



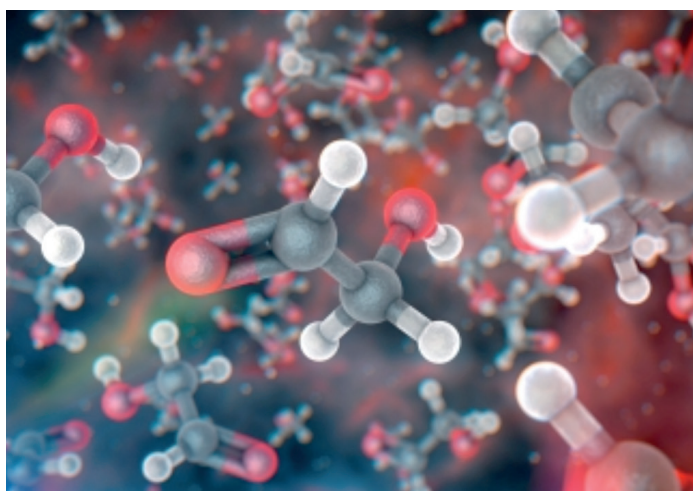
PROJEKT ELŐREHALADÁS:

I. Munkaszakasz:

A kvantumkémiai szimulációk futtatására és a szükséges szoftverfejlesztéshez alkalmas hardver-szoftver környezet kialakításra került. Elkészült egy különlegesen nagy kódot kezelni képes assembler, mely lineáris $O(n \log(n))$ időben képes sok millió utasításból álló forráskódot fordítani megfelelő bináris programmá. Elkészült a két elektron integrál számítás matematikai háttérének részletes matematikai leírása és az SCF algoritmus összes lépéseinek GPU-ra történő átvihetőségének és hatékonyságának vizsgálata. Részletes elemzést végeztünk, hogy milyen integrál levezetés útvonalak hatékonyak a GPU-n. Megtörtént a dupla pontosságú fordító backend implementációjának elkészítése, ami a tesztek szerint az STO-3G bázisra a dupla pontosságú integrálszámítást végez. Implementálásra került az SCF keretrendszer. Elkészült a rendszer olyan implementációja, ami névleges pontosság mellett képes single és double aritmetikával számolni két elektron integrálokat STO-3G bázisban GPU-n.

II. Munkaszakasz:

A programon végzett mérések alapján rengeteg további optimalizációt végeztünk, amik megnyitották a lehetőséget a szerves kémiában releváns nagy rendszerek számítása irányában. Implementálásra került egy DFT modul is, mely az első közelítés a programban, ami már ipari



relevanciával is rendelkezik ellentétben az SCF modullal, ami csak a nagyobb pontosságú módszerek bemeneteit számolja. Kialakítottunk egy különlegesen hatékony programinterfészt. Ennek legnagyobb előnye, hogy a program az eddig használt kvantumkémia szoftvereknél sokkal finomabban hangolható, a paraméterek futás közben a részeredményektől függően állíthatóak.



Megvizsgáltuk a nagyobb bonyolultságú kvantumkémiai algoritmusok elméleti és gyakorlati implementációs aspektusait. A rendszerünk az integrálszámítás mellett a DFT számítási feladatait is GPU-n oldja meg. A GPU implementáció optimalizációját több ponton sikerrel elvégeztük. A szoftver alkalmas GPU-grid kezelésére, valamint azon elosztott kvantumkémiai számítások végzésére, ami nagyban növeli a hatékonyságot és a számítási sebességet.

III. Munkaszakasz:

A szoftver széles körben történő használhatósága felé jelentős előrelépést tettünk. Együttműködés kezdődött a kvantumkémiai szoftver piac egyik legnagyobb ipari szereplőjével. Rendszerünk egyedülálló tulajdonságai miatt, akár egy már meglévő rendszerben történő integrálása esetén modul szintű GPU kompatibilitást biztosít és így jelentősen növeli annak teljesítményét. Elkészült a két szoftver közötti interfész és a tesztek alapján új eredményeink a területen minőségi előrelépést jelentenek.

Szoftverünkben megvalósítottuk a több GPU-s támogatást, így lényegében sok GPU-t tartalmazó hálózaton vagy GPU felhőn történő futtatást is hatékonyan meg tudunk valósítani. Tovább optimalizáltuk SCF és DFT algoritmusainkat, rendszerünk alkalmas RI-MP2 integrálok számítására és a coupled cluster (CC) futtatásokra is képes, amelyekhez a szükséges integrálokat GPU-n számoljuk. Megfelelő adatbázis és tesztrendszer felállításával biztosítottuk szoftver rendszerünk teljes kompatibilitást a piacon jelenleg legelterjedtebb GPU-k számára. Eredményeinket nemzetközi publikációkban dokumentáltuk.

