

# Condensed matter challenges that can be solved only with high-performance computing

---

**Vyacheslav Lozhnikov**

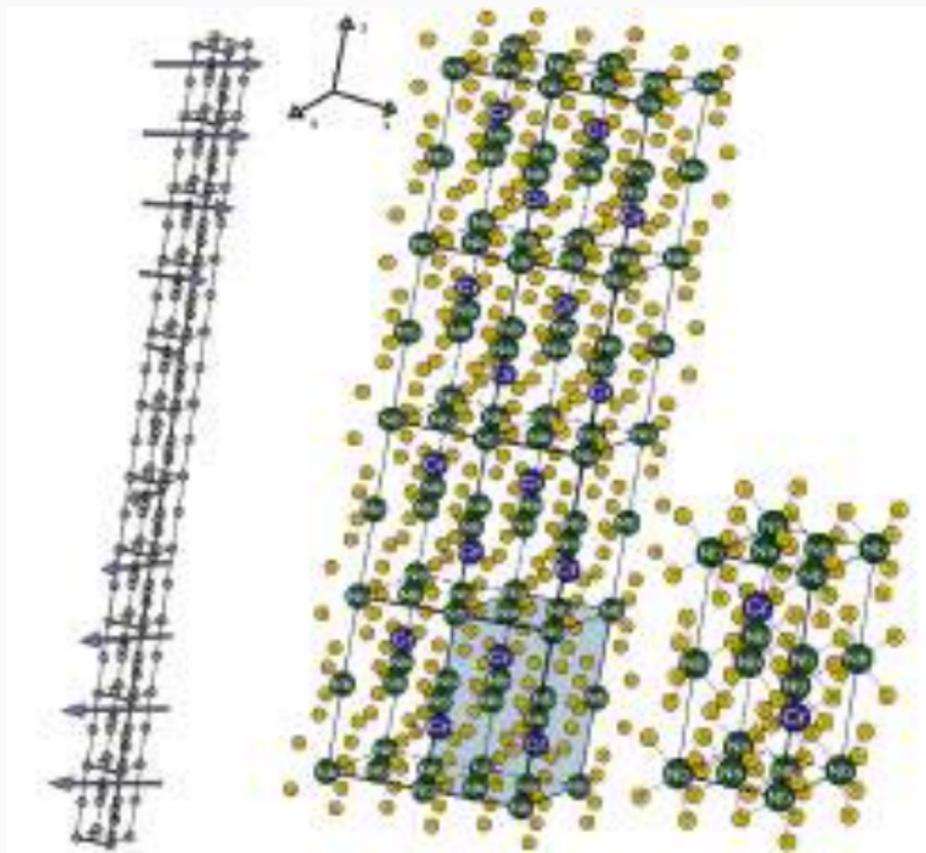
2023

Theoretical Physics Department  
Dostoevsky Omsk State University

## Поговорим про следующее:

- Структура  $CrNb_3S_6$ : масштаб задачи и характерные времена счёта
- Программно-аппаратная составляющая и компиляция VASP
- Масштабируемость вычислений и использование различных параметров оптимизации VASP
- Связность и влияние архитектур используемых вычислительных систем
- Немного про вычисления на GPU и другие задачи

# Исследуемая структура $CrNb_3S_6$



## Особенности $CrNb_3S_6$ :

- Период структуры гелимагнетика - 48 nm
- Постоянная решётки (размер одной суперъячейки)  
 $c = 12.1\text{\AA}$   
 $\Rightarrow$  нужно около 40 ячеек
- Атомов на ячейку - 20
- Время счёта одной ячейки на четырёх ядрах AMD Ерус 7302 (Zen 2, 2019): объёмной - **2.34** ч., плёнки - **87.2** ч.;  
одинарной объёмной ячейки на 32-х ядрах - **0.34** ч.,  
двойной - **2.72** ч.

## Вычислительные ресурсы:

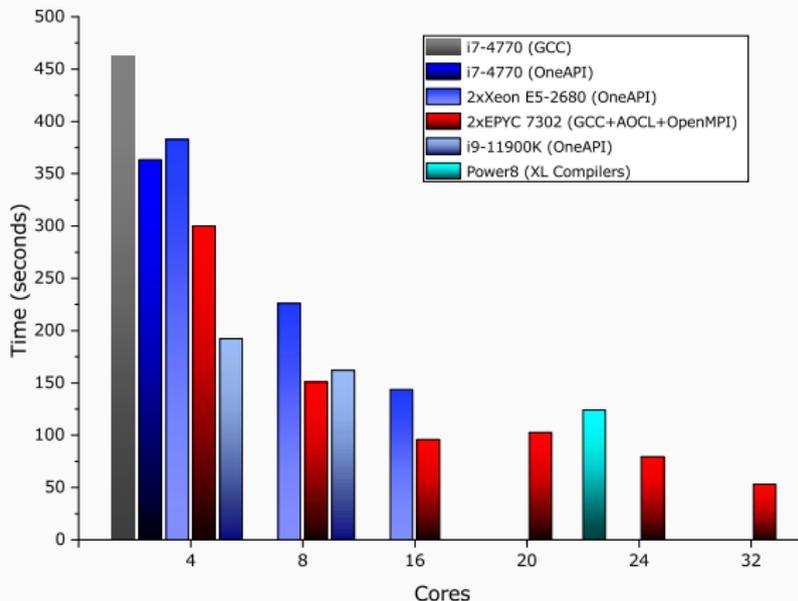
- ЦКП "Центр Данных ДВО РАН"
- Lenovo ThinkSystem SR645 (2xEpyc 7302)  
32rc/1Tb
- 2xHP ProLiant DL380p Gen8 (2xXeon E5-2680)  
16rc/256Gb node
- 10xHP EliteDesk (i7-4770)  
4rc/32Gb node

## VASP 6.2.1/6.3.2

Использовались специальные компиляторы и математические библиотеки:

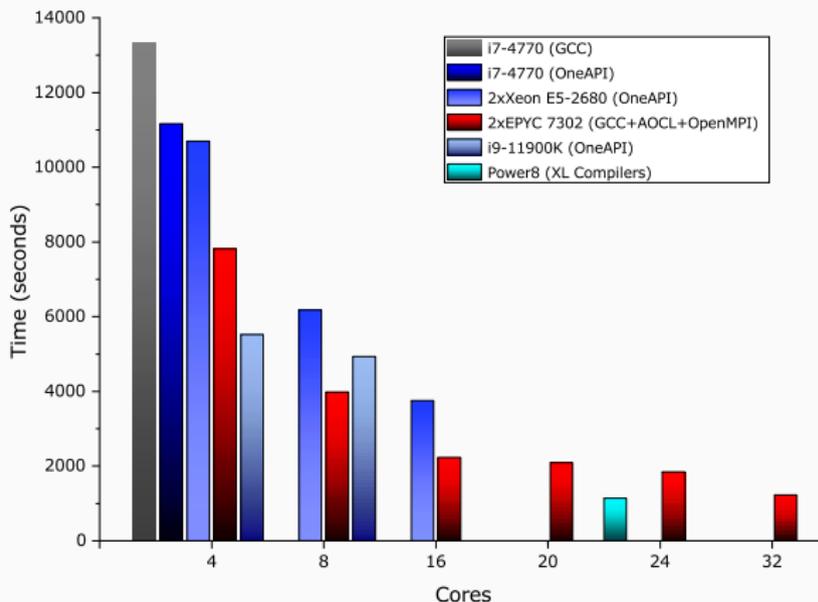
- **Intel:** GCC + system math / OneAPI, MKL (FFTW, BLAS, LAPACK), Intel MPI
- **AMD:** GCC + AOCL (FFTW, BLAS, LAPACK) + OpenMPI
- **Power8:** XL Compilers + ESSL + Spectrum MPI

# Масштабируемость вычислений в рамках одной ячейки



**Рис. 1:** Минимальные времена, нужные для релаксации системы коллинеарным VASP (std) NCORE/KPAR = 1,2,4

# Масштабируемость вычислений в рамках одной ячейки



**Рис. 2:** Минимальные времена, нужные для получения магнитных свойств ячейки неколлинеарным VASP (ncl) NCORE/KPAR = 1,2,4

# Использование параметров оптимизации VASP

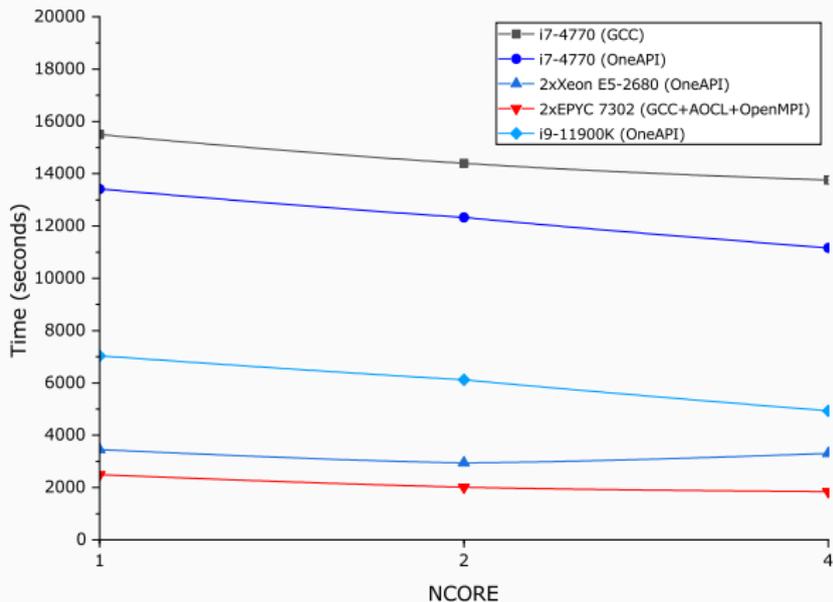


Рис. 3: VASP (ncl) Параметры оптимизации NCORE = 1,2,4; KPAR = 1

# Использование параметров оптимизации VASP

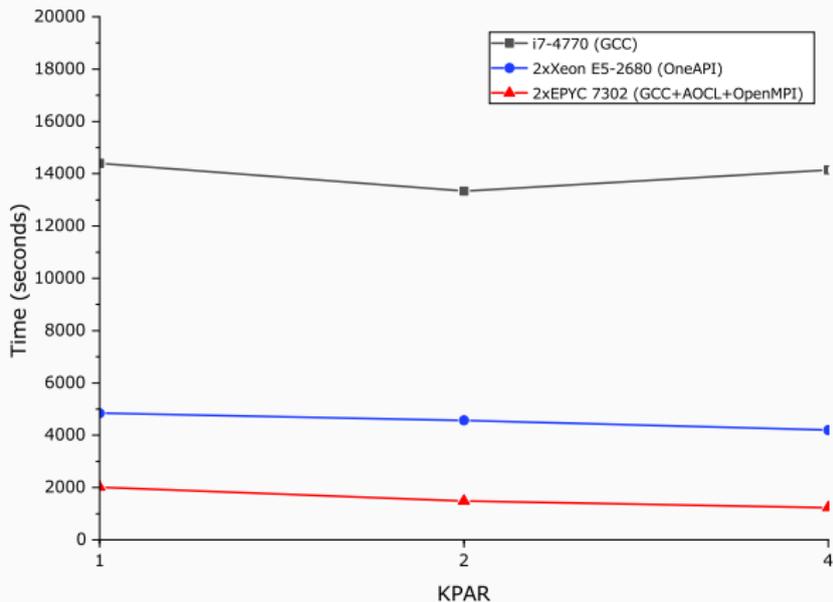


Рис. 4: VASP (ncl) Параметры оптимизации NCORE = 2; KPAR = 1,2,4

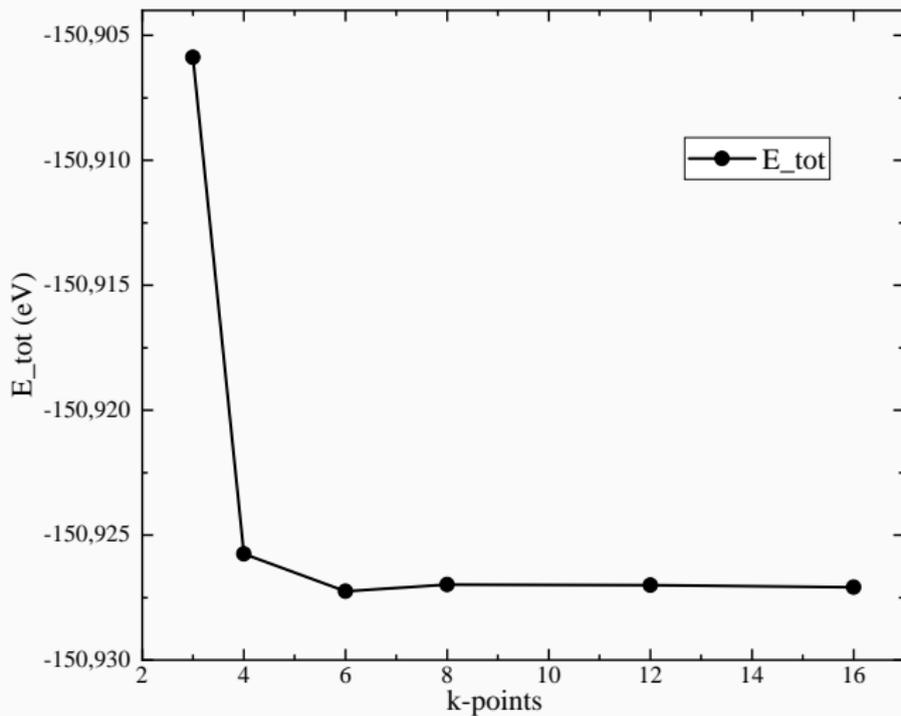


Рис. 5: Связь полной энергии с количеством K-точек

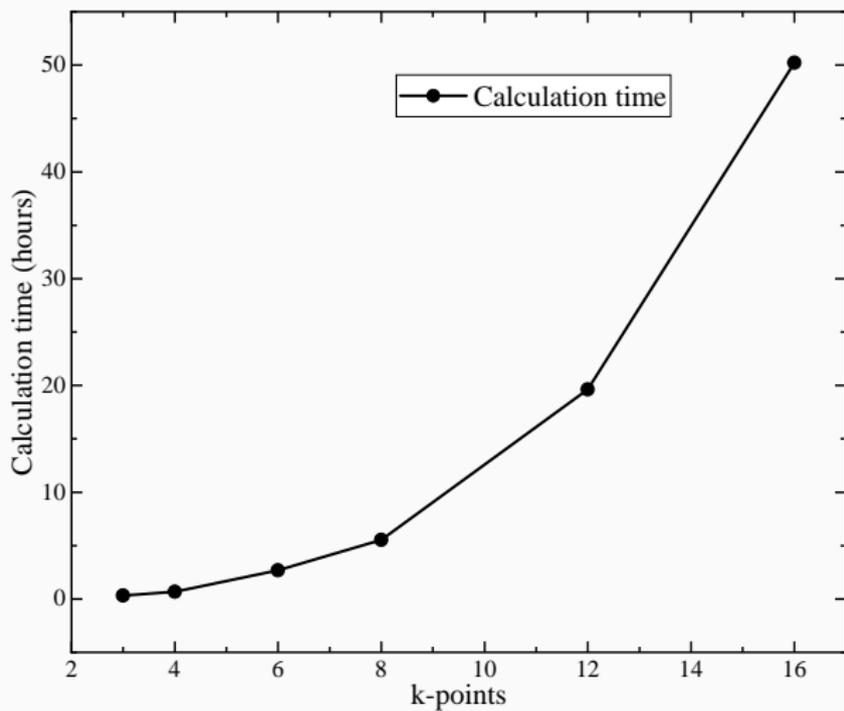


Рис. 6: Время счёта в зависимости от количества K-точек

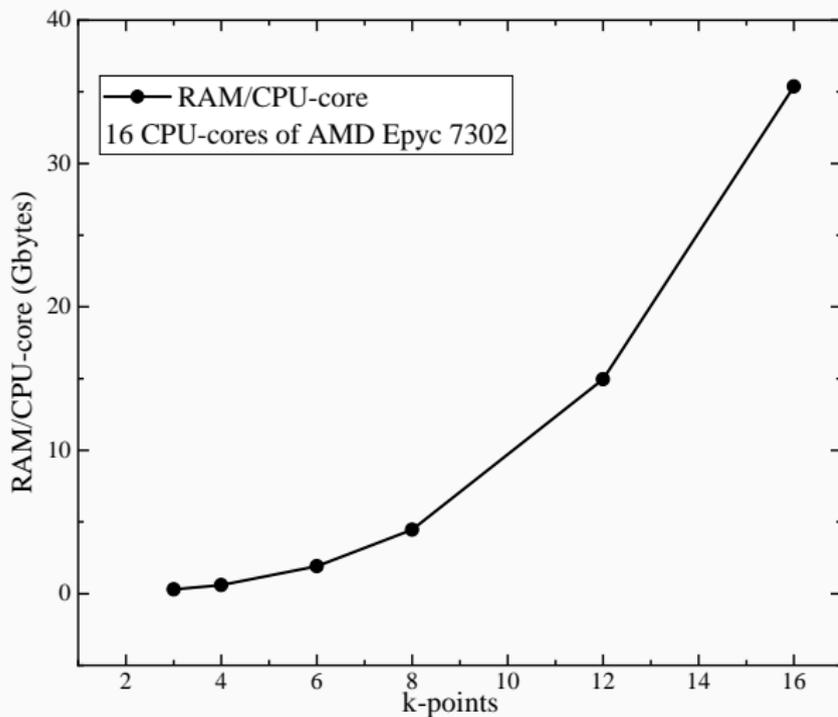


Рис. 7: Использование памяти в зависимости от количества K-точек

## VASP (ncl): Power8 / Tesla P100

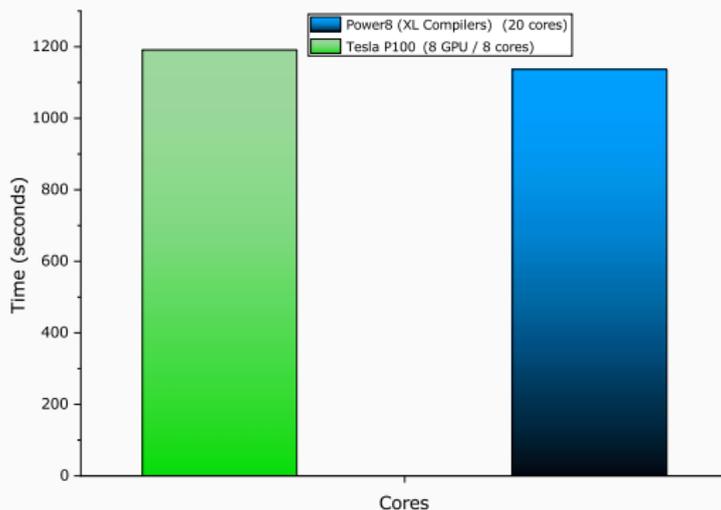


Рис. 8: 20 ядер Power8 против 8-ми Tesla P100

## VASP (std): Power9 / Tesla V100

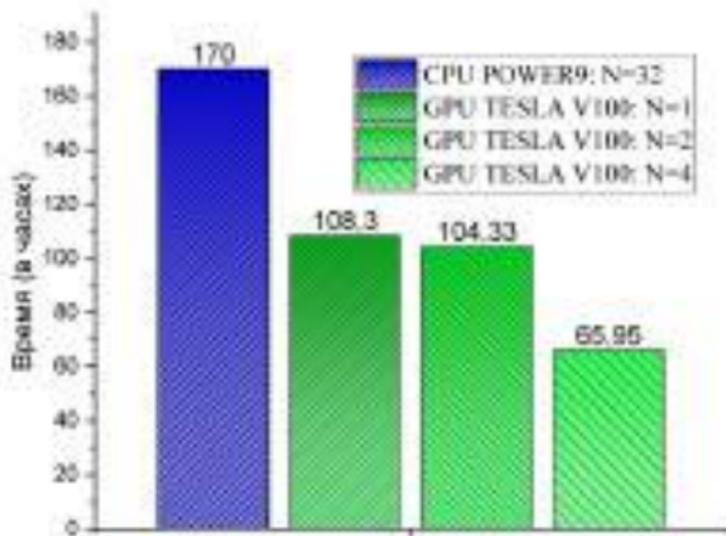


Рис. 9: Адсорбция фурфурола на поверхности палладия Pd (111)



**Рис. 10:** ЦКП "Центр Данных ДВО РАН"



**Рис. 11:** Лаборатория теоретической физики, прикладного моделирования и параллельных вычислений, ОмГУ

Для выполнения расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП «Центр данных ДВО РАН»<sup>1</sup> и лаборатории теоретической физики, прикладного моделирования и параллельных вычислений, ОмГУ им.Ф.М. Достоевского

---

<sup>1</sup>Сорокин А.А., Макогонов С.В., Королев С.П. Информационная инфраструктура для коллективной работы ученых Дальнего Востока России // Научно-техническая информация. Серия 1: Организация и методика информационной работы. 2017. № 12. С. 14-16.