

分子动力学模拟专用机器-Anton

——国防科大2020年高性能评测与优化课程小组讨论

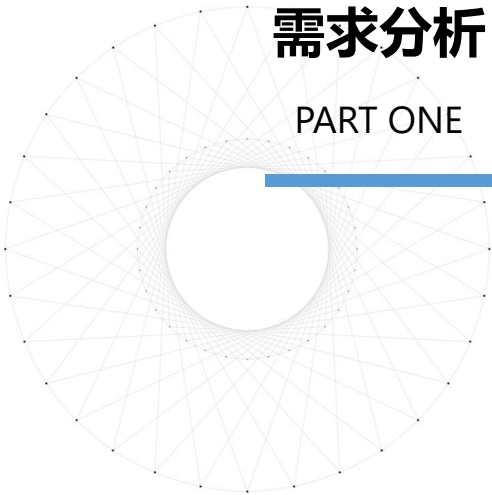
报告人
傅思清

组员
张巍
王笑雨

指导老师：龚春叶、甘新
标、杨博

目录

CONTENTS



需求分析

PART ONE

方案动机

PART TWO

技术方案


PART THREE

效 果

PART FOUR

结论分析

PART FIVE



需求分析

PART ONE

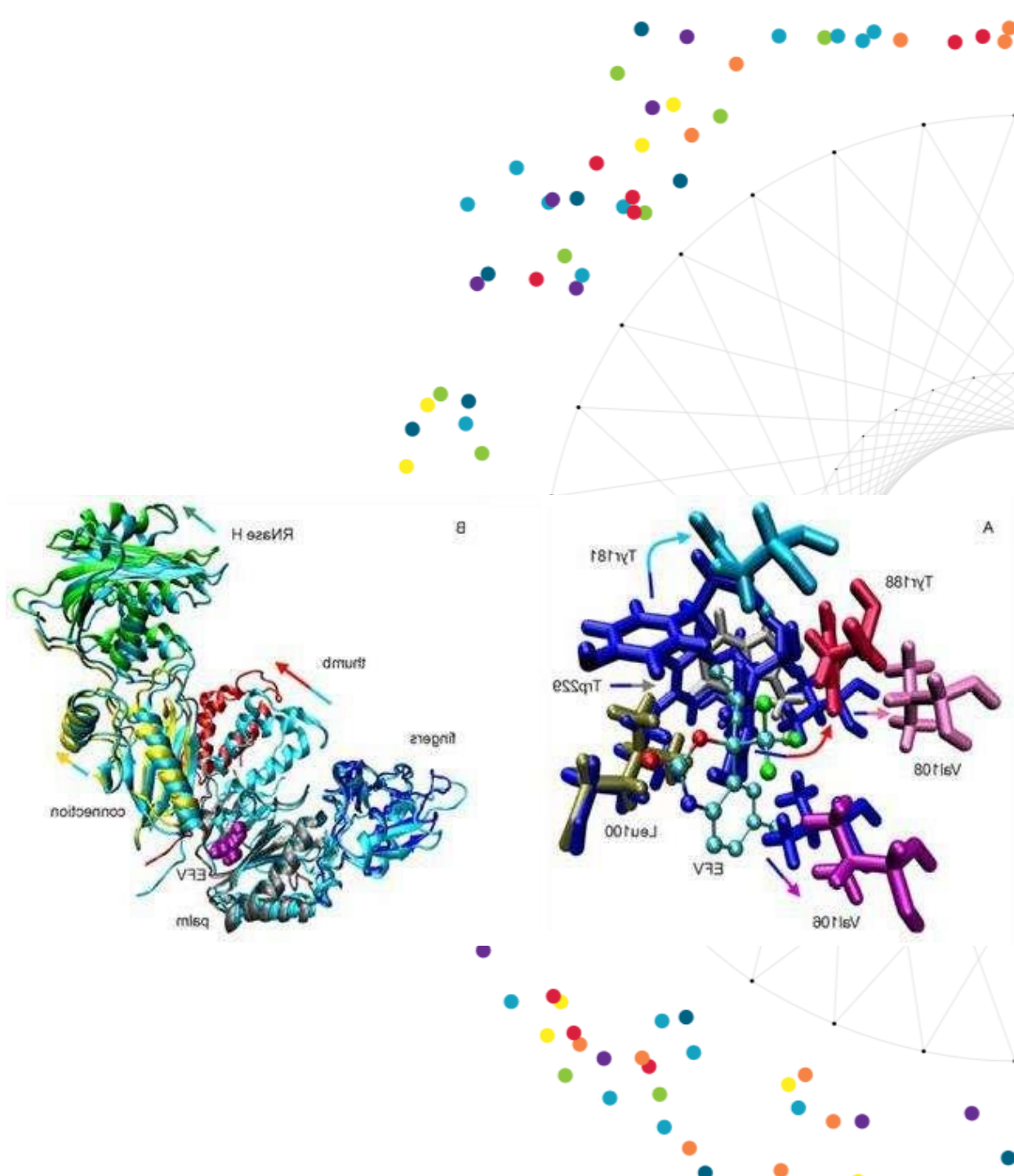
1.1 分子动力学

分子动力学模拟的概念：

分子动力学(MD)模拟可用于在原子水平上详细模拟分子系统的运动，包括蛋白质、细胞膜和DNA。

分子动力学模拟的需求：

足够长的、准确的MD模拟可以让科学家和药物设计师观察到许多目前在实验室中不能观察到实验中至关重要的生化现象,包括蛋白质功能背后的结构性变化,蛋白质之间和蛋白质和候选药物分子之间的相互作用。



1.2 现有项目和Anton

The Folding@Home project
FASTRUN , MDGRAPE and MD Engine




Antoni van Leeuwenhoek



David E. Shaw

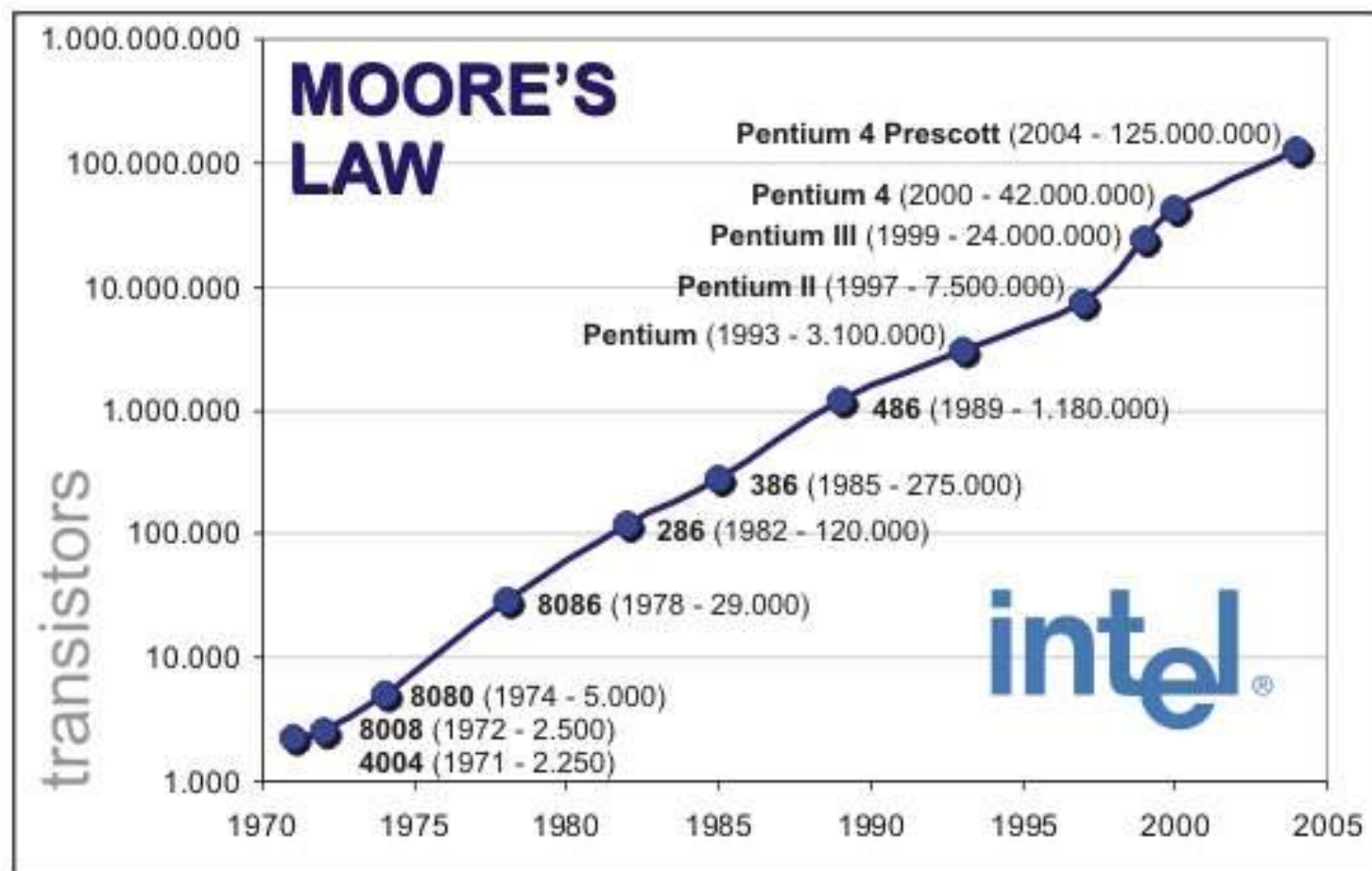




方案动机


PART TWO

2.1 采用专用硬件的动机



2.2 计算和通信的加速思路





技术方案

PART THREE

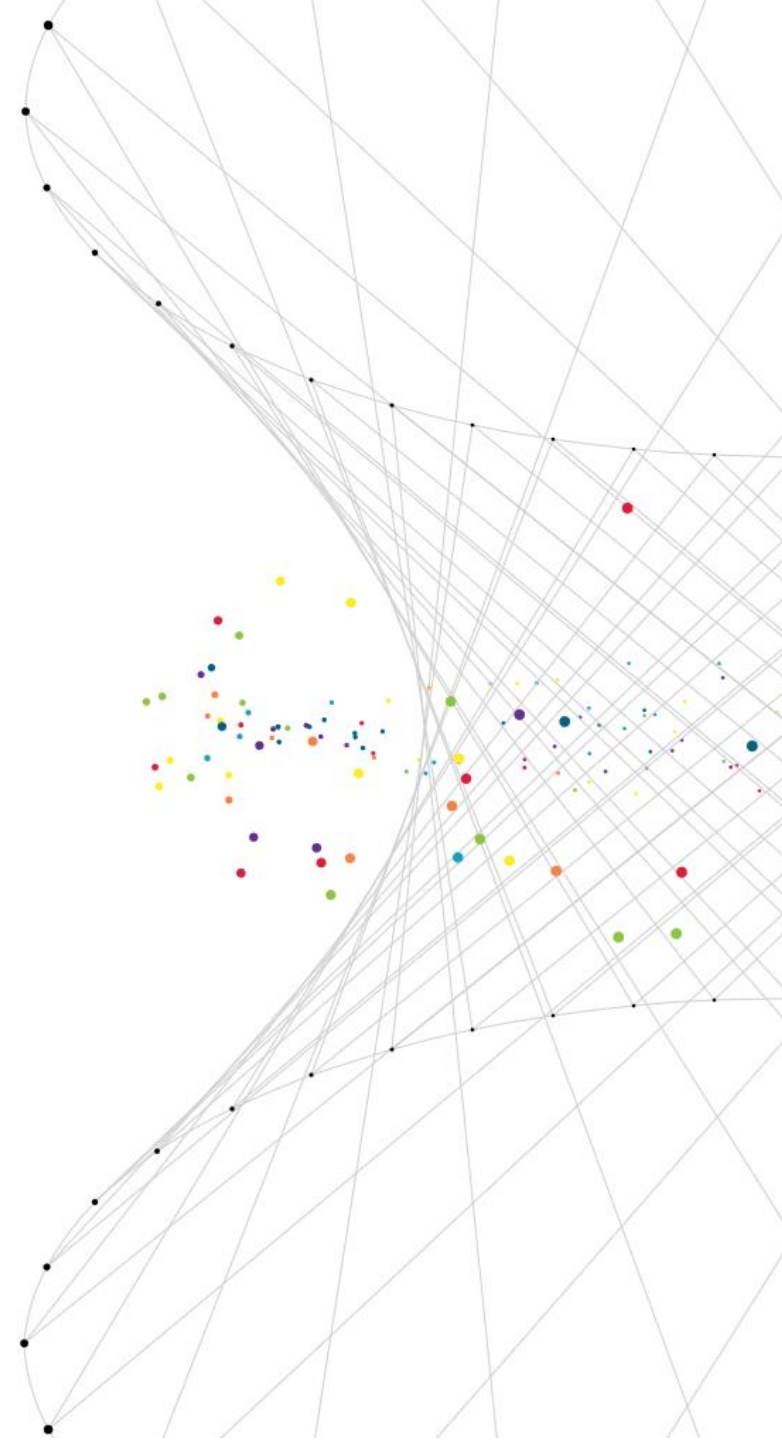
3.1 力计算

$$E_{\text{total}} = E_{\text{bonded}} + E_{\text{nonbonded}}$$

$$E_{\text{bonded}} = E_{\text{length}} + E_{\text{angle}} + E_{\text{dihedral}}$$

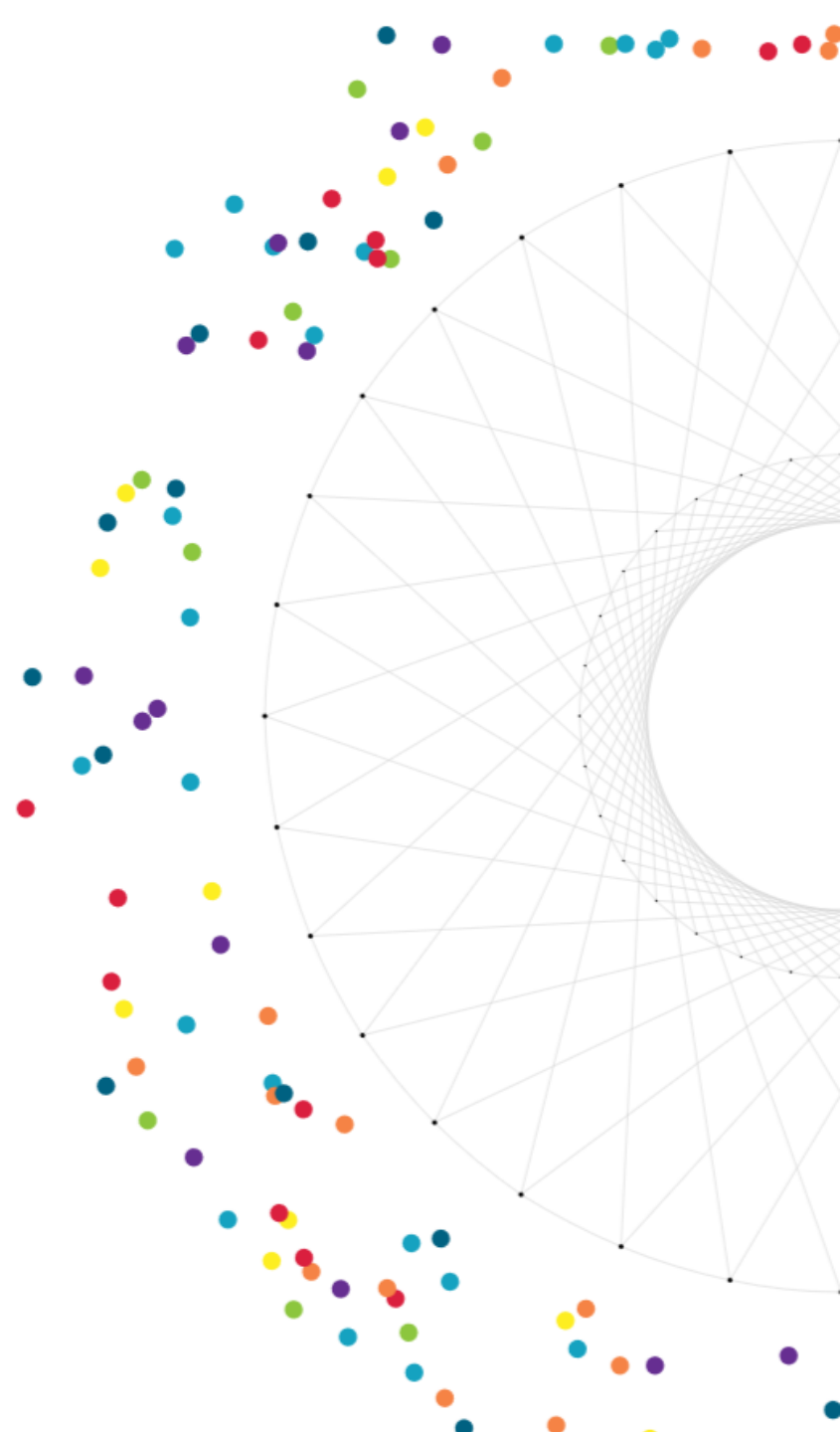
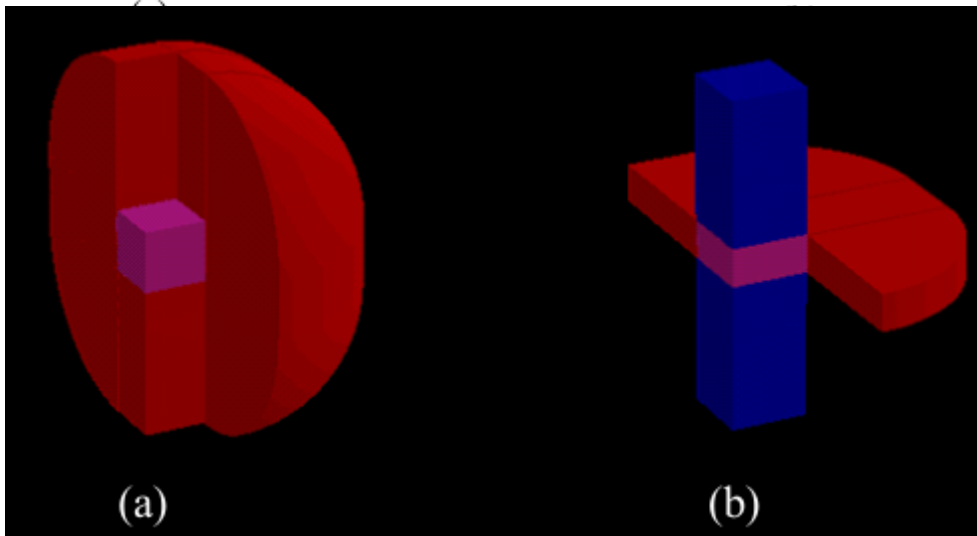
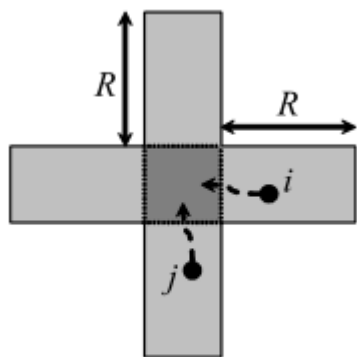
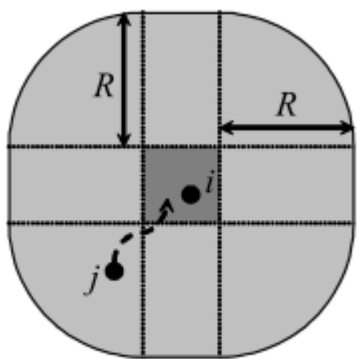
$$E_{\text{nonbonded}} = E_{\text{es}} + E_{\text{vdw.}}$$

k-space Gaussian split Ewald

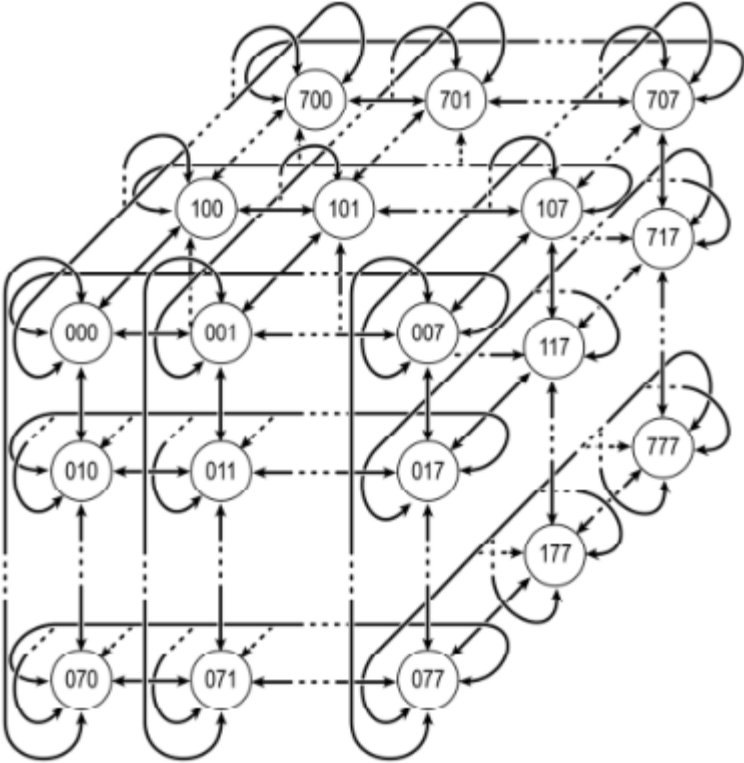
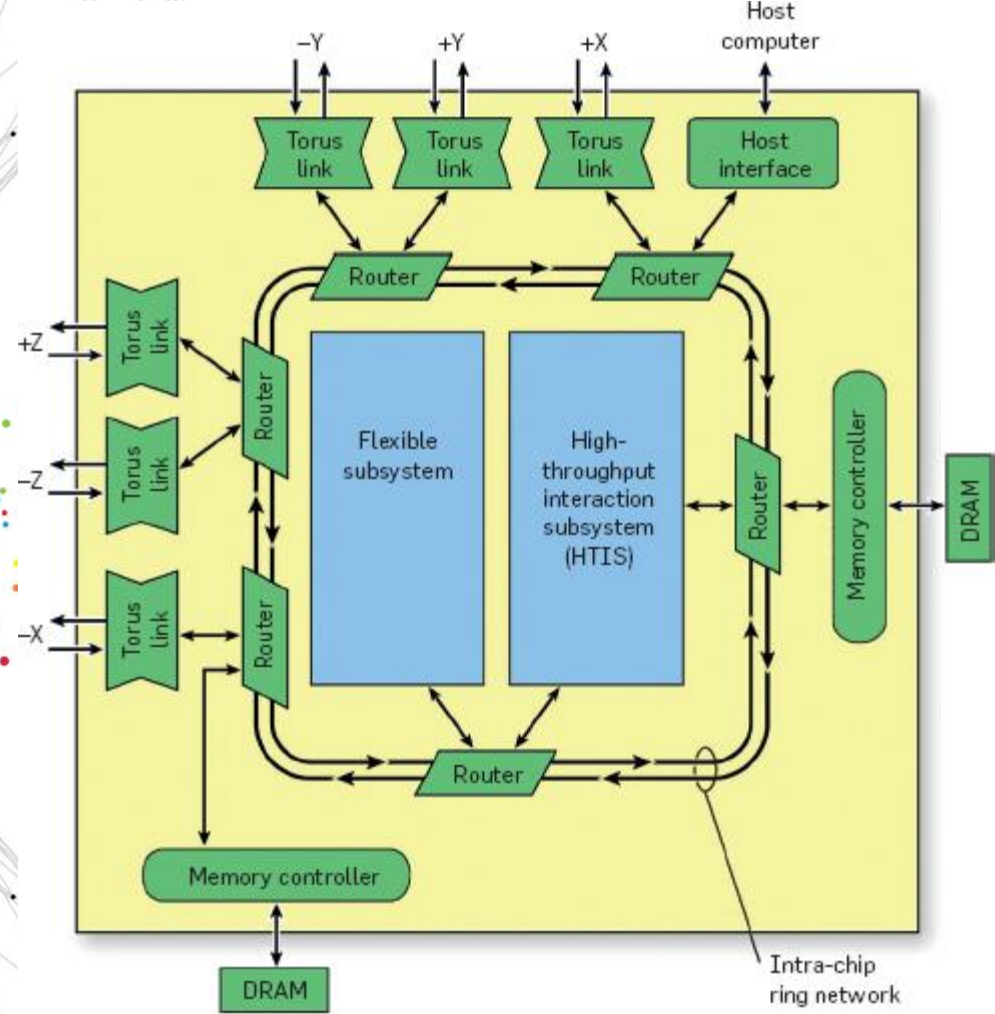


3.2 并行化

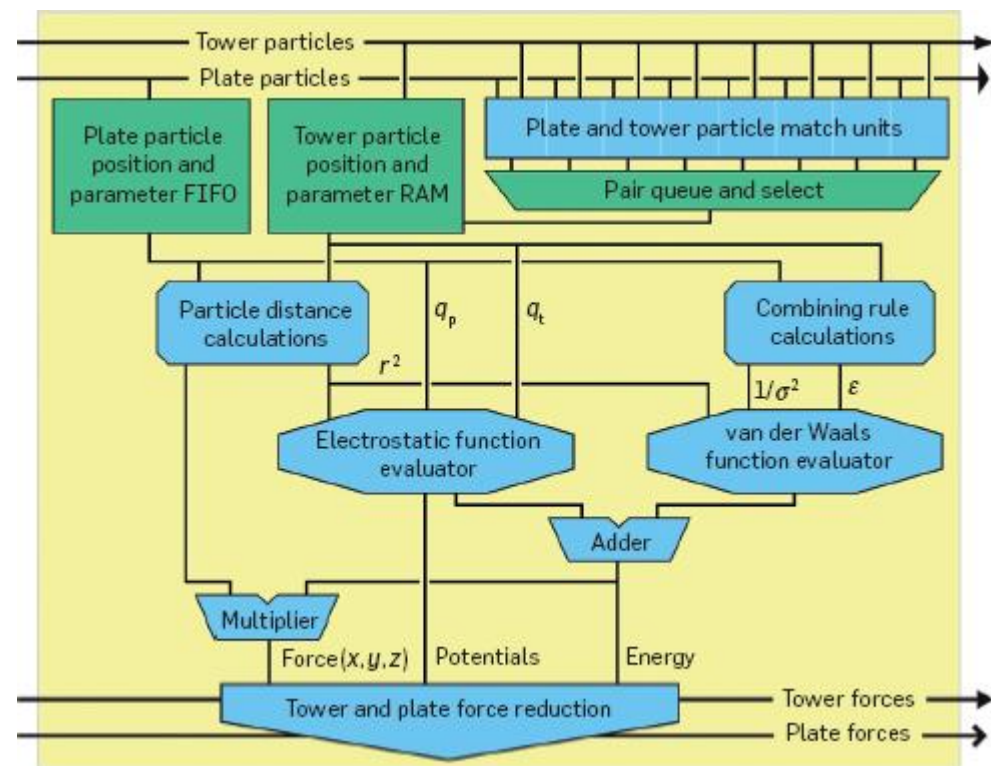
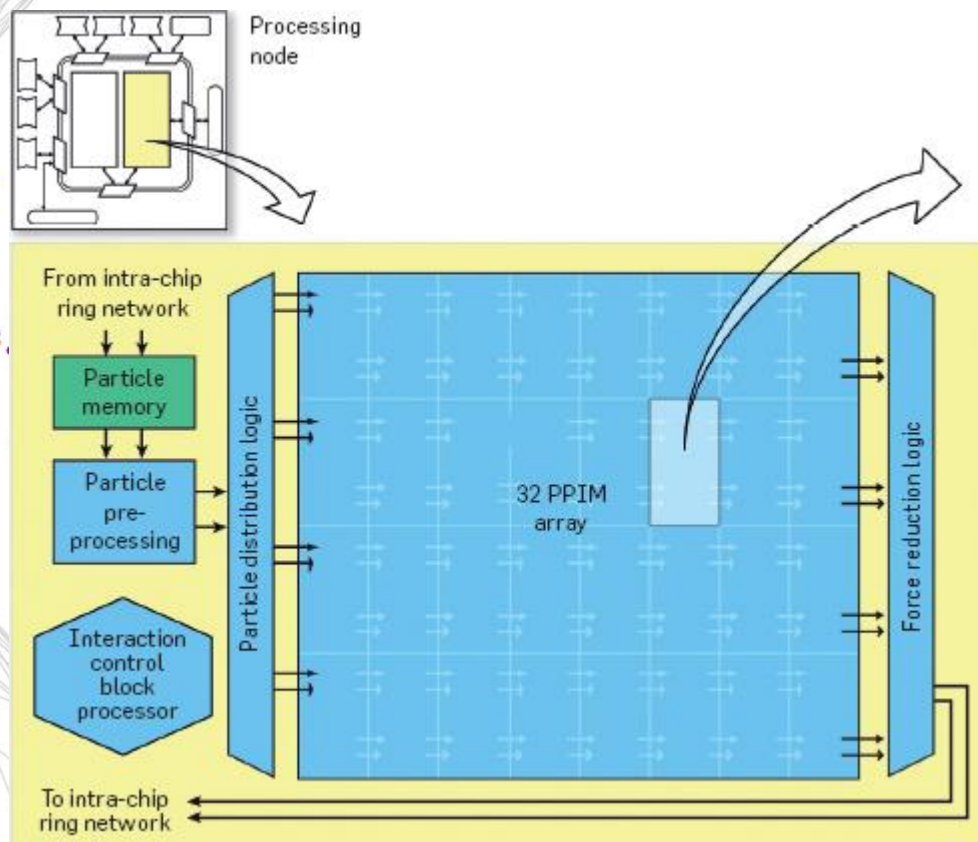
neutral territory methods



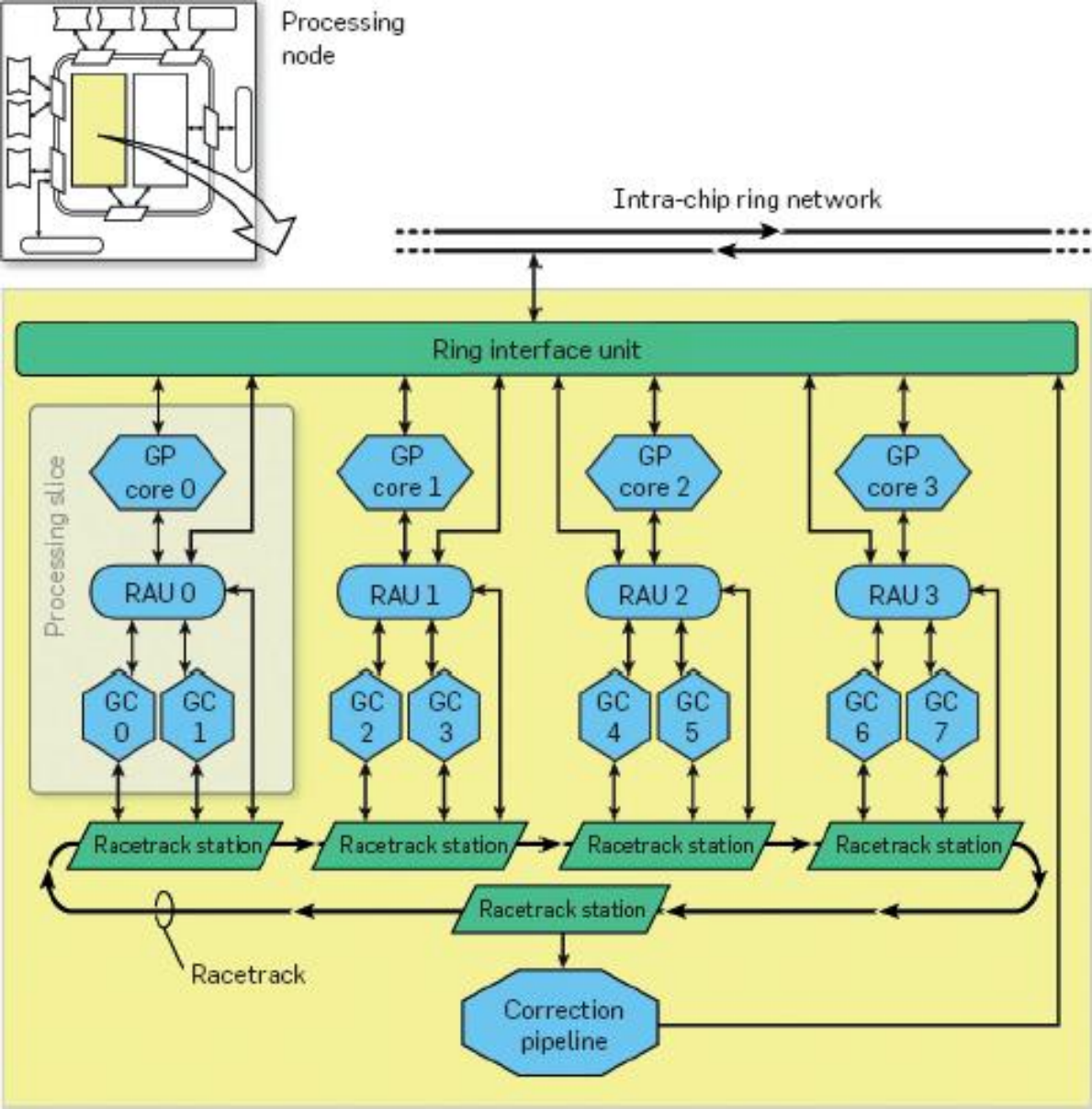
3.3 系统架构



3.3.1 系统架构-高通量交互子系统(HTIS)



3.3.2 系统架构-弹性子系统



3.3.3 系统架构-通信子系统

高速、低延迟

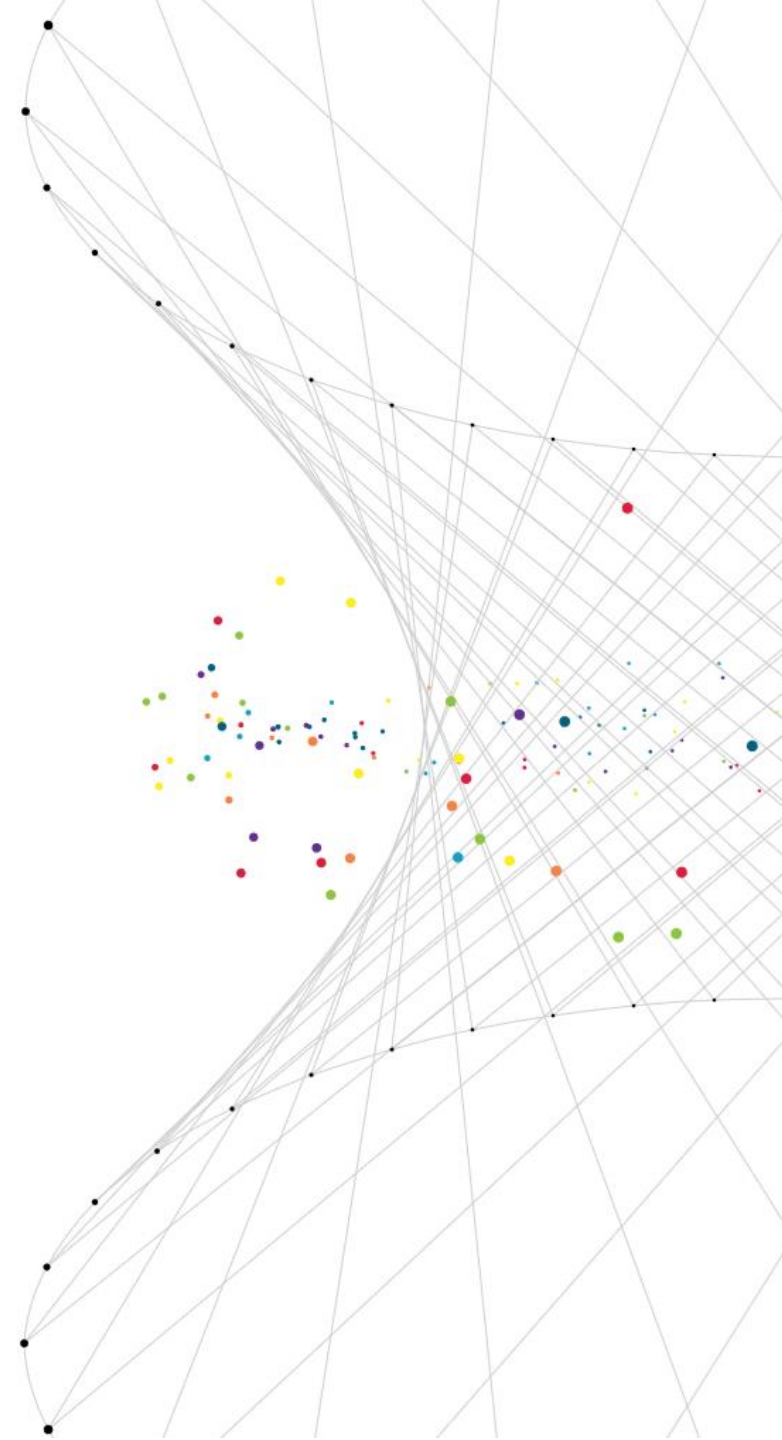
多播

源路由

接收端流量控制

3.3.4 系统架构-内存子系统

积累和同步





实验结果

PART FOUR

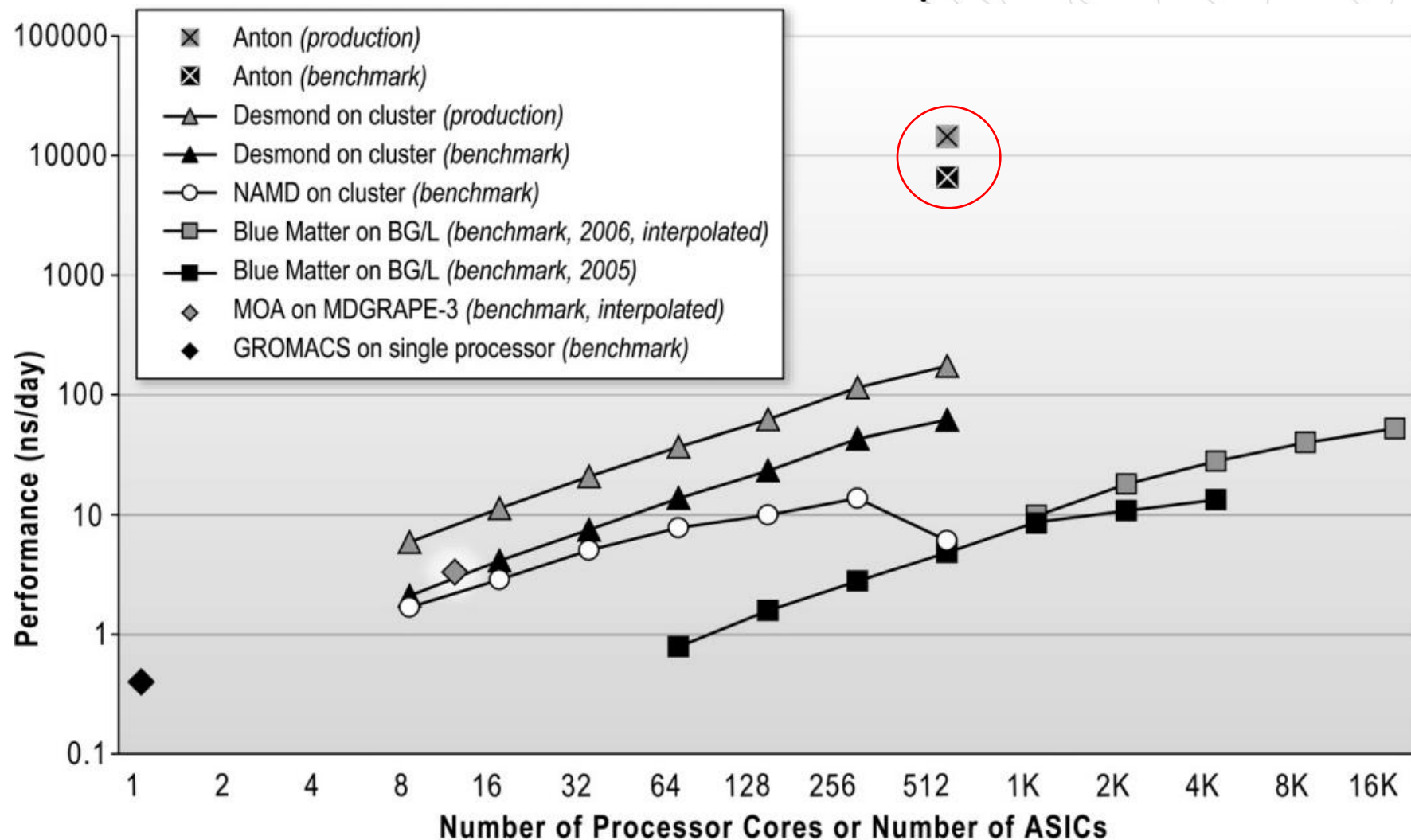
4.1 实验环境

- 采用模拟器估算性能，存在误差
- 模拟了512个节点的情况
- 模拟的化学系统为DHFR
- 使用CHARMM力场
- A state-of-the-art commodity cluster
- IBM Blue Gene/L & MD
- MDGRAPE-3 & MOA



4.2 性能评估

- benchmark
- production
- **6600**ns/day
- **14500**ns/day
- 14 ns/day
- 62ns/day
- 173 ns/day
- 13 ns/day
- 60 ns/day



4.3 精度评估

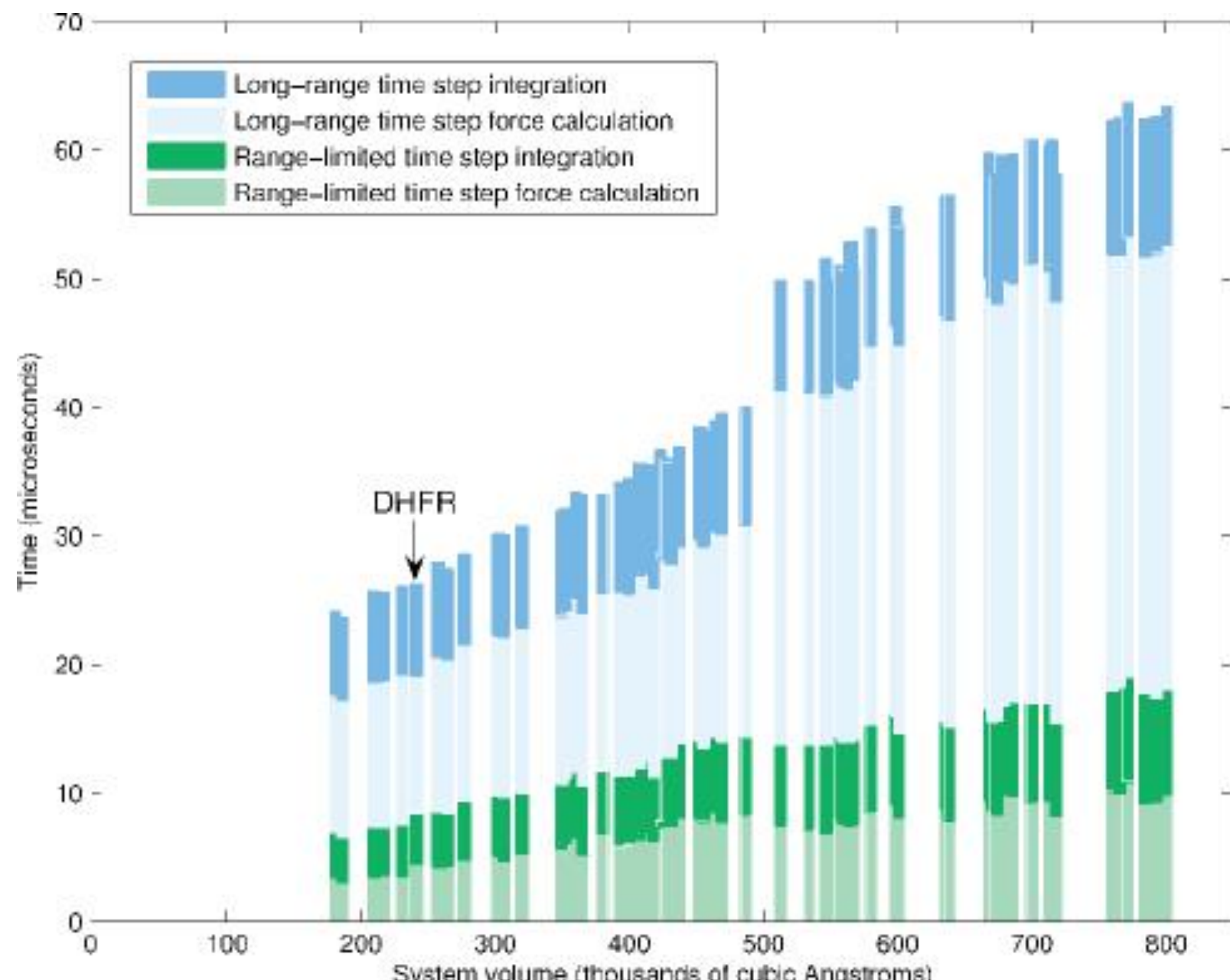
\mathcal{R} elative rms force error

- 用于衡量力计算的误差
- Anton在有限精度的定点计算下达到 1.5×10^{-4}
- Blue Matter在双精度的浮点计算下达到 3×10^{-4}

\mathcal{E} nergy drift

- 用于衡量系统整体误差
- 模拟了5ns, 运行了2百万的时间步
- 短期能量波动, 占0.001%
- 无明显的长期变化趋势

PART FOUR 实验结果





分析展望

PART FIVE

系统规模

文中只考虑了512个节点的情况，可以进一步调整节点数量，以更全面的显示anton的性能

硬件协议

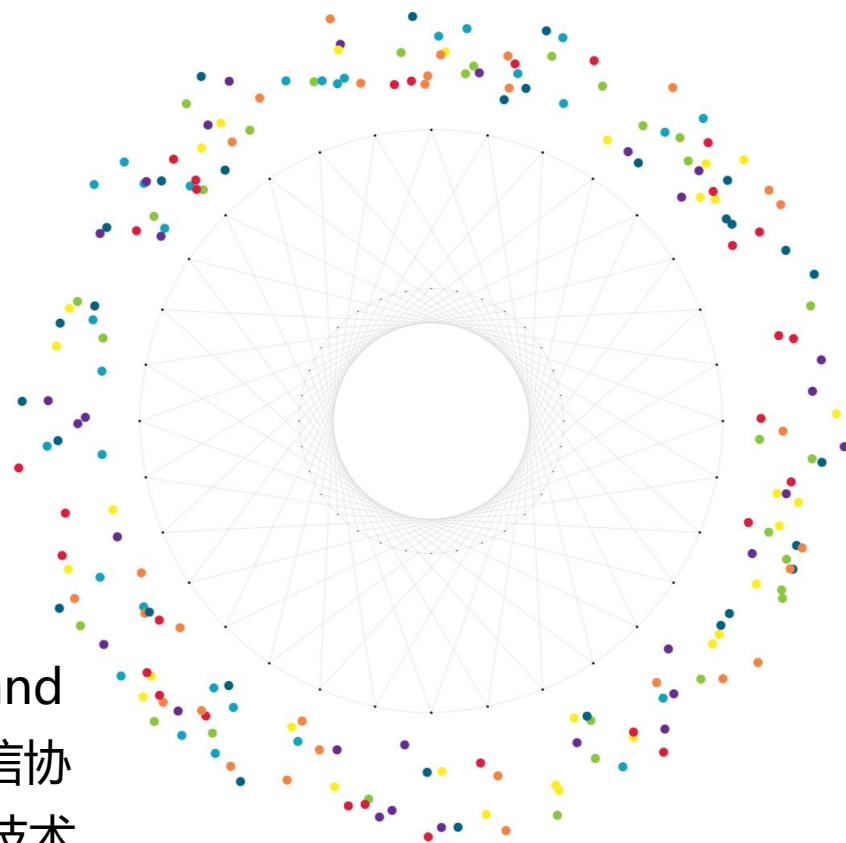
文中提到了使用了Infiniband网络，但没有具体指明通信协议，可以考虑使用RDMA技术减少通信开销

减少计算

前面可以看出随着原子数的增加，计算长程静电作用导致所需时间发生了跳跃，因而改进其计算的算法有望使其达到性能和原子数呈线性关系的目标

压缩通信

可以根据传输数据的特点在满足系统精度范围内对其进行压缩以减少通信量，提高通信效率





THANK YOU FOR WATCHING

报告人
傅思清

组员
张巍
王笑雨