Pontifícia Universidade Católica
do Rio de Janeiro

Cleomar Pereira da Silva

Computação de Alto Desempenho com Placas Gráficas para Acelerar o Processamento da Teoria do Funcional da Densidade

Dissertação de Mestrado

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-graduação em Engenharia Elétrica do Departamento de Engenharia Elétrica da PUC-Rio.

Orientador: Prof. Marco Aurélio Cavalcanti Pacheco

Rio de Janeiro

Abril de 2010

PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA
DO RIO DE JANEIRO

Cleomar Pereira da Silva

Computação de Alto Desempenho com Placas Gráficas para Acelerar o Processamento da Teoria do Funcional da Densidade

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica do Departamento de Engenharia Elétrica do Centro Técnico Científico da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Marco Aurélio Cavalcanti Pacheco
Orientador
Departamento de Engenharia Elétrica – PUC-Rio

Prof. Omar Paranaina Vilela Neto
Departamento de Engenharia Elétrica – PUC-Rio

Profa. Cristiana Bentes
UERJ

Prof. Ricardo Cordeiro de Farias
UFRJ

Prof. José Eugenio Leal
Coordenador Setorial do Centro
Técnico Científico – PUC-Rio

Rio de Janeiro, 13 de abril de 2010

Cleomar Pereira da Silva

Graduado Engenheiro Eletricista pela Universidade Federal de Santa Maria (UFSM) em 2008. Mestrado em Engenharia Elétrica, área de concentração Nanotecnologia, pela Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (PUC-Rio) em 2010.

Ficha Catalográfica

Silva, Cleomar Pereira da

Computação de alto desempenho com placas gráficas para acelerar o processamento da teoria do funcional da densidade / Cleomar Pereira da Silva ; orientador: Marco Aurélio Cavalcanti Pacheco. – 2010.

87 f. ; 30 cm

Dissertação (mestrado)–Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Elétrica, 2010.

Inclui bibliografia

1. Engenharia elétrica – Teses. 2. Teoria do funcional de densidade. 3. SIESTA. 4. Computação de alto desempenho. 5. GPGPU. 6. CUDA. I. Pacheco, Marco Aurélio Cavalcanti. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Elétrica. III. Título.

CDD: 621.3

Aos Meus Pais Antonio Coraci e Maria Rosa.

Agradecimentos

À CAPES e à PUC-Rio pela concessão da bolsa e dos auxílios que tornaram possível a realização deste trabalho.

Ao meu orientador, Dr. Marco Aurélio Cavalcanti Pacheco, pelo imediato atendimento das solicitações realizadas durante o período do estudo.

À professora Dra. Marley M. B. R. Vellasco pelos conhecimentos transferidos através das disciplinas que ministrou.

Aos demais professores pelos ensinamentos.

Ao Dr. Omar Paranaiba V. Neto pela participação na elaboração das idéias envolvidas com o tema desta dissertação.

Aos amigos Douglas M. Dias, Leandro F. Cupertino, Iury S. O. Bezerra, Daniel S. Chevitarese, Dr. Juan L. Lazo e Dr. Renato B. Oliveira, pelo apoio e auxilio prestados no desenvolvimento deste trabalho.

Aos meus pais, pela educação, atenção e carinho.

Aos amigos do ICA por seu contínuo apoio e colaboração.

Resumo

Silva, Cleomar Pereira; Pacheco, Marco Aurélio Cavalcanti (Orientador). **Computação de Alto Desempenho com Placas Gráficas para Acelerar o Processamento da Teoria do Funcional da Densidade**. Rio de Janeiro, 2010. 87p. Dissertação de Mestrado - Departamento de Engenharia Elétrica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

As Unidades de Processamento Gráfico (GPUs), ou Placas Gráficas, são processadores que foram originalmente projetados para executar tarefas dedicadas às operações da computação gráfica. Porém, a NVIDIA desenvolveu uma extensão da linguagem C para programação de GPUs, chamada CUDA (*Compute Unified Device Architecture*). Isto permitiu utilizá-las, na Computação de Alto Desempenho, para processar dados genéricos. Já os sistemas físicos estudados pela Mecânica Quântica apresentam dimensões próximas da escala atômica, tais como moléculas, átomos, prótons e elétrons. A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) é um dos métodos iterativos mais usados para encontrar uma solução aproximada para a equação de Schrödinger. Contudo, os cálculos realizados em DFT são computacionalmente intensos devido às integrais de troca e correlação eletrônica, integrais para o cálculo da energia de Hartree e energia cinética dos elétrons, as quais requerem maior esforço computacional à medida que o número de elétrons presentes na simulação aumenta. Esta pesquisa teve como objetivo estudar os cálculos do DFT e identificar partes do algoritmo que, se alteradas, apresentassem benefícios de desempenho ao serem executadas em GPU. Assim, funções computacionalmente intensas do método DFT do SIESTA (*Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms*) foram paralelizadas e usadas para calcular propriedades físicas de nanotubos e fulerenos. Verificou-se que a execução da versão paralela do SIESTA para GPU é capaz de atingir ganhos em desempenho, em funções individuais, de uma ou até duas ordens de grandeza, tornando promissor o emprego de GPUs em acelerar o processamento da Teoria do Funcional da Densidade.

Palavras-chave

Teoria do Funcional da Densidade; SIESTA; Computação de Alto Desempenho; GPGPU; CUDA.

Abstract

Silva, Cleomar Pereira; Pacheco, Marco Aurélio Cavalcanti (Advisor). **High Performance Computing with Graphics Cards to Accelerate Processing Density Functional Theory**. Rio de Janeiro, 2010. 87p. MSc. Dissertation - Departamento de Engenharia Elétrica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

The graphics processing units (GPUs), or graphics cards, are processors that were originally designed to perform dedicated tasks to the computer graphics operations. However, NVIDIA has developed an extension of the C language for programming GPUs, called CUDA (Compute Unified Device Architecture). This allowed the use of GPUs, in High Performance Computing, for processing generic data. The physical systems studied by quantum mechanics have dimensions close to atomic scale, such as molecules, atoms, protons and electrons. The Density Functional Theory (DFT) is one of the most used interactive methods to find an approximated solution to the Schrödinger equation. However, the calculations in DFT are computationally intensive because of the exchange and correlation electronic integrals, integrals to calculate the Hartree energy and electrons kinetic energy, which requires greater computational effort as the number of electrons present in the simulation increases. This research aimed to study the DFT calculations and identify parts of the algorithm that, if changed, experience performance benefits from execution in GPU. Thus, computationally intensive DFT functions of the SIESTA method (Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms) were parallelized and used to calculate the physical properties of nanotubes and fullerenes. It was found that the implementation of SIESTA parallel version on the GPU is able to achieve gains in performance, in individual functions, of one or even two orders of magnitude, making it promising employment of GPUs to speed up the processing of Density Functional Theory.

Keywords

Density Functional Theory; SIESTA; High Performance Computing; GPGPU; CUDA.

Sumário

Lista de Figuras

Lista de Tabelas