

# UJI PERFORMANSI APLIKASI QUANTUM ESPRESSO PADA CLUSTER SEDERHANA DENGAN VARIASI JUMLAH PROSESOR DAN NODE DENGAN openMP

Enggar Alfianto  
Jurusan Sistem Komputer, Institut Teknologi Adhi Tama Surabaya  
Email: enggar@itats.ac.id

## ABSTRAK

Penelitian *in silico* dewasa ini kian digemari pada bidang sains dan teknik. *In silico* menawarkan beberapa kelebihan jika dibandingkan dengan riset eksperimen. Model penelitian yang memanfaatkan simulasi komputer banyak dimanfaatkan untuk menghitung system kompleks. Dalam penelitian ini digunakan aplikasi Quantum Espresso 5.0.2 untuk menghitung *Au surface*. *Au surface* merupakan sistem standar untuk menghitung performansi Quantum Espresso. Pada saat melakukan perhitungan dilakukan dengan memvariasikan jumlah prosesor yang digunakan. Dilanjutkan dengan variasi prosesor pada node yang berbeda. Tujuan variasi adalah untuk memperoleh hasil kecepatan perhitungan yang optimal. Dari beberapa perhitungan diperoleh hasil percepatan perhitungan paling tinggi adalah 83,8% jika dibandingkan antara prosesor tunggal dengan dua prosesor. Hasil tak lebih dari 10% untuk penambahan prosesor diatas 2 buah jika dibandingkan dengan penambahan pertama.

**Kata Kunci:** Klaster Komputer, Quantum Espresso, open MP, DFT.

## ABSTRACT

*A study about in silico system was very vogue in science and engineering fields. In silico offers many excesses considered to direct experiment research. The modelling that utilized computer simulation is used to calculate complex system. In this study, Quantum espresso 5.0.2 is being used for Au Surface calculation. Au surface is standard system to calculate Quantum Espresso performance. When calculation executed, a number of processor which is used was varied. And then detailed with processor variation in different node. The objective of this variation is to get an optimal calculation speed. The result of some calculations show that the highest speed of it is 83,8%, getting from comparing one and double processors. Furthermore, The speed result is less than 10% for adding many processors.*

**Keywords:** Cluster Computer, Quantum Espresso, OpenMP DFT.

## PENDAHULUAN

Metode penelitian *in silico* adalah penelitian yang dilakukan didalam komputer. Artinya untuk melakukan suatu pengujian, diwakili dengan pemodelan dan simulasi yang dihitung secara numerik. Sehingga untuk mendisain suatu material cerdas, peneliti mampu memprediksi dengan akurat apa yang terjadi dengan disainnya sebelum material itu benar-benar diciptakan.

Dengan *in silico* dapat menghemat pengeluaran karena sebelum melakukan eksperimen, sudah dapat dipertimbangkan tingkat keberhasilannya. Misalkan untuk membuat sel surya, kita dapat mencoba memasukkan berbagai macam bahan yang digunakan dye, namun bahan apa yang dapat mengeluarkan energi listrik paling banyak? Apabila kita melakukan uji coba tiap zat, selain begitu lama, juga ada resiko kegagalan dalam melakukan eksperimen.

Jika sebelum eksperimen sudah dilakukan simulasi komputer, niscaya kegagalan tersebut dapat ditekan. Sehingga penelitian menjadi lebih akurat, terarah dan murah. Ada banyak metode yang sudah diciptakan untuk melakukan penelitian dengan simulasi computer ini. Di antaranya adalah *Density Functional Theory* (DFT), *Molecular Dynamic* (MD) dan Quantum Motecarlo.

Salah satu aplikasi yang banyak dipakai untuk menghitung material dengan DFT adalah Quantum Espresso (QE). QE merupakan aplikasi bebas pakai yang berlisensi *Open Source*. Selain *Open Source* aplikasi ini juga banyak didukung oleh beberapa ilmuwan dan laboratorium komputasi.

Untuk memudahkan pemakai, tersedia beberapa forum yang khusus membahas tentang QE yang mana anggota forum dapat membantu dengan baik[1].

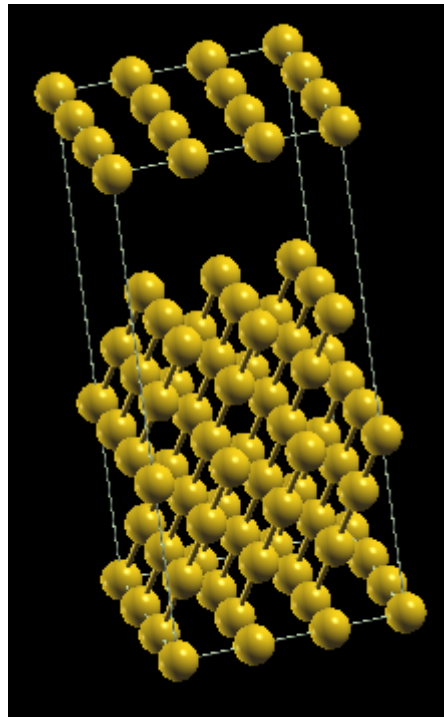
Quantum espresso adalah aplikasi *Open Source* untuk menghitung struktur elektronik dan model material yang berdasarkan pada metode DFT, gelombang bidang, dan *pseudopotensial*. QE merupakan aplikasi yang dibangun oleh kerjasama beberapa institusi yang bergabung dalam Quantum Espresso foundation yang saat ini di monitor oleh ICTP Trieste Italia[10].

Untuk menjalankan QE agar dapat digunakan untuk menghitung system material dengan spesifikasi besar, dibutuhkan piranti computer yang tinggi. Sehingga dalam penelitian ini digunakan klaster computer dengan menggabungkan 3 buah komputer berprosesor total 12. Jenis prosesor yang digunakan adalah AMD Phenom X6 1090T[9]. Dari tiga buah komputer, 1 berfungsi sebagai computer master dan 2 berfungsi sebagai computer penghitung.

Penelitian ini bertujuan untuk mencari nilai optimum antara kecepatan perhitungan dengan jumlah prosesor yang digunakan. Selain daripada itu juga ingin diketahui dampak apabila menggunakan dua buah komputer berbeda dengan MPI untuk menghitung system yang sama.

## METODE PENELITIAN

Pada penelitian ini digunakan sistem emas berbentuk kristal yang biasa digunakan untuk melakukan uji kinerja pada aplikasi Quantum Espresso. Struktur emas dalam bentuk kristal ditunjukkan pada Gambar 1

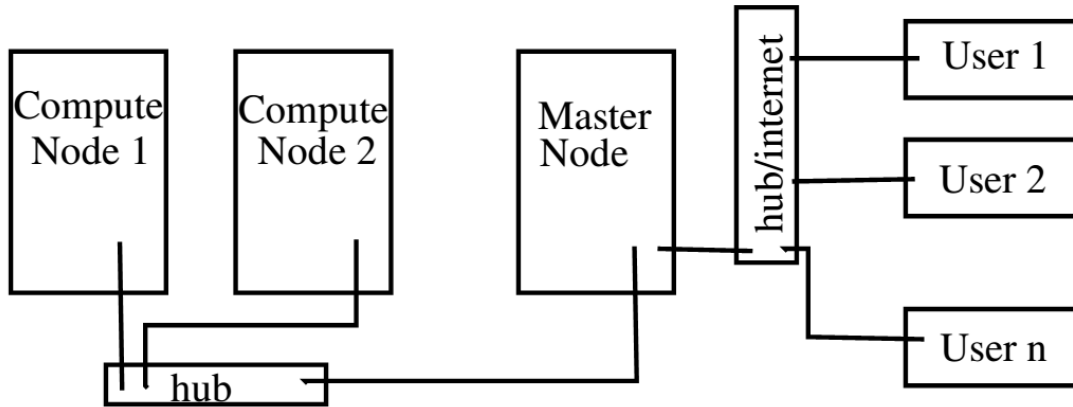


**Gambar 1 Struktur atom emas**

Proses perhitungan menggunakan metode DFT yang disimulasikan dalam aplikasi Quantum Espresso. Pada saat melakukan perhitungan, dilakukan perubahan variasi terhadap jumlah prosesor dan jumlah node yang digunakan. Kemudian dicari nilai optimum kecepatan yang diperoleh dengan jumlah prosesor yang digunakan.

## TINJAUAN PUSTAKA

Untuk melaksanakan uji kecepatan perhitungan digunakan komputer klaster. Komputer klaster tersebut terdiri dari terdiri dari 3 buah PC dengan prosesor seragam yaitu "AMD Phenom II X6 1090T". Ketiga PC tersebut dihubungkan dengan jaringan ethernet LAN berkecepatan tinggi. Topologi jaringan yang digunakan untuk membangun klaster ditunjukkan pada Gambar 2. Keuntungan menggunakan topologi tersebut adalah dapat dimanfaatkan oleh banyak pengguna.



**Gambar 2. Topologi klaster**

Tiap prosesor memiliki kecepatan proses maksimal adalah 800.000 MHZ, pada arsitektur komputer 64 bit. Masing-masing CPU didukung dengan RAM berkapasitas 4GB dengan ukuran cache 512 KB.

Untuk mendukung komunikasi data di dalam klaster digunakan Network File System (NFS). NFS dibutuhkan karena adanya komunikasi dua arah antara PC Master dan PC Nodes. Sehingga tiap komputer harus dapat diakses oleh komputer master saat itu juga (real time)[2]. NFS berfungsi untuk mengatur sharing file antar PC.

Sebagai pengatur kerja prosesor paralel digunakan openMPI [1]. OpenMPI adalah software Open Source yang berfungsi untuk membagi pekerjaan perhitungan sehingga dapat dikerjakan oleh beberapa prosesor sekaligus. Sehingga dengan openMPI ini, dimungkinkan pekerjaan perhitungan diselesaikan secara lebih cepat karena menggunakan lebih dari sebuah prosesor.

Karena bekerja dengan banyak komputer, dibutuhkan aplikasi yang dapat mengatur distribusi Sebagai pengatur kerja prosesor paralel digunakan openMPI [8]. OpenMPI adalah software Open Source yang berfungsi untuk membagi pekerjaan perhitungan sehingga dapat dikerjakan oleh beberapa prosesor sekaligus. Sehingga dengan openMPI ini, dimungkinkan pekerjaan perhitungan diselesaikan secara lebih cepat karena menggunakan lebih dari sebuah prosesor. Karena bekerja dengan banyak komputer, dibutuhkan aplikasi yang dapat mengatur distribusi data. Untuk memenuhi kebutuhan tersebut digunakan Torque dari Adaptive Computing (Sebuah perusahaan pembangun aplikasi HPC)[4]. Penggunaan aplikasi ini untuk memastikan bahwa tidak ada lalu lintas data yang nantinya tumpang tindih sehingga menimbulkan bottleneck pada proses perhitungan.

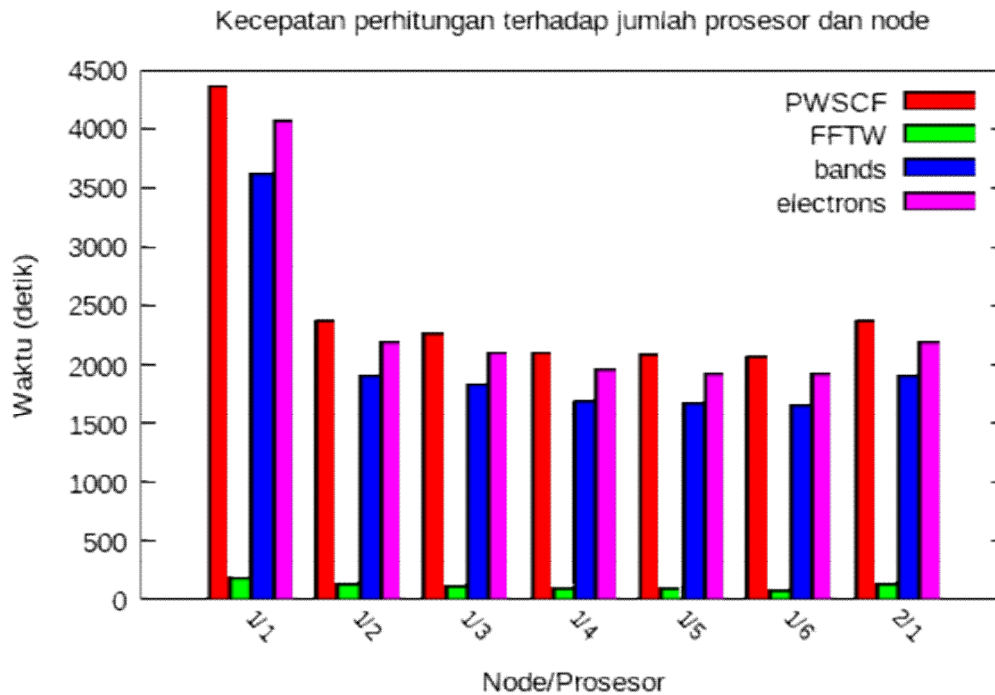
Biasanya klaster digunakan oleh lebih dari seorang pamakai dan tiap pamakai akan melakukan perhitungan lebih dari satu kasus. Sedangkan jumlah prosesor yang tersedia terbatas. Sehingga perlu adanya pengaturan jadwal perhitungan. Pengaturan ini bersifat seperti sistem antrian. Jika prosesor masih melayani perhitungan lain, maka sistem perhitungan masuk ke daftar antrian. Jika prosesor sudah kosong, maka perhitungan segera dilakukan. Aplikasi untuk mengatur antrian yang kami gunakan adalah MAUI[11].

## HASIL DAN PEMBAHASAN

Penelitian tersebut dimulai dengan perhitungan sistem emas yang dihitung menggunakan Quantum espresso dengan jumlah prosesor awal adalah satu pada 1 node. Kemudian dilakukan pencatatan untuk mendapatkan waktu hitung.

Dengan system yang sama, perhitungan dilanjutkan dengan menggunakan 2 buah prosesor dengan 1 node. Pada langkah ini diperoleh grafik waktu hitung terhadap jumlah prosesor ditunjukkan pada.

Gambar 3.



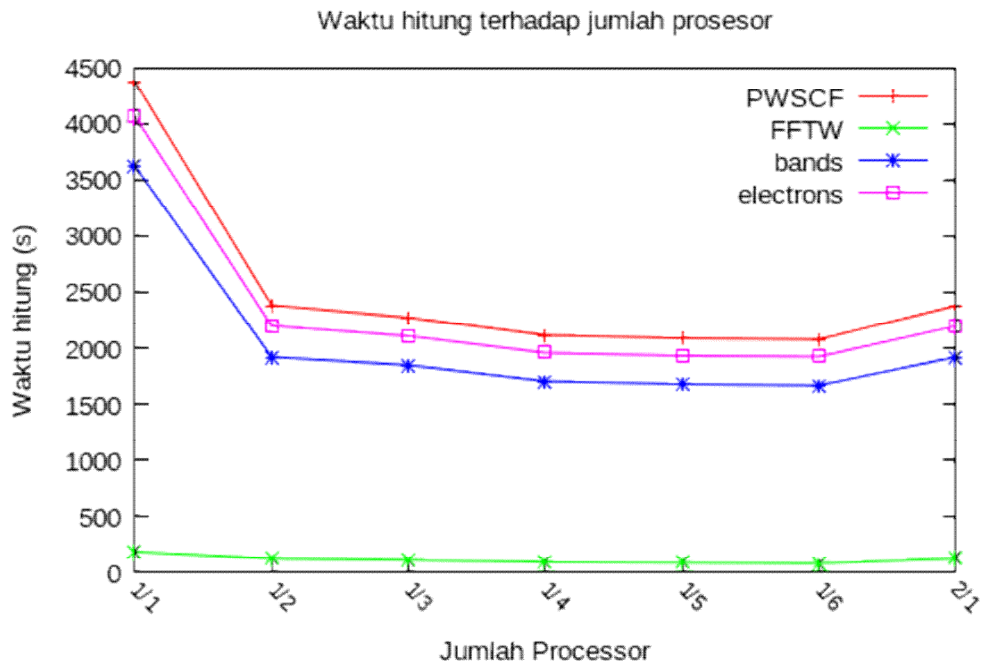
**Gambar 3 Variasi perhitungan yang menunjukkan perbedaan kecepatan berbanding lurus dengan jumlah prosesor**

Gambar 3 Menunjukkan adanya beberapa proses perhitungan yang dilakukan dengan metode DFT. Grafik warna merah menunjukkan proses perhitungan PWSCF. Pada proses tersebut memakan waktu paling lama jika dibandingkan dengan ketiga proses lain.

Dalam proses PWSCF digunakan algoritma optimasi yang memang memakan waktu lama. Saat menggunakan sebuah prosesor proses perhitungan hampir memakan waktu 1 jam 13 menit. Atau sekitar 4450 detik.

Tahap perhitungan kedua digunakan 2 prosesor dalam 1 node, diperoleh hasil percepatan perhitungan sebesar 100%. Terlihat pada saat menggunakan dua prosesor, perhitungan dapat diselesaikan dalam waktu 2400 detik. Atau hanya 39 menit 43 detik. Perubahan kecepatan juga dialami oleh dua proses lain yakni perhitungan bands dan energy electron.

Pada Gambar 4 diperoleh hasil bahwa menambahkan jumlah prosesor tidak memiliki dampak linier terhadap percepatan yang diberikan. Sehingga dapat diasumsikan bahwa ada nilai optimum antara penambahan prosesor dengan percepatan. Dalam penelitian ini nilai optimum adalah pada saat digunakan jumlah prosesor 2. Baik pada 1 node ataupun 2 node. Percepatan yang diperoleh sebesar 83.8%. Untuk penambahan berikutnya presentase percepatan yang diperoleh tidak lebih dari 10%. Hasil ini sesuai dengan hukum Amdahl yang mengatakan bahwa percepatan kalkulasi pada computer parallel memiliki batasan, dan tidak berlaku linier dengan jumlah prosesor.



**Gambar 4. Hubungan antara percepatan hitung yang tidak linier terhadap jumlah prosesor yang terus ditambah**

## KESIMPULAN

Dari penelitian ini dapat disimpulkan bahwa percepatan perhitungan dapat dilakukan dengan menambahkan jumlah prosesor yang digunakan untuk menghitung. Penambahan dilakukan dengan cara memparalelkan prosesor yang digunakan untuk menghitung. Namun penambahan prosesor tidak linier dengan penambahan percepatan hitung. Nilai maksimum adalah ketika ditambahkan dari 1 prosesor menjadi prosesor dengan percepatan 83.8% dan penambahan berikutnya tak lebih dari 10% percepatan yang dihasilkan.

## REFERENSI

- [1] **P. Gianozzi, S. Baroni, M. Calandra** "Quantum Espresso: a modular and open-source Software project for quantum simulation of materials" J. Phys: condense. Matter 21,395502 (2009) .
- [2] **P. Stazdins, J. Uhlmann** "A comparison of local and gang scheduling on a Beowulf cluster" in Cluster computing, 2004, IEEE International conference ISBN : 0-7803-8694-9, PP. 55-62
- [3] **A. Plaza, D. Valencia, J. Plaza, P. Martinez,** "Commodity cluster-based parallel processing of hyperspectral imagery", in Journal of Parallel and Distributed Computing, 2006, vol 66, page 345-356.
- [4] **M. Choi, DW. Lee,** **Cluster computing environment supporting single system image, in Cluster Computing, 2004** IEEE International Conference ISBN : 0-7803-8694-9, PP. 235-243
- [5] **A. Fava, E. Fava, M. Bertozzi,** **MPIPOV: A Parallel Implementation of POV-Ray Based on MPI,** in Recent Advances in Parallel Virtual Machine and Message Passing Interface Lecture Notes in Computer Science, 2002, Volume 1697, 1999, pp 426-433

- [6] **Ralph. D. Meeker**, Comparative system performance for a Beowulf cluster, in Journal of Computing Sciences in Colleges, 2005, Volume 21 Issue 1, Pages 114-119, Consortium for Computing Sciences in Colleges , USA
- [7] **R. Rabenseilfner, Sunil R. Tiyyagura, M. M "** Muller Network Bandwidth Measurements and Ratio Analysis with the HPC Challenge Benchmark Suite (HPCC), Recent Advances in Parallel Virtual Machine and Message Passing Interface, Lecture Notes in Computer Science Volume 3666, 2005, pp 368-378
- [8] **H.K. Dipojono, H. Zulhaidi**, "On The Performance of Simple Parallel Computer of Four PCs Cluster ", in Proceedings Komputer dan sistem Intelijen (KOMMIT2002), pp. A70-A74
- [9] [http : //www.amd.com/en -us/products/processors/desktop/phenom -ii](http://www.amd.com/en-us/products/processors/desktop/phenom-ii)
- [10] [www.Quantum-espresso.org](http://www.Quantum-espresso.org)
- [11] [www.adaptivecomputing.com](http://www.adaptivecomputing.com)