

課題名 (タイトル) :

大規模系の超並列量子化学計算のための理論およびアルゴリズムの開発

利用者氏名 : 河東田 道夫

所属 : 計算科学研究機構 量子系分子科学研究チーム

- |  |  |
|--|--|
| <p>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</p> <p>近年の大規模計算システムではマルチコア超並列クラスタシステム構成が一般的となっており、現在では京コンピュータのような 10 ペタフロップス級の演算性能を持つシステムも登場している。理論分子科学の分野においても、巨大分子の高精度量子化学計算をこれらのシステム上で実行可能とする計算科学基盤技術を整備し、ナノ分子や生体分子の機能デザインや生体系の現象解明といった応用計算を行うことが重要な研究課題となっている。本課題では、京コンピュータなどのマルチコア超並列クラスタシステムを用いてナノ分子や生体分子の高精度量子化学計算を現実的な計算時間で実行可能とするために、超並列計算に適した高精度量子化学理論の計算手法・超並列アルゴリズム、およびプログラムの開発を行っている。昨年度 RICC 利用課題においては、ナノ分子や生体分子などの化学現象で重要な役割を果たすファンデルワールス力のような電子相関に由来する弱い非共有結合相互作用を正しく再現し、かつ高速に計算すること可能な Resolution-of-identity Møller-Plesset 2 次摂動 (RI-MP2) 法による電子相関エネルギー計算の超並列アルゴリズムおよび計算ソフトウェアの並列性能向上のためのチューニングを行い、性能評価テストを超並列クラスタシステムを用いて行った。</p> <p>2. 具体的な利用内容、計算方法</p> <p>本年度は RICC を利用しなかった。</p> <p>3. 結果</p> <p>本年度は RICC 利用による成果はない。</p> | <p>4. まとめ</p> <p>本年度は RICC を利用しなかったため、利用成果は特に無かった。</p> <p>5. 今後の計画・展望</p> <p>次年度も簡易利用での RICC 利用申請を行う予定である。新システムが稼働した際には、今年度開発を行った RI-MP2 法に基づく解析的エネルギー勾配計算の超並列アルゴリズムおよび計算プログラムの性能評価を行うことを検討している。</p> <p>6. 利用がなかった場合の理由</p> <p>上述の RI-MP2 法に基づく解析的エネルギー勾配計算のアルゴリズムおよびプログラムの開発は京コンピュータ上で行ったため、RICC を利用する機会が無かった。さらに、昨年度と比較して、超並列クラスタシステムの利用可能ノード数が大きく減り、さらに週末運用も行われなかったため、並列性能評価のために RICC を利用する機会も無かった。</p> |
|--|--|