

АНАЛИЗ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ УСТРОЙСТВ ДЛЯ ЗАДАЧ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

*И.Э. Недомолкин, М.П. Конилов, А.В. Тимофеев,
В.В. Стегайлов, И.Д. Федоров*

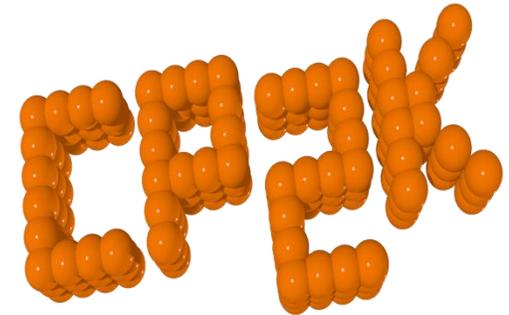
Научные приложения



AUSURF112

$1,25 \times 10^{19}$ *Flop*

Используется DFT

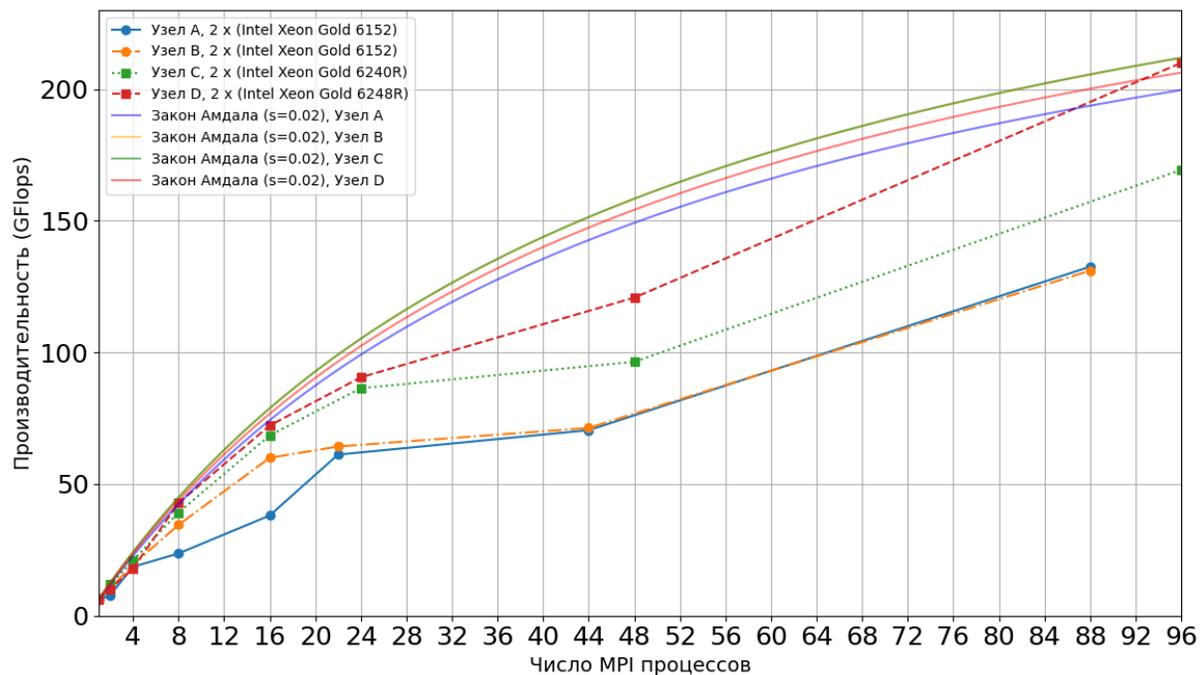


H2O-128

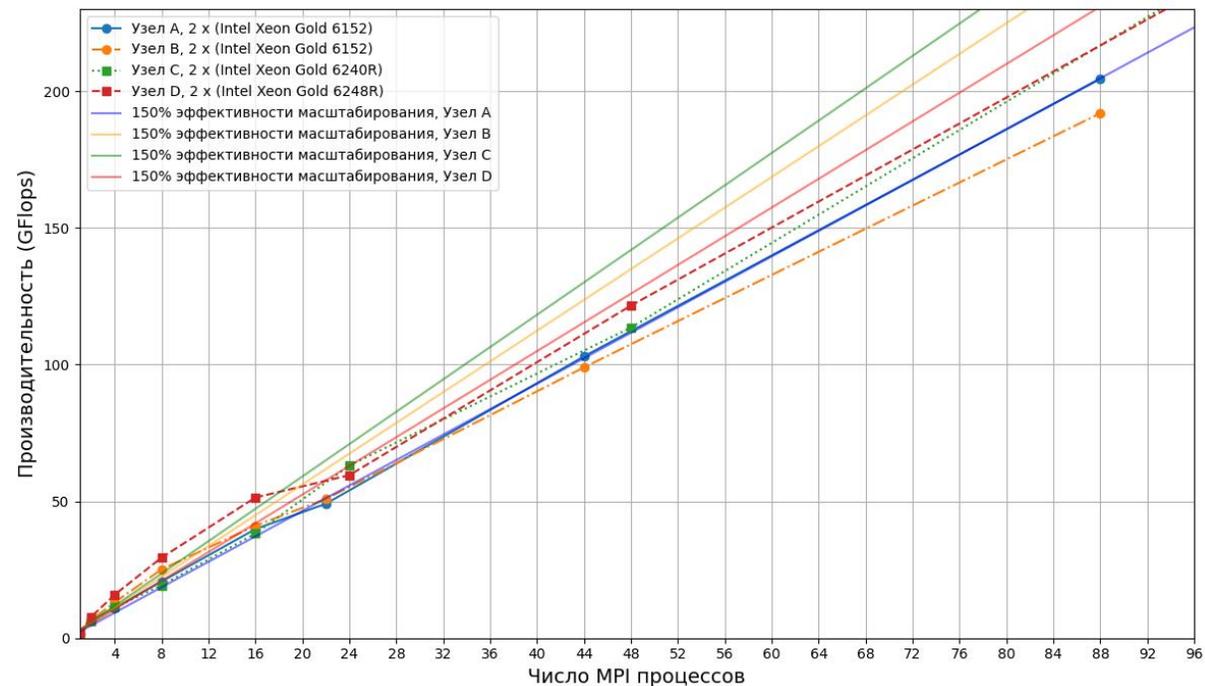
$1,29 \times 10^{19}$ *Flop*

Используется DFT

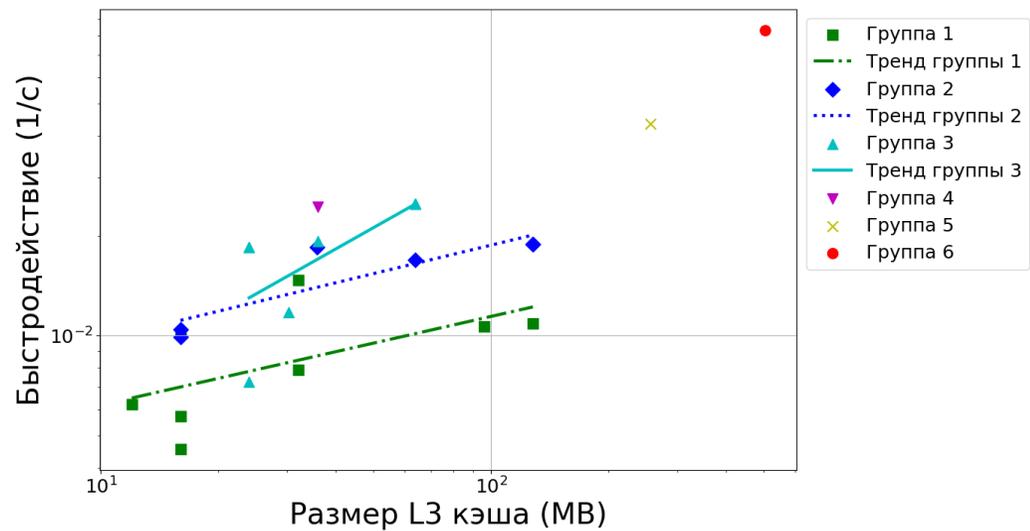
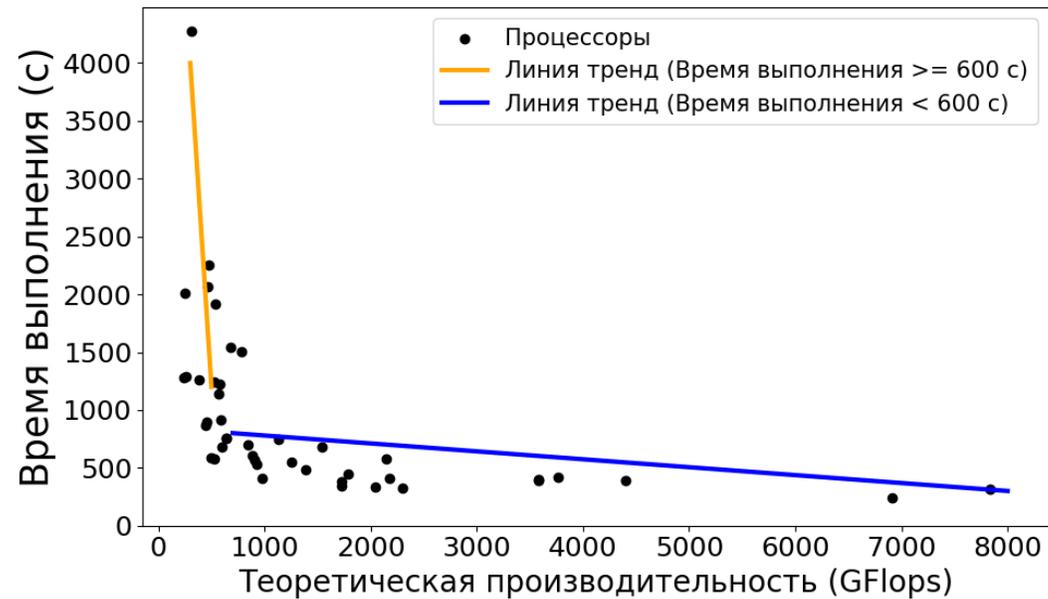
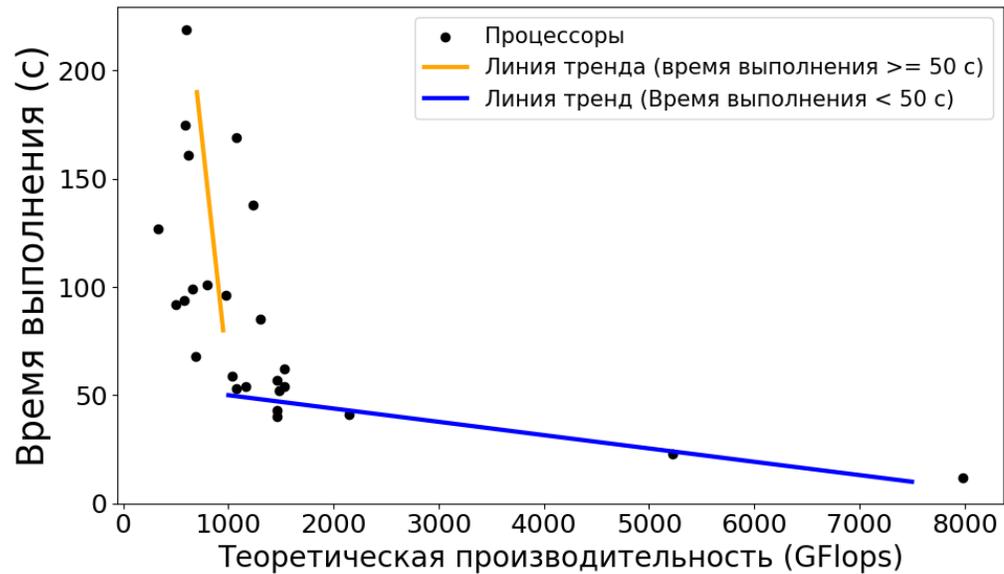
Производительность



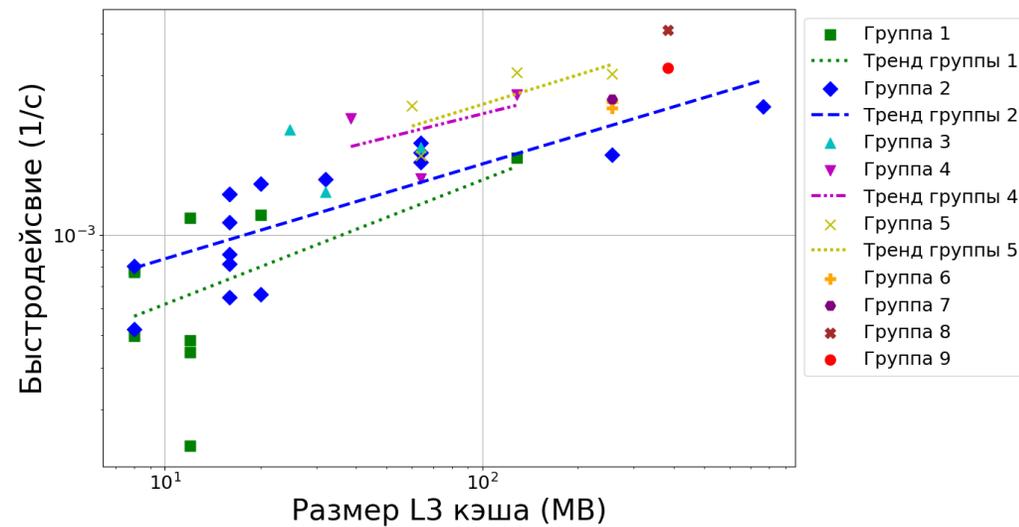
CP2K



QE

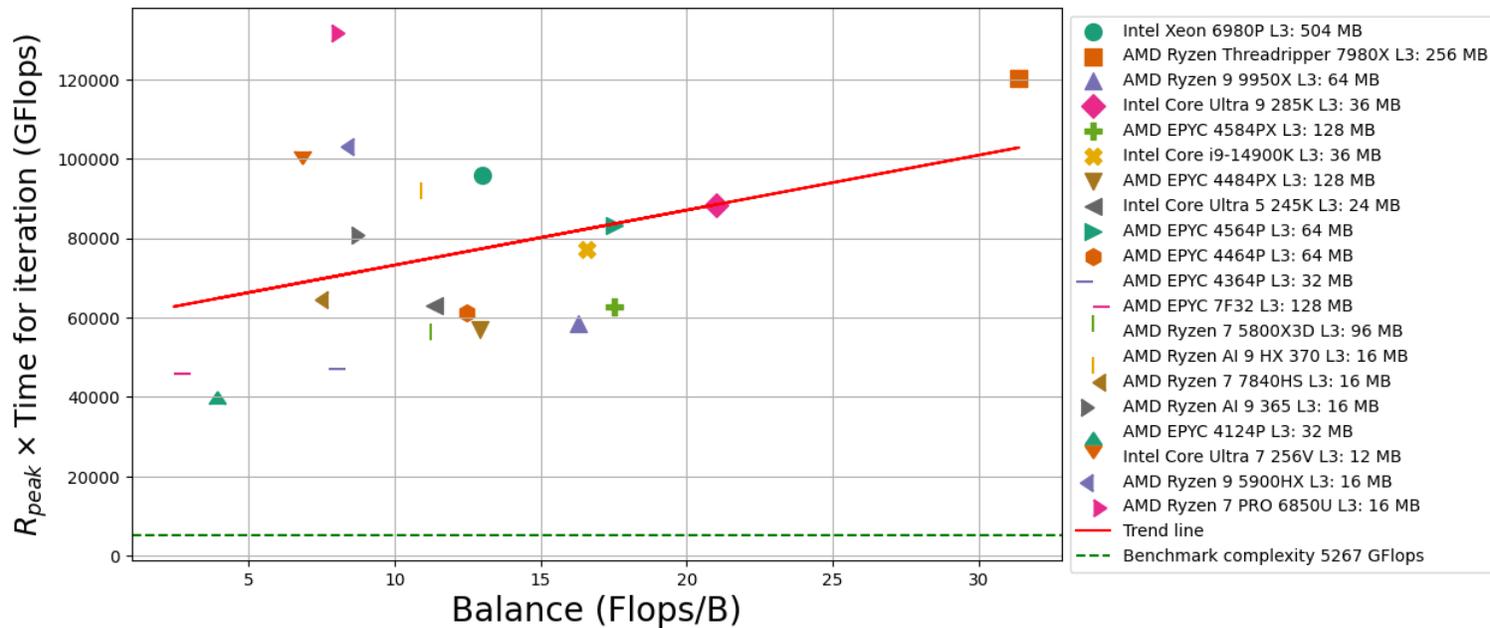


CP2K

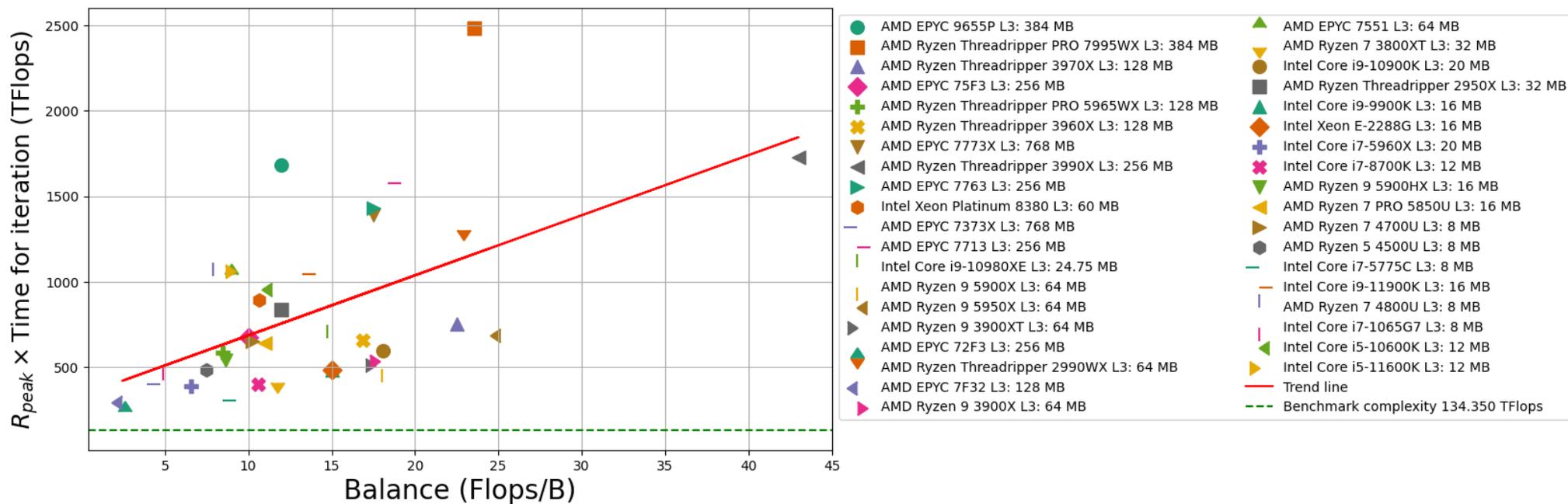


QE

CP2K



QE



Бедующие работы

- Более глубокий анализ узких мест
- Проведение тестов с использованием графических ускорителей
- Проведение более глубоких тестов на других суперкомпьютерах

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ