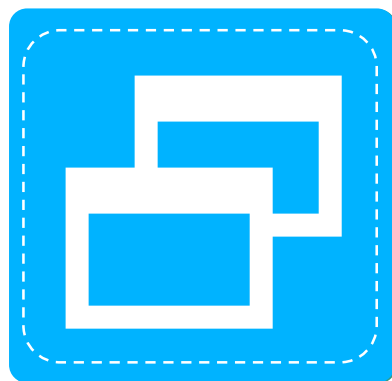


# OpenKMC: 大规模并行原子动力学蒙特卡洛程序

中国科学院计算技术研究所 | 汇报人：李琨



背景介绍



关键技术



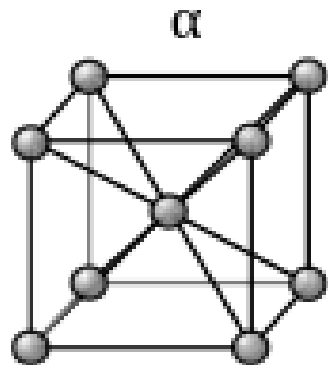
实验数据



工作展望

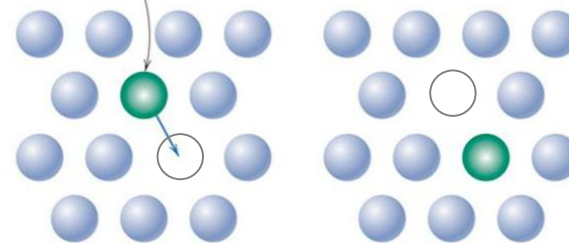
# 背景介绍

物理背景:

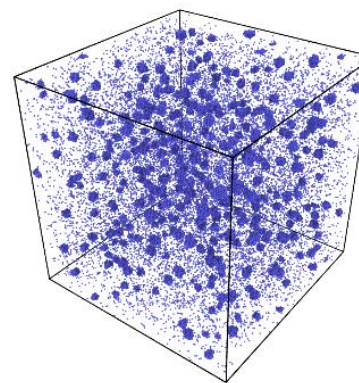


空位扩散

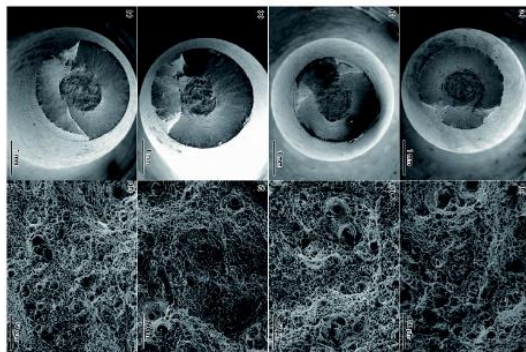
溶质原子



溶质原子聚集



金属脆化



# 背景介绍



## 模拟方法:

- 初始损伤由级联碰撞引起, 由分子动力学 (MD) 得到;
- 后续的缺陷、溶质的扩散演化, 最终决定了材料辐照损伤效应和材料微观结构变化, 由动力学蒙特卡洛 (KMC) 方法得到;

## KMC流程:

- 计算处于初始态的跃迁概率
- 选择随机数
- 寻找跃迁路径
- 模拟时间向前推进一步
- 重复以上步骤



背景介绍



关键技术



实验数据



工作展望

# 关键技术-移植

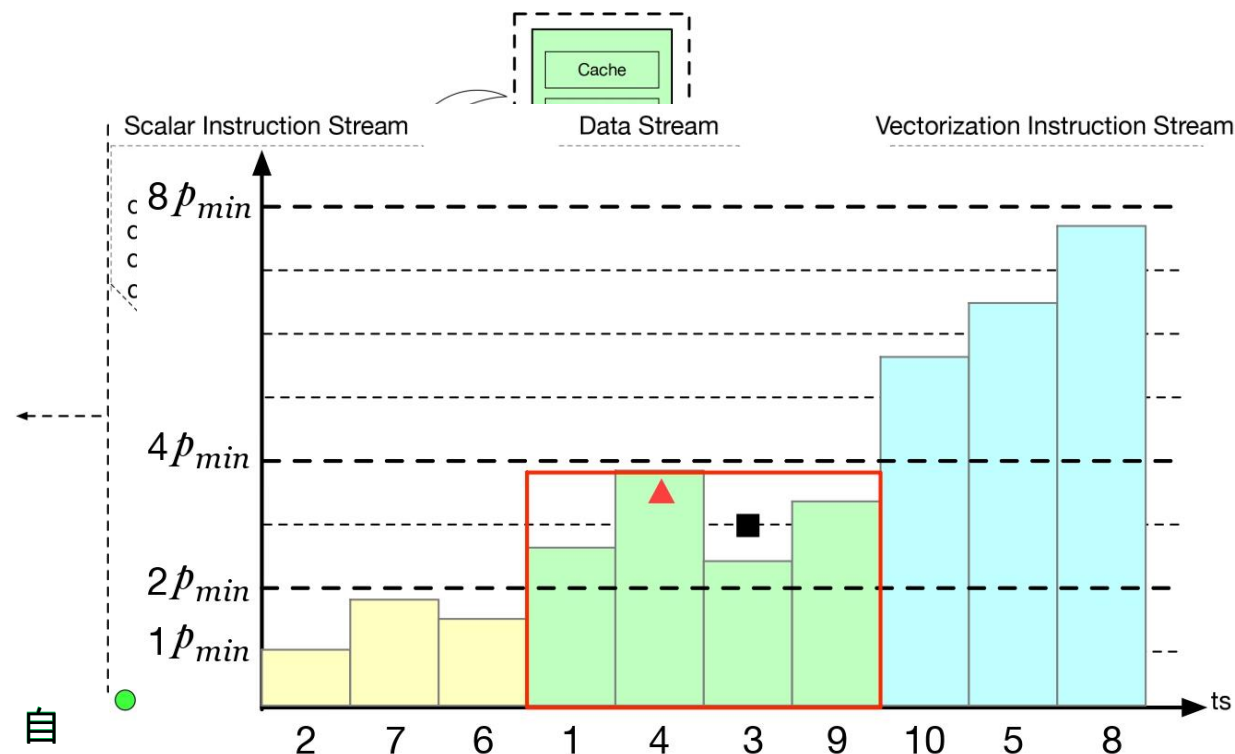


- **以SPPARKS为框架，构建AKMC计算模型**  
按照事件选择-计算-更新-迭代的框架构建新的KMC计算模型
- **修改通信模式**  
根据构建的KMC模型，建立新的按需通信模式
- **移植到神威太湖之光**  
根据神威架构，调整并行方法
- **针对神威太湖之光优化**  
利用神威主从核架构进行计算及通信优化

# 关键技术-优化



- **采用EAM和Pair两种势能模型**  
支持两种势能模型进行KMC模拟
- **基于SPARKS开发，采用三级同步子域方法**  
从空间域将box划分到各个子域，各子域再划分为多sector的结构，各sector使用从核加速计算
- **分组反应策略**  
使用分组策略进行事件的选择和更新
- **将程序移植到神威太湖之光，并进行了内存访问优化**  
进行cache优化，调整AoS数据结构，提高cache的命中率
- **多层通信优化**  
计算ghost区域以减少通信量；非阻塞点对点通信降低同步时间；自适应算法降低通信频率
- **从核“转录-翻译-传输” 3T算法**  
主核：“模板”；从核：“传输”、“翻译”
- **从核向量化加速**  
使用SIMD指令加速从核上的计算





背景介绍



关键技术



实验数据



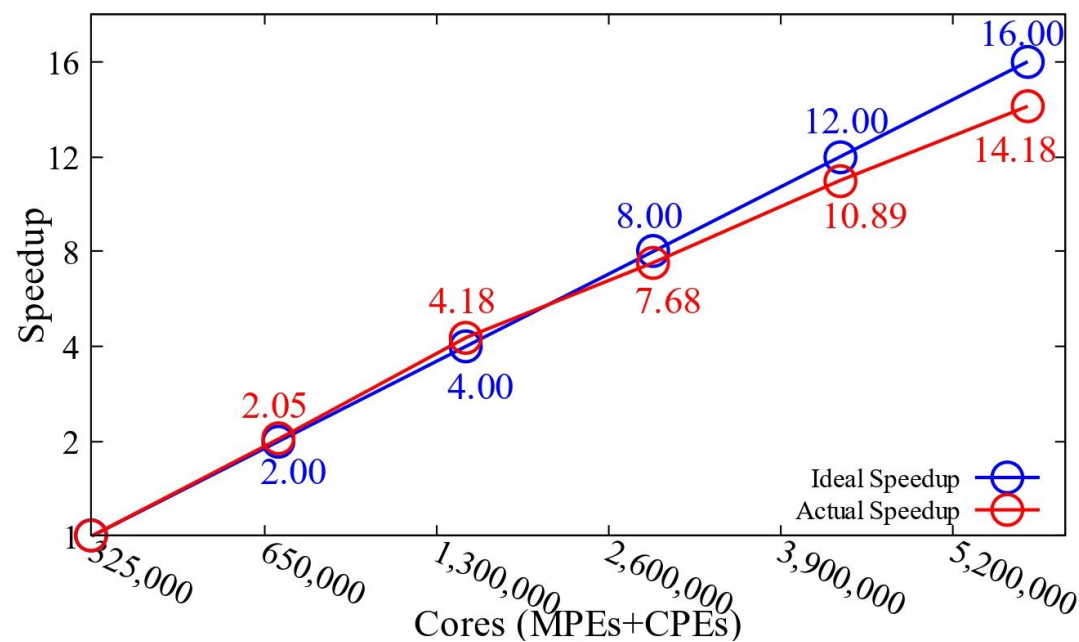
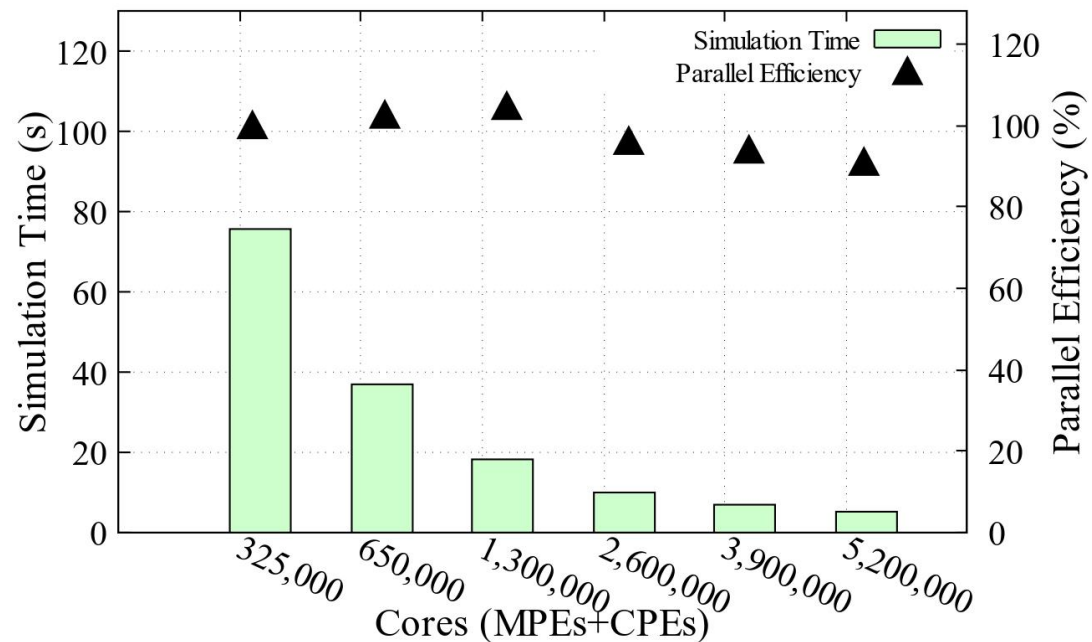
工作展望



# 实验数据



## 强可扩展性:

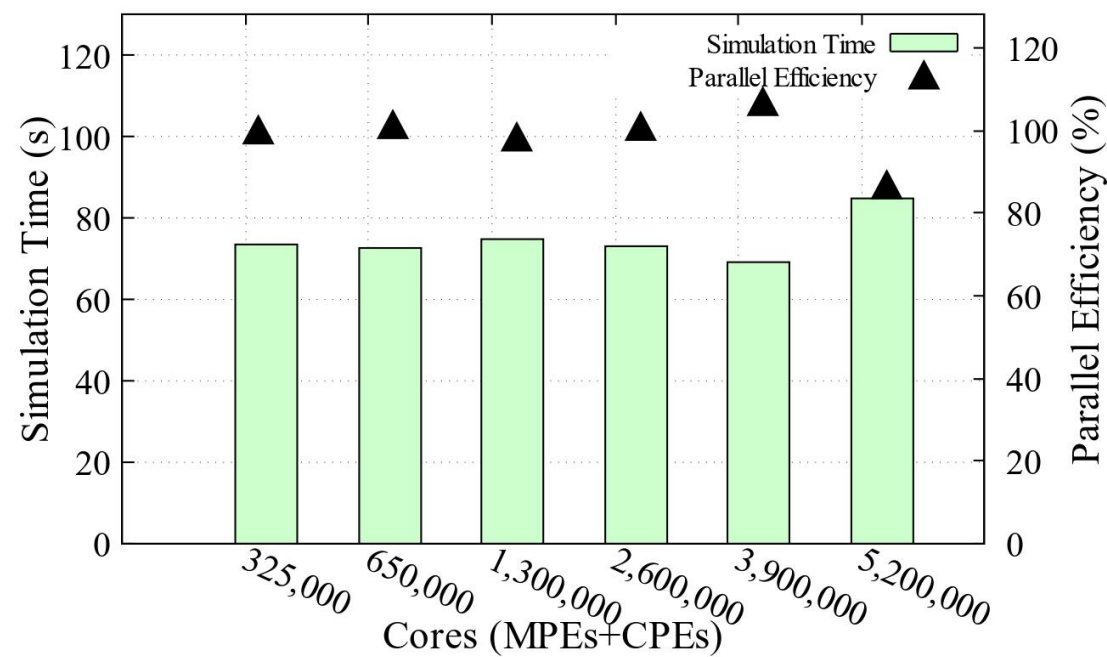


- Baseline: 325,000 cores (5,000 MPEs with 320,000 CPEs)
- $5.4 \times 10^{10}$  个粒子。
- 520万核并行效率保持在91%。

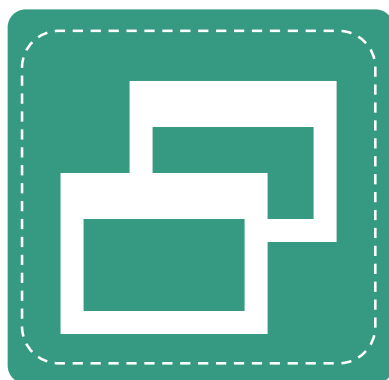
# 实验数据



## 弱可扩展性:



- Baseline: 325,000 cores (5,000 MPes with 320,000 CPEs)
- $1.1 \times 10^7$  个粒子/核组, 最大规模至  $8.4 \times 10^{11}$  个粒子。
- 520万核并行效率保持在87%。



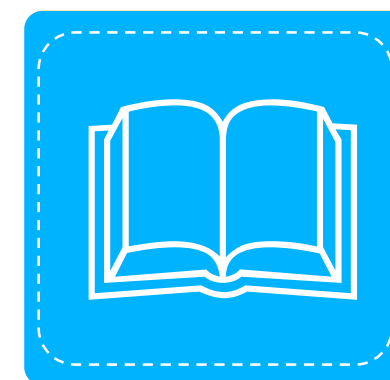
背景介绍



关键技术



实验数据



工作展望

# 工作展望



中国科学院计算技术研究所  
INSTITUTE OF COMPUTING TECHNOLOGY, CHINESE ACADEMY OF SCIENCES

- 在物理算法层次降通信量
- 间隙模型加入及相应的并行优化
- 实际不锈钢体系的模拟



**请专家们批评指正！**