

GRRM の高速化と可視化：超並列化 NeoGRRM とリアルタイム GRRM (量子化学探索研究所・東北大院理) 大野 公一

[序] 個々の化学組成に可能な構造と反応経路の自動探索は、GRRM プログラムによって始めて実現されたが、探索に要する時間が長く探索結果が膨大で有意な情報の取出しに手間がかかることなど改善すべき課題がある。今回は、「探索過程の高速化」と「探索結果の可視化」への方策として現在取り組んでいる「超並列化 NeoGRRM」と「リアルタイム GRRM」について報告する。

[超並列化 NeoGRRM] 構造と反応経路の網羅的な探索を行う GRRM オプションでは、安定構造(EQ)の周囲に存在する反応経路を見つけ出す「1点周り探索」をすべての EQ について1度ずつ行う。初期の GRRM プログラム (GRRM1.n) は、1つの1点周り探索が終わってから次の1点周り探索を開始する非並列の仕様であり、これを single-GRRM とよぶ。GRRM11 は、single-GRRM をマルチコア環境の1つのノード内で同時に複数走らせる仕様になっており、1点周り探索を開始した EQ を DONE リストに登録し、新たな1点周り探索は DONE リストに未登録の EQ について開始させることにより、複数の single-GRRM が行う1点周り探索の重複を回避している。GRRM11 では、1ノード内限定で、GRRM の並列化を実現しているが、複数のノードを利用して高速化させることはできない。現在開発を進めている NeoGRRM では、複数のノード (または複数の計算機) を利用して GRRM オプションによる網羅的な探索を行うことができる。NeoGRRM では、利用できるノード数に制限はないので、巨大な計算環境で GRRM を並列化する超並列化が可能である。

[リアルタイム GRRM] GRRM プログラムで網羅的な探索を行うと、探索の進行につれて、探索結果を記録したファイルの内容が更新され、次第に探索結果を記したファイルの数やファイルサイズが増える。大量の探索結果から、有意な情報を引き出すためには、解析作業を効率化することが望まれる。そのやり方は任意であり、いろいろな方策があり得るが、標準的なものとしては、以下の項目があげられる。

- ・ 構造の系統的番号付
- ・ 構造の可視化
- ・ 最安定構造を基準とする各構造のエネルギー値 (単位 : kJ/mol)
- ・ 各安定構造 (EQ) 周りの連結情報 (隣接する TS とその先の EQ または DC)
- ・ 各遷移構造 (TS) に直結する連結情報 (隣接する EQ または DC)
- ・ 各解離構造(DC)に直結する連結情報 (隣接する TS または EQ)

GRRM 探索情報自動処理プログラム GRRM-GDSP を利用すると、以上の情報が自動解析され Web ブラウザで簡便に閲覧できるようになる。今回、GRRM プログラムによる探索実行中に GRRM-GDSP 処理をリアルタイムで行う GRRMgdsp (リアルタイム GRRM) を作成した。その実例は GRRM ホームページ <http://grrm.chem.tohoku.ac.jp/GRRM/>に公開されており、探索中の情報が常時可視化され Web 表示されている。