

AFSTUDEEROPDRACHT

Versnellen van Computational Quantum Chemistry softwarepakket ADF m.b.v. GPU's

Achtergrond

Computational Chemistry houdt zich bezig met het voorspellen en begrijpen van chemische processen, zoals reacties, op de computer. Het programma ADF (Amsterdam Density Functional) richt zich hierbinnen op de quantummechanische beschrijving van moleculen. De berekeningen met ADF aan grote moleculen zijn erg tijdrovend en worden typisch op Linux clusters of supercomputers bij rekencentra uitgevoerd en kunnen dan nog dagen in beslag nemen. Er is toenemende interesse binnen ons vakgebied voor het gebruik van GPU's voor het versnellen van de berekeningen, zodat gebruikers op hun desktop simulaties zullen kunnen uitvoeren waarvoor nu nog supercomputers nodig zijn. SCM volgt deze ontwikkelingen op de voet en wil nu (laten) onderzoeken in hoeverre GPU's voor onze software gebruikt kunnen worden. ADF video op YouTube: <http://www.scm.com/Videos/Welcome.html>

Opdrachtomschrijving

Haalbaarheidsstudie naar versnellen van modules in ADF mbv GPU's. Het ADF programma bevat meerdere modules, met verschillende soorten bottlenecks in rekentijd, die vaak terug te voeren zijn op een bepaalde standaard lineaire algebra taak. De meest rekenintensieve delen, bijvoorbeeld numerieke integratie, van het programma zijn geïsoleerd in een los klein programma dat eenvoudig voor allerlei tests gebruikt kan worden zonder diepgaande kennis van ADF zelf. ADF is een Fortran90 programma dat reeds is gevectoriseerd en geparalleliseerd. ADF maakt gebruik van performance libraries zoals BLAS en LAPACK, en is goed gestructureerd. De taak voor de student is om de algorithmes van de meeste rekenintensieve delen van de code dusdanig aan te passen dat een aanzienlijke versnelling kan worden bereikt door het gebruik van GPU's. In eerste instantie in vergelijking met serieel gebruik op een CPU, later mogelijk in combinatie met gebruik van meerdere CPU cores).

Stagebedrijf

Scientific Computing & Modelling NV (SCM, www.scm.com) is een spin-off bedrijf van de VU, gevestigd in het VU-gebouw en goed bereikbaar met OV (station Amsterdam-Zuid). Bij SCM werken zes ervaren gepromoveerde chemici en fysici, waarvan één gespecialiseerd is in het versnellen van code en als begeleider zal optreden. De software van SCM wordt wereldwijd gebruikt om eigenschappen van materialen te voorspellen. De opdracht hoeft slechts ten dele in Amsterdam te worden uitgevoerd.

Meer informatie

Voor meer informatie kun je contact opnemen met Dr. Stan van Gisbergen, directeur van SCM (vangisbergen@scm.com, 020-5987626). Diverse vormen en lengtes van de opdracht zijn bespreekbaar.