Пресмятане на електростатични взаимодействия в молекулната динамика с уравнение на Поасон

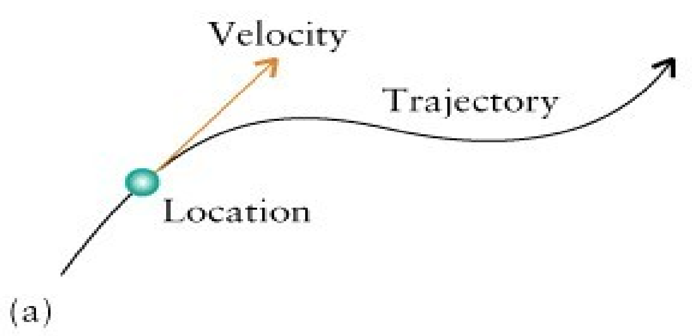
Дамян Грънчаров
докторант към катедра Атомна физика
специалност "Физика на атомите и молекулите"

Атестационен семинар 3-та година

Съдържание

- Накратко за МД
- Методи за пресмятане на електростатични взаимодействия в МД
- Библиотека за пресмятане на уравнението на Поасон
- Кратко отклонение: копроцесор Intel Xeon Phi
- Резултати
- Академични данни

Класическа динамика на атомни системи



$$(q,p) = (q_1, \ldots, p_{3N})$$

point in the phase space of the system

Hamilton's equations

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial H/\partial p \\ -\partial H/\partial q \end{pmatrix} = i\mathcal{L}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}(t) = \exp(i\mathcal{L}t)\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}(0)$$

Liouville operator $\mathcal{L}$

$$H = T + V = \sum_i p_i^2 / 2m_i + V(x)$$

in Cartesian coordinates

$$i\mathcal{L}\begin{pmatrix} x \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v \\ F(x)/m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v \\ o \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} o \\ F/m \end{pmatrix} = i\mathcal{L}_v + i\mathcal{L}_F$$

$\mathcal{L}_v$ и $\mathcal{L}_F$ do not commute

$i\,\mathcal{L}_v = \{\quad, H\}$

МД интегратор

$$\exp(i\mathcal{L}\Delta t) = \exp(\frac{1}{2}\, i\mathcal{L}_F\Delta t)\exp(i\mathcal{L}_v\Delta t)\exp(\frac{1}{2}\, i\mathcal{L}_F\Delta t)$$
$$= U_F(\frac{1}{2}\,\Delta t)U_v(\Delta t)U_F(\frac{1}{2}\,\Delta t)$$

One-step propagators;
step Δt; apply on $x(t_n), v(t_n)$

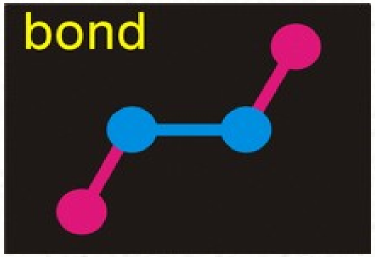
$$U_F(\tfrac{1}{2}\,\Delta t)\, U_v(\Delta t)\, U_F(\tfrac{1}{2}\,\Delta t)$$

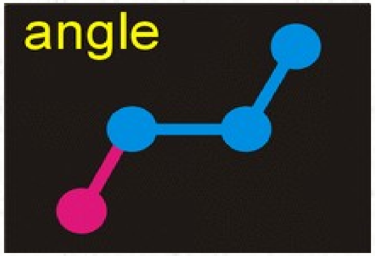
$$U_F(\Delta t)\begin{pmatrix} x \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ v + (F(x)/m)\Delta t \end{pmatrix}$$
$$U_v(\Delta t)\begin{pmatrix} x \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x + v\Delta t \\ v \end{pmatrix}$$

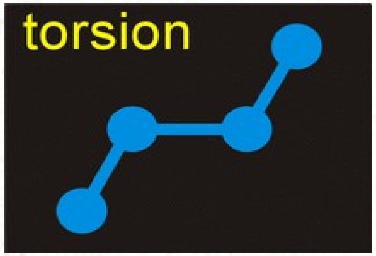
$$v_{n+1} = v_n + \frac{1}{2m}F_n\Delta t + \frac{1}{2m}F_{n+1}\Delta t$$
$$x_{n+1} = x_n + \left(v_n + \frac{1}{2m}F_n\Delta t\right)\Delta t$$

Силово поле

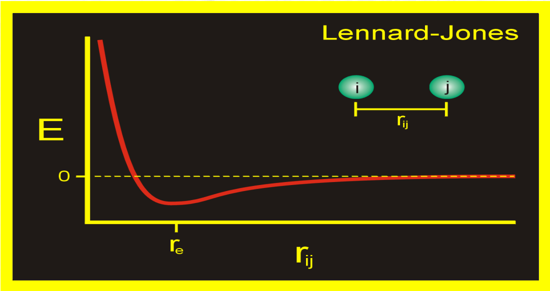
$$V = \sum_i V_s + \sum_i V_a + \sum_i V_t + \sum_i V_v + \sum_i V_e + \dots$$

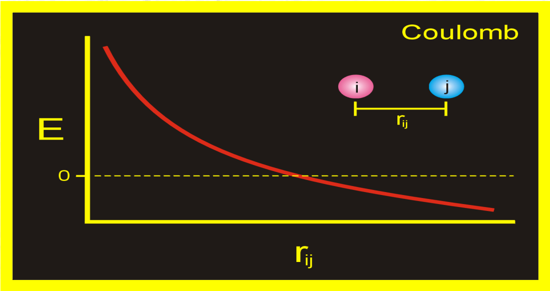






$$v_b(r) = \tfrac{1}{2} k_b (r - r_0)^2 \qquad v_a(\theta) = \tfrac{1}{2} k_a (\theta - \theta_0)^2 \qquad v_d(\varphi) = k_d (1 + \cos(n\varphi - \varphi_0))$$

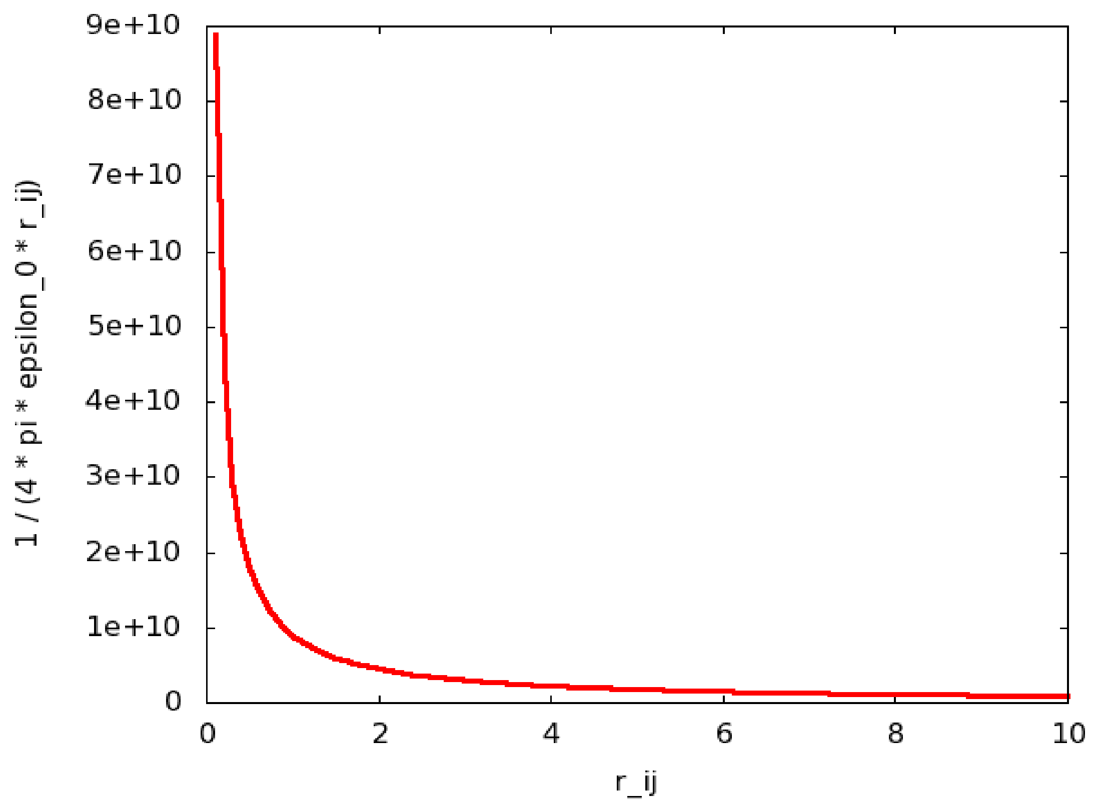




$$V_{lj}(r_{ij}) = \frac{C_{ij}^{(12)}}{r_{ij}^{12}} - \frac{C_{ij}^{(6)}}{r_{ij}^{6}} \qquad V_c(r_{ij}) = \frac{q_i q_j}{4\pi\varepsilon_0 r_{ij}}$$

Електростатичен потенциал

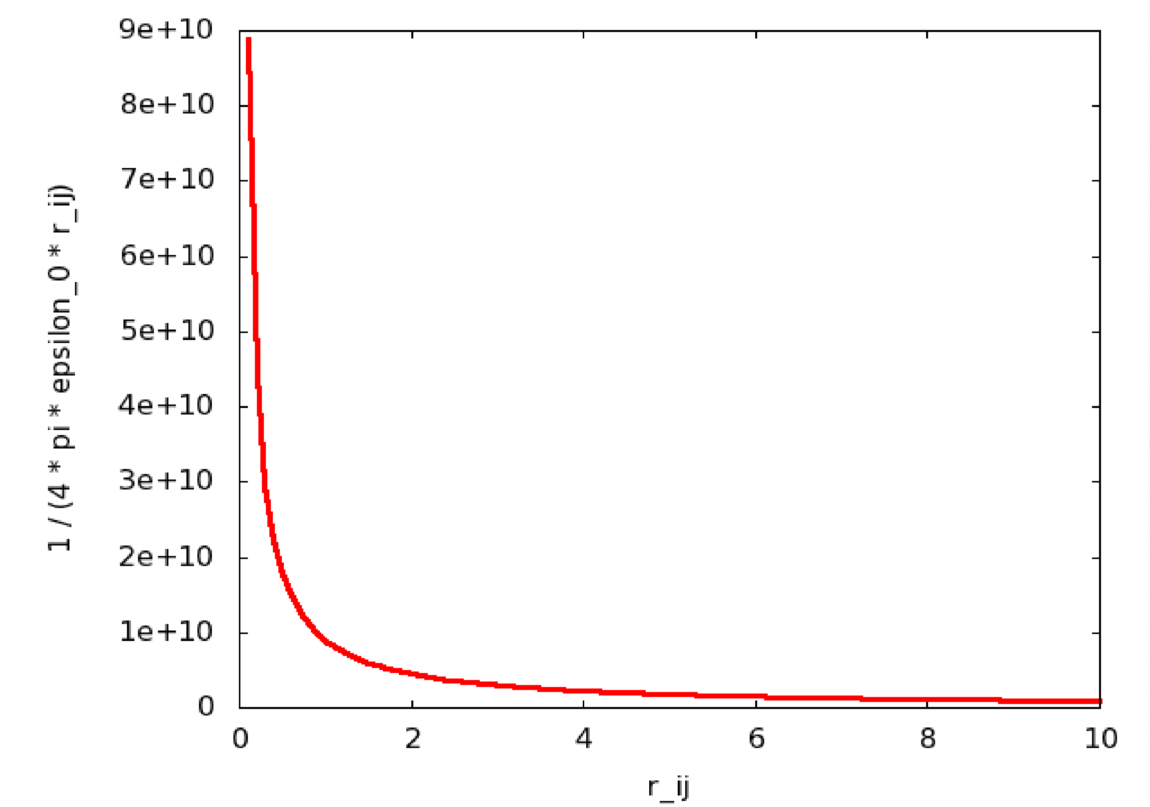
$$\sum_{pairs i,j} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0\epsilon_1}\frac{1}{r_{ij}}$$



Електростатичен потенциал

$$\sum_{pairs i,j} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0\epsilon_1}\frac{1}{r_{ij}}$$

O(N^2)



Методи за пресмятане на ЕВ

- Пълна двучастична сума
- Пълна двучастична сума с обрязване
- Суми на Евалд
  - Пресмятане на опашката на взаимодействието в реципрочното Фурие пространство
- Метод с мултиполи
  - Клъстеризиране на далечни заряди в групи с общ еквивалентен заряд
- Методи на решетка

Методи на решетка

- PPPM; PME, SPME etc.
- Изчислителна сложност O(N*logN)
- Решетка от точки, която запълва симулационния обем
- Правило за приписването на зарядите към точките от решетката
- Решаване на уравнение на Поасон върху решетката
- Разделяне на късо- и далекодействащи взаимодействия - PP/PM

Библиотека за решаване на уравнението на Поасон

- Приписване на зарядите към точката на решетката
  - Стъпка на дискретизация h=0.5Å
  - Плътността ρ на заряда q(x,y,z) е константа в обем h^3 и начало i,j,k
  - i,j,k – цели числа от делението на x,y,z на h
  - $q(x,y,z) \longrightarrow \rho(i,j,k)$
- Решаваме уравнението на Поасон

Уравнение на Поасон

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\epsilon}$$

- Дискретизираме на решетката:

$$(\phi_{xx})_{ijk} + \left(\phi_{yy}\right)_{ijk} + (\phi_{zz})_{ijk} = -f_{ijk}$$

- Диференциален оператор от втори ред:

$$(\phi_{\alpha\alpha})_{ijk} = \frac{1}{{h_\alpha}^2}\delta_\alpha^2 \phi_{ijk}$$

$$\delta_{\mathrm{x}}^2 = \phi_{i-1,j,k} - 2\phi_{i,j,k} + \phi_{i+1,j,k}$$
$$\delta_{\mathrm{y}}^2 = \phi_{i,j-1,k} - 2\phi_{i,j,k} + \phi_{i,j+1,k}$$
$$\delta_{\mathrm{z}}^2 = \phi_{i,j,k-1} - 2\phi_{i,j,k} + \phi_{i,j,k+1}$$

Уравнение на Поасон

- 27-точкова схема на дискретизация:

$$
\begin{aligned}
144h^2\rho = -600\varphi_{i,j,k} + 60\,[&\varphi_{i-1,j,k} + \varphi_{i+1,j,k} + \\
&\varphi_{i,j-1,k} + \varphi_{i,j+1,k} + \varphi_{i,j,k-1} + \varphi_{i,j,k+1}] + \\
18\,[&\varphi_{i-1,j-1,k} + \varphi_{i-1,j+1,k} + \varphi_{i+1,j-1,k} + \varphi_{i+1,j+1,k} + \\
&\varphi_{i-1,j,k-1} + \varphi_{i+1,j,k-1} + \varphi_{i-1,j,k+1} + \varphi_{i+1,j,k+1} + \\
&\varphi_{i,j-1,k-1} + \varphi_{i,j+1,k-1} + \varphi_{i,j-1,k+1} + \varphi_{i,j+1,k+1}] + \\
3\,[&\varphi_{i-1,j-1,k-1} + \varphi_{i+1,j-1,k-1} + \varphi_{i-1,j+1,k-1} + \varphi_{i+1,j+1,k-1} + \\
&\varphi_{i-1,j-1,k+1} + \varphi_{i+1,j-1,k+1} + \varphi_{i-1,j+1,k+1} + \varphi_{i+1,j+1,k+1}]
\end{aligned}
$$

The Poisson equation

- Система линейни уравнения

$$A\varphi = b$$

- A е тридиагонална разредена матрица

$$A = \begin{pmatrix} R & S & & & & \\ S & R & S & & & \\ & S & R & S & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & S & R & S \\ & & & & S & R \end{pmatrix}$$

$$R = \begin{pmatrix} R_1 & R_2 & & & & \\ R_2 & R_1 & R_2 & & & \\ & R_2 & R_1 & R_2 & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & R_2 & R_1 & R_2 \\ & & & & R_2 & R_1 \end{pmatrix}$$

$$S = \begin{pmatrix} S_1 & S_2 & & & & \\ S_2 & S_1 & S_2 & & & \\ & S_2 & S_1 & S_2 & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & S_2 & S_1 & S_2 \\ & & & & S_2 & S_1 \end{pmatrix}$$

The Poisson equation

$$R_1 = \begin{pmatrix} -600 & 60 & & & & & \\ 60 & -600 & 60 & & & & \\ & 60 & -600 & 60 & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & 60 & -600 & 60 \\ & & & & & 60 & -600 \end{pmatrix}$$

$$S_1 = \begin{pmatrix} 60 & 18 & & & & & \\ 18 & 60 & 18 & & & & \\ & 18 & 60 & 18 & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & 18 & 60 & 18 \\ & & & & & 18 & 60 \end{pmatrix}$$

$$R_2 = \begin{pmatrix} 60 & 18 & & & & & \\ 18 & 60 & 18 & & & & \\ & 18 & 60 & 18 & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & 18 & 60 & 18 \\ & & & & & 18 & 60 \end{pmatrix}$$

$$S_2 = \begin{pmatrix} 18 & 3 & & & & & \\ 3 & 18 & 3 & & & & \\ & 3 & 18 & 3 & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & 3 & 18 & 3 \\ & & & & & 3 & 18 \end{pmatrix}$$

- Алгоритъм за търсене на решението: BiCGstab

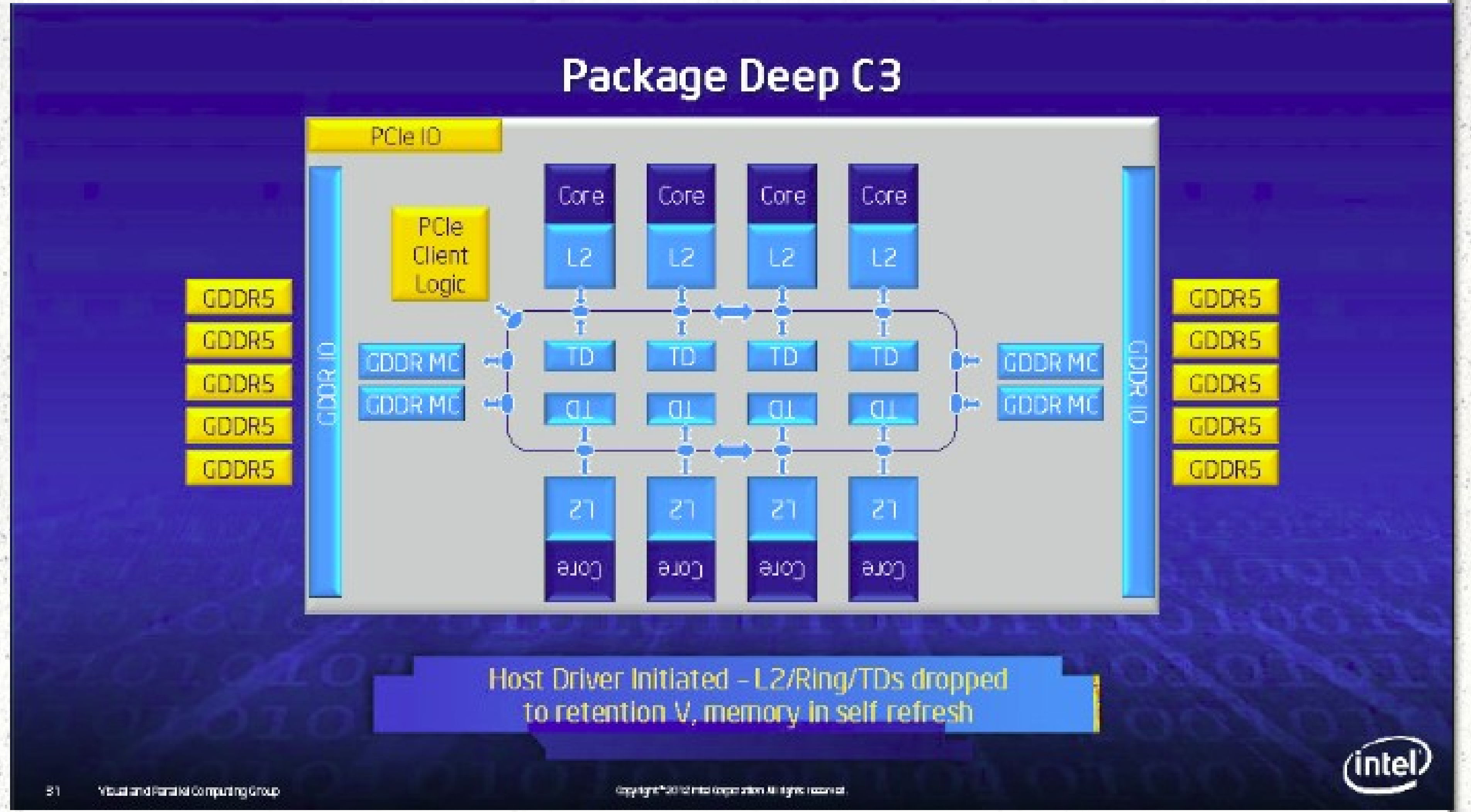
Обещаното кратко отклонение

...

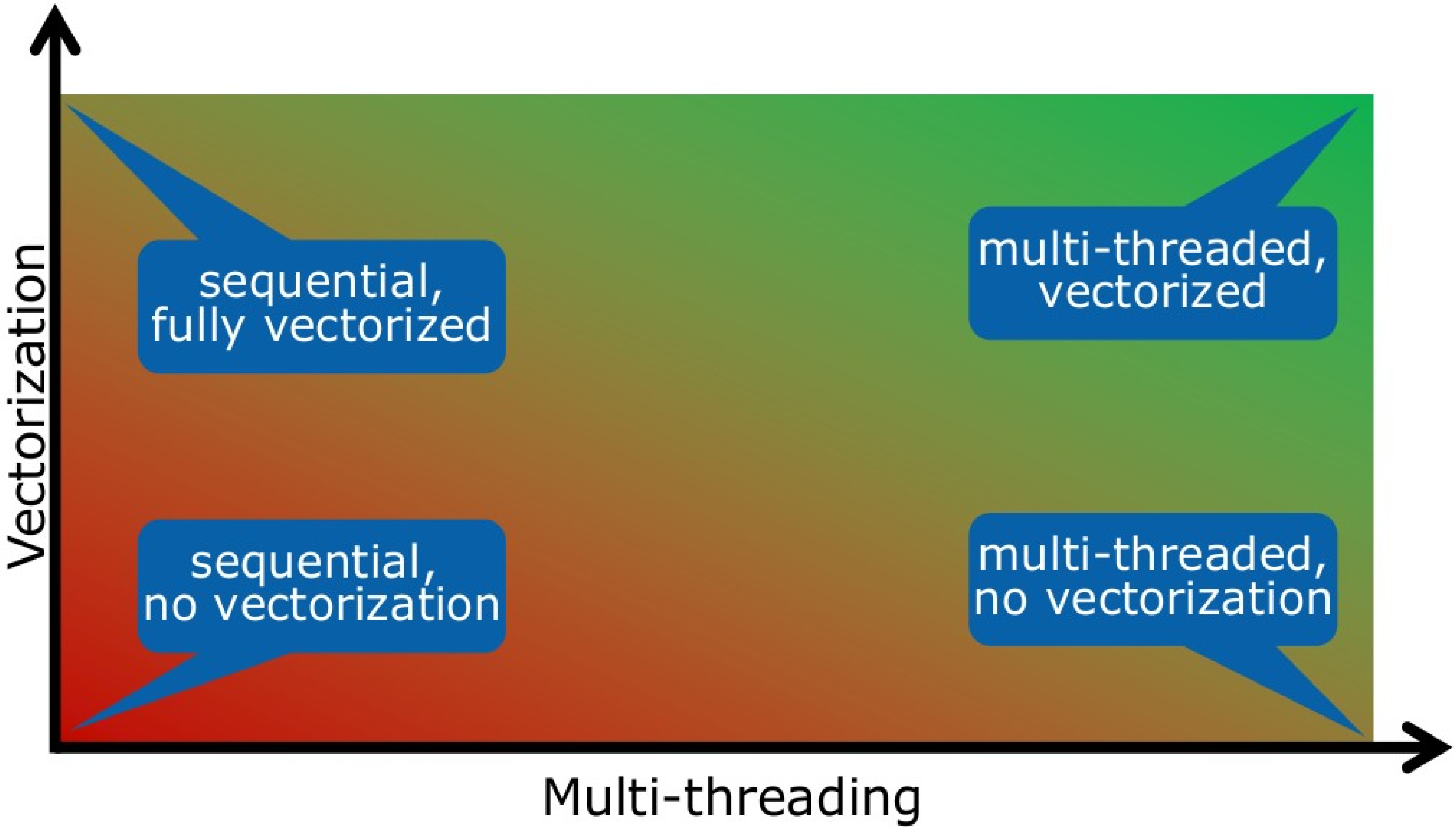
Копроцесор Intel Xeon Phi

- Копроцесор, не ускорител на изчисления или GPU
- MIC е наименование на архитектурата, Xeon Phi е името на продукта
- PCI Express bus
- Съдържа около 60 x86-based изчислителни ядра
    - 512-bit дълги SIMD векторни операции
    - Hardware multithreading
    - Fused Multiply and Add
- Лека версия на Линукс
- GDDR5 GPU памет
- Може да функционира самостоятелно в нативен режим

Архитектура MIC

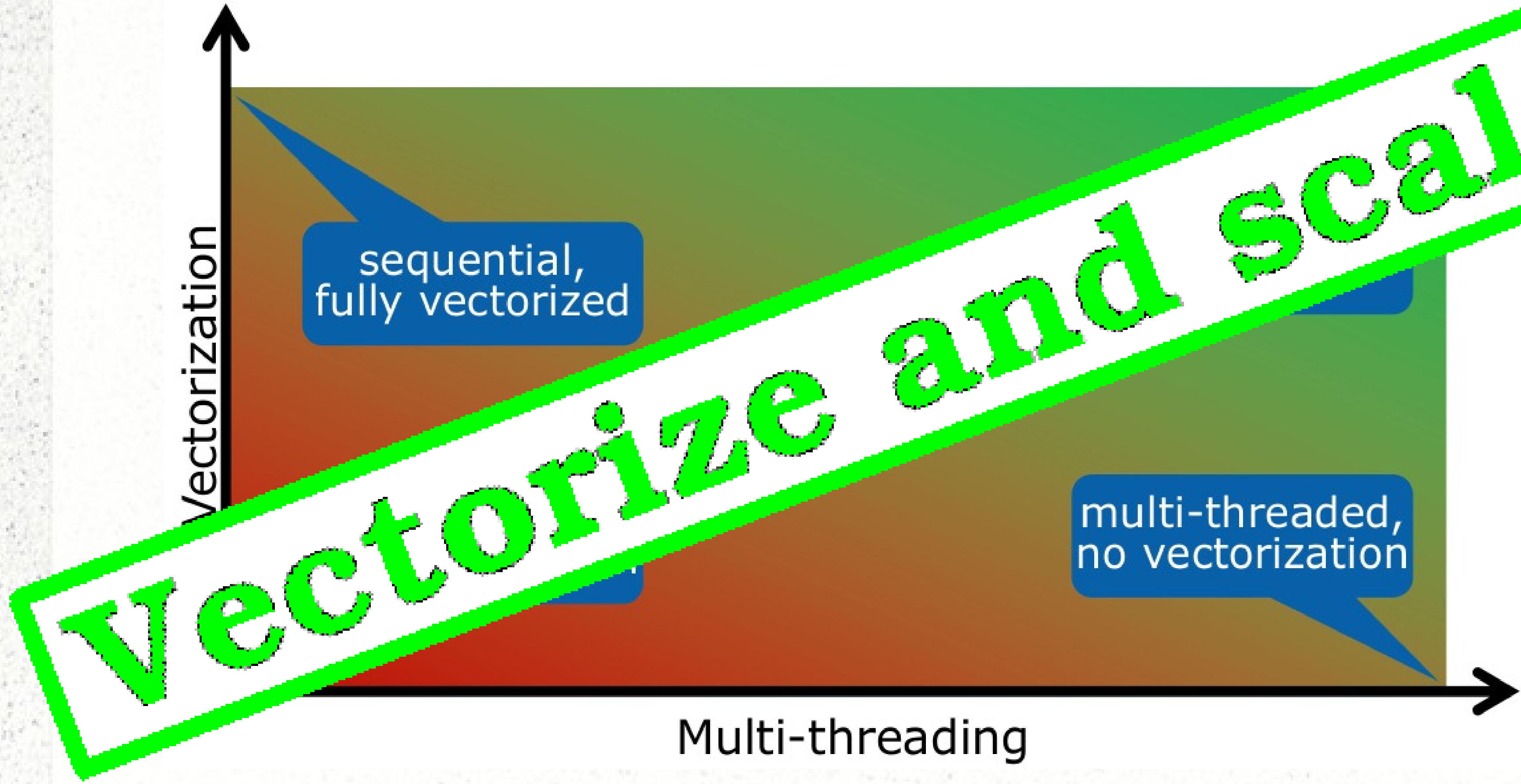


Препоръки за правилно използване на MIC



Dr.-Ing. Michael Klemm, Software and Services Group, Intel Corporation, *Programming for the Intel Xeon Phi Coprocessor*, PRACE Spring School, Umea, Sweden, April, 2013

Препоръки за правилно използване на MIC

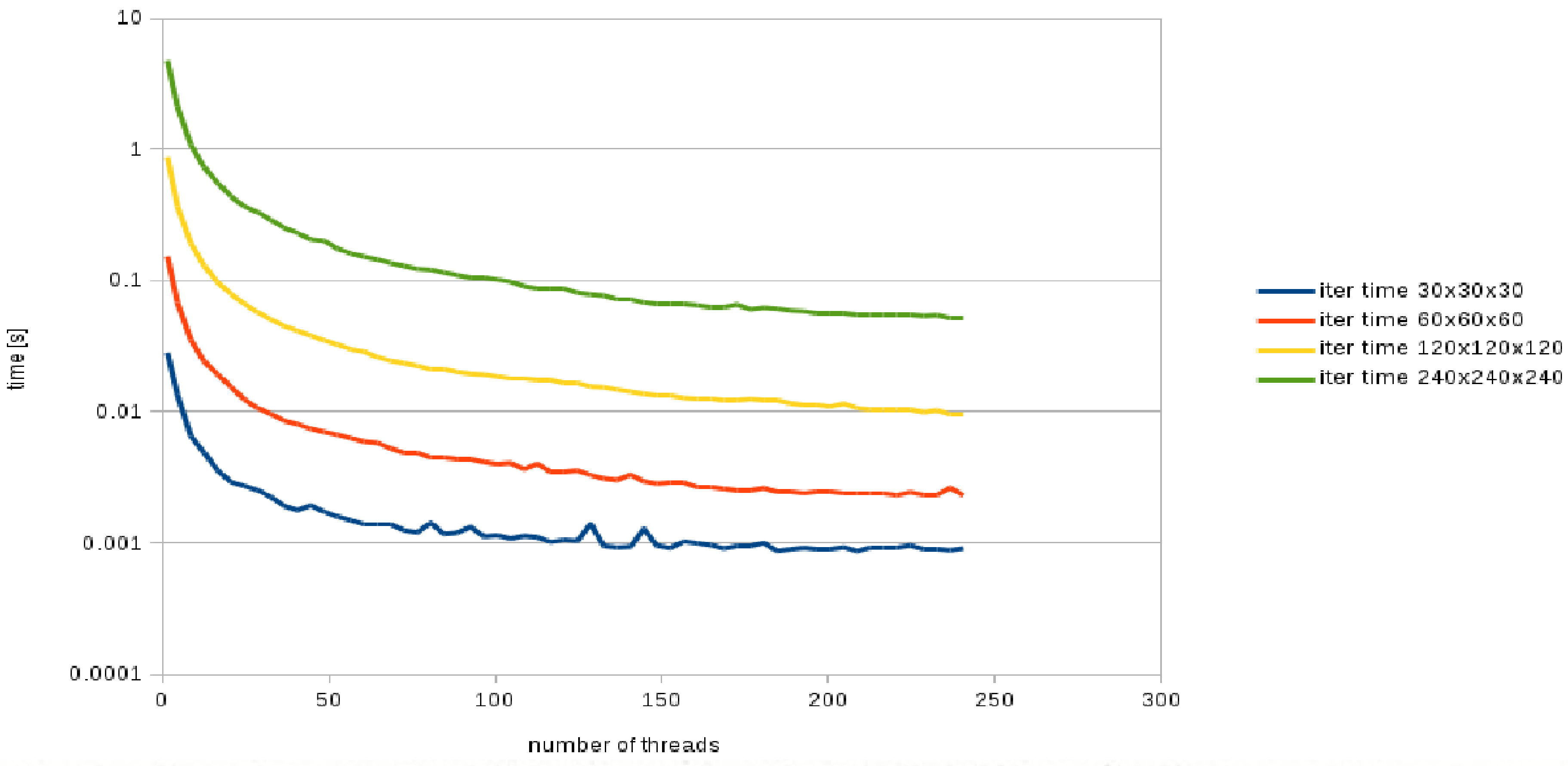


Dr.-Ing. Michael Klemm, Software and Services Group, Intel Corporation, *Programming for the Intel Xeon Phi Coprocessor*, PRACE Spring School, Umea, Sweden, April, 2013

Имплементация

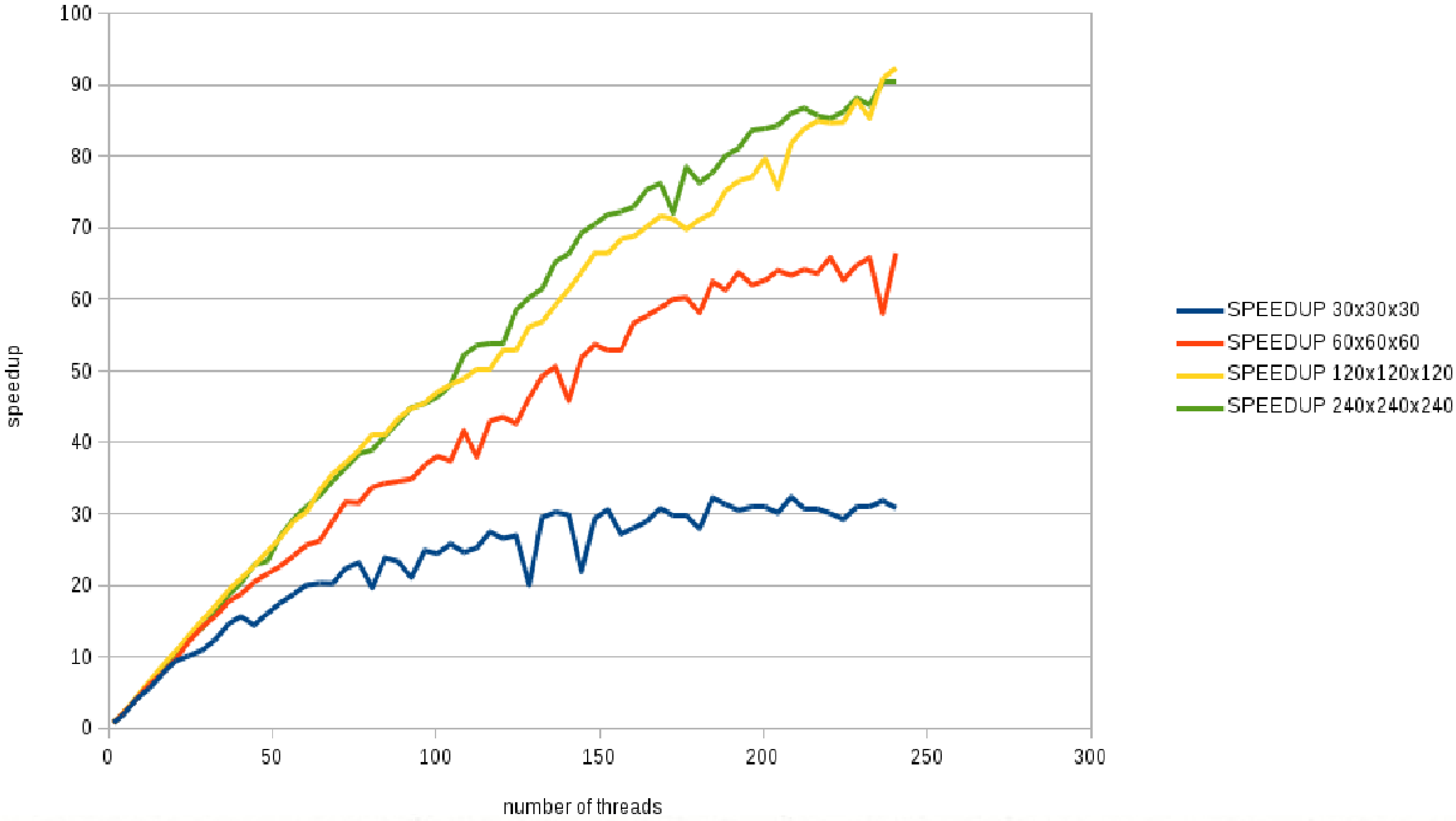
- Код написан на C с OpenMP паралелизация
- Сумиране на ненулеви индекси в матрицата A
- Векторизация
  - Дефиниране на временни променливи за съхранение на данни
- Заделяне на памет за данните, подравняване и копиране
  - Вградени бързи библиотеки от Intel: memset/memcpy
  - Подравняване на данните на 64B

Резултати: Скалируемост време за една итерация



- Сходимост при 10^{-4}

Резултати: Скалируемост ускорение



Заключение

- Библиотека за решаване на уравнението на Поасон
- Векторизация – ключ към производителност и скалируемост
- Постигнато е добро ускорение:
  - Сравнително прост код
  - Достъпване на данни
  - Векторизация
- Въпреки всички направени оптимизации, библиотеката се изпълнява най-бързо на стандартни Xeon процесори

Академични данни

- Участие в конференции:
- Grancharov D, Petkov P, Lilkova E, Ilieva N, Litov L, *Replica exchange MD investigation of the conformational space of prion proteins;* 2-nd National Congress on Physical Sciences, Sofia, 2013
- Petkov P., Lilkova E., Grancharov D., Markov S., Ilieva N., Litov L. *Libraries for treatment of electrostatic interactions for Intel Xeon Phi;* Numerical Methods for Scientific Computations and Advanced Applications, 19-22 May 2014, Bansko, Bulgaria
- Ilieva N., Grancharov, D., Petkov, P., Ribarics R., Schreiner W. *Alloreactive TCRpMHC Complexes: Conformation alalysis;* International Conference on Mathematical Methods and Models in Biosciences, 22-27 June 2014, Sofia, Bulgaria,

Публикации във връзка с дисертацията

- D. Grancharov, P. Petkov, E. Lilkova, N. Ilieva, Litov, L., *Investigation of Binding Affinity of hIFN-gamma Mutated Forms with the Rosetta Suite of Programs*, Proc. 6th International Scientific Conference Computer Science 2011, (2011), ISBN: 978-954-438-914-7, pp. 353-357.
- D. Grancharov, E. Lilkova, N. Ilieva1, P. Petkov, S. Markov and L. Litov, *Analysis of symplectic integration algorithms with variable step size for petascale biomolecular simulations*, PRACE whitepapers, (2012)
- Markov S., Petkov P., Grancharov D. and Georgiev G., *High Performance Poisson Equation Solver for Hybrid CPU/GPU Systems;* PRACE Whitepaper No 112, (2013) http://www.prace-ri.eu/IMG/pdf/wp112.pdf
- P. Petkov, E. Lilkova, S. Markov, D. Grancharov, N. Ilieva, L. Litov, *AGBNP2 Implicit Solvent Library for Intel® MIC Architecture*, PRACE whitepapers, (2014) http://www.prace-ri.eu/IMG/pdf/wp146.pdf
- P. Petkov, D. Grancharov, S. Markov, G. Georgiev, E. Lilkova, N. Ilieva, L. Litov, *Massively parallel Poisson Equation Solver for hybrid Intel Xeon – Xeon Phi HPC Systems*, PRACE whitepapers, (2014) http://www.prace-ri.eu/IMG/pdf/wp143.pdf

Благодаря
за вниманието!