基于蒙特卡洛法算圆的面积

诸晓婉(922110800509)　　张雨馨(923104780210)　　拓欣(922114740127)

2024 年 12 月

1　介绍

1.1　小组分工

诸晓婉 - PPT

张雨馨 - 报告

拓欣 - 代码

1.2　项目介绍

蒙特卡罗方法, 也称统计模拟方法, 是 1940 年代中期由于科学技术的发展和电子计算机的发明, 而提出的一种以概率统计理论为指导的数值计算方法. 使用随机数来解决很多计算问题的方法

2　代码实现

2.1　串行

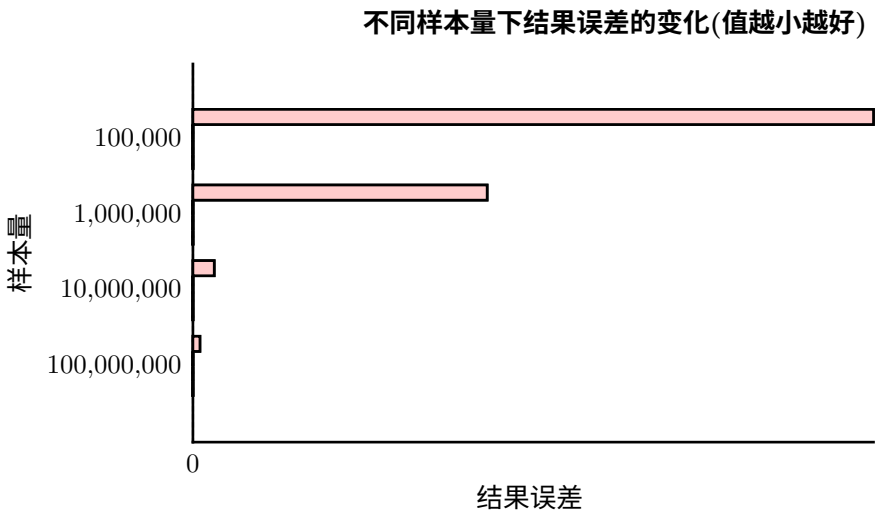
Fortran

```
program normal
    use, intrinsic :: iso_fortran_env, only: dp => real64
    implicit none

    real(dp) :: x, y, area, true_area, dis
    real(dp) :: r
    real(dp) :: start_cpu, end_cpu
    integer :: start_time, end_time
    integer :: i, inside_points, samples

    ! 参数
    r = 1.0_dp
    samples = 1000000
    inside_points = 0
    true_area = r*r*3.141592653589793_dp

    ! 开始时间
    call cpu_time(start_cpu)
    call system_clock(count=start_time)

    ! 蒙特卡洛
    do i = 1, samples
       call random_number(x)
```

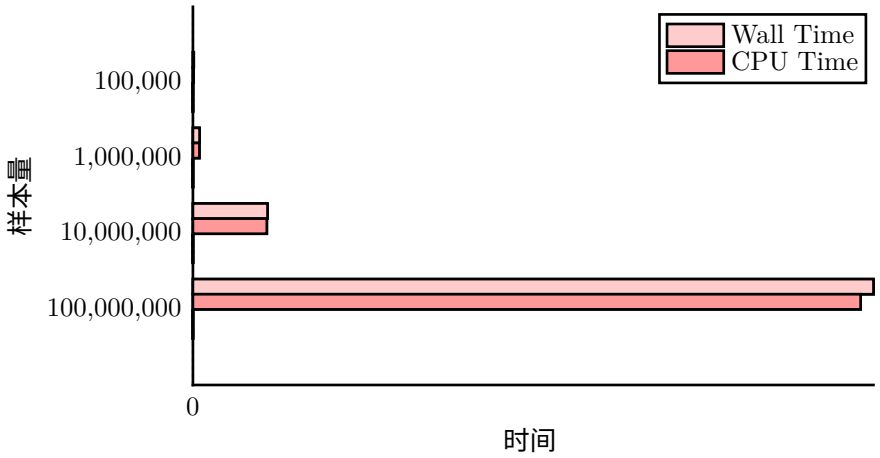
```
24        call random_number(y)
25        x = x*r*2.0_dp - r
26        y = y*r*2.0_dp - r
27
28        if (x*x + y*y <= r*r) then
29           inside_points = inside_points + 1
30        end if
31     end do
32
33     ! 圆面积
34     area = (real(inside_points, dp)/real(samples, dp))*(4.0_dp*r*r)
35     dis = abs(area - true_area)
36
37     ! 结束时间
38     call cpu_time(end_cpu)
39     call system_clock(count=end_time)
40
41     ! 结果
42     print '(A,F15.8)', '计算结果(面积): ', area
43     print '(A,F15.8)', '半径: ', r
44     print '(A,I10)', '样本量: ', samples
45     print '(A,F15.8)', '结果精度(误差): ', dis
46     print '(A,F15.8,A)', 'Wall Time: ', (end_time - start_time)/1000.0_dp, '秒'
47     print '(A,F15.8,A)', 'CPU Time: ', (end_cpu - start_cpu), '秒'
48  end program normal
```

编译指令

```
1  gfortran -O3 -march=native src/normal.f90 -o dist/normal
```
Shell



不同样本量下 Wall Time/CPU Time 的变化



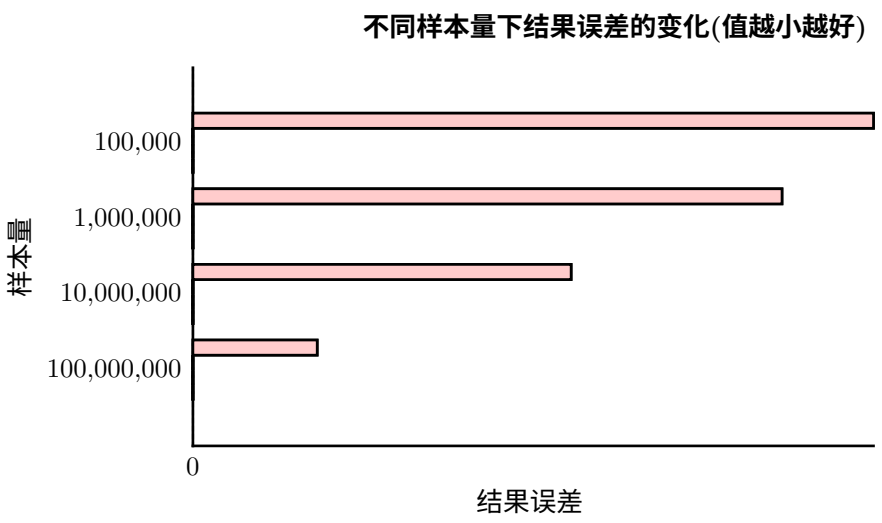
2.2 OpenMP

```fortran
program omp
   use, intrinsic :: iso_fortran_env, only: dp => real64
   implicit none

   real(dp) :: x, y, area, true_area, dis
   real(dp) :: r
   real(dp) :: start_cpu, end_cpu
   integer :: start_time, end_time
   integer :: i, inside_points, samples
   integer :: tid

   ! 参数
   r = 1.0_dp
   samples = 1000000
   inside_points = 0
   true_area = r*r*3.141592653589793_dp

   ! 开始时间
   call cpu_time(start_cpu)
   call system_clock(count=start_time)

   !$omp parallel private(x, y, tid) reduction(+:inside_points)
   !$omp do
   do i = 1, samples
      call random_number(x)
      call random_number(y)
      x = x*r*2.0_dp - r
      y = y*r*2.0_dp - r

      if (x*x + y*y <= r*r) then
         inside_points = inside_points + 1
      end if
   end do
   !$omp end do
```

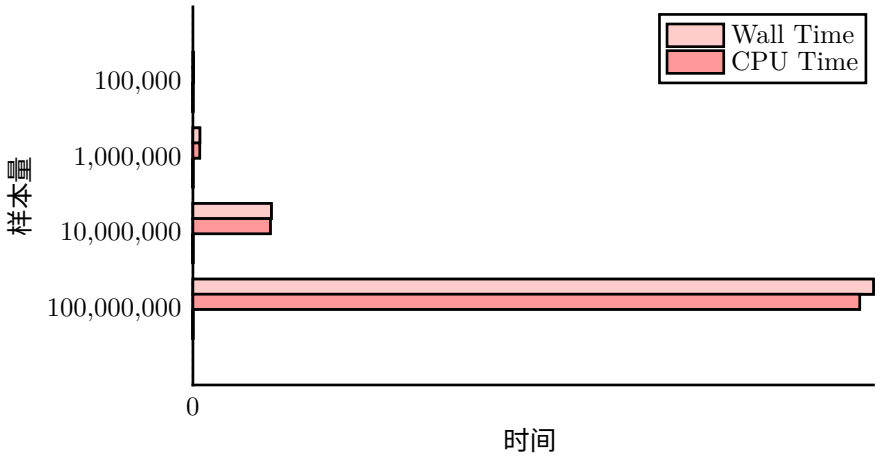
```
    !$omp end parallel

    ! 圆面积
    area = (real(inside_points, dp)/real(samples, dp))*(4.0_dp*r*r)
    dis = abs(area - true_area)

    ! 结束时间
    call cpu_time(end_cpu)
    call system_clock(count=end_time)

    ! 结果
    print '(A,F15.8)', '计算结果(面积): ', area
    print '(A,F15.8)', '半径: ', r
    print '(A,I10)', '样本量: ', samples
    print '(A,F15.8)', '结果精度(误差): ', dis
    print '(A,F15.8,A)', 'Wall Time: ', (end_time - start_time)/1000.0_dp, '秒'
    print '(A,F15.8,A)', 'CPU Time: ', (end_cpu - start_cpu), '秒'
end program omp
```

编译指令

```shell
gfortran -O3 -march=native -openmp src/omp.f90 -o dist/omp-g
mpiifx -O3 -march=native -qopenmp -qmkl src/omp.f90 -o dist/omp-i
```



不同样本量下 Wall Time/CPU Time 的变化



2.3 OpenMP+MPI

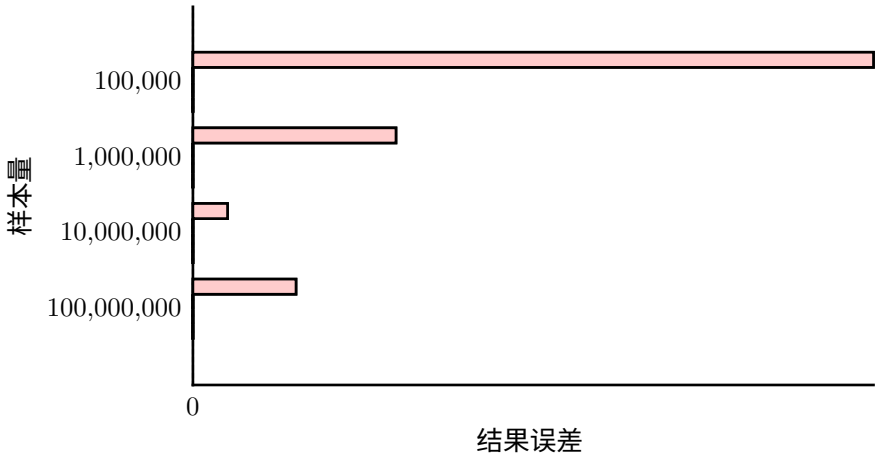
```fortran
program hybrid
   use, intrinsic :: iso_fortran_env, only: dp => real64
   use mpi
   implicit none

   real(dp) :: x, y, pi, area, true_area, dis
   real(dp) :: r
   real(dp) :: start_cpu, end_cpu
   integer :: start_time, end_time
   integer :: i, local_inside, global_inside, samples, local_points
   integer :: ierr, rank, size

   ! MPI
   call MPI_Init(ierr)
   call MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, rank, ierr)
   call MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, size, ierr)

   ! 参数
   r = 1.0_dp
   samples = 1000000
   local_points = samples/size
   local_inside = 0
   true_area = r*r*3.141592653589793_dp

   ! 开始时间
   if (rank == 0) then
      call cpu_time(start_cpu)
      call system_clock(count=start_time)
   end if

   !$omp parallel private(x, y) reduction(+:local_inside)
   !$omp do
   do i = 1, local_points
      call random_number(x)
```

```
35        call random_number(y)
36        x = x*r*2.0_dp - r
37        y = y*r*2.0_dp - r
38
39        if (x*x + y*y <= r*r) then
40           local_inside = local_inside + 1
41        end if
42     end do
43     !$omp end do
44     !$omp end parallel
45
46     ! 汇总所有进程的结果
47     call MPI_Reduce(local_inside, global_inside, 1, MPI_INTEGER, &
48                     MPI_SUM, 0, MPI_COMM_WORLD, ierr)
49
50     if (rank == 0) then
51        ! 圆面积
52        area = (real(global_inside, dp)/real(samples, dp))*(4.0_dp*r*r)
53        dis = abs(area - true_area)
54
55        ! 结束时间
56        call cpu_time(end_cpu)
57        call system_clock(count=end_time)
58
59        ! 结果
60        print '(A,F15.8)', '计算结果(面积): ', area
61        print '(A,F15.8)', '半径: ', r
62        print '(A,I10)', '样本量: ', samples
63        print '(A,F15.8)', '结果精度(误差): ', dis
64        print '(A,F15.8,A)', 'Wall Time: ', (end_time - start_time)/1000.0_dp, '秒'
65        print '(A,F15.8,A)', 'CPU Time: ', (end_cpu - start_cpu), '秒'
66     end if
67
68     call MPI_Finalize(ierr)
69  end program hybrid
```

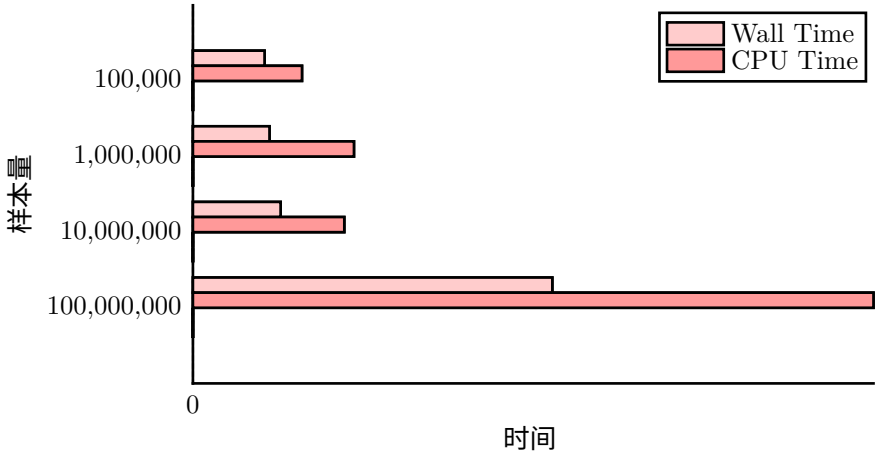
编译指令

```Shell
mpif90 -O3 -fopenmp src/hybrid.f90 -o dist/hybrid-g
mpirun -np 8 ./dist/hybrid-g

mpiifx -O3 -march=native -qopenmp -lmpi -qmkl src/hybrid.f90 -o dist/hybrid-i && \
mpirun -np 8 ./dist/hybrid-i"
```

不同样本量下结果误差的变化(值越小越好)



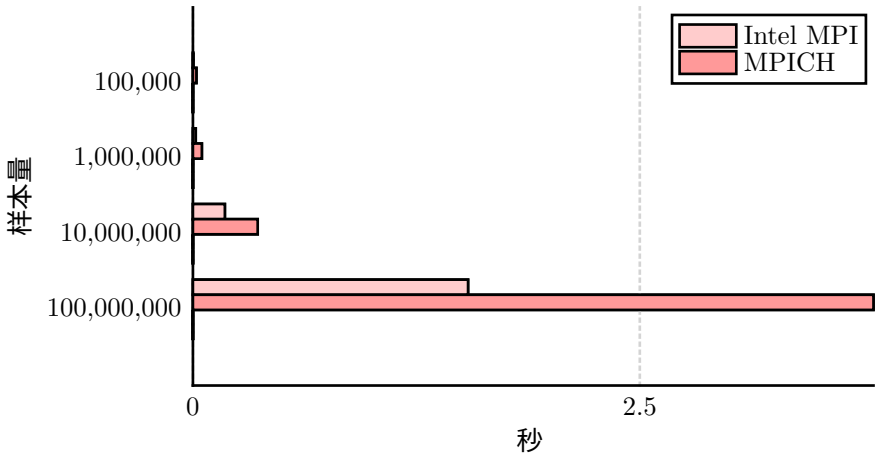
不同样本量下 Wall Time/CPU Time 的变化



2.4 MPICH/BLAS vs Intel MPI/MKL

这里我们分别使用 GFortran 编译器和 Intel Fortran 编译器来对比两者的性能

不同样本量下执行速度(CPU Time)的变化



3 项目展望

因为时间和技术的限制, 我们只实现了串行、OpenMP 和 OpenMP+MPI 三种版本, 但是还有很多其他的优化方法可以尝试

3.1 Coarray

Coarray 是 Fortran 2008 的一个特性, 可以实现分布式内存并行计算, 无需自己编写 OpenMP、MPI 等代码, 但是需要编译器支持

3.2 使用 Julia 等更热门的语言

3.2.1 Julia

Julia 是一个高性能的动态编程语言, 有很多并行计算的库, 可以实现分布式内存并行计算

- Threads.jl
- Distributed.jl

3.2.2 Python

Python 虽然是一个解释型语言, 但是有很多高性能的库, 可以实现并行计算

- Cython
- Ray

3.2.3 Rust

Rust 是一门近年来非常流行的系统编程语言, 有一些高性能的库可以实现并行计算

- Rayon

3.3 使用 GPU 加速

我们的显卡擅长浮点运算, 可以使用 GPU 加速来提高计算速度

而 NVIDIA 公司的 CUDA 是一个非常流行的 GPU 编程框架, 可以使用 CUDA C/C++、CUDA Python、CUDA Fortran 等语言来编写 GPU 程序

- NVIDIA CUDA Fortran

3.4 更高级的算法

- 分层采样 把蒙特卡洛法进一步微分，把一个任务拆分成了数个任务
- 重要性采样 需要一定的概论相关的数学知识
- 自适应采样 通过一定的算法/机器学习的方法来自适应的调整采样的方法
- 拟蒙特卡洛序列
  - Sobol 序列
  - Halton 序列
  - Faure 序列