

ПРИМЕНЕНИЕ GPU ДЛЯ ЗАДАЧ КВАНТОВОЙ ХИМИИ: ПРЯМОЙ РАСЧЕТ МАТРИЦ ПЛОТНОСТИ СВЕРХБОЛЬШИХ МОЛЕКУЛ МЕТОДОМ PDM

М.Б. Кузьминский¹, А.М. Андреев¹, А.М. Чернецов²

¹*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва*

²*Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН, Москва*

Предложена реализация метода PDM для прямого квантовохимического расчета матрицы плотности сверхбольших молекул по фокиану с использованием технологии разреженных матриц и аппаратных средств GPU Nvidia Tesla C2050. Исследование актуально не только собственно для задач химии и биохимии, но и для определения областей эффективного применения GPU, в частности, для задач квантовой химии, поскольку такие приложения (как и сами GPU) потенциально могут использоваться в будущих системах экзафлопсного уровня.

Введение

Одним из возможных путей построения будущих экзафлопсных систем предполагается применение MPP-систем или кластеров, использующих GPU в узлах. Современные высокопроизводительные многоядерные микропроцессоры, например Intel Xeon или IBM Power7, имеют 64-разрядную пиковую производительность на уровне нескольких сот GFLOPS, в то время как аналогичная пиковая производительность широко используемых GPU Nvidia Tesla M2050 близка к 0.5 TFLOPS. Таким образом, мы имеем отличия в разы, а не на порядок, хотя это соотношение может быть в будущем улучшено в сторону GPU.

Кроме того, высокая эффективность (в смысле уровня производительности) применения GPU достигается при больших размерностях задач, что не всегда характерно, например, при работе с разреженными матрицами. Возможно, применение Intel Xeon Phi будет эффективным уже на задачах меньших размерностей.

Одной из типичных прикладных областей применения петафлопсных и экзафлопсных систем указывается квантовая химия. Практика показывает, что для достижения высокой эффективности распараллеливания на таких системах требуется применение специальных, подчас приближенных методов и программ (например, метода фрагментных молекулярных орбиталей, FMO, в рамках стандартной теории возмущений Меллера-Плессета), отличных от обычно используемых в большинстве HPC-систем.

Прямое построение матрицы плотности на GPU

Использование GPU в задачах квантовой химии сегодня достаточно ограничено и связано обычно с применением умножения матриц больших размерностей. В настоящей работе GPU применяется для расчетов методом PDM (Purification of Density Matrix) в ортогональном базисе с использованием технологии разреженных матриц.

Для полуэмпирических квантовохимических методов типа AM1, PM3 и т.д., а также для наиболее эффективных реализаций методов функционала плотности (DFT) лимитирующей стадией расчетов электронной структуры сверхбольших молекулярных систем является диагонализация матрицы фокиана. Для крупномасштабных серийных расчетов больших биомолекул (в том числе актуальных для задач конструирования лекарств докинг-комплексов протеин-лиганд) и наноструктур такой подход приводит к