

# Paralelné výpočtové spracovanie spektroskopických dát

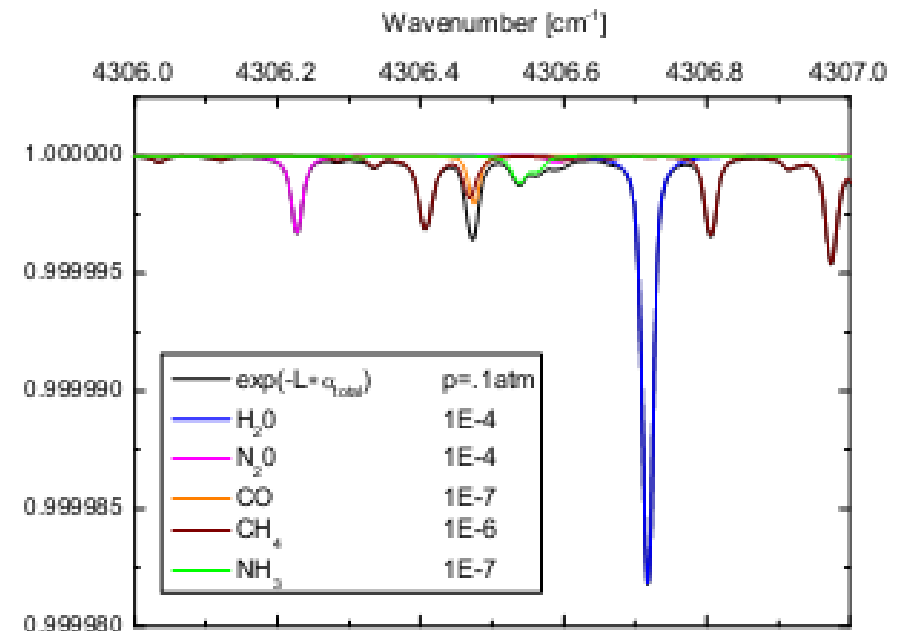
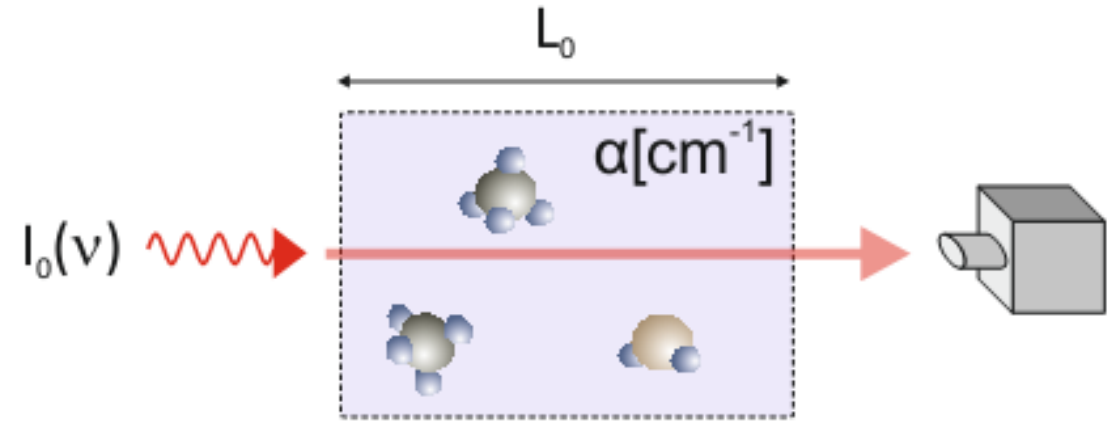
Adrián Kocúrek

Školiteľ: Mgr. Pavel Petrovič, PhD.

Konzultant: Dr. Peter Čermák, PhD.

# Problematika

- Spektrometrický výskum
- Spektrálne čiary



# Problematika

- Spektrum = súčet spektrálnych čiar
- $S(\nu) = \sum_{\nu_{\eta \rightarrow \eta'}} Peak(\nu, \nu_{\eta \rightarrow \eta'})$
- Nezávislé  $\nu$  -> paralelizovateľné

# Problematika

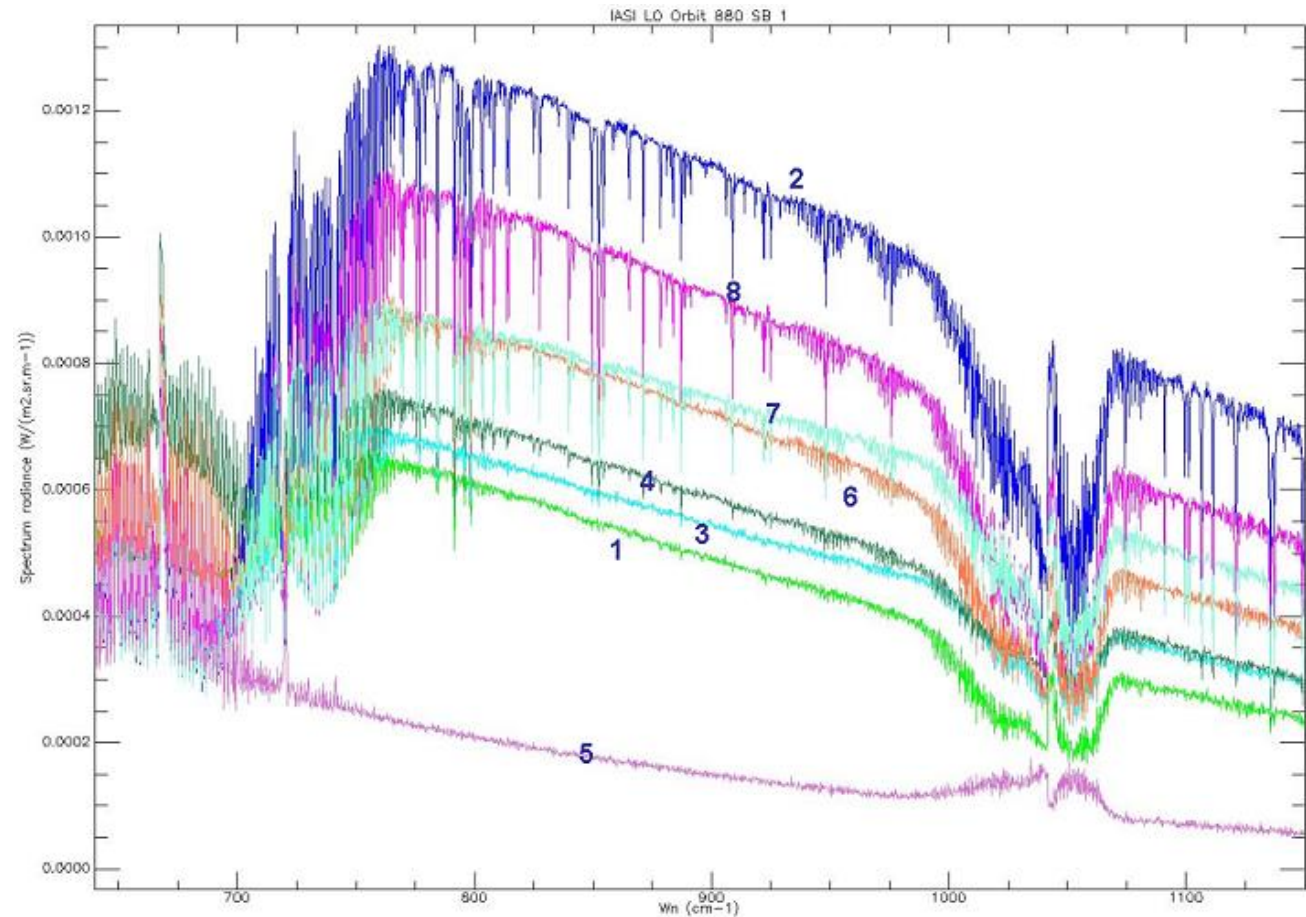
- Spektrálne čiary sú modelované pomocou:
- Aritmetických funkcií – Lorentz, Gauss
- Integrálnych funkcií – Voigt, HTP
- Výpočet integrálnych funkcií využíva aj Faddejevovej funkciu

# Problematika

- Rozlíšenie a počet spektrálnych čiar
- Odlišná forma spectra
- Množstvo nameraných dát

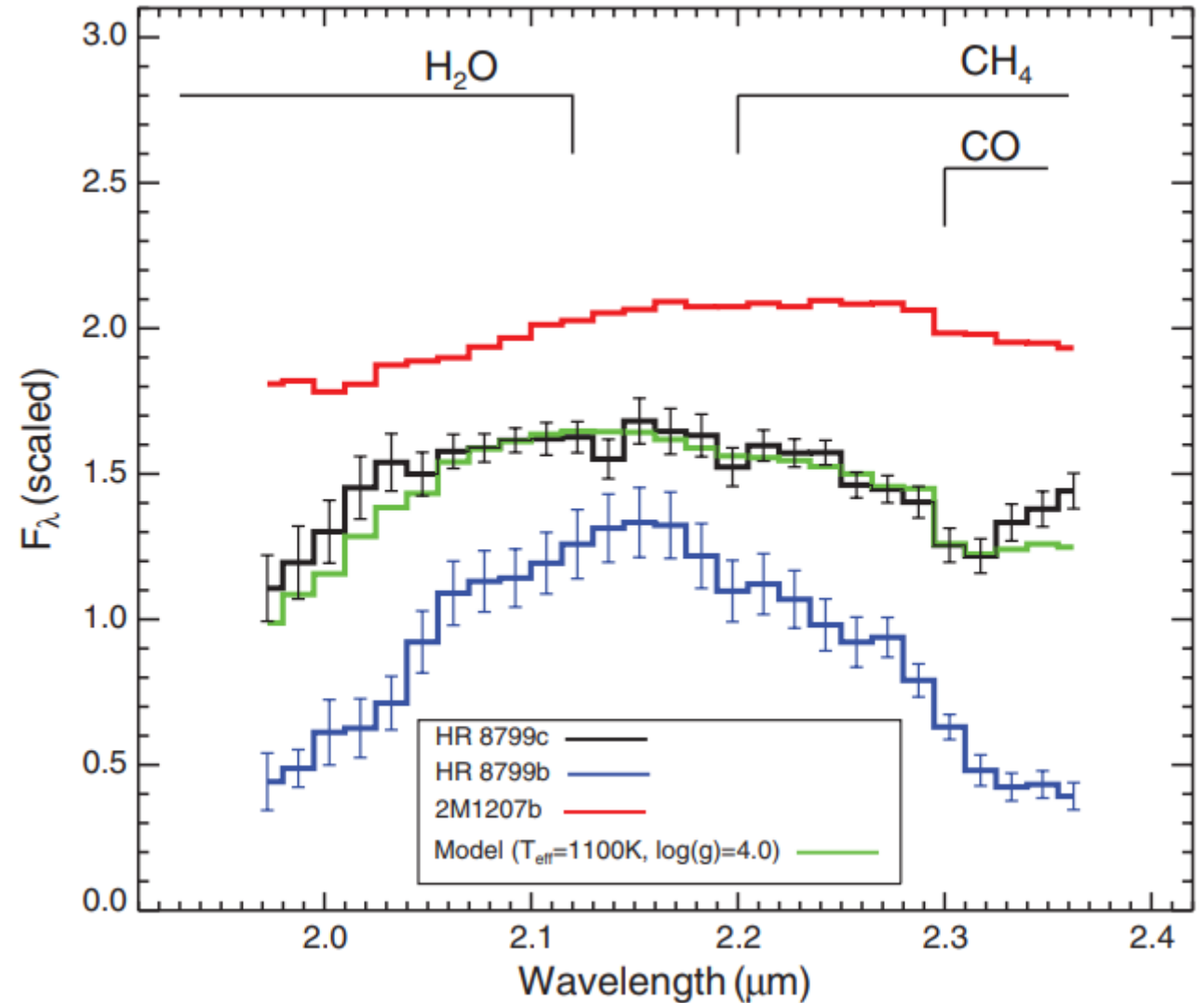
# Extrémy

- Príklad atmosferického spektra
- Misia IASI - zloženie atmosféry
- Tisíce spektier za noc
- Analyzované real-time



# Extrémy

- Príklad exoplanetárneho spektra
- Rozlíšenie 50 hodnôt
- Skúmanie CO a H<sub>2</sub>O



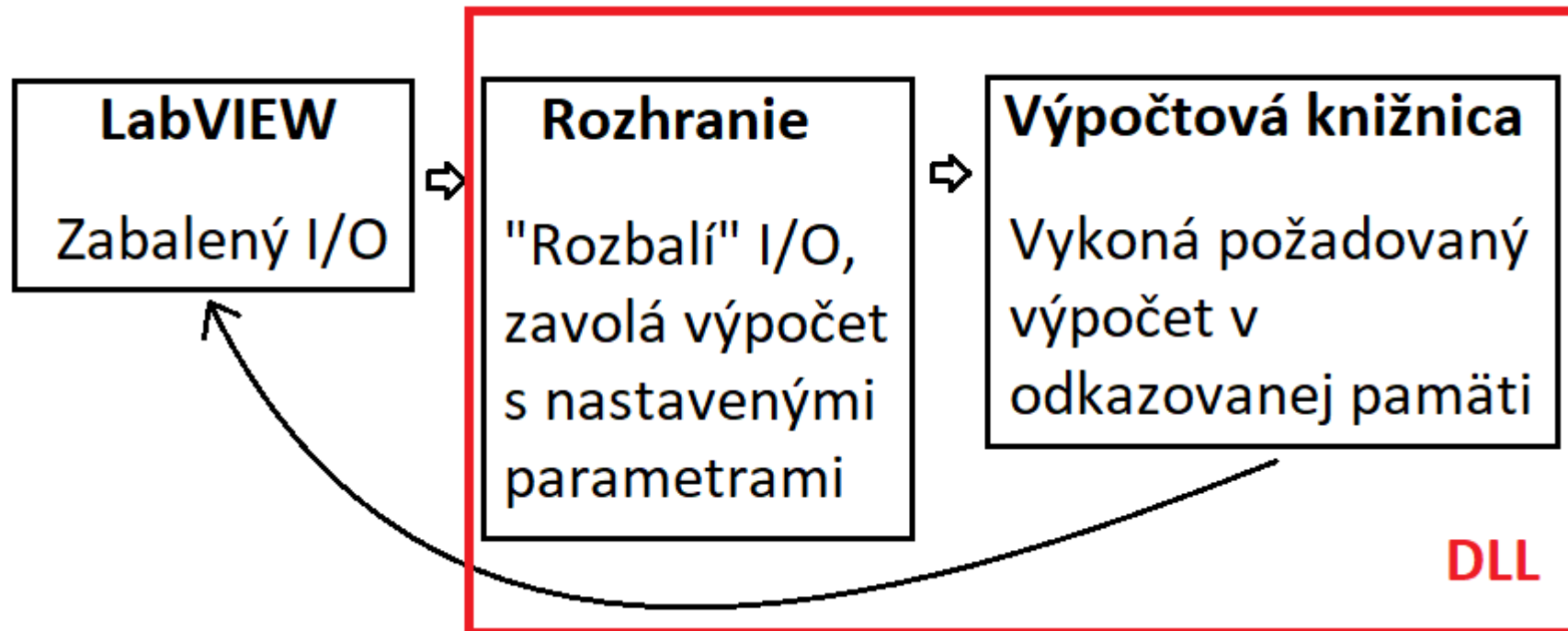
# Problematika

- Fitovanie – poloautomatika
- Časovo náročné určovanie jednotlivých zložiek
- Čas výpočtu spektra, odozva
  
- Každé zrýchlenie sa počíta - GPU



# Štruktúra programu

- Vypočítava grafy, ktoré LabVIEW zobrazí
- Jadro problému



# Štruktúra programu

Peaks Synthesizer 2017.vi

File Edit Operate Tools Window Help

**Peak shapes:**

- 0 Lorentz
- 1 Gauss
- 2 Voigt
- 3 Humlicek
- 4 Rauthian
- 5 RauthianH
- 6 Galatry
- 7 HTP -full
- 8 HTP -Hum

**Peak param:**

- 0 shape
- 1 center
- 2 amp
- 3 surf.
- 4 wD (HWHM)
- 5 w0 (HWHM)
- 6 d0
- 7 w2
- 8 d2
- 9 eta
- 10 nu\_VC
- 11 beta
- 12 vMP
- 13 sample
- 14 center\_in

Input Output-Data Output-Fit

Auto Peak Gen?  OFF/ON

value	count/s	center	amp./surf.	wD	w0	d0	w2	d2	eta	nu_VP
1	6005	1	0.01	0.01	0					
2	1	0.5	0.01	0.01	0.01					

**Peak Parameters**

0.1	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Options samples: 10000

0 = amp 1 = surf

start: 6004

end: 6006

return Ser: 1 return Par: 0

Plot?  OFF/ON

error out:  OFF/ON

status:  code: 6006

source:

Tab Control	Old Time	Ser Time	Par Time	Serge Time	LB time	Old Int	Ser Int	Par Int	Serge Int	2017 Int	LB Int
XY Graph	432	3	7	4	53	0.2129	0.2129	0.2129	0.2129	0.2129	0.9936

CPW not operational!!!!

Ramp Pattern: 0 6004

Sample - last digit = ISO

**Peak shapes:**

- 0 Lorentz
- 1 Gauss
- 2 Voigt
- 3 HTP
- 4 Rauthian
- 5 RauthianH
- 6 Galatry
- 7 HTP -full
- 8 HTP -Hum

profile name	Parameters	Mechanism
	N	SD <sup>a</sup> VC <sup>b</sup> Correlation
Doppler	1 $\Gamma_c$	No No No
Lorentz	2 $\Gamma_c \Delta$	No No No
Voigt	3 $\Gamma_p \Gamma_c \Delta$	No No No
Galatry	4 $\Gamma_p \Gamma_c \Delta, \nu_{VC}$	No Soft No
Rautian	4 $\Gamma_p \Gamma_c \Delta, \nu_{VC}$	No Hard No
Nelkin-Ghatak	4 $\Gamma_p \Gamma_c \Delta, \nu_{VC}$	No Hard No
speed-dependent Voigt	5 $\Gamma_p \Gamma_c \Delta, \Gamma_p \Delta_2$	Yes No No
speed-dependent Galatry	6 $\Gamma_p \Gamma_c \Delta, \Gamma_p \Delta_2, \nu_{VC}$	Yes Soft No
speed-dependent Nelkin-Ghatak	6 $\Gamma_p \Gamma_c \Delta, \Gamma_p \Delta_2, \nu_{VC}$	Yes Hard No
speed-dependent Rautian	6 $\Gamma_p \Gamma_c \Delta, \Gamma_p \Delta_2, \nu_{VC}$	Yes Hard No
Jartmann-Tran	7 $\Gamma_p \Gamma_c \Delta, \Gamma_p \Delta_2, \nu_{VC}, \eta$	Yes Hard Yes
correlated SD asymmetric Rautian-Sobelman	8 $\Gamma_p \Gamma_c \Delta, \Gamma_p \Delta_2, \nu_{VC}, \chi, \eta$	Yes Combination Yes
partially correlated SD Keilson-Storer	8 $\Gamma_p \Gamma_c \Delta, \Gamma_p \Delta_2, \nu_{VC}, \chi, \eta$	Yes Combination Yes

For further details and citations. All profiles except the simple Lorentz profile include the Doppler broadening effect. Independent; VC = velocity changes due to collisions.

For these profiles are all given in the quadratic (q) form of the speed dependence; for hypergeometric models the parameters  $\Gamma_c$  and  $\Gamma_p$  (or  $\Delta_c$  and  $\Delta_p$ ) are replaced by an amplitude factor and a parameter that is either  $\rho$ , the power-giving the dependence of the broadening on the relative speed, or  $q$ , which describes the power-law dependence of the secular potential on the intermolecular distance.

2017

par

ser

Serge

v2011

Plot 5

# CUDA

- Grafické API
- Postavené nad C/C++
- Zamerané na programovanie vláknami
- Jadrá-Kernely

# CUDA

```
void VoigtHS(const int index, const double *xi, double *yi, const double x0, const double d0)
{
    double z_real = M_SqrtLn2 * (xi[index] - (x0 + d0)) / wD;
    double z_img = (w0 / wD) * M_SqrtLn2;
    double vrz, vri;

    wofz(z_real, z_img, &vrz, &vri);
    yi[index] = s * vrz * (1 / wD) * M_SqrtLn2oPi;
}
```

```
global void VoigtHS(const double *xi, double *yi, const double x0, const double d0)
{
    int myIndex = blockIdx.x * blockDim.x + threadIdx.x;

    double z_real = M_SqrtLn2 * (xi[myIndex] - (x0 + d0)) / wD;
    double z_img = (w0 / wD) * M_SqrtLn2;
    double vrz, vri;

    wofz(z_real, z_img, &vrz, &vri);
    yi[myIndex] = s * vrz * (1 / wD) * M_SqrtLn2oPi;
}

//...
VoigtHS<<<groupSize,blockSize>>>(gpu_xs, gpu_ys, shape, s, wD, w0, d0);
```

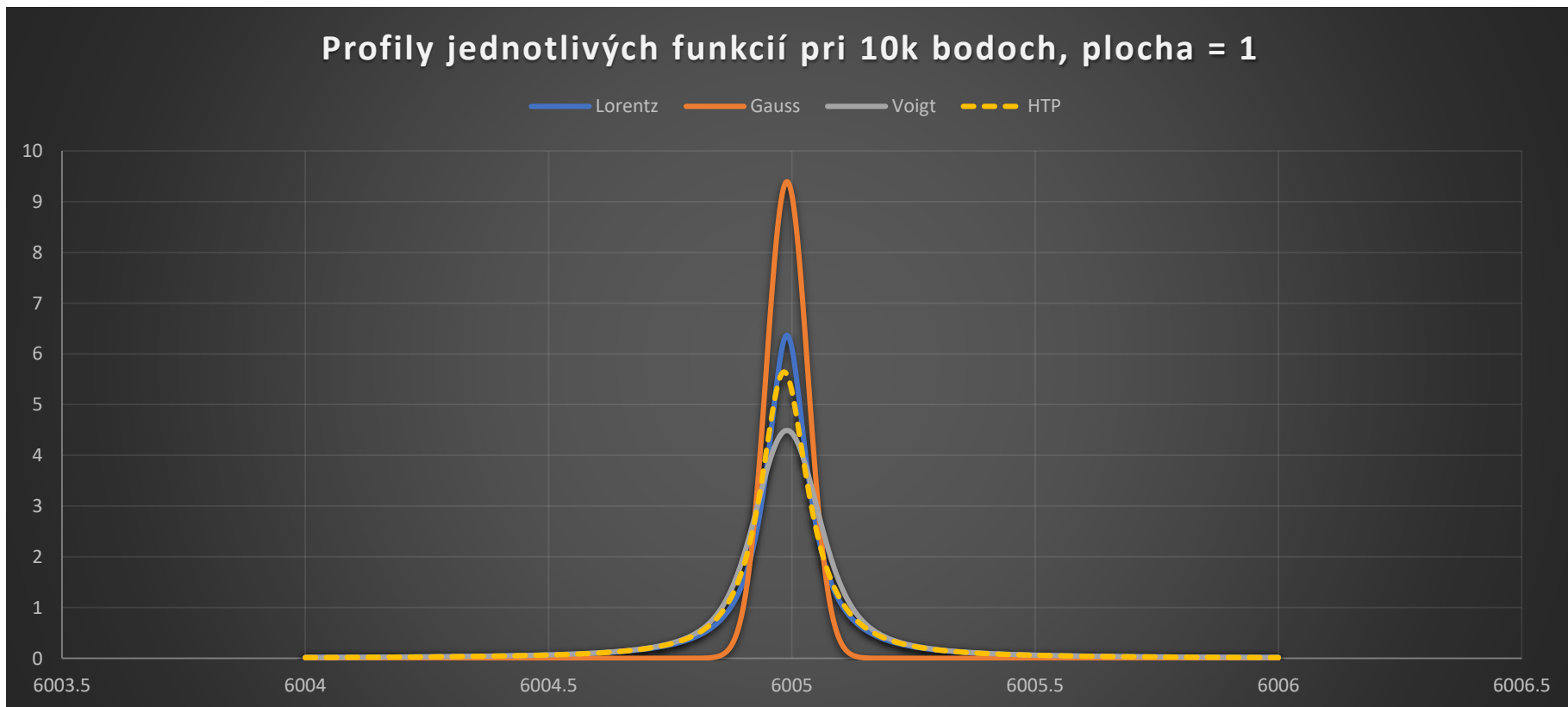
# Implementácia

- Knižničné vyriešenie Faddejevovej funkcie => CERNLib
- Vlastné riešenie Faddejevovej funkcie
- Porovnanie riešení

# Implementácia

- Výpočet funkcií z úvodu

- $V(x; \sigma, \gamma) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x'; \sigma)L(x - x'; \gamma)dx'$



# Implementácia

- Všeobecná schéma výpočtu 2 spôsobmi
- Minimalizácia réžie, opätovných výpočtov
- Rozšírenie knižnice viacerými spôsobmi
- Zachovaná algoritmická zložitosť

# Nasadenie

- Nasadenie prebehlo úspešne bez väčších úprav
- Plná implementácia HTP funkcie



# Nasadenie

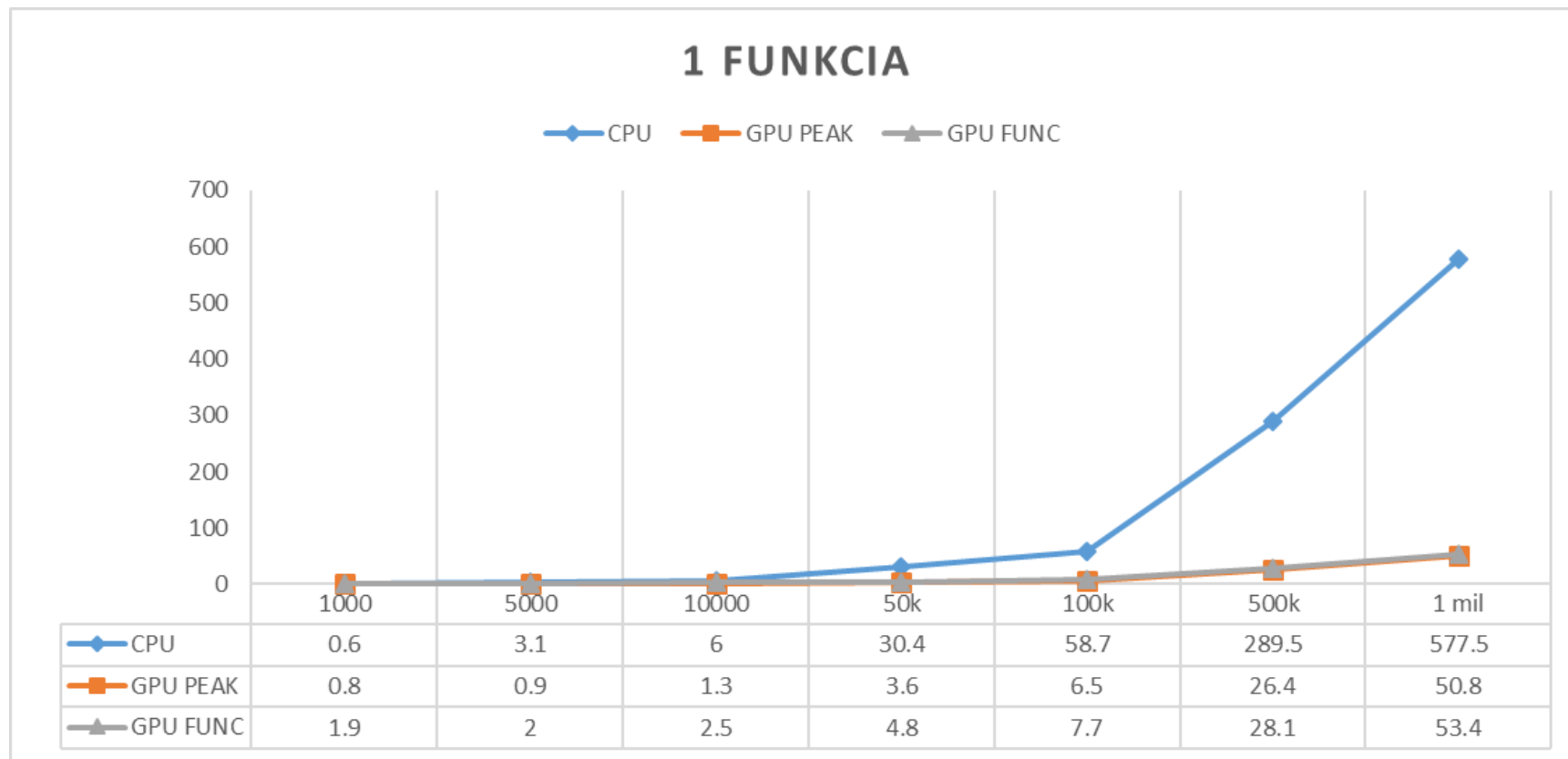
- Zrýchlenie pri všetkých používaných funkciách
- Zložité výpočty zrýchlené ~10-násobne

# Testovanie

Priemerné časy výpočtu func.  
HTP pre  $10^3$  až  $10^6$  bodov.

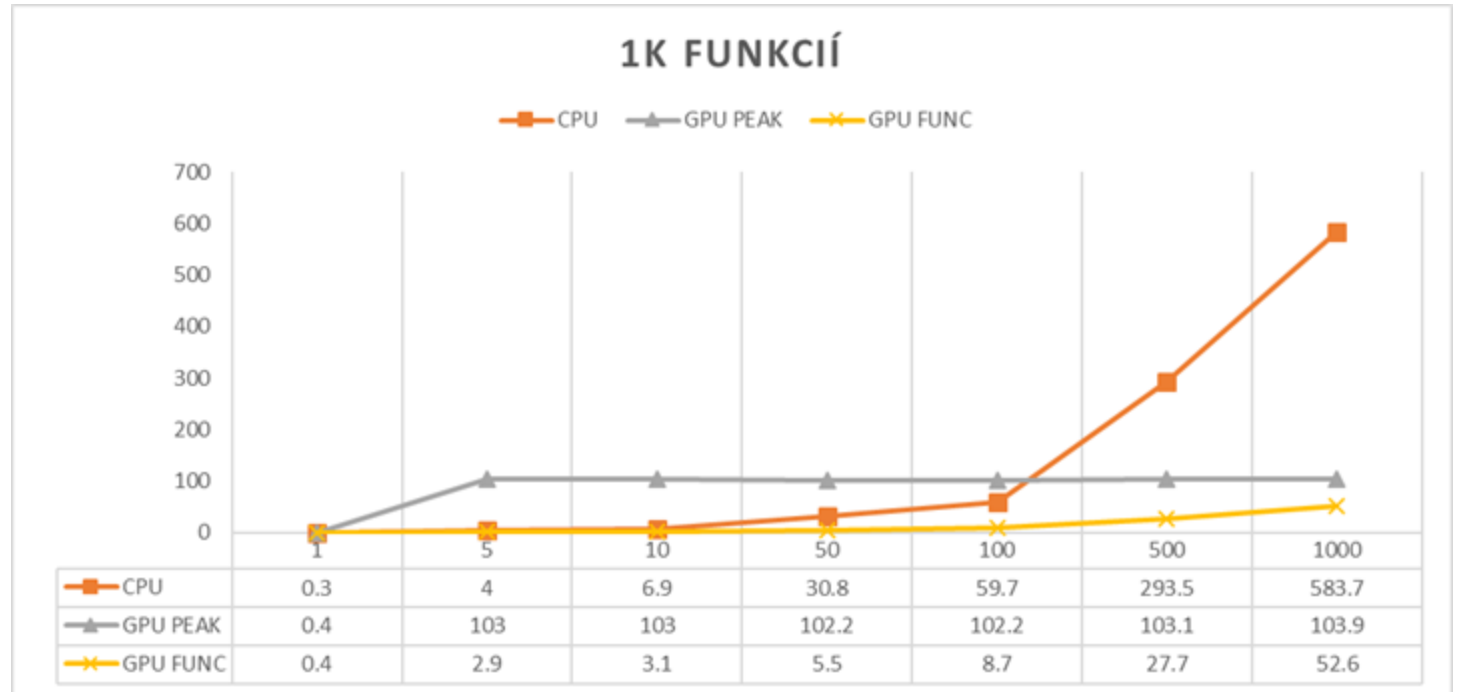
CPU = i7-6700 @ 3.4 - 4.0Ghz

GPU = GTX 750 Ti



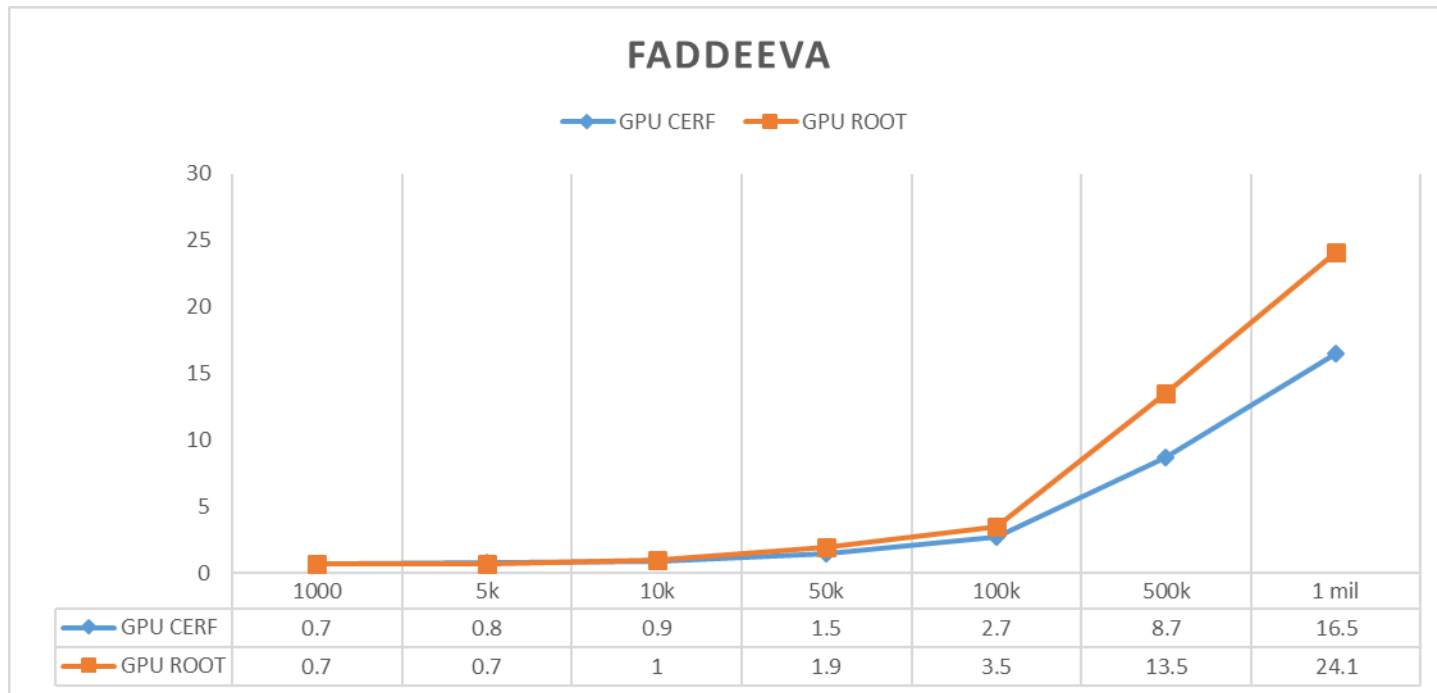
# Testovanie

Priemerné časy výpočtu 1000 funkcií HTP na danom množstve bodov.



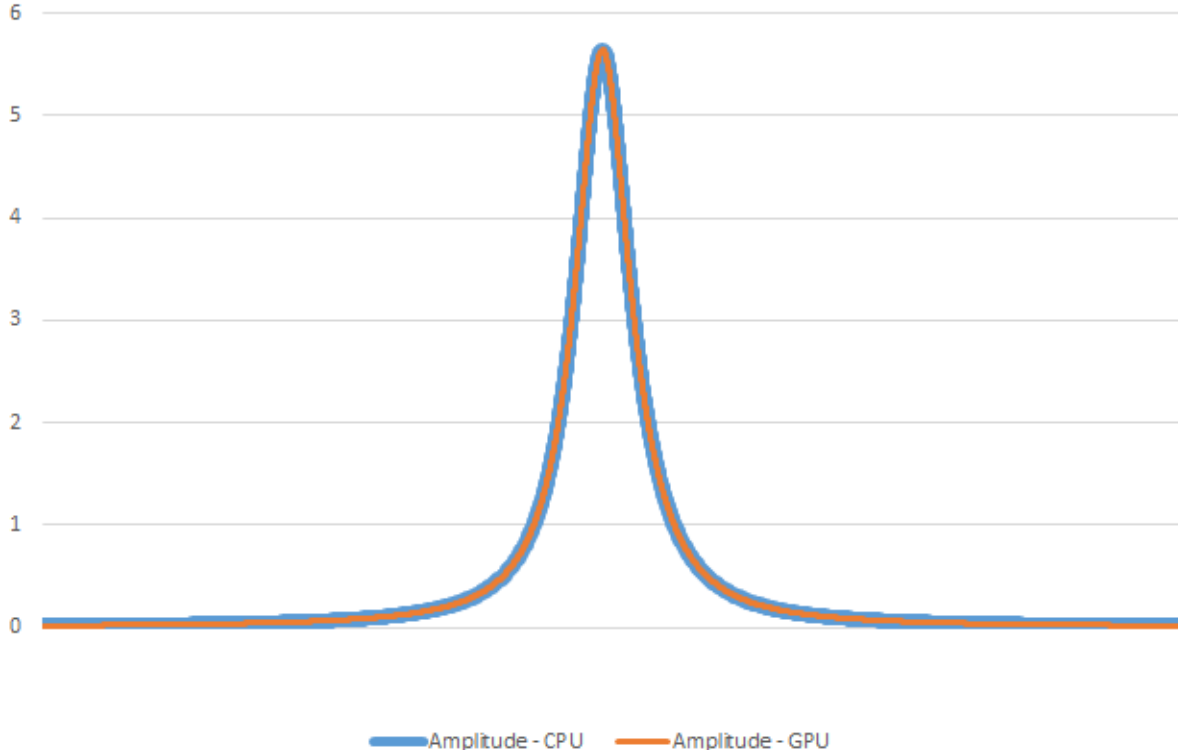
# Testovanie

Priemerné časy 1000 výpočtov  
Faddeevovej funkcie starou a  
novou funkciou.



# Testovanie

TEST KOREKTNOSTI



CHYBA



# Ďalšie kroky

- Dodatočná optimalizácia
- Zavedenie riešenia do programu používaného medzinárodnou spektrografickou komunitou

# Ďalšie kroky

- Využitie rozhrania a rýchlejšieho výpočtu na automatické skúmanie výsledkov

# Prínosy práce

- Zrýchlenie odozvy pri zložitých výpočtoch
- Otvorenie nových možností na automatizáciu práce s dátami
- Nadobudnuté skúsenosti s GPGPU



Ďakujem za pozornosť