

OPTIMIZATION OF OPEN-SOURCE QUANTUM CHEMISTRY CODES ON THE GOVORUN SUPERCOMPUTER: APPLICATION TO ADSORPTION OF SUPERHEAVY ELEMENTS

H. Esawii^{1,2}, *D. Sen*¹, *M. Iliaş*^{1,*}

¹ Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

² Academy of Scientific Research and Technology, Cairo, Egypt

The rapid advancement of computational molecular physics relies on the efficient adaptation of the software to high-performance computing platforms. We report a systematic benchmarking of two major open-source packages: DIRAC, for relativistic molecular electronic structure theory, and Quantum ESPRESSO, for periodic density functional theory simulations, on the Govorun supercomputer. We considered multiple build configurations, parallelization schemes, and GPU-enabled implementations to assess scalability, memory performance, and computational throughput.

Стремительное развитие вычислительной молекулярной физики зависит от эффективной адаптации программного обеспечения к платформам высокопроизводительных вычислений. Представлен систематический бенчмаркинг двух основных пакетов с открытым исходным кодом: DIRAC для релятивистской теории электронной структуры молекул и Quantum ESPRESSO для моделирования периодических задач теории функционала плотности на суперкомпьютере «Говорун». Рассмотрены различные конфигурации сборки, схемы распараллеливания и реализации на базе графических процессоров для оценки масштабируемости, производительности памяти и вычислительной пропускной способности.

PACS: 89.20.Ff

* E-mail: milias@theor.jinr.ru