



Московский институт
электроники и математики
им. А.Н. Тихонова

НИУ ВШЭ

Москва
2022

Разработка модели ADP на основе библиотеки Kokkos C++ для пакета молекулярной динамики LAMMPS

Галигеров Владислав Сергеевич,

Никольский Всеволод Павлович,
Стегайлов Владимир Владимирович,

НИУ ВШЭ, ОИВТ РАН

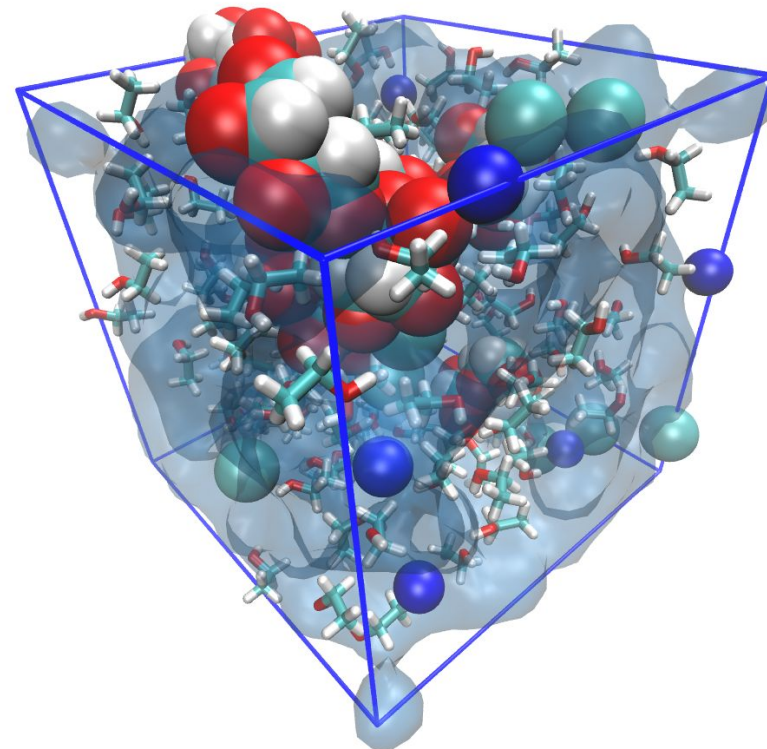


Цель работы

Разработка потенциала ADP,
ускоренного при помощи переносимой по
производительности программной
модели Kokkos внутри пакета
молекулярной динамики LAMMPS.

Задачи

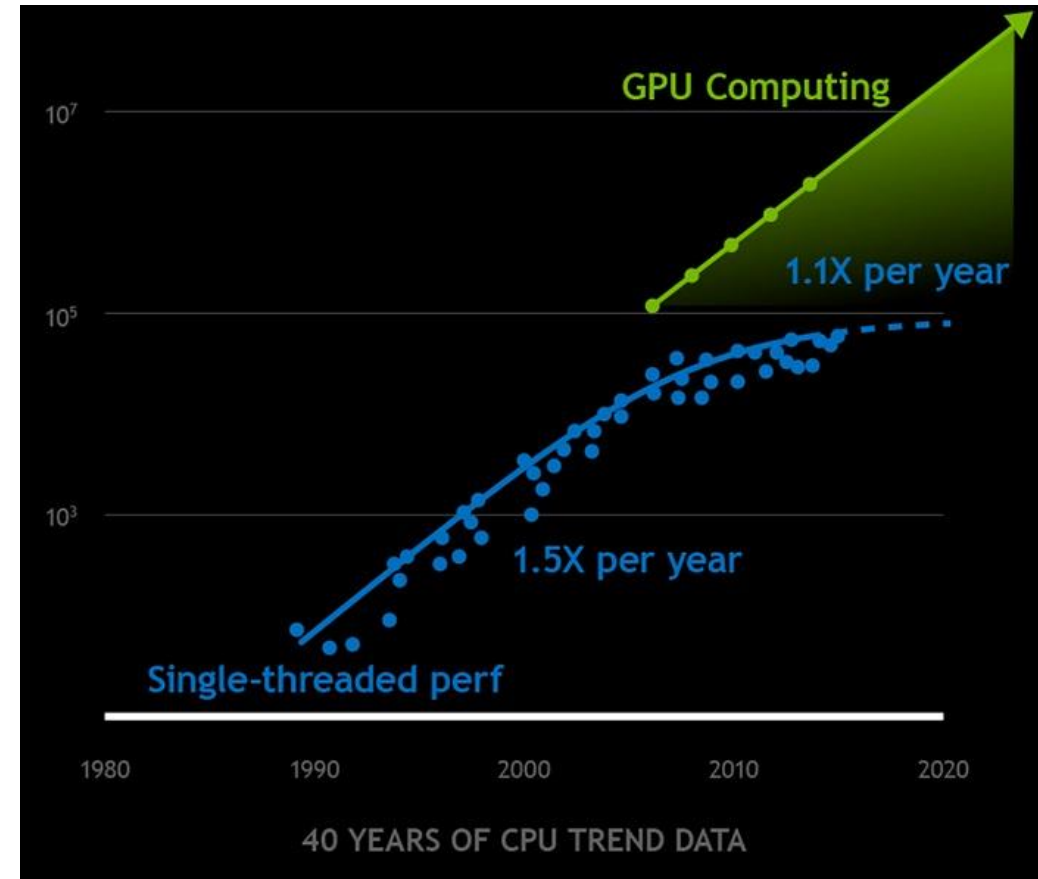
- Написание ускоренного ADP на основе Kokkos.
- Верификация полученного алгоритма и замеры производительности.





Актуальность

- Современные GPU позволяют получить значительный прирост производительности во многих задачах, в том числе в молекулярной динамике.
- Потенциал ADP реализован в LAMMPS, однако эта реализация может быть запущена лишь на центральных процессорах в однопоточном режиме (в рамках MPI процесса).
- Программная модель Kokkos позволяет писать код, который может быть одинаково эффективно запущен как на CPU, так и на GPU.

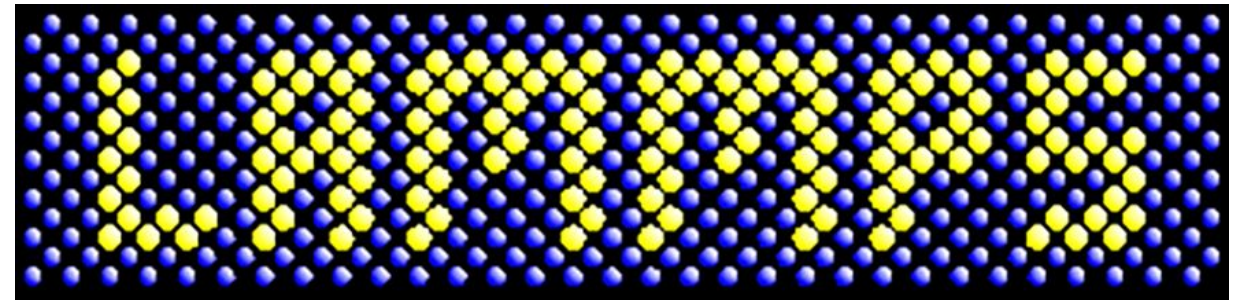


<https://developer.nvidia.com/blog/summit-gpu-supercomputer-enables-smarter-science/>



Пакет молекулярной динамики LAMMPS

- Написан на C++
- Открытый исходный код.
- Реализует большое количество потенциалов взаимодействия.
- Архитектура кода дает широкие возможности для расширения.



Логотип LAMMPS

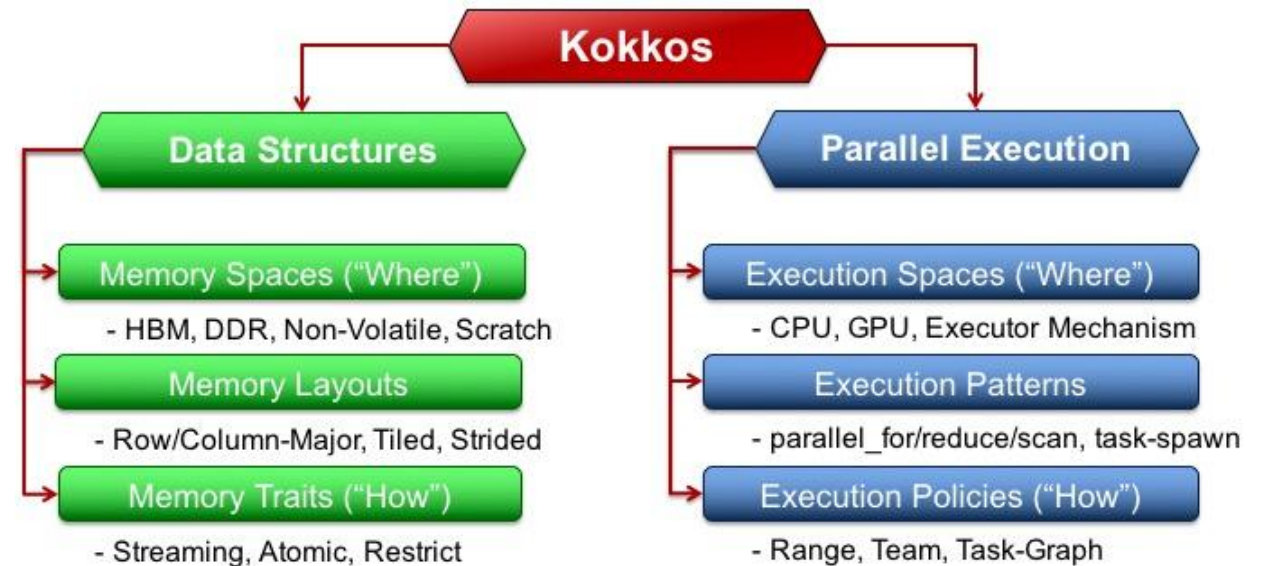
Есть поддержка GPU в виде отдельного модуля, однако он имеет ряд недостатков:

- Не гибкий.
- Мощности графического ускорителя используются лишь на некоторых этапах вычисления.

Почему Kokkos?

Performance portability:

- Kokkos дает возможность писать максимальное количество кода, который был бы одинаково производителен на разных платформах, поддерживаемых Kokkos (performance portability).
- Также это означает, что с ним возможно один раз написать алгоритм, который можно запустить как на CPU с бэкендами Serial и OpenMP, так и на GPU с Cuda, HIP и т.д.
- Интегрирован в LAMMPS в виде модуля с именем KOKKOS.
- Лишен недостатков модуля LAMMPS/GPU.



<https://kokkos.org/core-about/>



Модель ADP

Полуэмпирический метод для моделирования
металлов и их сплавов. Расширение EAM.

$$E_i = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \Phi_{s_i s_j}(r_{ij}) + F_{s_i}(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (\mu_i^{\alpha})^2 +$$
$$\frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} (\lambda_i^{\alpha\beta})^2 - \frac{1}{6} v_i^2.$$



Результат

ADP/КК

Полученная реализация
готова к использованию
в научных
исследованиях с
использованием
графических
ускорителей.

Ускорение $>7x$

Более чем семикратное
ускорение на
суперкомпьютере HSE
CHARISMa по
сравнению с
существующей
реализацией.

GITHub

Результат проверен и
одобрен владельцами
гит репозитория и
вошел в летний релиз.