



Monte Carlo in Bielefeld

Oder wie man mit Zufallszahlen rechnen kann



**UNIVERSITÄT
BIELEFELD**



Faculty of Physics

Christian Schmidt-Sonntag

Der Plan

- **Monte Carlo Rechnungen**
 - Was ist das?
- **Der Bielefelder Supercomputer**
 - Was ist das besondere?
- **Materie unter extremen Bedingungen**
 - Experimente am Teilchenbeschleuniger
 - Simulationen in Bielefeld



Monte Carlo Rechnungen – die Idee

- **Idee von Stanislav Ulam ~ 1946**

- **Sein Problem:** Was ist die Wahrscheinlichkeit p ein Solitaire-Spiel mit 52 Karten zu gewinnen?
- **Seine Lösung:** Ein Computer spielt eine große Anzahl von “zufälligen” Spielen. Danach zähle man einfach die Anzahl der erfolgreichen Spiele

$$p = \frac{\text{\#erfolgreiche Spiele}}{\text{\#Spiele}}$$

- **Methode:** Wandele eine schweres/ unlösbares analytisches Problem in ein Zufallsexperiment um.

- **Frühe Pioniere der MC Methode:**

- Stanislav Ulam, John von Neumann, Nicholas Metropolis

- **Grundlegende Veröffentlichung:**

- N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller und E. Teller: *Equation of State Calculations by Fast Computing Machines*. In: *Journal of Chemical Physics*. Band 21, 1953, S. 1087–1092, doi:10.1063/1.1699114.

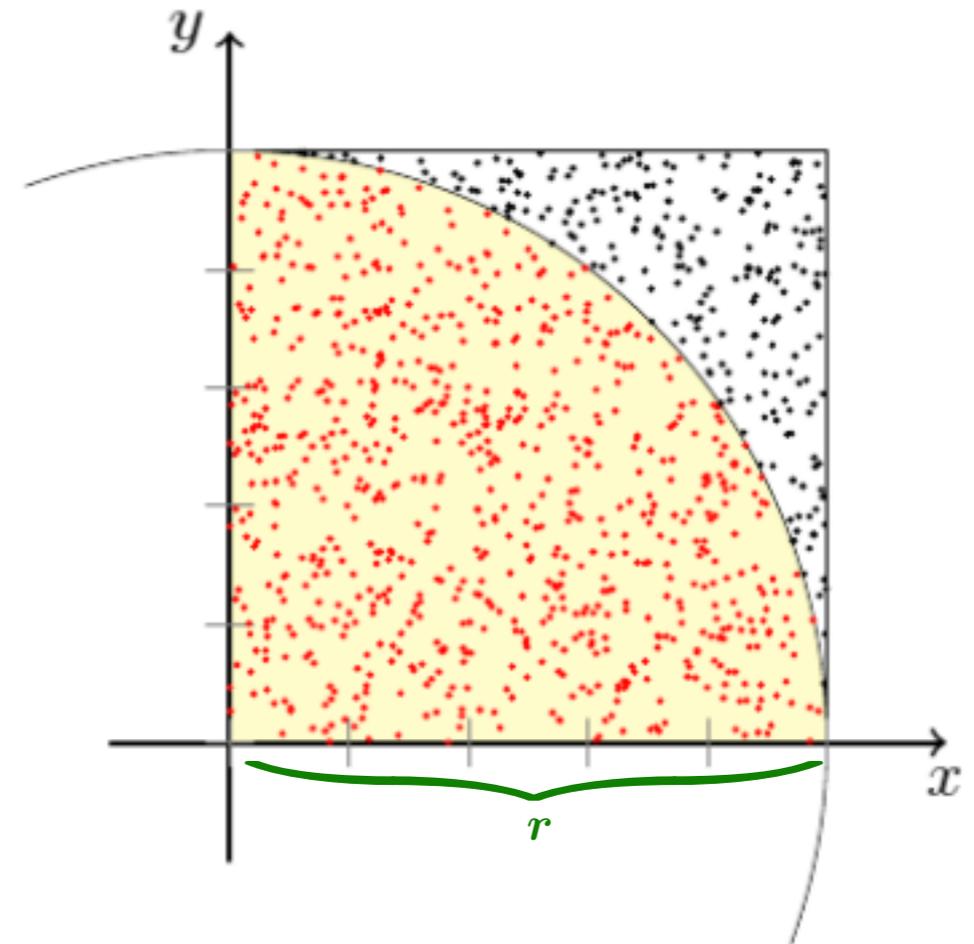
⇒ **Metropolis Algorithmus**



Der MANIAC I (*Mathematical Analyzer Numerical Integrator And Computer Model I*) in Los Alamos, 1953

Monte Carlo Rechnungen – Anwendungen

- Unzählige Anwendungen in der Physik, Biologie, Chemie, Informatik, Ingenieurwissenschaften, Betriebswirtschaftslehre, Soziologie, ...
- Anwendungen in der Mathematik:
 - Integrale (Flächen und Volumen)
 - Simulation und Optimierung (Extremwerte)
 - Inverse Probleme
- Genereller Ablauf
 1. Definition eines Zustandsraumes
 2. Ziehen mehrere Zustände mit bekannter Verteilung
 3. Mathematische Operation auf dem Zuständen
 4. Mittelung über die Ergebnisse



$$\frac{\# \text{ Punkte im Viertelkreis}}{\# \text{ Punkte im Quadrat}}$$

$$= \frac{\text{Fläche Viertelkreis}}{\text{Fläche Quadrat}} = \frac{\frac{\pi}{4} r^2}{r^2} = \frac{\pi}{4}$$

Monte Carlo Rechnungen – Zufallszahlen

- **Echte Zufallszahlen**

- Auf dem Computer nicht vorhanden
- Benötige spezielles Gerät, z.B. durch radioaktive Zerfälle, ein verrauschtes Signal, ...
- Nicht reproduzierbar

- **Pseudo-Zufallszahlen**

- Leicht auf dem Computer zu erzeugen
- Deterministisch, d.h. reproduzierbar
- Nachteil: mehr oder weniger korreliert

- **Linearer Kongruenzgenerator:**

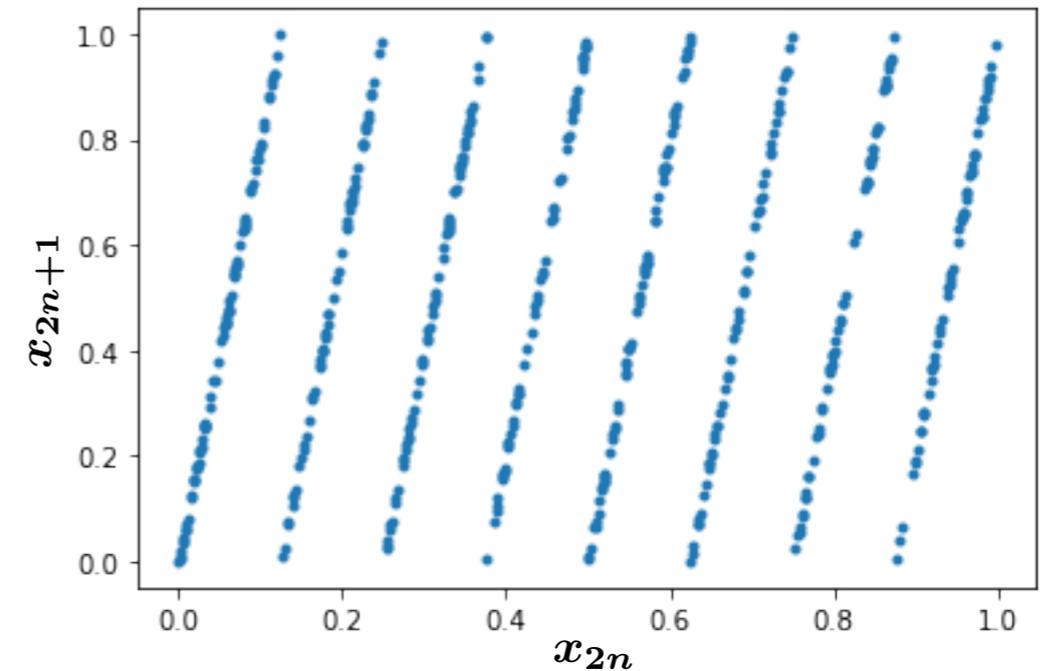
$$x_n = (a \cdot x_{n-1} + b) \bmod m$$

- Schnell und einfach
- Güte der Zufallszahlen ist abhängig von den Parametern

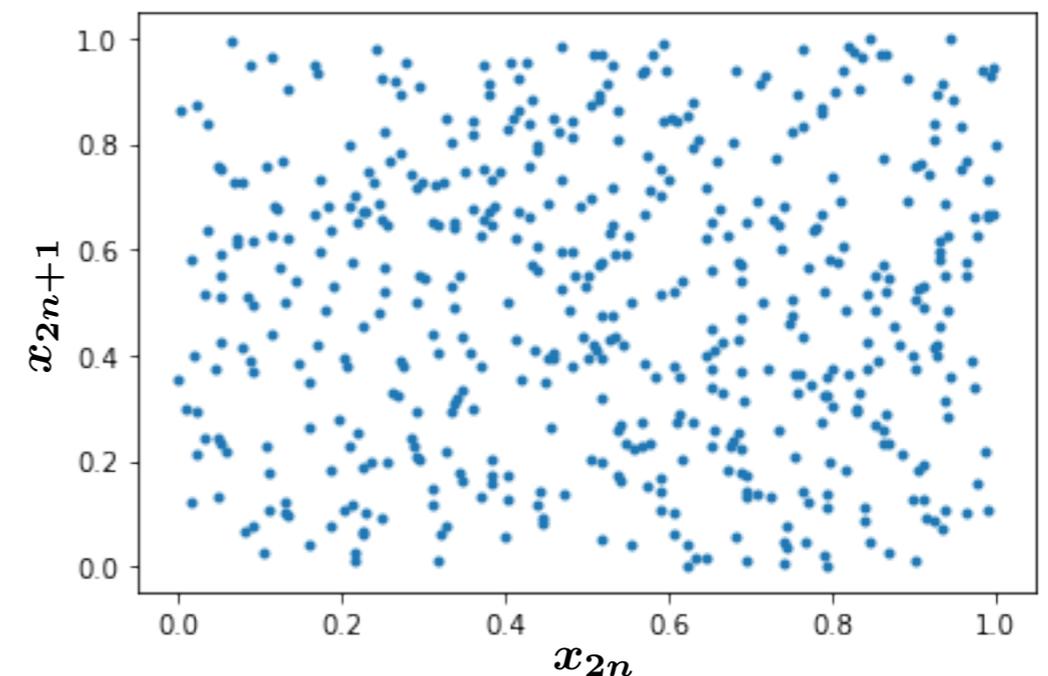
- **Weitere Generatoren**

- Verzögerter Kongruenzgenerator, Nicht-linearer Kongruenzgenerator, Xorshift, Mersenne Twister, ...

$$a = 8, \quad b = 10, \quad m = 10^6$$



$$a = 1103515245, \quad b = 12345, \quad m = 2^{31}$$



Monte Carlo Rechnungen – Beispiel 1

- Vervollständigen Sie das Notebook “MonteCarlo1.ipynb”

MonteCarlo1.ipynb Python 3

Monte-Carlo zur Berechnung der Kreisszahl π

1. Imports

Hier werden die notwendigen Python Module eingebunden

```
[1]: import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
```

2. Pseudo-Zufallszahlen Generator

Hier eine Funktion die N Zufallszahlen im Intervall [0,1] erzeugt mit hilfe eines linearen Kongruenzgenerators

```
[2]: def rng1(seed, a, b, m, N):
    random=np.zeros(N, dtype=int)
    state=seed
    for i in range(N):
        ''' hier fehlt eine Rechnung'''
        random[i]=state
    return random/m
```

hier die Parameter für den Generator

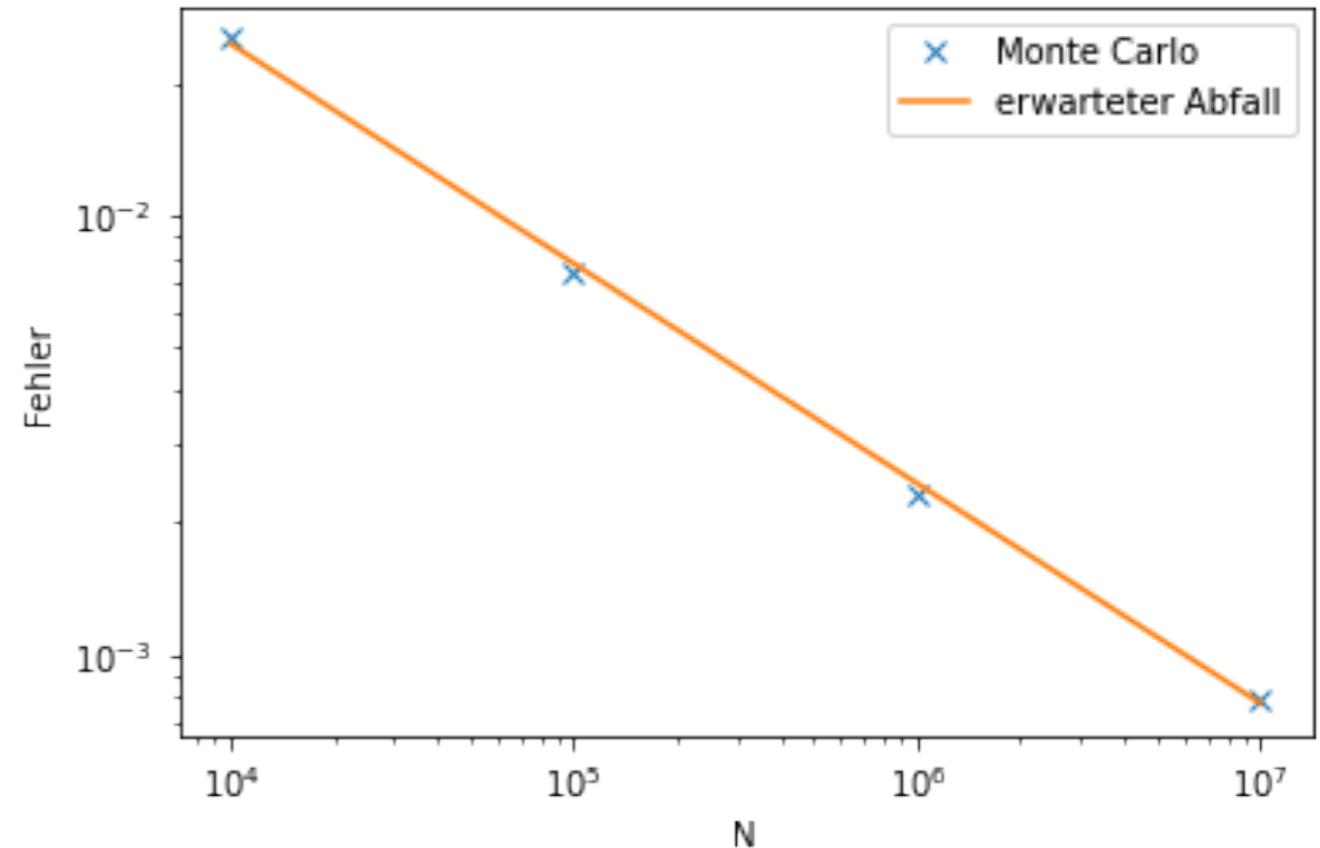
```
[3]: N=int(1000)
a=int(1103515245)
b=int(12345)
m=int(2**31)
```

Schließlich wird der Generator aufgerufen und es werden N Zufallszahlen erzeugt die in dem Array "numbers" stehen. Alternativ

Monte Carlo Rechnungen – Fehlerabschätzung

- **Monte Carlo Rechnungen erzielen immer ein Ergebnis, die Kunst ist es den Fehler richtig abzuschätzen**
 - Für Präzisionsrechnungen braucht man eine sehr hohe Statistik
 - D.h. man braucht auch einen sehr guten Pseudo-Zufallszahlengenerator
 - Der Fehler fällt nur langsam ab (wie $1/\sqrt{N}$)

$$\begin{aligned} N &\rightarrow \text{Error} \\ 4N &\rightarrow \frac{\text{Error}}{2} \end{aligned}$$



• Grundlagen der Statistik

- Mittelwert

$$\langle X \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i$$

- Standardabweichung

$$\text{std}(X) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (X_i - \langle X \rangle)^2}{N - 1}}$$

Monte Carlo Rechnungen – Beispiel 2

- **N geladene Teilchen auf einer Scheibe**

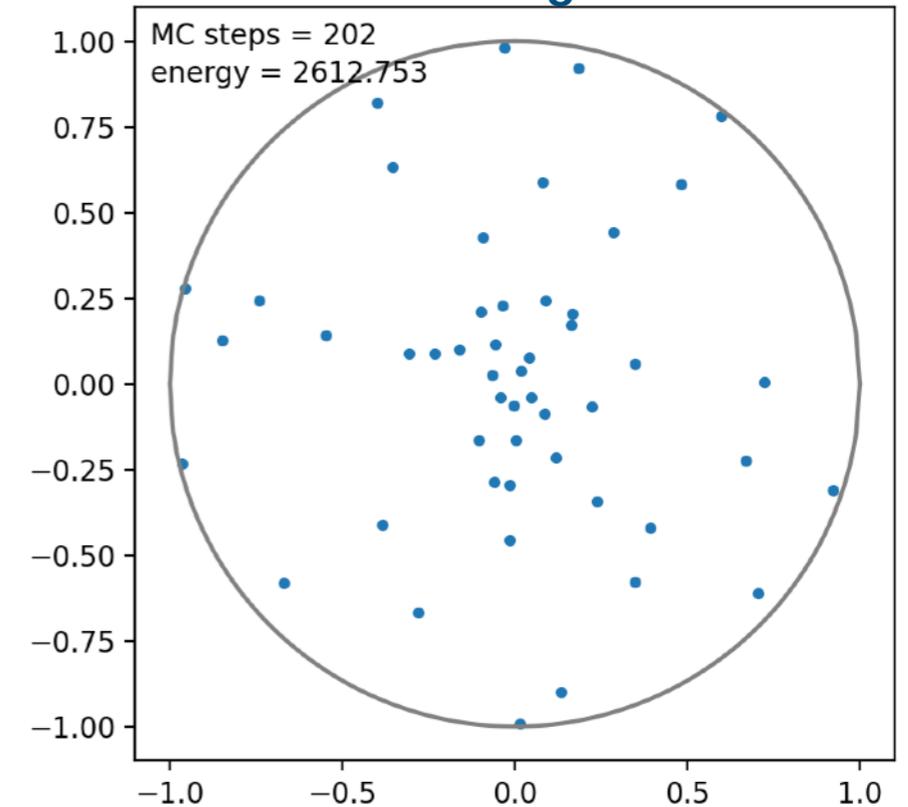
- Die gesamt Energie soll minimiert werden
- Man starts mit N zufälligen Positionen
- Die Position eines jeden Teilchens wird nacheinander zufällig variiert, danach wird geschaut ob sich die Energie verringert hat
- Bei Verringerung der Energie wird die neue Position angenommen
- Dies ist bereits eine Vorstufe des berühmten Metropolis-Algorithmus

- **Energie im E-Feld:**

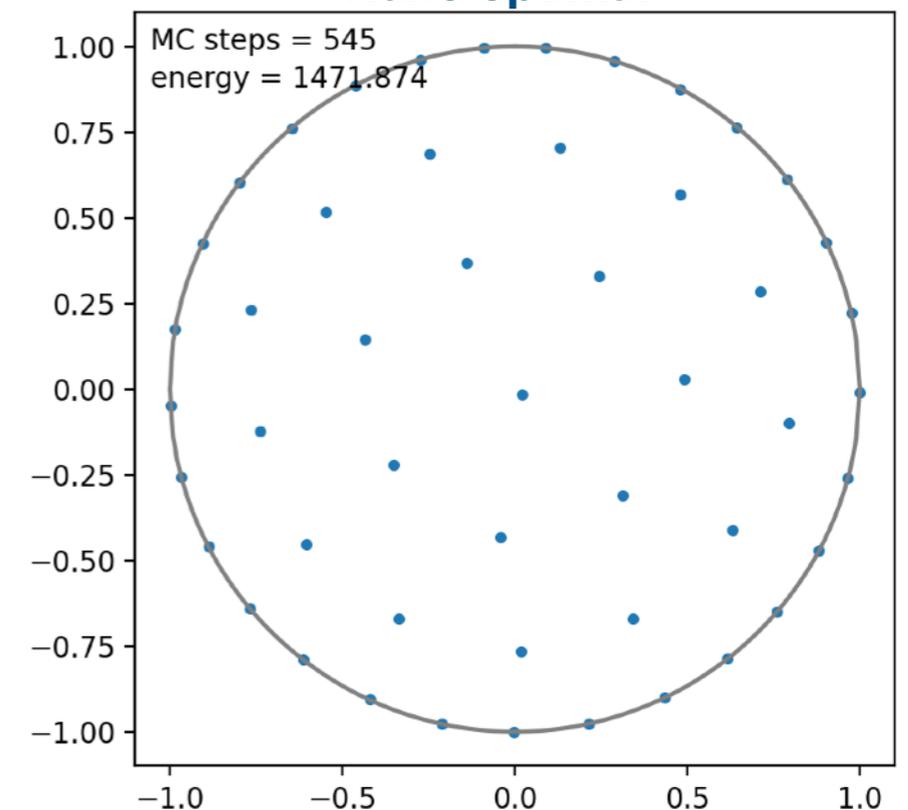
- **Summe der inversen Abstände**

$$E \propto \sum_i \sum_{j>i} \frac{q_i q_j}{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}}$$

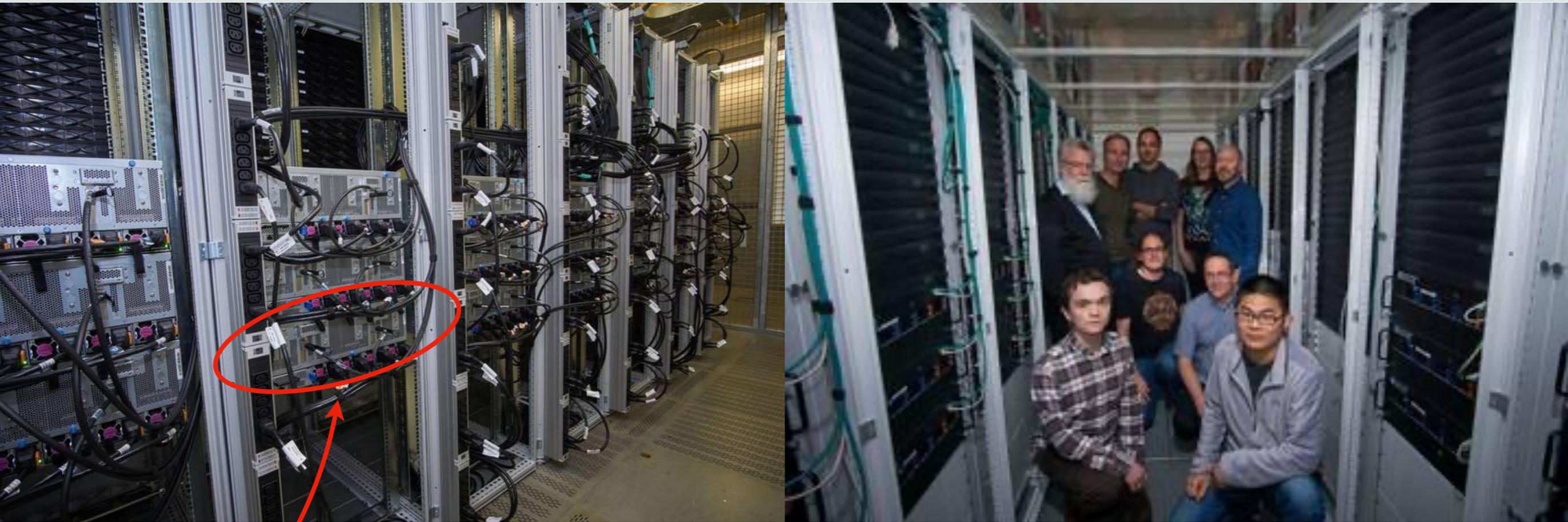
Zufällig



Nahe optimal



Der Bielefelder Supercomputer – Ein Cluster



14x19" Racks

- **28 "Knoten"**

- Jeweils 2 CPU's (Intel)
- Jeweils 8 GPU's (Nvidia)
- 384 GB RAM



- **Performance**

- CPU's: total 56 - 560 cores - 19 Flops
- GPU's (single) - 1146880 cores - 3.5 PFlops
- GPU's (double) - 573440 cores - 1.75 PFlops

- **Dateisystem**

- Paralleles Dateisystem (BeeGFS verteilt auf 4 Server)
- 4 PB Plattenspeicher
- 384 GB RAM

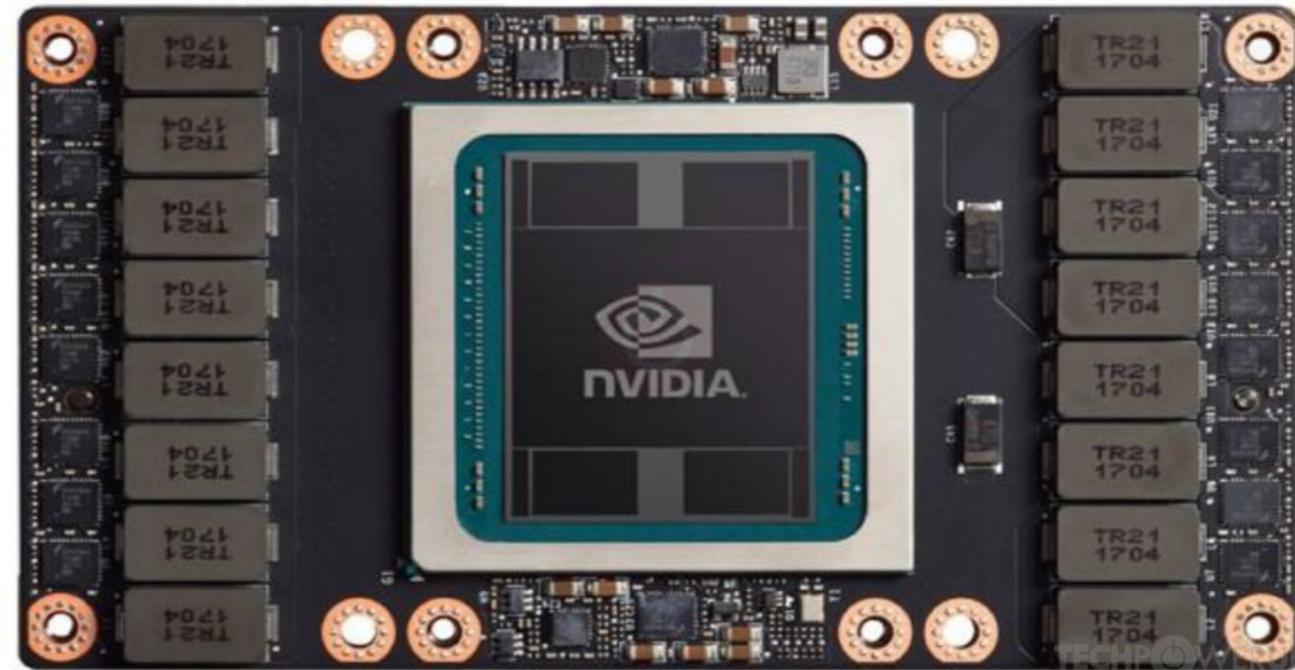
- **Netzwerk**

- High Speed Infiniband EDR
- Modular Gibabit Network

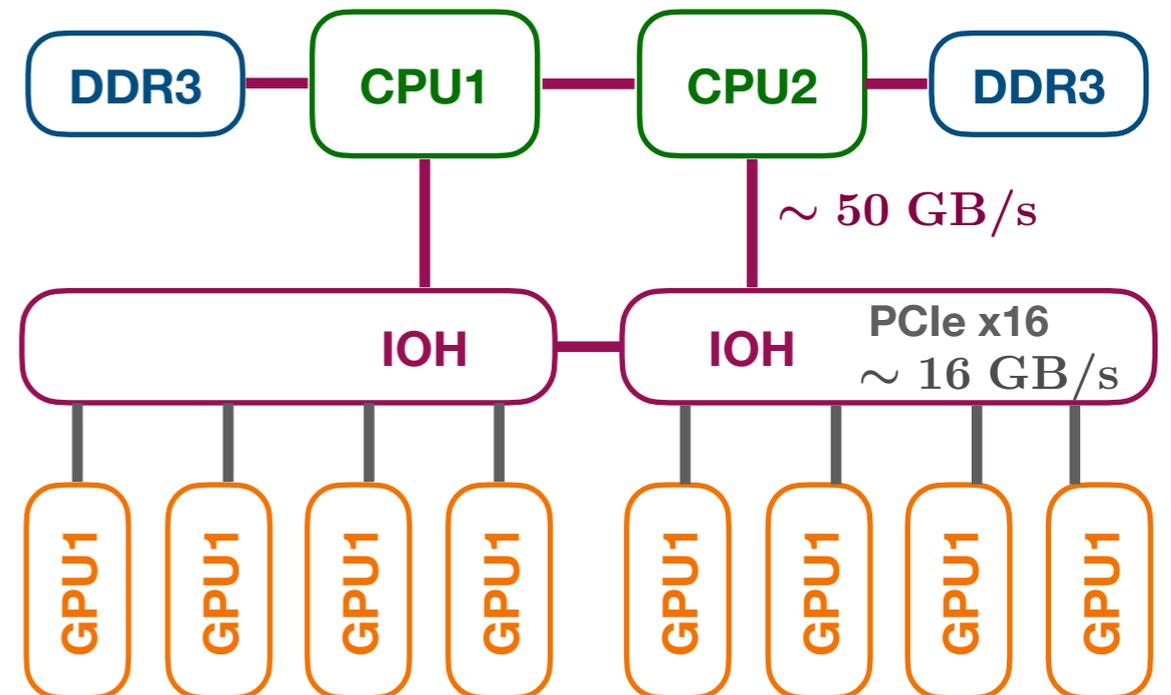
Der Bielefelder Supercomputer – GPU's



- GPU's sind kleine Parallelrechner
 - Entwicklung getrieben durch den Markt für **Computer-Spiele**
 - Unabhängige Recheneinheiten "**Shader**" berechnen die Pixel einer Szene in Echtzeit
 - In der **Nvidia V100** gibt es 5120 "**Shader**" (Cores)



- Programmierung von GPU's
 - Das Programmieren von parallelen Programmen ist generell schwieriger
 - Zur Optimierung der Programme auf der GPU muss man die Hardware gut kennen
 - Die Anbindung der GPU's über den PCI-Express-Buss stellt meist einen "**Flaschenhals**" für die Performance dar.



Der Bielefelder Supercomputer – Vergleich mit der Top500

- www.top500.org
- **Zweimal im Jahr wird auf der ISC die Top 500 Liste veröffentlicht**
 - **Dazu muss ein Benchmark Programm auf dem System laufen und die Performance in TFlop/s messen**
 - **Deutschlands schnellster Rechner ist Juwels-Booster in Juelich auf Platz 8**
 - **Der Bielefelder Rechner wäre ungefähr auf Platz 200 - 230**



HOME LISTS ▾ STATISTICS ▾ RESOURCES ▾ ABOUT ▾ MEDIA KIT

Home » Lists » Top500 » November 2021 » List

TOP500 LIST - NOVEMBER 2021

R_{max} and R_{peak} values are in TFlops. For more details about other fields, check the TOP500 description.

R_{peak} values are calculated using the advertised clock rate of the CPU. For the efficiency of the systems you should take into account the Turbo CPU clock rate where it applies.

← 1-100 **101-200** 201-300 301-400 401-500 →

Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	Supercomputer Fugaku - Supercomputer Fugaku, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D, Fujitsu RIKEN Center for Computational Science Japan	7,630,848	442,010.0	537,212.0	29,899
2	Summit - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.07GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	2,414,592	148,600.0	200,794.9	10,096

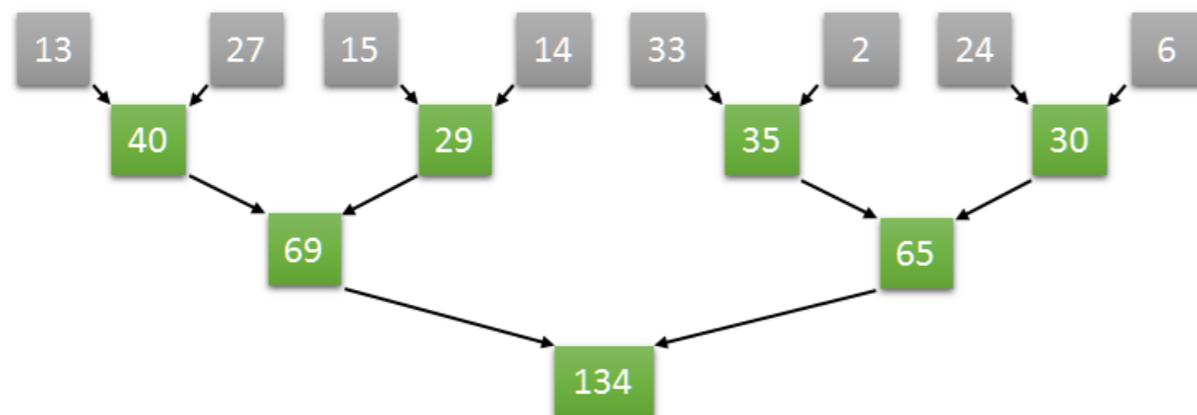
Monte Carlo in parallel

- Monte Carlo Rechnungen kann man oft parallelisieren

- **Beispiel 1 - Flächenberechnung**

- Es können beliebig viele Punkte gleichzeitig gezogen werden, alle Rechnungen sind unabhängig voneinander
- Das Summieren (Zählen) am Ende ist ein Problem auf Parallelrechnern (reduction) die Performance steigert sich nur logarithmisch

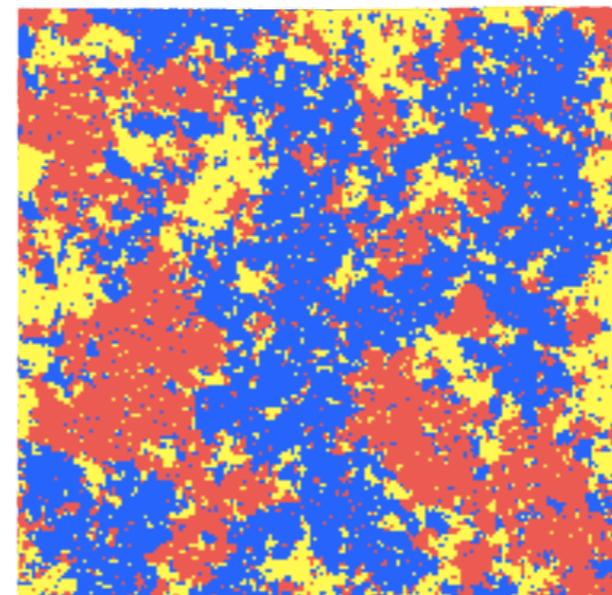
Beispiel einer parallelen Reduction



- **Beispiel 2 - Simulation**

- In Vielen Systemen treten nur nächste-Nachbar Wechselwirkungen auf, dann kann man mehrere Teilchen gleichzeitig 'updaten'.
- Elektro-Magnetische Wechselwirkungen sind langreichweitig, parallelisieren im MonteCarlo ist schwierig.

Beispiel Modell für Magnetismus



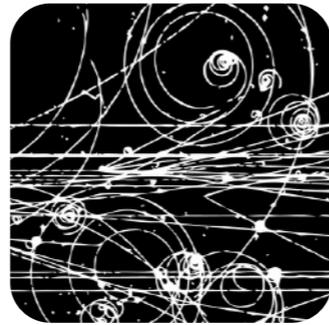
Materie unter Extremen Bedingungen

- Wechselwirkung von Materie und Strahlung: 4 Fundamentale Naturkräfte

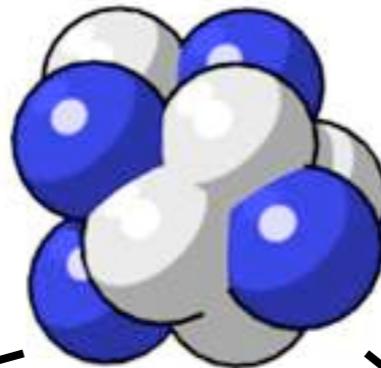
- Elektro-Magnetismus (Photonen)



- schwache Wechselwirkung (W,Z-Bosonen)



- starke Wechselwirkung (Gluonen)



- Gravitation (Gravitonen?)



QCD: Quantenchromodynamik

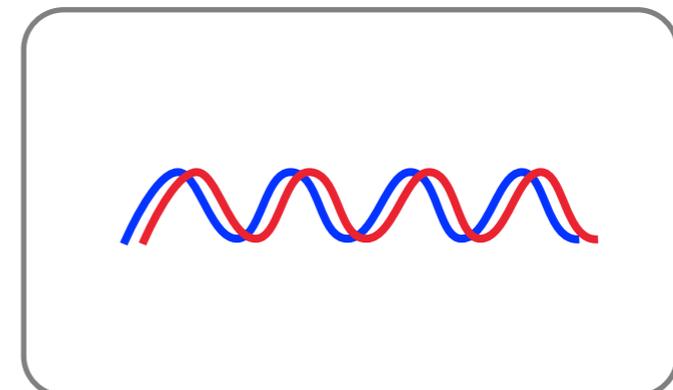
Quarks

	u	d	s	c	b	t
r	●	●	●	●	●	●
g	●	●	●	●	●	●
b	●	●	●	●	●	●

Anti-Quarks

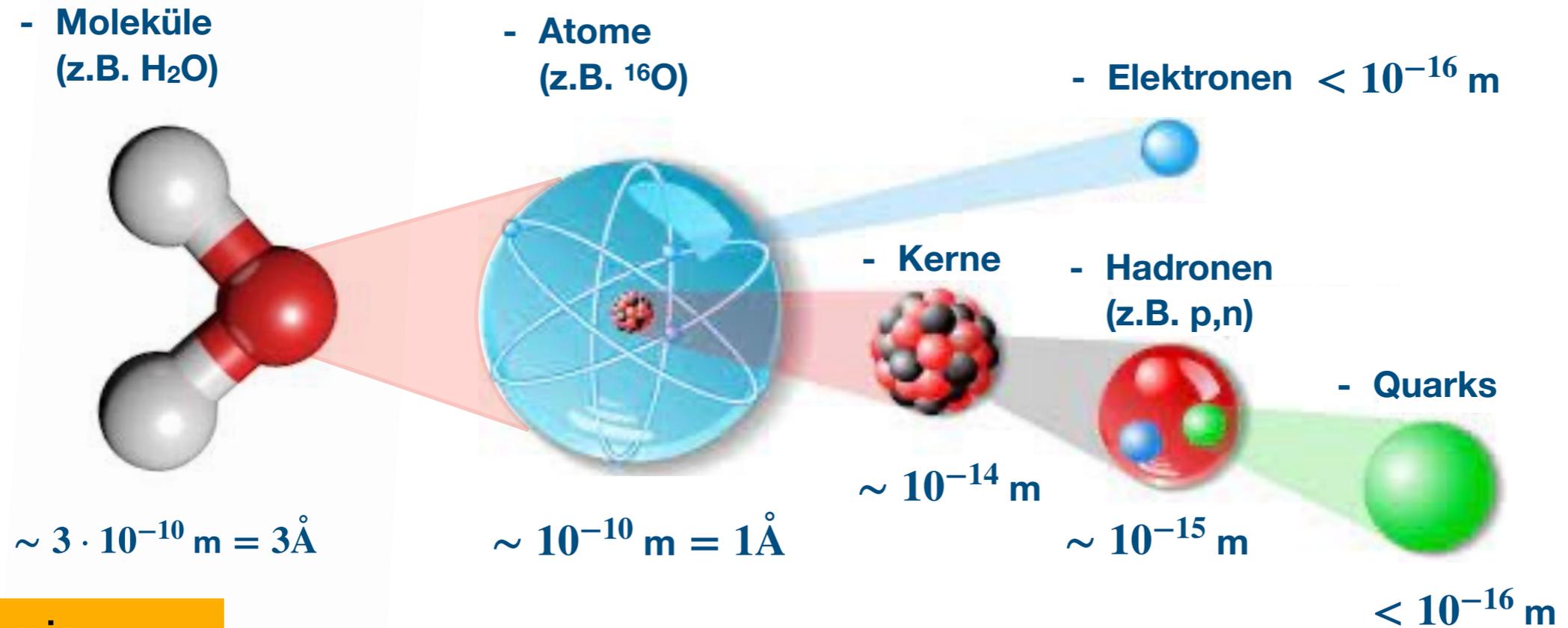
	\bar{u}	\bar{d}	\bar{s}	\bar{c}	\bar{b}	\bar{t}
r	○	○	○	○	○	○
g	○	○	○	○	○	○
b	○	○	○	○	○	○

Gluonen



Materie unter Extremen Bedingungen

• Bausteine der Materie



Chemie

Atom- und Molekülphysik

Kern- und Hadronenphysik

Elementarteilchenphysik

← Dominiert durch Elektro-Magnetismus →

← Dominiert durch starke Wechselwirkung →

Materie unter Extremen Bedingungen - Eigenschaften der QCD

- **Wir beobachten im Alltag keine freien Quarks oder Gluonen**

- Man findet Quarks immer nur in Hadronen
- Die QCD sagt Art und Masse der Hadronen voraus



- Baryonen bestehen aus 3 Quarks (unterschiedlicher Farbe)

- Der Flavor-Inhalt bestimmt alle weiteren Eigenschaften

- **Beispiele:**
 $p, n, \Delta, \Sigma, \Xi, \Omega, \dots$



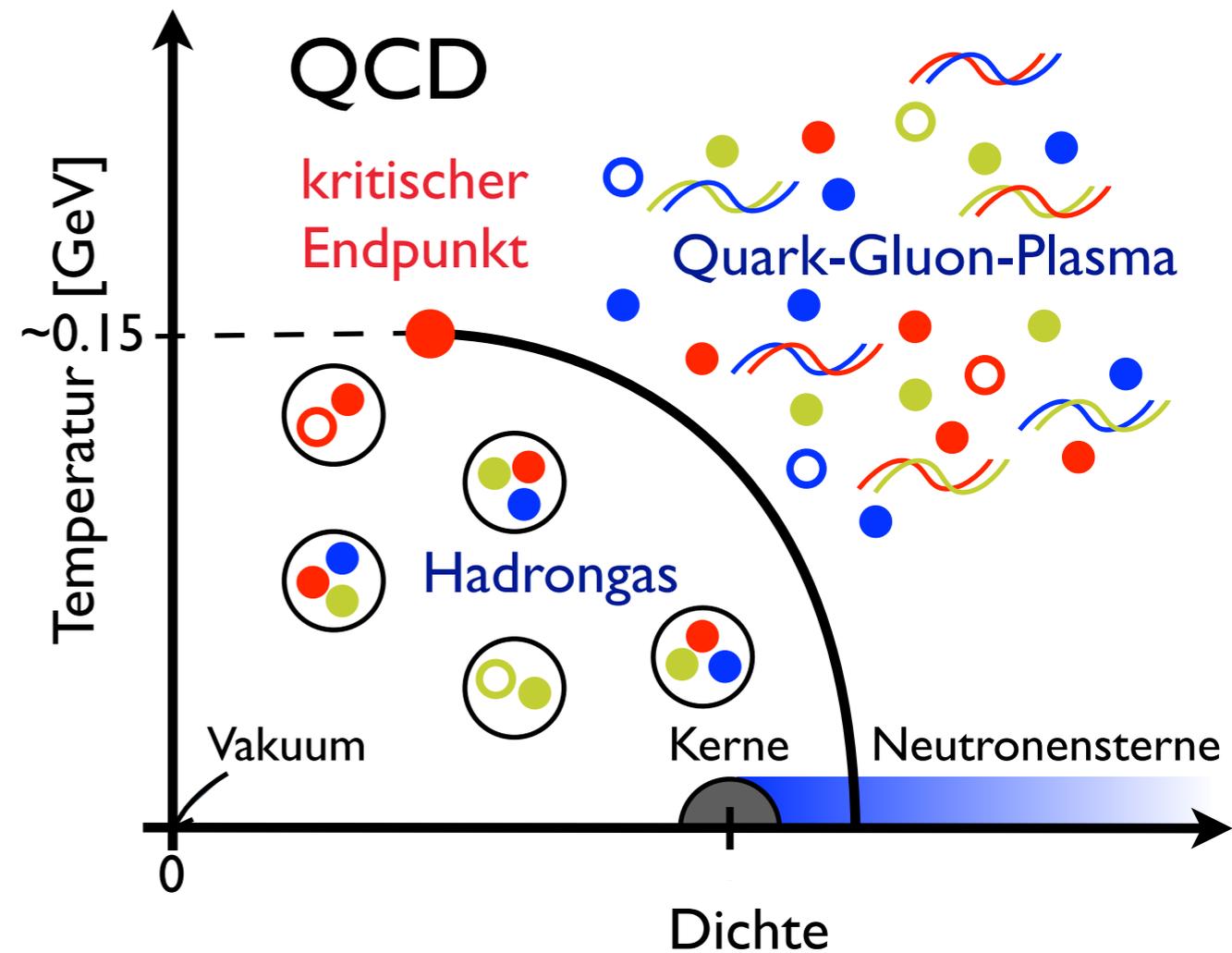
- Mesonen bestehen aus Quark und Anti-Quark

- **Beispiele:**
 $\pi, \eta, \rho, \omega, \dots$

Teilchen-Zoo

- **Schmelzende Hadronen**

- Bei hohen Temperaturen oder Dichten sollten Quark als frei Teilchen zu beobachten sein
- Man vermutet das folgende Phasendiagramm



Materie unter Extremen Bedingungen - Phasenübergänge

- **Phasenübergänge sind sehr interessant**

- Sie sind nur in makroskopischen System mit sehr vielen Teilchen/Hadronen/Atomen/Molekülen zu beobachten
- Man unterscheidet zwischen verschiedenen "Ordnungen" von Phasenübergängen

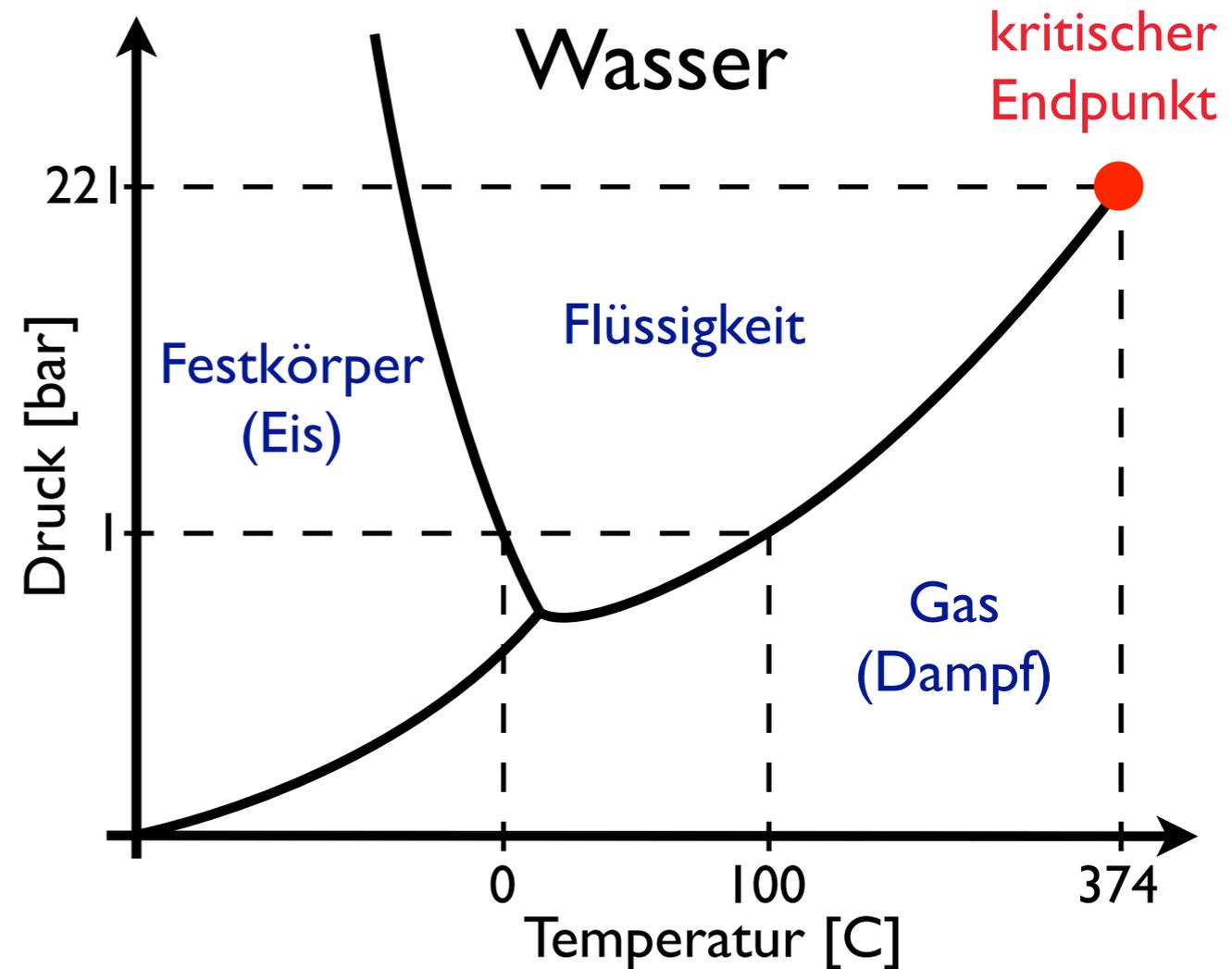
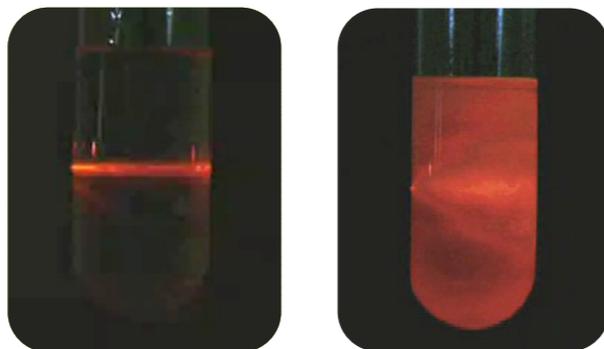
- **Phasenübergang 1. Ordnung**

- z.B. das Schmelzen von Wasser
- Der Übergang ist abrupt
- Am Übergang entsteht eine gemischte Phase



- **Phasenübergang 2. Ordnung**

- Kritische Phänomene, wie z.B. kritische Opaleszenz

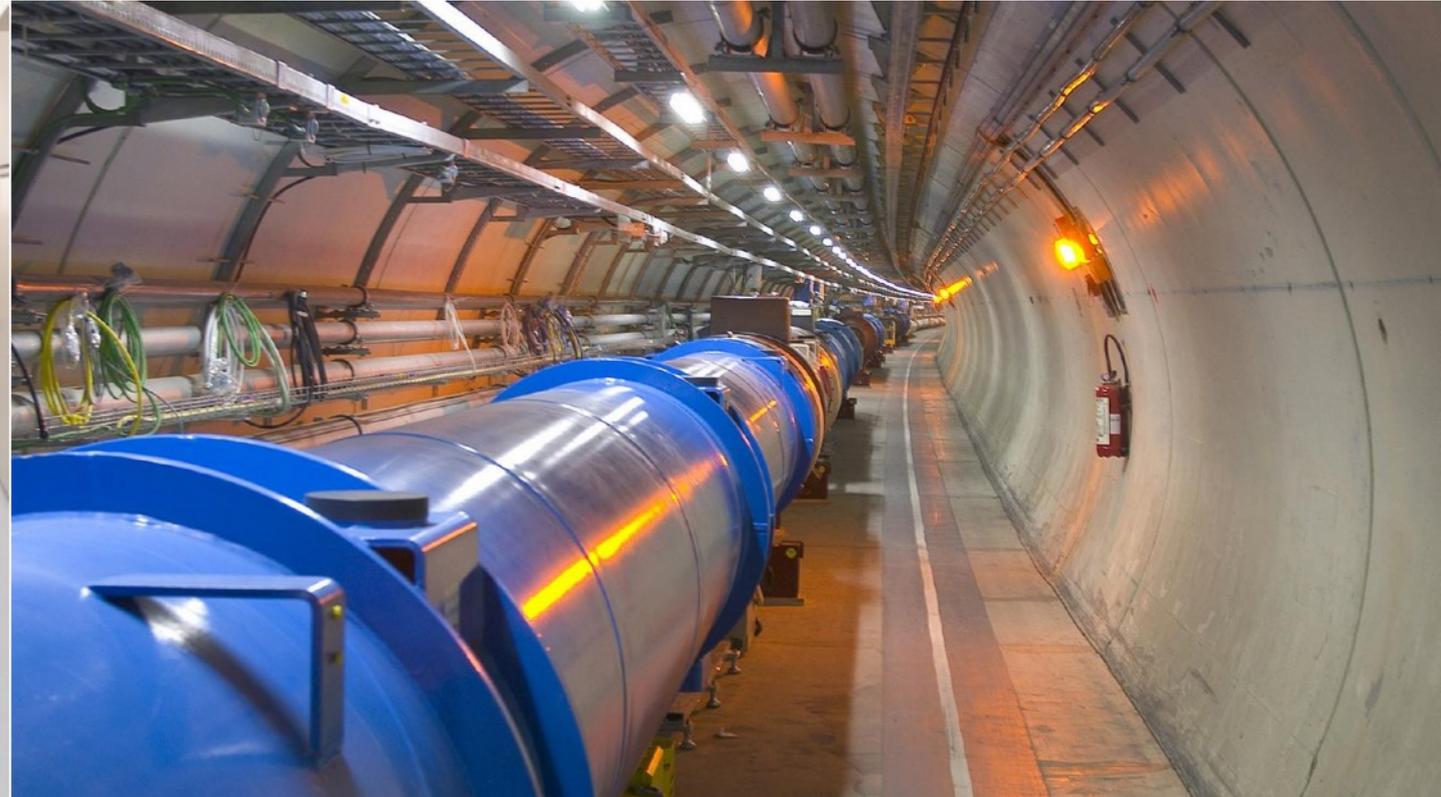


- **Kein echter Phasenübergang: "Crossover"**

- z. B. das Schmelzen von Butter



Materie unter Extremen Bedingungen - Experimente



- **“Experimente” am Computer**

- Simulation der zeitlichen Entwicklung (Ausdehnung und Abkühlung) eines Tropfens Plasmas, z.B. mittels **Hydrodynamik**
- Berechnung thermodynamischer Erwartungswerte mit Hilfe von **Monte Carlo Rechnungen**

- **Experimente am Teilchenbeschleuniger**

- Der **ALICE** - Detektor am Large Hadron Collider (LHC) in Genf ist für Messungen von Kern-Kern Stößen konzipiert.
- Durch Kern-Kern Stöße mit sehr hohen Energien werden kleinen Tröpfchen von Quark-Gluon-Plasma erzeugt
- Man beobachtet was aus dem Tropfen entsteht, wenn er abkühlt in in Hadronen zerfällt.
- Auch am Relativistic Heavy Ion Collider (RHIC) erforscht man das QGP

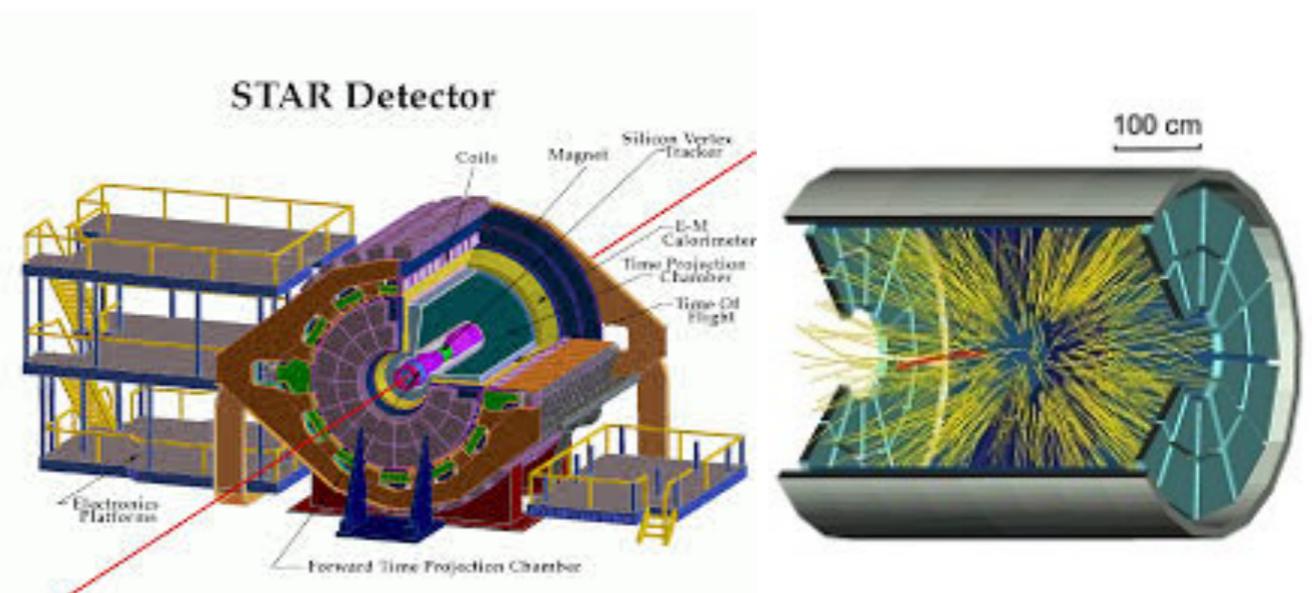
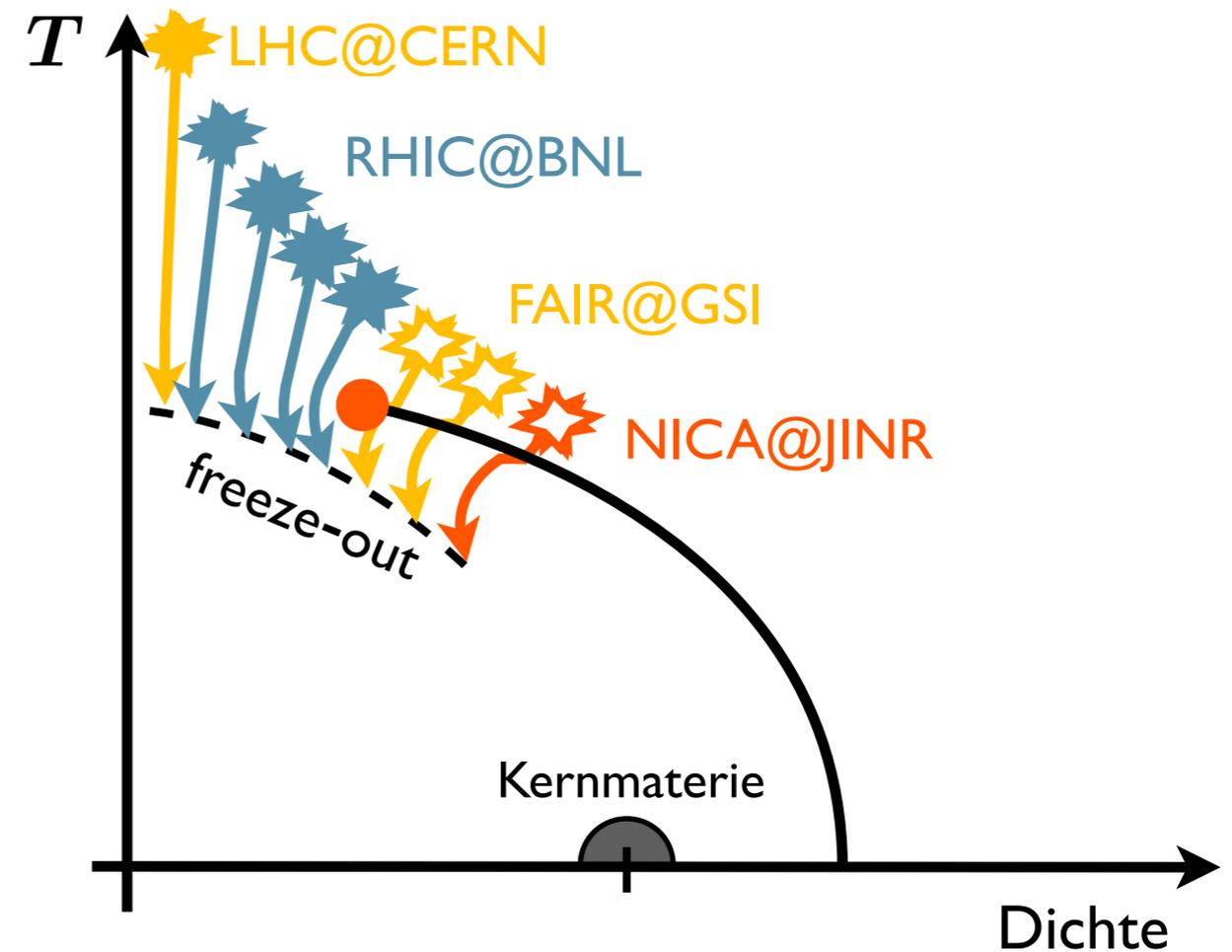
Materie unter Extremen Bedingungen - Experimente

- **Das frühe Universum**

- Der QCD Übergang wird nur ein paar micro Sekunden nach dem Urknall passiert
- Wahrscheinlich bei sehr kleiner Baryondichte

- **Scan des Phasendiagramms**

- Durch Variation der Kollisionsenergie kann man Temperatur und dichte des Plasmas verändern



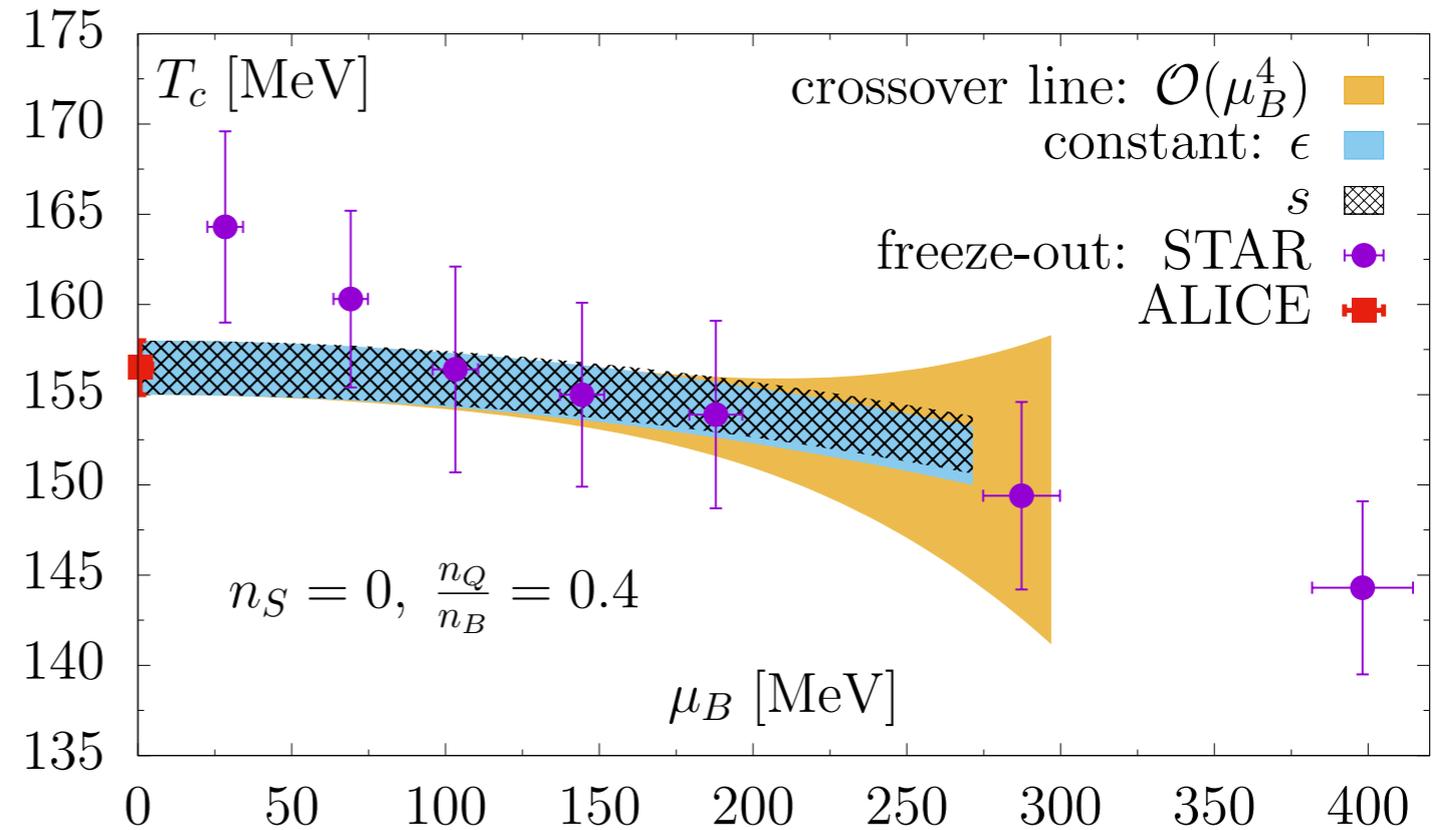
Materie unter Extremen Bedingungen - Resultate

- **Übergangstemperatur**

- $T_c \approx 156 \text{ MeV} \approx 1,8 \cdot 10^{12} \text{ K}$
 $= 1.800.000.000.000 \text{ K}$
- Zum Vergleich der Kern der Sonne hat eine Temperatur von $T_\odot = 15 \cdot 10^6 \text{ K}$

- **Kritischer Punkt**

- Leider noch nicht gefunden



Vielen Dank für Eure Aufmerksamkeit!

Fragen?