Abstrakt

Práce je rozdělena do několika částí. Nejdříve jsme implementovali paralelní kód BW-MRCCSD metody, který je založený na automaticky generovaném jednoreferenčním CC kódu z Tensor Contraction Engine (TCE). Následně jsme navrhli nové schéma nezávislé dvouúrovňové paralelizace, na jejímž základě jsme implementovali BW-MRCCSD a Mk-MRCCSD metody. Nový algoritmus využívá tzv. procesorových skupin, které mohou vykonávat části úloh navzájem nezávisle. V první úrovni paralelizace je řešení pro jednotlivé reference rozděleno mezi procesorové skupiny (reference-level parallelism), v druhé úrovni jsou pak úlohy dané reference distribuovány mezi procesy v odpovídající procesorové skupině (task-level parallelism). Testy škálování byly provedeny až na 24000 jádrech pro beta-karoten.

Další část je věnována paralelním MRCC výpočtům, kde je zároveň demostrována využitelnost nové implementace na větších a chemicky zajímavých systémech.

Poslední část práce se zabývá nově navrženou universal state-selective (USS) korekcí ke stavově specifickým MRCC metodám, její implementací a aplikací. Vlastnosti této korekce jsou ukázány na několika příkladech disociačních křivek a porovnány s FCI.