Analiza i eksperymenty nad zrównoleglonym algorytmem MCTS-NC

Wojciech Bartoszek
Jarosław Kołdun

Streszczenie

Niniejszy raport stanowi sprawozdanie z analizy i testów oprogramowania MCTS-NC (Monte Carlo Tree Search - numba.cuda). Dokument opisuje cel rozwiązania, zastosowany model zrównoleglenia GPU oraz narzędzia implementacyjne. Przedstawiono również wyniki własnych eksperymentów dla wariantu `OCP_THRIFTY` w grze Connect4, badając wpływ liczby drzew i playoutów na wydajność i jakość decyzji. Dodatkowo przeprowadzono analizę wydajności przy pomocy systemu monitorującego.

1 Przeznaczenie rozwiązania

Omawiane rozwiązanie, MCTS-NC, jest biblioteką służącą do realizacji algorytmu Monte Carlo Tree Search (MCTS) w środowisku wysoce zrównoleglonym. MCTS to algorytm uczenia ze wzmocnieniem (Reinforcement Learning), który buduje asymetryczne drzewo gry poprzez selektywne próbkowanie akcji i estymację ich wartości na podstawie losowych symulacji (playouts) [1].

Główne obszary zastosowań tego rozwiązania to:

- **Gry decyzyjne:** Szachy, Go, Connect4, Gomoku (weryfikowane w artykule źródłowym).
- **Bioinformatyka:** np. modelowanie 3D chromatyny czy zwijanie RNA.
- **Inżynieria ruchu i energetyka:** optymalizacja przepływu ruchu, zarządzanie siecią energetyczną.
- **Matematyka:** odkrywanie algorytmów mnożenia macierzy.

Celem MCTS-NC jest dostarczenie szybkiej, działającej wyłącznie na GPU implementacji, która eliminuje wąskie gardła związane z przesyłaniem danych między CPU a GPU.

2 Opis zrównoleglenia algorytmu

Algorytm został zrównoleglony w oparciu o model obliczeniowy **CUDA (Compute Unified Device Architecture)** Implementacja łączy trzy poziomy zrównoleglenia (Leaf, Root, Tree parallelization) w jeden spójny system.

2.1 Model podziału i mapowanie wątków

Podział pracy pomiędzy wątki GPU zależy od etapu algorytmu i wybranego wariantu:

- **Organizacja bloków:** Wątki są grupowane w bloki CUDA, które są indeksowane albo przez same indeksy drzew, albo przez pary (drzewo, akcja).
- **Etapy MCTS:** Wszystkie cztery etapy algorytmu (selekcja, ekspansja, symulacja/playout, wsteczna propagacja/backup) wykorzystują wiele wątków GPU.

- **Redukcje:** Do sumowania wyników oraz wyznaczania wartości maksymalnych (max/argmax) zastosowano wzorce redukcji (reduction patterns), co pozwala na obliczenia w czasie $O(1)$ lub $O(\log n)$.

2.2 Zarządzanie pamięcią i komunikacja

Implementacja jest typu **lock-free** (bez blokad) – nie używa operacji atomowych ani muteksów, co jest kluczowe dla wydajności przy masowej równoległości.

- **Współpraca wątków:** Wykorzystano mechanizm kooperacji wątków (threads cooperation) oraz szybką pamięć współdzieloną (shared memory) wewnątrz bloków.
- **Transfer danych:** Zminimalizowano komunikację Host-Device. W wariancie *Prodigal* transfery pamięci są niemal całkowicie wyeliminowane w głównej pętli.

2.3 Warianty algorytmiczne

Zaimplementowano cztery warianty różniące się sposobem alokacji zasobów:

- **OCP (One-Child Playouts) vs ACP (All-Children Playouts):** W OCP symulowany jest jeden losowy potomek liścia, w ACP – wszyscy potomkowie równolegle.
- **Thrifty vs Prodigal:**
  - **Thrifty (Oszczędny):** Liczba bloków jest dokładnie dopasowana do liczby legalnych akcji. Wymaga to jednak transferów pamięci do hosta w celu przeliczenia indeksów.
  - **Prodigal (Rozrzutny):** Alokuje nadmiarową siatkę bloków (T, B). Marnuje pewne zasoby GPU, ale unika kosztownych transferów pamięci Host-Device.

3 Narzędzia realizacyjne

Do realizacji równoległości wykorzystano następujące technologie:

- **Język:** Python (wersja ≥ 3.13).
- **Biblioteka równoległości: Numba** (moduł `numba.cuda`). Jest to kompilator JIT (Just-In-Time), który tłumaczy kod Pythona na instrukcje PTX wykonywalne na kartach graficznych NVIDIA.
- **Sprzęt:** RTX 1650; CUDA 12.8.

W przeciwieństwie do rozwiązań opartych na MPI czy OpenMP działających na CPU, użycie `numba.cuda` pozwala na bezpośrednie pisanie jąder (kernels) CUDA w Pythonie.

4 Przebieg eksperymentów

Celem eksperymentów (demo) było ocenienie zachowania wariantu `OCP_THRIFTY` dla gry Connect4 w różnych konfiguracjach: `n_trees` = {1,4,8,16} i `n_playouts` = {32,64,128,256,512}. Każda konfiguracja została wielokrotnie testowana (100 prób).

4.1 Metodologia eksperymentalna

- Wariant algorytmu: `OCP_THRIFTY`
- Gra: Connect 4
- Miary: `playouts_per_second`, `best_q` (średnia wygranych dla wybranej akcji).

4.2 Analiza wydajności i monitoring

W ramach projektu przeprowadzono analizę wydajności aplikacji przy użyciu systemu monitorującego. Poniżej przedstawiono plan, proponowane metryki oraz wyniki pomiarów z instrumentacji.

4.2.1 Cele i metryki

Analiza skupi się na następujących metrykach: wykorzystanie GPU (%), wykorzystanie pamięci GPU, wykorzystanie CPU (%), zużycie pamięci RAM procesu, liczba playoutów na sekundę (playouts/s), czasy etapów (select/expand/playout/backup), transfery host<->device oraz, o ile to możliwe, czasy poszczególnych kernelów.

4.2.2 Plan eksperymentów i wyniki

Po uruchomieniu eksperymentów z instrumentacją wygenerowano poniższą tabelę podsumowującą miary monitoringu oraz wykres wykorzystania GPU.

metric	mean	std / max
CPU (%)	18.8	6.5
GPU util (%)	51.9	4.9
GPU mem mean (MB)	1846.6	max 2339.4
RSS mem mean (MB)	438.2	

Wnioski: GPU było umiarkowanie obciążone podczas eksperymentów; rozważamy optymalizację parametrów bloków oraz redukcję transferów host $\leftrightarrow$ device w celu lepszego wykorzystania dostępnych zasobów GPU.

4.2.3 Proponowane ulepszenia — hipotezy do weryfikacji

- Zredukowanie transferów host$\leftrightarrow$device i minimalizacja kopiowania danych (oczekiwane zwiększenie przepustowości i zmniejszenie opóźnień).
- Dopasowanie parametrów bloków/wątków (tpb) oraz rozkładu pracy w kernelach w celu lepszego wykorzystania SM GPU.
- Usprawnienie generatora losowości (np. pre-allocacja stanów RNG) i optymalizacja inicjalizacji per-thread, aby uniknąć kosztów w pętli programu.
- Profilowanie kernelów i rozważenie łączenia prostych kernelów (kernel fusion) lub przenoszenia części logiki na host w celu redukcji liczby wywołań kerneli.

4.3 Zestawienie wyników

Poniżej wstawiono tabelę podsumowującą średnie wartości ($mean \pm std$) dla szybkości playoutów i jakości akcji.

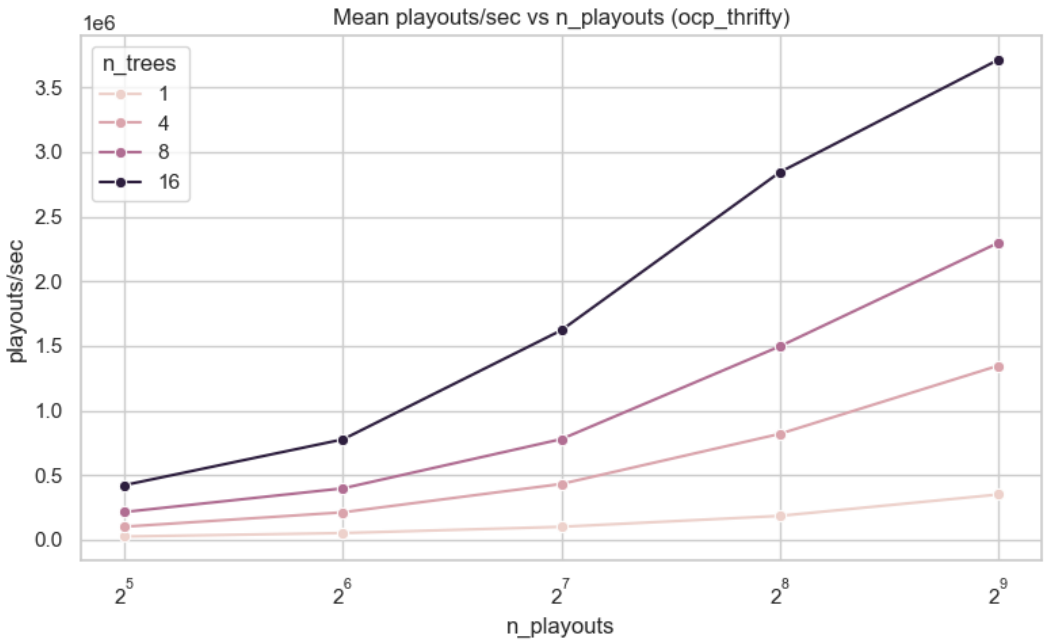
n_trees	n_playouts	playouts/s (mean ± std)	best_q (mean ± std)	trials
1	64	52,265 ± 5,265	0.6416 ± 0.0302	100
1	128	100,643 ± 8,357	0.6356 ± 0.0257	100
1	256	185,010 ± 11,775	0.6337 ± 0.0229	100
1	512	350,306 ± 23,495	0.6399 ± 0.0176	100
4	32	101,651 ± 7,923	0.6407 ± 0.0219	100
4	64	212,774 ± 15,353	0.6389 ± 0.0187	100
4	128	432,024 ± 31,429	0.6402 ± 0.0126	100
4	256	819,187 ± 53,015	0.6405 ± 0.0122	100
4	512	1,346,204 ± 99,740	0.6398 ± 0.0079	100
8	32	215,212 ± 15,660	0.6379 ± 0.0195	100
8	64	398,186 ± 47,392	0.6393 ± 0.0132	100
8	128	778,756 ± 88,164	0.6396 ± 0.0098	100
8	256	1,495,930 ± 118,487	0.6411 ± 0.0083	100
8	512	2,296,589 ± 133,618	0.6407 ± 0.0059	100
16	32	423,327 ± 31,679	0.6387 ± 0.0131	100
16	64	777,088 ± 71,423	0.6396 ± 0.0092	100
16	128	1,620,980 ± 101,277	0.6398 ± 0.0066	100
16	256	2,842,605 ± 185,688	0.6416 ± 0.0060	100
16	512	3,712,266 ± 170,840	0.6409 ± 0.0037	100

4.4 Najważniejsze obserwacje

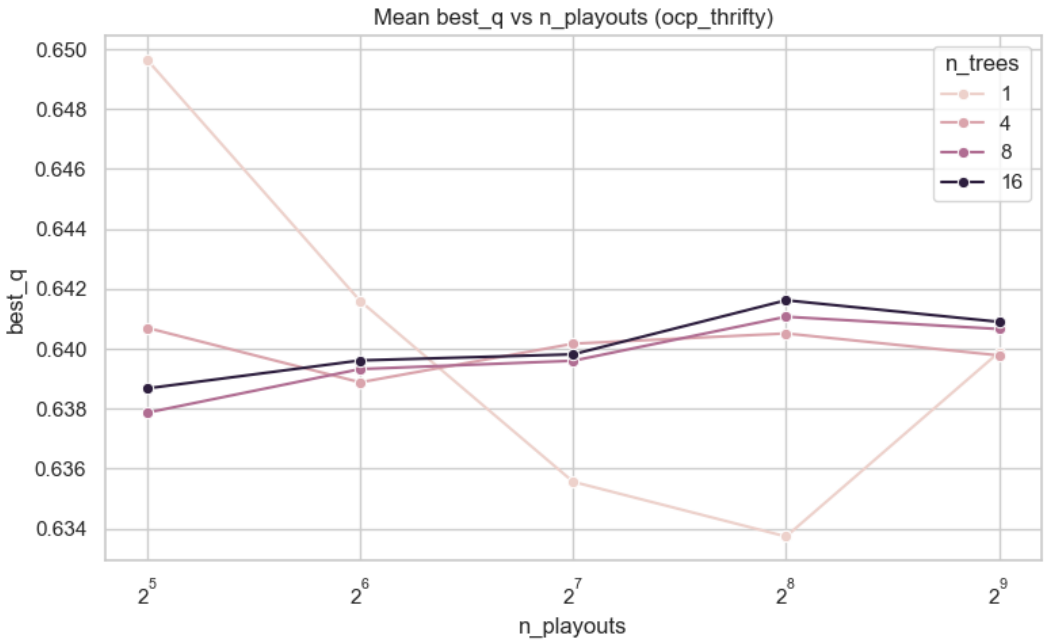
- Najwyższą średnią liczbę playoutów na sekundę zaobserwowano dla konfiguracji `n_trees=16, n_playouts=512`.
- Najwyższą średnią jakość decyzji (`best_q`) uzyskano dla `n_trees=1, n_playouts=32` (średnia około 0.6496).
- Ogólnie: szybkość playoutów rośnie wraz ze wzrostem `n_trees` i/lub `n_playouts`, natomiast średnia jakość (best_q) jest względnie stabilna w mierzonych konfiguracjach.

4.5 Wykresy

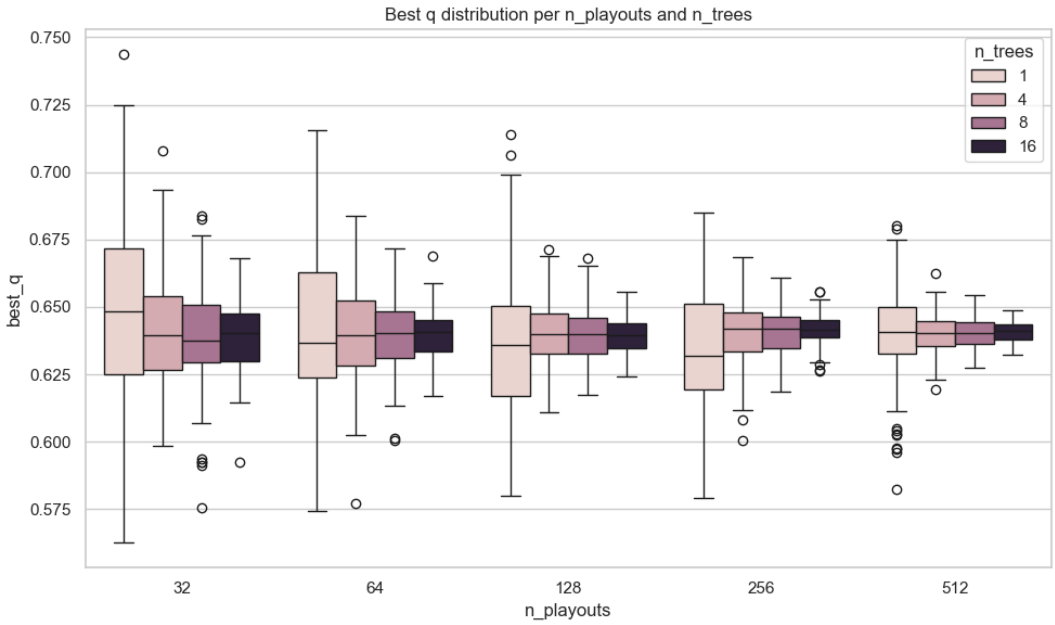
Poniżej zamieszczono kluczowe wykresy wygenerowane podczas eksperymentów.



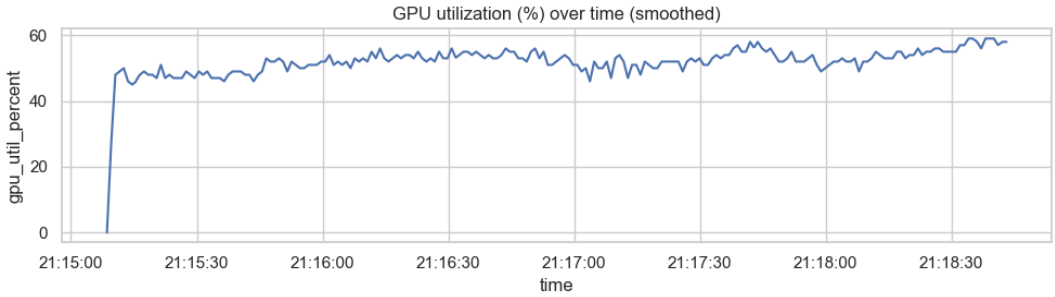
Rysunek 1: Średnie playouts/sec w zależności od *n_playouts* dla różnych wartości *n_trees*.



Rysunek 2: Średnie *best_q* w zależności od *n_playouts* dla różnych wartości *n_trees*.



Rysunek 3: Boxploty rozkładu *best_q* dla różnych konfiguracji *n_trees* i *n_playouts*.



Rysunek 4: Wykres wykorzystania GPU w czasie podczas eksperymentu.

5 Dyskusja i propozycja ulepszenia

Wyniki eksperymentów wskazują, że samo zwiększanie przepustowości (liczby playoutów na sekundę) nie przekłada się liniowo na jakość decyzji w wariancie OCP. W związku z tym, zamiast prostej zmiany wariantu na bardziej zasobożerny (ACP), proponujemy optymalizację algorytmiczną.

5.1 Propozycja: Dynamiczne skalowanie liczby playoutów

Zgodnie z otwartymi pytaniami badawczymi postawionymi przez autora oprogramowania, proponujemy implementację mechanizmu **zmiennej liczby playoutów w zależności od głębokości drzewa**.

- **Problem:** Obecnie parametr m (liczba playoutów) jest stały dla każdego węzła. Powoduje to, że zasoby GPU są zużywane równomiernie, nawet w sytuacjach, gdzie ruchy są oczywiste lub mało znaczące dla wyniku końcowego.
- **Rozwiązanie:** Modyfikacja jądra `_playout_ocp` tak, aby parametr m był funkcją głębokości węzła d, np. $m(d) = m_{base} \cdot f(d)$.

- **Oczekiwany efekt:** Pozwoli to na "głębsze"przeszukiwanie w krytycznych momentach gry przy zachowaniu tego samego budżetu czasowego, co powinno podnieść wskaźnik wygranych bez konieczności drastycznego zwiększania pamięci (jak w wariancie Prodigal).
- **Plan wdrożenia:** Wprowadzenie tablicy wag dla głębokości przesyłanej do pamięci stałej (constant memory) GPU i skalowanie pętli symulacji wewnątrz kernela CUDA.

Literatura

[1] Przemysław Klęsk. "MCTS-NC: A thorough GPU parallelization of Monte Carlo Tree Search implemented in Python via numba.cuda". W: *SoftwareX* 30 (2025), s. 102139. ISSN: 2352-7110. DOI: https://doi.org/10.1016/j.softx.2025.102139. URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352711025001062.

[2] Przemysław Klęsk. *Presentation on MCTS-NC: A thorough GPU parallelization of Monte Carlo Tree Search implemented in Python via numba.cuda*. Styczeń 2026.

[3] Siu Kwan Lam, Antoine Pitrou i Stanley Seibert. "Numba: a LLVM-based Python JIT compiler". W: *Proceedings of the Second Workshop on the LLVM Compiler Infrastructure in HPC*. LLVM '15. Austin, Texas: Association for Computing Machinery, 2015. ISBN: 9781450340052. DOI: 10.1145/2833157.2833162. URL: https://doi.org/10.1145/2833157.2833162.

[4] Maciej Swiechowski i in. "Monte Carlo Tree Search: A Review of Recent Modifications and Applications". W: *CoRR* abs/2103.04931 (2021). arXiv: 2103.04931. URL: https://arxiv.org/abs/2103.04931.