

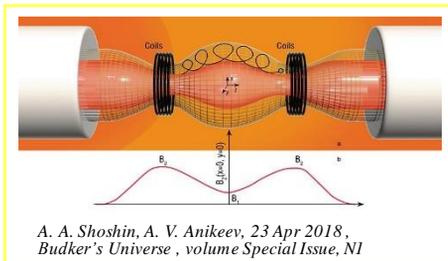
AVX-512 Optimization of Plasma Physics Solver

Igor Chernykh, Marina Boronina

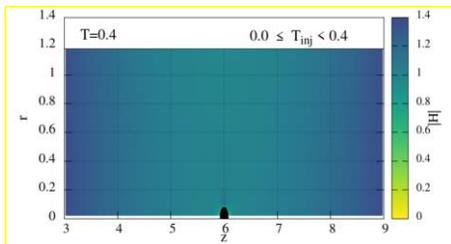
Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics SB RAS

This work was supported by RSF grant No. 19-71-20026

Введение



В начальный момент магнитное поле в камере ловушки $V=(0,0,V_0)$. Камера заполнена водородной фоновой плазмой с плотностью n_0 . Источник нейтральных частиц расположен внутри области. Быстрая ионизация обеспечивает инжекцию ионов и электронов, которые взаимодействуют с фоновой плазмой.



Теоретически, эволюция системы может привести к образованию насыщенного частицами стационарного диамагнитного «пузыря» и соответствующего удерживающего плазму магнитного поля [А. Беклемишев, 2016]. Цель – исследование параметров образования диамагнитного пузыря.

На рисунке представлены расчеты по двумерной модели с аксиальной симметрией в цилиндре.

Уравнения

Кинетическое уравнение Власова

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial f_i}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}_i}{m_i} \frac{\partial f_i}{\partial \vec{v}} = 0$$

$$\vec{F}_i = e \left(\vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{v}, \vec{B}] \right) + R_i$$

$$n_i(\vec{r}) = \int f_i(t, \vec{r}, \vec{v}) d\vec{v}$$

$$\vec{V}_i(\vec{r}) = \frac{1}{n_i(\vec{r})} \int \vec{v} f_i(t, \vec{r}, \vec{v}) d\vec{v}$$

МГД уравнения

$$-e\vec{E} - \frac{e}{c} [\vec{V}_e, \vec{B}] - \frac{\nabla p_e}{n_e} + \vec{R}_e = m_e \frac{d\vec{V}}{dt}$$

$$\vec{R}_e = -m_e \frac{\vec{V}_e - \vec{V}_i}{\tau_{ei}}$$

Уравнения Максвелла

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \text{rot} \vec{B} - \frac{4\pi}{c} \vec{j}$$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\text{rot} \vec{E}$$

$$\text{div} \vec{E} = 4\pi \rho$$

$$\text{div} \vec{B} = 0$$

$$n_i = n_e$$

$$R_i = -R_e$$

$$\vec{j} = e(n_i \vec{V}_i - n_e \vec{V}_e)$$

$$\rho = e(n_i - n_e)$$

Уравнения переноса тепла

$$n_e \left(\frac{\partial T_e}{\partial t} + (\vec{V}_e \nabla) T_e \right) = (\gamma - 1) (Q_e - \text{div} \vec{q}_e - p_e \text{div} \vec{V}_e)$$

$$Q_e = \frac{j^2}{\sigma}$$

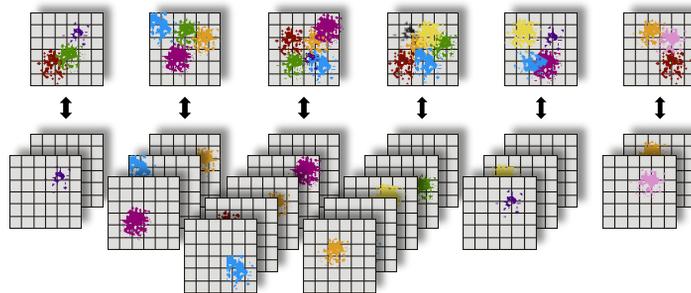
$$\vec{q}_e = -k \nabla T_e$$

Уравнение состояния

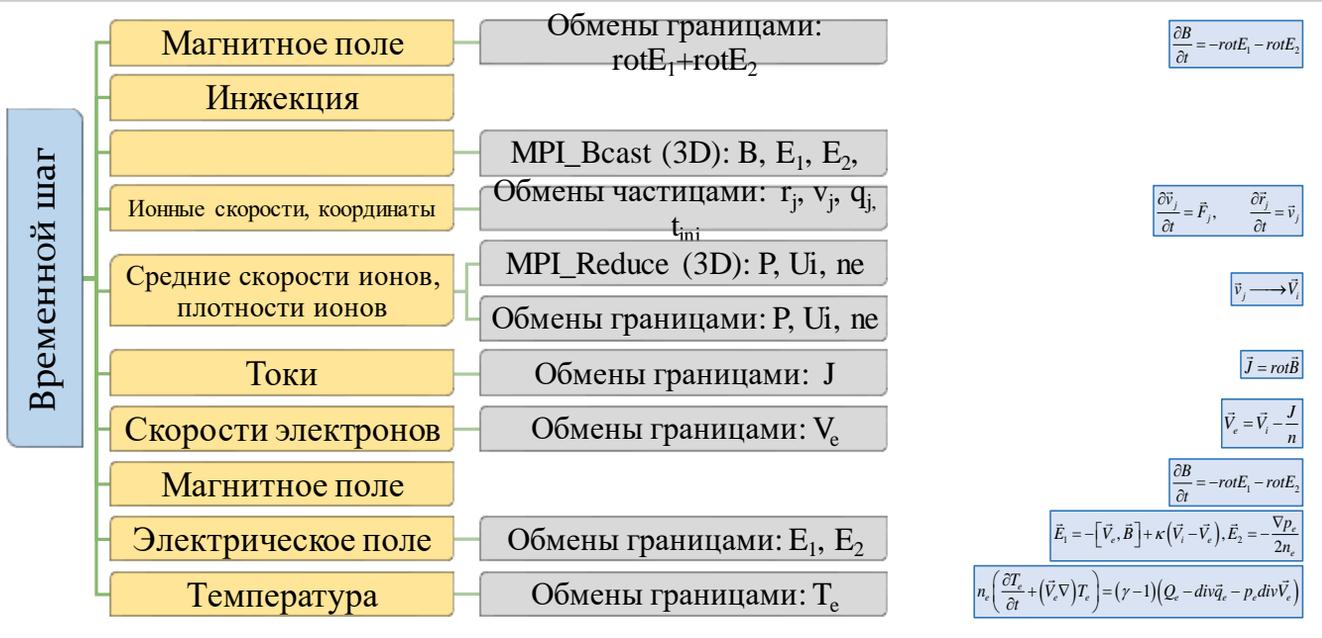
$$p_e = n_e T_e$$

Подходы

- ✓ Декартовы координаты
- ✓ Гибридная модель: ионы описываются кинетически, электроны – МГД
- ✓ Метод частиц-в-ячейках
- ✓ Смешанная декомпозиция (область + частицы)
- ✓ Векторизуемые циклы для движения частиц и расчета плотностей частиц



Один временной шаг

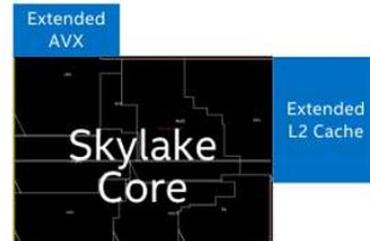
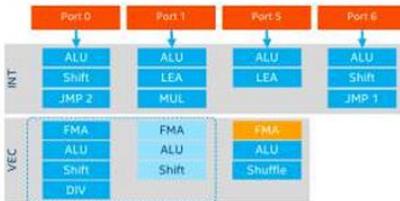


Векторизация

Ядро Skylake-SP

Ядро Skylake-SP построено на базе ядра Skylake с добавлением особенностей для дата-центров

- Intel AVX-512, реализованные для портов 0 и 1 объединены в единое 512-битное исполнительное устройство;
- порт 5 расширен до полноценного 512-го битного FMA снаружи ядра;
- пропускная способность L1-D load/store повышена до 2x64B load и 1x64B store;
- дополнительный кеш 768KB добавлен снаружи ядра



ядро Skylake-SP: оптимизировано для дата-центров

Векторизация

Эйлеров этап векторизуется легко, но не трудоемко:

$$\frac{B_{x i-\frac{1}{2}, l, k}^m - B_{x i-\frac{1}{2}, l, k}^{m-\frac{1}{2}}}{\tau/2} = -(\text{curl} \vec{E}_1^m)_x - (\text{curl} \vec{E}_2^m)_x$$

$$(\text{curl} \vec{E}_2^m)_x = -\frac{1}{h_y h_z n_{ilk}} G_{xilk}^m$$

$$G_{xilk} = \left[\left(T_{i-\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}} - T_{i-\frac{1}{2}, l-\frac{1}{2}, k-\frac{1}{2}} \right) \left(n_{i-\frac{1}{2}, l-\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}} - n_{i-\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2}, k-\frac{1}{2}} \right) - \left(n_{i-\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}} - n_{i-\frac{1}{2}, l-\frac{1}{2}, k-\frac{1}{2}} \right) \left(T_{i-\frac{1}{2}, l-\frac{1}{2}, k+\frac{1}{2}} - T_{i-\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2}, k-\frac{1}{2}} \right) \right]$$

do i=1, Imax

do l=1, Lmax-1

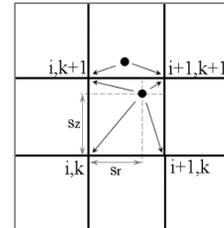
do k=1, Kmax-1

$$\begin{aligned} \text{Gn\% } x(i,l,k) = & ((T(i,l+1,k+1) - T(i,l,k)) * (n(i,l,k+1) - n(i,l+1,k)) - \\ & (n(i,l+1,k+1) - n(i,l,k)) * ((T(i,l,k+1) - T(i,l+1,k)))) / \\ & (n(i,l,k) + n(i,l+1,k) + n(i,l,k+1) + n(i,l+1,k+1)) \end{aligned}$$

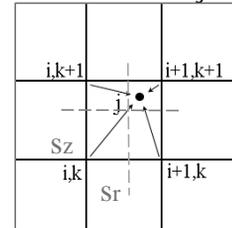
Время счета, сек

Динамика частиц	215	46%
Плотности	237	51%
Полное время	463	

Плотность



Сила, действующая на частицу



Сетка - частицы

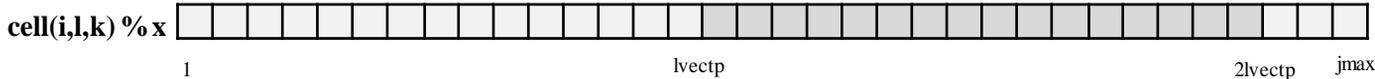
теперь частицы привязаны к ячейке `cell(i,l,k)`

`cell(i,l,k) % jmax` – сколько в ячейке частиц

`hole i,l,k % j` – номера вылетевших из ячейки

`in i,l,k % x(j), y(j)...` – их данные

```
do j=1, jmax
  dx(j)=...
  dy(j)=...
  dz(j)=...
```



do k=1, Kmax

do l=1, Lmax

do i=1, Imax

do j=1, cell(i,l,k)%jmax

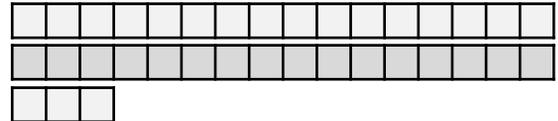
- вычисление пачками скоростей и координат
- граничные условия
- влетевшие / вылетевшие: `Nin`, `Nout`, `hole`, `in`
- обмены частицами
- сортировка: удаление вылетевших и вставка влетевших частиц с учетом инжекции на следующем шаге.

НО: Cache L1

Cascade Lake

data 32kb

Поэтому:



```
DO jpack=1, jmax, lvectp
  DO jlloc=1, MIN(lvectp, jmax - jpack + 1)
    j = jpack+jlloc-1
    dx(jlloc)=...
    dy(jlloc)=...
    dz(jlloc)=...
```

Векторизация AVX512

Листинг 10. Пример цикла с использованием свертки над массивом.

```
1 double sum = 0.0;
2
3 for (int i = 0; i < N; i++)
4 {
5     sum += A[i];
6     sum /= 2.0;
7 }
```

Листинг 11. Пример псевдокода преобразованного цикла из листинга 10 для векторизации.

```
1 double sum = 0.0;
2
3 for (int i = 0; i < N; i += 8)
4 {
5     __m512d v = _mm512_set_pd(1.0 / 256.0, 1.0 / 128.0,
6                             1.0 / 64.0, 1.0 / 32.0,
7                             1.0 / 16.0, 1.0 / 8.0,
8                             1.0 / 4.0, 1.0 / 2.0);
9     __m512d z = _mm512_mask_loadu_pd(_mm512_setzero_pd(),
10                                    0xFF, &a[i]);
11
12     z = _mm512_mask_mul_pd(z, 0xFF, z, v);
13
14     sum /= 256.0;
15     sum += _mm512_reduce_add_pd(z);
16 }
```

Векторизация AVX512

```
257      jEx(jloc) = sz(jloc)*( sy(jloc)*( sz(jloc)*cEx(1,1,1) + dz(jloc)*cEx(1,1,2) )
258 *      +      dy(jloc)*( sz(jloc)*cEx(1,2,1) + dz(jloc)*cEx(1,2,2) ))
259 *      + dx(jloc)*( sy(jloc)*( sz(jloc)*cEx(2,1,1) + dz(jloc)*cEx(2,1,2) )
260 *      +      dy(jloc)*( sz(jloc)*cEx(2,2,1) + dz(jloc)*cEx(2,2,2) ))
```

Module: cloud3dm.out!0x462598

Address	Lin.	
0x462740	252	vfmadd231pd -0x7f0(%rbp), %zmm10, %k0, %zmm10
0x462755	254	vfmadd213pd %zmm7, %zmm8, %k0, %zmm31
0x46275b	260	vmovupsz -0x7f0(%rbp), %k0, %zmm7
0x462765	257	vfmadd231pd %zmm10, %zmm19, %k0, %zmm9
0x46276b	252	vfmadd213pd %zmm3, %zmm8, %k0, %zmm30
0x462771	250	vfmadd231pd %zmm10, %zmm19, %k0, %zmm9

[loop in move_packj at push.f:221]

Vectorized (Body) AVX512; processes Float32; Float64 data type(s)

Performance: **10.951** GFLOPS

Self Time: **12.296** s

Self Elapsed Time: **12.296** s

Total Time: **12.296** s

Total Elapsed Time: **12.296** s

Self Memory Traffic: **396.151** GB

L1 Arithmetic Intensity: **0.34** FLOP/Byte

[loop in move_packj at push.f:221]

Vectorized (Body) AVX512; processes Float32; Float64 data type(s)

Performance: **12.19** GFLOPS

Self Time: **11.046** s

Self Elapsed Time: **11.046** s

Total Time: **11.046** s

Total Elapsed Time: **11.046** s

Self Memory Traffic: **396.151** GB

L1 Arithmetic Intensity: **0.34** FLOP/Byte

Производительность

Project Navigator

- ConsoleApplication1
 - r000
 - r001
 - r002
 - r003

Performance Snapshot

Analysis Configuration | Collection Log | Summary

Choose your next analysis type

Select a highlighted recommendation based on your performance snapshot.

- ALGORITHM**
 - Hotspots
 - Anomaly Detection (preview)
 - Memory Consumption
- PARALLELISM**
 - Threading (47.8%)
 - IPC Performance Characterization (100.0%)
- ACCELERATORS**
 - GPU Offload
 - GPU Compute/Media Hotspots (preview)
 - GPU/FPGA Interaction
- MICROARCHITECTURE**
 - Microarchitecture Exploration (11.5%)
 - Memory Access (52.6%)
- I/O**
 - Input and Output
- PLATFORM ANALYSES**
 - System Overview
 - GPU Rendering (preview)

Collection and Platform Info

This section provides information about this collection, including result set size and collection platform data.

Application Command Line: `./assu3dm.out`

Operating System: 3.10.0-1062.el7.x86_64 NAME="CentOS Linux" VERSION="7" (Core) ID="rhel" fedora" VERSION_ID="7" PRETTY_NAME="CentOS Linux 7 (Core)" ANSI_COLOR="31" CPE_NAME="/cpo:/o/centos/centos:7" HOME_URL="https://www.centos.org/" BUG_REPORT_URL="https://bug.centos.org/" CENTOS_MANTISBT_PROJECT="CentOS" CENTOS_MANTISBT_PROJECT_VERSION="7" REDHAT_SUPPORT_PRODUCT="centos" REDHAT_SUPPORT_PRODUCT_VERSION="7"

MPI Process Rank: 18

Computer Name: r04p002

Result Size: 19.8 MB

Collection start time: 08:42:40 28/01/2025 UTC

Collection stop time: 09:44:44 28/01/2025 UTC

Collector Type: Driverless Perf per-process counting

Finalization mode: Fast. If the number of collected samples exceeds the threshold, this mode limits the number of processed samples to speed up post-processing.

- CPU**
 - Name: Intel(R) Xeon(R) Processor code named Cascadelake
 - Frequency: 3.0 GHz
 - Logical CPU Count: 65
 - LLC size: 37.5 MB
- Cache Allocation Technology**
 - Level 2 capability: not detected
 - Level 3 capability: available

Elapsed Time: 117.479s

- IPC: 0.324
- SP GFLOPS: 0.000
- DP GFLOPS: 88.851
- x87 GFLOPS: 0.000
- Average CPU Frequency: 3.2 GHz

Logical Core Utilization: 47.8% (45,928 out of 96)

Physical Core Utilization: 93.1% (44,719 out of 48)

Microarchitecture Usage: 11.5% of Pipeline Slots

- Retiring: 11.5% of Pipeline Slots
- Front-End Bound: 1.1% of Pipeline Slots
- Back-End Bound: 0.2% of Pipeline Slots
- Memory Bound: 52.6% of Pipeline Slots
 - L1 Bound: 4.5% of Clockticks
 - L2 Bound: 0.1% of Clockticks
 - L3 Bound: 1.3% of Clockticks
 - DRAM Bound: 40.5% of Clockticks
- Memory Bandwidth: 42.1% of Clockticks
- Memory Latency: 11.4% of Clockticks
 - Local DRAM: 78.9% of Clockticks
 - Remote DRAM: 0.1% of Clockticks
 - Remote Cache: 0.1% of Clockticks
- Store Bound: 15.7% of Clockticks
- Core Bound: 34.6% of Pipeline Slots

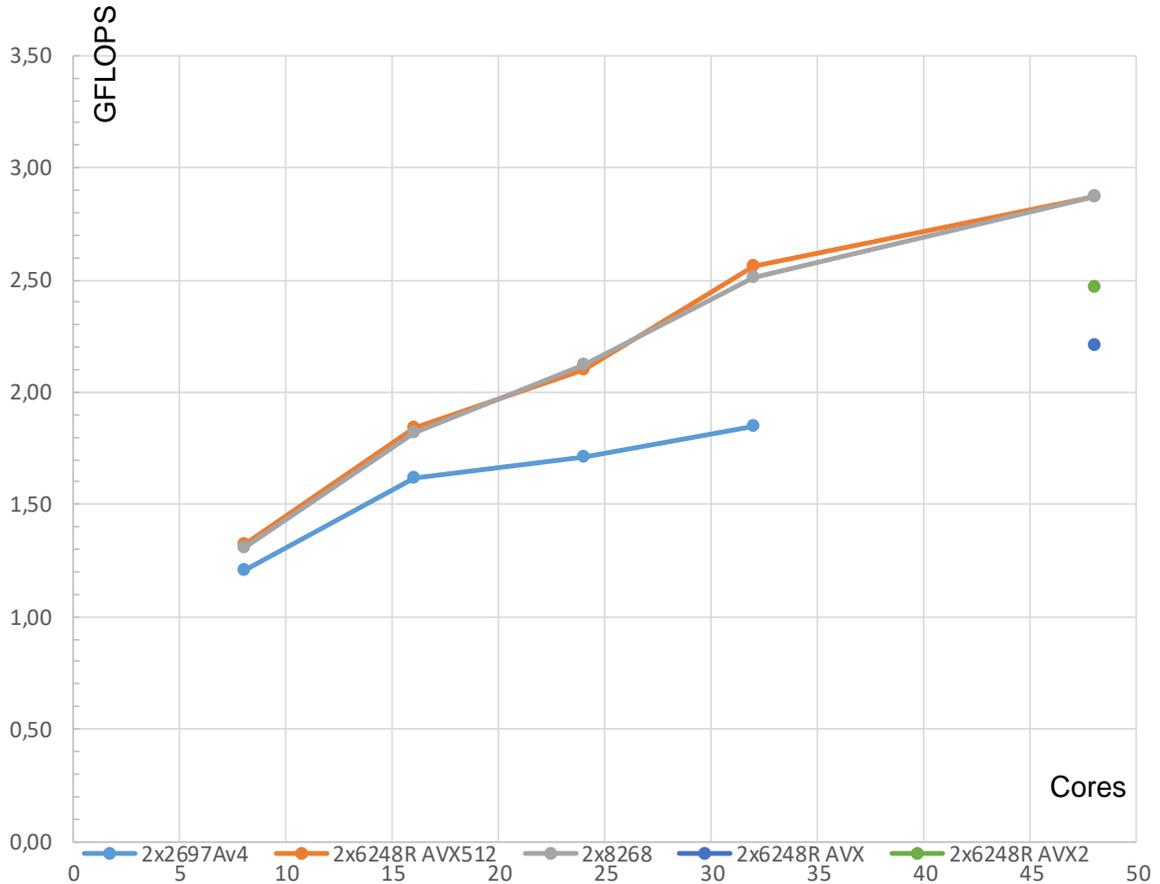
Memory Bound: 52.6% of Pipeline Slots

- Cache Bound: 5.9% of Clockticks
- DRAM Bound: 40.5% of Clockticks
- NUMA % of Remote Accesses: 0.3%

Vectorization: 89.7% of Packed FP Operations

- Instruction Mix:
 - SP FLOPs: 0.0% of uOps
 - Packed: 0.0% from SP FP
 - Scalar: 100.0% from SP FP
 - DP FLOPs: 20.8% of uOps
 - Packed: 89.7% from DP FP
 - 128-bit: 12.2% from DP FP
 - 256-bit: 0.0% from DP FP
 - 512-bit: 77.5% from DP FP
 - Scalar: 10.3% from DP FP
 - x87 FLOPs: 0.0% of uOps
 - Non-FP: 79.2% of uOps
- FP Arith/Mem Wt Inst. Ratio: 0.914
- FP Arith/Mem Wt Inst. Ratio: 2.476

Производительность



Спасибо за внимание

Численное моделирование

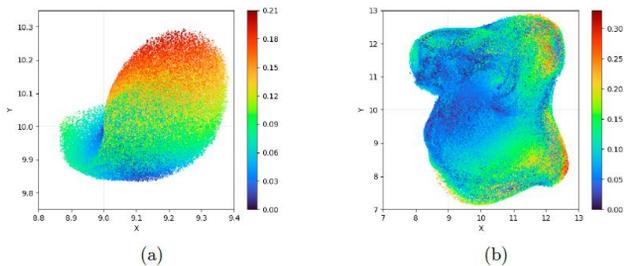


Fig. 3. The injected particle coordinates (x, y) at $t = 3$ (a) and $t = 30$ (b).

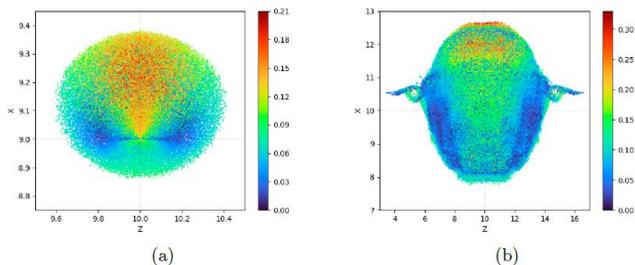


Fig. 4. The injected particle coordinates (z, x) at $t = 3$ (a) and $t = 30$ (b).

Численное моделирование

The background plasma changes its start uniform distribution with $n = 1$: the background ions move out from the central region and form a thin high-density border of the bubble (Figure 5(a)). Figure 5(b) demonstrates the repelled magnetic field from the central region, occupied with the injected bunch.

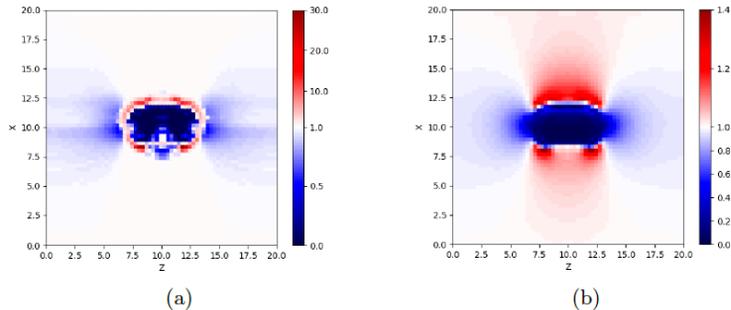


Fig. 5. The density of the background ions n_{bg} (a) and the the absolute value of the magnetic field (b) in the central section $x = L_x/2$, $t = 30$.