

Семинар 4: Распараллеливание по частицам

При использовании этого подхода вычисления происходят в N независимых потоках, выполняющихся на ГП одновременно. Каждый из потоков вычисляет значения потенциальной энергии и силы для всех взаимодействующих пар, включающих конкретную частицу. Таким образом, в N потоках, независимо друг от друга, вычисляются N сил, действующих на N частиц. Несмотря на то, что в этом случае сила, действующая между i -той и j -той частицами, вычисляется дважды (в i -том и j -том потоках), количество обращений к глобальной памяти при использовании такого подхода минимально, так как силы суммируются в локальной памяти сразу после расчёта. Таким образом, время, потраченное на вычисление одной и той же силы дважды, компенсируется за счёт экономии времени ожидания при чтении и записи значений силы в глобальную память ГП.

Алгоритм 1: Расчёт сил взаимодействия между частицами (реализация для ГП с использованием подхода распараллеливания по частицам).

- 1: $\vec{f}_i \leftarrow 0$ {результатирующая сила}
- 2: $i \leftarrow$ индекс потока вычислений на ГП {равен индексу частицы}
- 3: $\vec{r}_i \leftarrow \vec{r}[i]$ {координаты i -той частицы}
- 4: $P_i \leftarrow P_p[i]$ {число пар с участием i -той частицы}
- 5: **for** $p = 0$ to $P_i - 1$ **do**
- 6: $j \leftarrow PairsMap[i][p].j$ {вторая частица пары}
- 7: $\vec{r}_j \leftarrow \vec{r}[j]$ {координаты j -той частицы}
- 8: $par \leftarrow PairsMap[i][j].parameters$ {параметры пары i -той и j -той частиц}
- 9: $\vec{r} \leftarrow \vec{r}_i - \vec{r}_j$

```

10:  $\vec{df} \leftarrow \text{force}(\vec{r}, par)$ 
11:  $\vec{f}_i \leftarrow \vec{f}_i + \vec{df}$ 
12: end for
13: Output:  $\vec{f}_i$ 

```

Массив P_p , в котором хранится количество пар для каждой из частиц, и матрица $PairsMap$ всех пар частиц заранее вычисляются на ЦП и передаются в общую память ГП. P_p представляет собой N -мерный целочисленный вектор. Каждый элемент этого вектора соответствует одной частице, и i -тое значение показывает число других частиц, с которыми взаимодействует i -тая частица. $PairsMap$ - это двумерная матрица размером N на M , где M - максимальное число из массива P_p . i -тая строка матрицы $PairsMap$ соответствует i -той частице и содержит индексы всех частиц, взаимодействующих с ней, а также постоянные параметры функции потенциальной энергии. Данные в массиве $PairsMap$ могут легко быть представлены таким образом, чтобы потоки обращались к смежным областям памяти, выполняя условие коалесинга. Обращения к координатам второй частицы пары происходят в произвольном порядке, что может привести к существенным потерям производительности. Чтобы сократить эти потери, можно использовать доступ к глобальной памяти графической карты через текстурные ссылки, что существенно сокращает количество обращений к глобальной памяти за счёт эффективного использования текстурного кеша.

Значения сил вычисляются параллельно в N потоков описанным далее образом. Вначале i -тый поток считывает из глобальной памяти координаты i -той частицы, r_i (строка 3), и число пар с участием этой частицы $P_p[i]$ (строка 4). Проходя в цикле по всем парам, содержащим i -тую частицу (строки 5-12), поток определяет по индексу j координаты r_j второй частицы пары и постоянные параметры функции потенциальной энергии par (строки 6-8). Эти данные далее используются для вычисления значения силы df (строка 10), которое добавляется к результирующей силе f (строка 11), действующей на i -тую частицу. Параметры par зависят от типа вычисляемого потенциала. Например, для ковалентной связи, описываемой гармоническим потенциалом $V_H = K_{ij}^{sp}(r_{ij} - r_{ij}^0)^2/2$, par содержит равновесное

расстояние r_{ij}^0 и постоянную пружины K_{ij}^{sp} .

Списки Верле: При моделировании молекулярных систем информация о ковалентных связях и нативных взаимодействиях (массив P_p и матрица $PairsMap$), обычно получаемая из кристаллической структуры белка, не меняется. Однако, при вычислении дальнедействующих потенциалов, таких как электростатические взаимодействия и силы Ван-дер-Ваальса, информацию о взаимодействиях между частицами нужно периодически обновлять. Это делается для того, чтобы сократить количество вычислений, т. к. сложность вычислений потенциала взаимодействия порядка $O(N^2)$ является наиболее вычислительно-затратной частью алгоритма. Обычный подход для оптимизации расчёта дальнедействующих потенциалов основан на том, что сила взаимодействия стремится к нулю с увеличением расстояния между частицами. Это позволяет ограничить список пар взаимодействующих частиц только теми, которые находятся в пределах заданного расстояния (списки Верле) [?]. Распараллеливание по частицам предполагает, что массив P_p и матрица $PairsMap$ периодически перестраиваются, что позволяет ускорить вычисление сил взаимодействия, пренебрегая силами, действующими между сильно удалёнными частицами. На ГП, алгоритм построения списков Верле можно получить путём преобразования алгоритма расчёта межчастичных сил (Алгоритм 2), как это показано в Алгоритме 3:

Алгоритм 2: Построение списков Верле при использовании метода параллелизации по частицам.

- 1: $i \leftarrow$ индекс потока вычислений на ГП {равен индексу частицы}
- 2: $p_i \leftarrow 0$ {счётчик пар частиц в списке Верле}
- 3: $\vec{r}_i \leftarrow \vec{r}[i]$ {координаты i -той частицы}
- 4: $P_{p,i} \leftarrow P_{pp}[p_1]$ {число возможных пар с участием i -той частицы}
- 5: **for** $p_p = 0$ to $P_{p,i} - 1$ **do**
- 6: $j \leftarrow PossiblePairsMap[i][p_p]$ {вторая частица пары (j -тая)}
- 7: $\vec{r}_j \leftarrow \vec{r}[j]$ {координаты j -той частицы}
- 8: $r \leftarrow |\vec{r}[i] - \vec{r}[j]|$
- 9: **if** $r < cutoff$ **then**

```
10:    $PossiblePairsMap[i][p_p] \Rightarrow PairsMap[i][p_i]$ 
11:    $p_i \leftarrow p_i + 1$ 
12: end if
13: end for
14:  $p_i \Rightarrow P_p[i]$ 
```

Проход по циклу по p_p (строка 5) позволяет из всех возможных взаимодействующих пар выбрать пары, находящиеся в радиусе взаимодействия. Расстояния между частицами рассчитываются в строке 8. Количество частиц p_i , находящихся в радиусе взаимодействия, определяется в строке 11. Найденные новые пары добавляются в $PairsMap$, то есть копируются из матрицы $PossiblePairsMap$ (все возможные пары) в матрицу $PairsMap$ (подходящие пары) на позицию (i, p_i) . Когда цикл пройден, значение p_i , равное числу взаимодействующих пар списка Верле, сохраняется в массив $P_p[i]$.