

Оценка эффективности графических процессоров на примере квантово-химического моделирования комплекса хитозана

В.В. Лазарев, В.В. Спеле, А.В. Юлдашев

Уфимский государственный авиационный технический университет

В последние годы гибридные системы, оснащенные графическими процессорами (GPU) NVIDIA, стали рабочей платформой для решения ресурсоемких задач квантово-химического моделирования и молекулярной динамики [1]. Это произошло благодаря появлению поддержки программно-аппаратной архитектуры CUDA и, следовательно, возможности проведения расчетов на GPU NVIDIA в ряде популярных прикладных пакетов, к примеру, GAMESS-US. Кроме того, появились новые пакеты, ориентированные исключительно на GPU, например, TeraChem.

В нашей работе показана возможность существенного ускорения вычислений на GPU на примере квантово-химического расчета оптимальной геометрии молекулярного комплекса хитозана. Линейный полисахарид хитозан (ХТЗ) – производное природного биополимера хитина, привлекает в последнее время пристальное внимание исследователей, благодаря сочетанию ряда уникальных свойств. Совместимость ХТЗ с тканями человека, его способность к биоразложению, бактериостатичность, и возможность образования поликатионной наноразмерной структуры делают его полимером пригодным для использования в медицинских целях. В качестве численного эксперимента проводилась оптимизация молекулярной структуры комплексов олигомеров ХТЗ с ацетат-ионами: использовались фрагменты $[ХТЗ]_n$, состоящие из двух мономерных молекул 2-амино-2-дегидро- β ,D-глюкопиранозы, соединенные β -1,4-глюкозидными связями (55 атомов). Расчет оптимальных геометрических параметров комплекса проводился методом теории функционала плотности в приближении B3LYP/6-31++G(d,p).

Оптимизационная задача решалась на одном из гибридных узлов (2 x CPU Intel Xeon E5-2670 + 2 x GPU NVIDIA K20) вычислительного кластера УГАТУ в пакете TeraChem 1.50k. Для сравнения аналогичная задача была решена в пакете GAMESS-US (версия от 05.12.2014г.) на центральных процессорах 1-4 узлов кластера. При проведении расчетов в GAMESS-US процессоры NVIDIA задействованы не были, т.к. на данный момент в пакете не поддерживается решение оптимизационных задач с привлечением GPU. Для корректной сравнительной оценки вводились одинаковые исходные данные: координаты атомов, метод расчета, базисный набор и критерий сходимости. Полученные результаты приведены в таблице 1, из которой следует, что решение данной задачи на двух GPU K20 в пакете TeraChem производится в 5,8 раз быстрее, чем на 4 узлах кластера в пакете GAMESS-US, а один шаг алгоритма оптимизации проходит быстрее приблизительно в 2 раза.

Таблица 1. Время решения оптимизационной задачи на различных программно-аппаратных платформах

Программный комплекс	Наименование процессора	Кол-во процессоров	Количество оптимизационных шагов	Время вычислений, с
GAMESS-US	Xeon E5-2670	2	101	57 416
		8	101	17 300
TeraChem	Tesla K20	1	35	4 703
		2	35	2 985

В дальнейшем планируется использование GPU для моделирования комплексообразования ХТЗ в растворах поликарбонновых кислот, что позволит выяснить природу образования олигомеров ХТЗ, а также образующихся полиэлектролитных комплексов.

Литература

1. Волохов А.В. и др. Использование гибридных вычислительных узлов на базе GPU TESLA C2075 при проведении расчетов в области вычислительной химии и молекулярной динамики // Параллельные вычислительные технологии (ПАВТ'2013): труды междунаро. научн. конф. Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2013. – С. 308-311.