Сравнительный анализ многопоточной производительности CPU и GPU в JDFT-моделировании гетероструктур металл-графен*

Д.В. Гордиенко^{1,2}, С.В. Павлов¹, В.А. Кисленко¹, С.А. Кисленко¹

Объединенный институт высоких температур РАН¹,
Московский физико-технический институт²

В работе исследована производительность CPU и GPU на примере расчетов в рамках теории функционала электронной плотности в программе JDFTx [1, 2]. Произведены замеры скорости счета при варьировании числа OpenMP-потоков и MPI-процессов. Тестирование производилось в большом каноническом ансамбле при заданной величине химического потенциала электронов в гетероструктуре графен/золото с применением континуальной модели электролита CANDLE [3], симулирующей 0.1 М водный раствор KCl. Также выполнялось моделирование в каноническом ансамбле электронейтральной системы. Расчеты такого рода принципиально важны для реалистичного моделирования электрохимических систем и экспериментальных аналитических процедур, которые часто производятся в потенциостатическом режиме или при потенциале нулевого заряда в контакте с раствором электролита. Еще одной особенностью работы является осуществление тестирования на примере длительных расчетов до 24 часов, в отличие от часто встречающихся замеров на пробных системах длительностью в несколько минут.

Результаты демонстрируют существенный выигрыш от применения графических процессоров в рассматриваемом классе задач. Получены аналитические оценки необходимого объема оперативной памяти для проведения вычислений как в пределах одного MPI-процесса, так и для всей программы. Обнаружено, что при работе на GPU-системах следует запускать не более одного MPI-процесса на одной GPU, что эффективней как с точки зрения скорости вычислений, так и необходимого объема памяти, что существенно ограничивает применение графических процессоров на практике. При проведении моделирования на CPU-системах следует задавать как можно большее число MPI-процессов, но не больше числа неприводимых k-точек, внутри каждого MPI-процесса запускать наибольшее возможное число OpenMP-потоков.

Литература

1. Sundararaman R., Vigil-Fowler D., Schwarz K. Improving the accuracy of atomistic simulations of the electrochemical interface // Chemical reviews. 2022. Vol. 122, no. 12. P. 10651–10674. DOI: 10.1021/acs.chemrev.1c00800.
2. Sundararaman R., Letchworth-Weaver K., Schwarz K.A. et al. JDFTx: Software for joint density-functional theory // SoftwareX. 2017. Vol. 6. P. 278–284. DOI: 10.1016/j.softx.2017.10.006.
3. Sundararaman R., Goddard W.A. The charge-asymmetric nonlocally determined localelectric (CANDLE) solvation model // The Journal of chemical physics. 2015. Vol. 142, no. 6. DOI: 10.1063/1.4907731.

* Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Государственное задание № 075-00269-25-00).