

МАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ – АЛГОРИТМ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО ОТЖИГА

Л.Н. Щур ^a, Л.В. Щур ^b

Научный Центр РАН в Черноголовке, 142432 Черноголовка, Россия

E-mail: ^alev.shchur@gmail.com, ^blvs@chg.ru

Использование возможностей суперкомпьютеров в большой степени определяется применением алгоритмов, которые допускают масштабирование на миллионы параллельно работающих вычислительных устройств. В настоящем обзоре мы обсуждаем в этой связи возможности применения алгоритма отжига популяции, который был предложен для моделирования систем статистической механики со сложным профилем свободной энергии. Мы приводим краткий обзор имеющихся реализаций алгоритма на гибридной вычислительной архитектуре с использованием классических процессоров и графических ускорителей. Алгоритм обладает свойством полной масштабируемости. Мы приводим обзор применения реализаций алгоритма к нескольким интересным научным задачам. Алгоритм достаточно универсальный и может быть применен к любой системе статистической механики, для которой можно записать статистическую сумму.

Ключевые слова: широкомасштабное моделирование, гибридные вычислительные архитектуры, статистическая сумма, параллельный отжиг

© 2018 Лев Н. Щур, Людмила В. Щур

1. Введение

В первой части введения мы приводим историческую мотивировку проведения исследований по тематике нашего обзора. Во второй части введения мы приводим современную мотивировку таких исследований.

Исторически развитие вычислительной техники связано также с развитием методов моделирования и исследования физических систем. Первые компьютеры появились в начале холодной войны с целью проведения исследований, необходимых для разработки термоядерного оружия. В то же время, исследователи-физики обнаружили, что эти компьютеры могут быть использованы и для проведения фундаментальных исследований. Так, в 1947 году был предложен метод Монте-Карло [1], использованный для расчетов на ENIAC (Electronic Numerical Integrator and Computer), первой электронно-вычислительной машине (ЭВМ) [2]. Широкую известность среди исследователей в области физики и химии этот метод получил позднее, после опубликования работы [3], в которой был предложен метод расчета уравнения состояния. Этот метод известен теперь, как метод Метрополиса.

Другой важный исторический факт, который связан с нашей статьей, это проблема генерации псевдо-случайных чисел, необходимых для реализации алгоритмов метода Монте-Карло на ЭВМ. Наиболее употребительный метод генерации псевдо-случайных чисел – это линейно-конгруэнтный метод, который был впервые доложен в докладе Деррика Лемера из Калифорнийского университета в Беркли на конференции в 1949 году [4].

Оба метода были предложены с учетом конкретной архитектуры ЭВМ, которая была способна выполнять последовательные операции. Заметим, что названия конференций в конце 40-х годов по тематике настоящей работы содержали словосочетание – «масштабные вычисления» (смотри, например, [4]). В настоящее время под этим словосочетанием подразумевается не только большой размер физической задачи, но и особенности архитектуры современных высоко-производительных ЭВМ.

Известно, что закон Мура [5] в его начальной интерпретации – число транзисторов на одном кристалле удваивается каждые два года – в настоящее время не выполняется. Тем не менее, его модифицированный закон – число транзисторов в высоко-производительной ЭВМ – выполняется за весь период времени от создания первой микросхемы до настоящего времени. Дальнейшее обеспечение этого закона может быть обеспечено за счет развития всех технологий, используемых в высоко-производительных ЭВМ, как центрального процессора, так и системы в целом, что включает в себя также коммуникационные системы [6]. В настоящее время следование закону Мура обеспечивается в основном за счет роста числа ядер на кристалле. Если в 1998 году необходимый рост обеспечивался за счет 32-кратного роста за счет числа транзисторов и 32-кратного роста за счет степени параллелизма, то в настоящее время по прошествии 20 лет эти цифры таковы – 2-х кратный рост за счет числа транзисторов и 400-т кратный рост за счет параллелизма.

Достижение производительности высоко-производительных ЭВМ значительно отстает от прогнозов десятилетней давности. Ожидалось, что в 2018 году будет достигнута производительность в 1 экса-флопс [7]. На самом деле, самая мощная супер-ЭВМ Summit [8] в 2018 году достигла пиковой производительности лишь в 0.188 экса-флопс [9], что в 5.3 раза меньше планируемого и необходимого для доминирования США в области высоко-производительных вычислений – вторую строку в списке самых мощных ЭВМ [9] занимает компьютер оригинального производства КНР TaihuLight с производительностью 0.125 экса-флопс, что лишь в 1.5 раза меньше, чем супер-ЭВМ Summit¹.

Американские специалисты не теряют надежду на восстановление статус-кво. Решение было сформулировано два года назад в рамках новой программы DOE, Exascale Computing Project [10]. Акцент перенесен на создание высоко-эффективного программного обеспечения. Рабочая формула проекта звучит так. Если в 2016 году на 10 пета-флопсной ЭВМ IBM Blue Gene/Q расчеты физического процесса занимали единицу времени, а в 20XX году такие расчеты займут в 100 раз меньше времени, то мы можем считать, что мы достигли экса-

¹ Заметим, что это тот же самый коэффициент, который на пике отечественной вычислительной техники в 1967 год, между БЭСМ-6 и CDC-6600 – мощнейшими супер-ЭВМ того времени.

флопсной производительности. В реализации проекта по созданию эффективного программного обеспечения задействованы практически все национальные лаборатории США и выданы гранты по 15-ти предметным направлениям.

Основная задача по разработке эффективного программного обеспечения состоит в разработке таких алгоритмов проведения расчетов, которые позволяют распараллелить задачу на сотни миллионов и более параллельных потоков (уже сегодня некоторые супер-ЭВМ имеют более 10 миллионов ядер [9]). Задача нетривиальная и требует серьезных усилий математиков, информатиков и специалистов предметных областей.

Возможно два принципиально различных подхода. Первый подход, это разработка универсального метода, который потенциально масштабируем. Примером такого подхода может быть метод параллельного моделирования параллельных событий [11], который показал хорошую масштабируемость на ЭВМ IBM Blue Gene с числом параллельных потоков более миллиона [12]. Исследование масштабируемости этого метода было представлено на этой конференции в докладе нашей исследовательской группы [13]. Метод с успехом применяется в научных исследованиях в различных областях науки (смотри краткий обзор в работе [14]).

Второй подход, это разработка методов и алгоритмов, оптимальных для некоторого круга задач, четко определенного, но при этом достаточно широкого – для оправдания затрат на разработку, реализацию и тестирование метода с целью его дальнейшего применения для исследования конкретных научных проблем. Примером такого подхода может служить метод параллельного отжига (parallel annealing) [15,16], который применим к исследованию проблем, для которых можно написать статистическую сумму (или ее аналог, например, целевую функцию). Возможность введения статистической суммы, казалось бы, ограничивает круг задач. С другой стороны, этот круг задач сам по себе достаточно широк. Это не только все задачи, для описания которых используется аппарат статистической механики, но и большой круг задач оптимизации, как будет видно ниже. По сути, этот метод так же универсален, как и введенный на заре использования ЭВМ метод Метрополиса. Отличие метода отжига популяции состоит в том, что он по своей сути идеально подходит для реализации на параллельной архитектуре современных супер-ЭВМ, в том числе и на гибридных супер-ЭВМ, состоящих из традиционных центральных процессоров и ускорителей вычислений. Замечательно, что метод отжига популяции тем более эффективен, чем больше используется параллельных процессов в одной задаче.

2. Метод отжига популяции

Метод отжига популяции разработан для изучения систем со сложным профилем свободной энергии. Он комбинирует мощь известных эффективных алгоритмов – моделирования отжига, репродукции популяции с помощью весов Больцмана и последовательного метода Монте-Карло. Его основная идея состоит в том, чтобы обеспечить процесс приведения популяции в равновесное состояние даже в области низких температур. Метод позволяет получить очень точную оценку свободной энергии путем усреднения по популяции на каждом шаге охлаждения (нагревания) популяции. Он позволяет провести эффективную реализацию в параллельных алгоритмах за счет обработки каждого элемента популяции отдельным ядром или нитью.

Метод можно изложить в такой универсальной схеме, предложенной в работе [16].

1. Задается начальная популяция с большим числом копий системы, помещенной в термостат при такой температуре $T(0)$, для которой мы знаем значение свободной энергии $F(T(0))$. Значения переменных взяты, как случайная выборка из статистического ансамбля при температуре $T(0)$. Число копий (replicas) при этой температуре обозначим $R(0)$ – начальный размер популяции.
2. Изменим температуру на $T(i)$ так, чтобы разница температур при двух последовательных шагах охлаждения была небольшой $dT=|T(i)-T(i-1)|\ll 1$.

3. Применим веса Больцмана для вычисления на их основе для каждой реплики вероятности ее «выживания» при новой температуре $T(i)$. В эти веса входят отношения весов Больцмана, что позволяет вычислять свободную энергию при каждом шаге по температуре.

Таким образом формируется новая популяция системы при температуре $T(i)$. При этом желательно иметь размер популяции, примерно равный начальному размеру $R(0)$.

4. Значения переменных в репликах примерно соответствуют новой температуре $T(i)$. Для достижения термодинамического равновесия на этом этапе, можно применить любой метод Монте-Карло, наиболее подходящий для моделируемой системы. Параметром этого этапа будет число шагов Монте-Карло, которое обозначим через M .
5. Вычисляем оценку наблюдаемых величин, как простое среднее по популяции.
6. Переходим на шаг 2 до тех пор, пока не достигнем желаемой температуры $T(k)$.

3. Применения метода отжига популяции

В этом разделе приводятся примеры успешного применения метода отжига популяции для исследования ряда научных задач.

3.1. Модель фрустрированного ферромагнетика на стопке треугольных решеток

Явление ферромагнетизма наблюдается во многих материалах, наиболее известны ферромагнитные свойства железа. Железо проявляет магнитные свойства при температуре ниже температуры Кюри. При температуре выше температуры Кюри отдельные магнитные домены вещества разупорядочены – их магнитные моменты ориентированы в пространстве случайно. При охлаждении образца ниже температуры Кюри возникает эффект спонтанного упорядочения, магнитные домены ориентированы в одном направлении, и возникает большой магнитный момент образца. Простейшее практическое использование ферромагнетика – это компас, стрелка которого реагирует на магнитное поле Земли, стремясь занять положение вдоль силовых линий магнитного поля Земли.

Введение примесей в ферромагнитный материал может привести к тому, что соседние домены при температуре ниже температуры Кюри будут параллельны, но разнонаправлены, стремясь минимизировать локальную энергию взаимодействия. Это явление носит название антиферромагнетизм. В примесных магнитных материалах локальное взаимодействие доменов может иметь случайный знак, приводя локально к ферромагнитным или антиферромагнитным связям. При этом, может случиться так, что отдельный домен будет окружен равным числом похожих доменов, с половиной из которых он будет иметь ферромагнитные связи, а с половиной – антиферромагнитные связи. В таком случае, в локальном поле соседних доменов, этот домен будет иметь нулевую локальную магнитную энергию взаимодействия. Такая ситуация называется фрустрацией – домен не знает, в каком направлении направить свой магнитный момент. Исследование таких моделей известными методами затруднено.

Одна из моделей такого фрустрированного магнетика – это модель фрустрированного ферромагнетика на стопке треугольных решеток (ФФСТР). Для нее известно состояние при нулевой температуре – состояние с самой низкой энергией, так называемое основное состояние. Значение этой энергии на один элементарный домен равно -2 . Для простоты в этой модели элементарный домен заменяется на точку, в которой располагается частица – ее магнитный момент (коротко, спин) принимает только два значения $+1$ и -1 , что можно интерпретировать, как направление вверх и вниз, соответственно. Распределение взаимодействий между спинами такое, что имеются фрустрации – неопределенные значения спина.

Методами Монте-Карло (методом Метрополиса и другими) не удалось провести моделирование так, чтобы ФФСТР пришла в основное состояние с энергией -2 на один спин – все попытки моделирования приводили к несколько большему значению энергии, которое соответствовало первому возбужденному состоянию. С другой стороны, метод отжига популяции при охлаждении по схеме, изложенной в предыдущем разделе, при всех параметрах моделирования гарантированно приводил систему в основное состояние с энергией -2 [17].

Этот факт вселил надежду на то, что метод может быть использован и для нахождения основного состояния более сложных систем.

3.2. Модель ферромагнетика Поттса на квадратной решетке

В модели Поттса [18] спиновая переменная может принимать несколько значений, от 1 до q . При различных значениях переменной q , модель Поттса соответствует различным физическим системам и проявляет различные свойства. Например, при $q=1$, она соответствует модели протекания, при $q=2$ – модели Изинга. При этом, она демонстрирует физически различное поведение. При $q < 4$ в системе проявляется фазовый переход второго рода, при котором термодинамические величины, которые определяются второй производной от свободной энергии, обращаются в бесконечность при температуре Кюри, например, теплоемкость и магнитная восприимчивость. При значениях $q > 4$ система демонстрирует фазовый переход первого рода, то есть скачок имеют первые производные от свободной энергии, например, энергия и намагниченность.

При моделировании стандартными методами довольно сложно сделать вывод о типе фазового перехода при небольших значениях q (например, от 5 до 10), поскольку корреляционная длина очень большая, превосходящая разумные размеры моделируемой системы. Например, для $q=5$ корреляционная длина более пяти тысяч.

Оказалось, что вычисление свободной энергии, как функции температуры, с использованием метода отжига популяции при процессе охлаждения и при процессе нагревания, позволяет определить тип фазового перехода даже для системы умеренного размера [19]. Пересечение этих кривых свободной энергии происходит при температуре фазового перехода с большой точностью, обратно пропорциональной объему системы. Примечательно, что для систем с фазовым переходом второго рода кривые свободной энергии, полученные при нагревании и при охлаждении, совпадают и не имеют пересечения.

Этот результат демонстрирует, что метод отжига популяции может быть использован не только для охлаждения, но и для нагревания системы – шаг 3 схемы отжига популяции это допускает.

3.3. Фолдинг полимеров

Сложные полимеры демонстрируют явление фолдинга, сворачивания в компактную структуру при понижении температуры. Исследование этого явления довольно затруднительно, поскольку при таком процессе играют роль не только энергетические эффекты, но также и энтропийные. В работе [20] был применен метод отжига популяции совместно с методом молекулярной динамики (модификация шага 4 схемы отжига популяции, изложенной в разделе 2). Результаты моделирования показали, что для умеренных размеров полимеров и для умеренных размеров популяции метод отжига популяции демонстрирует ту же эффективность, что и метод *parallel tempering*. Однако, при росте значений параметров задачи, метод отжига популяции становится все более и более эффективным.

Этот результат явно показывает, что метод отжига популяции перспективен на больших задачах большого объема с использованием высокого уровня параллелизма высокопроизводительных вычислительных систем.

3.4. Задачи оптимизации

Метод отжига популяции также с успехом был проверен на задачах оптимизации, для которых решение может быть отображено на задачи магнетика со случайным взаимодействием [27].

4. Реализация метода отжига популяции на гибридной архитектуре

Ускорение вычислений на графических ускорителях Nvidia при реализации метода отжига популяции было продемонстрировано в работе [21] на примере модели Поттса с $q=2$. Было использовано несколько приемов по оптимизации доступа к памяти, по упаковке спиновых переменных нескольких узлов в одном целом числе, и т.д. – хорошо известный набор

приемов по оптимизации вычислений. Было исследовано влияние параметров (число реплик R , число шагов Монте-Карло M) на точность оценки термодинамических переменных. Кроме того, был предложен алгоритм для еще одного параметра – шага изменения температуры dT , который в других работах был постоянный. Оптимальным будет выбор такого шага, чтобы распределения термодинамических величин по репликам при двух последовательных значениях температуры пересекались более, чем на 50 процентов. Это гарантирует наличие достаточного числа реплик с похожими свойствами при этих температурах, что даст правдоподобную оценку вероятности репликации (шаг 3 схемы в разделе 2).

Таблица показывает полное время моделирования, деленное на полное число переворотов спинов в модели Поттса с числом компонент спина $q=2$. Переворот спина – это шаг 4 схемы алгоритма с использованием метода Метрополиса с числом шагов Монте-Карло $M=500$. Вычисления проводились с использованием одного ядра процессора Intel Xeon E5-2683 v4 с тактовой частотой 2.1 GHz и с использованием графических ускорителей Tesla K80 (Kepler card) и GeForce GTX 1080 (Pascal card). Использование GPU дает ускорение более, чем в 200 раз на карте Kepler и более 500 раз на карте Pascal.

Таблица. Пиковая производительность метода отжига популяции для модели Поттса с числом компонент спина $q=2$. L – размер квадратной решетки. Размер популяции $R=50\ 000$

	time per spin flip (ns)		
	CPU	GPU (Kepler card)	GPU (Pascal card)
$L = 16$	23.1	0.094	0.038
$L = 32$	22.9	0.092	0.034
$L = 64$	22.6	0.092	0.036
$L = 128$	22.6	0.097	0.039

Метод также реализован в гибридной архитектуре с использованием CUDA и MPI.

5. Генерация псевдослучайных чисел для параллельных вычислений

Известные методы генерации псевдослучайных чисел разработаны для генерации одного потока чисел. Наиболее употребительные генераторы были протестированы с использованием набора стандартных тестов. Для использования генераторов псевдослучайных чисел (ГПСЧ) при параллельных вычислениях дополнительно требуется, чтобы параллельные потоки псевдослучайных чисел не имели корреляции между собой. К сожалению, такие тесты в настоящее время не стандартизованы [22].

В этой ситуации приобретают особую ценность такие ГСПЧ, которые теоретически гарантируют отсутствие корреляций между параллельными потоками генерируемых чисел. Метод построения генераторов случайных чисел, основанный на автоморфизме тора, обладает таким свойством – параллельные потоки случайных чисел имеют свойство гиперболичности траекторий [23]. Построенные этим методом ГСПЧ входят в библиотеки RNGSSELIB [24] и RENGAVXLIB [25] с реализацией на архитектурах SSE (Streaming SIMD Extension) и AVX (Advanced Vector Extension), библиотеку PRAND [26] с реализацией на CUDA. Эти библиотеки содержат процедуры инициализации до 1019 параллельных потоков случайных чисел.

6. Заключение

В обзоре приведены результаты по реализации метода отжига популяции для моделирования с использованием гибридных высокопроизводительных ЭВМ. Приведены примеры успешного использования этого метода для исследования актуальных задач статистической механики. Метод отжига популяции достаточно универсальный, позволяет исследовать любые задачи, для которых можно записать статистическую сумму. Методу

свойственна параллелизуемость. Его эффективность растет с увеличением числа параллельных потоков.

Разделы 4 и обзора выполнены в рамках государственного задания, остальные разделы выполнены в рамках проекта РНФ 14-21-00158.

Список литературы

- [1] Metropolis N., and Ulam S. The Monte Carlo Method // J. Am. Stat. Ass., 1947: Vol. 44. P. 335.
- [2] M. Campbell-Kelly, W. Aspray, N. Ensmenger, and J.R. Yost Computer: A History of the Information Machine // 3rd edition (Westview Press, Boulder, 2014).
- [3] Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., Teller A.H., and Teller E. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines // J. Chem. Phys., 1952: Vol. 21. P. 1087.
- [4] D.H. Lehmer Mathematical Methods in Large-scale Computing Units // Proceedings of a Second Symposium on Large-Scale Digital Calculating Machinery, 1949, pp. 141–146. Harvard University Press, Cambridge, Mass., 1951.
- [5] G.M. Moore, Cramming More Components onto Integrated Circuits // Proceedings of the IEEE, 1998: Vol. 86. P. 82.
- [6] More Moore White Paper // International Roadmap of Devices and Systems, 2016 Edition, IEEE.
- [7] DOE Exascale Initiative // US Department of Energy, 2008.
- [8] <https://www.ornl.gov/news/ornl-launches-summit-supercomputer>
- [9] <https://www.top500.org/lists/2018/06/>
- [10] Exascale computing Project // US DOE, 2016 - <https://www.exascaleproject.org/>
- [11] R. Fujimoto. Parallel and Distributed Simulation Systems. Wiley Interscience, 2000.
- [12] D. Jefferson, Past, Present, and Future of Parallel Discrete Event Simulation // ACM-SIGSIM, Keynote of PADS-2016.
- [13] L. Ziganurova, L. Shchur, Properties of the parallel discrete event simulation algorithms on small-world communication network // this volume.
- [14] L. Shchur, L. Shchur, Parallel Discrete Event Simulation as a Paradigm for Large Scale Modeling Experiments // CEUR Workshop Proceedings, 2015: Vol. 1536. P. 107.
- [15] K. Hukushima, Y. Iba, AIP Conf. Proc., 2003: Vol. 690. P. 200.
- [16] J. Machta, Phys. Rev E, 2010: Vol. 82. P.026704.
- [17] M. Borovsky, M. Weigel, L.Y. Barash, M. Zukovic, EPJ Web of Conferences, 2016: Vol. 108. P. 02016.
- [18] F.Y. Wu, Potts model // Rev. Mod. Phys., 1982: Vol. 54. P. 235.
- [19] L.Yu. Barash, M. Weigel, L.N. Shchur, W. Janke, Exploring first-order phase transitions with population annealing // European Physical Journal - Special Topics: 2017. Vol. 226. P. 595.
- [20] H. Christiansen, M. Weigel, W. Janke, Population Annealing for Molecular Dynamics Simulations of Biopolymers, 2018: arXiv:1806.06016.
- [21] L.Yu. Barash, M. Weigel, M. Borovský, W. Janke, and L.N. Shchur, *GPU Accelerated Population Annealing Algorithm* // Comput. Phys. Commun.:2017. Vol. 220. P. 341.
- [22] P. L'Ecuyer, D. Munger, B. Oreshkin, R. Simard, Random numbers for parallel computers: Requirements and methods, with emphasis on GPUs // Mathematics and Computers in Simulation: 2017. Vol. 135. P. 3.

- [23] L.Yu. Barash, L.N. Shchur, Periodic orbits of the ensemble of Sinai-Arnold cat maps and pseudorandom number generation //Physical Review E.: 2006. Vol. 73. P. 036701.
- [24] L. Yu. Barash, L.N. Shchur, RINGSSELIB: Program library for random number generation. More generators, parallel streams of random numbers and Fortran compatibility //Computer Physics Communications: 2013. Vol. 184. P. 2367.
- [25] M.S. Guskova, L.Yu. Barash, L.N. Shchur, RINGAVXLIB: Program library for random number generation, AVX realization // *Computer Physics Communications*: 2016. Vol. 200. P. 402.
- [26] L.Yu.Barash, L.N.Shchur, PRAND: GPU accelerated parallel random number generation library: Using most reliable algorithms and applying parallelism of modern GPUs and CPUs //Comput. Phys. Commun.: 2014. Vol. 185. P. 1343.
- [27] M. Aramon, et al., Physics-Inspired Optimization for Quadratic Unconstrained Problems Using a Digital Annealer // arXiv:1806.08815.

LARGE SCALE SIMULATIONS WITH PARALLEL ANNEALING ALGORITHM

L.N. Shchur ^a, L.V. Shchur ^b

Science Center in Chernogolovka, 142432 Chernogolovka, Russia

E-mail: ^alev.shchur@gmail.com, ^blvs@chg.ru

The effective application of supercomputers does depend on the scalable algorithms which can be used on the millions of cores. In the review, we discuss the possibility of using population annealing algorithm designed for the simulations of the statistical mechanic's systems with rugged free energy landscape. We present a short review report on the present realization of the algorithm on the hybrid computing architecture combining CPU and GPGPU. The algorithm is fully scalable. We review the application of the developed realizations to several interesting problems. The algorithm can be applied to any system of statistical mechanics, described by partition function.

Keywords: large-scale simulations, hybrid computing architecture, partition function, parallel annealing

© 2018 Lev N. Shchur, Liudmila V. Shchur