

## Оптимизация энергопотребления при расчетах задач классической и квантовой молекулярной динамики

В.С. Вечер<sup>1,2</sup>, В.В. Стегайлов<sup>1,2,3</sup>  
<sup>1</sup>ОИВТ РАН, <sup>2</sup>МФТИ, <sup>3</sup>ВШЭ

Задачи вычислительного материаловедения являются крайне важной отраслью научного знания, которые для своего успешного решения требуют использование сложных и точных атомистических и квантовых моделей. Увеличение размеров и сложности моделируемых систем для молекулярно-динамических и квантовых *ab-initio* расчетов приводит к соответствующему увеличению требований к доступному суперкомпьютерному оборудованию — производительности вычислительных модулей, объему памяти и т. д. Кроме того, увеличение вычислительной нагрузки увеличивает и энергопотребление системы, которое постепенно становится существенным барьером на пути дальнейшего наращивания вычислительной мощности, наряду с вопросом возрастающей стоимости вычислительного оборудования.

В первой части доклада будет обсужден вопрос молекулярно-динамического моделирования. Поскольку данные алгоритмы довольно хорошо ускоряются на GPU, в рамках доклада будут проведены параллели между различными поколениями графических акселераторов от Nvidia, их производительностью в молекулярно-динамическом пакете LAMMPS с модулями USER-CUDA и GPU, и аппаратно измеренным энергопотреблением графических ускорителей во время расчета. Будет продемонстрировано существование оптимального режима энергопотребления, позволяющего в некоторых случаях значительно экономить затраченную на расчет энергию.

Во второй части выступления будет обсужден вопрос выбора аппаратных компонентов для эффективного решения *ab-initio* задач на примере одного из самых популярных в мире квантовых пакетов VASP. Будет продемонстрировано влияние баланса между вычислительной мощностью (число ядер) и производительностью подсистемы памяти (число каналов, размер кэша) суперкомпьютерного узла на скорость решения задачи, обсужден вопрос энергопотребления.