di Pierro *et. al.*, 2002; Di Pierro *et. al.*, 2004), i cili është një koleksion klasash, funksionesh dhe algoritmesh në paralel për QCD-në rrjetore të shkruara në C++. Ai përmban algoritme të optimizura të implementuara duke përdorur MPI (Message Passing Interface) (Kuiper, 2008) por thirrjet MPI janë të fshehura në nivelet e larta të algoritmeve që përbëjnë FermiQCD. FermiQCD funksionon gjithashtu edhe në një procesor të vetëm. Tipet (klasat) e gjuhës tek FermiQCD përfshijnë numra kompleksë (mdp_complex), matrica (mdp_matrices), rrjeta (mdp_lattice), fushat gluonike, fermionike (gauge field, fermi field), përhapës (fermi propagator), funksione veprimi kalibrues, fermionik (gauge action, fermi action) etj. Një nga avantazhet kryesore të FermiQCD ndaj librarive të tjera është fakti se ai bazohet në një strukturë të thjeshtë të programimit të orientuar në objekte ndryshe nga një dizajn “procedural”. Më poshtë po listojmë në mënyrë të përmbledhur disa prej avantazheve që ka përdorimi i këtij softueri për simulimet numerike të QCD-së rrjetore.

- Programet (kodet) e shkruar në FermiQCD janë të thjeshta për t’u shkruar, lexuar dhe modifikuar pasi sintaksa e përdorur lidhet ngushtë me sintaksën matematikore të përdorur në artikujt dhe librat e Teorisë Kuantike të Fushës.
- Programet janë “portable”, në sensin se mundet që të kompilohen me çfarëdolloj kompiluesi ANSI C++ tjetër. Optimizimet specifike harduerike janë koduar në librari dhe janë të fshehura nga niveli i lartë i programimit.
- Komunikimet në FermiQCD bazohen në MPI.
- Programet janë të thjeshta për t’u korigjuar për shkak se përdorimi i objekteve dhe algoritmeve të FermiQCD nuk kërkon përdorim eksplícit të shënjesve. I gjithë menaxhimi i memorjës realizohet prej objekteve në vetvete.

Fillimisht ne studjuam dhe testuam softuerin FermiQCD në kompjutera lokalë individuale për rrjeta të vogla deri në 4^4 mbi shembujt e gatshëm që përfshin paketa. Burimi për shkarkimin e tij gjendet në faqen e internetit të softuerit (<http://web2py.com/fermiqcd>). Për ta përdorur më pas nuk nevojitet instalim por paraprakisht kërkon instalimin e softuerit Mercurial, instruksione të mëtejshme jepen në faqen zyrtare të softuerit. Më pas testimi i softuerit u shtri në makina të mëdha paralele si klasteri në Sofje të Bullgarisë. Aksesimi për të përdorur këtë të fundit ishte pjesë e llogaritjeve për një projekt llogaritës të LQCD nga grupi TirLatt (grupi i studjueseve të QCD-së rrjetore në Tiranë, Shqipëri) të përzgjedhur nga HP-SEE(High-Performance Computing Infrastructure for South East Europe's Research Communities) (https://cordis.europa.eu/project/rcn/95208_en.html). Një punë parapërgatitore u bë me studimin dhe familjarizimin me programimin në paralel me MPI. U njohën dhe u testuan komandat e kompilitimit dhe ekzekutimit në paralel.

Rezultatet dhe diskutimi

U studjua fillimisht koha kompjuterike e llogaritjeve në klasterin paralel për numër procesorësh të ndryshëm të përdorur si dhe për rrjeta me përmasa të ndryshme me shembujt e gatshëm të paketës, në mënyrë që të testohet shkallëzimi i tij për rrjeta edhe më të dendura dhe për numër procesorësh të ndryshëm. Rezultatet jepen të tabeluara në Tabelën 1.

Tabela 1. Vlerat e marra të kohës së llogaritjes në sekonda në varësi të numrit të procesorëve për rrjeta me volum të ndryshëm me FermiQCD

Numri i procesorëve (np)	Rrjeta 8^4	Rrjeta 12^4	Rrjeta 16^4	Rrjeta 20^4
1	102.928	539.974	1699.8	3875.01
2	50.1882	245.913	775.098	1949.18
3	40.6041	187.391	575.832	1331.94
4	24.0793	137.427	414.68	940.543
5	27.4751	127.294	429.739	802.563
6	24.9939	92.3678	315.519	831.246
7	24.7644	83.7491	314.14	610.789
8	12.5531	84.0548	225.209	599.266
9	19.4817	125.336	313.202	893.248
10	19.475	126.841	313.366	616.307
11	19.441	128.586	311.705	626.435
12	19.5794	66.9843	317.799	625.546

13	19.7308	66.227	313.243	626.113
14	19.7594	67.4796	314.101	620.389

Gjithashtu po japim më poshtë rezultatet në trajtë grafike. Konkretisht, Figurat 1 deri në 4 tregojnë kohën kompjuterike të llogaritjes për numër procesorësh të ndryshëm nga 1 deri 14 për rrjetat me volum 8^4 , 12^4 , 16^4 , 20^4 . Duket qartë rënia eksponenciale e kohës së llogaritjes me rritjen e numrit të procesorëve për të gjitha rrjetat. Vihet re gjithashtu se për numër procesorësh mbi 4, koha e llogaritjes saturohet.

Figura 1. Varësia e kohës llogaritëse kompjuterike nga numri i procesorëve të përdorur, gjatë simulimit të një prej kodeve të FermiQCD për rrjetë me volum 8^4

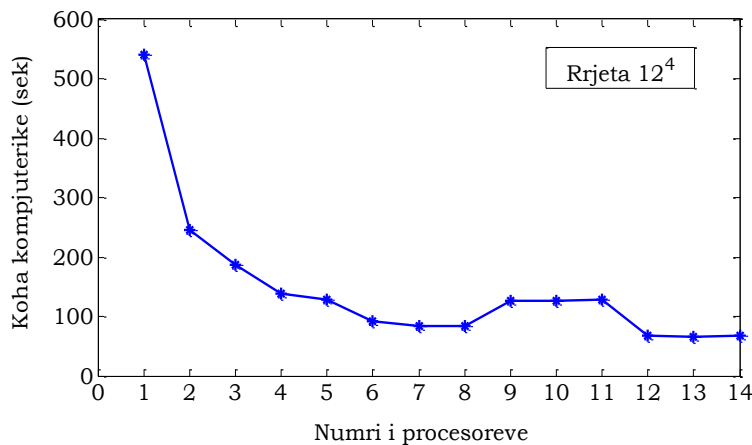


Figura 2. Varësia e kohës llogaritëse kompjuterike nga numri i procesorëve të përdorur, gjatë simulimit të një prej shembujve të FermiQCD për rrjetë me volum 12^4 .

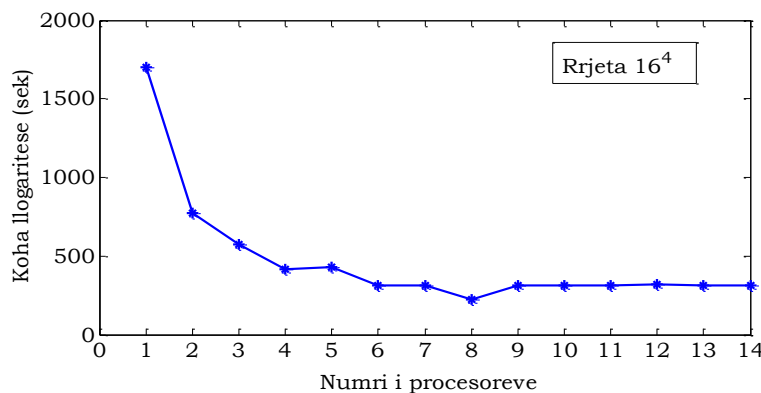


Figura 3. Varësia e kohës llogaritëse kompjuterike nga numri i procesorëve të përdorur, gjatë simulimit të një prej shembujve të FermiQCD për rrjetë me volum 16^4 .

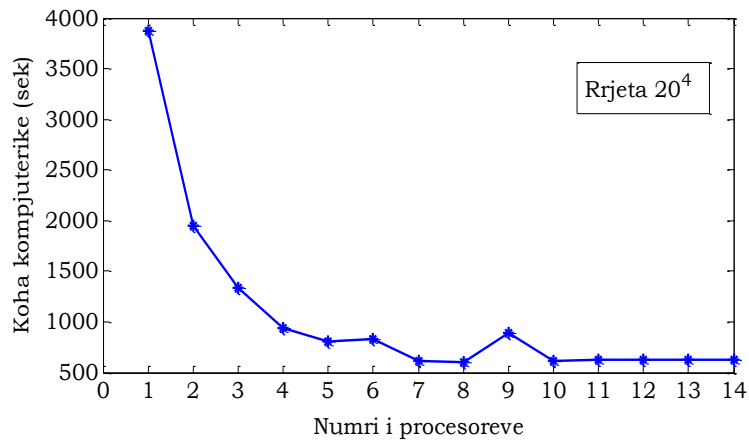


Figura 4. Varësia e kohës llogaritëse kompjuterike nga numri i procesoreve të përdorur, gjatë simulimit të një prej shembujve të FermiQCD për rrjetë me volum 20^4 .

Kemi studjuar gjithashtu varësinë e kohës kompjuterike të llogaritjes nga madhësia e rrjetës së përdorur në simulime për numër procesorësh të fiksuar, e paraqitur grafikisht në Figurën 5.

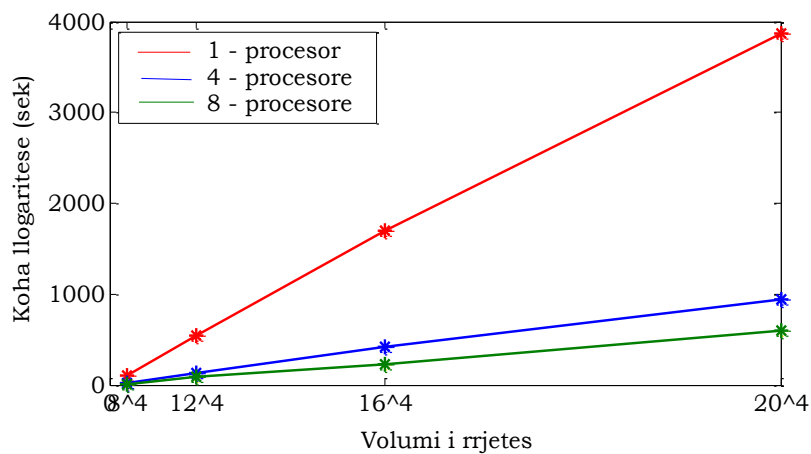


Figura 5. Varësia e kohës kompjuterike llogaritëse nga volumi i rrjetës, gjatë simulimit të një prej shembujve të FermiQCD për numër procesorësh të fiksuar 1,4,8.

Duket qartë se me rritjen e volumit të rrjetës rritet koha e llogaritjes. Në Figurë 5 paraqiten disa raste studimi për procesorë të ndryshëm të fiksuar, si p.sh 1,4,8. Kemi kryer edhe testin e përsheptimit dhe efikasitetit të FermiQCD. Në qoftë se $T(n,1)$ është koha e llogaritjes së algoritmit

sekuencial më të shpejtë të njohur dhe $T(n,p)$ koha e llogaritjes e algoritmit në paralel të ekzekutuar në p -proçesorë, ku n është madhësia e parametrave hyrës (volumi rrjetor), atëherë testi i përshpejtimit përcaktohet nga $S(p) = T(n,1)/T(n,p)$. Rezultatet e testit të përshpejtimit të FermiQCD për rrjeta me volum të ndryshëm jepen në Figurën 6.

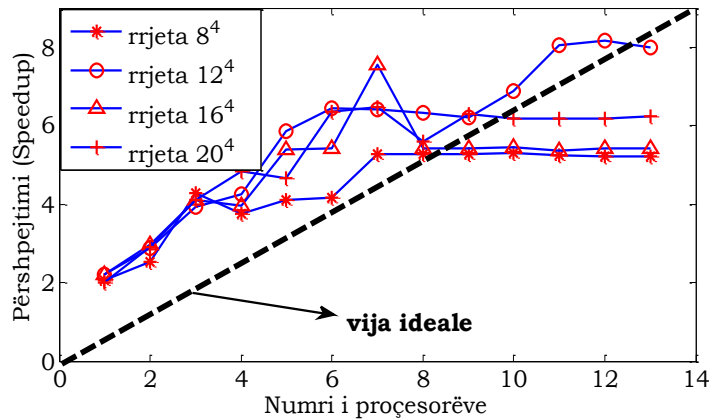


Figura 6. Testi i përshpejtimit (speedup test) të FermiQCD nga numri i procesorëve të përdorur në simulim për rrjeta me volum të ndryshëm

Përshpejtimi ideal do të përfitohej nëse $S(p) = p$, kështu nëse do të dyfishonim numrin e procesorëve, do të dyfishohej koha e ekzekutimit. Një tjetër test që mat performancën e një algoritmi në paralel është testi i efikasitetit, $E(p)$, i përcaktuar si: $E(p) = S(p)/p$. Rezultatet e testit të efikasitetit të FermiQCD për rrjeta me volum të ndryshëm jepen në Figurën 7.

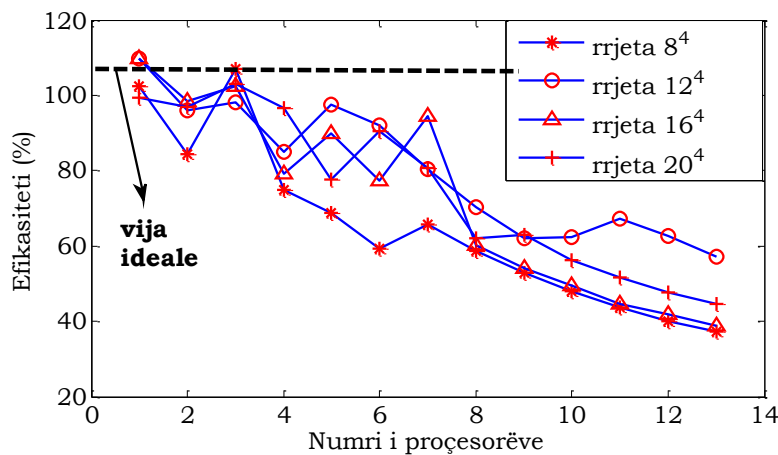


Figura 7. Testi i efikasitetit (efficiency test) i shprehur në përqindje të FermiQCD nga numri i procesorëve të përdorur në simulim për rrjeta me volum të ndryshëm

Përfundime

Teknikat e llogaritjes në paralel janë mjaft efikase në llogaritjet e QCD-së rrjetore. Në simulimet në kompjuterat tonë individualë me rrjeta shumë të vogla 4^4 (të rralla) do duhej rreth 8 orë për të marrë laqe drejtkëndore ($r = t = 1 \dots 4$) të Wilsoni-it për 100 konfiguracione. Ndërkohë të njëjtës llogaritje në paralel do t'i duheshin disa sekonda. Kështu një drejtim i rëndësishëm ku duhet të fokusohemi për llogaritjet e ardhshme në QCD-në rrjetore janë llogaritjet në paralel. Softueri i zgjedhur për llogaritjet tona në paralel është një ndër softueret më të mirë sot për sot në fushën e QCD-së rrjetore. Nga përshkrimi i tij theksuam thjeshtësinë por dhe nivelin e lartë të gjuhës së përdorur. Testet e kryera treguan se FermiQCD është optimal për simulime të QCD-se rrjetore në paralel. Softueri shkallëzohet shumë mirë deri për numër procesorësh të përdorur $np=4$. Koha kompjuterike e llogaritjes bie eksponencialisht me rritjen e numrit të procesorëve të përdorur për një nyje, për një rrjetë të fiksuar.

Falënderime

Ky punim është realizuar duke shfrytëzuar një prej tufave për superllogaritje të projektit HP-SEE (High-Performance Computing Infrastructure for South East Europe's Research Communities), klasteri në Sofje të Bullgarisë (BG-HPC).

Literatura

Barkai D., Creutz M., Moriarty K.J.M. (1984): Monte Carlo study of SU(3) gauge theory on a 124 lattice, Phys. Rev. D29, 1207-1212

Creutz M. (1980): Monte Carlo study of quantized SU(2) gauge theory, Phys. Rev. D21, 2308-2315.

Di Pierro M. (2001): Parallel Programming with Matrix Distributed Processing, Computer Physics Communications, 141, 98-148.

Di Pierro M. (2002): FermiQCD: A tool kit for parallel lattice QCD applications, Nuclear Physics B- Proceedings, Supplement, 106-107, 1034-1036

Di Pierro M., El-Khadra A., Mackenzie P., Okamoto M., Oktay M. (2004): www.fermiqcd.net, Nuclear Physics Proceedings Supplement. 129: 832-834

Kuiper R. (2008): Introduction to Parallel Computing and the Message Passing Interface, (MPI) July, Lectures

Wilson K.G. (1974): Confinement of Quarks, Phys. Rev. D10 2445