



NATIONAL RESEARCH
UNIVERSITY

Применимость процессорной архитектуры Epirhanу для реализации параллельного алгоритма классической молекулярной динамики

Всеволод Никольский^{1,2}, Владимир Стегайлов^{1,2}

¹ Объединенный институт высоких температур РАН

² Высшая школа экономики

E-mail: vnikolskiy@hse.ru

Web: samma.hse.ru



National Research University Higher School of Economics Intl Lab



Supercomputer Atomistic Modelling and Multi-scale Analysis



NATIONAL RESEARCH
UNIVERSITY

Some Likely Exascale Architectures

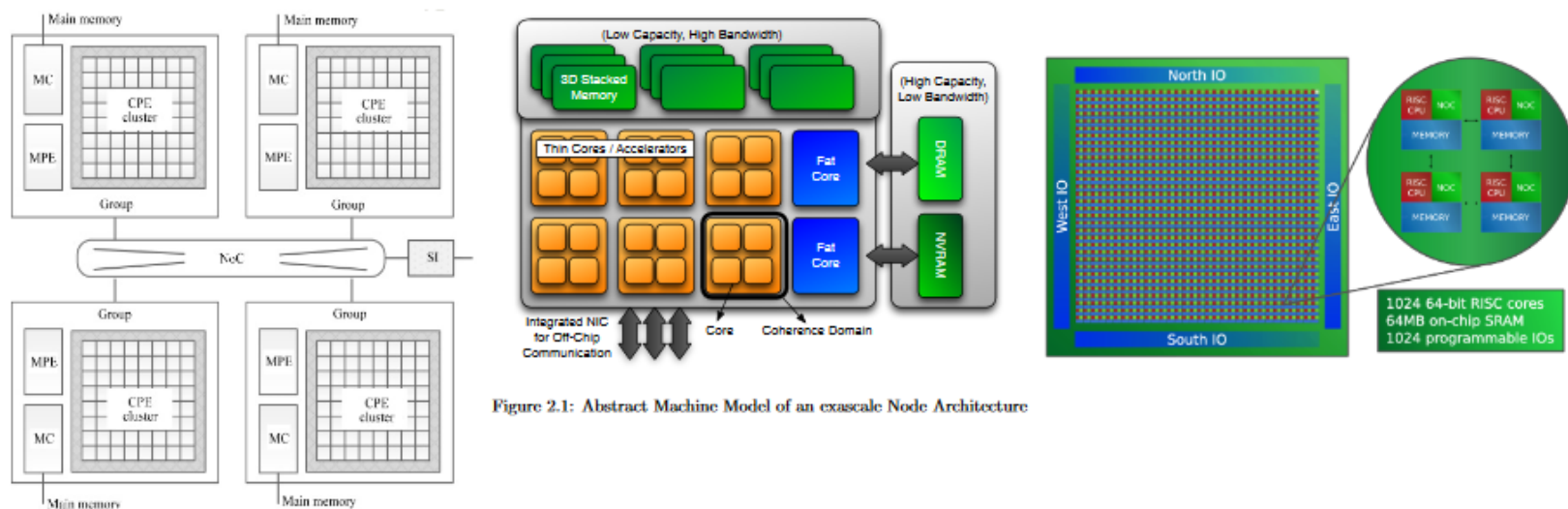


Figure 2.1: Abstract Machine Model of an exascale Node Architecture

Sunway TaihuLight

- Heterogeneous processors (MPE, CPE)
- No data cache

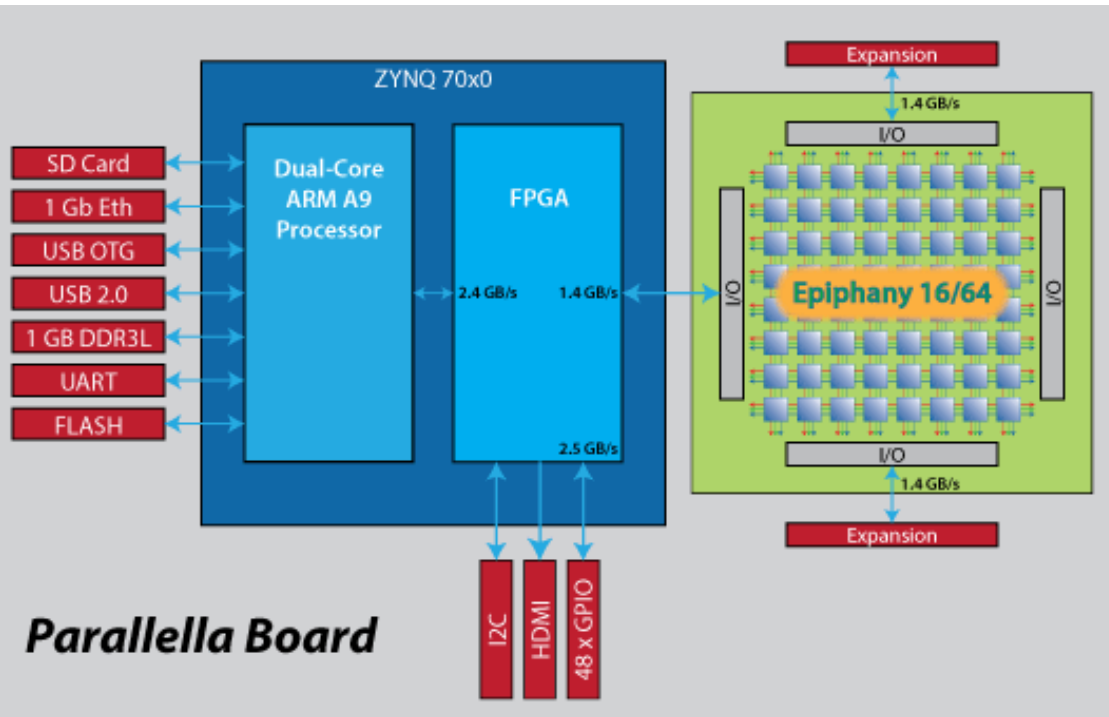
From “Abstract Machine Models and Proxy Architectures for Exascale Computing Rev 1.1,” J Ang et al

Adapteva Epiphany-V

- 1024 RISC processors
- 32x32 mesh
- Very high power efficiency

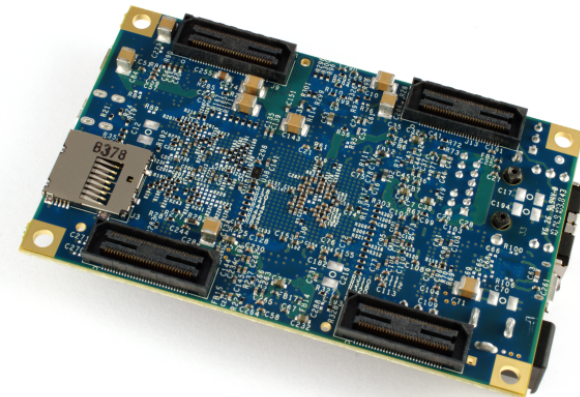
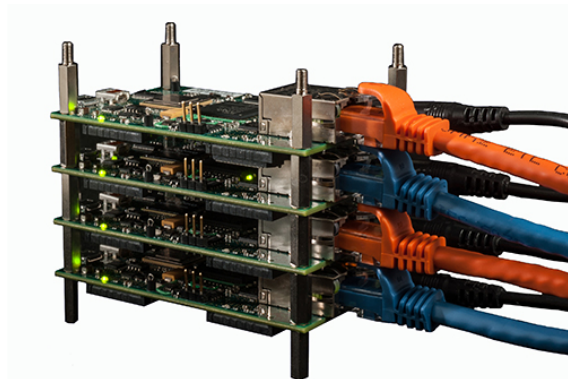
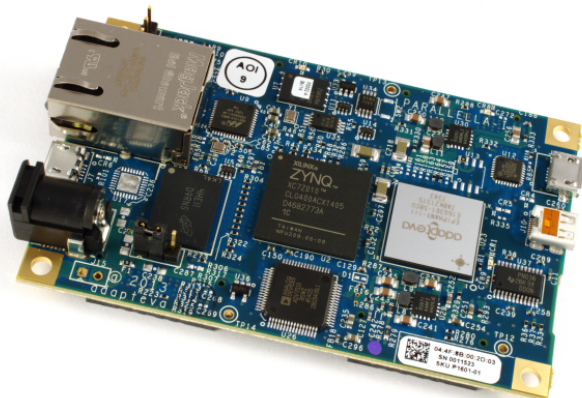
William D. Gropp, National Center for Supercomputing Applications
**12th INTERNATIONAL CONFERENCE ON
 PARALLEL PROCESSING AND APPLIED MATHEMATICS**
 Lublin, Poland, September 10-13, 2017

Parallella (2014)

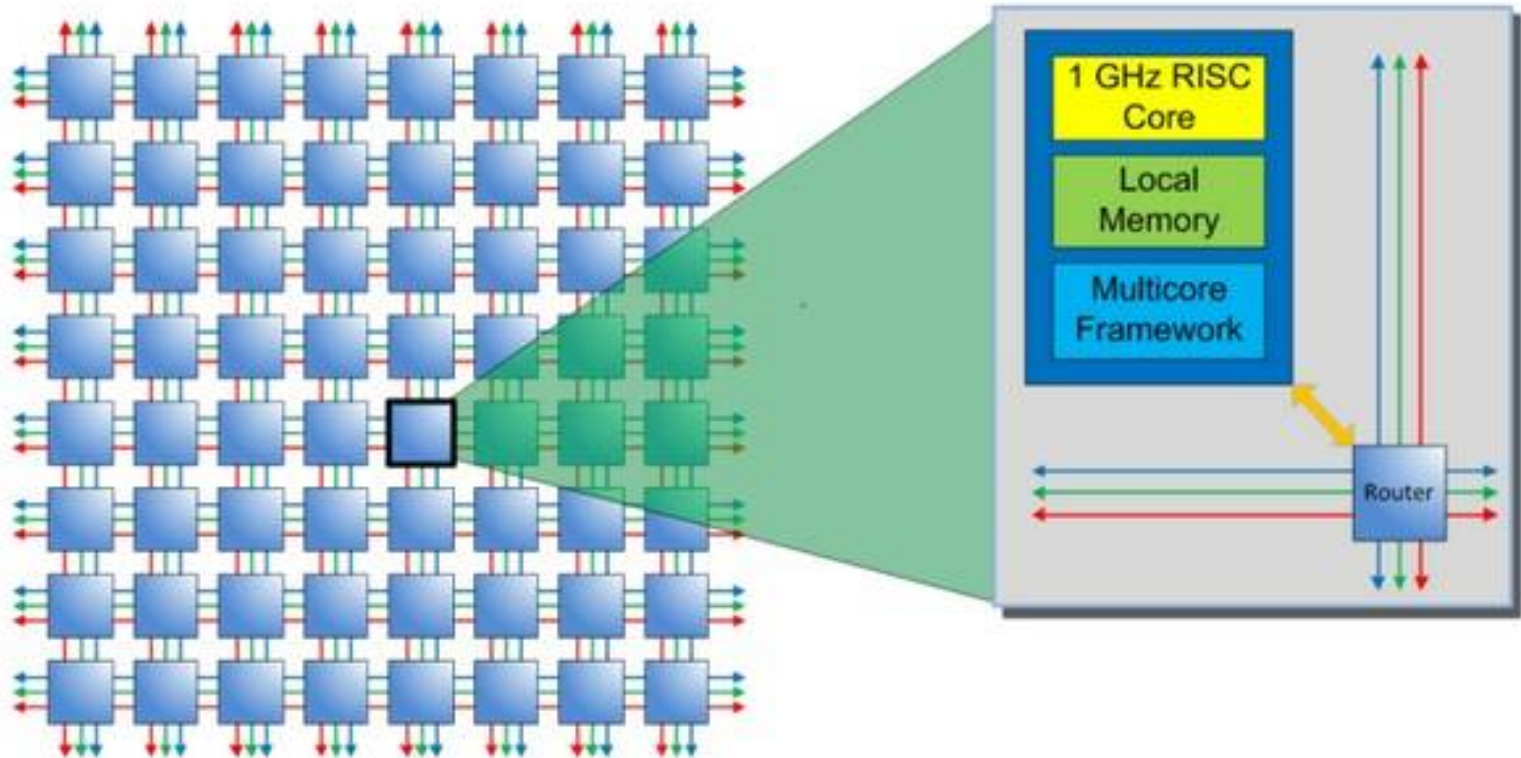


18-core minicomputer

- 5W
- 16-core Epiphany RISC SOC
- Zynq SOC (FPGA + ARM A9)
- Gigabit Ethernet
- 1GB SDRAM
- Open source design files
- Runs Linux



Epiphany

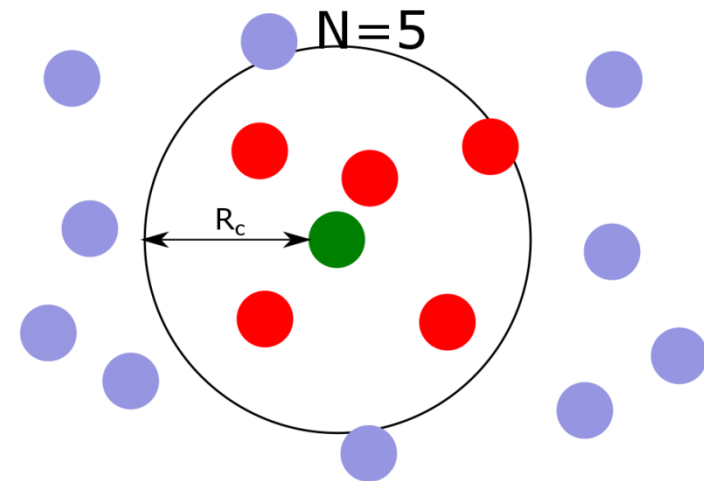
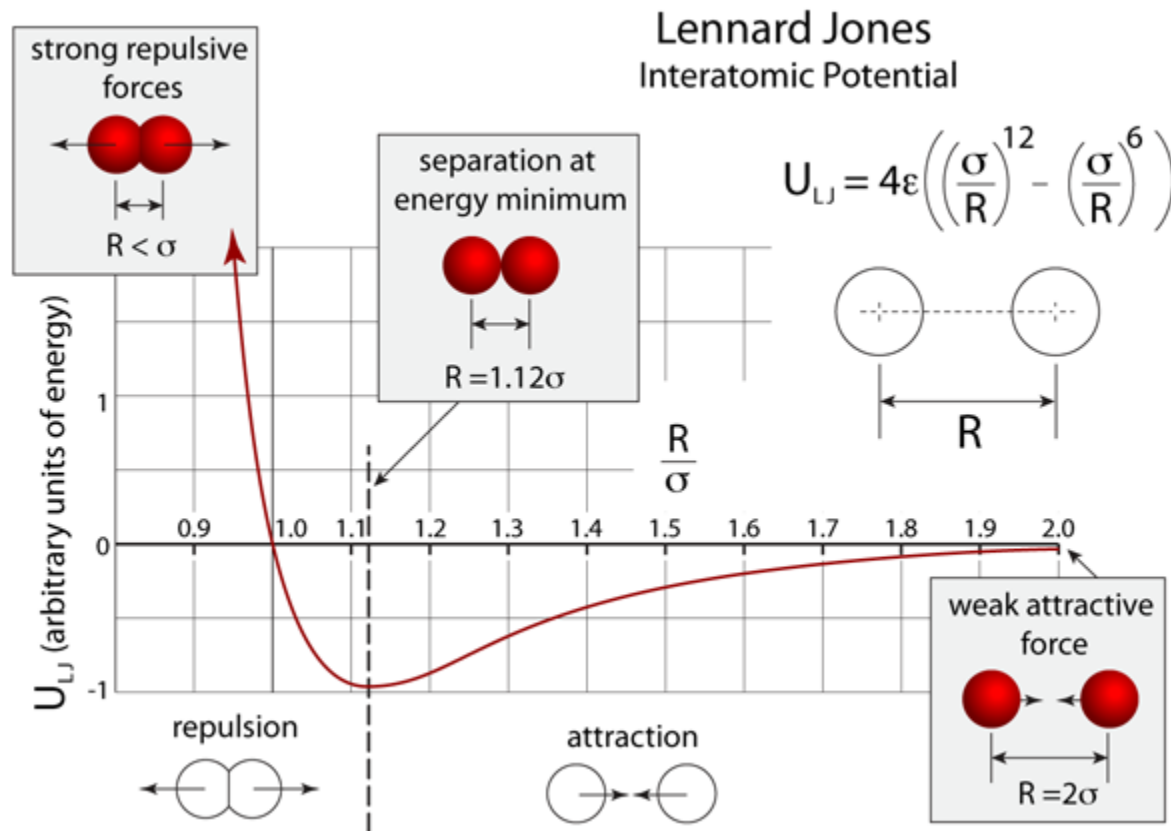


Coprocessor to
ARM/Intel Host

C/C++/OpenCL
Programmable

Scales to 1000's of
cores on a chip

Математическая модель: потенциал Леннарда-Джонса

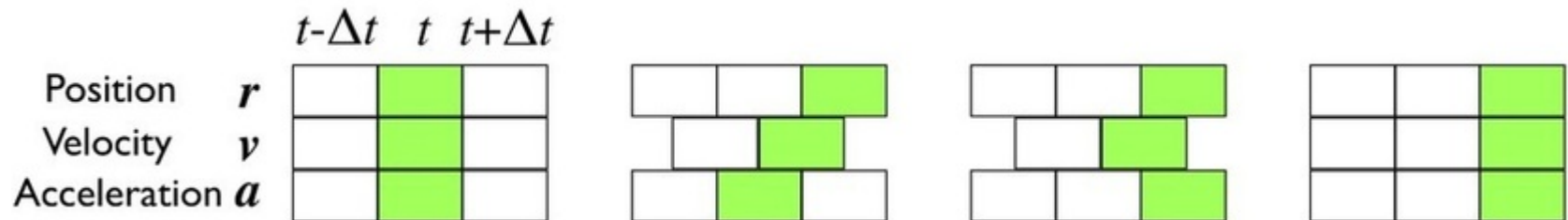


Математическая модель: схема Верле в скоростной форме

$$\mathbf{v}_i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{\mathbf{F}_i(t)\Delta t}{m_i} \frac{1}{2},$$

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right)\Delta t,$$

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{\mathbf{F}_i(t + \Delta t)\Delta t}{m_i} \frac{1}{2}.$$



Базовый алгоритм МД

Arrays of Structures:

```
typedef struct {  
    float x,y,z;  
    float mass;  
} Particle;
```

```
typedef struct {  
    float vx, vy, vz;  
    float ax, ay, az;  
} ParticleV;
```

Setup Positions

Periodic Boundary Conditions

Compute Forces

loop over N time steps:

Verlet Initial Integrate

if (Neighbor Decide)

Periodic Boundary Conditions

Neighbor Build

Clear Forces

Compute Forces

Verlet Final Integrate

Параллелизм алгоритма

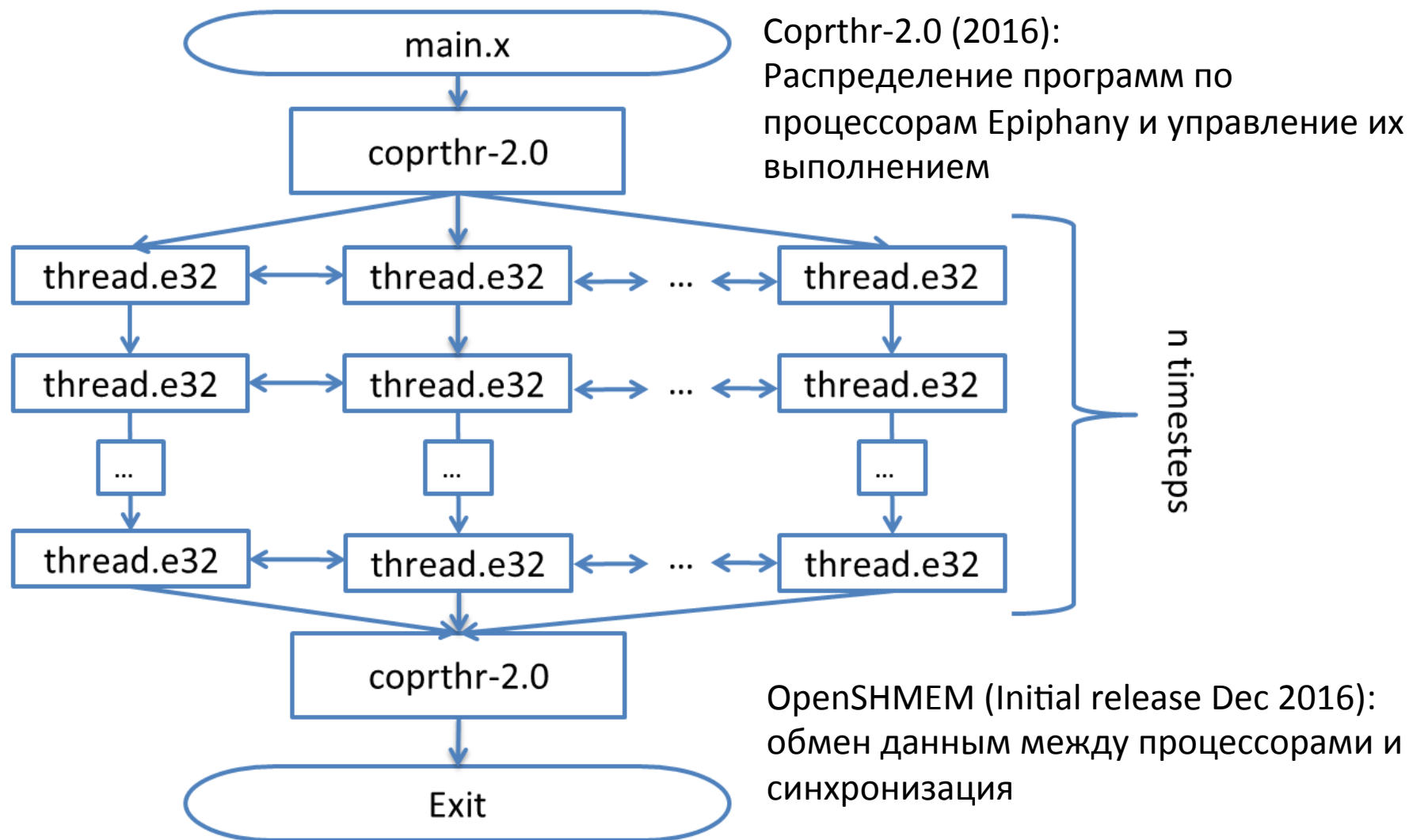
Декомпозиция по частицам

- Каждый из P процессоров получает N/P частиц (расположение в пространстве не учитывается)
- Процессор вычисляет все взаимодействия между «своими» частицами
- На каждом шаге происходит коммуникация «каждый-с-каждым», чтобы получить координаты частиц от остальных процессоров и вычислить их вклад во взаимодействие

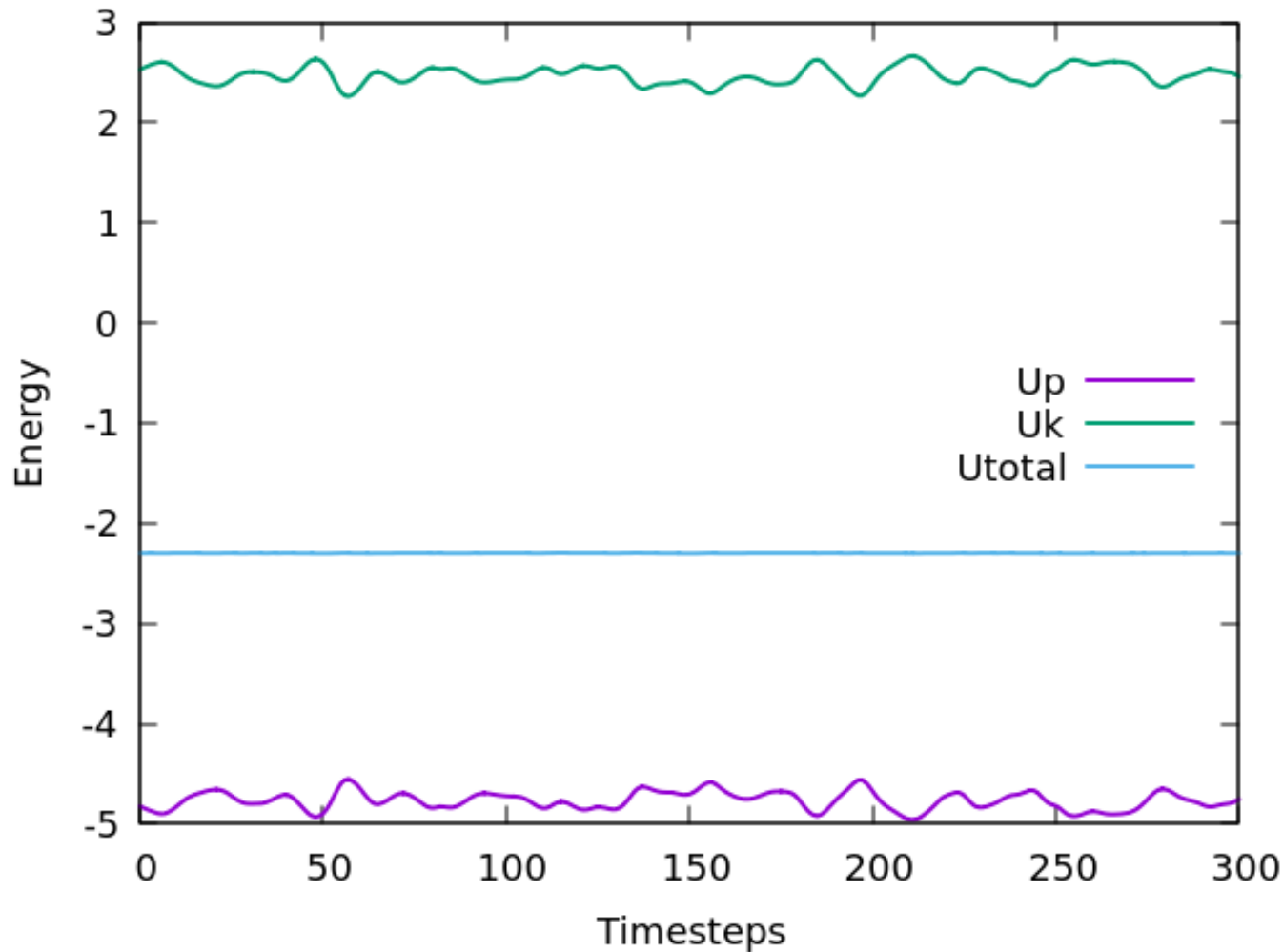
Декомпозиция по пространству

- Вычислительный объем разбивается на P трехмерных блоков
- Каждый процессор обрабатывает частицы, попадающие в соответствующий блок
- По мере движения атомы переназначаются новыми процессорам
- Обмены локальные по своей природе, разбиение пространства может быть отображено на сеть Eriphany

Структура программы



Верификация: сохранение полной энергии



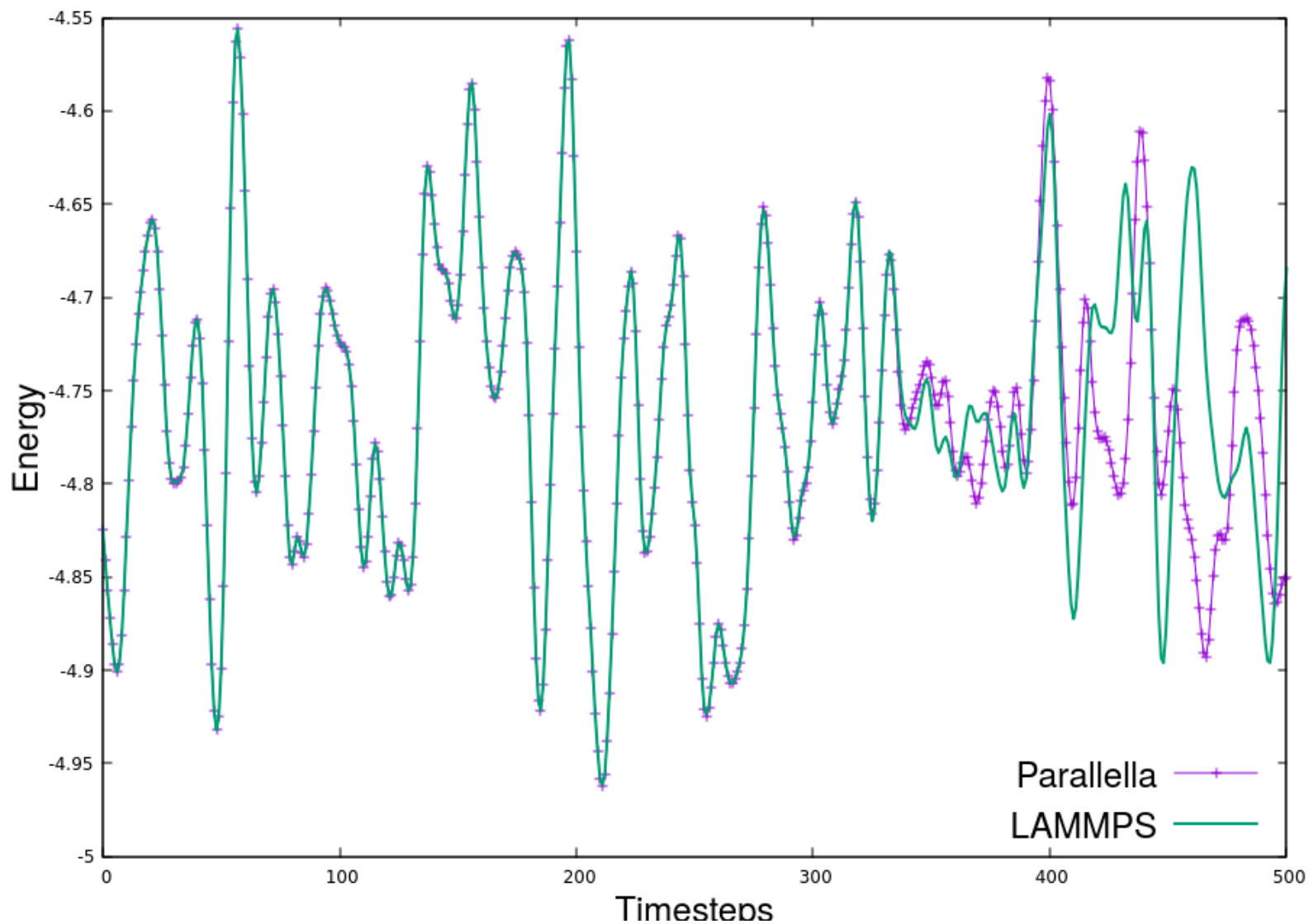
$$U_k = \sum_i \frac{m_i v_i^2}{2},$$

$$U_p = \sum_{i < j} U_p(\vec{r}_i, \vec{r}_j),$$

$$U_{total} = U_p + U_k.$$

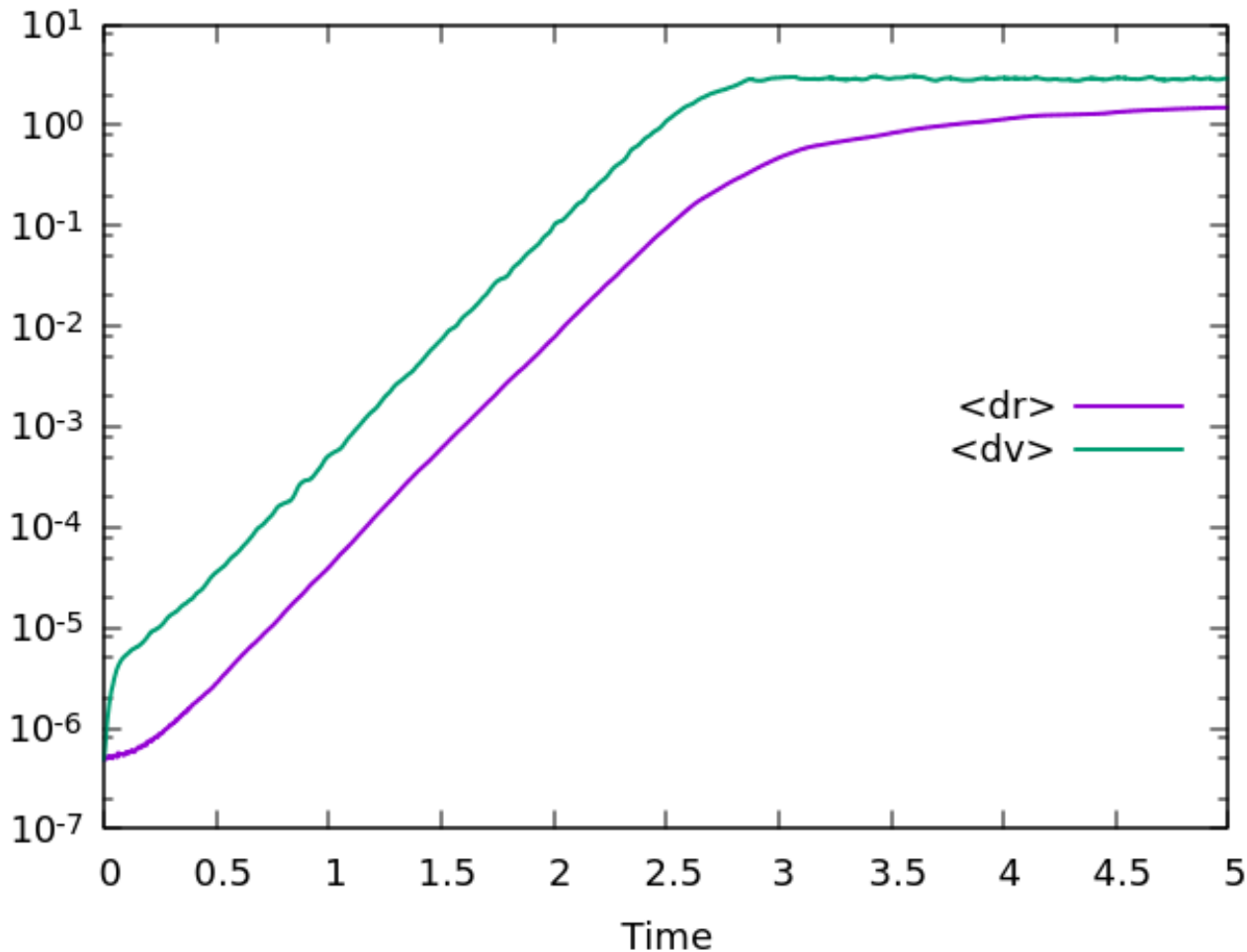
Верификация: сопоставление энергии

Up



Верификация: сопоставление траекторий

$$\langle r \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |r_i^{lammmps} - r_i^{parallella}|, \quad \langle v \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |v_i^{lammmps} - v_i^{parallella}|$$

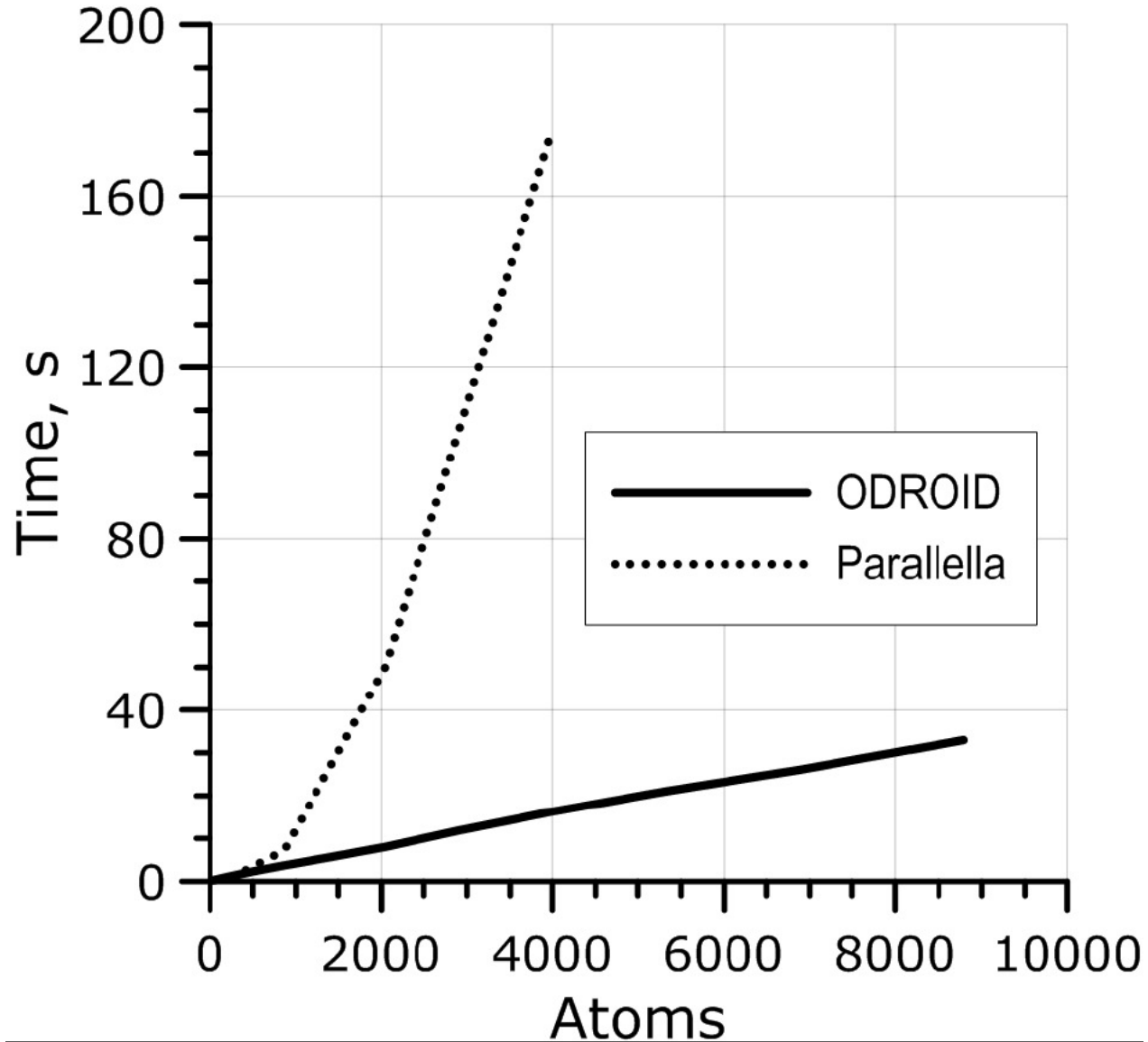


$r^{lammmps}, v^{lammmps}$ —

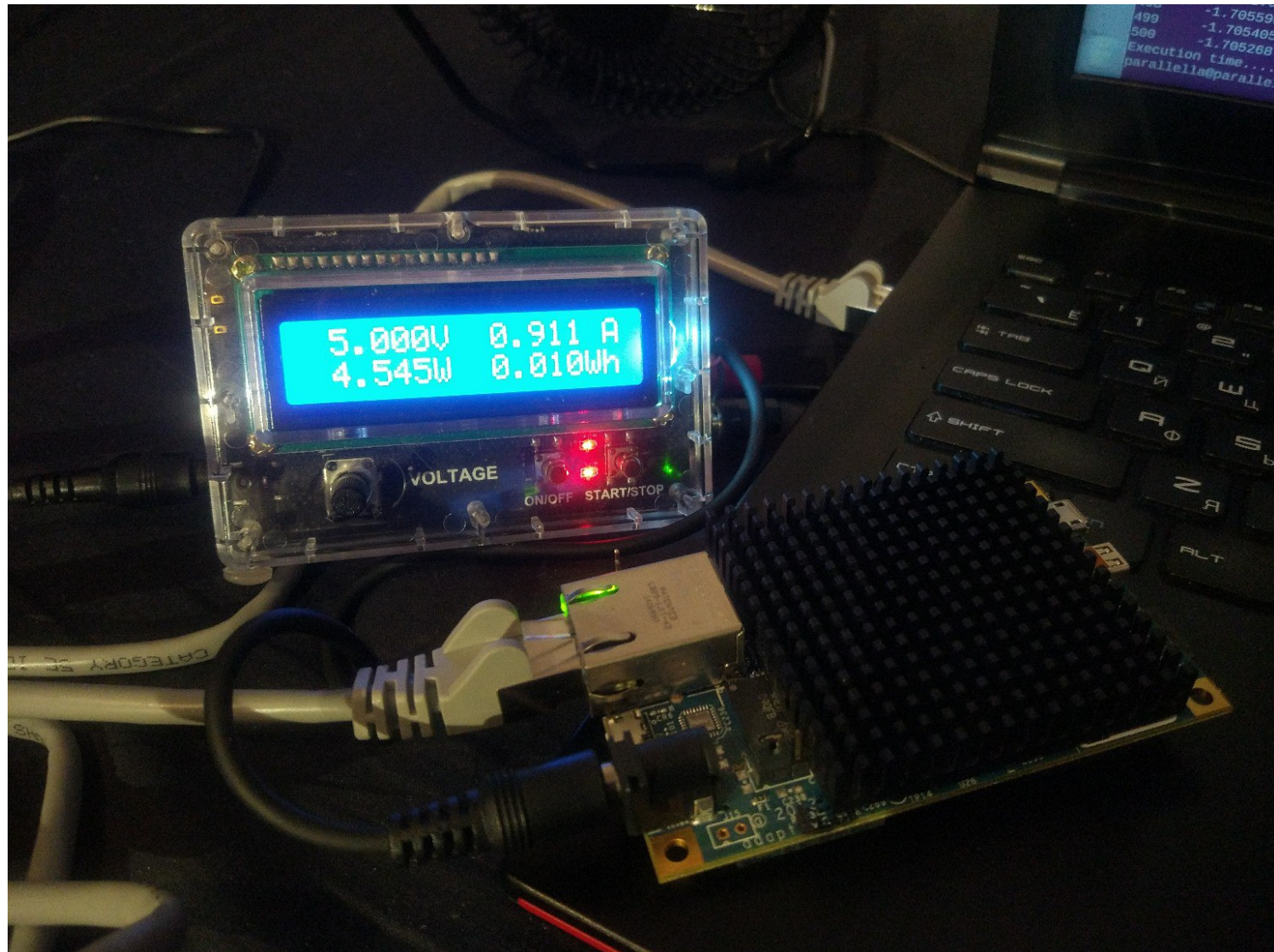
траектории и скорости,
рассчитанные с помощью
популярного пакета
молекулярной динамики
LAMMPS

Начальные условия для
тестового расчёта новой
программы на Parallella
устанавливаются равными
расчёту на LAMMPS

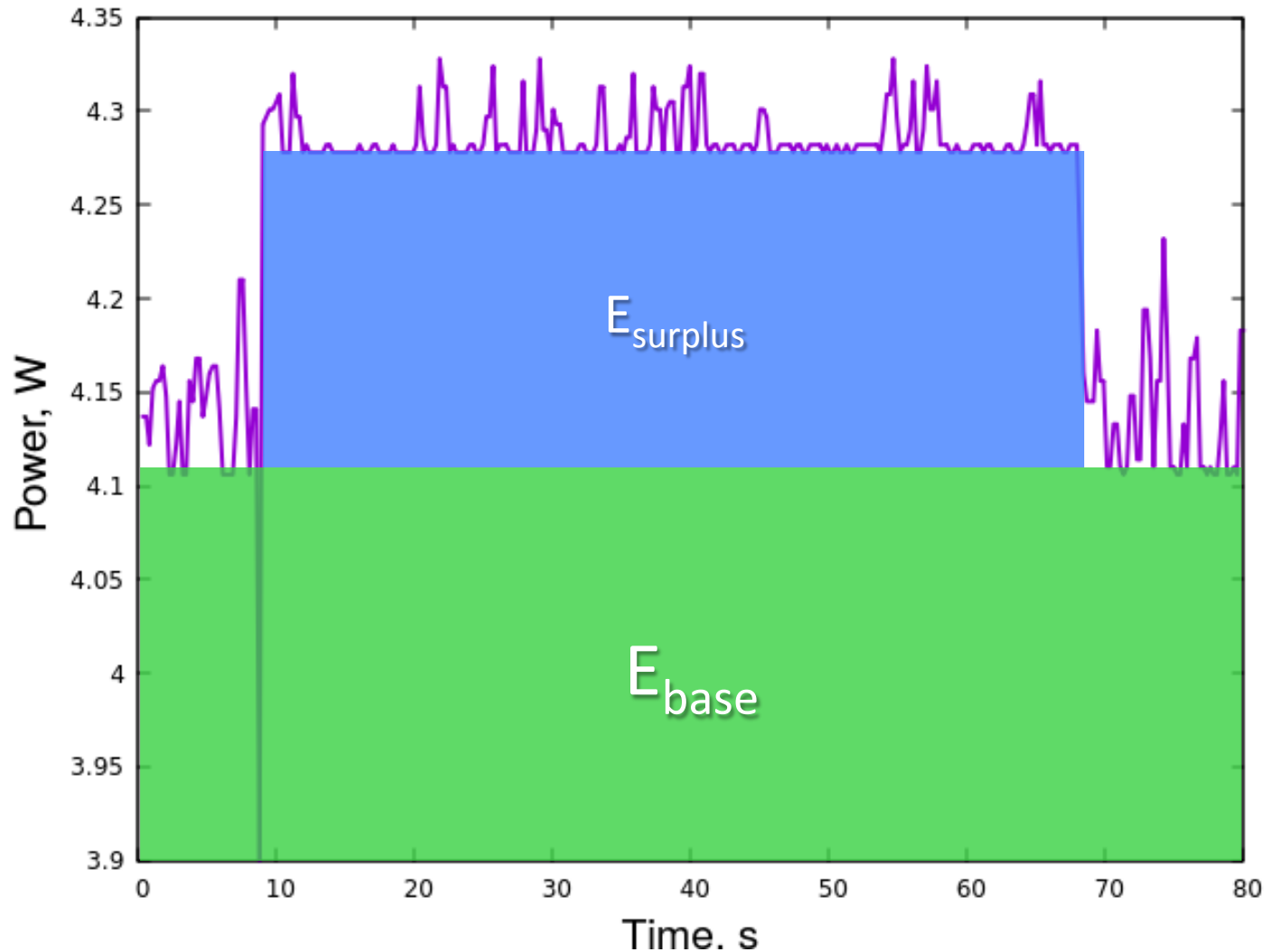
Масштабирование алгоритма



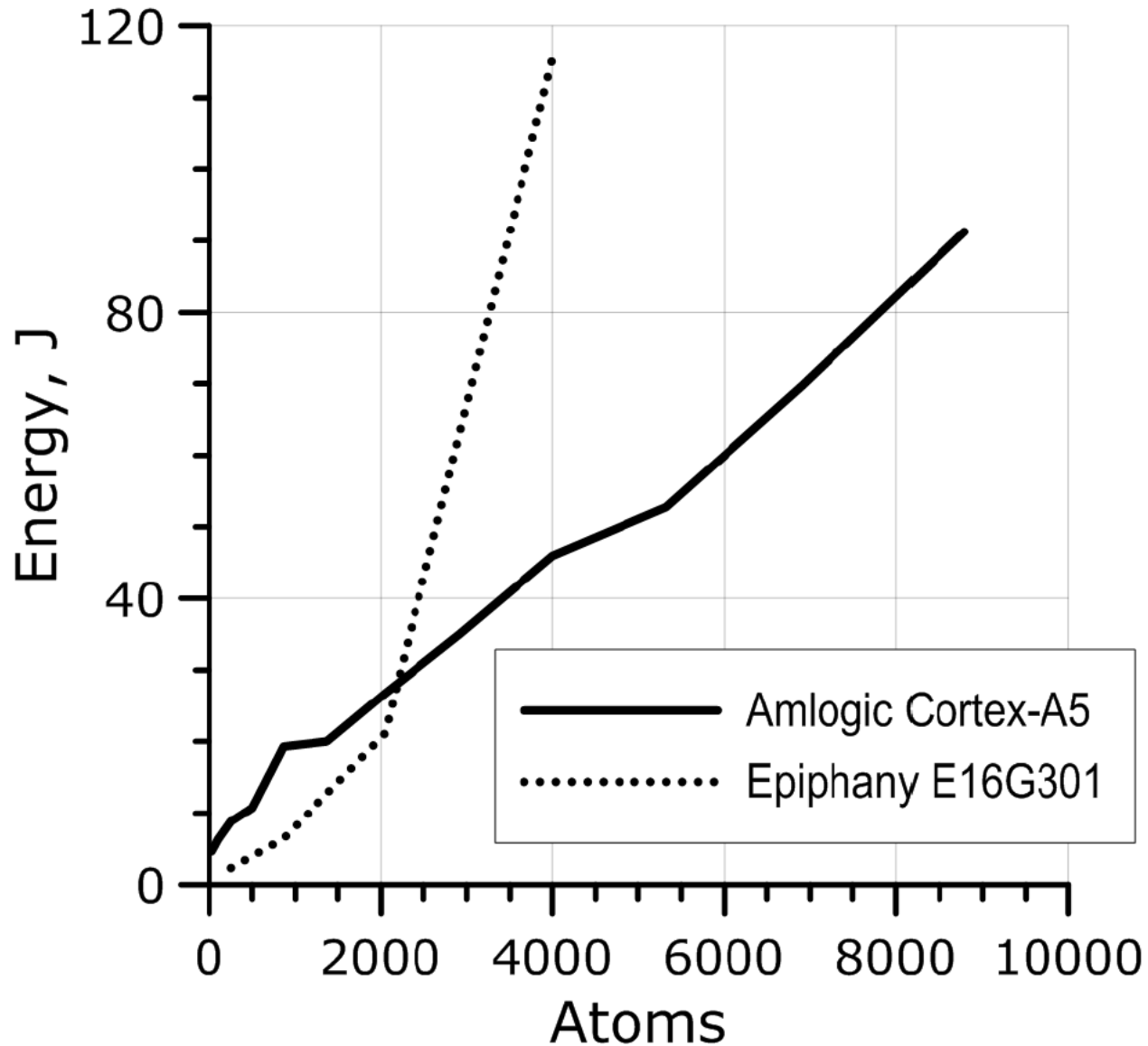
Тестовый стенд



Профиль энергопотребления при запуске программы



$$E_{surplus} = E_{total} - P_{idle} * t_{solution}.$$



Выводы

- Рассмотрено устройство новой процессорной архитектуры Eriphany и её средства параллельного программирования
- На платформе-прототипе Parallella написана и верифицирована программа для алгоритма классической молекулярной динамики с межатомным потенциалом Леннарда-Джонса
- Проведены измерения энергопотребления платформы Parallella. Наивная реализация МД-алгоритма со сложностью $O(N^2)$ может превосходить по энергоэффективности линейно масштабируемый код LAMMPS на другой энергоэффективной платформе ODROID-C1
- Проанализированы возможности дальнейшей оптимизации параллельного алгоритма для достижения большей производительности