

Impacto del cómputo de alto rendimiento en la química

Jorge Garza

Departamento de Química
Área de Físicoquímica Teórica
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

Mayo 8-10 de 2013



Índice

- 1 Métodos de estructura electrónica
 - Instrumentos de los químicos
 - Mundo microscópico
 - Función de onda y DFT

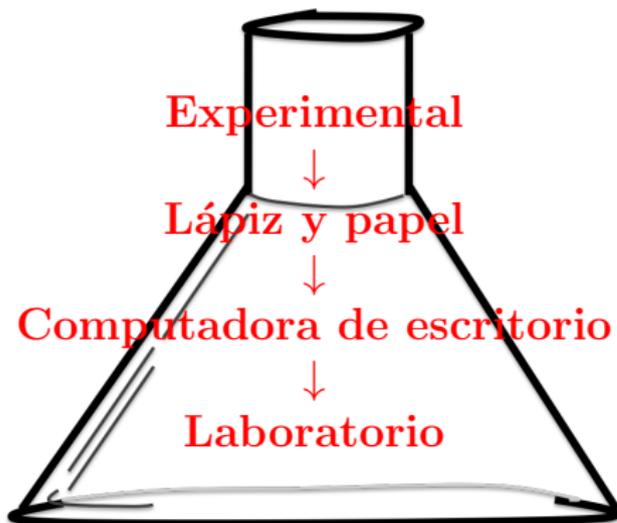
Índice

- 1 Métodos de estructura electrónica
 - Instrumentos de los químicos
 - Mundo microscópico
 - Función de onda y DFT
- 2 Computadoras
 - Operaciones a realizar
 - TOP500
 - HPC

Índice

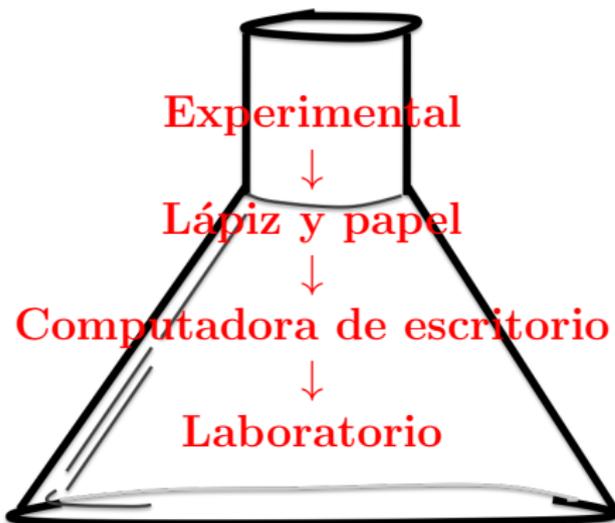
- 1 Métodos de estructura electrónica
 - Instrumentos de los químicos
 - Mundo microscópico
 - Función de onda y DFT
- 2 Computadoras
 - Operaciones a realizar
 - TOP500
 - HPC
- 3 Cúmulos de servidores
 - Construcción de cúmulos
 - Ejemplos
 - GPUs

Instrumentos de los químicos

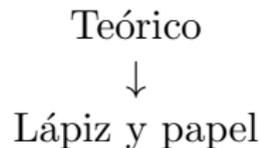
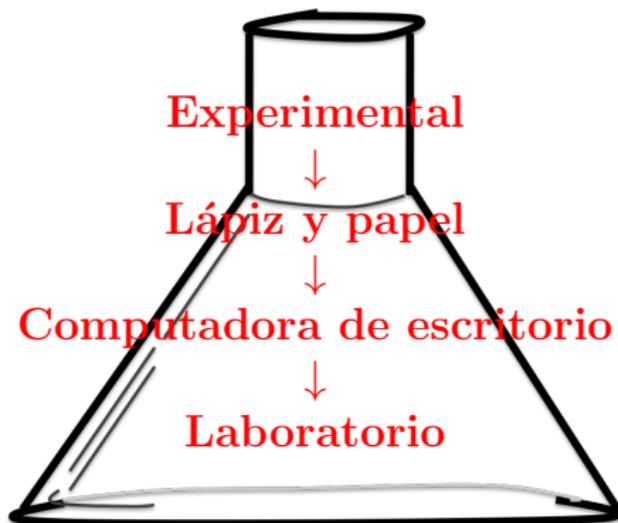


Instrumentos de los químicos

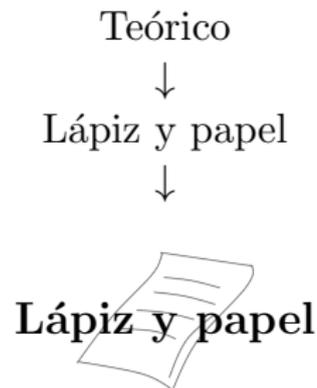
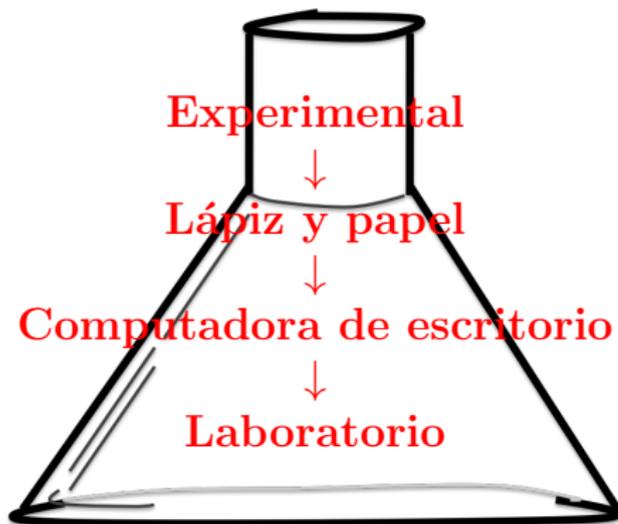
Teórico



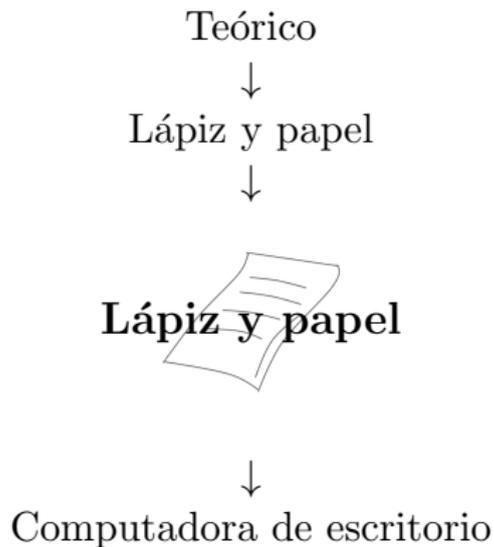
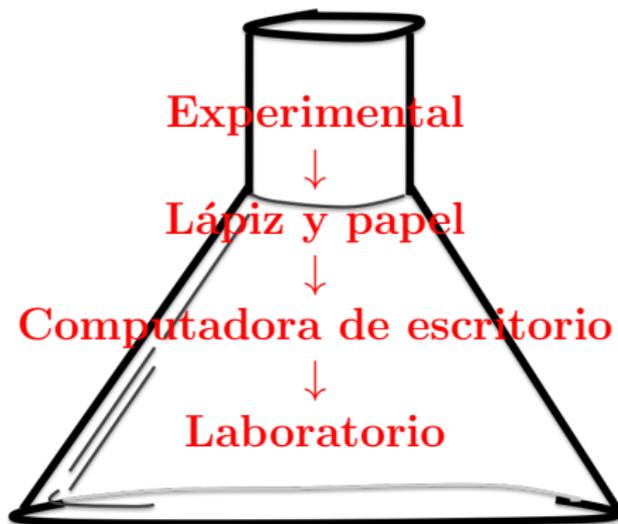
Instrumentos de los químicos



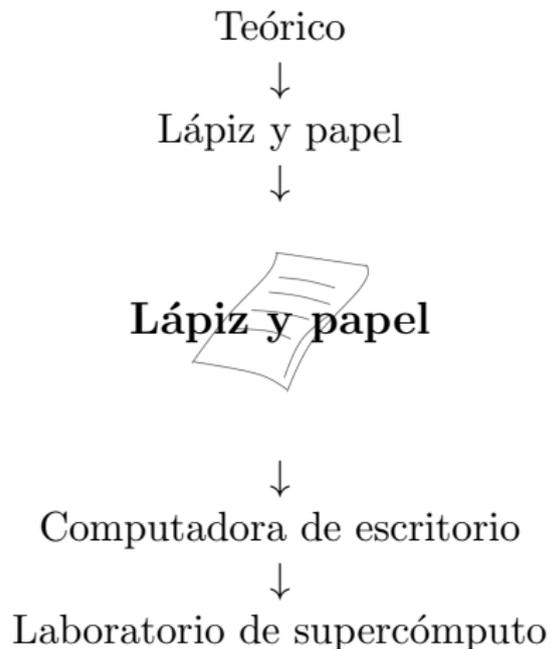
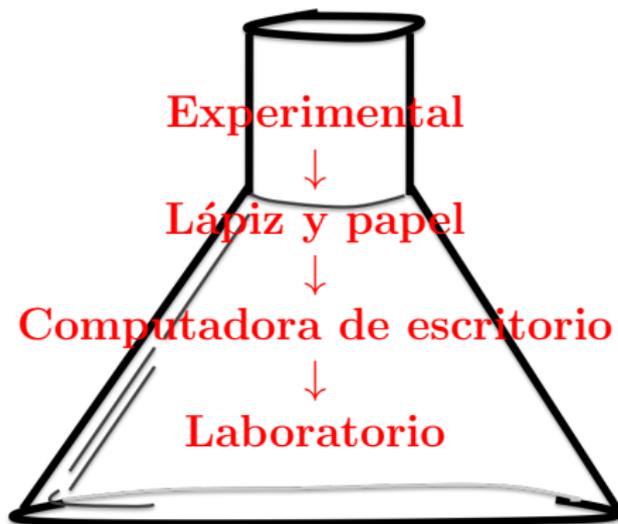
Instrumentos de los químicos



Instrumentos de los químicos



Instrumentos de los químicos



Estructura electrónica de átomos y moléculas

Mecánica clásica

Estructura electrónica de átomos y moléculas

Mecánica clásica



Mundo macroscópico

Estructura electrónica de átomos y moléculas

Mecánica clásica



Mundo macroscópico



Ecuaciones de Newton

Estructura electrónica de átomos y moléculas

Mecánica clásica



Mundo macroscópico



Ecuaciones de Newton

Mecánica cuántica

Estructura electrónica de átomos y moléculas

Mecánica clásica



Mundo macroscópico



Ecuaciones de Newton

Mecánica cuántica



Mundo microscópico

Estructura electrónica de átomos y moléculas

Mecánica clásica



Mundo macroscópico



Ecuaciones de Newton

Mecánica cuántica



Mundo microscópico



Ecuación de Schrödinger

Solución de la ecuación de Schrödinger

$$\hat{H} |\Phi\rangle = \varepsilon |\Phi\rangle. \quad (1)$$

Concepto de orbital !!

Métodos de la química cuántica

Métodos basados en la función de onda

- Hartree-Fock
- MP2, MP4,..
- CI
- CC

Métodos de la química cuántica

Métodos basados en la función de onda

- Hartree-Fock
- MP2, MP4,..
- CI
- CC

Métodos basados en la teoría de funcionales de la densidad

- Solución de la ecuación de Euler-Lagrange
- Kohn y Sham

Métodos de la química cuántica

Métodos basados en la función de onda

- Hartree-Fock
- MP2, MP4,..
- CI
- CC

Métodos basados en la teoría de funcionales de la densidad

- Solución de la ecuación de Euler-Lagrange
- Kohn y Sham

Basados en el concepto de orbital!!

Funciones de base

Representación de orbitales en términos de un conjunto de funciones de base

$$\psi_i(\vec{r}_1) = \sum_{\mu=1}^k c_{\mu}^{(i)} \phi_{\mu}(\vec{r}_1) \quad i = 1, 2, \dots, k \quad (2)$$

$$\sum_{\nu} c_{\nu}^{(i)} \int d\vec{r}_1 \phi_{\mu}^*(1) \hat{f}(1) \phi_{\nu}(1) = \varepsilon_i \sum_{\nu} c_{\nu}^{(i)} \int d\vec{r}_1 \phi_{\mu}^*(1) \phi_{\nu}(1) \quad (3)$$

$$\mathbb{F}\vec{c}_i = \varepsilon_i \mathbb{S}\vec{c}_i \quad i = 1, 2, \dots, k \quad (4)$$

Uso de computadoras

Tareas a realizar

Millones de operaciones:

- Multiplicaciones
- Divisiones
- Integrales
- Álgebra lineal

Uso de computadoras

¿Cómo realizar tantas tareas?

- Saber química cuántica, saber programar y tener una computadora

Uso de computadoras

¿Cómo realizar tantas tareas?

- Saber química cuántica, saber programar y tener una computadora
- Saber química cuántica, tener una computadora y el software necesario

Uso de computadoras

¿Cómo realizar tantas tareas?

- Saber química cuántica, saber programar y tener una computadora
- Saber química cuántica, tener una computadora y el software necesario
- No saber química cuántica, tener una computadora y el software necesario (con ratón integrado)

Uso de computadoras

Partes de una computadora

Uso de computadoras

Partes de una computadora

- CPU
 - Procesador



Uso de computadoras

Partes de una computadora

- CPU
 - Procesador
 - Coprocesador



Uso de computadoras

Partes de una computadora

- CPU
 - Procesador
 - Coprocesador
 - Memoria RAM



Uso de computadoras

Partes de una computadora

- CPU
 - Procesador
 - Coprocesador
 - Memoria RAM
 - Memoria en disco duro



Uso de computadoras

Partes de una computadora

- CPU
 - Procesador
 - Coprocesador
 - Memoria RAM
 - Memoria en disco duro
- Monitor



Uso de computadoras

Partes de una computadora

- CPU
 - Procesador
 - Coprocesador
 - Memoria RAM
 - Memoria en disco duro
- Monitor
- Teclado



Uso de computadoras

Partes de una computadora

- CPU
 - Procesador
 - Coprocesador
 - Memoria RAM
 - Memoria en disco duro
- Monitor
- Teclado
- GPU



Uso de computadoras

Las supercomputadoras más poderosas del mundo



TOP 10 Sites for November 2012

For more information about the sites and systems in the list, click on the links or view the [complete list](#).

Rank	Site	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	Titan - Cray XK7 , Opteron 6274 16C 2.200GHz, Cray Gemini interconnect, NVIDIA K20x Cray Inc.	560640	17590.0	27112.5	8209
2	DOE/NNSA/LLNL United States	Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom IBM	1572864	16324.8	20132.7	7890
3	RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS) Japan	K computer , SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect Fujitsu	705024	10510.0	11280.4	12660
4	DOE/SC/Argonne National Laboratory United States	Mira - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60GHz, Custom IBM	786432	8162.4	10066.3	3945
5	Forschungszentrum Juelich (FZJ) Germany	JUQUEEN - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.600GHz, Custom Interconnect IBM	393216	4141.2	5033.2	1970
6	Leibniz Rechenzentrum Germany	SuperMUC - iDataPlex DX360M4, Xeon E5- 2680 8C 2.70GHz, Infiniband FDR IBM	147456	2897.0	3185.1	3423
7	Texas Advanced Computing Center/Univ. of Texas United States	Stampede - PowerEdge C8220, Xeon E5-2680 8C 2.700GHz, Infiniband FDR, Intel Xeon Phi Dell	204900	2660.3	3959.0	
8	National Supercomputing Center in Tianjin China	Tianhe-1A - NUDT YH MPP, Xeon X5670 8C 2.93 GHz, NVIDIA 2050 NUDT	186368	2566.0	4701.0	4040
9	CINECA Italy	Fermi - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60GHz, Custom IBM	163840	1725.5	2097.2	822
10	IBM Development Engineering United States	DARPA Trial Subset - Power 775, POWER7 8C 3.836GHz, Custom Interconnect IBM	63360	1515.0	1944.4	3576

Uso de computadoras

- ¿Quién tiene este tipo de computadoras?

Uso de computadoras

- ¿Quién tiene este tipo de computadoras?
 - Laboratorios de investigación

Uso de computadoras

- ¿Quién tiene este tipo de computadoras?
 - Laboratorios de investigación
 - Universidades

Uso de computadoras

- ¿Quién tiene este tipo de computadoras?
 - Laboratorios de investigación
 - Universidades
 - Empresas privadas

Uso de computadoras

- ¿Quién tiene este tipo de computadoras?
 - Laboratorios de investigación
 - Universidades
 - Empresas privadas

México y el TOP500

Uso de computadoras

- ¿Quién tiene este tipo de computadoras?
 - Laboratorios de investigación
 - Universidades
 - Empresas privadas

México y el TOP500

En 61 ocasiones ha aparecido en la lista desde 1993

<http://supercomputo.izt.uam.mx>

Uso de computadoras

- ¿Quién tiene este tipo de computadoras?
 - Laboratorios de investigación
 - Universidades
 - Empresas privadas

México y el TOP500

En 61 ocasiones ha aparecido en la lista desde 1993

<http://supercomputo.izt.uam.mx>

¿Es importante estar en la lista?

Uso de computadoras

Cómputo de Alto Rendimiento (HPC)

- Procesadores trabajando todo el tiempo
- Sistema disponible en cualquier momento
- Sistema operativo estable
- Trabajos con una larga duración
- Trabajos que requieren varios procesadores
- Muchas operaciones con enteros y números de punto flotante.

Cúmulos de servidores



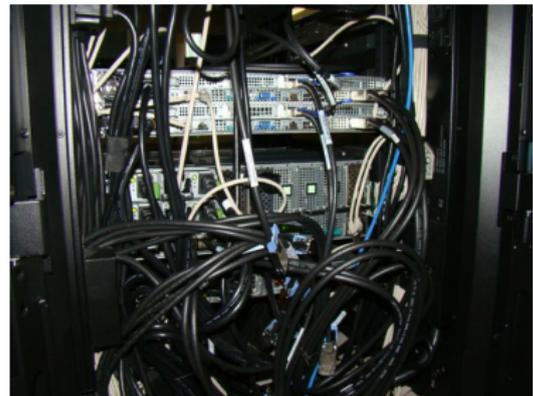
Cúmulos de servidores



Cúmulos de servidores



Cúmulos de servidores



Cúmulos de servidores

Tesla M2090 Announced

by Nadeem Mohammad, posted Mar 12 2012 at 02:37PM

NVIDIA unveiled the **Tesla M2090** GPU this week. Equipped with 512 CUDA parallel processing cores, it delivers 665 GigaFLOPS of peak double-precision performance and 178 GB/sec memory bandwidth. Systems with M2090 will be available imminently from OEMs and system builders, including Appro, ASUS, BULL, HP, IBM, NextIO, SGI, Supermicro and Tyan.

The **Tesla M2090** is already getting a lot of people excited, check out these postings and quotes:

NVIDIA Blog - HP Guest Blog From Ed Turkel Long Live Disruptive Technologies

"HP congratulates NVIDIA on the new M2090. We remain proud to work with a strategic and innovative partner and look forward to continued collaboration that will allow us to change the world. Long live disruptive technologies."



Conectividad en los cúmulos de servidores

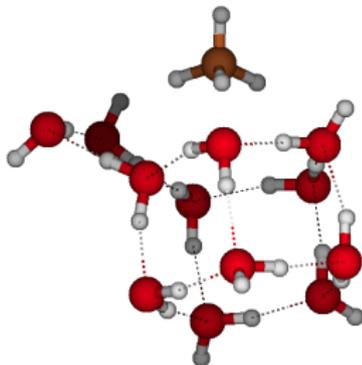
- TCP/IP
 - 10 Mbps
 - 100 Mbps
 - 1000 Mbps

Conectividad en los cúmulos de servidores

- TCP/IP
 - 10 Mbps
 - 100 Mbps
 - 1000 Mbps
- Mayor de 1000 Mbps
 - Giganet
 - Myrinet
 - Quadrics
 - Infiniband
 - Ten Giga

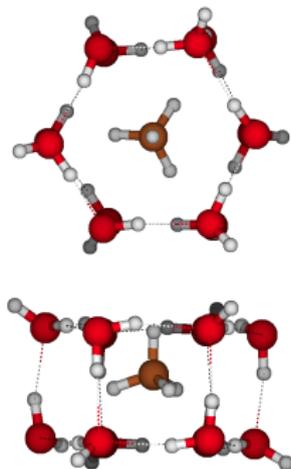
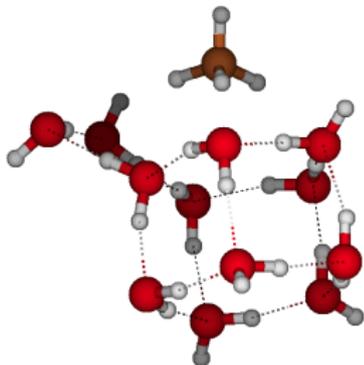
Ejemplos (Hartree-Fock)

Sistema con 12 moléculas de H_2O y una de CH_4



Ejemplos (Hartree-Fock)

Sistema con 12 moléculas de H_2O y una de CH_4



Colaboración con la U. de Antioquia (Dr. Albeiro Restrepo)

Ejemplos (Hartree-Fock)

Para este sistema usando la base 6-311++G**
se tienen 482 funciones de base

Ejemplos (Hartree-Fock)

Para este sistema usando la base 6-311++G**
se tienen 482 funciones de base

Por lo tanto se requieren de 3.266D+09 integrales bielectrónicas

Nos puede ayudar el chapulín colorado??

Ejemplos (Hartree-Fock)

Para este sistema usando la base 6-311++G**
se tienen 482 funciones de base

Por lo tanto se requieren de 3.266D+09 integrales bielectrónicas

Nos puede ayudar el chapulín colorado??

NO! Pero NWChem sí

Con 64 cores NWChem realiza un cálculo de Hartree-Fock para
nuestro sistema en **94 s**.

NWChem (<http://www.nwchem-sw.org>)



NWCHEM

HIGH-PERFORMANCE COMPUTATIONAL
CHEMISTRY SOFTWARE

[Main page](#) [Science](#) [Benchmarks](#) [Download Code](#) [Documentation](#) [News](#) [Community](#) [Developers](#)

[Page](#) [View source](#)

modified on 26 June 2012 at 10:58 --- 4,553,285 views

NWChem: Delivering High-Performance Computational Chemistry to Science

NWChem aims to provide its users with computational chemistry tools that are scalable both in their ability to treat large scientific computational chemistry problems efficiently, and in their use of available parallel computing resources from high-performance parallel supercomputers to conventional workstation clusters.

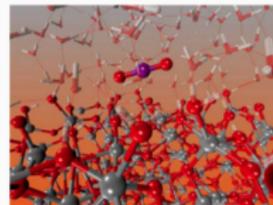
NWChem software can handle

- ▶ Biomolecules, nanostructures, and solid-state
- ▶ From quantum to classical, and all combinations
- ▶ Gaussian basis functions or plane-waves
- ▶ Scaling from one to thousands of processors
- ▶ Properties and relativity

NWChem is actively developed by a consortium of developers and maintained by the [EMSL](#) located at the Pacific Northwest National Laboratory ([PNNL](#)) in Washington State. Researchers interested in contributing to NWChem should review the [Developers page](#). The code is distributed as open-source under the terms of the [Educational Community License version 2.0](#) (ECL 2.0).

The current version of NWChem is version 6.1.1 can be [downloaded here](#).

The [NWChem development strategy](#) is focused on providing new and essential scientific capabilities to its users in the areas of kinetics and dynamics of chemical transformations, chemistry at interfaces and in the condensed phase, and enabling innovative and integrated research at EMSL. At the same time continued development is needed to enable NWChem to effectively utilize architectures of tens of petaflops and beyond.



NWChem (<http://www.nwchem-sw.org>)

CITATION

Please cite the following reference when publishing
results obtained with NWChem:

M. Valiev, E.J. Bylaska, N. Govind, K. Kowalski,
T.P. Straatsma, H.J.J. van Dam, D. Wang, J. Nieplocha,
E. Apra, T.L. Windus, W.A. de Jong
"NWChem: a comprehensive and scalable open-source
solution for large scale molecular simulations"
Comput. Phys. Commun. 181, 1477 (2010)
doi:10.1016/j.cpc.2010.04.018

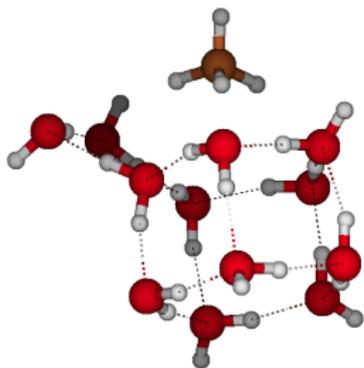
AUTHORS & CONTRIBUTORS

E. J. Bylaska, W. A. de Jong, N. Govind, K. Kowalski, T. P. Straatsma,
M. Valiev, H. J. J. van Dam, D. Wang, E. Apra, T. L. Windus, J. Hammond,
J. Autschbach, F. Aquino, J. Mullin, P. Nichols, S. Hirata, M. T. Hackler,
Y. Zhao, P.-D. Fan, R. J. Harrison, M. Dupuis, D. M. A. Smith, K. Glaesemann,
J. Nieplocha, V. Tipparaju, M. Krishnan, A. Vazquez-Mayagoitia, L. Jensen,
M. Swart, Q. Wu, T. Van Voorhis, A. A. Auer, M. Nooijen, L. D. Crosby,
E. Brown, G. Cisneros, G. I. Fann, H. Fruchtl, J. Garza, K. Hirao,
R. Kendall, J. A. Nichols, K. Tsemekhman, K. Wolinski, J. Anchell,
D. Bernholdt, P. Borowski, T. Clark, D. Clerc, H. Dachsel, M. Deegan,
K. Dylla, D. Elwood, E. Glendening, M. Gutowski, A. Hess, J. Jaffe,
B. Johnson, J. Ju, R. Kobayashi, R. Kutteh, Z. Lin, R. Littlefield,
X. Long, B. Meng, T. Nakajima, S. Niu, L. Pollack, M. Rosing, G. Sandrone,
M. Stave, H. Taylor, G. Thomas, J. H. van Lenthe, A. Wong, Z. Zhang.

Ejemplos (MP2)

Siguiendo con nuestro ejemplo de clatratos

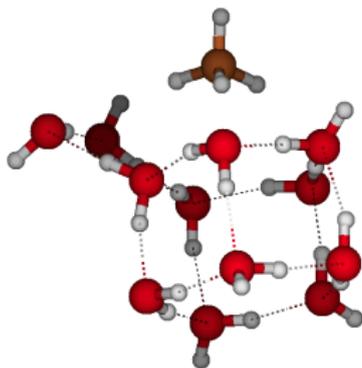
Sistema con 12 moléculas de
 H_2O y una de CH_4



Ejemplos (MP2)

Siguiendo con nuestro ejemplo de clatratos

Sistema con 12 moléculas de
 H_2O y una de CH_4



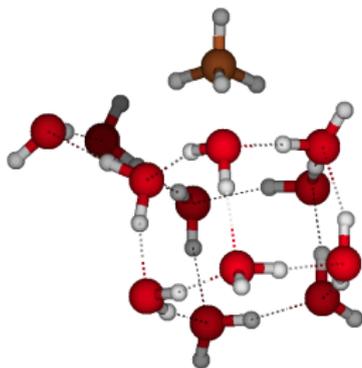
482 funciones de base
con 3.266D+09 integrales
bielectrónicas

Evaluación de energía
con gradiente en NWChem con
64 cores:

Ejemplos (MP2)

Siguiendo con nuestro ejemplo de clatratos

Sistema con 12 moléculas de
 H_2O y una de CH_4



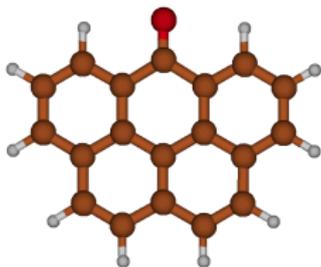
482 funciones de base
con 3.266D+09 integrales
bielectrónicas

Evaluación de energía
con gradiente en NWChem con
64 cores:

5800 s

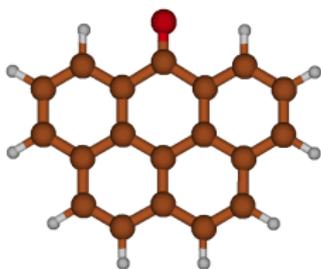
Ejemplos (CC)

Dr. Juan Espinal
(U. de Antioquia)



Ejemplos (CC)

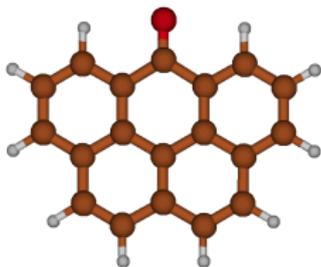
Dr. Juan Espinal
(U. de Antioquia)



CCSD(T)/6-311G**
Evaluación de energía en
NWChem con 480 cores:

Ejemplos (CC)

Dr. Juan Espinal
(U. de Antioquia)

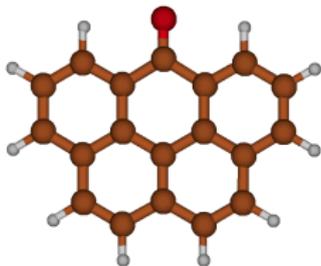


CCSD(T)/6-311G**
Evaluación de energía en
NWChem con 480 cores:

39528 s

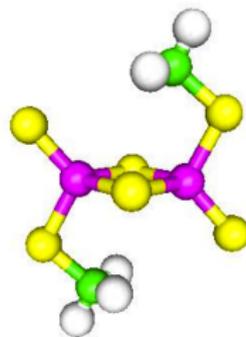
Ejemplos (CC)

Dr. Juan Espinal
(U. de Antioquia)



CCSD(T)/6-311G**
Evaluación de energía en
NWChem con 480 cores:

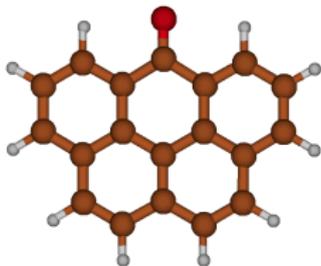
39528 s



CCSD(T)/aug-cc-pVTZ
Evaluación de energía en
NWChem con 800 cores:

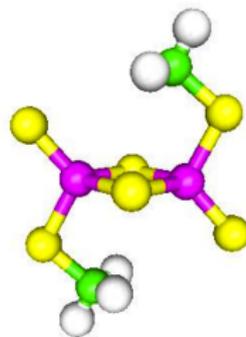
Ejemplos (CC)

Dr. Juan Espinal
(U. de Antioquia)



CCSD(T)/6-311G**
Evaluación de energía en
NWChem con 480 cores:

39528 s

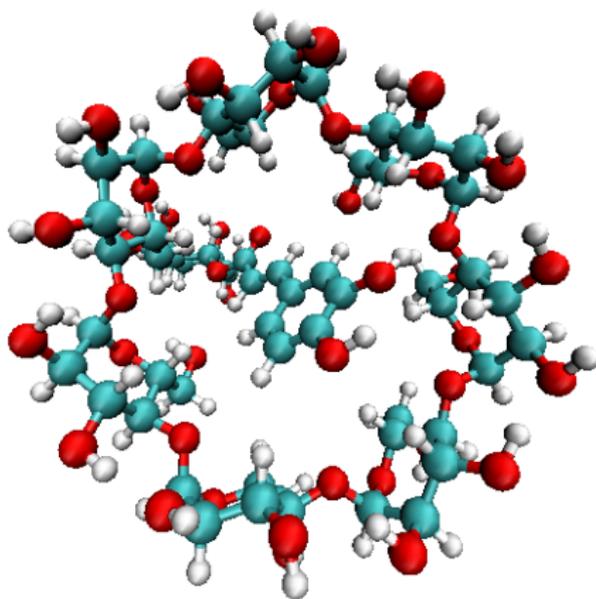


CCSD(T)/aug-cc-pVTZ
Evaluación de energía en
NWChem con 800 cores:

7300 s

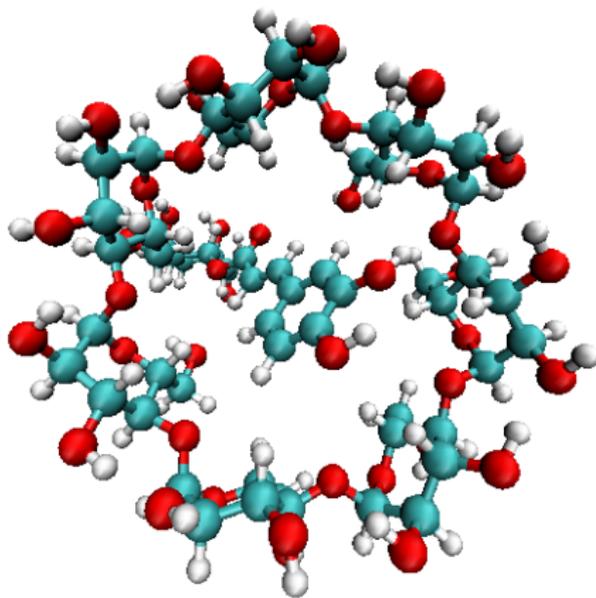
Uso de GPUs

Servidor con 32 cores y 4 tarjetas gráficas NVIDIA M2090



Uso de GPUs

Servidor con 32 cores y 4 tarjetas gráficas NVIDIA M2090

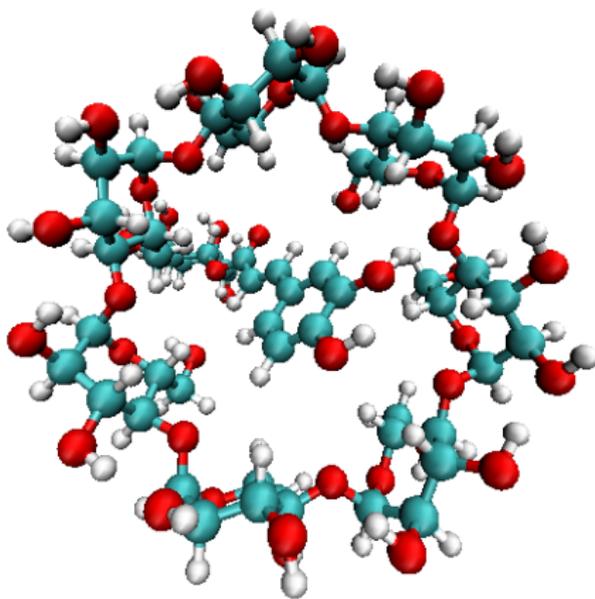


PBE0/6-31++G**
2466 funciones de
base

Evaluación de
energía y gradiente
en Terachem:

Uso de GPUs

Servidor con 32 cores y 4 tarjetas gráficas NVIDIA M2090



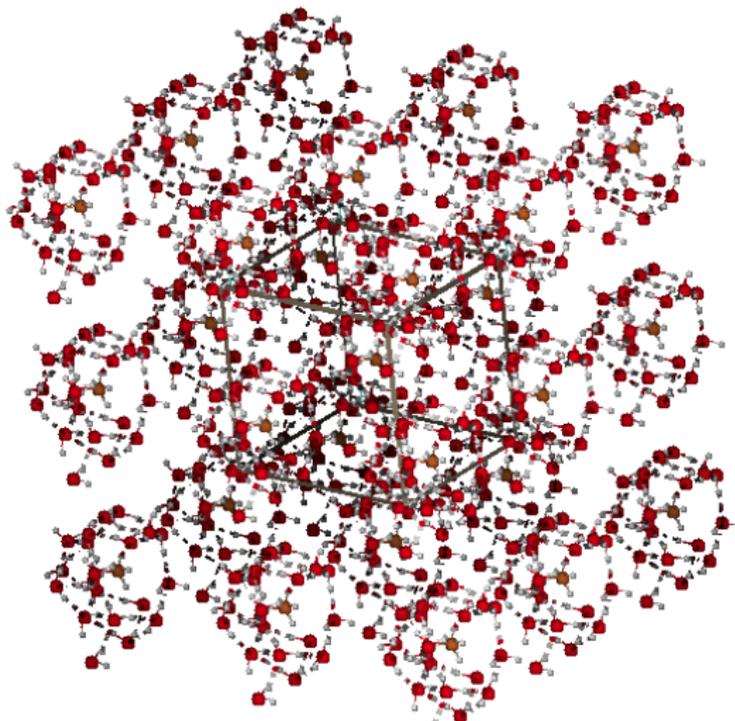
PBE0/6-31++G**
2466 funciones de
base

Evaluación de
energía y gradiente
en Terachem:

2500 s

Uso de GPUs

Servidor con 32 cores y 4 tarjetas gráficas NVIDIA M2090



Uso de GPUs

Átomos confinados (Dra. Doris Guerra. U. de Antioquia)

Uso de GPUs

Átomos confinados (Dra. Doris Guerra. U. de Antioquia)
El propagador del electrón aplicado en átomos confinados.

$$\begin{aligned}\omega_k = \epsilon_k + & \sum_{a=ocup+1}^{\infty} \sum_{i=1}^{ocup} \sum_{j>i}^{ocup} \frac{|\langle ka || ij \rangle|^2}{\omega_k + \epsilon_a - \epsilon_i - \epsilon_j} \\ & + \sum_{i=1}^{ocup} \sum_{a=ocup+1}^{\infty} \sum_{b>a}^{\infty} \frac{|\langle ki || ab \rangle|^2}{\omega_k + \epsilon_i - \epsilon_a - \epsilon_b}\end{aligned}\quad (5)$$

$$(ar | bs) = \sum_{\mu, \nu, \sigma, \lambda=1}^k c_{\mu}^{(a)} c_{\nu}^{(r)} c_{\sigma}^{(b)} c_{\lambda}^{(s)} \iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \frac{\phi_{\mu}(1) \phi_{\nu}(1) \phi_{\sigma}(2) \phi_{\lambda}(2)}{|r_1 - r_2|}\quad (6)$$

Uso de GPUs

Para un término de la ecuación 5

Número de transformaciones : 480

Uso de GPUs

Para un término de la ecuación 5

Número de transformaciones : 480

CPU: 330 s (688 ms)

Uso de GPUs

Para un término de la ecuación 5

Número de transformaciones : 480

CPU: 330 s (688 ms)

GPU: 004 s (008 ms)

Para pensar

- ¿Es importante contar con un laboratorio de supercómputo?

Para pensar

- ¿Es importante contar con un laboratorio de supercómputo?
- ¿Qué se debe de tener para contar con un laboratorio de supercómputo?

Para pensar

- ¿Es importante contar con un laboratorio de supercómputo?
- ¿Qué se debe de tener para contar con un laboratorio de supercómputo?
- Generar código que use eficientemente el cómputo en paralelo nos da independencia

Para pensar

- ¿Es importante contar con un laboratorio de supercómputo?
- ¿Qué se debe de tener para contar con un laboratorio de supercómputo?
- Generar código que use eficientemente el cómputo en paralelo nos da independencia
- Permear nuevas técnicas de programación a generaciones venideras es importante

Colaboradores y agradecimientos



Colaboradores y agradecimientos



Colaboradores y agradecimientos



Colaboradores y agradecimientos



CONACYT: Proyecto 155070

www.fqt.izt.uam.mx