

Confronto delle prestazioni CPU-GPU per la simulazione di un reticolo di Ising-2D

Stefano Mandelli
Matricola: 861838

Introduzione

Per confrontare le prestazioni di CPU e GPU in questo lavoro è stato scelto il modello di Ising 2D. È un modello analitico, nel senso che al limite termodinamico esiste una soluzione analitica esatta.

È stato possibile riportare il codice, operazione per operazione, compresa la generazione dei numeri pseudorandom, da singola CPU alla fine parallelizzazione delle GPU in questo modo sarà possibile valutare lo speed-up di prestazioni in modo quantitativo perfettamente consistente. Se si fosse usato un generatore di numeri pseudorandom diverso, la comparazione sarebbe stata correlata anche al tipo di implementazione del *Generatore di Numeri Pseudorandom (PNRG)*. I punti che verranno trattati in questo lavoro sono i seguenti:

- Breve introduzione sul modello usato;
- Implementazione del codice;
- Consistenza fisica del modello;
- Discussione sulla diversità dei risultati;
- Comparazione delle prestazioni per diverse implementazioni;

1 Scelta del modello

Il modello di Ising-2D è un modello che si presta molto bene ad essere parallelizzato, in quanto è un tipico modello interagente a corto range. Per questo tipo di interazioni è facile trovare strategie di parallelizzazione molto efficaci.

Il modello di Ising è caratterizzato da un reticolo (ad esempio ipercubico) in D dimensioni. Ad ogni cella del reticolo viene associato uno spin che può essere solo del tipo $s_i = \{+1, -1\}$ a seconda che la direzione del dipolo magnetico, associato alla cella i –esima del reticolo, risulti verso l'alto o verso il basso.

Il sistema è descritto dall'Hamiltoniana di Ising

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i, \quad (1)$$

dove h identifica un eventuale campo magnetico uniforme esterno. La prima sommatoria è fatta su tutte le coppie di siti primi vicini e J indica la costante di accoppiamento tra spin.

In questo lavoro si considera il caso il caso $D = 2$ dimensionale, $J > 0$ e a campo magnetico esterno nullo, quindi $h = 0$. Al limite termodinamico, il modello di Ising (escluso il caso $1D$) presenta una transizione di fase in prossimità di una temperatura critica T_c . Per temperature maggiori di T_c il sistema si comporta in modo paramagnetico. Per temperature inferiori invece si ha un fenomeno di magnetizzazione spontanea.

Le principali grandezze fisiche che possono essere calcolate sono la magnetizzazione media del sistema $\langle M \rangle$ e la capacità termica a volume costante $\langle C_V \rangle$ che viene calcolata col teorema di fluttuazione-dissipazione. Tutte queste quantità estensive divergono al limite termodinamico. Nelle simulazioni statistiche vengono considerati dei modelli finiti di $N = L \times L$ spins che si desidera confrontare per diversi size. È utile pertanto confrontare la densità di calore specifico $c_V = CV/N$ e di magnetizzazione che è la variabile coniugata al campo esterno h

$$m = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i s_i \right\rangle \quad (2)$$

Per il caso $h = 0$ e $T > T_c$, $\langle M \rangle$ si annulla. Questo comportamento può essere spiegato nel seguente modo: per $T > T_c$ le fluttuazioni termiche prevalgono sulla tendenza del termine di interazione J ad allineare gli spin in un'unica direzione. La lunghezza di correlazione è molto piccola e ogni spin ha la stessa probabilità di avere come valore $+1$ o -1 , in questo modo $\langle M \rangle$ risulta nulla.

Per temperature $T < T_c$ gli spin risentono fortemente dell'interazione coi loro primi vicini. Si nota che in questo range di temperature il modello di Ising 2D, presenta una transizione di fase netta. Il sistema passa, in modo spontaneo, da una situazione di ordine in cui gli spin sono orientati prevalentemente nella stessa direzione quindi hanno in maggioranza valore $+1$ oppure -1 . I due casi, per campo magnetico esterno nullo ($h = 0$), sono equiprobabili, in quanto per $h = 0$ l'Hamiltoniana di Ising è pari per inversione di tutti gli spins, per tempi

molto lunghi entrambi gli stati vengono popolati per la stessa quantità di tempo facendo risultare, anche in questo caso, $\langle M \rangle = 0$.

Per modelli finiti sufficientemente grandi è ugualmente possibile effettuare delle valutazioni e misure di magnetizzazione media spontanea del sistema per $T < T_c$. Questo si ottiene settando lo stato di partenza in modo tale che uno dei due stati sia più popolato dell'altro. Se per convenzione si sceglie uno stato di partenza con una maggioranza di spins a valore $+1$, lo stato di equilibrio dell'Hamiltoniana di Ising, con molti spin a valore $+1$ sarà favorito. In questo modo, per temperature inferiori a quella critica, si hanno dei valori di magnetizzazione non nulli e dello stesso segno ed è quindi possibile valutare l'entità della magnetizzazione spontanea.

1.1 Algoritmo di Metropolis

Dato che le fluttuazioni di energia, rispetto all'energia totale del sistema, sono piccole, un modo sufficientemente efficiente di generare delle mosse Monte Carlo, è quello definito dalla *dinamica a singolo spin-flip*. I vari stati vengono generati in modo che il successivo sia differente dal precedente per il flip di un singolo spin del reticolo preso in modo casuale, quindi lo stato μ e quello ν differiscono tra loro solo per il flip di un singolo spin.

Risulta evidente che nei passi di evoluzione, secondo un algoritmo di tipo Metropolis, il primo passo è quello di definire la probabilità con cui scegliere lo spin a cui apportare la modifica. Come detto precedentemente, essendo una dinamica a *singolo spin flip* si ha che

$$g(\mu \rightarrow \nu) = \frac{1}{N}. \quad (3)$$

Con la probabilità di selezione definita in questo modo la condizione del *bilancio dettagliato* prende la forma

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_\nu}{p_\mu} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} \quad (4)$$

e dato che $g(\mu \rightarrow \nu) = g(\nu \rightarrow \mu)$ si sceglie l'acceptance ratio in modo tale che soddisfi l'equazione (4)

$$\frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}, \quad (5)$$

da cui è possibile dedurre che

$$A(\mu \rightarrow \nu) = A_0 e^{-\frac{1}{2}\beta(E_\nu - E_\mu)}. \quad (6)$$

Per avere un algoritmo che sia il più efficiente possibile il *rateo di accettazione* deve essere significativamente diverso da zero. Il parametro A_0 è scelto in funzione ad alcune considerazioni relative alla struttura dell'Hamiltoniana di Ising. È facile osservare che la differenza di energia tra due stati, in modulo, è al massimo pari a $|\Delta E| = 2zJ$ dove z è il numero di primi vicini. Nel caso di reticolo $2D$ vale $z = 4$, quindi per il reticolo $2D$ abbiamo che al massimo $|\Delta E| = 8J$. La differenza di energia tra lo stato μ e ν è

$$|E_\nu - E_\mu| \leq 2zJ. \quad (7)$$

In questo modo, il massimo valore possibile dell'esponentiale è

$$e^{-\frac{1}{2}\beta(E_\nu - E_\mu)} \leq e^{\beta zJ} \quad (8)$$

che permette di stabilire la scelta migliore possibile del coefficiente

$$A_0 = e^{-\beta zJ}. \quad (9)$$

La scrittura finale per il *rateo di accettazione* risulta quindi essere

$$A(\mu \rightarrow \nu) = e^{-\frac{1}{2}\beta(E_\nu - E_\mu + 2zJ)}, \quad (10)$$

in modo da avere $A(\mu \rightarrow \nu) \leq 1$. Si può verificare che l' $A(\mu \rightarrow \nu)$ scritta ora è molto inefficiente. Il sistema rimane per troppo tempo nello stesso stato. Una scelta migliore che rispetta tutte le condizioni di quella precedente è data proprio dall'acceptance ratio proposta da Metropolis

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} & E_\nu - E_\mu > 0 \\ 1 & \text{altrimenti.} \end{cases} \quad (11)$$

Per il modello di Ising i *ratei di accettazione* appena descritti hanno la particolarità che possono essere calcolati mediante la sola conoscenza degli spins primi vicini allo spin di cui si propone il suo flip, questo perchè l'interazione nel modello di Ising è a corto raggio.

Nel caso dell'Hamiltoniana di Ising, questa differenza è possibile scriverla in modo molto semplice, in funzione solo dagli spin primi vicini dello spin di cui si propone il flip

$$\begin{aligned} E_\nu - E_\mu &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i^\nu s_j^\nu + J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i^\mu s_j^\mu = \\ &= -J \sum_{i \neq k} s_i^\nu (s_k^\nu - s_k^\mu) = -2J s_k^\mu \sum_{i \neq k} s_i^\mu. \end{aligned} \quad (12)$$

2 Implementazione del codice

La strategia di implementazione che è stata adottata in questo lavoro consiste in una prima implementazione su CPU e la successiva implementazione su scheda grafica. L'obiettivo è quello di riottenere gli stessi risultati e gli stessi grafici.

Un primo confronto viene fatto con i grafici di *Magnetizzazione* e *Calore Specifico* in funzione di β , con la soluzione esatta di Onsager. Questo confronto è per verificare la compatibilità della simulazione con il modello fisico. Successivamente sono stati confrontati gli stessi risultati ottenuti su GPU e CPU.

Il secondo risultato che viene presentato riguarda le caratteristiche (punti favorevoli e punti sfavorevoli) di diversi PRNG, nel particolare è stato confrontato il numero di step di termalizzazione in funzione alla complessità numerica della generazione.

Il terzo risultato che viene presentato riguarda la ricerca di un BLOCKL di dimensione tale da portare a saturazione ogni singolo WARP.

Le conclusioni finali sull'ottimizzazione del programma terranno conto di tutte le conclusioni presentate precedentemente.

2.1 Implementazione su CPU

In Fig. 1 sono presentati i risultati di Magnetizzazione e Calore specifico, per diversi size in funzione di β , comparati con la soluzione analitica al limite termodinamico di Onsager.

Si notano in modo evidenti gli effetti di *size scaling* per reticoli molto piccoli. Al crescere della taglia del reticolo, i risultati della simulazione si avvicinano sempre di più al modello al limite termodinamico.

Comparazione tra diversi PNRG su CPU

In Fig. 2 viene presentato il confronto tra tre diversi PNRG. Come si nota, diversi generatori fanno termalizzare il sistema in un numero molto diverso di step. Tra i passi di termalizzazione del generatore più performante e quello meno performante c'è circa un fattore tre.

2.2 Implementazione su GPU

L'implementazione del codice su GPU passa attraverso due fasi. La prima consiste nell'organizzare il reticolo di Ising sulla GPU. L'obiettivo che ci si pone è quello

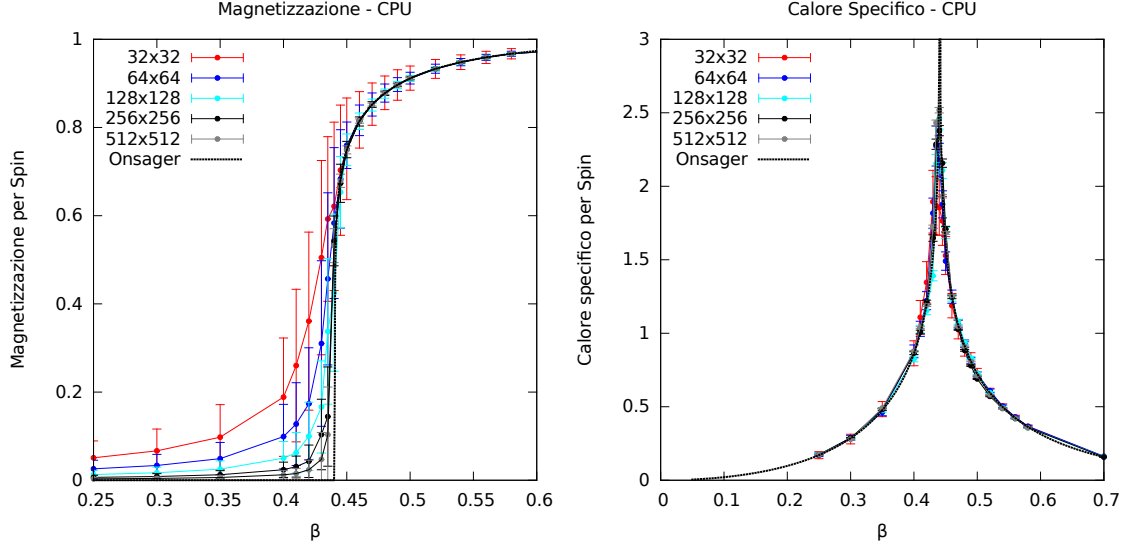


Figura 1: *Magnetizzazione e Calore Specifico* per diverse taglie di reticolo, in funzione di β generati su CPU

di usare nel modo migliore le aree di memorie in modo da garantire sempre coalescenza, velocità di lettura/scrittura e minimizzazione di bank conflict.

La coalescenza consiste nell'effettuare chiamate ad aree di memoria allineate in modo da massimizzare le performance. La velocità di lettura e scrittura dipende dal tipo di memoria usata mentre il problema del bank conflict consiste nel fatto che due aree di memoria non possono essere lette contemporaneamente. Se nel programma ci sono chiamate di questo tipo, vengono schedate in modo sequenziale perdendo tutto il vantaggio della parallelizzazione.

Una seconda fase consiste nel riportare, operazione per operazione, il codice per il PNRG usato nel caso per CPU, in parallelo su GPU. Questo tipo di passaggio non è immediato in quanto la generazione di numeri pseudorandom è per definizione seriale.

La generazione del numero $n + 1$ dipende dal numero n . Dato che l'evoluzione del nostro modello è di tipo *Metropolis* e i numeri random sono quindi una necessità principe, per non perdere parallelizzazione del codice è necessario elaborare una strategia di estrazione parallela e performante per le GPU.

Implementazione del modello

Il reticolo di Ising è stato posizionato sulla griglia della GPU utilizzando la *memoria shared* per ottenere migliori performance. La *memoria shared* è divisa in blocchi indipendenti tra loro, questo fa sì che il reticolo iniziale, una volta cari-

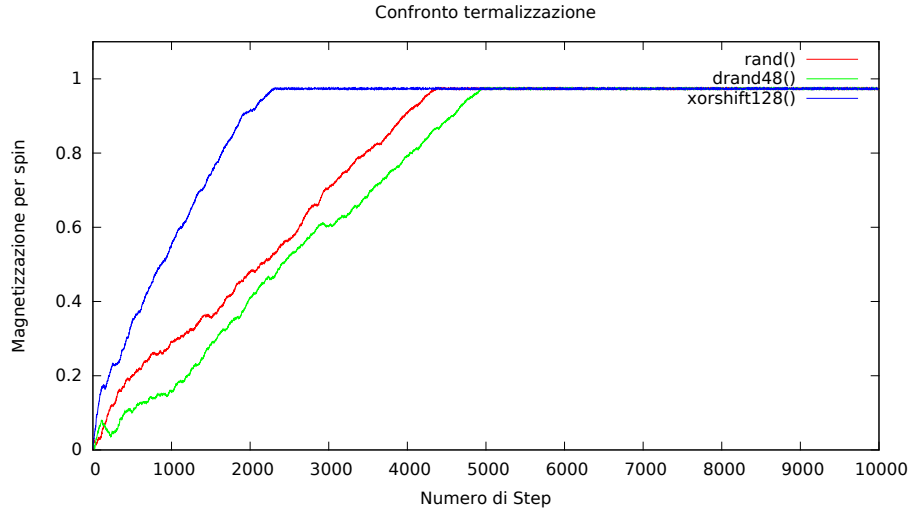


Figura 2: *Passi Montecarlo* necessari per raggiungere la termalizzazione in funzione a tre diversi PNRG.

cato in *memoria shared* necessita che vengano specificate le relative condizioni di raccorto blocco/blocco e quindi effettuare l'update degli spin usando una doppia scacchiera.

Il primo livello di scacchiera, a blocchi grandi relativi ai blocchi della *memoria shared*; il secondo livello di scacchiera, a blocchi piccoli nel senso che l'update dei siti viene svolto a scacchiera anche tra i threads all'interno dello stesso blocco. Tutti i threads dello stesso blocco condividono la stessa area di memoria shared. In Fig. 6 sono stati plottati il tempo per proporre un update in funzione al size del reticolo.

Anche su GPU è stata verificata l'attendibilità fisica del modello simulato. In Fig. 3 sono rappresentati i grafici di *Magnetizzazione* e *Calore Specifico* a confronto con la soluzione analitica di Onsager al limite termodinamico.

Confronto performance dei vari PNRG

Insieme al numero di step necessari a far termalizzare il sistema è necessario indagare anche le performance temporali di ogni singolo PNRG per verificare se l'effettivo guadagno in numero di step è un effettivo guadagno in termini di tempi di simulazione. Un generatore caratterizzato da una miglior statistica e randomicità dei dati può far termalizzare prima il sistema ma va comunque valutato il costo temporale necessario a generarli.

Mettendo insieme i risultati esposti in Fig. 2 ed in Fig. 4 si può notare che, l'algoritmo *XorShift 128-bit* impiega circa 1600 step a termalizzare. Con la

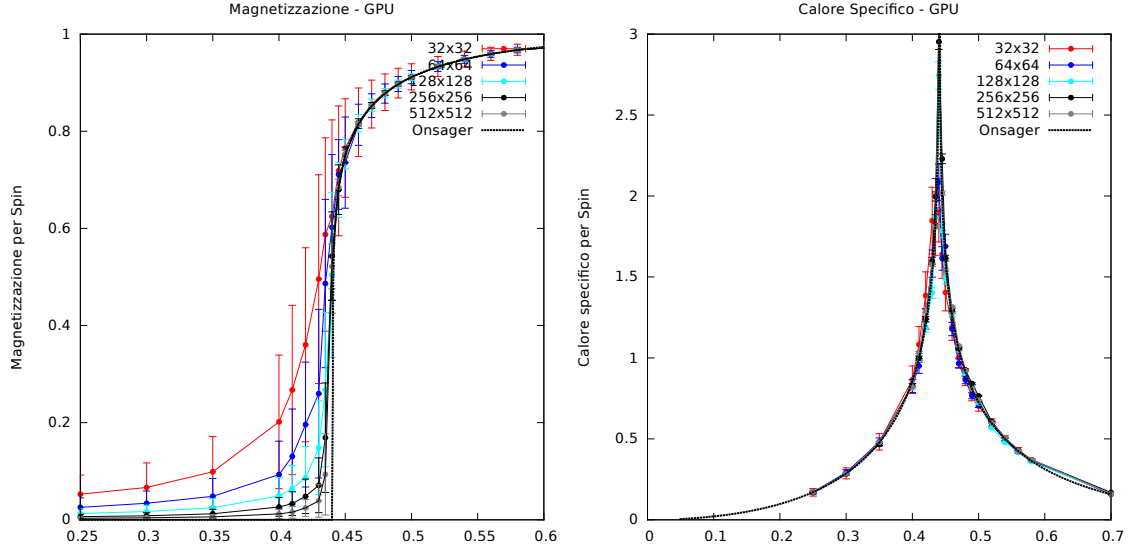


Figura 3: *Magnetizzazione e Calore Specifico* per diverse taglie di reticolo, in funzione di β generati su GPU

funzione *rand 31-bit* impegna quasi 4000 step, quindi un generatore a 31bit impegna circa 2.5 volte in più a termalizzare rispetto ad uno a 128 bit. Per quanto riguardo i tempi, un generatore a 128 – *bit*, rispetto ad uno a 32 – *bit* è solamente 2 volte più lento. Questo fa sì che la soluzione più performante sia quella che prevede di utilizzare un generatore di numeri pseudorandom più lento ma che permetta al sistema di termalizzare in un numero inferiori di step Monte Carlo.

Ottimizzazione della dimensione del blocco

3 Consistenza del modello Fisico

Nelle Figure [1] e [3] sono raffigurati tre grafici. Il primo rappresenta la magnetizzazione (per spin) in funzione di β , il secondo il calore specifico per spin, sempre in funzione di β e nel terzo viene fatto un fit dei valori di magnetizzazione, per ricavare l'esponente critico α . Nell'intorno del β_c la magnetizzazione si comporta come

$$M(\beta) \sim \left| 1 - \frac{\beta_c}{\beta} \right|^\alpha. \quad (13)$$

Effettuando un fit dei valori intorno alla temperatura critica, mettendo come parametri liberi α e β_c è quindi possibile ricavare il valore dell'esponente critico e della temperatura critica di transizione di fase. Nelle immagini 1 e 3 sono riportati i valori del fit trovati che sono compatibili con quelli noti.

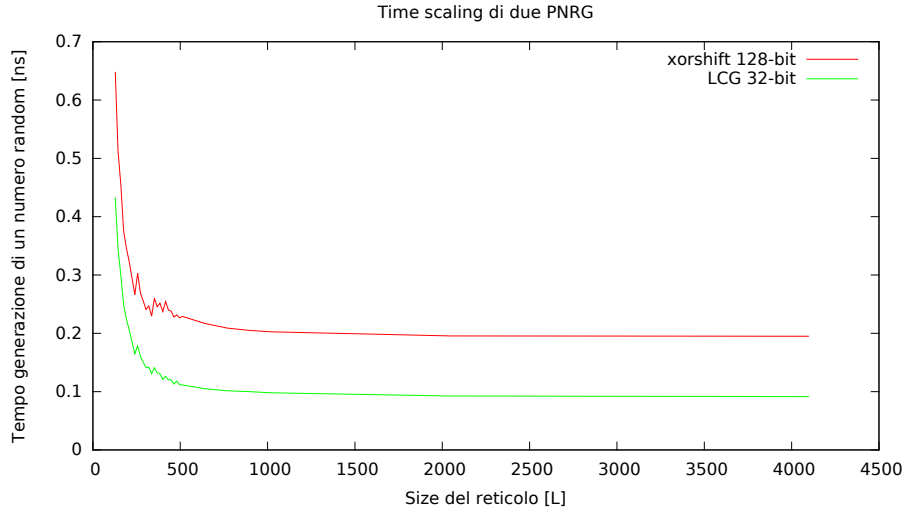


Figura 4: Confronto del tempo di generazione di un numero pseudorandom per due differenti PNRG

4 Discussione sulla diversità dei risultati

In Tabella 1 sono riportati i valori di magnetizzazione per un reticolo 32×32 , con relativo errore, in funzione di β . Come detto in precedenza, si è riusciti a portare completamente, operazione per operazione, l'algoritmo usato su CPU alle schede grafiche, quindi ci si aspettava che dopo lo stesso numero di passi di termalizzazione e di step Monte Carlo, il dato sia proprio identicamente lo stesso. Come si può notare in tabella i dati, seppur compatibili tra loro all'interno del proprio errore, non sono identicamente lo stesso dato. La spiegazione consiste nel modo in cui vengono estratti i numeri pseudocasuali. Nel caso dell'CPU, in modo seriale, l'evoluzione di uno spin è contraddistinto da un certo numero PR della catena e così via in modo ordinato su tutta l'estensione del reticolo, per tutti gli step Monte Carlo usati. Nel caso della GPU, la catena di numeri pseudo random viene suddivisa in sottocatene. Il numero pseudorandom che caratterizzava l'evoluzione dello spin nominato precedentemente, sulla GPU può caratterizzare un altro spin. È quindi corretto ritrovarsi con valori differenti, ma molto vicini tra loro e compatibilissimi all'interno del loro errore statistico. In conclusione i dati ci stanno dicendo è che nonostante ci sia un rimescolamento dei numeri casuali, la statistica del sistema rimane sempre la stessa, quindi i due dati sono perfettamente compatibili.

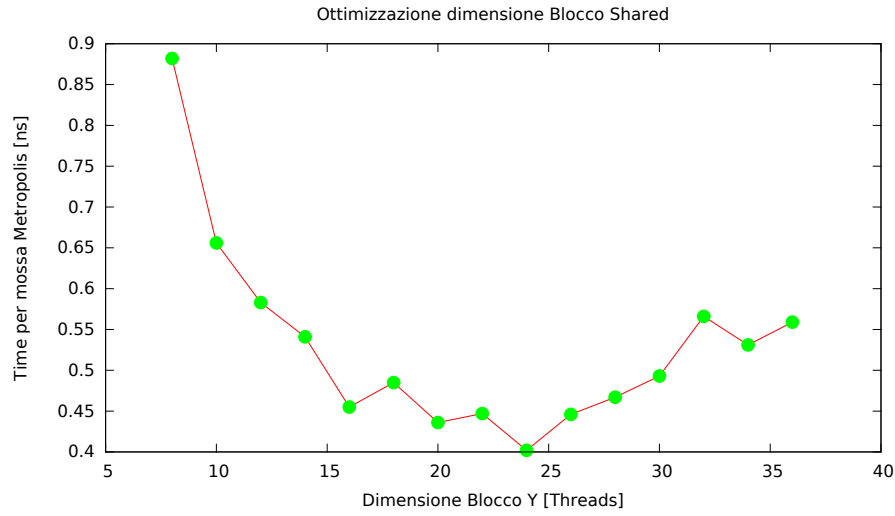


Figura 5

5 Comparazione delle prestazioni

Il codice è stato implementato in CPP per singola CPU, ed in cuda C con due varianti, la prima con il reticolo tutto su global memory la seconda utilizzando l'apporto anche della memoria shared. I risultati sono riportati in Figura 6. Come è possibile notare, una volta saturato il sensore, lo speed-up raggiunto è nell'ordine dei 2 ordini di grandezza rispetto allo stesso codice girato su CPU. L'utilizzo della memoria shared non ha velocizzato il processo. Le migliori prestazioni sono state ottenute aggiornando il reticolo a scacchiera sulla memoria globale.

β	$\langle M \rangle$ -GPU	$\sigma_{\langle M \rangle-GPU}$	$\langle M \rangle$ -CPU	$\sigma_{\langle M \rangle-CPU}$
0,250000	0,052712	0,039474	0,050932	0,038267
0,300000	0,066671	0,050460	0,066645	0,049545
0,350000	0,098850	0,072529	0,097678	0,073882
0,400000	0,201638	0,137473	0,188406	0,134147
0,410000	0,267280	0,174247	0,260063	0,172984
0,420000	0,360316	0,199749	0,360821	0,201873
0,430000	0,495578	0,214933	0,504824	0,220384
0,435000	0,587416	0,199017	0,592545	0,186706
0,440000	0,624490	0,198886	0,621196	0,190946
0,445000	0,718453	0,133490	0,703127	0,147649
0,450000	0,765466	0,101283	0,751676	0,115272
0,460000	0,818402	0,070646	0,817304	0,063977
0,470000	0,855991	0,049240	0,853003	0,048010
0,480000	0,880319	0,037618	0,878726	0,038106
0,490000	0,899063	0,030522	0,896382	0,034484
0,500000	0,912002	0,026942	0,912000	0,027388
0,520000	0,933304	0,020621	0,932910	0,021438
0,540000	0,948533	0,016265	0,948100	0,016604
0,560000	0,959347	0,013461	0,958931	0,013762
0,580000	0,967683	0,011340	0,967213	0,011583
0,700000	0,990200	0,005175	0,990184	0,005217

Tabella 1: Valori di magnetizzazione con il loro errore.

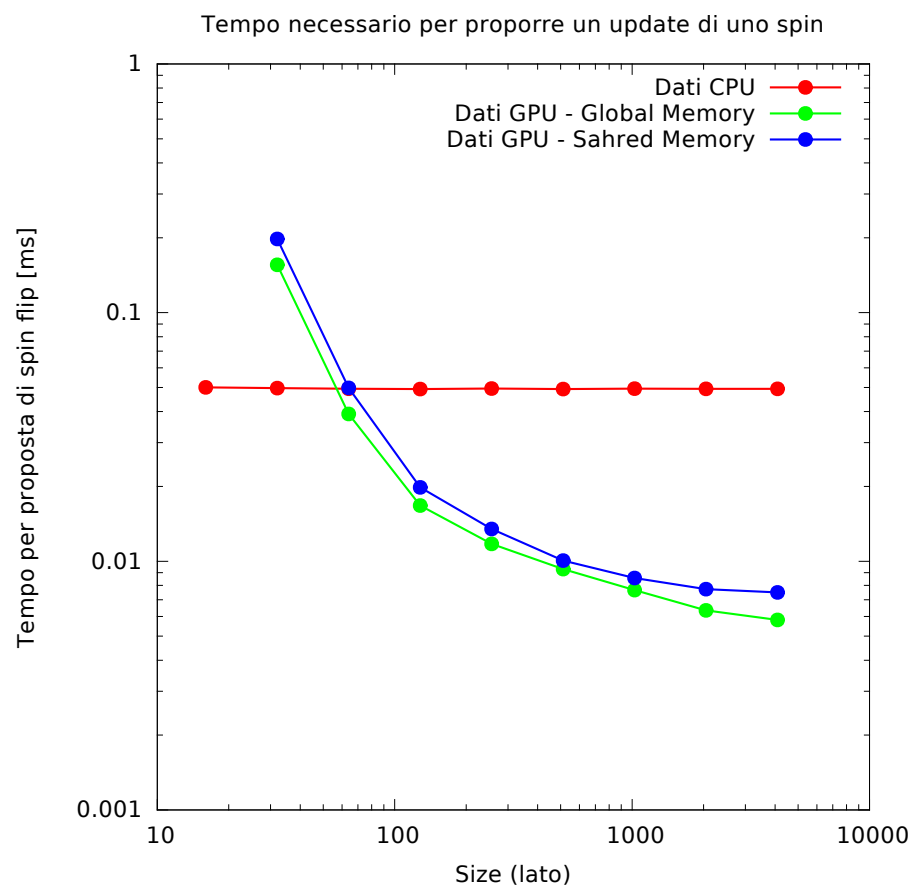


Figura 6: CPU/GPU