

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.

Investigation of graphics processors efficiency on the example of quantum-chemical modeling of the complex of chitosan

Arthur Yuldashev, Vladimir Lazarev and Vladimir Spele

Keywords: graphics processors, quantum chemical modeling, molecular complex of chitosan

The report presents the experience of using graphics processors for quantum chemical calculation of the optimum geometry of the molecular complex of chitosan.