

# SX-Aurora TSUBASAへのOSSアプリケーション移植調査

日本電気株式会社 官公ソリューション事業部門 片岡 洋介

- 目的 SX-Aurora TSUBASAのもつベクトル演算性能の優位性を発揮するアプリケーション移植技術の確立を目的とする。
- 内容 フラグメント分子軌道法計算プログラム"ABINIT-MP"のSX-Aurora TSUBASAへの移植性調査、技術課題の抽出、ならびに、性能調査を実施した。性能調査においては、アーキテクチャの進化および、それに伴う演算性能とメモリバンド幅とのバランスの変化を考慮した最適化を検討した。また、スカラ型スーパーコンピュータとの性能比較を通じて、ベクトル演算性能の優位性を検証した。
- 結果 ABINIT-MPのSX-Aurora TSUBASAへの移植・性能分析および最適化施策の検討・適用をすることにより、スカラ型スーパーコンピュータと比較して、新型コロナウイルスのメインプロテアーゼ+N3リガンドの結晶構造(PDB-ID=6LU7)における6-31G\*基底でのFMO-MP2計算において約1.35倍の性能優位性を実現した。
- 利用した計算機
- |        | SX-Aurora TSUBASA | Intel Xeon Platinum 8368 |
|--------|-------------------|--------------------------|
| ノード時間  | 22時間              | 100時間                    |
| 使用メモリ  | 366GB             | 366GB                    |
| ベクトル化率 | 96.9%             |                          |
| 並列化    | 64並列              | 128並列                    |
- 