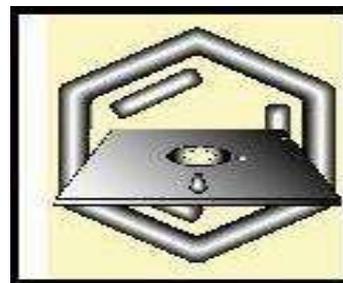


Суперкомпьютеры для задач молекулярной динамики и квантовой механики молекул

М.Б. Кузьминский, Н.А. Аникин

Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва

e-mail: kus@free.net



Издательский дом «Открытые системы»



**ОТКРЫТЫЕ
СИСТЕМЫ**
Open Systems Publications

Москва 2013

Зачем нужна квантовая химия с суперкомпьютерами ?

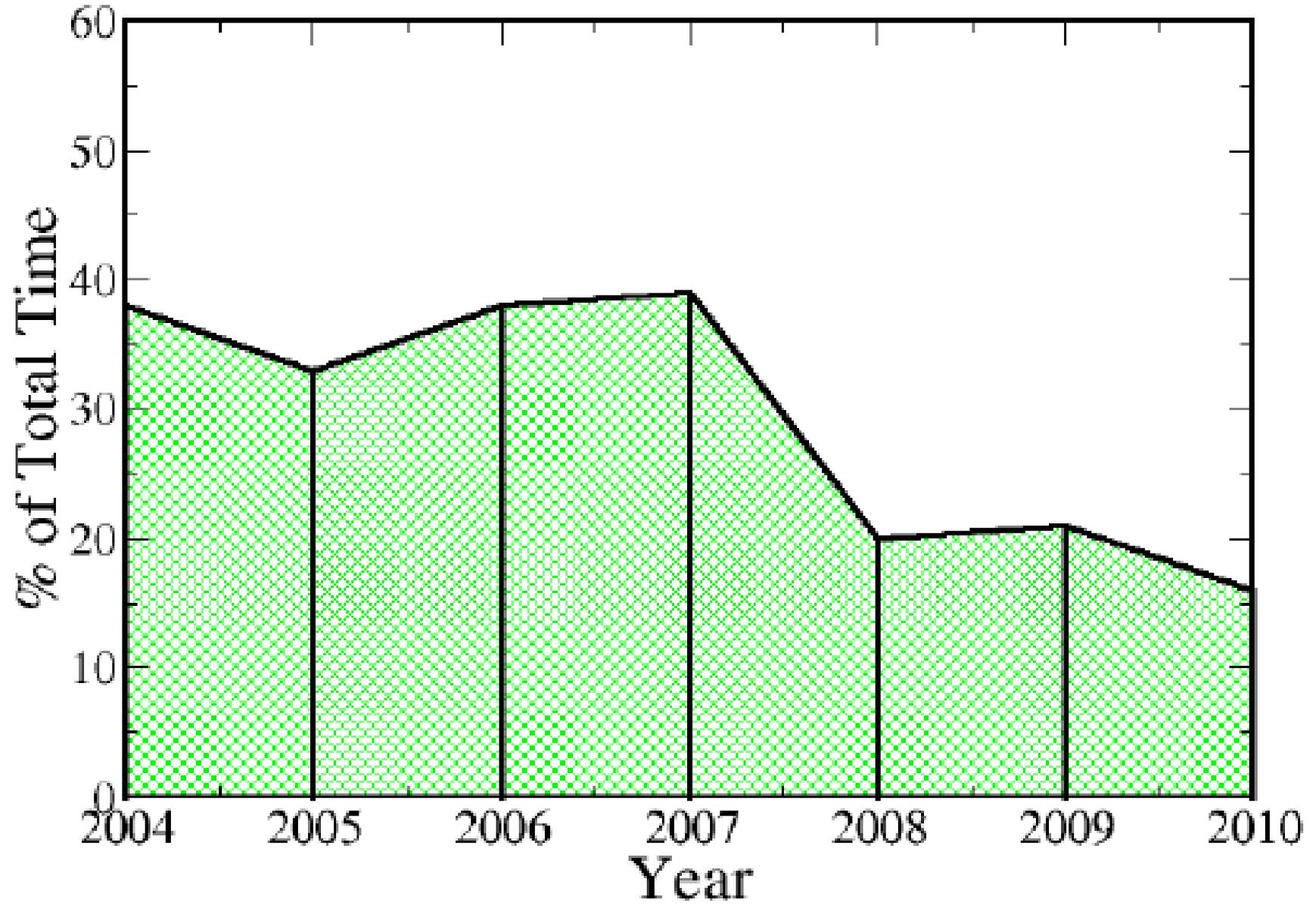
Для нанотехнологий и биотехнологий:

- Сокращение времени разработок
- Эксперимент становится все более дорог
- Био- нанообъекты для молекулярного моделирования требуют огромных затрат компьютерных ресурсов
- Поэтому требуется применение суперкомпьютеров

Зачем нужна молекулярная динамика с суперкомпьютерами ?

- Большие и гигантские биомолекулы содержат от тысяч до миллионов атомов
- Эти молекулы имеют гибкую подвижную структуру, надо учесть их тепловое движение (**молекулярная динамика**)
- Для этого нужны **массовые расчеты гигантских молекул** при разных расположениях в пространстве их атомов и соответственно нужны **суперкомпьютеры**

Квантовохимические приложения в Швейцарском суперкомпьютерном центре



Асимптотическая производительность квантовохимических методов

Scaling Behavior	Method(s)
N^3	DFT
N^4	HF
N^5	MP2
N^6	MP3, CISD, CCSD, QCISD
N^7	MP4, CCSD(T), QCISD(T)
N^8	MP5, CISDT, CCSDT
N^9	MP6
N^{10}	MP7, CISDTQ, CCSDTQ
$N!$	Full CI

N = Number of Basis Functions

GPU для квантовой химии и молекулярной динамики

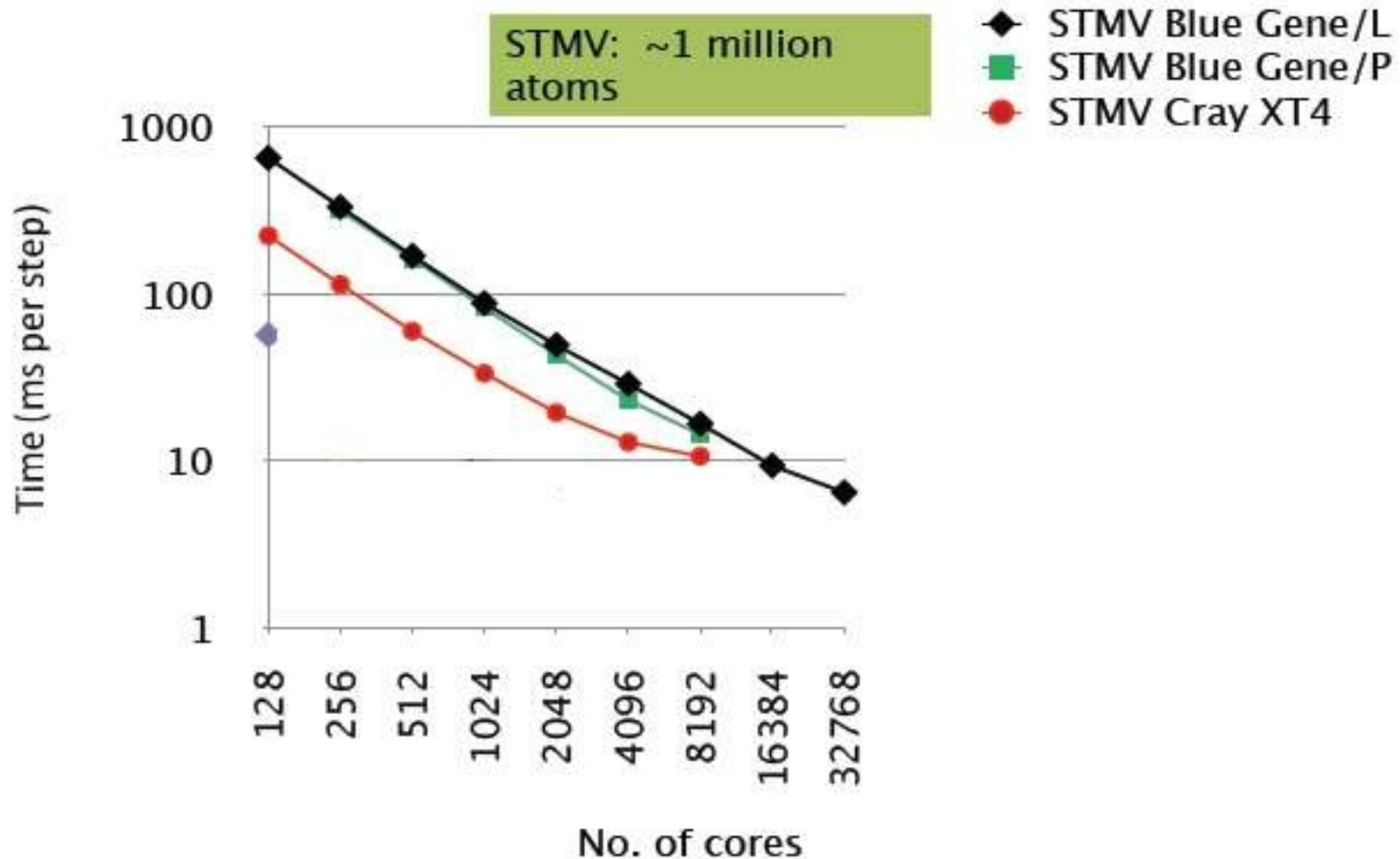
Квантовая химия:

- программы: NWChem, GAMESS-US, GAMESS-UK, MOLCAS, ADF, BigDFT, Qchem и др.
- методы: DFT, MP2, RI-MP2 и др.
- разработки: наш аппроксимированный метод DFT со сверхбыстрыми расчетами больших био- и нанобъектов

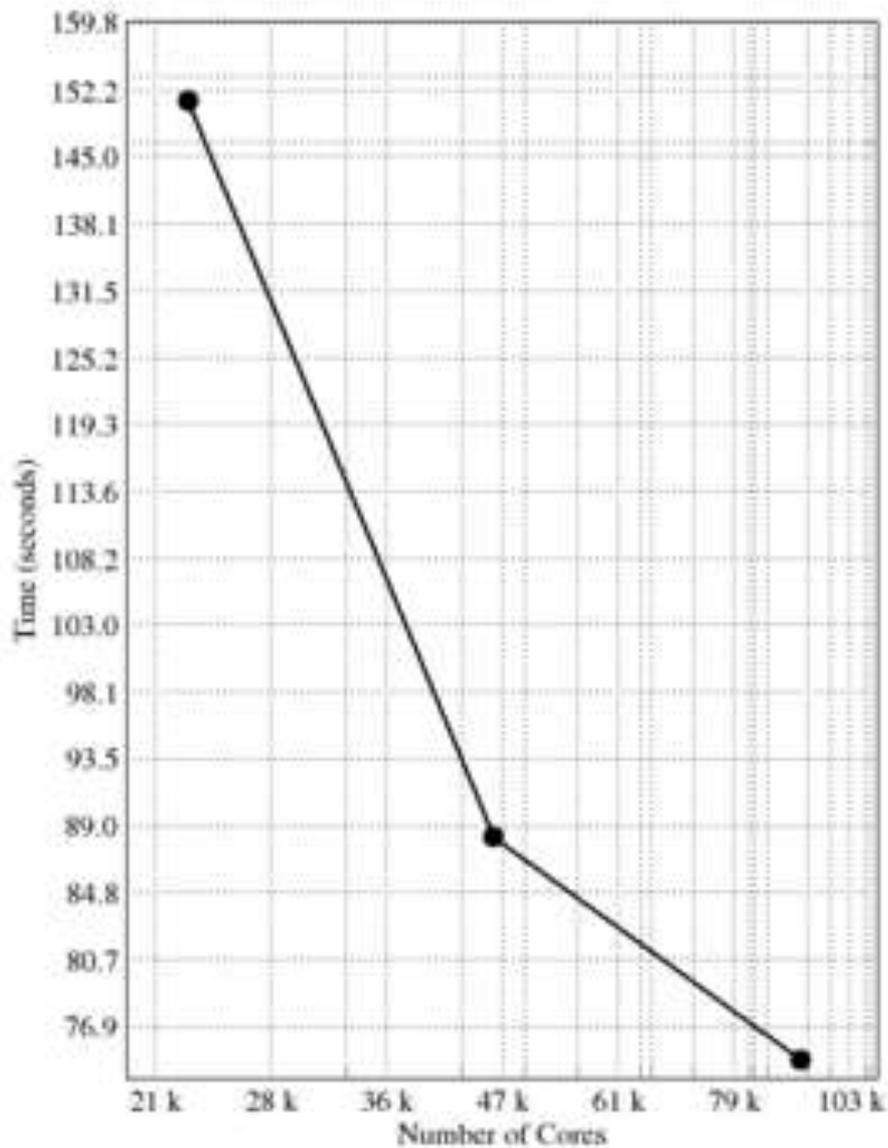
Молекулярная динамика:

Amber, Charmm, DL_Poly, GROMACS, LAMMPS, NAMD

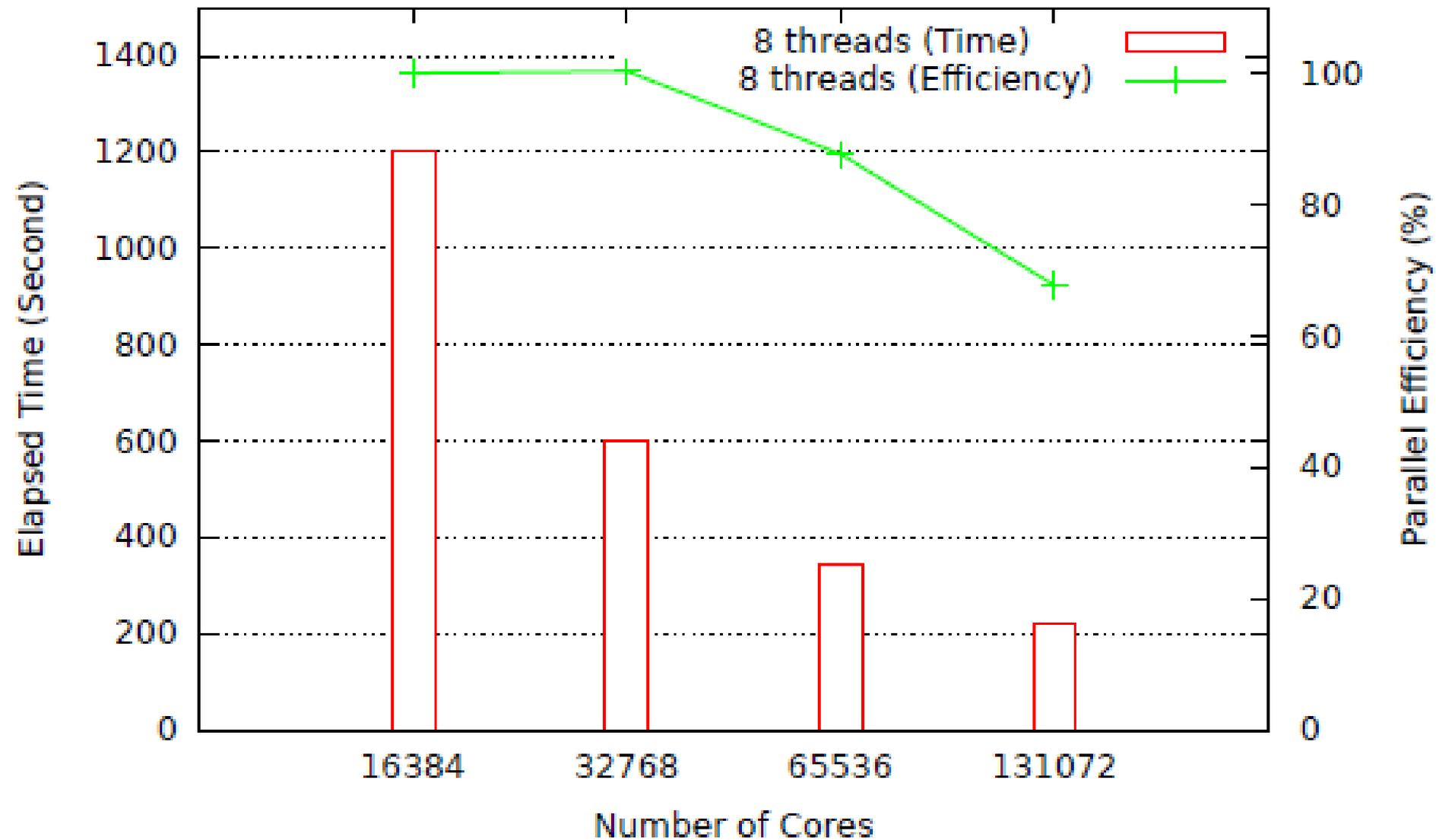
Blue Gene / Cray XT4 Performance of NAMD



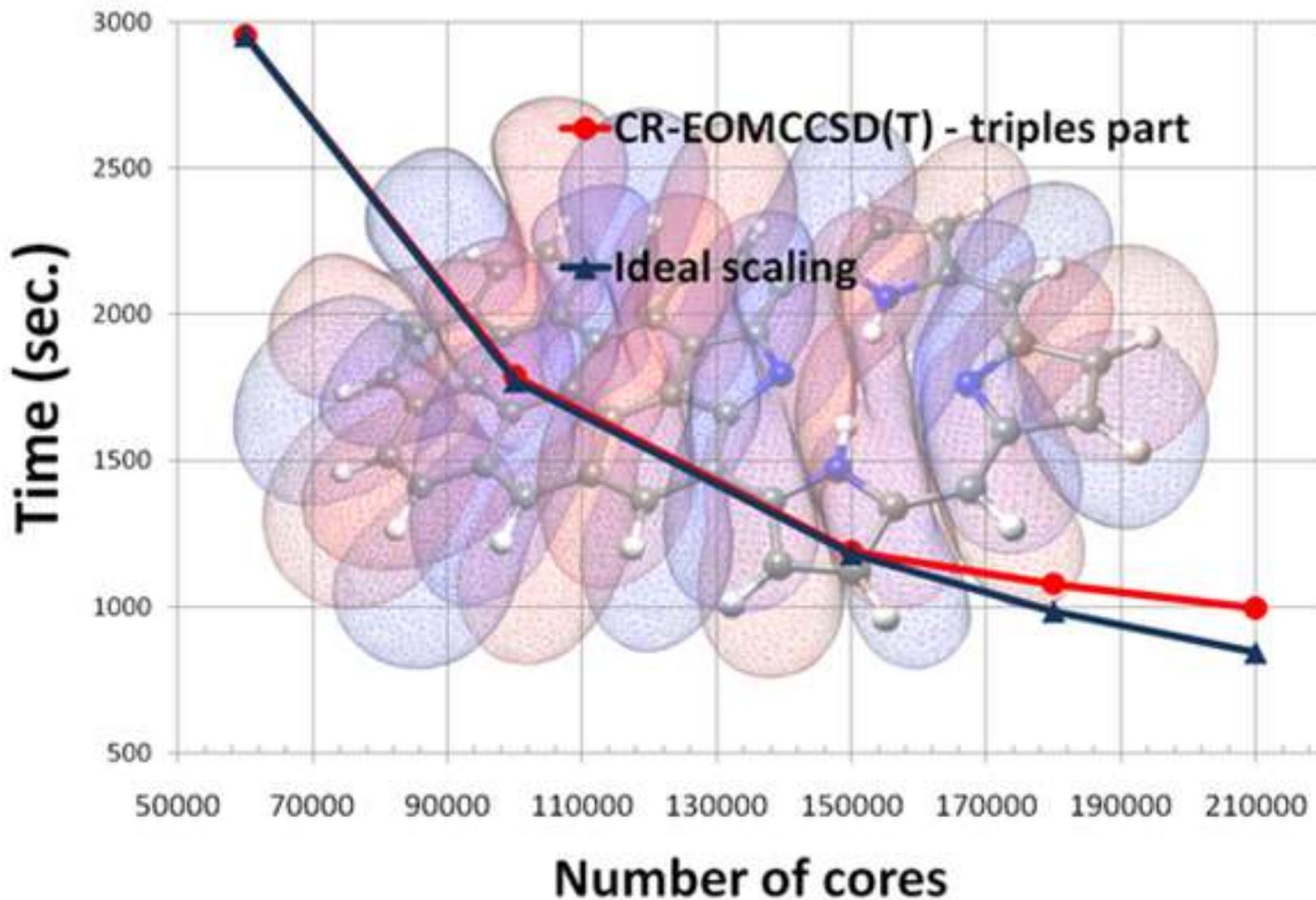
Неэмпирическая молекулярная динамика, NWChem/Cray XE6



DFT, Fujitsu K Computer, структура алмаза



Квантовая химия, программа NWChem/Jaguar Cray XT5



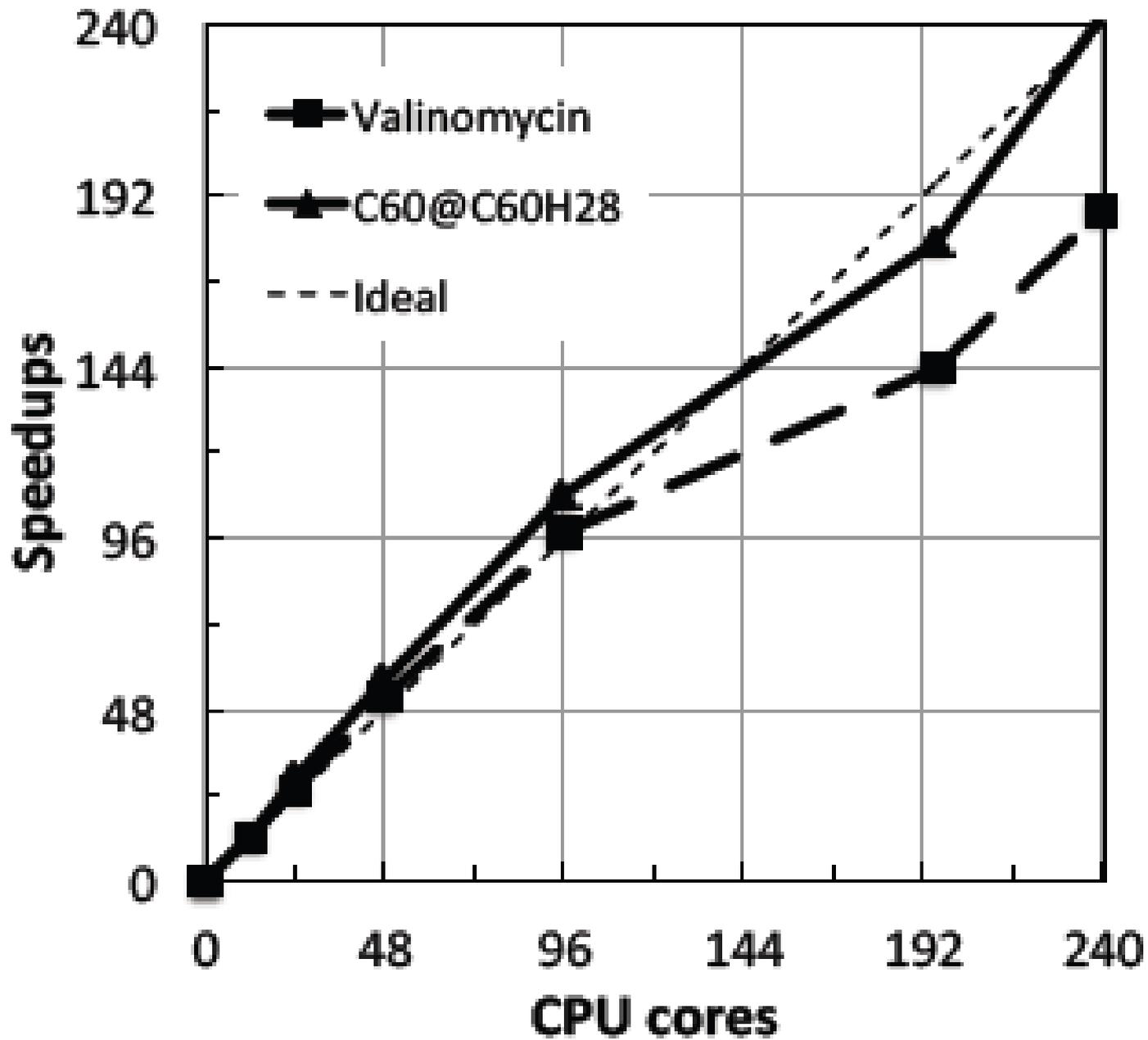
Метод RI-MP2

$$\rho_{\mu\nu}(\mathbf{r}) = \mu(\mathbf{r})\nu(\mathbf{r}) \approx \tilde{\rho}(\mathbf{r}) = \sum C_{\mu\nu,p}P(\mathbf{r}) \quad (1)$$

Аппроксимация массива кулоновских интегралов от молекулярных орбиталей μ , ν , λ , σ факторизуется комбинацией массивов меньших размеров с участием вспомогательных функций плотности P и Q

$$(\mu\nu|\widetilde{\lambda\sigma}) = \sum_{P,Q} (\mu\nu|P)(P|Q)^{-1}(Q|\lambda\sigma) \quad (2)$$

RIMP2: Infiniband-кластер Хеон X5670



Метод FMO (Fragment Molecular Orbitals)

$$\Delta E_{IJ} = E_{IJ} - E_I - E_J \quad (1)$$

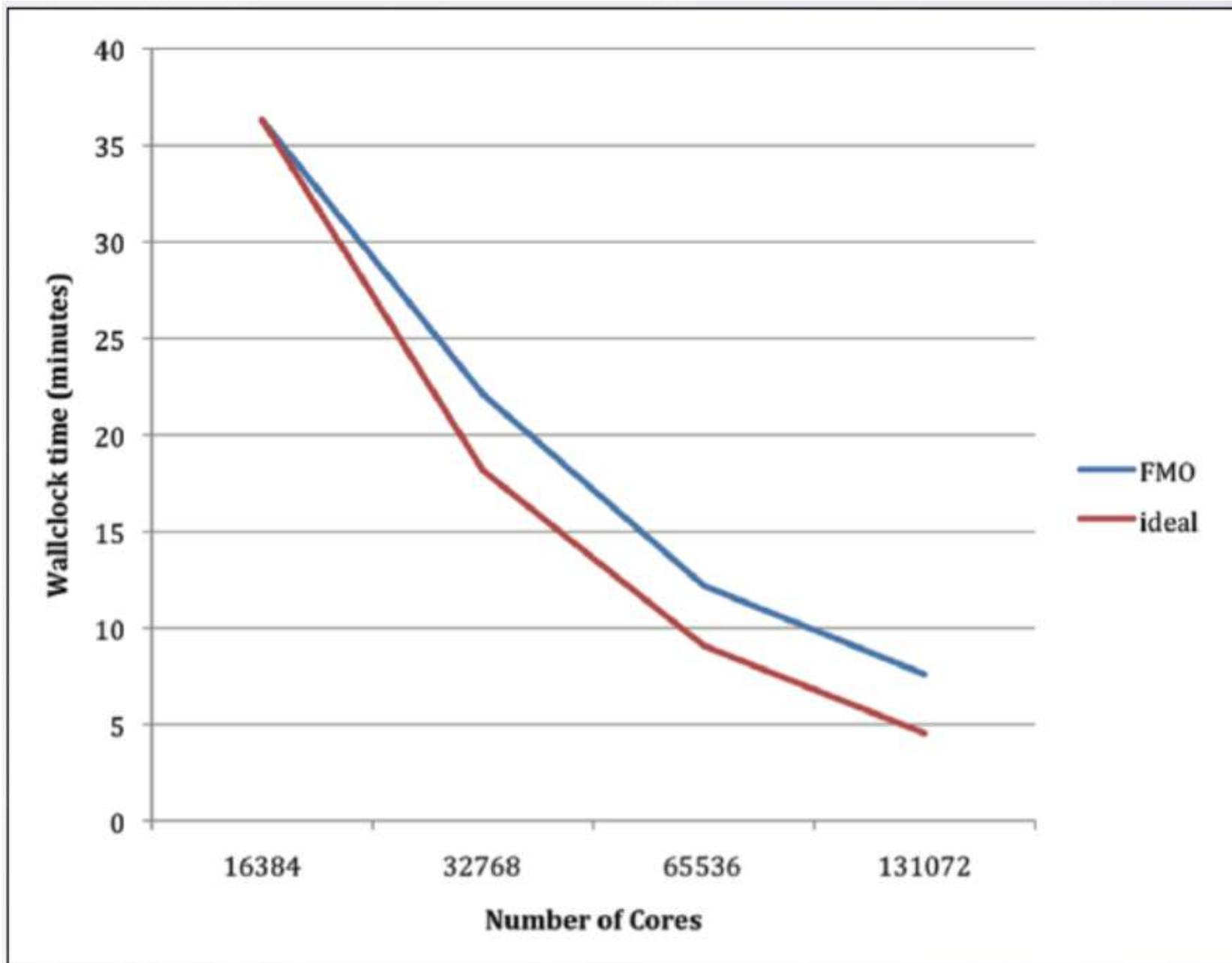
E_I - мономерная энергия фрагмента I

E_{IJ} - димерная энергия фрагментов I и J

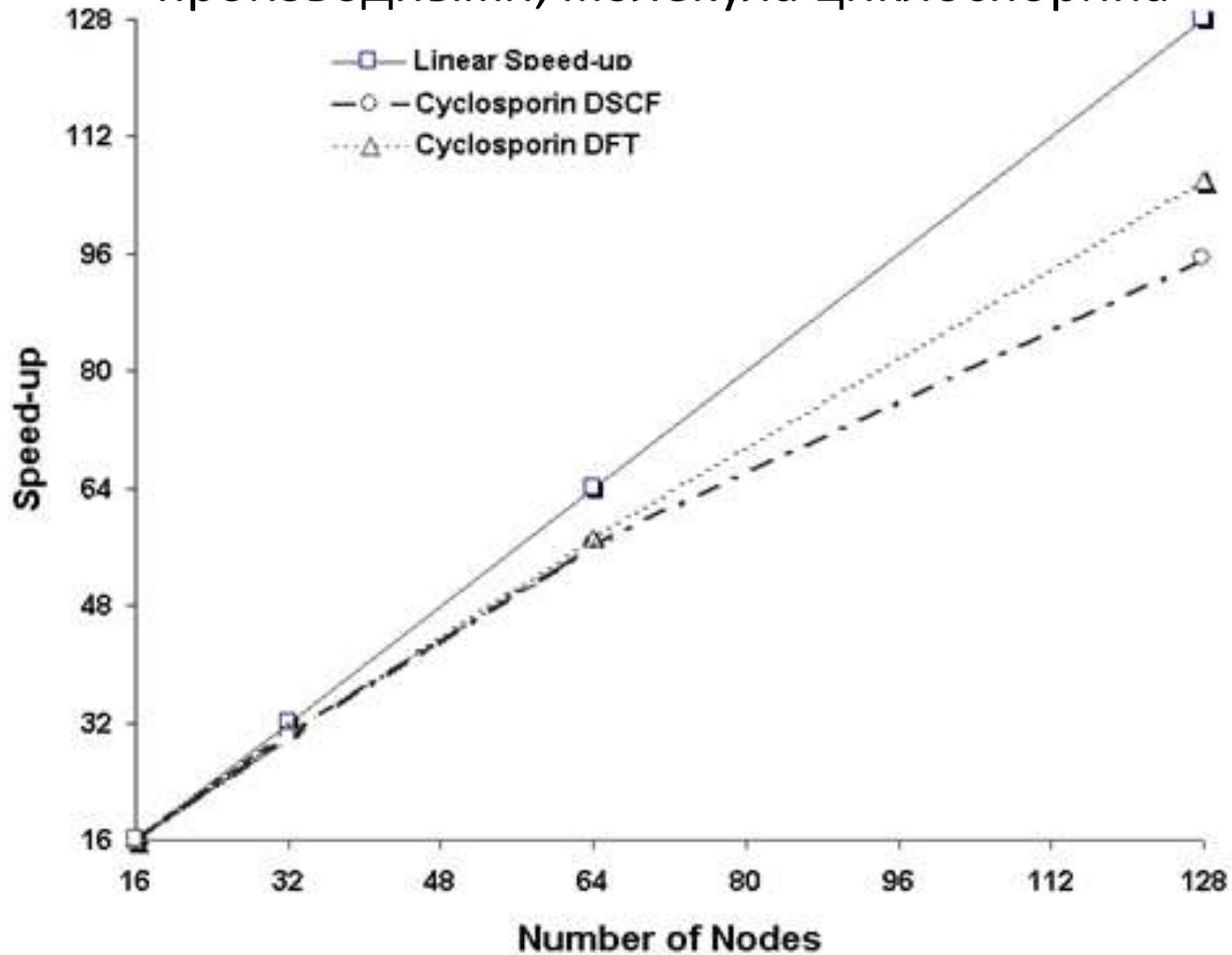
$$E_{total} \approx \sum_{I>J} \Delta E_{IJ} + \sum_I E_I \quad (2) \quad - \text{ полная энергия}$$

Метод FMO и формулы (1) и (2) применимы для разных методов квантовой химии (DFT, MP2, RI-MP2 и др.)

FMO2-MP2/6-31G(d) 12288 атомов, VG/P, расчет сил



Games-UK, direct SCF и DFT со вторыми производными, молекула циклоспорина



ВЫВОДЫ

- Т. к. методы расчета сложны (и молекулярной динамики, и квантовой химии), распараллеливание достаточно эффективно и на многопроцессорных суперкомпьютерах.
- Практика это подтверждает
- В среднем чем сложнее метод, тем больше расчетный блок при декомпозиции, и лучше распараллеливание (меньше доля во времени операция обменов)
- То же самое справедливо для размера молекулы (крупные молекулы лучше распараллеливаются)