

# Использование гибридных вычислительных узлов на базе GPU TESLA C2075 при проведении расчетов в области вычислительной химии и молекулярной динамики

А.В. Волохов<sup>1</sup>, В.М. Волохов<sup>1</sup>, Д.А. Варламов<sup>1,2</sup>,  
А.В. Пивушков<sup>1</sup>, Г.А. Покатович<sup>1</sup>, А.И. Прохоров<sup>1</sup>

Институт проблем химической физики РАН<sup>1</sup>,  
Институт экспериментальной минералогии РАН<sup>2</sup>

На примере прикладных пакетов в области квантовой химии и молекулярной динамики, реализованных на базе гибридных вычислительных узлов в ИПХФ РАН (с применением GPU Nvidia Tesla C2075), изучена возможность применения гибридных вычислений для повышения эффективности расчетов в области вычислительной химии, в том числе на ресурсных узлах различных грид-сред.

## 1. Введение

Развитие «гибридных» (CPU+GPU) вычислительных технологий достигло точки, когда множество существующих приложений в различных областях реализуются с их использованием и работают значительно быстрее, чем на обычных многоядерных системах. В настоящее время резко интенсифицировался перевод программного кода прикладных пакетов на параллельные технологии с использованием технологий программирования CUDA™ и аналогичных. При этом программирование обновленного или создаваемого заново «гибридного» кода для квантово-химических и молекулярно-динамических пакетов занимает одно из ведущих позиций в этом направлении. В течение последних лет существенно упростилось программирование соответствующей модели параллельных вычислений с использованием среды программирования CUDA™, которая обеспечивает набор абстракций, позволяющих выражать как параллелизм данных, так и параллелизм задач. Это позволяет проводить высокоинтенсивные вычисления с применением встраиваемых в расчетные узлы кластеров высокопроизводительных графических процессоров (Nvidia – Tesla и Kepler, AMD – ATI Radeon), что значительно повышает эффективность использования параллельных методов расчетов и снижает требования к расчетным центрам и операционную стоимость расчетов, особенно при использовании большого числа расчетных узлов. Применение методов параллелизации с использованием GPU устройств для прикладных пакетов в области квантовой химии и молекулярной динамики в большинстве случаев ведет к снижению времени расчетов от десятков процентов до нескольких раз, либо (как вариант) дает возможность существенного повышения точности или детальности расчетов.

В 2012 году авторами были изучены предпосылки широкого использования новых программных вариантов прикладных квантово-химических пакетов (ППП), основанных на гибридных вычислениях, в интересах вычислительного центра ИПХФ и в перспективе – для применения в качестве вычислительных грид-сервисов (на базе выделенного грид-ресурса). Было проведено тестирование и оптимизация имеющихся вариантов PPP с последующей адаптацией их для проведения расчетов в грид-средах в рамках грид-центра ИПХФ РАН. В настоящее время разрабатываются методики запуска грид-заданий, ориентированных на использование ресурсов с поддержкой CUDA™ технологий, в том числе на доступных в рамках грид-полигонов суперкомпьютерных установках.

## 2. Использование ППП вычислительной химии с применением «гибридных» вычислений в ИПХФ РАН

### 2.1 Оценки повышения эффективности проведения расчетов с использованием «гибридных» расчетных узлов

Существует большой спектр различных источников (основанных на оценках собственно разработчиков, тестеров, конечных пользователей), демонстрирующих эффективность «гибридных» методов вычислений для проблемно-ориентированных ППП в области вычислительной химии и молекулярной динамики. Предлагаемые к внедрению в практику грид-вычислений гибридные GPU расчеты представлены совместным использованием CPU и GPU в гетерогенной модели вычислений. Стандартная часть приложения выполняется на CPU, а более требовательная к вычислениям часть, допускающая параллельное проведение расчетов, обрабатывается с GPU ускорением. С точки зрения пользователя приложение работает быстрее, так как оно использует высокую производительность и параллельность GPU для повышения производительности. В настоящее время наиболее мощные GPU устройства способны обеспечить производительность, оцениваемую как первые терафлопсы при проведении вычислений с плавающей запятой благодаря новой архитектуре массивно-параллельных вычислений CUDA. Архитектура CUDA состоит из сотен процессорных ядер, которые работают в единой массивно-параллельной связке, чтобы разом справиться с набором данных в приложении.

Разработчиками прикладных пакетов показано, что использование массивно-параллельных GPU архитектур NVIDIA и Radeon для большинства ППП позволяет получать превосходные результаты при работе с приложениями в сфере квантовой химии и молекулярной динамики. Различные источники дают варьирующие оценки выигрыша во времени расчетов и усиления коэффициентов масштабируемости и эффективности использования расчетных узлов. Это определяется: а) качеством программного кода, переделанного или созданного заново для использования GPU; б) различными количественными вариациями соотношений CPU vs. GPU – зависит от типов задач и во многом определяет эффект вычислений; в) используемыми в прикладных задачах вычислительными методами (например, CPU-ориентированный метод в редких случаях может давать даже замедление при использовании его на GPU устройствах).

Для единичного узла выигрыш во времени расчетов составляет (приведены оценки только для ППП, уже реализованных авторами в ИПХФ в качестве грид-сервисов и в дальнейшем планируемых к рекомпиляции или установке GPU-ориентированных бинарных версий на грид-ресурсы ИПХФ): **GAMESS/FireFly** (метод самосогласованного поля) – до 50-60 раз, **Gaussian** (расчет потенциала Кулона) – 12-15 раз, **VASP** – 3-6 раз, **NWChem** – 3-8 раз, **GROMACS** (метод суммы Эвальда) – от 2 до 5 раз, **LAMMPS** (потенциалы Леннарда-Джонса, Гей-Берне) – в 6 раз, **NAMD** (расчет валентно-невалентных взаимодействий) – от 2 до 7 раз. Приведены как оценки авторов на основе проведенных расчетов реальных квантово-химических задач, так и оценки, скомпилированные в обзоре прикладных пакетов на сайте Nvidia Corp. ([http://www.nvidia.ru/object/computational\\_chemistry\\_ru.html](http://www.nvidia.ru/object/computational_chemistry_ru.html)). Это пакеты, для которых массивно-параллельные GPU-ориентированные алгоритмы реализованы лишь частично. Для сравнения – для прикладных пакетов, которые создавались именно для CUDA-ориентированных вычислений (например, TeraChem и PetaChem - <http://www.petachem.com> или ‘Schrodinger Core Hopping’) выигрыш по времени оценивается существенно выше и может составлять от 50 до 5000 раз (сведения приведены разработчиками пакетов).

### 2.2 Опытный полигон ИПХФ РАН по оценке перспективности «гибридных» вычислений для проблемно-ориентированных грид-сервисов

В 2012 году в ИПХФ РАН были начаты методические и практические исследования возможности использования новых GPU-оптимизированных программных вариантов различных прикладных квантово-химических пакетов как на локальных расчетных узлах ИПХФ (включая кластеры), так и в рамках грид-сайтов различных грид-полигонов.

На средства программы Президиума РАН была произведена закупка 2-х высокопроизводительных вычислительных узлов, оптимизированных для задач вычислительной химии, со следующей конфигурацией:

1 узел – 12 вычислительных ядер [2x6 3.46GHz Intel® Xeon® X5675], 48 Гб RAM, 3 Тб HDD/SSD, 2 GPU Nvidia Tesla C2075, 3 сети Gigabit Ethernet, пиковая производительность узла – до 1,3 Тф для вычислений двойной точности (2.3 Тф для вычислений ординарной точности).

Таким образом, ожидаемая пиковая производительность пула составляет около 2,6 Тф. После тестирования физических узлов было установлено и сконфигурировано системное ПО узлов (ОС CentOS 6.3) с установкой драйверов Nvidia (версия 304.54 с последующим обновлением до 310.19). Были установлены все необходимые программные (gcc и gfortran95 – 4.4.6, CUDA SDK 5.0.35 и 4.2.9 (для совместимости ряда ППП), специализированные библиотеки *BLAS*, *Lapack*, *FFT*, скомпилированные с поддержкой CUDA технологий), сетевые и кластерные средства. После установки ПО была протестирована работа узлов в качестве гибридных вычислителей на внутренних тестах пакета CUDA и независимых тестах (типа *cuda\_memtest*), далее узлы были объединены в единый пул с поддержкой GPU технологий. После тестирования пула в локальном режиме проведена его интеграция в ресурсный грид-центр ИПХФ РАН с последующим представлением в качестве грид-ресурса (выделенная очередь заданий) в рамках доступных российских грид-полигонов (ГридННС и пилотная российская грид-сеть для высокопроизводительных вычислений).

Для отработки методики GPU вычислений в качестве первоочередного был установлен ППП NAMD версии 2.9, откомпилированный в версии «Linux-x86\_64-multicore-CUDA», который был запущен для тестирования и оценки эффективности. На ряде тестовых задач ППП NAMD была проведена предварительная оценка повышения эффективности расчетов, которая показала выигрыш во времени от 2 до 4-4,5 раз на мицеллах средней размерности (время расчета до 1-2 суток). Были проведены первичные испытания различных соотношений CPU/GPU (от 1:1 до 2:4), варьирование разных используемых вычислительных методов (определяется конфигурационным файлом NAMD), проверена возможность передачи GPU-ориентированной версии NAMD входных грид-заданий через существующие шлюзы ГридННС и пилотной российской грид-сети. Полная оценка эффективности GPU ускорения для ППП NAMD возможна при расчете высокомолекулярных соединений с числом атомов 10,000 и более (желательно более  $10^6$  атомов), где высокий параллелизм расчетов хорошо оправдывает накладные расходы на связь CPU-GPU и затраты на организацию внутренних циклов большинства *ab initio* квантово-химических методов.

В настоящее время (декабрь 2012 г.) проводится инсталляция и тестирование на расчетном пуле GPU-ориентированных версий квантово-химических пакетов AbInit, NWChem, PWScf, Orca и др. Инсталляция проводится (при возможности) в двух вариантах: заранее откомпилированные разработчиками бинарные варианты ППП и (при предоставлении исходных кодов) откомпилированные авторами варианты с учетом оптимизации под конкретные конфигурации расчетных узлов. Оценки повышения эффективности использования указанных ППП будут приведены в докладе на конференции ПАВТ-2013.

Также начата разработка методики запуска грид-заданий (для промежуточного ПО Globus Tools 4 и 5 и основанных на нем грид-сред), ориентированных на поиск и использование грид-ресурсов, поддерживающих использование CUDA технологий. В настоящее время существующие системы управления грид-заданиями (брокеры ресурсов, pilot-менеджеры и т.п.) не поддерживают напрямую в файлах описания грид-заданий целеуказания на использование именно гибридных вычислительных узлов, что не позволяет пользователю, как в ручном, так и тем более в автоматическом режиме выбирать более эффективные «гибридные» ресурсы для запуска ППП. Однако, в дальнейшем ситуация, как ожидается, будет исправлена разработчиками грид-сред (как и в случае использования новейших мультиспроцессоров типа Intel Phi).

### 3. Заключение

Использование «гибридных» массивно-параллельных GPU архитектур (NVIDIA, AMD) для большинства квантово-химических и молекулярно-динамических ППП позволяет существенно улучшить эффективность использования единичных расчетных узлов и основанных на их ис-

пользовании пулов ресурсов, а в перспективе – и ресурсных грид-центров на их основе. Введение в массовую практику использования GPU-ориентированных версий прикладных пакетов в области вычислительной химии позволяет существенно расширить общий круг расчетных задач, особенно – для интенсивно использующих параллелизацию квантово-химических расчетов (в первую очередь *ab initio*). При этом также становится возможным значительно повысить точность и детальность проводимых с помощью ППП расчетов. Настоятельно стоит вопрос о решении проблемы идентификации пулов «гибридных» вычислительных узлов в качестве специфичных грид-ресурсов с возможностью их целенаправленного выбора. В целом, применение «гибридных» вычислений (в том числе в рамках грид-полигонов) позволит значительно интенсифицировать расчеты с применением параллельных прикладных квантово-химических пакетов на ресурсных узлах грид-инфраструктуры в рамках виртуальных организаций, базирующихся на разнородных вычислительных ресурсах.