

Vetorização de Programas de Simulação
de Teorias de Campos na Rede

Marcia G. do Amaral e Ronald Cintra Shellard

Sumário: Vetorização de programa de simulação numérica pelo método de Monte Carlo, da teoria $\lambda\phi^4$, para ser implantado no Cray X-MP.

Os métodos analíticos usuais da Física, quando aplicados a teorias de campos quânticas não lineares, são inadequados para o estudo de fenômenos não perturbativos. Uma maneira usual de abordar-se esta classe de problemas consiste em definir a teoria numa rede do espaço tempo discretizado e simular numericamente o comportamento do sistema. As quantidades mensuráveis do sistema são computadas através de médias sobre configurações, aonde a medida da integração envolve um fator de Boltzman, ou seja, o inverso da exponencial da ação do sistema. As integrais funcionais sobre as configurações do sistema são extremamente complexas, mesmo no sistema discretizado. O método de simulação numérica mais comumente aplicado, o método de Monte Carlo, consiste em substituir a integração funcional por uma soma sobre uma amostragem de configurações que obedecem à distribuição da medida da integração.

Recentemente, iniciamos o estudo da teoria de campo quântica $\lambda\phi^4$ (1,2), e em particular examinamos as propriedades da teoria no limite do contínuo. Há uma conjectura de que a versão quantizada desta teoria seja

trivial, isto é, seja uma teoria de campos massivos livres(2). Na investigação desta conjectura é necessário examinar o comportamento da teoria com a variação do tamanho da rede, procurando-se redes cada vez maiores. a limitação no tamanho das redes neste problema é estabelecida pelo computador e pelo tempo de CPU disponível para o projeto.

Um cálculo típico de Monte Carlo para a teoria $\lambda\phi^4$ necessita de 10.000 a 20.000 passos de Monte Carlo (um passo de Monte Carlo é um varrida por todos os sítios da rede), para que se obtenham resultados confiáveis. Uma rede ideal para este tipo de cálculo contém de 20^4 sítios a 30^4 sítios. O programa de Monte Carlo desenvolvido por nós no CYBER 170/185 da PUC/RJ gastava aproximadamente $5.1 \cdot 10^{-5}$ seg. de CPU por sítio da rede. Um programa que utilizasse 30^4 sítios e 10.000 passos de Monte Carlo usaria 115 horas de CPU. O mesmo programa, quando submetido ao CRAY XMP 22 do NMFEEC (National Magnetic Fusion Energy Computing Center) no Lawrence Livermore Laboratory rodava em 6 horas de CPU, gastando, aproximadamente, $3.0 \cdot 10^{-6}$ seg. de CPU por sítio. Durante esta parte do trabalho deixou-se que o compilador CFT do CRAY tentasse vetorizar ou paralelizar automaticamente o programa o máximo possível, sem que houvesse qualquer tentativa de vetorização de nossa parte. Com isso, tínhamos somente três loops de do vetorizados.

O Departamento de Energia dos EUA (DOE) concedeu ao nosso projeto 250 horas CRAY de CPU nos CRAY XMP-22 e CRAY 2. Deste tempo total dispomos ainda de 230 horas. O tempo de CPU restante será utilizado na complementação do estudo da teoria e no estudo de teorias mais complexas, como por exemplo, o modelo de SU(2) Higgs.

O programa da teoria $\lambda\phi^4$ teve sua estrutura alterada a fim de que fosse passível de vetorização e, conseqüentemente, se tornasse mais eficiente, já que os CRAY XMP e o CRAY 2 são processadores vetoriais. A subrotina de Monte Carlo, na qual o programa gasta mais tempo de CPU, é a que sofreu modificações mais drásticas. A vetorização desta parte do programa foi inibida anteriormente já que o cálculo do campo no sítio i , $\phi(i)$, dependia dos valores dos campos nos sítios vizinhos, $\phi(i-1)$ e $\phi(i+1)$. Se o cálculo de um dado sítio depende do resultado de um sítio anterior, então estes dois sítios não podem ser computados em paralelo e o processo é sequencial. No entanto, existem maneiras de se ordenar os sítios que produzam vários grupos de sítios nos quais os sítios pertencentes a cada grupo sejam independentes uns dos outros para uma dada iteração. Com isto, os valores das quantidades associadas aos sítios de um dado grupo constituem um vetor, isto é, podem ser processadas em paralelo. Uma destas maneiras é descrita no algoritmo Preto-Vermelho e a outra pelo Algoritmo dos quadrados mágicos³, que é mais geral. Com a utilização de um destes algoritmos consegue-se vetorizar 80% da subrotina Monte Carlo. A vetorização do resto do programa é mais simples e se espera que com estas alterações o programa se torne mais eficiente.

Referencias:

- 1) Teoria $\lambda\phi^4$ na Rede . Tese de doutoramento - Marcia G. do Amaral . Novembro de 1985

Numerical simulation of $\lambda\phi_4^4$. Marcia Gonçalves do Amaral, e Ronald C. Shellard - Rev. Bras. de Fis. Vol 14 (1984)
The Continuum Limit of $\lambda\phi_4^4$ in the broken Phase. Marcia G. do Amaral e R. C. Shellard Phys. Lett. b 171 (1986),285
 $\lambda\phi_2^4$ at Finite temperature. Marcia G. do Amaral, C.A. Aragao de Carvalho, M.E. Pol, e R.C. Shellard. Phys. Lett. B 165 (1985),117.
A Monte Carlo Study of Finite Temperature $\lambda\phi_{2,3}^4$. Marcia G. do Amaral, C. A. Aragaõ de Carvalho, M. E. Pol e R.C. Shellard, Z.Phys. C32 (1986),609.
- 2) The triviality of $\lambda\phi_4^4$ using a CRAY XMP-22 . Marcia G. do Amaral e R.C.Shellard- em fase de redaçãõ.
- 3) D. Barkai e K.J. M. Moriarty, Comp. Phys. Comm. 27 (1982) 105