

LABORATOR DE TEHNOLOGII COMPUTAȚIONALE AVANSATE

Responsabil: Prof. Moca Pașcu Cătălin

DESCRIERE TEHNICĂ	2
TEME DE CERCETARE	5
LISTĂ LUCRĂRI REPREZENTATIVE	6
PARTENERI	9

DESCRIEREA TEHNICA

1. Arhitectura generală

Infrastructura laboratorului este organizată sub forma unui cluster HPC distribuit, alcătuit din 27 noduri de calcul, configurate în mai multe partiții gestionate prin Slurm Workload Manager. Clusterul este construit pe baza ecosistemului OpenHPC și rulează un sistem de operare Linux enterprise-grade. Arhitectura este de tip master–compute nodes, cu nod dedicat pentru management, autentificare și administrarea resurselor.



Laboratorul de Calcul Științific de Înaltă Performanță este amplasat în clădirea dedicată Data Center-ului instituției, într-un spațiu proiectat special pentru operarea echipamentelor IT critice. Sala serverelor beneficiază de infrastructură profesională de climatizare, cu sistem de aer condiționat industrial dimensionat pentru disiparea eficientă a sarcinii termice generate de nodurile de calcul, asigurând menținerea constantă a temperaturii și umidității în parametri optimi de funcționare. Controlul mediului este realizat prin sisteme redundante, care permit funcționarea continuă 24/7 fără fluctuații termice semnificative. Spațiul este dotat cu rack-uri standardizate, distribuție electrică securizată, protecție la supratensiune și sisteme dedicate de monitorizare a consumului și a parametrilor ambienali. Infrastructura electrică este stabilizată și protejată prin surse UPS și mecanisme de backup, reducând riscul întreruperilor neplanificate. Amplasarea în Data Center asigură, de asemenea, control al accesului fizic, securitate sporită și condiții conforme cu standardele pentru operarea infrastructurilor HPC.

2. Infrastructura hardware

Clusterul este alcătuit din 27 noduri de calcul active, organizate în două partiții principale, denumite cpu1 și cpu2, precum și o partiție separată pentru testare și dezvoltare. Nodurile sunt eterogene din punct de vedere al configurației hardware, ceea ce permite alocarea optimizată a resurselor în funcție de tipul aplicației. Partiția cpu2 include noduri de capacitate ridicată, configurate dual-socket, cu un număr variabil de nuclee per socket și suport pentru multi-threading (două thread-uri per nucleu). Configurațiile variază între 16 și 104 nuclee per nod, existând noduri intermediare de 24, 40 și 80 de nuclee. Aceste noduri sunt destinate aplicațiilor puternic paralele, simulărilor numerice la scară mare și calculelor hibride MPI + OpenMP. Partiția cpu1 conține noduri cu configurații mai compacte, între 12 și 16 nuclee per nod, utilizate pentru sarcini medii, dezvoltare de cod, testare și pre- sau post-procesare de date. În ansamblu, infrastructura oferă peste 900 de nuclee CPU disponibile pentru utilizatori, permițând rularea simultană a unui număr mare

de procese MPI sau thread-uri OpenMP. Arhitectura multi-socket și suportul pentru simultaneous multi-threading permit exploatarea eficientă a paralelismului la nivel de nod.

Memoria RAM

Capacitatea de memorie este configurată diferențiat pentru a susține aplicații cu cerințe variabile. Nodurile standard dispun de aproximativ 120 GB RAM, în timp ce nodurile de capacitate ridicată sunt echipate cu aproximativ 250 GB RAM. Un nod dedicat oferă memorie extinsă de peste 500 GB și până la 1TB, fiind destinat aplicațiilor memory-intensive, precum diagonalizări dense de mari dimensiuni, metode tensoriale sau procesare de seturi masive de date. Memoria este distribuită pe socket-uri în configurație NUMA, permițând optimizarea aplicațiilor conștiente de topologia memoriei. Această configurație este adecvată atât pentru aplicații compute-bound, cât și pentru aplicații memory-bound.

Rețea și interconectare

Nodurile clusterului sunt interconectate printr-o rețea internă de mare viteză (10 GB), destinată comunicațiilor MPI și transferului eficient de date între procese distribuite. Există o separare logică între rețeaua de management și rețeaua de calcul, ceea ce contribuie la stabilitate și securitate operațională. Configurația rețelei permite latență redusă și lățime de bandă suficientă pentru aplicații distribuite intensive, asigurând scalabilitate bună pentru joburi multi-nod.

Stocare

Clusterul utilizează un sistem de fișiere partajat, accesibil de pe toate nodurile de calcul. Directoarele utilizatorilor, datele temporare și rezultatele numerice sunt stocate centralizat, permițând acces consistent și gestionare eficientă a datelor. Sistemul implementează politici de quota și mecanisme de backup, asigurând integritatea și disponibilitatea informațiilor.

Software și managementul resurselor

Platforma rulează un sistem de operare Linux enterprise-grade, optimizat pentru medii HPC și configurat pentru suport NUMA. Stack-ul software este instalat și administrat prin OpenHPC, oferind un mediu standardizat și reproductibil pentru cercetare. Managementul joburilor este realizat prin Slurm Workload Manager, care asigură alocarea dinamică a resurselor de procesare și memorie, planificarea pe partiții și monitorizarea stării nodurilor. Sistemul permite prioritizare, politici de fair-share și raportare detaliată a utilizării resurselor. Monitorizarea permanentă a încărcării CPU, memoriei și stării nodurilor contribuie la menținerea stabilității operaționale. Mediul software include compilatoare GCC, suport pentru programare paralelă prin OpenMPI și OpenMP, biblioteci numerice optimizate, precum și suport pentru limbaje utilizate frecvent în cercetarea științifică, inclusiv C, C++, Fortran, Python și Julia. Utilizarea sistemului de environment modules permite gestionarea flexibilă a versiunilor și reproducibilitatea mediului de execuție.

Capabilități computaționale

Infrastructura permite execuția aplicațiilor paralele distribuite pe mai multe noduri, utilizând MPI, precum și aplicații multi-threaded la nivel de nod prin OpenMP. Pot fi rulate joburi care utilizează peste 100 de nuclee simultan, în funcție de disponibilitatea resurselor. Clusterul este adecvat pentru simulări numerice intensive, metode many-body, diagonalizări sparse și dense, metode tensoriale (DMRG), simulări Monte Carlo și procesare paralelă de date. Configurația hardware și software permite scalare eficientă și utilizare intensivă a resurselor în proiecte de cercetare avansată.

Operare și disponibilitate

Infrastructura este proiectată pentru funcționare continuă 24/7, cu monitorizare permanentă a stării nodurilor. În cazul apariției unor disfuncționalități, nodurile pot fi izolate automat prin sistemul de management, fără a afecta funcționarea globală a clusterului. Administrarea este realizată centralizat, asigurând mentenanță eficientă și intervenții rapide.

TEME DE CERCETARE

Activitatea științifică desfășurată în cadrul laboratorului este concentrată pe studiul numeric al sistemelor cuantice many-body, cu accent pe proprietăți de neechilibru, transport, entanglement și complexitate cuantică. Sunt investigate atât modele integrabile, cât și modele neintegrabile, cu scopul de a înțelege relația dintre dinamică, transport, structură spectrală și caracterul haotic sau integrabil al sistemelor. O direcție importantă este analiza proprietăților informaționale ale stărilor cuantice, inclusiv cuantificarea non-stabilizerness (magic) și a corelațiilor cuantice în sisteme extinse. Cercetarea combină dezvoltarea de algoritmi numerici paraleli cu implementarea metodelor tensoriale și a diagonalizării exacte pentru studierea sistemelor cu interacțiuni puternice.

Teme științifice principale

- Studiul entropiei de stabilizator („magic”) în sisteme cuantice many-body și relația acesteia cu dinamica și transportul.
- Analiza reprezentărilor în spațiul impulsului pentru cuantificarea non-stabilizerness în lanțuri de spin.
- Dinamica în timp real în lanțul Ising în câmp transversal și în modelul XXZ.
- Transport de spin și energie în lanțuri XXZ deschise cu drivare la margine.
- Corelația dintre generarea de entanglement și propagarea magic în sisteme neechilibrate.
- Studiul diferențelor dintre comportamentul integrabil și cel haotic în dinamica sistemelor cuantice.
- Funcții spectrale la temperatură infinită în modelul XXZ.
- Evoluția operatorilor și scrambling în sisteme cuantice interacționante.
- Implementarea și optimizarea metodelor DMRG și a algoritmilor tensoriali pentru simulări în timp real.
- Diagonalizare exactă și metode sparse pentru sisteme finite de dimensiune mare.
- Simularea modelului Hubbard cu spin folosind metode tensoriale (ITensor).
- Investigarea proprietăților informaționale ale modelelor integrabile, inclusiv modelul Richardson, din perspectivă de quantum information.

LISTA LUCRĂRI REPREZENTATIVE

În continuare este prezentată lista lucrărilor științifice publicate în ultimii cinci ani în cadrul grupului de cercetare, pentru realizarea căreia a fost utilizată infrastructura Laboratorului de Calcul Științific de Înaltă Performanță (HPC). Resursele clusterului au fost esențiale pentru desfășurarea simulărilor numerice la scară mare, a calculelor paralele multi-nod și a analizelor de date intensive asociate studiului sistemelor cuantice many-body. În mod particular, infrastructura a permis implementarea și rularea algoritmilor de diagonalizare exactă, a metodelor tensoriale (DMRG și evoluții în timp real), precum și a simulărilor de transport în sisteme deschise și modele integrabile sau neintegrabile. Capacitatea de calcul distribuit, memoria extinsă disponibilă pe nodurile high-memory și suportul pentru paralelizare MPI/OpenMP au constituit elemente critice pentru obținerea rezultatelor raportate în publicațiile enumerate mai jos. Utilizarea constantă a infrastructurii HPC a contribuit semnificativ la creșterea productivității științifice și la publicarea rezultatelor în reviste internaționale de prestigiu.

- [1] Kondo compensation in a pseudogap phase: A renormalization group study
Hajdú, C., Moca, C.P., Dóra, B., Weymann, I., Zaránd, G.
Physical Review B, 2025, 111(15), 155125
- [2] Semiclassical analysis of spin dynamics in the non-Hermitian Hubbard model
Sticlet, D., Moca, C.P., Dóra, B.
Physical Review B, 2024, 110(22), 224433
- [3] Loss-Induced Quantum Information Jet in an Infinite Temperature Hubbard Chain
Penc, P., Moca, C.P., Legeza, Ö., ... Zaránd, G., Werner, M.A.
Physical Review Letters, 2024, 133(19), 190403
- [4] Work statistics and generalized Loschmidt echo for the Hatano-Nelson model
Dóra, B., Moca, C.P.
Physical Review B, 2024, 110(12), L121116
- [5] Collective tunneling of a Wigner necklace in carbon nanotubes
Szombathy, D., Werner, M.A., Moca, C.P., ... Ilani, S., Zaránd, G.
Physical Review B, 2024, 109(24), 245139
- [6] Optical conductivity of a PT -symmetric Tachyon model
Sticlet, D., Dóra, B., Pascu Moca, C.
AIP Conference Proceedings, 2024, 3181(1), 030002
- [7] Friedel oscillations around imaginary potentials
Sticlet, D., Dóra, B., Pascu Moca, C.
AIP Conference Proceedings, 2024, 3181(1), 030001

- [8] Kardar-Parisi-Zhang scaling in the Hubbard model
Moca, C.P., Werner, M.A., Valli, A., Prosen, T., Zaránd, G.
Physical Review B, 2023, 108(23), 235139
- [9] Combining the in-medium similarity renormalization group with the density matrix renormalization group: Shell structure and information entropy
Tichai, A., Knecht, S., Kruppa, A.T. Werner, M.A., Zarand, G.
Physics Letters Section B Nuclear Elementary Particle and High Energy Physics, 2023, 845, 138139
- [10] Spectroscopic evidence for engineered hadronic bound state formation in repulsive fermionic SU(N) Hubbard systems
Werner, M.A., Moca, C.P., Kormos, M., ... Dóra, B., Zaránd, G.
Physical Review Research, 2023, 5(4), 043020
- [11] Correlations at higher-order exceptional points in non-Hermitian models
Sticlet, D., Moca, C.P., Dóra, B.
Physical Review B, 2023, 108(7), 075133
- [12] Quantum quench dynamics in the Luttinger liquid phase of the Hatano-Nelson model
Dóra, B., Werner, M.A., Moca, C.P.
Physical Review B, 2023, 108(3), 035104
- [13] Multiparticle quantum walk: A dynamical probe of topological many-body excitations
Ostahie, B., Sticlet, D., Moca, C.P., ... Asbóth, J.K., Zaránd, G.
Physical Review B, 2023, 108(3), 035126
- [14] PT-symmetry phase transition in a Bose-Hubbard model with localized gain and loss
Moca, C.P., Sticlet, D., Dóra, B., Zaránd, G.
Physical Review B, 2023, 107(11), 115111
- [15] Full counting statistics in the many-body Hatano-Nelson model
Dóra, B., Moca, C.P.
Physical Review B, 2022, 106(23), 235125
- [16] Non-Hermitian off-diagonal magnetic response of Dirac fermions
Kiss, R.Z., Sticlet, D., Moca, C.P., Dóra, B.
Physical Review B, 2022, 106(16), 165411
- [17] Quantum Coulomb glass on the Bethe lattice
Lovas, I., Kiss, A., Moca, C.P., Zaránd, G.
Physical Review Research, 2022, 4(2), 023067

- [18] Simulating Lindbladian evolution with non-Abelian symmetries: Ballistic front propagation in the SU(2) Hubbard model with a localized loss
Moca, C.P., Werner, M.A., Legeza, Ö., ... Kormos, M., Zaránd, G.
Physical Review B, 2022, 105(19), 195144
- [19] Correlations at PT-Symmetric Quantum Critical Point
Dóra, B., Sticlet, D., Moca, C.P.
Physical Review Letters, 2022, 128(14), 146804
- [20] Kubo Formula for Non-Hermitian Systems and Tachyon Optical Conductivity
Sticlet, D., Dóra, B., Moca, C.P.
Physical Review Letters, 2022, 128(1), 016802
- [21] Dissipative dynamics in the free massive boson limit of the sine-Gordon model
Bácsi, Á., Moca, C.P., Zaránd, G., Dóra, B.
Scipost Physics Core, 2022, 5(1), 004
- [22] Kondo Cloud in a Superconductor
Moca, C.P., Weymann, I., Werner, M.A., Zaránd, G.
Physical Review Letters, 2021, 127(18), 186804
- [23] Universal conductance of a PT-symmetric Luttinger liquid after a quantum quench
Moca, C.P., Dóra, B.
Physical Review B, 2021, 104(12), 125124
- [24] Non-Hermitian Lindhard function and Friedel oscillations
Dóra, B., Sticlet, D., Moca, C.P.
Physical Review B, 2021, 104(12), 125113

PARTENERI

De asemenea, infrastructura Laboratorului de Calcul Științific de Înaltă Performanță este utilizată în mod activ în cadrul unor colaborări științifice naționale și internaționale. Accesul la resursele de calcul distribuit și la nodurile cu memorie extinsă permite desfășurarea de proiecte comune care implică simulări numerice intensive și dezvoltarea de metode computaționale avansate.

Colaborările active includ:

- **Sticlet Doru** – colaborare orientată spre studiul sistemelor cuantice topologice și al proprietăților de transport în modele efective de materie condensată. Infrastructura HPC este utilizată pentru simulări numerice ale hamiltonienilor model și analiza proprietăților spectrale și a stărilor de margine.
- **Balázs Dóra** – colaborare în domeniul sistemelor cuantice corelate și al fenomenelor de neechilibru. Clusterul este folosit pentru calcule many-body, analiză spectrală și investigarea dinamicii în timp real în modele de spin și fermionice.
- **Ostahie Bogdan** – colaborare axată pe modelare numerică și dezvoltarea de algoritmi pentru studierea proprietăților electronice în sisteme cu interacțiuni. Resursele HPC sunt utilizate pentru diagonalizări exacte și simulări la scară mare.
- **Werner Miklós** – colaborare concentrată pe metode numerice pentru sisteme cuantice puternic corelate, incluzând implementarea și optimizarea algoritmilor tensoriali și analiza proprietăților informaționale ale stărilor cuantice.

Aceste colaborări contribuie la valorificarea eficientă a infrastructurii HPC și la integrarea laboratorului într-o rețea activă de cercetare științifică competitivă la nivel internațional.