

OCTOPUSにおけるABINIT-MPのシミュレーション

大阪大学大学院薬学研究科 高谷大輔

目的 ABINIT-MPの高速化、高度化

内容 ・ 計算中間値を効率的にメモリ上に保存することで演算数を削減

結果 ・ メモリ保存機能（EriBuf_monomer|dimer）を有効にすることで、1.8倍程度の高速化を達成した。

表 メモリ保存機能ON/OFFによる高速化の効果
Chignolin/6-31G*/HF

EriBuf_monomer	EriBuf_dimer	total energy	Total Time
0	0	-3799.5009428415	745.6
5	6	-3799.5009428415	406.1

利用した計算機 OCTOPUS
1ノード実行、MPI/OpenMP、FlatMPI