



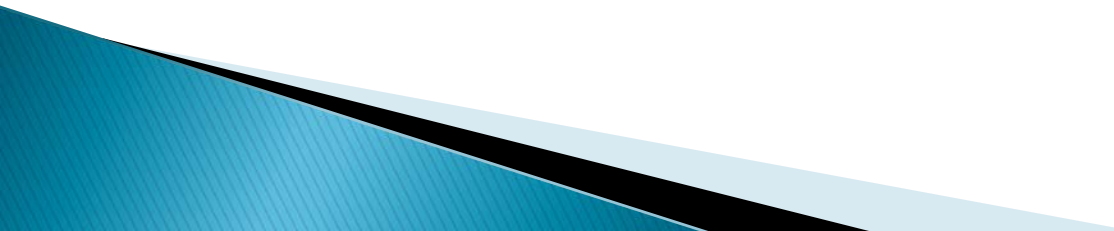
МГУ имени М.В. Ломоносова
Биологический факультет
Группа молекулярного моделирования



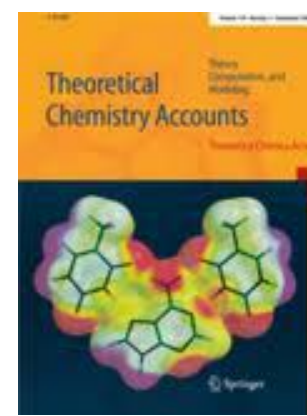
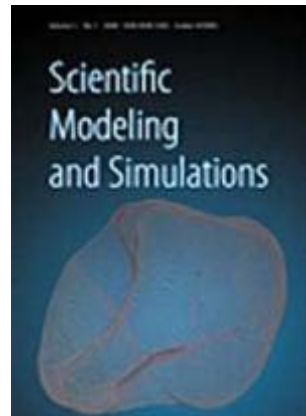
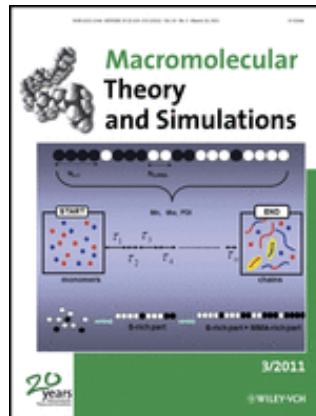
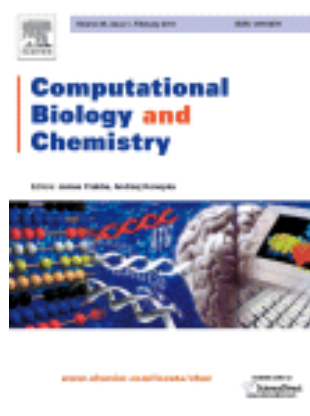
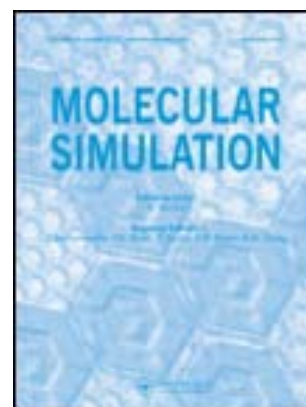
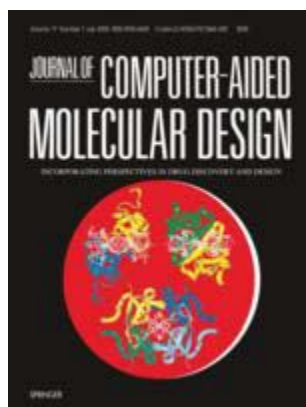
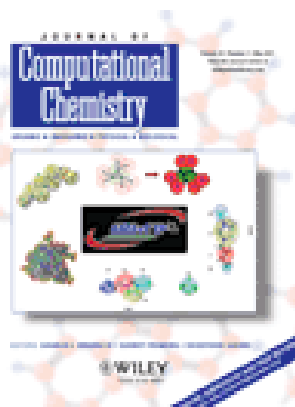
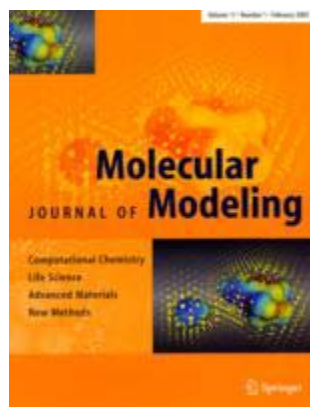
Использование гибридных и специализированных архитектур для решения задач молекулярного моделирования

Шайтан Алексей Константинович
к.ф.-м.н., н.с.

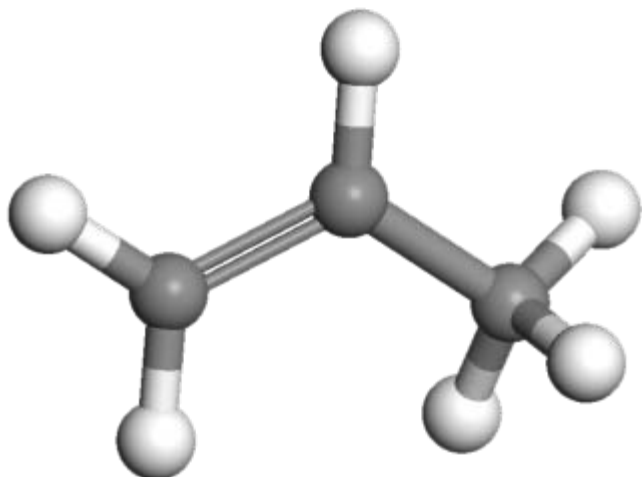
План

- ▶ Задачи молекулярного моделирования
 - ▶ Вычислительные особенности
 - ▶ Традиционные подходы к высокопроизводительным вычислениям
 - ▶ Применение ASIC
 - ▶ Применение ПЛИС
 - ▶ Применение GPU
 - ▶ Выводы
- 

Молекулярное моделирование

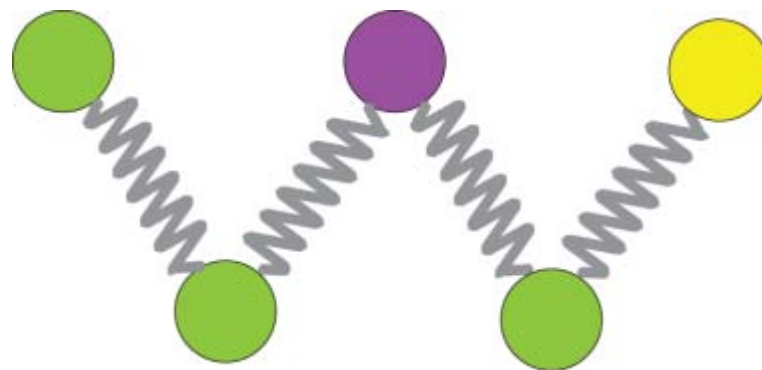


Молекулярно-механические модели



Набор координат

X	Y	Z
-6.542	0.365	-0.009
-5.169	1.043	0.152
-3.881	0.212	0.009
-6.465	-0.725	0.316
-6.863	0.414	-1.102
-7.311	0.902	0.639
-5.107	2.143	0.451
-3.945	-0.898	-0.254
-2.867	0.701	0.166



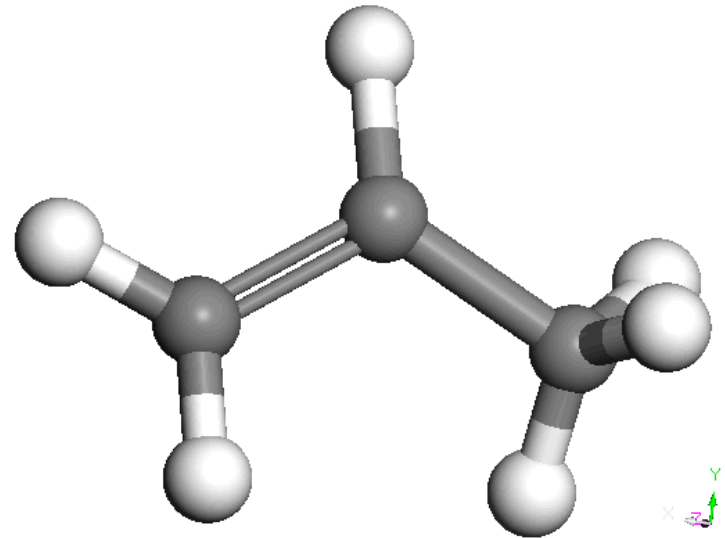
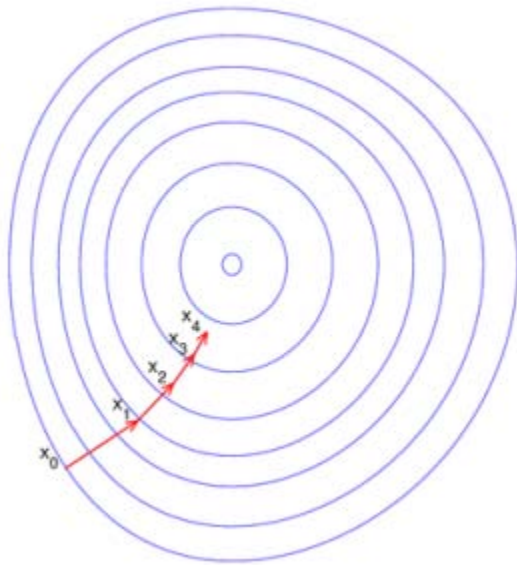
Силовое поле

$$E([x], [y], [z]) =$$

$$\begin{aligned} & \sum_b K_b (l - l_0)^2 + \\ & \sum_{\theta} K_{\theta} (\theta - \theta_0)^2 + \\ & \sum_{\phi} K_{\phi} (1 + \cos(n\phi - \phi_0)) + \\ & \sum \epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] + \\ & \sum_{ij} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \end{aligned}$$

Алгоритмы анализа моделей

- ▶ Поиск минимума энергии
- ▶ Решение уравнений движения (молекулярная динамика)



- ▶ Иные методы (молекулярный докинг, метод монте-карло и д.р.)

ММ в биологии

► «Вычислительный микроскоп»

Структурная биология



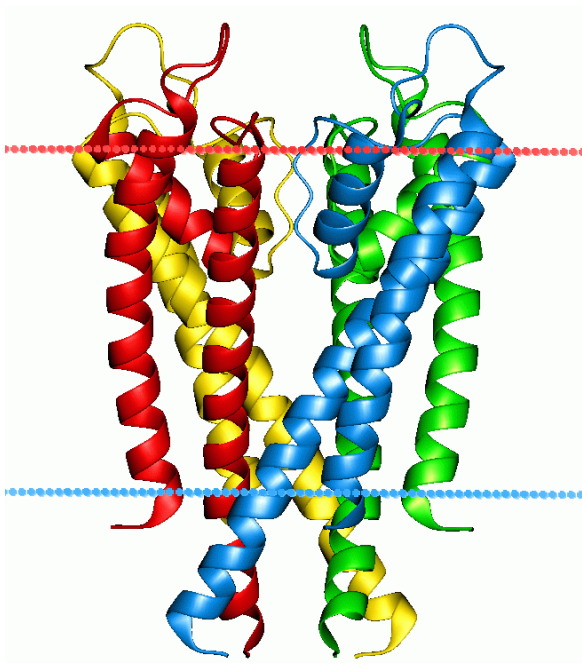
Атомистические
структуры белков, ДНК,
комплексов



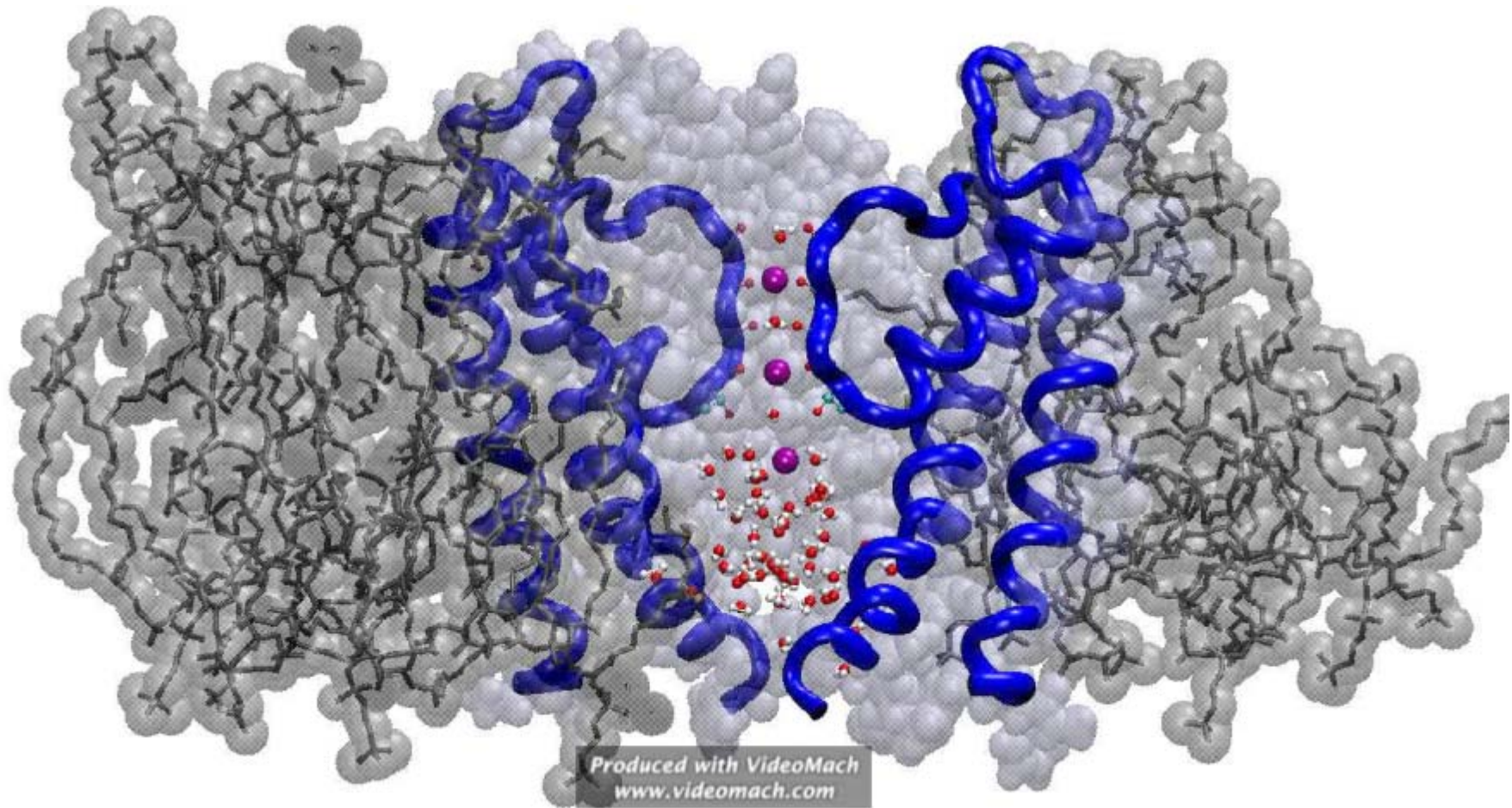
Молекулярное
моделирование



Изучение процессов во
времени



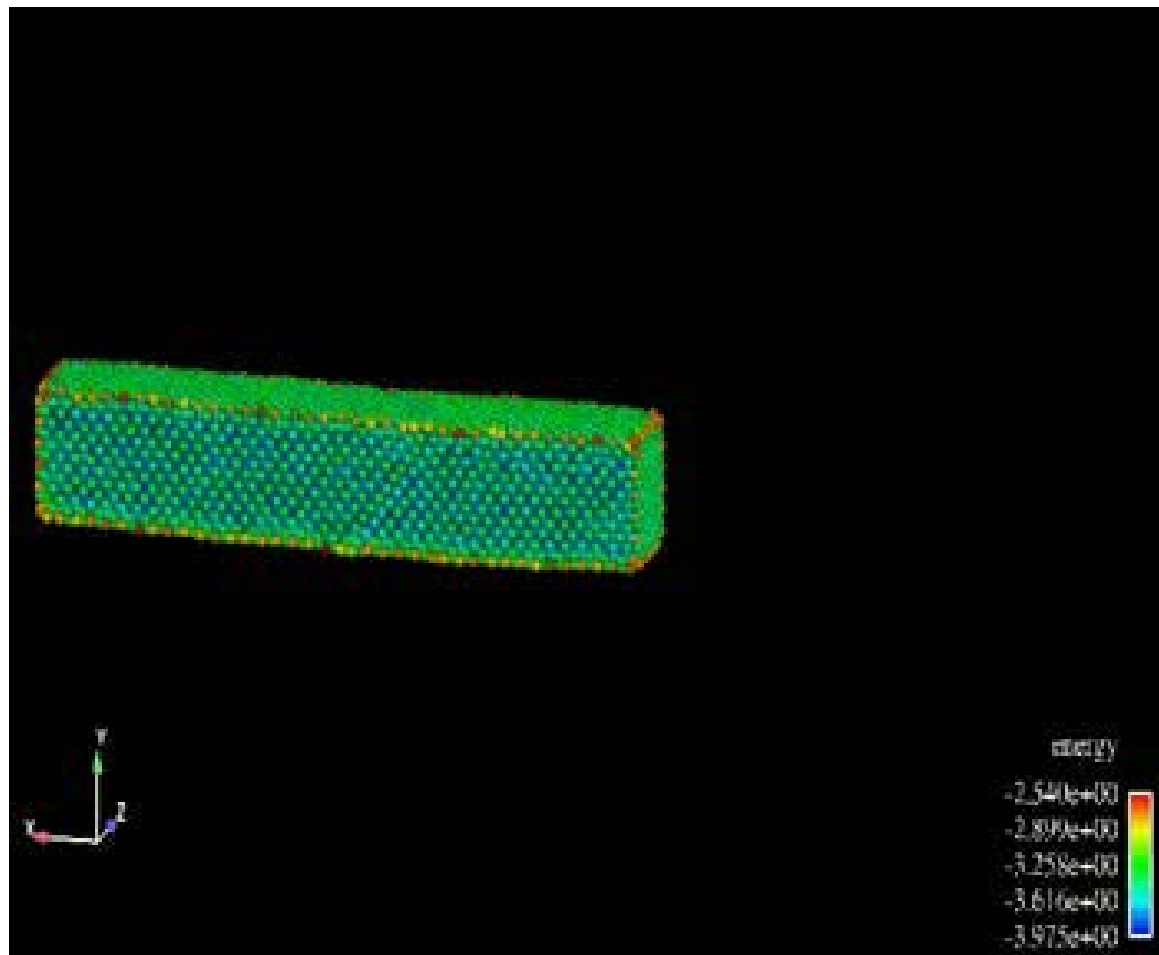
Пример: Ионные каналы



100 К частиц, $2 \cdot 10^6$ шагов интегрирования, время эволюции 20 нс

ММ в материаловедении

► Растяжение нанопроволоки



Modeling inelasticity and failure in gold nanowires, H. S. Park and J. A. Zimmerman, Phys Rev B, 72, 054106 (2005)

Вычислительные особенности

Вычислительные
затраты

Ввод начальных данных



Вычисление сил

$$\mathbf{F}_i = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_i} \quad \mathbf{F}_i = \sum_j \mathbf{F}_{ij}$$



Обновление координат

$$\frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i}$$

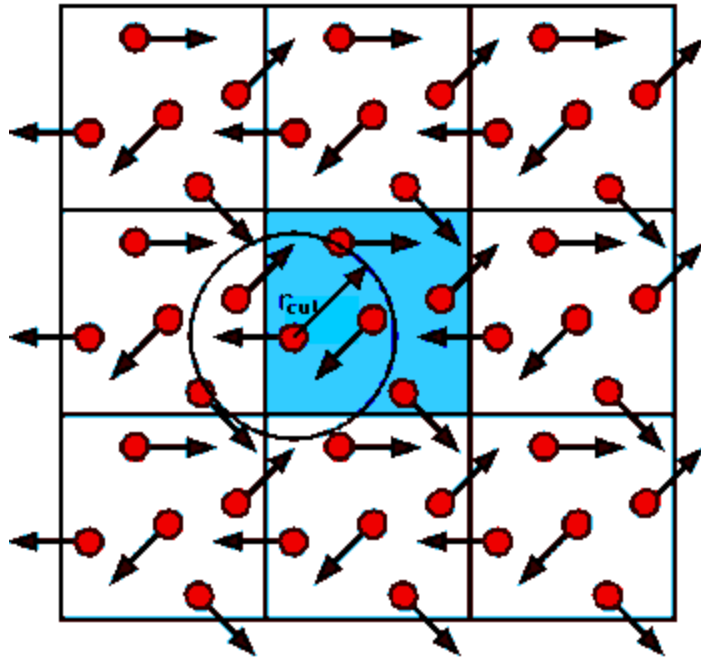


Вывод данных

$$\left. \begin{aligned} &\sum_{\theta} K_{\theta} (\theta - \theta_0)^2 + \\ &\sum_{\phi} K_{\phi} (1 + \cos(n\phi - \phi_0)) \end{aligned} \right\} \sim 2\%$$
$$\left. \begin{aligned} &\sum \epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] + \\ &\sum_{ij} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \end{aligned} \right\} \sim 90\%$$

$\sim 0.1\%$

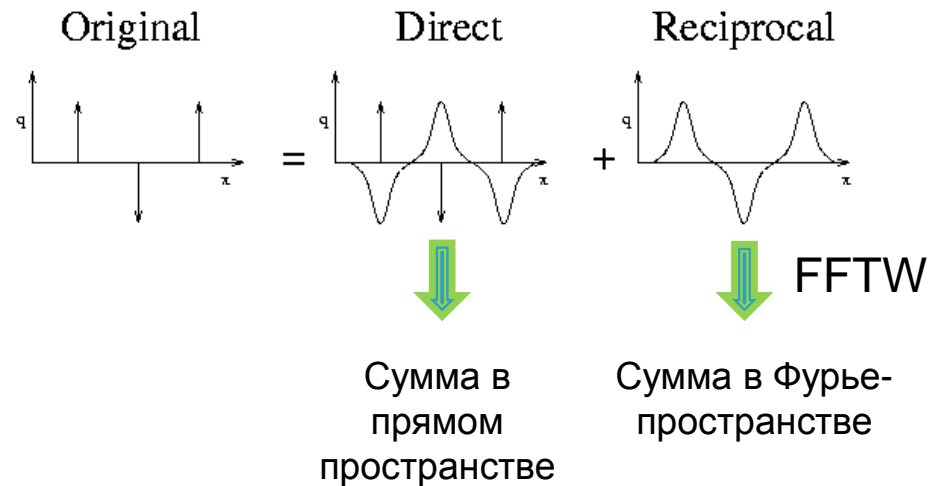
Вычислительные особенности



Периодические граничные условия

Взаимодействия
рассчитываются между
частицами внутри «радиуса
обрезания»

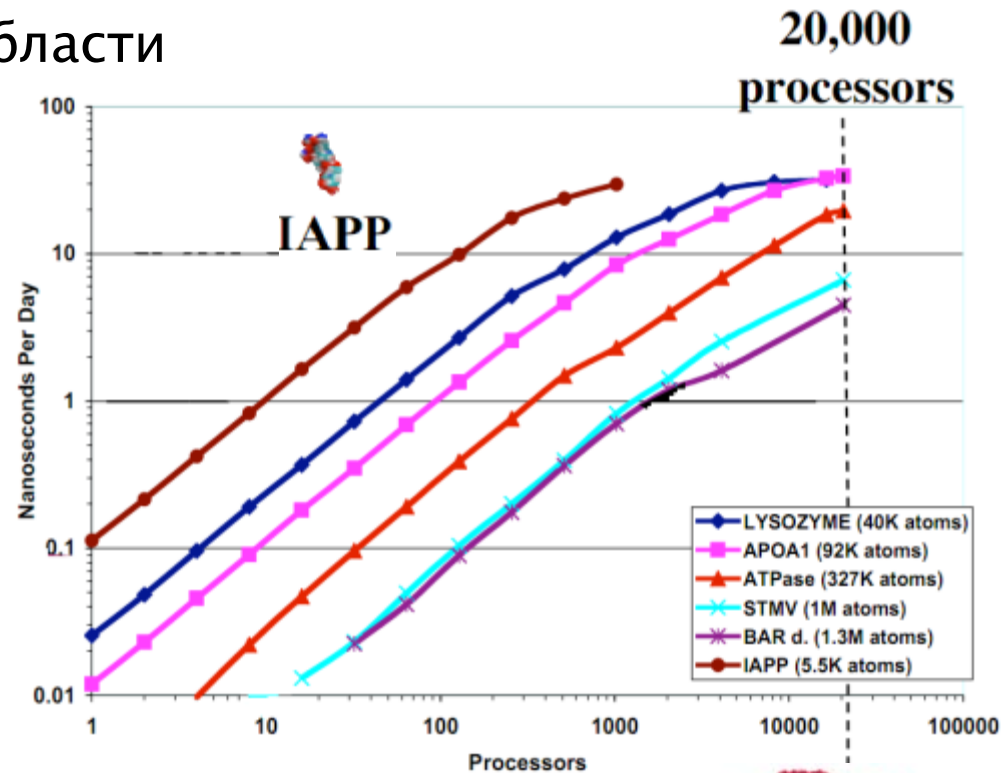
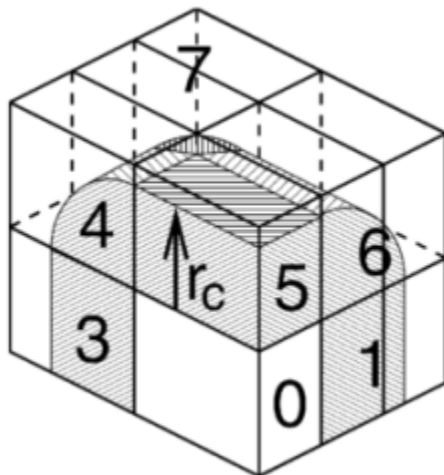
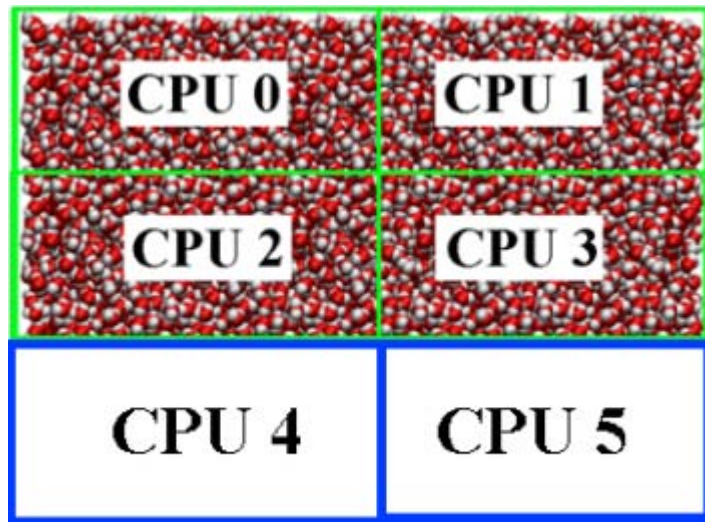
$$\phi(r_i) = q \sum_{j+}^{\infty} \frac{1}{|r_i - r_{j+}|} - q \sum_{j-}^{\infty} \frac{1}{|r_i - r_{j-}|}$$



Электростатические
взаимодействия являются
дальнодействующими

Параллельные расчеты

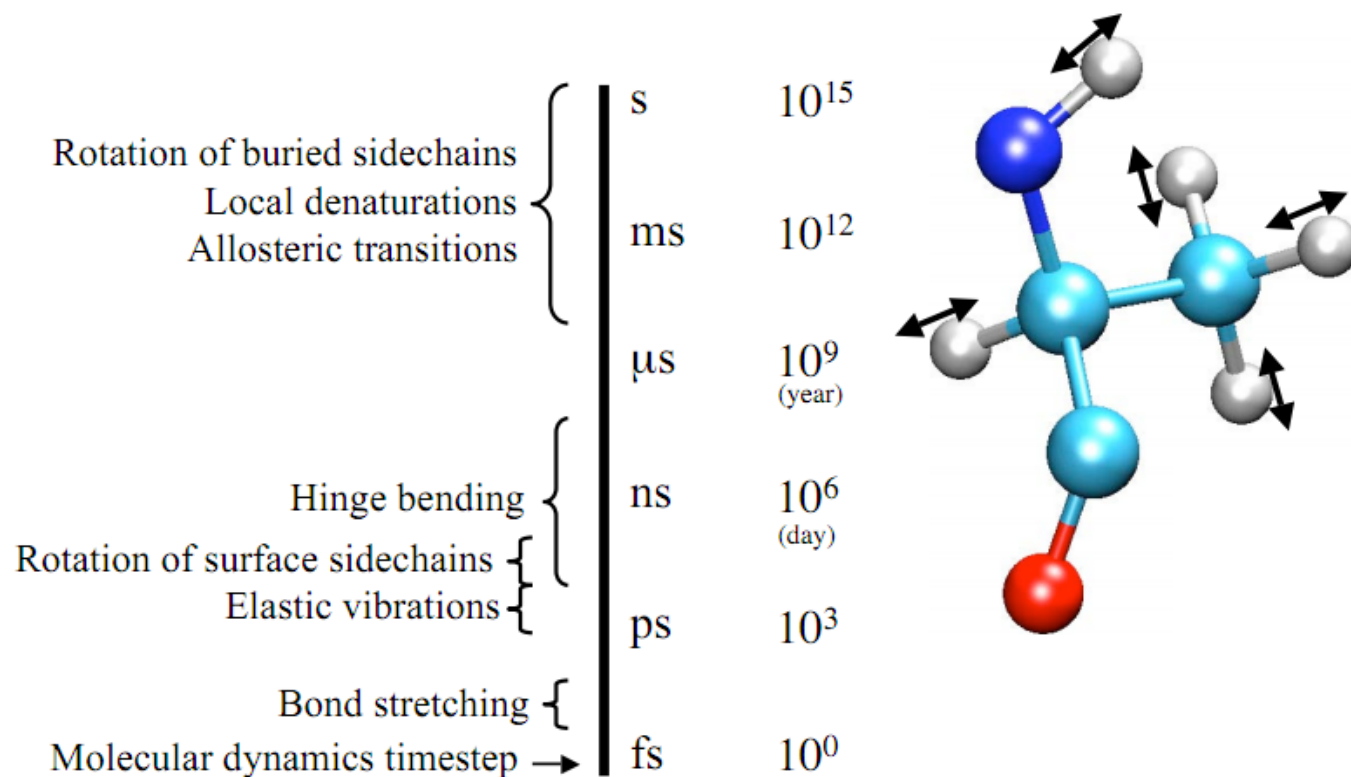
- ▶ Системы с распределенной памятью, MPI
- ▶ Методы декомпозиции области



Программа NAMD,
Klaus Schulten



Временные шкалы

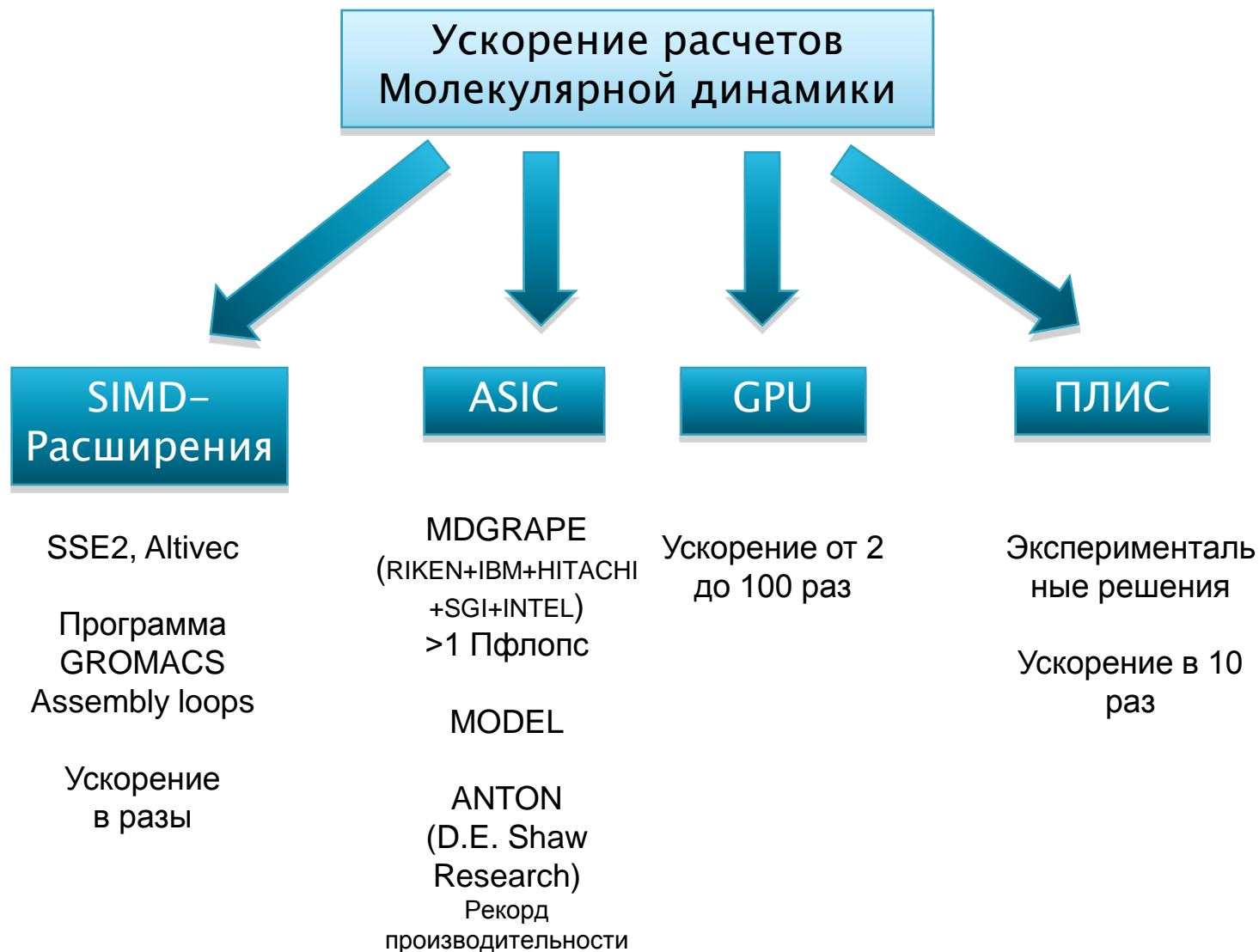


Рабочая станция (4 ядра): ~ 1 нс в день

Кластер-Суперкомпьютер (500 ядер) : ~ 100 нс в день

Специализированные архитектуры: ~ 10 000 нс в день

Различные подходы к ускорению



Application Specific Integrated Circuits

1991 - FASTRUN (Columbia University)

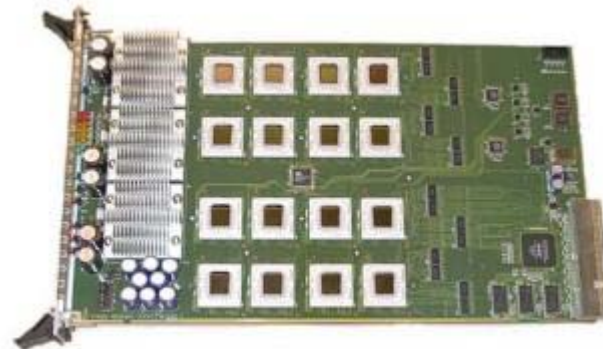
1994 - GRAPE2A

2001 - MDGRAPE-2 (RIKEN)

1999 – MODEL MD Engine (Xerox)

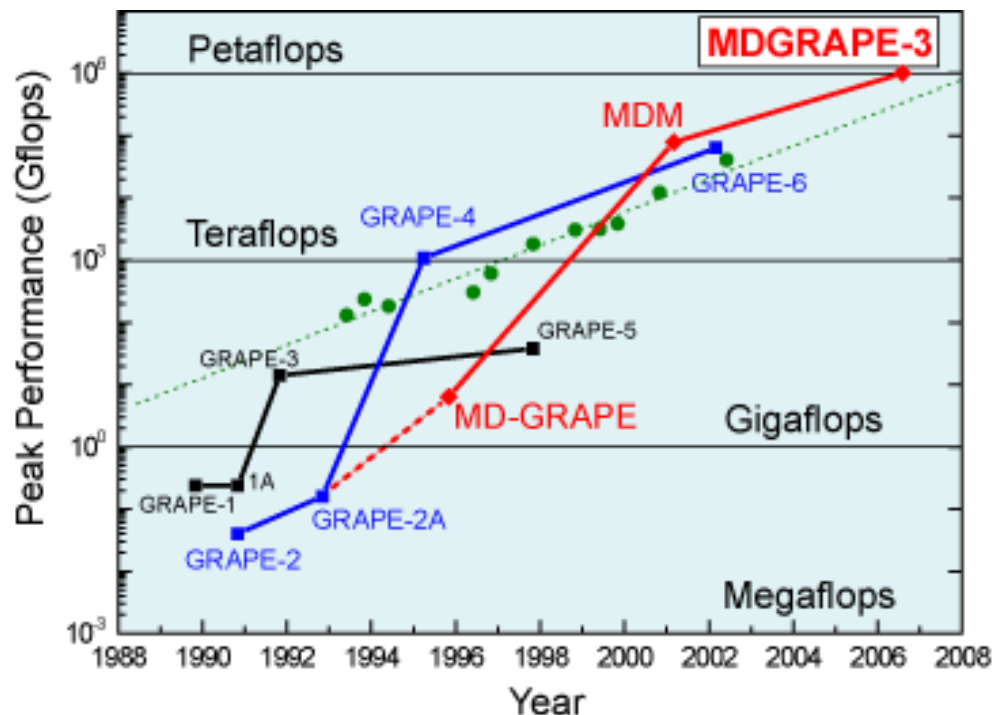
2006 - MDGRAPE-3 (RIKEN)

2008 - ANTON (D.E. Shaw Research)

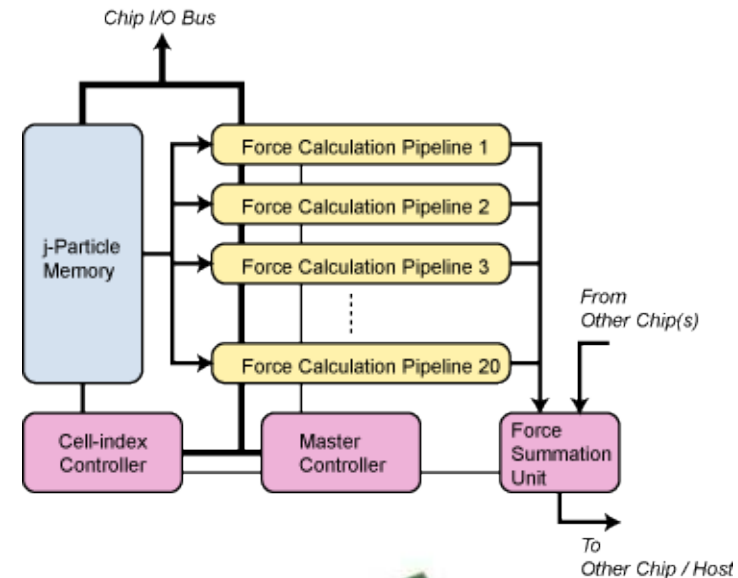


ASIC: MDGRAPE

- ▶ RIKEN, SGI JAPAN, INTEL, HITACHI
- ▶ 7 Gordon Bell Prizes



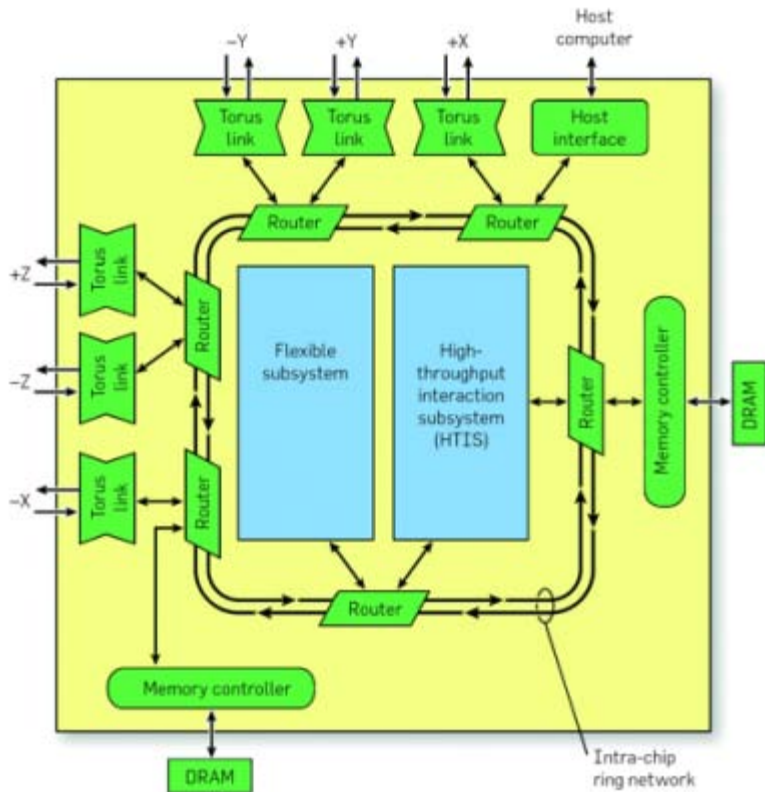
1M атомов, ~ 2 нс в день



20 pipelines, 660 equivalent-operations per cycle, peak performance 200 Gflops

*) <http://mdgrape.gsc.riken.jp/>

ASIC: ANTON (2008)



- ▶ Вычисления проводятся полностью на ASIC
- ▶ Сеть 3D тор, 512 узлов
- ▶ Пропускная способность соединений одного чипа $50.6 \times 12 = 607.2$ Гбит/с
- ▶ 23K атомов 17 000 нс в день

*) David E. Shaw et al. "Anton, A Special-Purpose Machine for Molecular Dynamics Simulation". Communications of the ACM (ACM) 51 (7): 91–97.

ASIC: ANTON (2008)

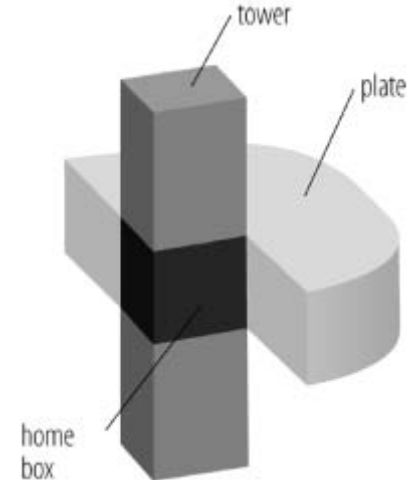


Figure 3: High-throughput interaction subsystem. The HTIS comprises an array of 32 PPIMs and an embedded control processor to coordinate the distribution of particles to the PPIM array.

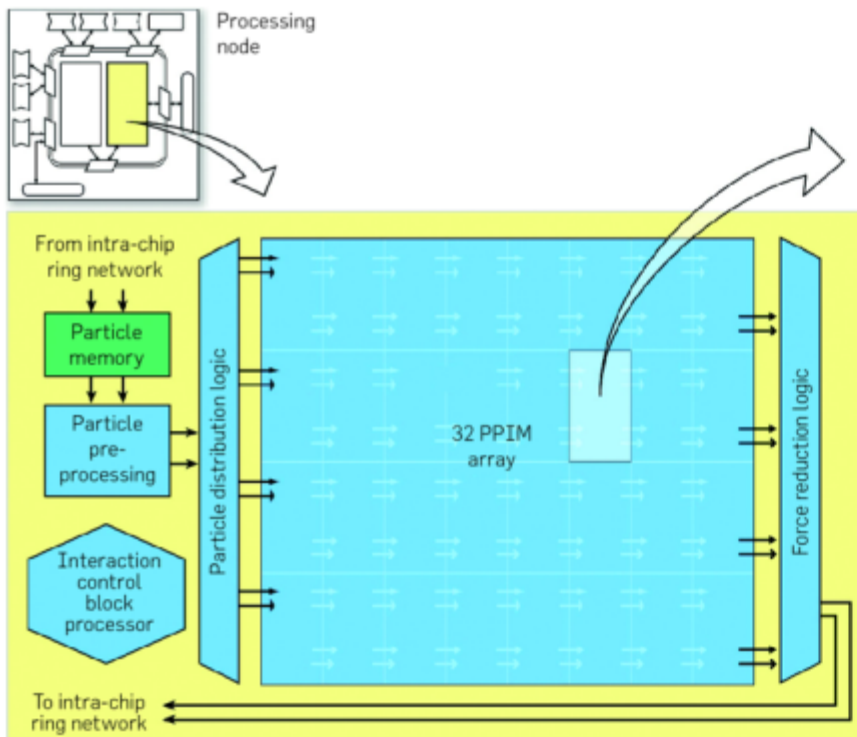
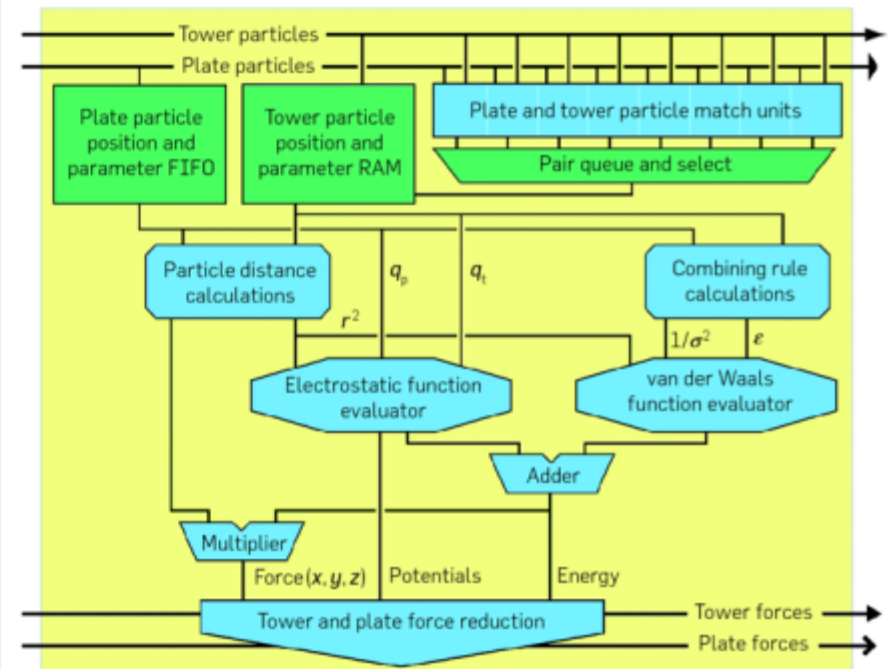


Figure 4: PPIM detail. This figure gives a sense of the numerical calculation units in a PPIM. The top portion of the figure shows the match units and particle memories. The lower portion shows the general structure of the force calculation pipelines.



ANTON (D.E. Shaw Research)

Finance whiz turns to science

David Shaw

Chief executive and chief scientist

D.E. Shaw & Co. and D.E. Shaw Research

David Shaw showed Wall Street the power of mathematics. By using complex algorithms on tiny stock market anomalies, he built one of the country's oldest and largest hedge funds, a giant with 1,500 employees in 12 offices in North America, Europe and Asia.

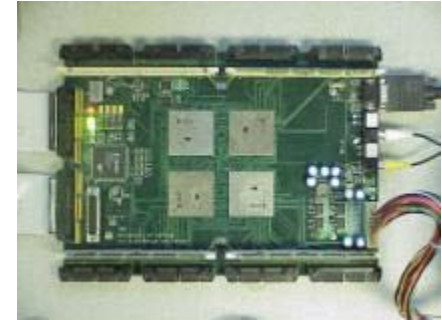


But Mr. Shaw's most important contribution may lie in the future. The publicity-shy doctor of computer science has withdrawn from worldly affairs to try to find a cure for cancer.

Forty of the world's top scientists work for Mr. Shaw in his midtown office. Current projects include developing a supercomputer, Anton, to allow scientists to observe structural changes in proteins. Another project, Desmond, offers a computer code for pharmaceuticals that will be free for universities and nonprofits.

FPGA

2003 TM3 4xVirtex-E 2000E FPGA: расчет системы частиц (ускорение $\times 0.29$)



2006 NAMD on SRC-6 MAP (уск. $\times 3$, 92K атомов)

**SRC
MAP[®] PROCESSOR**

2007 AMBER on SRC-6 MAP (уск. $\times 4$, 23K атомов)



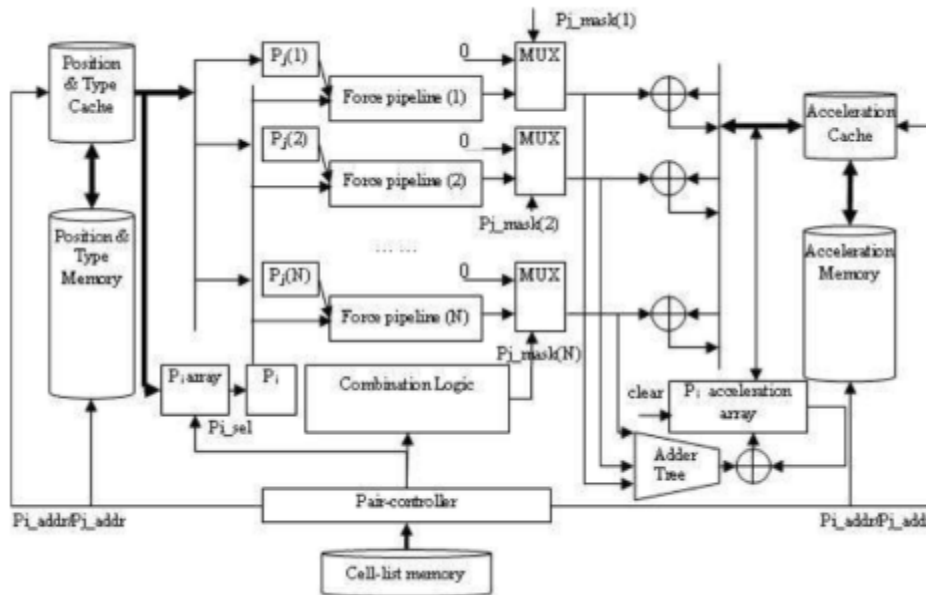
2007 попытки заменить MDGRAPE чипы на FPGA

2008 Boston University (Wildstar II),
explicit HDL design (уск. $\times 16$)



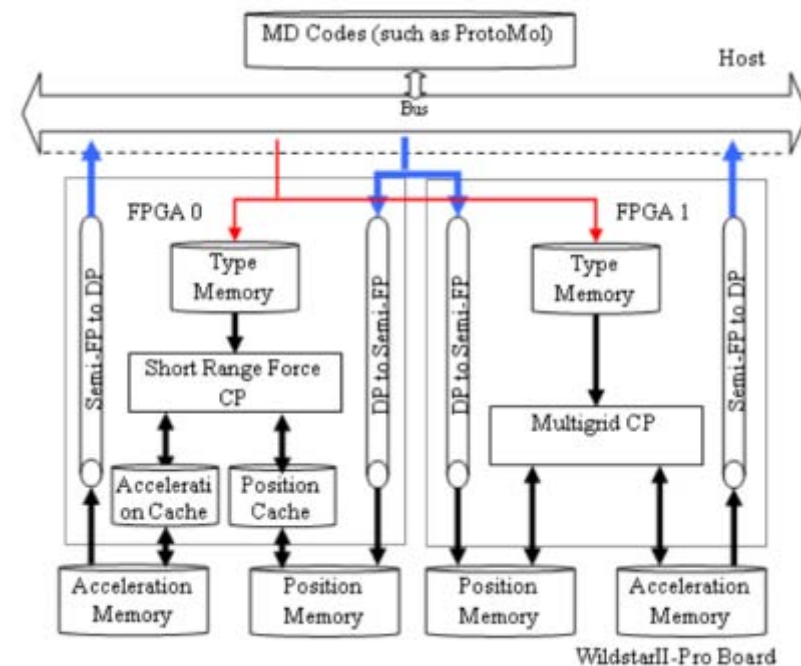
WILDSTAR II Pro for PCI
with Xilinx Virtex II Pro FPGAs

FPGA MD, Boston University (Wildstar II)



WILDSTAR II Pro for PCI
with Xilinx Virtex II Pro FPGAs

- Ускорение в 16 раз
- Нестандартные подходы и алгоритмы
- К моменту завершения проекта (4 года) оборудование устарело



*) Yongfeng Gu, PHD thesis, 2008, Boston University

GPU: применение в ММ

pre CUDA

2006 - Folding@Home, BrookGPU, Stanford

2007 – NAMD

CUDA

OpenMM, LAMMPS, HOOMD, ACEMD

2010 - AMBER

Факторы развития:

- доступность GPU (ср. FPGA, CELL)
- архитектура совместима с задачей
- развитие технологии
- поддержка NVIDIA

Folding@home
distributed computing

NAMD
Scalable Molecular Dynamics

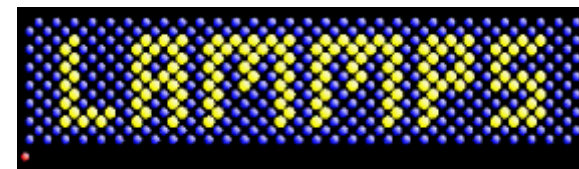


HOOMD
—blue

GROMACS FAST.
FLEXIBLE.
FREE.

ACEMD

Amber



GPU

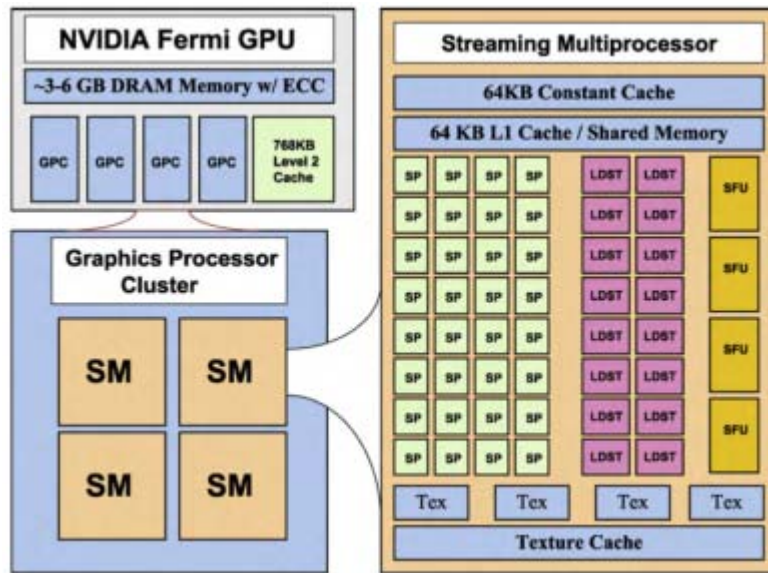


Схема Fermi GPU

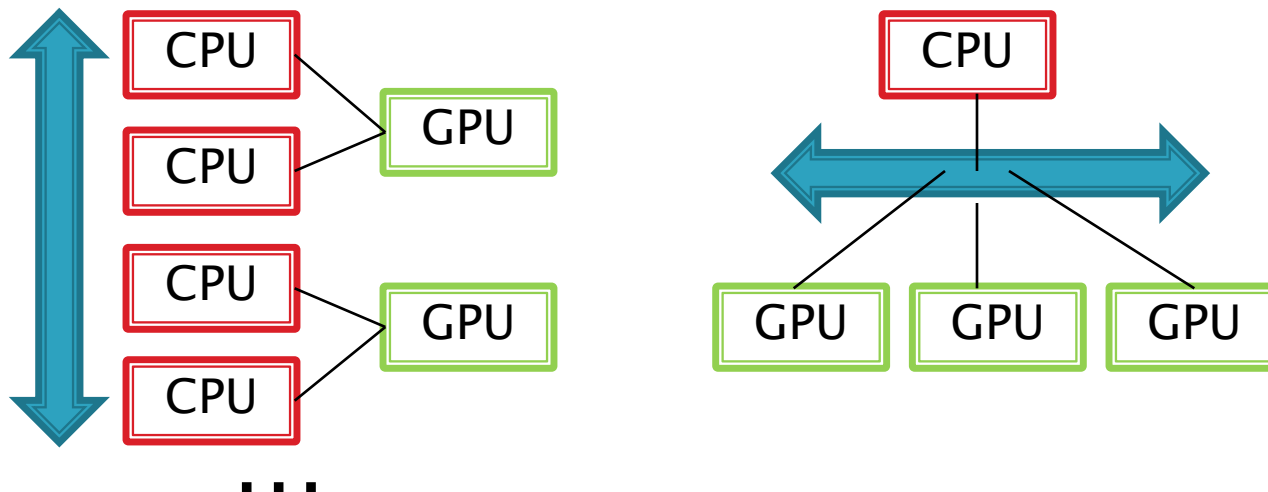
- Массивно параллельная многонитевая архитектура
- 512 SP (steaming processors) (ADD, SUB, MAD, ...)
- 64 SFU (special function units) (SIN,RSQRT,EXP,...)
- 1288 ГФлопс (одинарная точность)
- 515.2 ГФлопс (двойная точность)
- High memory bandwidth 100 Gb/s

Особенности работы:

- Маленький кэш, необходимость группировать данные в памяти
- Необходима параллельная загрузка на уровне 10 – 30 тыс. независимых нитей.
- Медленный перенос данных от хоста к GPU
- Переосмысление алгоритмов МД.

GPU в ММ: подходы к ускорению

GPU – ускоритель для расчета взаимодействий	Гибридный вариант CPU – только для коммуникации	Все вычисления производятся на GPU
NAMD, AMBER	ACEMD	OpenMM, GROMACS
60+ GPU	3 GPU	1 GPU
Маленькое ускорение	Плохо масштабируется	Не масштабируется



GPU в ММ: проблемы и решения

•Двойная vs одинарная точность

- AMBER: hybrid SPDP model – одинарная точность при вычислении сил, двойная при суммировании и интегрировании

•Латентность передачи данных CPU–GPU

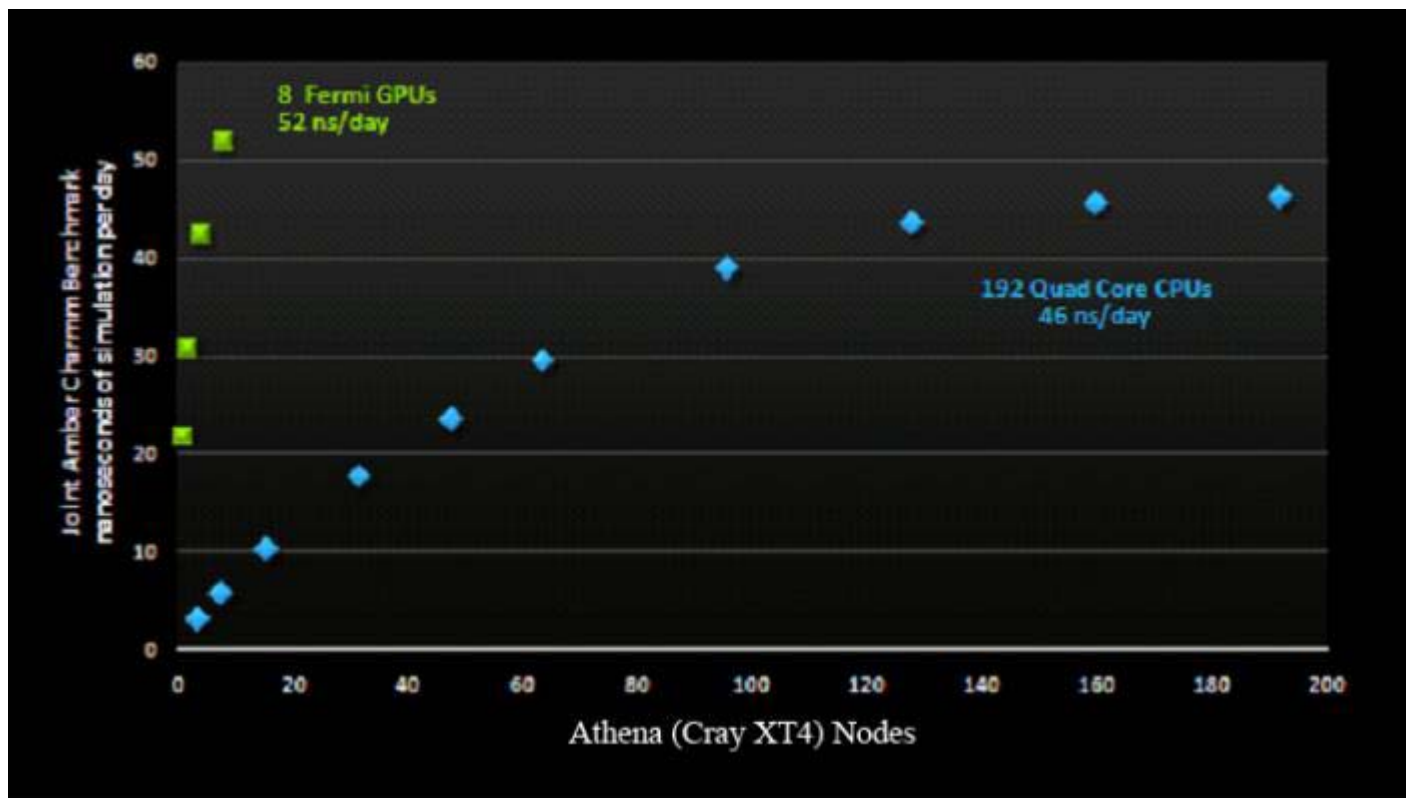
- OpenMM: проводить все вычисления на GPU
- Реже записывать данные вычислений
- AMBER, ACEMD: хранить все данные в памяти каждого GPU

•Массивно–параллельное исполнение

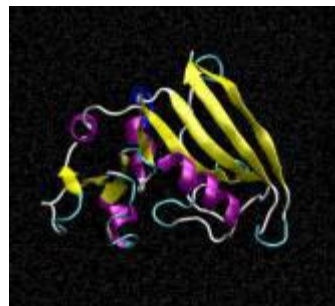
•Медленный доступ к памяти

- Использование регистров
- Создание scratch-массивов

GPU в MM: лучшие результаты



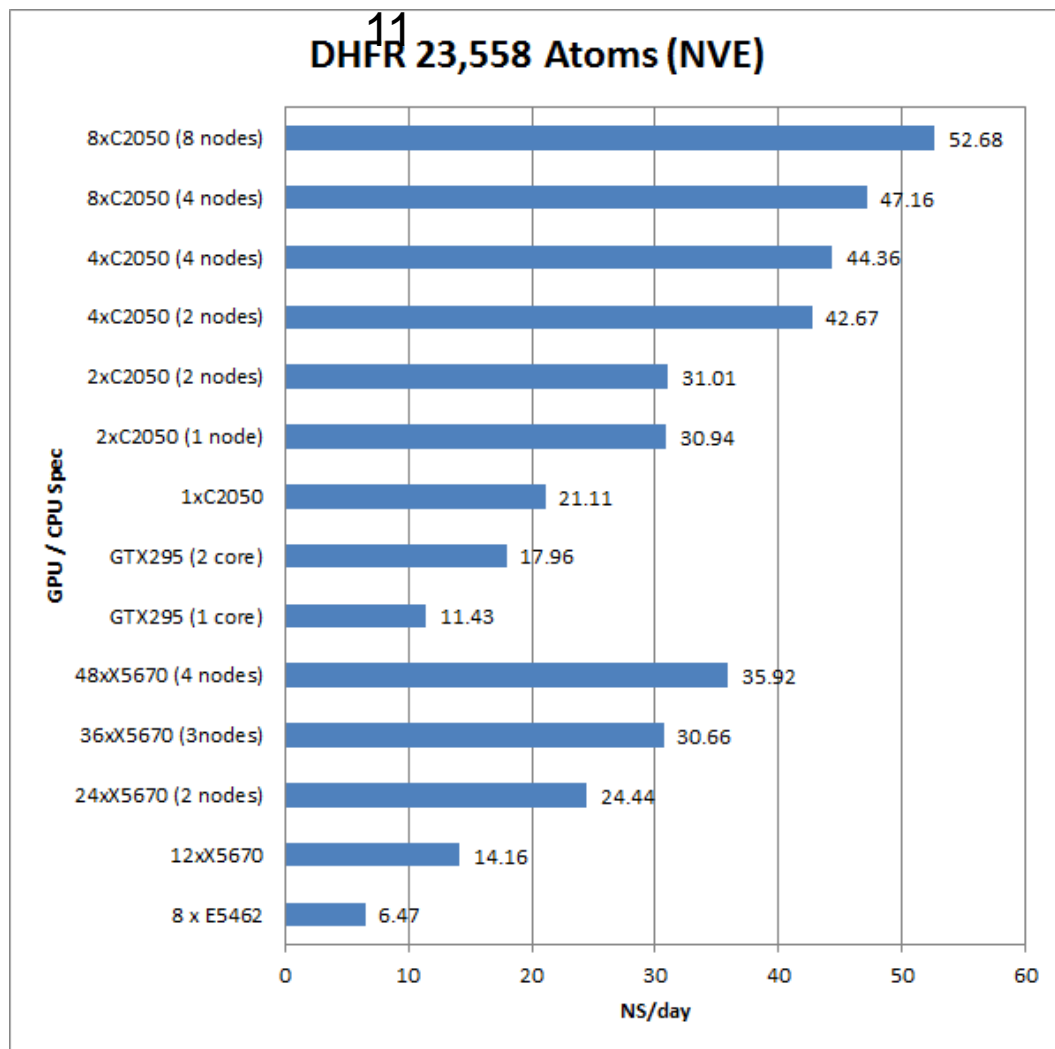
Пакет AMBER 11



23.5K атомов,
явный растворитель

GPU в MM: лучшие результаты

AMBER



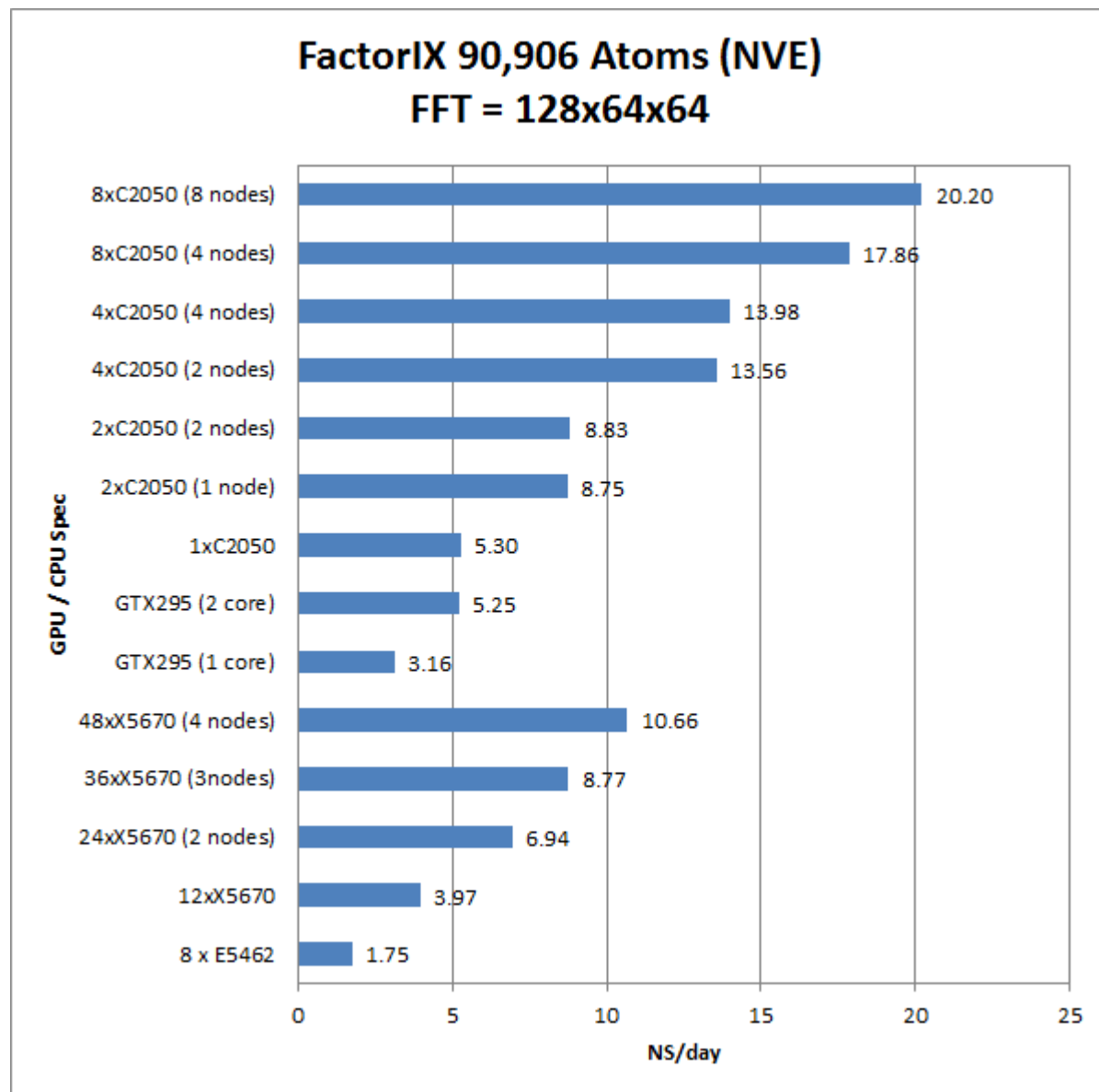
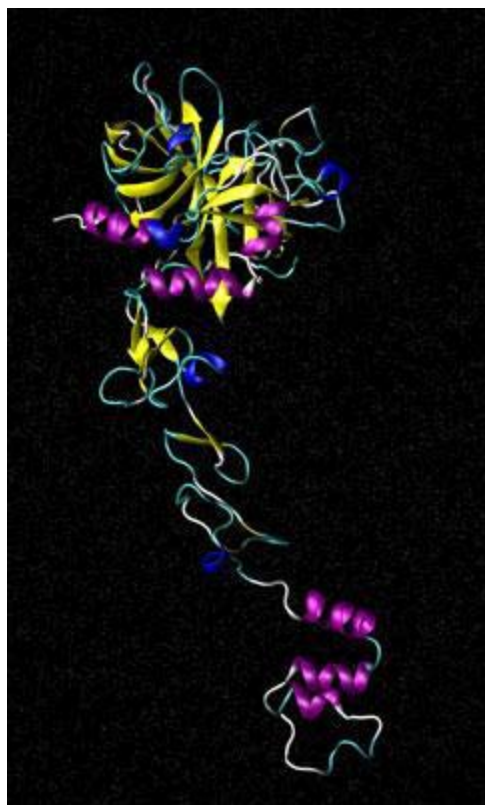
NAMD

- 1M атомов:
60 GPU ~ 330 CPU ядер
- Энергопотребление
уменьшилось в 2.7 раза

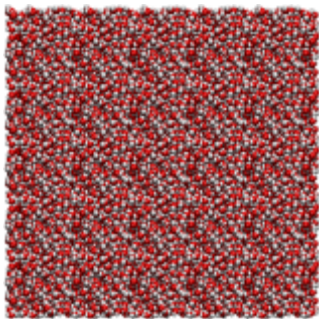
- Цена/производительность
- Энергоэффективность
- Размеры
вычислителя

*) <http://ambermd.org/gpus/>

GPU: AMBER (100K, явный растворитель)

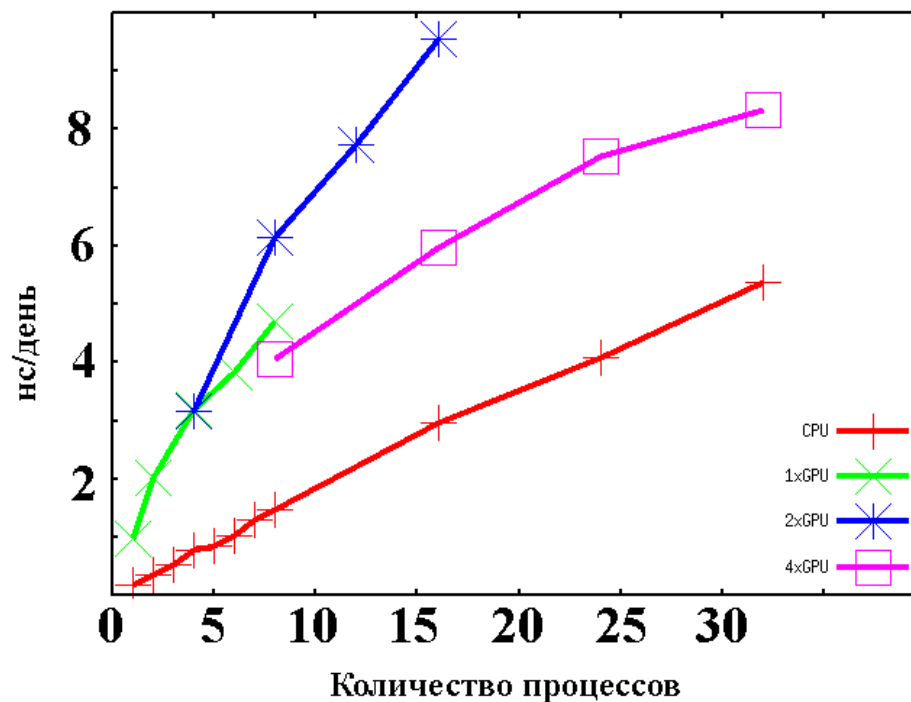
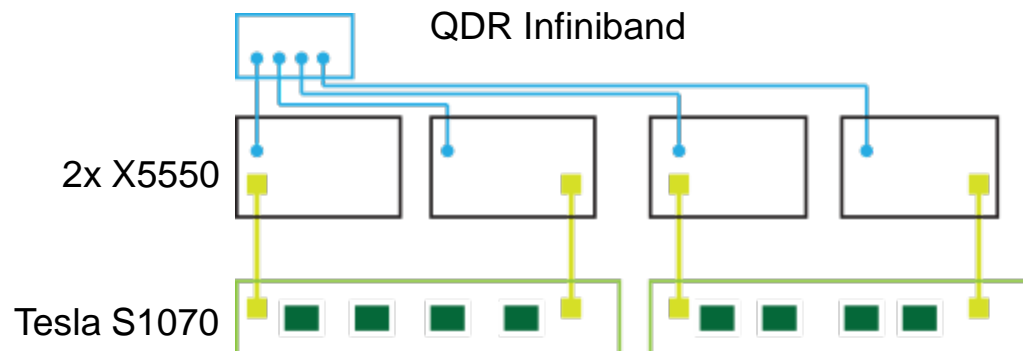


GPU: рабочий пример



100K атомов
32 000 молекул воды

GROMACS
CPU 0.5 нс/день
32 CPU 11 нс/день
GPU 2 нс/день



← Программа
NAMD

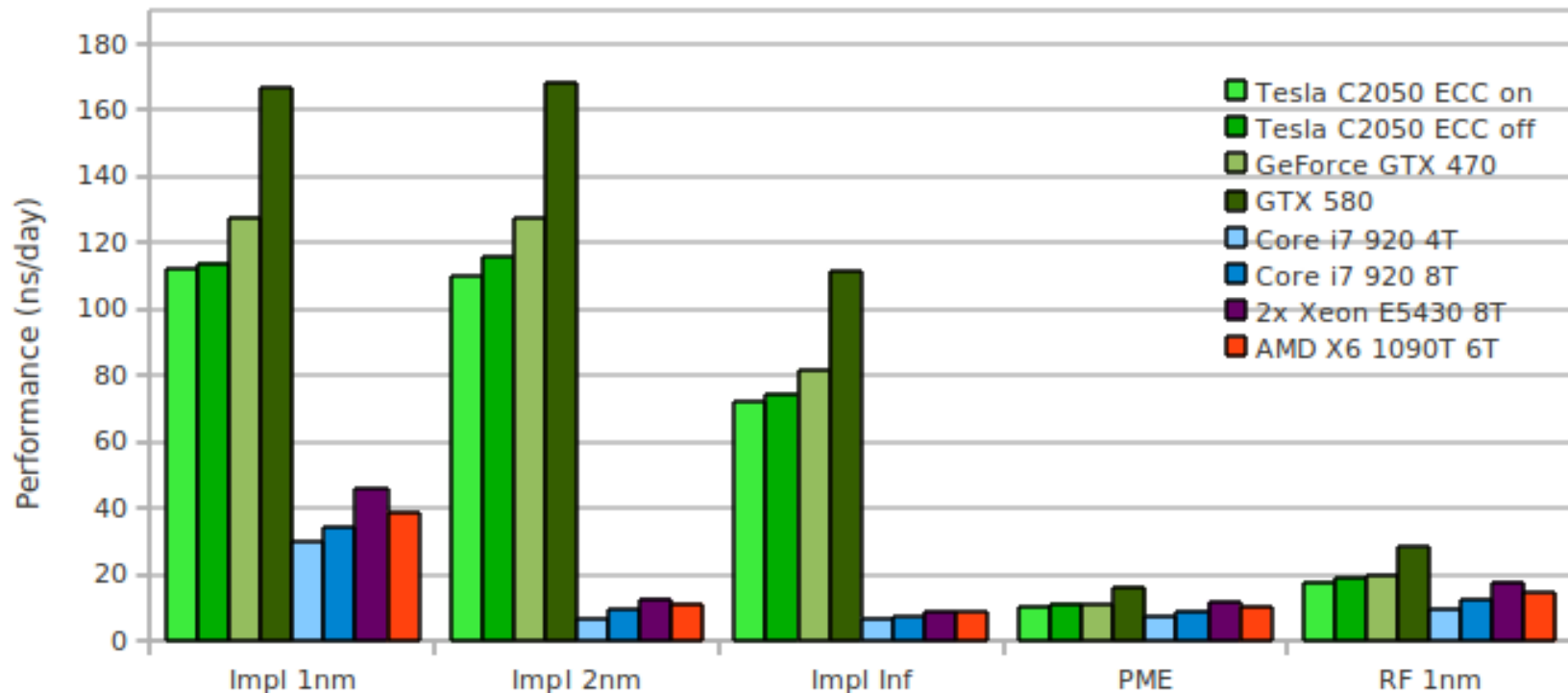
GPU в MM: особые случаи

▶ Неявный растворитель

Необходимо решение дифференциальных уравнений типа Пуассона-Больцмана

GROMACS 4.5 performance comparison

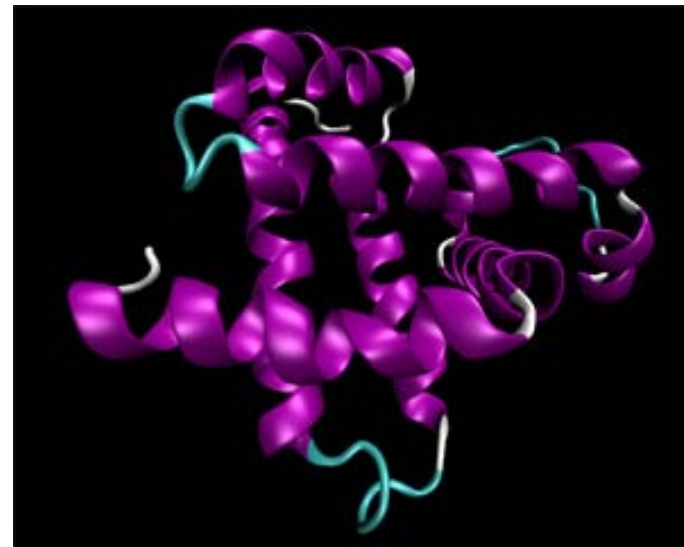
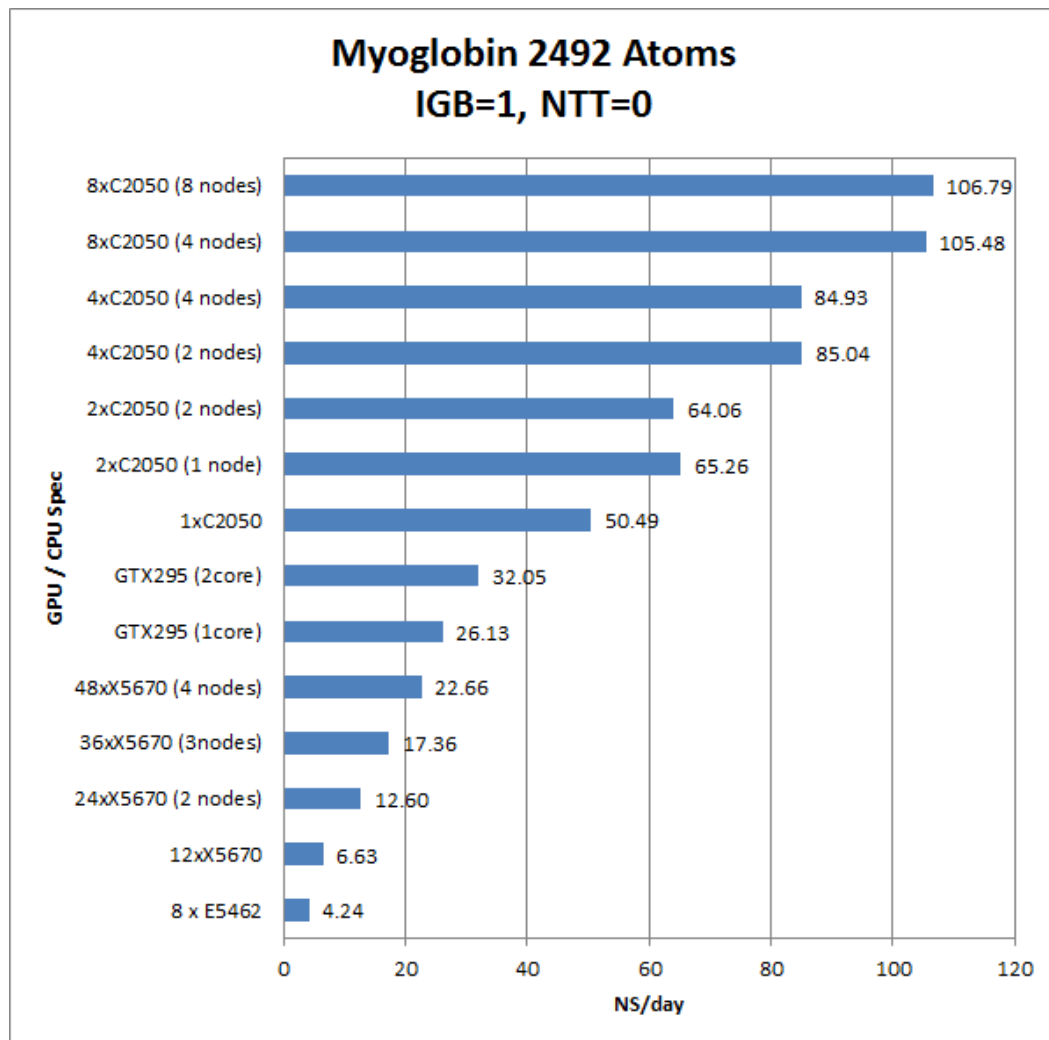
system: DHFR implicit (2489 atoms), solvated (23569 atoms)



*) <http://www.gromacs.org>

GPU в MM: особые случаи

- ▶ Неявный растворитель + отсутствие радиусов обертзани



Выводы

- ▶ Гибридные и специализированные архитектуры обладают широкими возможностями для ускорения расчетов ММ.
- ▶ Вычислители на базе ASIC позволяют достичь рекордных временных масштабов, но дороги и эксклюзивны.
- ▶ Вычислители на GPU уже сейчас представляют альтернативу вычислениям на CPU в области ММ.
- ▶ FPGA – потенциально пригодны для задач ММ.

Спасибо за внимание!