

# HPCS2015 オーガナイズド・セッション (OS\_1\_S、ショート OS)

OS タイトル	量子化学、計算化学とハイパフォーマンスコンピューティング		
OS 提案者氏名	中田真秀	所属	理化学研究所 情報基盤センター
OS 概要	<p>量子化学のプログラムパッケージは様々なものがあり、日々、新規物性の開発、有機化学や生体内の化学反応の解析など幅広い化学に応用されている。また、実装面でも多くの要素技術を必要とし、HPC としても興味深い。しかしながら、現在の量子化学がかかえるボトルネックを、HPC 視点でクリアに提示し、それを解決する、という活動は定着しているとは言えない。今回はその問題提起および議論をしたい。トピックとしては python でのプロトタイピング、プログラムスイート開発とその紹介、計算化学ベンチマークスイートの提案、である。</p>		
開催趣旨の説明 (HPCS2015 のテーマとの関連性)	<p>これまで量子化学、計算化学のプログラムパッケージは沢山開発されてきた。しかしながら、これらの開発研究は、主にどのように化学を発展させるかという視点で行われてきており HPC という視点ではあまり行われて来なかった。そのため実装向けの研究の多くには成果発表の場がなかった。従って HPC 的な視点での量子化学、計算化学の研究および議論の場を作ることには大変意義がある。</p>		

<b>講演者 1</b>	
タイトル	Python を用いた量子化学プログラムの開発と応用
講演者氏名 (所属)	島崎智実 (理化学研究所・計算科学研究機構)
<p>概要</p> <p>量子化学計算手法は化学分野だけでなく、材料や創薬等の様々な分野で重要な役割を果たしつつある。しかし、量子化学を幅広く応用していくには、プログラム整備や HPC 並列計算への対応等、プログラム開発者の負荷は増大する一方である。そこで、本研究ではプログラム生産性を向上させるために Python の利用を検討した。数値計算では高速性が求められるが、hot スポットに対しては、Fortran や C/C++ を用いてプログラムを記述するが、それらを binding することによって Python からの利用を可能にした。HPC 環境においても、このような技術を用いることにより、計算速度を一切犠牲にすることなく、Python の持つ高いプログラム開発能力を利用可能である</p>	
<b>講演者 2</b>	
タイトル	大規模並列量子化学計算プログラム SMASH の開発と公開
講演者氏名 (所属)	石村 和也
<p>概要</p> <p>2014 年 9 月に量子化学計算プログラム SMASH <a href="http://smash-qc.sourceforge.net/">http://smash-qc.sourceforge.net/</a> を Apache License 2.0 で公開した。360 原子で構成される炭素材料の密度汎関数 (DFT) エネルギー計算を京コンピュータで行ったところ、10 万 CPU コアで並列加速率は約 5 万倍、実行時間は 2 分半であった。ナノサイズ巨大分子の電子状態計算が実用的になり、今後分子レベルの創薬、触媒や電池の設計など幅広い分野での利用が期待される。本講演では、SMASH の MPI/OpenMP ハイブリッド並列化、演算量削減、通信最適化アルゴリズム、プログラムの拡張性、さらに応用計算例やポスト京に向けた課題について紹介する</p>	
<b>講演者 3</b>	
タイトル	QuantumChemistry500
講演者氏名 (所属)	中田 真秀
<p>概要</p> <p>どのコンピュータがどのように高速か？という問いはいつも重要である。それを決めるコンピュータのベンチマークは Top500、Graph500 や HPC チャレンジなどのように、非常に単純、または人工的な問題を主体に行ってきており、実際にはほとんど意味の無い計算を行っている。一方量子化学計算は科学的な意味も大きくユーザーも多い。そこで、我々は新しく、量子化学計算を行う、コンピュータのベンチマークを提案する。ベンチマークとなる分子、計算手法、リファレンスになる結果などを提示する。この特徴は、科学的に有意義、というのみならず、量子化学計算は同じ条件では同じ結果を出すため、プログラムパッケージを固定する必要はないところにある。このベンチマークの狙いは二点ある。量子化学のアルゴリズムの発展および、HPC 的なプログラムチューニングの発展である。このベンチマークで分野を超えた研究者、技術者同士の共通の土台を作りたい。</p>	