

分子动力学优化案例分享

背景介绍

分子动力学模拟技术是研究分子之间运动的一种工具，是典型的计算瓶颈问题。组成物质的微观粒子的数量十分庞大，且为精确跟踪粒子的运动，保证数值模拟的稳定性，必须使用很小的时间步长，计算量十分庞大。所以分子动力学模拟对计算机性能的需求是无止境的，并行计算是必由之路。通常情况下会采用设定邻近列表（图 1）和将计算空间分解成若干个元胞的优化方法（图 2）。在模拟过程中，受力计算是最费时的，占了整个模拟的 90% 左右，是优化实现的重点。

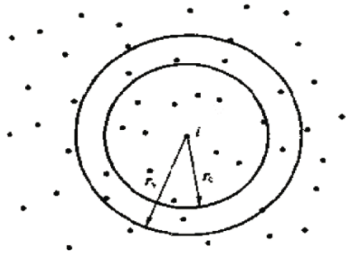


图1 建立邻近列表法规则示意

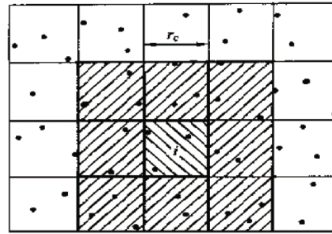


图2 元胞列表法规则示意

优化介绍

为了加速计算受力时寻找原子对的过程，分子动力学模拟经常采用邻近列表方法，对每个原子建立一个邻近列表，然后将符合条件的原子加入邻近列表中。计算力的算法常采用牛顿第三定律。

经典的并行化方法有域分解、任务分解、流水线等，在分子动力学模拟上采用流水线方法会有更好的表现，将计算机指令处理过程拆分为多个步骤，通过多个处理单元并行执行加快指令执行速度。SIMD 指令集的使用，把 64 位寄存器拆成 8 个 8 位寄存器同时完成 8 个操作，理论计算效率会提升 8 倍。

针对某异构众核处理器平台，计算核心的超强浮点计算能力。通过异步并行方法（图 3），达到计算隐藏效果，提高运行效率；解决邻近列表中原子不连续，离散访存的问题，减少 1/4 的数据量，增加数据复用。

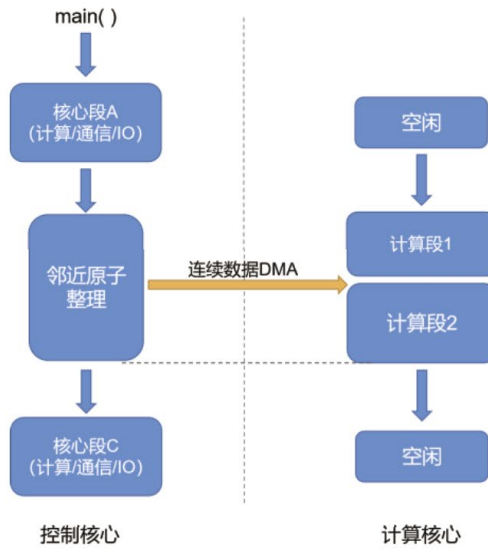


图3 异步并行示意图

改用完整的邻近列表增加计算，降低数据关联性，减少频繁的查表操作；引入原子簇的概念，相邻的所有粒子组成一个簇，共享大部分邻近列表，减少将近 20%的邻近原子，使邻近列表的建立时间缩减 30%。

达到整体加速将近 8 倍（图 4），解决合作用户的课题研究。不断深入研究与优化，突破超大并行规模瓶颈 1024x1024x1024 的原子规模下，实现了整体 10 倍以上的加速效果，且并行规模可扩展到千万核心（图 5）。为分子模拟、材料领域内的计算模拟提供相关软件，缩短模拟研究周期。

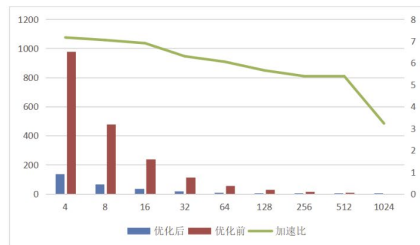


图4 128x128x128计算规模的优化对比图

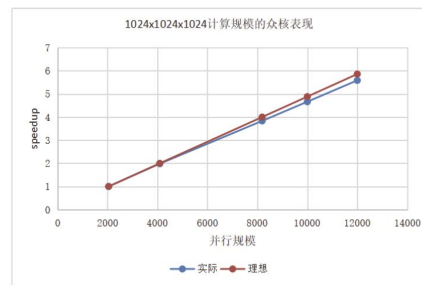


图5 1024x1024x1024计算规模的众核表现

以上研究由来自我们技术团队支持，从并行计算技术和超算应用生态的研究出发，面向科学计算、大数据与人工智能等领域典型应用，开展并行算法、并行实现、并行应用开发与运行环境等技术的深度研究，研究基于 GPU、国产众核处理器和 intel/AMD 超多核 CPU 的细粒度并行加速技术，研究大规模应用移植与调优、并行效率与扩展性等，承担超算应用一体化支撑平台、超算应用软件商城和多领域高性能计算应用软件的研发任务，一方面为超算应用提供产品和服务，另一方面为基于超算的基础科学研究、产业转型和成果转化提供有力支撑。