

Roadmap of the High Performance Computing in Italy and the establishment of a Scientific Advisory Board in CINECA

Il Punto di Vista della Comunità dei Chimici dello Stato Solido (?)

CINECA, 23 Marzo 2018

Alessandro Erba

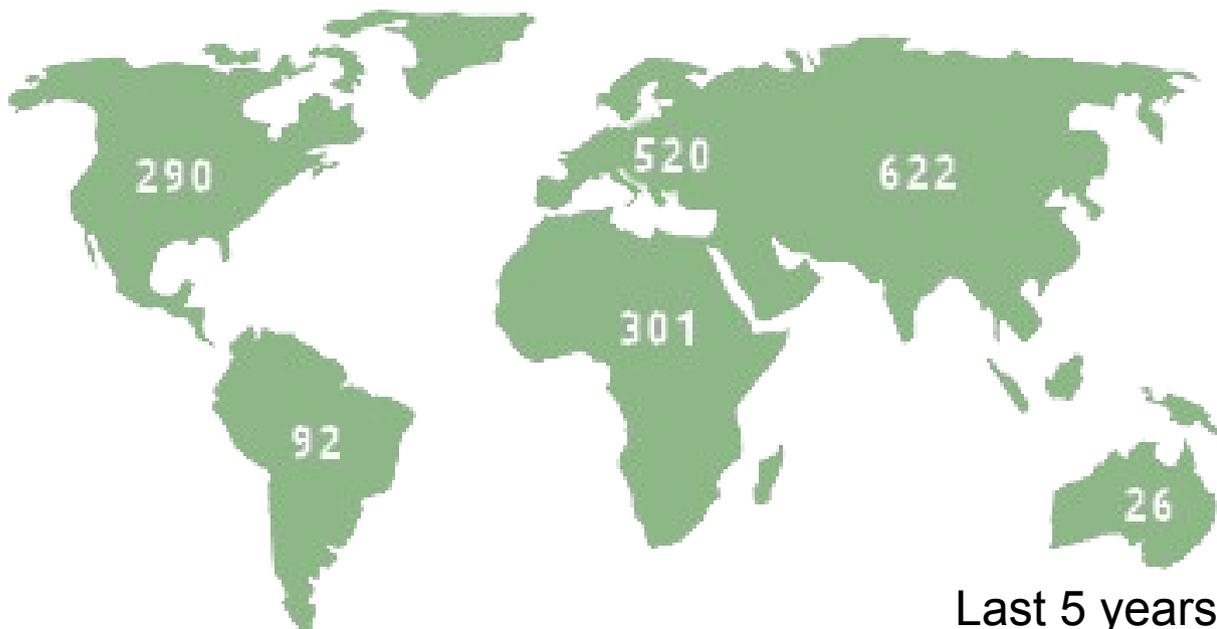
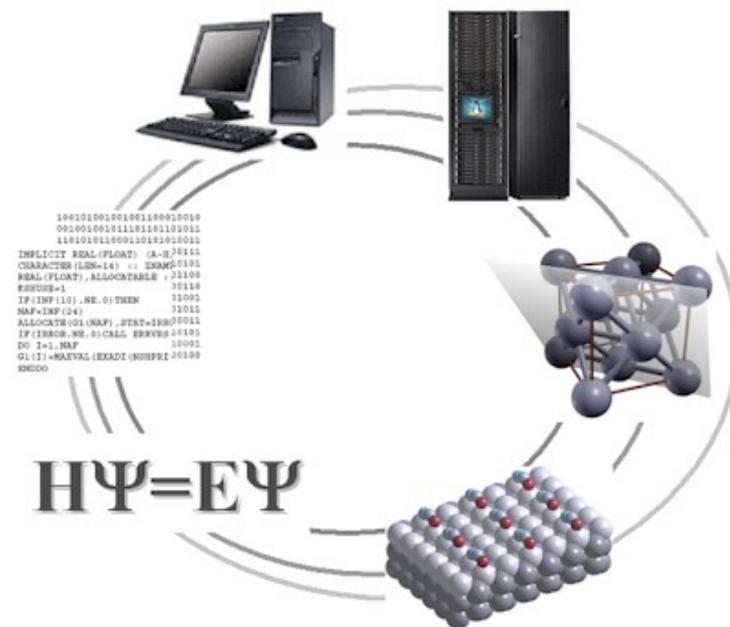
Dipartimento di Chimica, Università di Torino (Italy)
alessandro.erba@unito.it

Il Programma di Calcolo CRYSTAL



Il **Gruppo di Chimica Teorica** ([Università di Torino](#)) sviluppa un programma di calcolo (**CRYSTAL**) per lo studio quanto-meccanico delle proprietà dei materiali **da circa 40 anni**.

Programma pubblico (distribuito alla comunità scientifica) in una **versione demo gratuita** ed in una **versione completa a pagamento** (licenza accademica: 1200 euro)



Last 5 years



CRYSTAL: Milestones



CRYSTAL88

**Prima versione distribuita pubblicamente (HF periodico)
(primo codice pubblico al mondo per simulazioni QM di solidi)**

CRYSTAL: Milestones



CRYSTAL88

**Prima versione distribuita pubblicamente (HF periodico)
(primo codice pubblico al mondo per simulazioni QM di solidi)**

CRYSTAL92

CRYSTAL95

CRYSTAL: Milestones



CRYSTAL88

**Prima versione distribuita pubblicamente (HF periodico)
(primo codice pubblico al mondo per simulazioni QM di solidi)**

CRYSTAL92

CRYSTAL95

CRYSTAL98

**Prima versione parallela (P)
basata su MPI (replicated-data strategy)**

CRYSTAL: Milestones



CRYSTAL88

**Prima versione distribuita pubblicamente (HF periodico)
(primo codice pubblico al mondo per simulazioni QM di solidi)**

CRYSTAL92

CRYSTAL95

CRYSTAL98

**Prima versione parallela (P)
basata su MPI (replicated-data strategy)**

CRYSTAL03

CRYSTAL06

CRYSTAL09

**Prima versione massicciamente parallela (MPP)
basata su MPI e ScaLAPACK (distributed-data strategy)**

CRYSTAL: Milestones



CRYSTAL88

**Prima versione distribuita pubblicamente (HF periodico)
(primo codice pubblico al mondo per simulazioni QM di solidi)**

CRYSTAL92

CRYSTAL95

CRYSTAL98

**Prima versione parallela (P)
basata su MPI (replicated-data strategy)**

CRYSTAL03

CRYSTAL06

CRYSTAL09

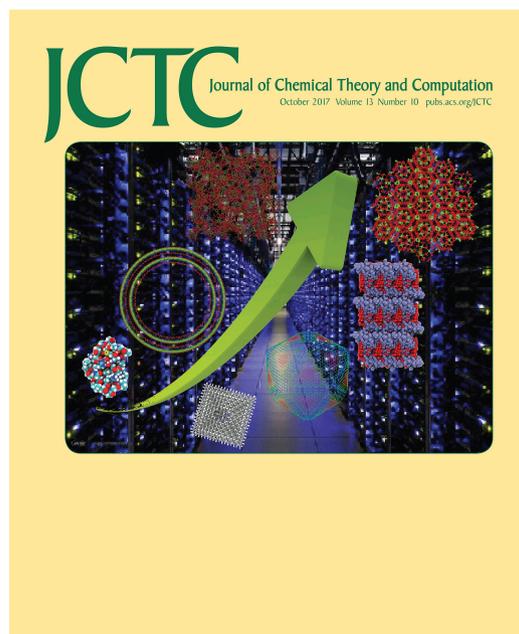
**Prima versione massicciamente parallela (MPP)
basata su MPI e ScaLAPACK (distributed-data strategy)**

CRYSTAL14

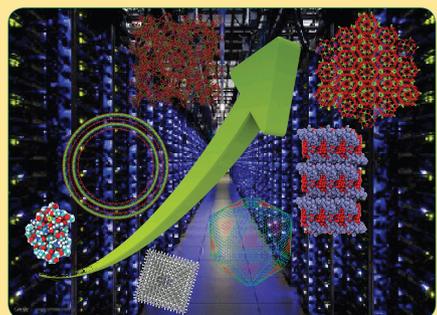
CRYSTAL17



Abbiamo recentemente presentato una Review sulle prestazioni di MPP CRYSTAL:

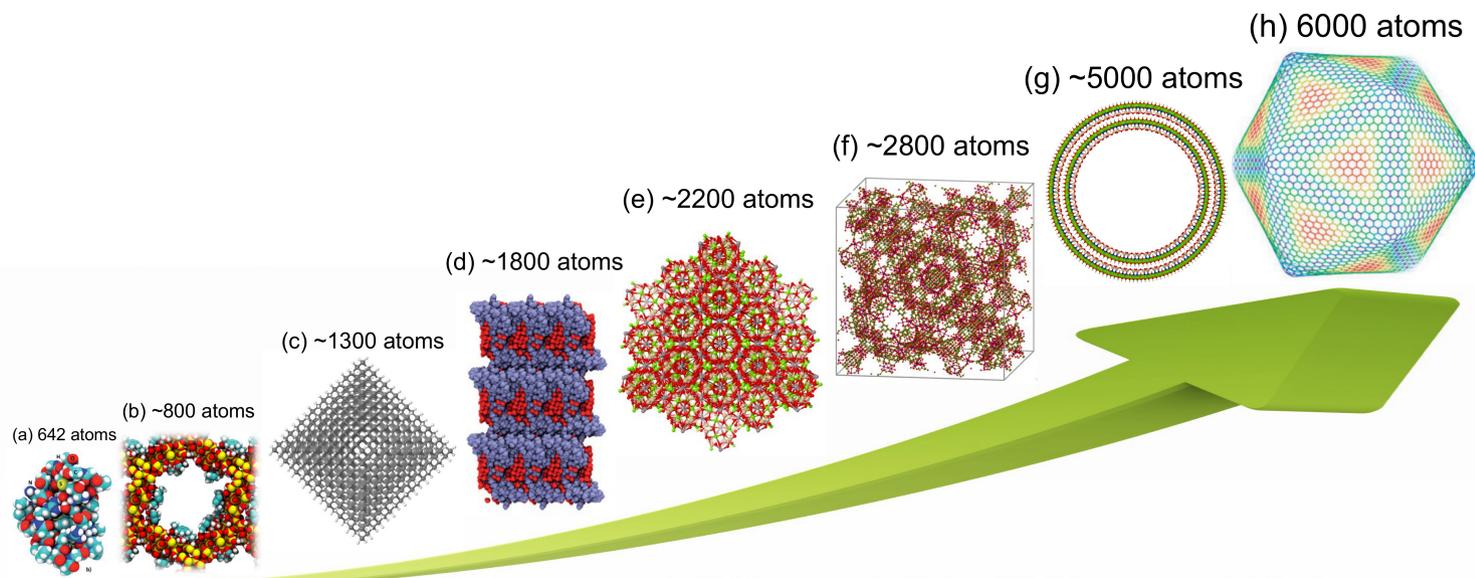


JCTC Journal of Chemical Theory and Computation
October 2017 Volume 13 Number 10 pubs.acs.org/JCTC



ACS Publications
Most Trusted. Most Cited. Most Read.

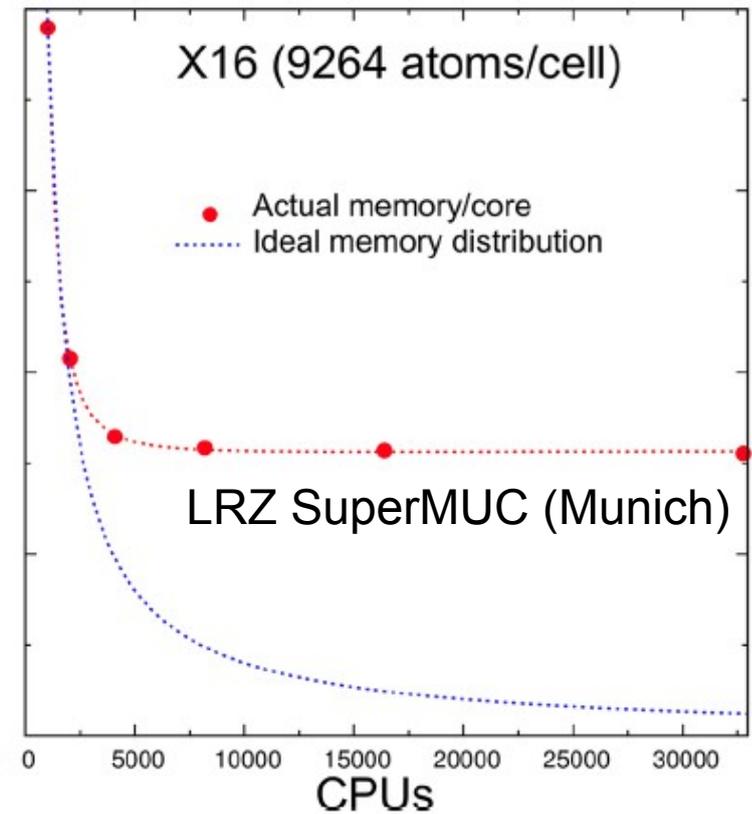
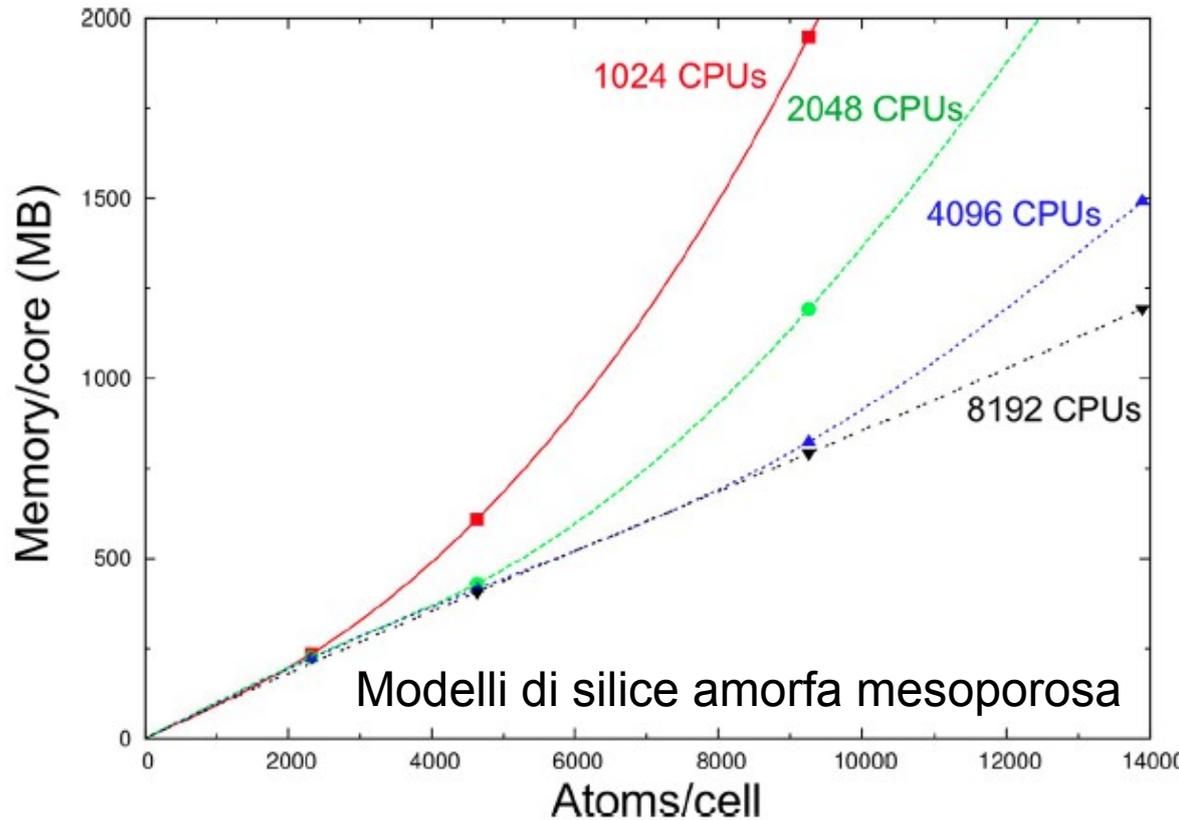
www.acs.org



AE, J. Baima, I. Bush, R. Orlando and R. Dovesi, *J. Chem. Theory Comput.*, **13**, 5019-5027 (2017) **Large Scale Condensed Matter DFT Simulations: Performance and Capabilities of the CRYSTAL Code**



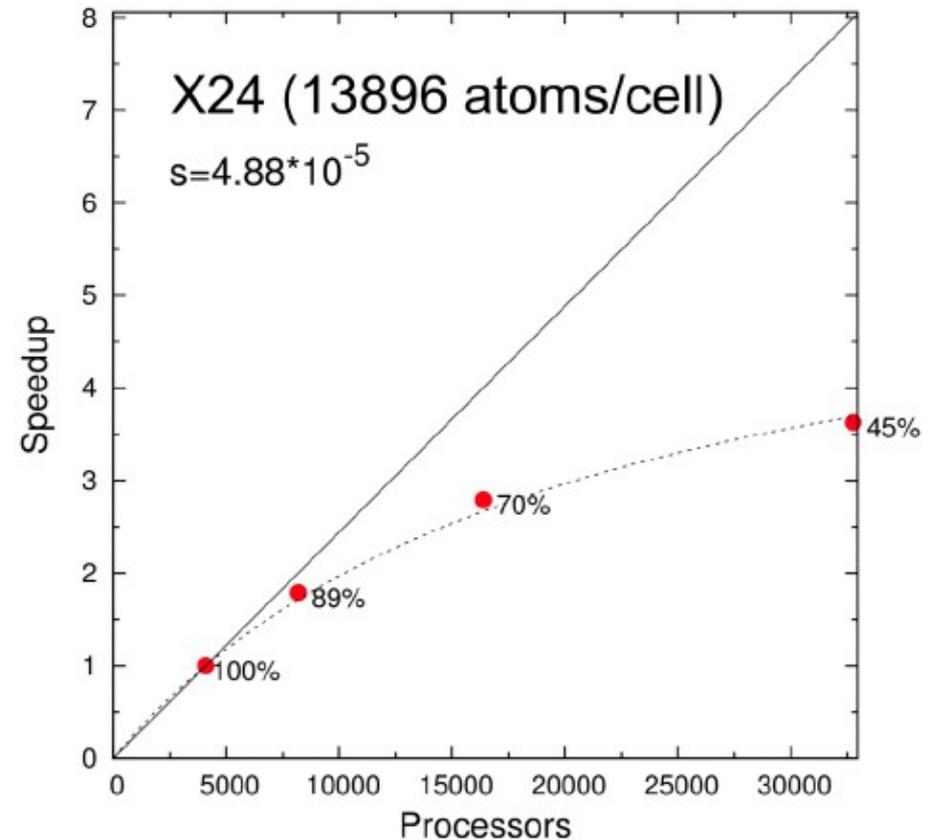
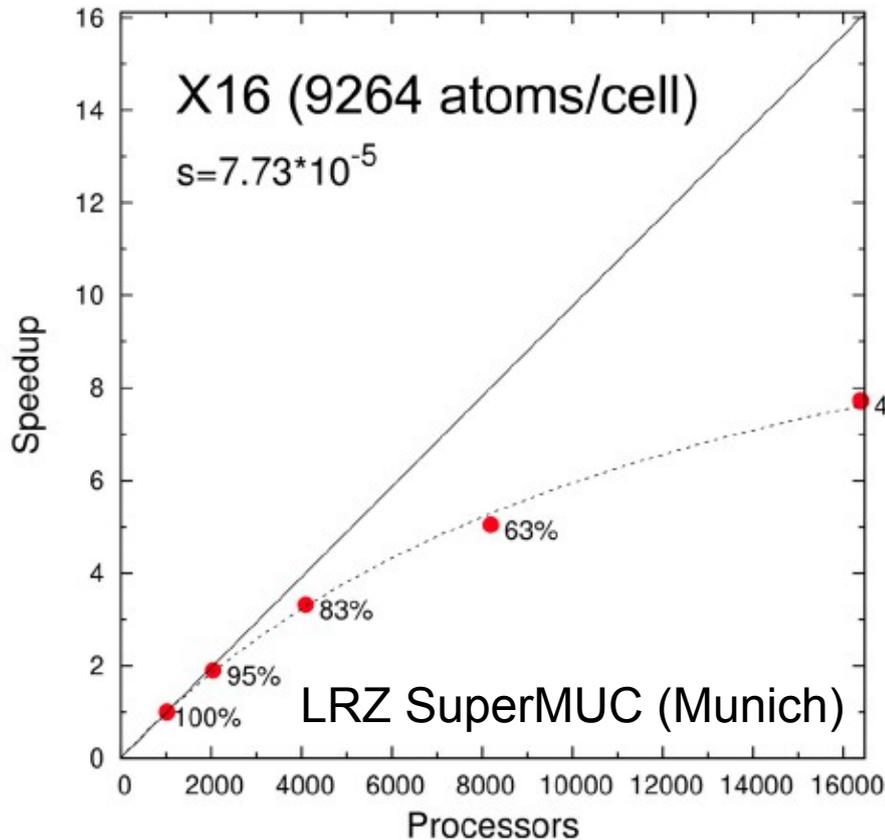
Riduzione del Memory Footprint



AE, J. Baima, I. Bush, R. Orlando and R. Dovesi, *J. Chem. Theory Comput.*, **13**, 5019-5027 (2017) **Large Scale Condensed Matter DFT Simulations: Performance and Capabilities of the CRYSTAL Code**



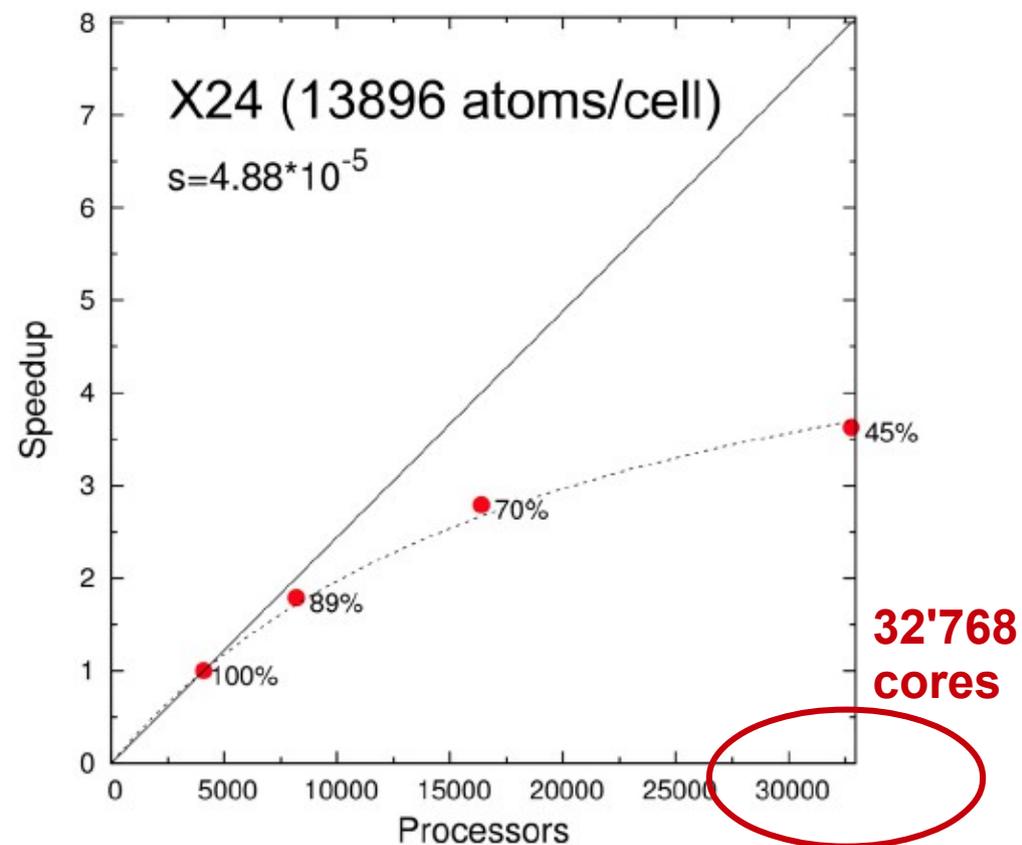
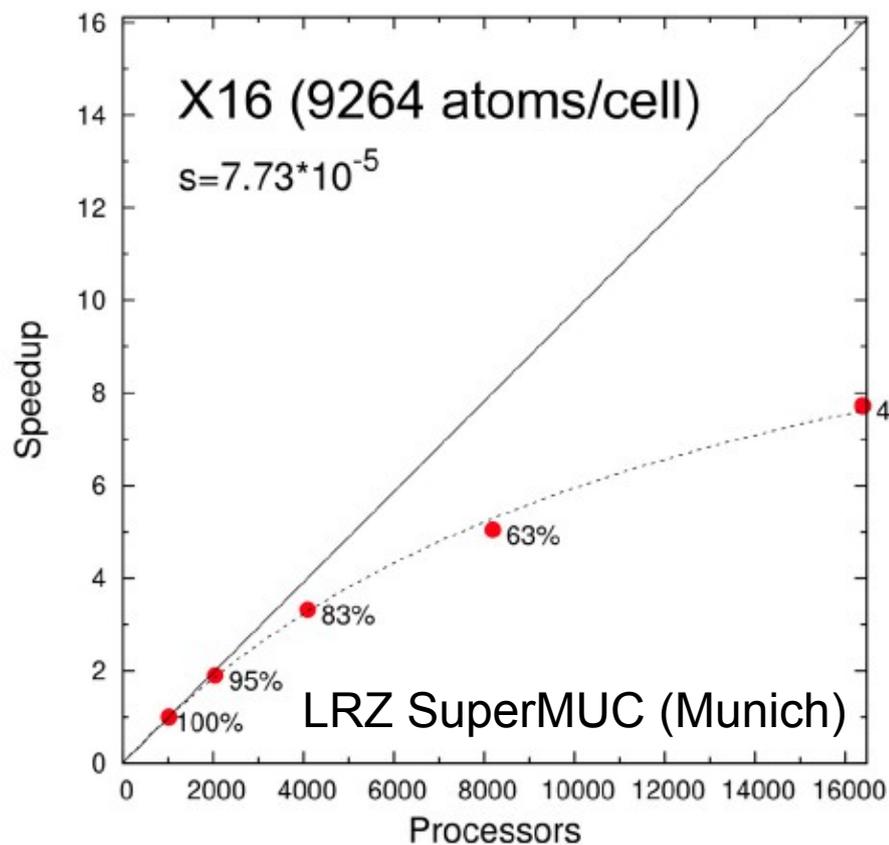
Miglioramento dello Scaling



AE, J. Baima, I. Bush, R. Orlando and R. Dovesi, *J. Chem. Theory Comput.*, **13**, 5019-5027 (2017) **Large Scale Condensed Matter DFT Simulations: Performance and Capabilities of the CRYSTAL Code**



Miglioramento dello Scaling



AE, J. Baima, I. Bush, R. Orlando and R. Dovesi, *J. Chem. Theory Comput.*, **13**, 5019-5027 (2017) **Large Scale Condensed Matter DFT Simulations: Performance and Capabilities of the CRYSTAL Code**