

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ソフトウェア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 NTChemのadaptive density partitioning technique実装が、効率的に高速Fourier変換を実行しているかについて、水素終端されたシリコン $\text{Si}_{17}\text{H}_{36}$ をPBE/3-21Gレベルで計算することで評価した。3-21Gを採用したのは、大きな基底関数系では実空間での通常の2電子積分がボトルネックとなるためである。

結果 Intel MKLでは良好なパフォーマンスが発揮されていることを確認した。

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群	
	ノード時間	400 時間
	使用メモリ	30 GB
	並列化	1ノード

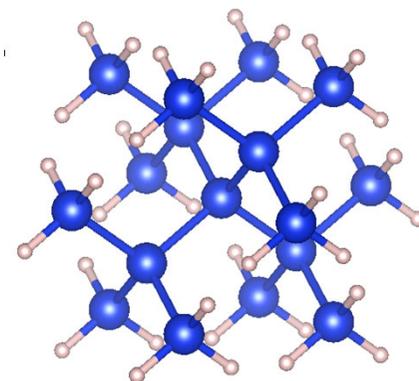


図 (水素終端したシリコン, $\text{Si}_{17}\text{H}_{36}$)