

量子化学計算ソフトウェアNTChemの開発

理化学研究所 計算科学研究センター 川嶋 英佑

目的 当研究チームで開発している量子化学計算NTChemについてベンチマークを行い、プロファイリングを取る.

内容 4,5-di(9*H*-carbazol-9-yl)phthalonitrile (2CzPN) 複合系を対象にハイブリッド密度汎関数法計算のストロング/ウィークスケーリングを計測した. 汎関数にはPBE0, 基底関数にはSTO-3G, pcseg-0, pcseg-1 を用いた.

結果 良好なスケーリングが発揮されていることが確認された.

利用した計算機

ノード時間
使用メモリ
並列化

OCTOPUS/SQUID

2800時間/2400時間

30GB

フラットMPI,
MPI-OpenMPハイブリッド並列
(NUMAノード内)

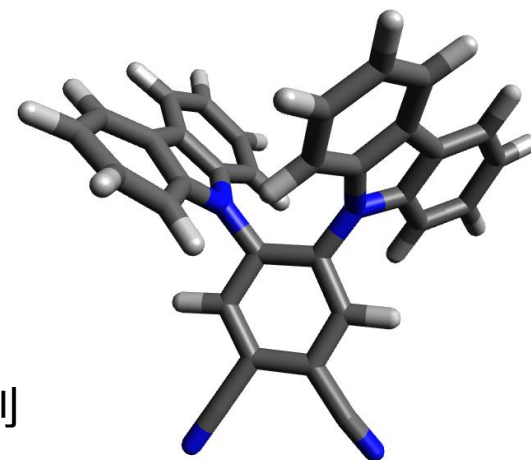


図 2CzPN