

**大規模**

ナノサイズ分子

並列化効率の向上

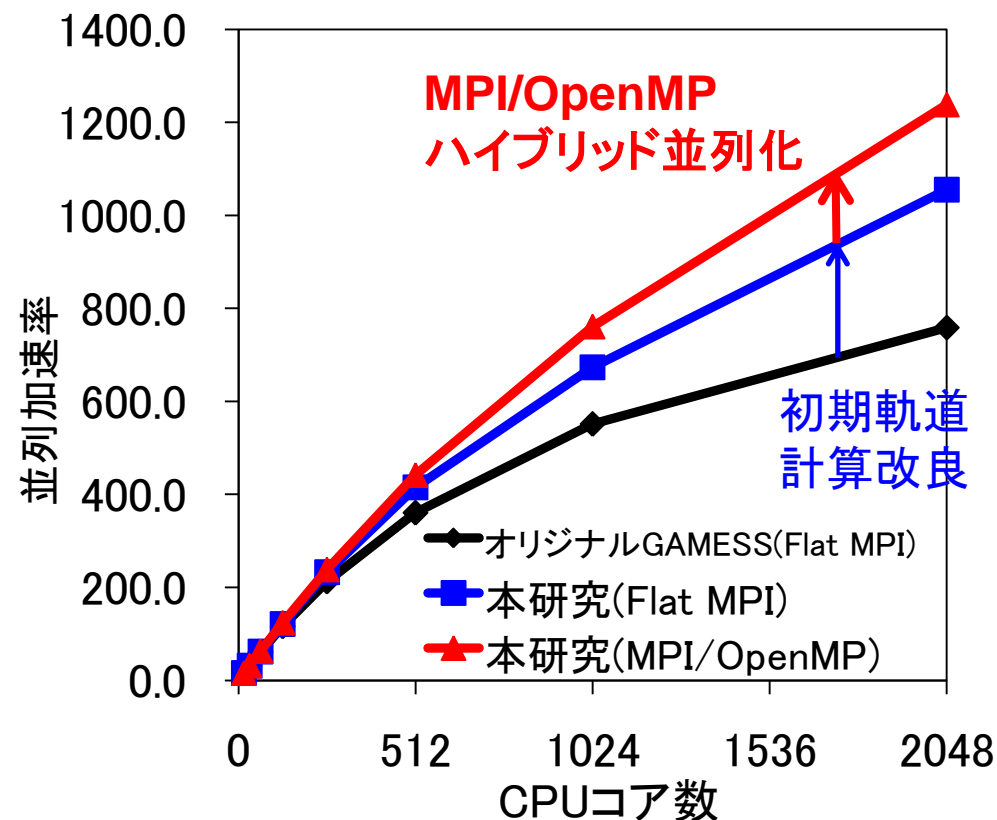
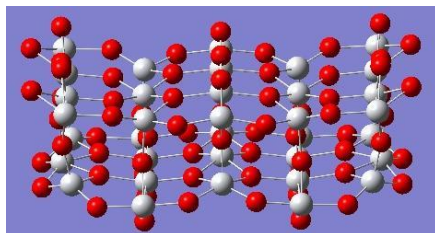
**高精度**

高精度理論計算

必要メモリ量の増加

ノード間、ノード内  
それぞれで負荷分散OpenMPによる  
ノード内のメモリ共有量子化学の基礎理論Hartree-Fock計算の  
**MPI/OpenMPハイブリッド並列化**

- ・GAMESSプログラムに実装  
(初期軌道計算の高速化、並列化を含む)
- ・Cray XT5 2048 CPUコア  
(8CPUコア/ノード)使用
- ・分子: TiO<sub>2</sub>クラスター(Ti<sub>35</sub>O<sub>70</sub>)
- ・基底: 6-31G (1645次元)



初期軌道計算を含めた全計算が  
**2048CPUコアで1238倍**

- ・ **MPI/OpenMPハイブリッド並列化** → **並列加速率向上、計算時間削減**
- ・ **数千コア、数万コアレベルで実用的な計算** → **全計算の高速化・並列化が重要**