

GRRM プログラム機能一覧表

機 能	GRRM1.22	GRRM11	GRRM14
基準振動解析 (FREQ)	○	○	○
熱力学関数解析	○	○	○
安定構造最適化 (MIN)	○	○	○
EigenCheck (最適化後 FREQ 計算)	×	○	○
HESLOW (初期評価を低レベル計算)	×	○	○
SPHIGH (最適化後の高レベル計算)	×	○	○
最適化のステップ・精度調節	×	○	○
遷移構造最適化 (SADDLE)	○	○	○
EigenCheck (最適化後 FREQ 計算)	×	○	○
HESLOW (初期評価を低レベル計算)	×	○	○
SPHIGH (最適化後の高レベル計算)	×	○	○
最適化のステップ・精度調節	×	○	○
固有反応経路追跡 (IRC)	○	○	○
EigenCheck (追跡後 FREQ 計算)	×	○	○
追跡のステップ・精度調節	×	○	○
二点間遷移構造最適化 (2PSHS)	○	○	○
EigenCheck (最適化後 FREQ 計算)	×	○	○
最適化のステップ・精度調節	×	○	○
二点間中間体探索 (SCW)	○	○	○
EigenCheck (探索後 FREQ 計算)	×	○	○
探索のステップ・精度調節	×	○	○
反応経路自動探索 (GRRM)	○	○	○
低エネルギー構造優先探索 (LADD)	○	○	○
初期構造自動発生 (NRUN)	○	○	○
NLowest	○	○	○
FirstOnly	○	○	○
BondCondition	×	○	○
NoBondRearrange	○	×	×
EQOnly	○	○	○
部分構造の固定	○	○	○
探索・最適化のステップ・精度調節	×	○	○
DC 判定基準の調節	○	○	○
構造の自動再計算 (ReStruct)	○	○	○
SkipIRC	×	○	○
最適化のステップ・精度調節	×	○	○

注： GRRM14 は、2014 年 10 月からリリースが開始されました。

機 能	GRRM1.22	GRRM11	GRRM14
エネルギー値の自動再計算 (ReEnergy)	○	○	○
ONIOM 法	○	○	○
Microiteration 法	×	○	○
多状態ポテンシャル解析	×	○	○
OptX	×	○	○
ModelF	×	○	○
MolPro 用インターフェイス	×	○	○
外部プログラムの利用	○	×	○
並列探索 (GRRM, ReStruct, ReEnergy)	×	○	○
Gamess 用インターフェイス	×	×	○
人工力誘起反応法 (AFIR)	×	×	○
反応経路自動再最適化	×	×	○
周期境界条件利用探索	×	×	△*1
Node 間にまたがる運用 (NeoGRRM では対応)	×	×	×
計算機間にまたがる運用 (NeoGRRM では対応)	×	×	×

*1 GRRM14 公開版に搭載して 2014 年 10 月にリリースする予定でしたが、整備が間に合いませんでしたので、この機能は、開発者 version 限定となっております。

注： GRRM14 は、2014 年 10 月からリリースが開始されました。

GRRM プログラム研究目的別対応一覧表

研究目的	GRRM1.22	GRRM11	GRRM14
グローバル構造探索	○	○	○
EQOnly	○	○	○
並列探索	×	○	○
反応経路全面探索	○	○	○
並列探索	×	○	○
逆合成解析 (A←B+C+・・・)	○	○	○
反応中間体解析	○	○	○
表面反応解析	○	○	○
部分構造固定	○	○	○
BondCondition	×	○	○
並列探索	×	○	○
クラスター解析	○	○	○
EQOnly	○	○	○
NoBondRearrange	○	×	×
BondCondition	×	○	○
並列探索	×	○	○
触媒機構解析	○	○	○
並列探索	×	○	○
Microiteration	×	○	○
AFIR	×	×	○
励起状態解析			
各スピン多重度の最低状態	○	○	○
励起状態一般 (Molpro)	×	○	○
MSX 解析	×	○	○
円錐交差解析	×	○	○
光化学解析	×	○	○
巨大反応場解析	○	○	○
並列探索	×	○	○
Microiteration	×	○	○
結晶構造探索 (周期構造探索)	×	×	△*1
分子間反応解析			
A+B+・・・→C	△逆合成解析	△逆合成解析	○AFIR
A+B+・・・→C+D+・・・	×~△	×~△	○AFIR
備考： 逆合成解析と比べた AFIR の探索速度は、 4~5 原子で 10~100 倍、6 原子以上では 1000 倍以上			

注： GRRM14 は、2014 年 10 月からリリースが開始されました。

GRRM 並列探索機能による効率化

GRRM1.22 では、EQ 周りの反応経路探索を 1 つの EQ ごとに順繰りに行います。GRRM11 および GRRM14 では、JOB 投入時に GRRM 探索の並列化度を指定することにより、EQ の周囲の探索を複数同時に進行させることができます。この並列探索機能で、どのくらい探索が効率化するかは、使用する計算環境（1 つの計算ノード）のコア数に依存します。

GRRM1.22 では、GRRM の並列探索機能がありませんので、電子状態計算に用いる Gaussian プログラムを並列化させて利用することで探索効率が上がります。電子状態計算の並列化度で、効率がどのように向上するかは、計算機システムや計算対象によって変わりますが、そのおよその傾向は、4~6 コア程度のところまでかなり直線的に向上し、8 コア程度以上になるとコア数に対する効率の向上が次第に頭打ちになり、10 コア以上利用しても、あまり効率が上がらなくなるのが普通です。

GRRM1.22 で Gaussian の並列度を 4 とした場合と比べて、GRRM11/GRRM14 での探索効率が、計算機（1 つのノード）のコア数に対してどの程度になるかを大雑把に見積もると、つぎのようになります。

1 ノード内コア数	GRRM11/GRRM14 での探索速度 / GRRM1.22 での探索速度
8	約 2 倍
1 2	約 3 倍
1 6	約 4 倍
2 0	約 5 倍
3 2	約 8 倍
6 4	約 1 6 倍
1 2 8	約 3 2 倍
2 5 6	約 6 4 倍
1 0 2 4	約 2 5 6 倍
4 0 9 6	約 1 0 2 4 倍
6 5 5 3 6	約 1 6 3 8 4 倍
2 6 2 1 4 4	約 6 5 5 3 6 倍
1 0 4 8 5 7 6	約 2 6 2 1 4 4 倍

備考： 探索すべき構造数が少なければ、GRRM の並列探索による効率向上の程度は、構造数以上にはなりません。GRRM11/GRRM14 での並列化は、1 ノード内に限定されていますが、現在進めております超並列化プロジェクト (NeoGRRM など) では、ノードを超えた並列化が可能になりますので、多数のノードまたは計算機の集団が保有する全コア数に対して、並列探索による効率化が実現するものと期待されています。

注： GRRM14 は、2014 年 10 月からリリースが開始されました。