

○大野公一

東北大院理・量子化学探索研究所

ohnok@m.tohoku.ac.jp

序 ポテンシャル表面上の化学構造（平衡構造 EQ, 遷移構造 TS）を量子化学計算に基づいて調べあげることが5原子以上では不可能であった[1]が、ポテンシャルの非調和下方歪(ADD)を利用することでこれを可能とし[2]、これまでに自動探索プログラム GRRM[3, 4]及び並列アルゴリズムを搭載した GRRM11[5]を開発してきた。本発表では、従来 node 内に限定されていた並列化を node 間に拡張する超並列 GRRM プログラム NeoGRRM の開発状況について報告する。GRRM プログラムでは、多原子系のポテンシャルエネルギー超曲面上の一点の電子状態計算を多数回繰り返す。一点計算としては必ずしも大規模計算でなくとも計算回数が膨大となるため、GRRM プログラムによる計算は一般に全体として大規模なものとなる。自動探索の途中において個々の電子状態計算は独立であるから、本質的に GRRM 法は超並列計算機に適している。しかしながら、計算の実行にあたっては、一点計算の結果を解析し、それまでの計算結果を参照しつつ、次の一点計算をどう行うかを判定して進行するため、効率的に計算機を利用するよう、全体の JOB 管理に特別な工夫が必要となる。

<GRRM プログラム> 化学反応経路自動探索プログラム GRRM は、平衡構造 EQ の周囲の反応経路の自動探索（1点周り探索）を繰り返して EQ, TS, IRC 及び解離経路(DC)を芋づる式に探索する自動解析プログラムであり、1点周り探索を順次繰り返す（非並列）GRRM1.22 と、1 node 内で1点周り探索を複数同時に行う（並列）GRRM11 がリリースされている。

<NeoGRRM プログラム> NeoGRRM では、複数の node を利用して GRRM11 による並列探索（超並列探索）を行う。このため、以下の3点への対応が必要である。

- (1)各 node で行う探索が node 間で重複しないよう全体の探索を合理的に管理する。
- (2)探索に要する計算時間と比べて node 間のデータ通信時間をできるだけ短縮する。
- (3)多数の node で別々に探索した結果を統合する。

node 間の情報の記録・参照を login せずに行えるクラスター計算機を対象を絞り、JOB の投入は rlogin で行う方式を採用した。通常の GRRM11 による node 内並列 JOB をメイン JOB として投入し、GRRM11 による1点周り探索をサブ JOB として投入して空いているコアを有効に活用するようにした。1点周りのサブ JOB は、探索された EQ リスト中1点周り未探索の EQ のうち最低エネルギーのものについて行うようにし、1点周り探索を行った EQ を Done リストに記録して、以降重複して1点周り探索が行われないようにした。

図1に示したように、コアの利用率は、NeoGRRM の投入後急速に立ち上がり、高い利用率が続いた後、1点周り未探索の EQ が減少すると利用率が低下する。5原子系(BCNOS)の全面探索について、2 core の計算機で6カ月以上かかったものが、16 core/node の4 node 計算システムで NeoGRRM 法を用いた場合は5日程度で終了した。この結果から、NeoGRRM 法により、マルチノード環境でも GRRM11 プログラムを効果的に利用できることがわかった。

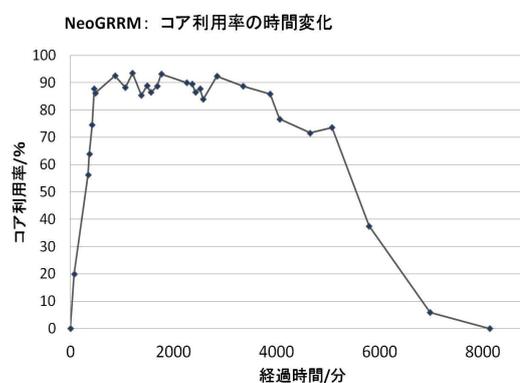


図1. NeoGRRM コア利用率の経時変化

[1] Jensen, F. Introduction to Computational Chemistry, 1999, Wiley.

[2] Ohno, K.; Maeda, S. *Chem. Phys. Lett.* **2004**, 384, 277.

[3] Maeda, S.; Ohno, K. *J. Phys. Chem. A* **2005**, 109, 5742.

[4] Ohno, K.; Maeda, S. *J. Phys. Chem. A* **2006**, 110, 8933.

[5] 大野公一、長田有人、前田理、諸熊奎治、第14回 理論化学討論会（岡山）2D1b (2011).