

課題名 (タイトル) :

Development of massive parallel *ab initio* quantum-chemical program

利用者氏名 : ○秋永 宜伸

所属 : 計算科学研究機構 量子系分子科学研究チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

物質科学の研究において、ハイパフォーマンス計算機資源をいかした大規模計算が求められている。本課題では、所属研究で京コンピュータ向けに開発中の分子科学計算ソフトウェア NTChem の並列チューニングを進めている。今年度は京コンピュータ上でのチューニングに重点を置いたため、RICC の利用はなかった。