

# GPU-VASP 运行测试

## 1 结果

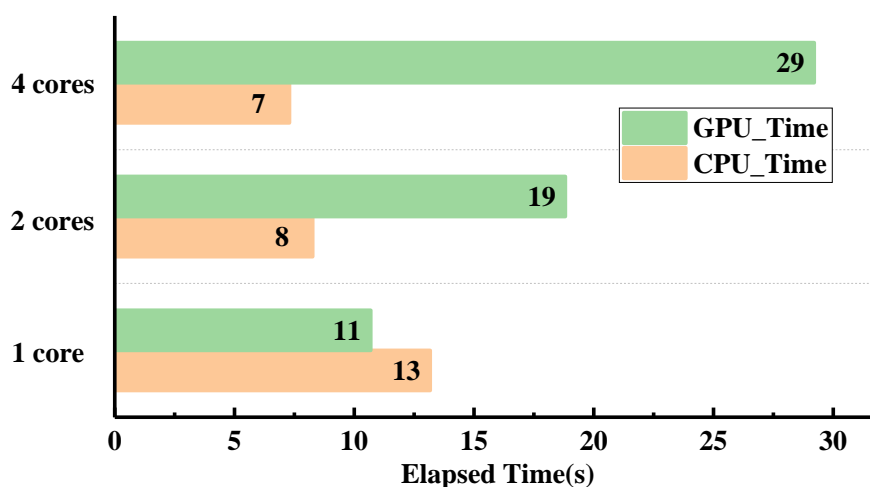
1. 在进行小体系计算（4 个 Ag 原子单胞的结构优化）时，  
GPU 的加入，拖慢了整体的运行速度。
2. 随着计算体系的增加(512 个 Si 原子)，GPU 表现出出色的  
加速效果，可提速 3~6 倍。
3. 针对阿里云的服务器 1 块 GPU 与 1 个 CPU 进程搭配计算  
速度最快

## 2 不同尺寸体系的自洽计算

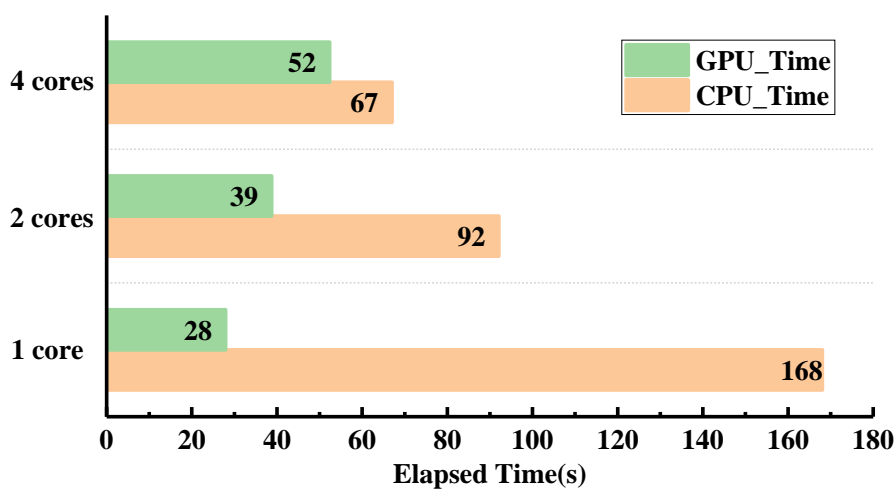
CPU\_Time 表示只用 CPU 计算的用时

GPU\_Time 表示在提供相同 CPU 配置的情况下外加一块 P100 显卡的计算用时

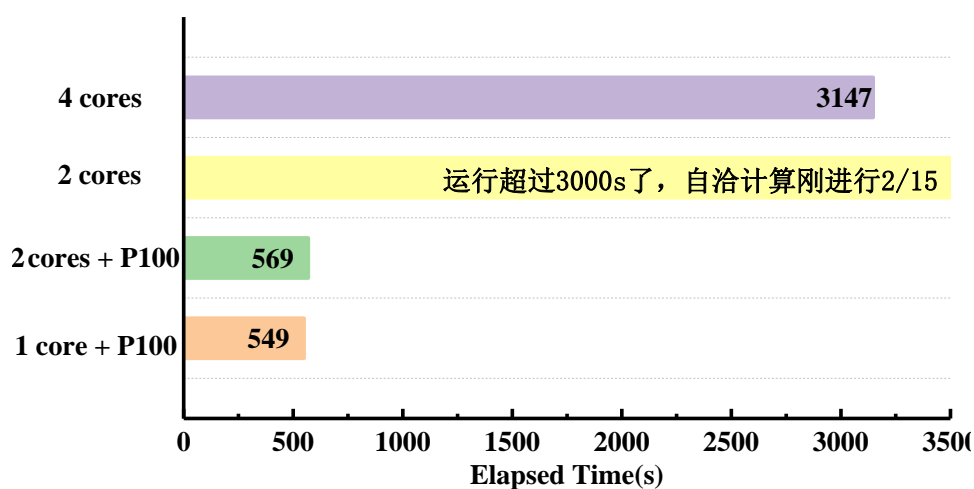
### 2.1 8 个 Si 原子单胞



### 2.2 64 个 Si 原子单胞



## 2.3 512 个 Si 原子单胞



## 3 附录：计算环境

### 3.1 硬件配置

CPU: Intel(R) Xeon(R) E5-2682 v4 共 8 核心

显卡: NVIDIA Tesla P100

内存: 64G

### 3.2 计算环境

Parallel\_studio\_xe\_2019\_update3\_cluster\_edition

NVIDIA Driver Version: 418.39 CUDA Version: 10.1