Simulação de *tracking* da dinâmica dos elétrons em um acelerador síncrotron

Gustavo Ciotto Pinton - RA 117136



Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP MO644 - Introdução à Computação Paralela

26 de junho de 2017

Introdução

- Conjunto de vetores X₀^{i,j} representando estados de elétrons.
- ► Elétrons submetidos a *M* atuadores em *N* voltas.
- Simular quais vetores X₀^{i,j} atenderão a determinadas condições ao fim de N * M iterações.

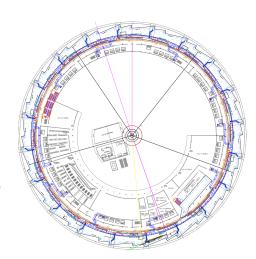


Figura: Acelerador Sirius

Programa sequencial

Profiling

- Utilização do gprof.
- Análise flat profile: quanto tempo o programa gastou em cada função e quantas vezes tal função foi chamada.
- 97.43% de todo o tempo gasto pelo programa está concentrado em apenas 6 funções, todas chamadas dentro de dynamical_search().

Tabela: Análise flat profile da execução sequencial.

% time	cum. sec.	self sec.	calls	name
28.87	2.27	2.27	100000	DynamicSearch::performOneTurn(double (&))
15.77	3.51	1.24	1200000020	std::vector <ringelement>::size() const</ringelement>
15.58	4.74	1.23	400000000	Drift::pass(double (&))
14.12	5.85	1.11	400000000	Quadrupole::pass(double (&)
11.64	6.77	0.92	200000000	Sextupole::pass(double (&)
11.45	7.67	0.90	100000000	std::vector::operator[](unsigned long)

Programa sequencial

Doacross e Doall loops

- Laços externos são doall: uma condição inicial $X_0^{m,n}$ não depende de outra $X_0^{m,p}$.
- Laços internos são doacross:
 - ▶ Volta de índice *i* necessita dos resultados que as voltas i-1, i-2, ..., 0.
 - Estado $X_m^{i,j}$ após atuador M_i necessita dos estados $X_{m-1}^{i,j}, \dots, X_0^{i,j}$.

Algorithm 1 Pseudo-código do algoritmo sequencial

```
1: function DEFAULT DYNAMICSEARCH
        for (i,j) in \mathbb{I}_x \times \mathbb{I}_v do
 2:
                                                  \triangleright Calcula condição inicial X^{i,j} em função de i e j
            X^{i,j} \leftarrow f(i,j)
 3:
 4:
             for n \leftarrow 0 to N do \triangleright Itera sobre o número de voltas (performOneTurn())
                  for m \leftarrow 0 to M do
                                                       ⊳ Itera sobre o número de atuadores (size())
 5:
                      X^{i,j} \leftarrow g_{A[m]}(X^{i,j}) \triangleright \text{Altera } X^{i,j} \text{ de acordo com atuador } A[m] \text{ (pass())}
 6:
                 end for
 7:
             end for
 8:
         end for
10: end function
```

Implementação

- ▶ Distribui-se a computação de cada condição inicial X₀^{m,n} em uma thread distinta: paralelização dos doall loops.
- Cada thread executa os doacross loops.
- Blocos de dimensões 32 x 32, visto que a quantidade máxima de threads por bloco é 1024.
- Maximizar o uso de um SM: para a NVIDIA Tesla K40c, de compute capability 3.5, o número máximo de warps por SM é 64, totalizando 2048 threads.
- Dois blocos inteiros por SM.

Implementação

Algorithm 2 Pseudo-código do kernel que é executado pela GPU

```
1: function DYNAMICSEARCHKERNEL(A, M, N, R)
        i \leftarrow blockDim.v * blockIdx.v + threadIdx.v
                                                                               ▷ Índice v da thread
 2:
                                                                               ⊳ Índice x da thread
       j \leftarrow blockDim.x * blockIdx.x + threadIdx.x
 3:
      X^{i,j} \leftarrow f(i,i)
                                             ▷ Calcula condição inicial X<sub>i,i</sub> em função de i e j
 4.
        for n \leftarrow 0 to N do
                                                                ⊳ Itera sobre o número de voltas
 5.
 6.
            for m \leftarrow 0 to M do
                                                           Itera sobre o número de atuadores
                X^{i,j} \leftarrow g_{A[m]}(X^{i,j})
                                                     \triangleright Altera X^{i,j} de acordo com atuador A[m]
 7.
            end for
 8.
        end for
 9.
        R[i,j] \leftarrow X^{i,j}
                                                                Armazena resultado calculado
10.
11: end function
```

Resultados

- ► Testes no parsusy: Intel(R) Xeon(R) E5-2620 v4 e NVIDIA Tesla K40c.
- ► *Flags* gcc: -03, -Wall, -std=c++11, -mfpmath=sse **e** -sse2.
- Duas implementações paralelas realizadas: uma com suporte a instruções FMA (um arredondamento) e a outra compatível com a aplicação sequencial (dois arredondamentos).

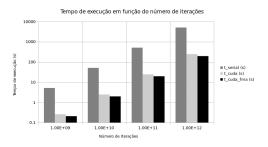


Figura: Tempos de execução para diversos valores de N

Resultados

Em média, a solução que utiliza FMA tem um speedup de 26.821, enquanto que a tradicional, 20.622.

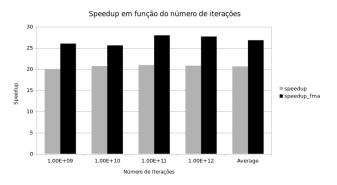


Figura: Speedup para diversos valores de N

Dificuldades

- It is not allowed to pass as an argument to a __global__ function an object of a class derived from virtual base classes. [NVIDIA. C/C++ language support]
- A tabela de funções virtuais é colocada em uma posição de memória constante ou global pelo compilador nvcc.
- ▶ GPUs com *compute capability* \geq 2.0: operação denominada *fused-multiply-add* (*FMA*) em pontos flutuantes de precisão simples e dupla.
- Executar uma multiplicação e uma adição, isto é, computar X * Y + Z, através de uma única instrução.
- Ganho em performance por executar duas operações de uma única vez.
- Realiza um arredondamento a menos que uma operação de multiplicação seguida por uma de adição.
- $rn(X*Y+Z) \neq rn(rn(X*Y)+Z).$

Referências

- Monniaux, D. (2008). The pitfalls of verifying floating-point computations. ACM Transactions on Programming Languages and Systems (TOPLAS).
- ► NVIDIA. C/C++ language support. http://docs.nvidia.com/cuda/cuda-c-programming-guide/index.html#virtual-functions.
- NVIDIA. Compute capabilities. http://docs.nvidia.com/cuda/cuda-c-programming-guide/ index.html#compute-capabilities.
- ► NVIDIA. Cuda C programming guide. http: //docs.nvidia.com/pdf/CUDA_C_Programming_Guide.pdf.
- Whitehead, N. and Fit-Florea, A. (2011). Precision performance: Floating point and IEEE 754 compliance for NVIDA GPUs. nVidia technical white paper.