

Skaičiavimų galimybės naudojant 0.3 PFlops našumo „VU HPC“ Saulėtekis superkompiuterį

Calculation capabilities using the 0.3 PFlops performance “VU HPC” Saulėtekis supercomputer

Mindaugas Macernis¹, Jonas Franukevičius¹, Juozas Šulskus¹

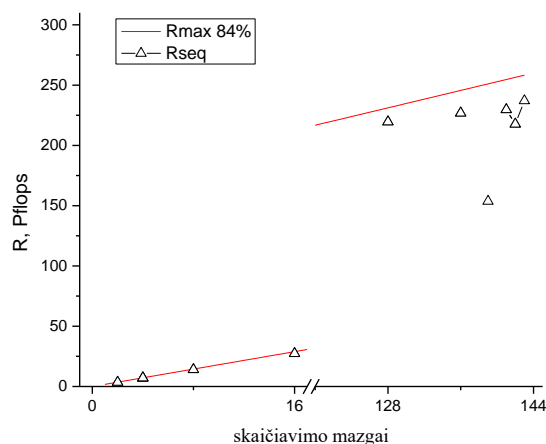
¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

mindaugas.macernis@ff.vu.lt

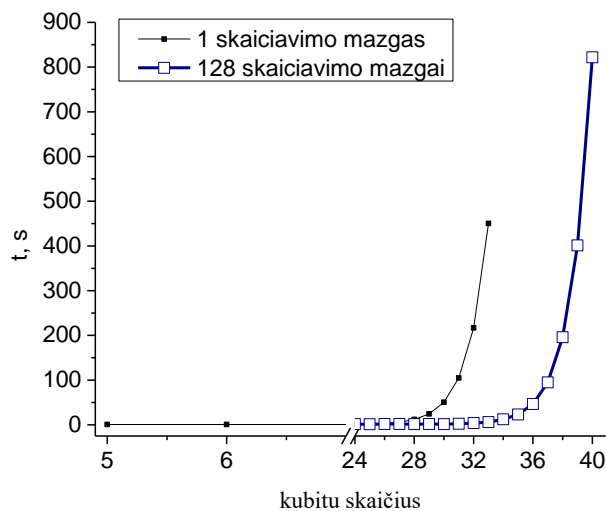
Naujoms mokslo šakoms tokioms kaip kvantinė biologija[1] ar kvantiniai kompiuteriai[2] reikalinga ypač naši kompiuterinė įranga su ypač našiais skaičiavimo algoritmais. Kvantinė biologijoje yra naudojami skaičiuojamosios kvantinės chemijos ir fizikos metodika, todėl reikalingi galingi paraleliniai kompiuteriniai pajėgumai. Amadalo dėsnis sudaro prielaidas nuspėti su kokio dydžio superkompiuteriais įmanoma greičiau spręsti uždavinius ir kada nebegalima tikėtis pagreitėjimo. Be Amadalo dėsnio ribojimo yra papildomi ribojantys veiksniai. Šie ribojai yra dėl kompiuterinio tinklo pralaidumo ir vėlinimo, operatyvinės atminties dydžio ir vėlinimo, procesų konkurencijos dėl skaičiavimo resursų ir t.t. Kiti našumo ribojimai yra pačiame programos kode, kuris turi būti tinkamai išlygiagretintas. O Amadalo dėsnis apibrėžia tik santykio tarp nuoseklaus ir lygiagretaus programinio kodo dalių įtaką. Įvertinti realias superkompiuterio galimybes galima atliekant bandomuosius skaičiavimus. Tipinis superkompiuterių architektūros kokybės matas yra aukšto našumo Linpack (HPLinpack) testas, kuris naudojamas įvertinti pasaulio 500 našiausių superkompiuterius (www.top500.org). Visgi, specifiniams parametrų įvertinti būtini kiti standartiniai paketai: kvantinės chemijos NwChem paketas yra ypač stipriai pritaikytas superkompiuteriams, o kvantinio kompiuterio simulatorius QuEST pasižymi operatyvios atminties poreikiu. Tokie testai gana objektyviai atspindi superkompiuterių galimybes fizikiniams medžiagotyrimams uždaviniams spręsti.

Šiame darbe buvo atlikta eilė tyrimų su HPLinpack, molekulių dinamika su NwChem, ir QuEST paketais. Gautas superkompiuterio našumas 0.237052 PFlops, o tai sudaro 80% heterogeninio superkompiuterio įrangos pikinio suminio našumo (1 pav.). Naudojant NwChem Car-Parinello molekulių dinamiką pagal [3] literatūros duomenis 89 valandų skaičiavimus vieno mazgo uždavinys buvo išspręstas per 2.5 valandas su 96 skaičiavimo mazgais. Tuo tarpu kvantinio kompiuterio simulatorius QuEST su 128 skaičiavimo mazgais (2 pav.) susumuliavmo 40 kvantinių kubitų.

Atlikti skaičiavimai parodė, kad atnaujintas „VU HPC“ Saulėtekis superkompiuteris yra priklausomai nuo konkrečios užduoties nuo 10 iki 35 kartų našesnis už iki šiol buvusį. Tai leidžia spręsti mokslines problemas, kurios dar prieš metus buvo visiškai nerealias.



1 pav. HPLinpack rezultatai



2 pav. QuEST kvantinių kompiuterio kubitų simuliacijos su superkompiuteriu.

Reikšminiai žodžiai: kvantinė chemija, superkompiuteriai, kvantiniai kompiuteriai.

Literatūra

- [1] Cao, J., Cogdell, R.J., Coker, D.F., Duan, H.-G., Hauer, J., Kleinekathöfer, U., Jansen, T.L.C., Mančal, T., Miller, R.J.D., Ogilvie, J.P., Prokhorenko, V.I., Renger, T., Tan, H.-S., Tempelaar, R., Thorwart, M., Thyryhaug, E., Westenhoff, S., and Zigmantas, D., 'Quantum Biology Revisited', Science Advances, 2020, 6, (14), p. eaaz4888.
- [2] Jones, T., Brown, A., Bush, I., and Benjamin, S.C., 'Quest and High Performance Simulation of Quantum Computers', Scientific Reports, 2019, 9, (1), p. 10736.
- [3] S. Streckaite, M. Macernis, F. Li et al., J. Phys. Chem. A, **124**, 2792-2801, (2020).