

АНАЛИЗ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ОЦЕНОЧНОЙ ФУНКЦИИ ДЛЯ УЧЕТА МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ НА ГРАФИЧЕСКОМ ПРОЦЕССОРЕ

Коржов Игнат Юрьевич

Студент

Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия

E-mail: kiyu.21@uni-dubna.ru

Научный руководитель — Полунин Сергей Владимирович

На сегодняшний день в различных пакетах для молекулярного моделирования активно используются вычисления, выполняемые на графических процессорах [1]. При этом в большинстве исследований демонстрируются принципы применения графических процессоров при реализации метода молекулярной динамики [2], в котором рассматривается изменение молекулярной системы с течением времени. Следует отметить, что на данный момент отсутствуют исследования, посвященные оценке производительности подходов с использованием графических процессоров при вычислении энергии статической молекулярной системы методами молекулярной механики.

В настоящей работе рассматривается задача оценки энергии связывания для белковых комплексов вида белок-белок. Оценка энергии выполняется с помощью оценочной функции, при вычислении которой используются классические парные потенциалы [3], а компоненты комплексов описываются координатами атомов и частичными зарядами. Предметом исследования являются принципы организации параллельных вычислений при реализации оценочной функции с использованием графических ускорителей.

Цели исследования — реализация оценочной функции с использованием графического процессора и технологии CUDA на языке программирования C++, а также анализ производительности выбранного подхода к организации вычислений с применением Roofline-модели [4].

Вычисление энергии связывания включает два основных этапа. Сначала производится поиск взаимодействующих атомов. Затем выполняется оценка энергии с помощью парных потенциалов. В исследовании рассматриваются два способа параллельной реализации для выполнения указанных этапов с использованием технологии CUDA: простой (simple) и с применением shared-memory (shared).

В результате выполненной работы произведена реализация оценочной функции с использованием технологии CUDA. В докладе рассматриваются преимущества выбранного подхода применения параллельных вычислений. Приводится анализ и сравнение двух способов вычислений с помощью Roofline-модели, которая построена средствами инструмента Nvidia Nsight Compute и представлена на рис. 1. Вычислительные эксперименты проведены на графическом процессоре Nvidia GeForce RTX 3050 Ti.

Иллюстрации

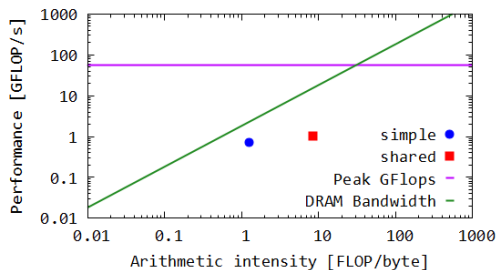


Рис. 1. Построенная средствами Nvidia Nsight Compute Roofline-модель

Литература

1. Kondratyuk N., Nikolskiy V., Pavlov D., Stegailov V. GPU-accelerated molecular dynamics: State-of-art software performance and porting from Nvidia CUDA to AMD HIP // IJHPCA, 2021, 35(4), P. 312–324. doi: 10.1177/10943420211008288
2. George A., Mondal S., Purnaprajna M., Athri P. Review of Electrostatic Force Calculation Methods and Their Acceleration in Molecular Dynamics Packages Using Graphics Processors // ACS Omega, 2022, 7(37), P. 32877–32896.
3. Полуян С. В., Никулин Д. А., Ершов Н. М. Разработка и верификация оценочной функции для учета межмолекулярных взаимодействий в белковых комплексах // Материалы Всероссийской конференции «Информационно-телекоммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем», Изд-во РУДН, 2023, С. 231–235.
4. Williams S., Waterman A., Patterson D. Roofline: an insightful visual performance model for multicore architectures // Communications of the ACM, 52(4), P. 65–76.