Quantum Chemistry on GPGPU

Marcin Makowski,[1,2] Grzegorz Mazur,[1,2] Piotr Kuźniarowicz,[1,3]
Roman Łazarski,[1,4] Alina Mreńca,[5] Krzysztof Kolasiński[5]

[1]Faculty of Chemistry, Jagiellonian University

[2]Academic Computer Centre CYFRONET AGH

[3]Department of Molecular and Material Sciences, Kyushu University

[4]Institute of Material Science and Material Technology, F. Schiller University

[5]Faculty of Physics and Computer Science, AGH University of Science and Technology

KU KDM 2013

INNOWACYJNA GOSPODARKA NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

CYFRONET

UNIA EUROPEJSKA EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO

Plan

INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

CYFRONET

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ
ROZWOJU REGIONALNEGO

Plan

INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

CYFRONET

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ
ROZWOJU REGIONALNEGO

POWIEW

HPC Infrastructure for Grand Challenges of Science and Engineering

- ICM, CYFRONET, PCSS
- Acquisition of modern HPC architectures allowing for large-scale calculations
- Research groups working optimal computational models for HPC

INNOWACYJNA GOSPODARKA NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
CYFRONET
UNIA EUROPEJSKA EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO

POWIEW in CYFRONET

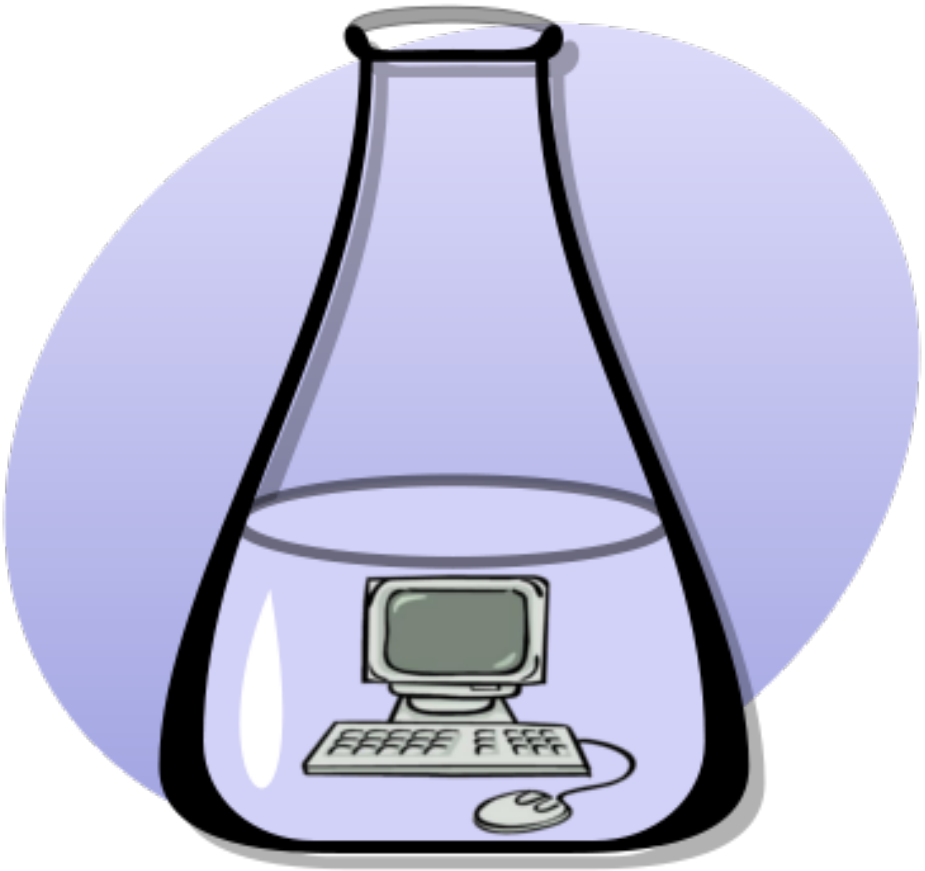
- Hardware
  - GPGPU
  - vSMP
  - cluster of fat nodes
- Software
- Software development
- Workshops

INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
CYFRONET
UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ
ROZWOJU REGIONALNEGO

Computational Chemistry

ZEUS

- 34% of grid workload
- 56% of local workload



INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
CYFRONET
UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ
ROZWOJU REGIONALNEGO

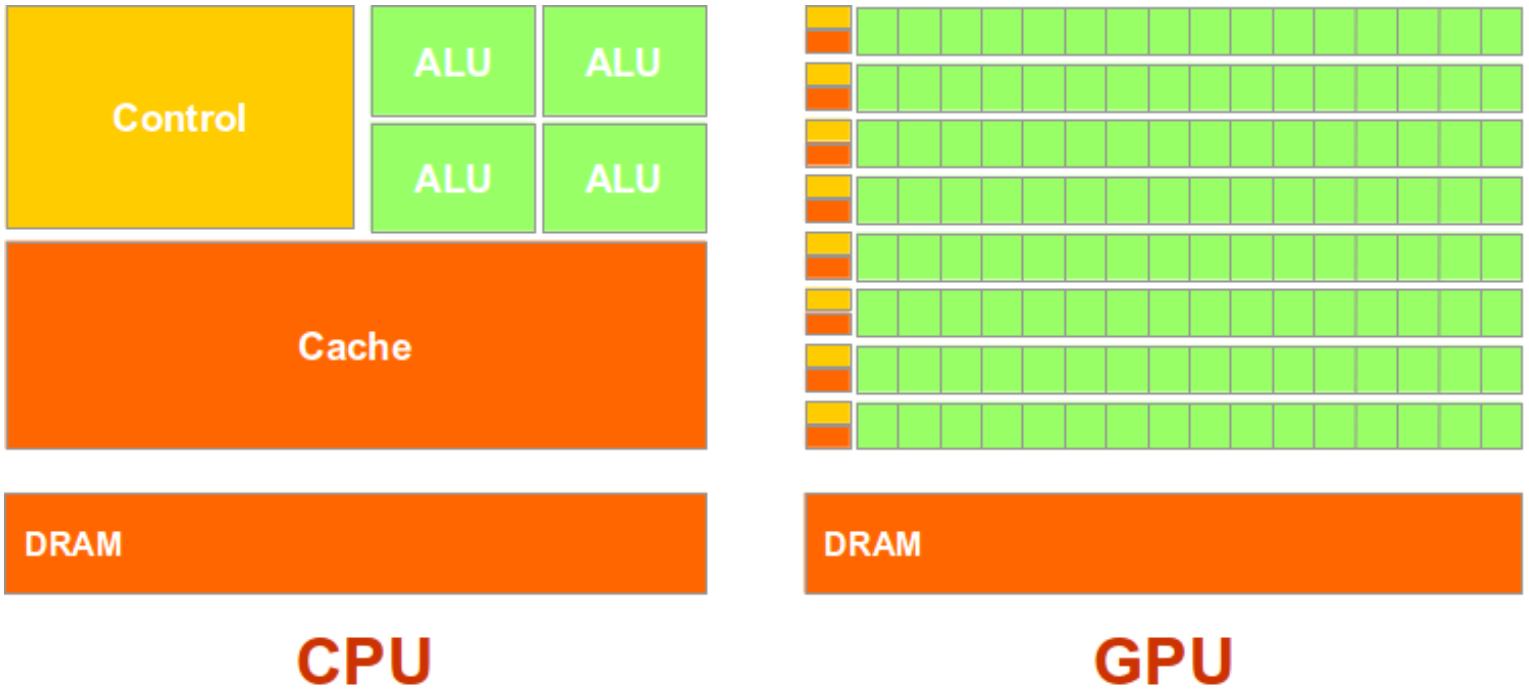
Plan

INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

CYFRONET

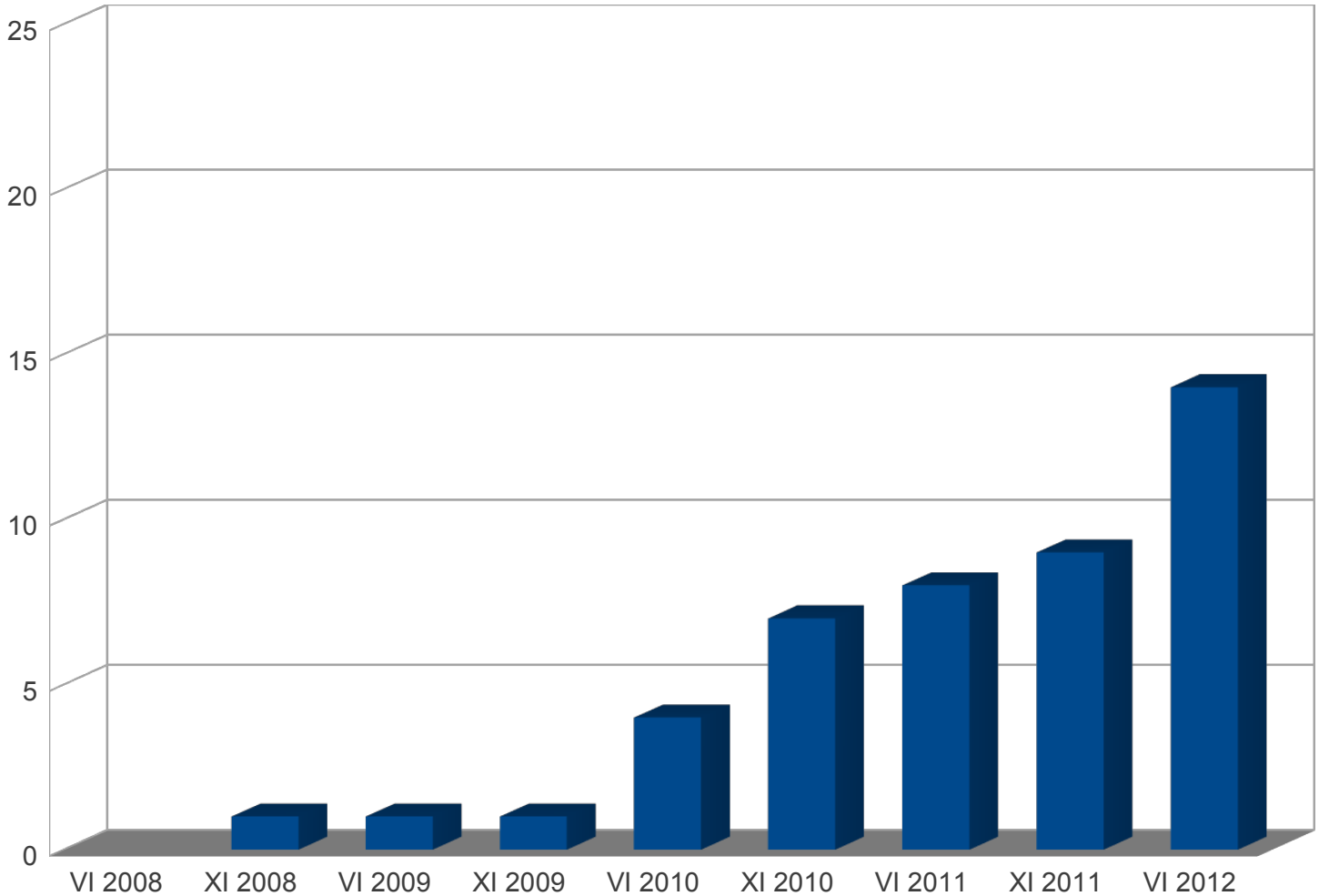
UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ
ROZWOJU REGIONALNEGO

GPGPU



INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
CYFRONET
UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ
ROZWOJU REGIONALNEGO

GPGPU in TOP100



INNOWACYJNA GOSPODARKA NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
CYFRONET
UNIA EUROPEJSKA EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO

GPGPU in CYFRONET

- Hardware
  - 48 NVIDIA Tesla M2050 GPUs (24 servers)
  - 160 NVIDIA Tesla M2090 GPUs (20 servers)
  - almost 140 TFlops
- Software
  - TeraChem (quantum chemistry)
  - NAMD (molecular mechanics)
- Software development

INNOWACYJNA GOSPODARKA NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
CYFRONET
UNIA EUROPEJSKA EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO

Plan

INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI

CYFRONET

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ
ROZWOJU REGIONALNEGO

niedoida

- General-purpose computational quantum-chemistry package
- Created and developed at Faculty of Chemistry (Jagiellonian University) in collaboration with CYFRONET
- Optimal implementation of existing methods
- Development of original, efficient methodologies
- Aiming at large systems
  - advanced hybrid parallelization
  - GPGPU computing

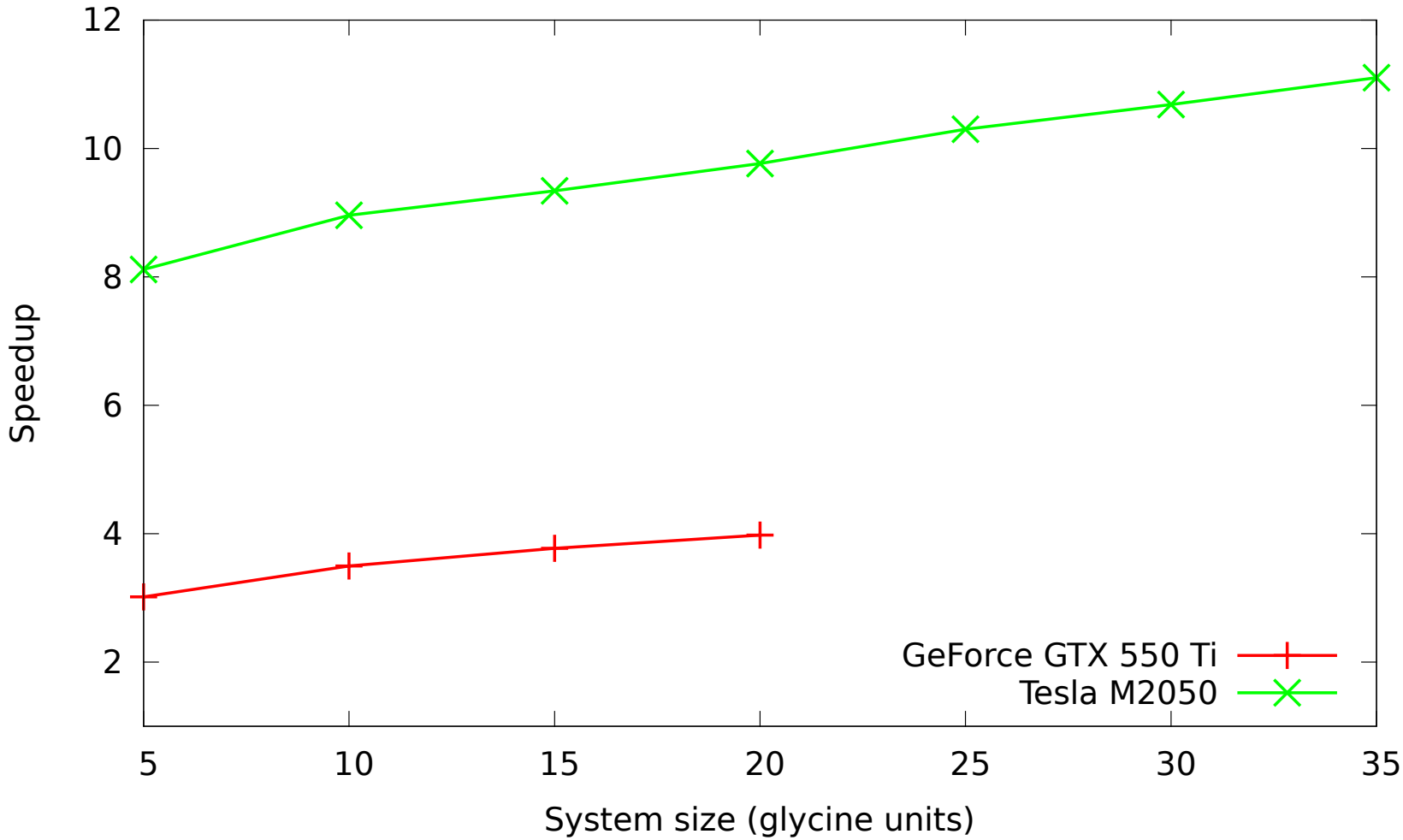
INNOWACYJNA GOSPODARKA NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
CYFRONET
UNIA EUROPEJSKA EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO

Testbed

- Hardware
- CPU: Intel Xeon X5670
- GPUs: Tesla M2050, GeForce 550 Ti
- Software
  - niedoida
  - TeraChem (ver. 1.50K)
- Molecular systems
  - polyglycine chains
  - 6-31G basis set
  - RHF and B3LYP calculations

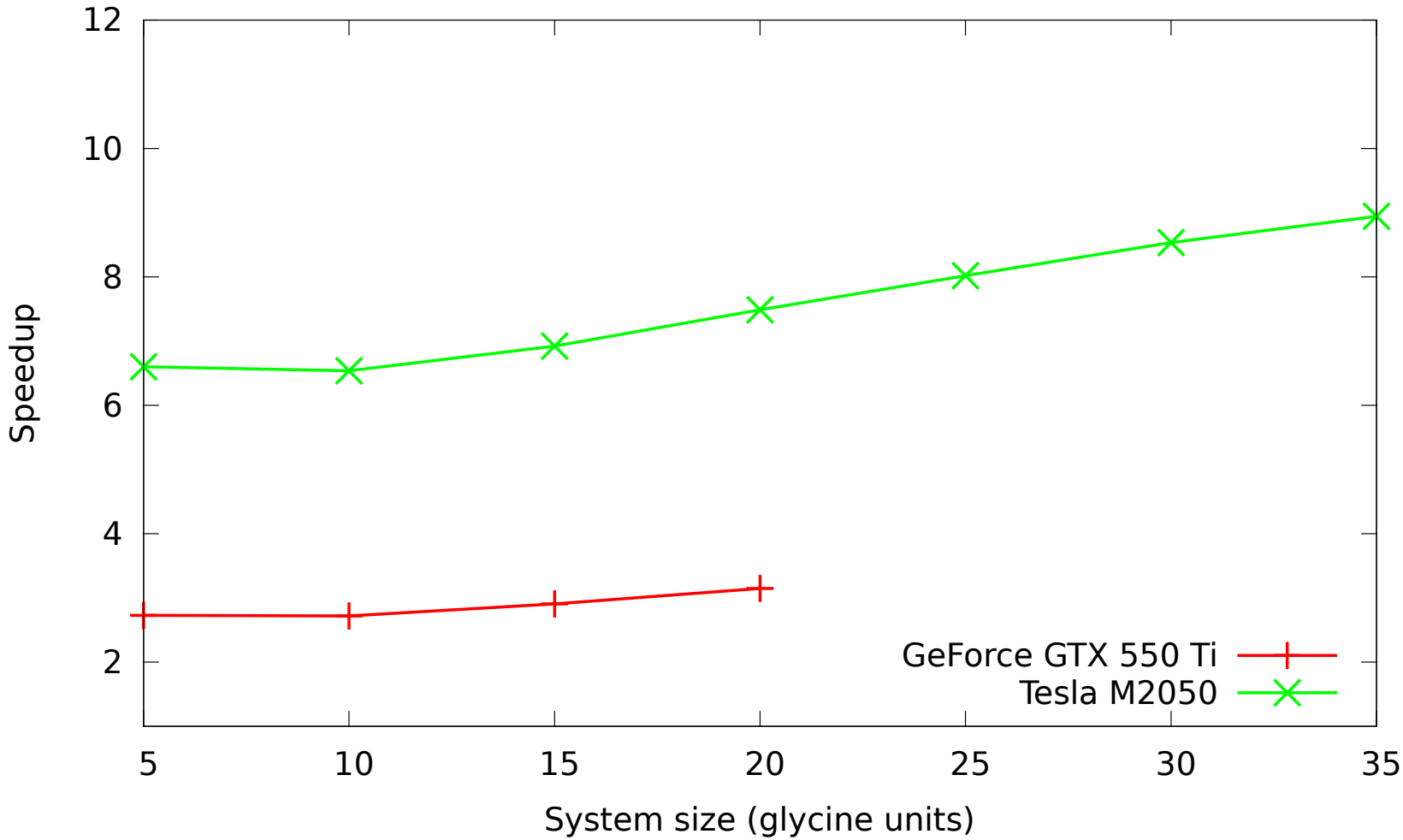
INNOWACYJNA GOSPODARKA NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
CYFRONET
UNIA EUROPEJSKA EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO

GPU vs CPU: Hartree-Fock



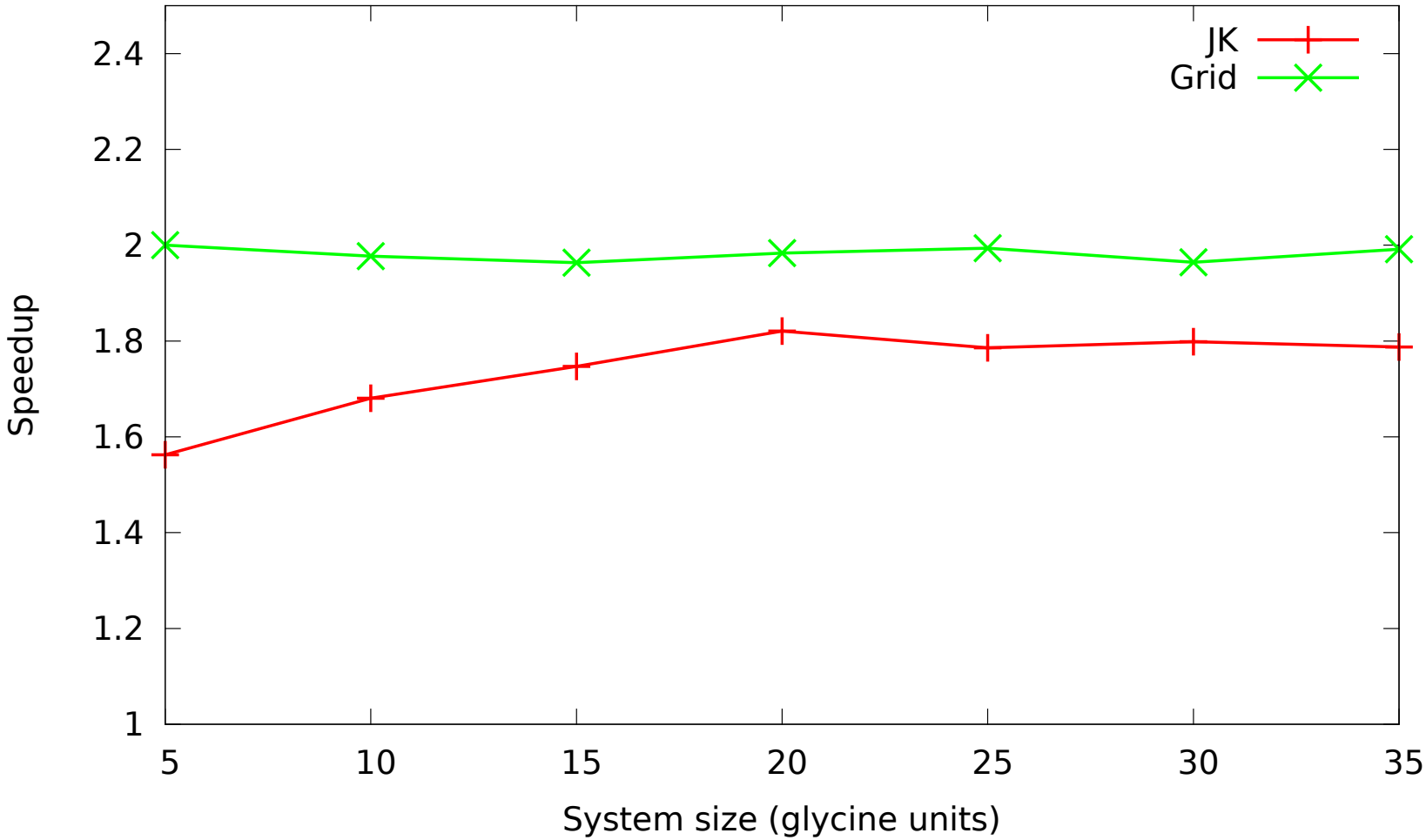
INNOWACYJNA GOSPODARKA NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
CYFRONET
UNIA EUROPEJSKA EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO

GPU vs CPU: B3LYP



INNOWACYJNA GOSPODARKA NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
CYFRONET
UNIA EUROPEJSKA EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO

Multi-GPU efficiency



INNOWACYJNA GOSPODARKA NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
CYFRONET
UNIA EUROPEJSKA EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO

Method	Speedup vs CPU	Speedup vs TeraChem
HF	11.10	0.30
B3LYP	8.94	0.37
grid integration	2.33	0.69

INNOWACYJNA GOSPODARKA NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
CYFRONET
UNIA EUROPEJSKA EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO

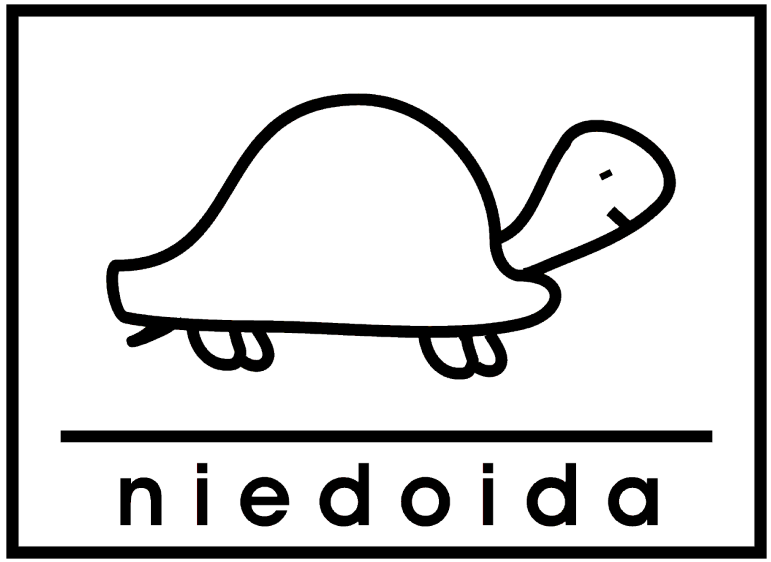
Future

Projects in progress/planned:

- integration for d- and f-type basis functions
- RI-DFT and RI-MP2
- CIS and TD-DFT excited states calculations
- gradients and second derivatives:
  - geometry optimization
  - Born-Oppenheimer molecular dynamics
  - vibrations
- hybrid parallelization

INNOWACYJNA GOSPODARKA NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
CYFRONET
UNIA EUROPEJSKA EUROPEJSKI FUNDUSZ ROZWOJU REGIONALNEGO

To Be Continued...



This work was carried out thanks to the
"POWIEW" POIG.02.03.00-00-018/08-00 project.
This project is co-funded by the European Regional Development Fund
(ERDF) as a part of the Innovative Economy program.

INNOWACYJNA GOSPODARKA
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI
CYFRONET
UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ
ROZWOJU REGIONALNEGO