

マルチコア大規模GRRM

大野 公一

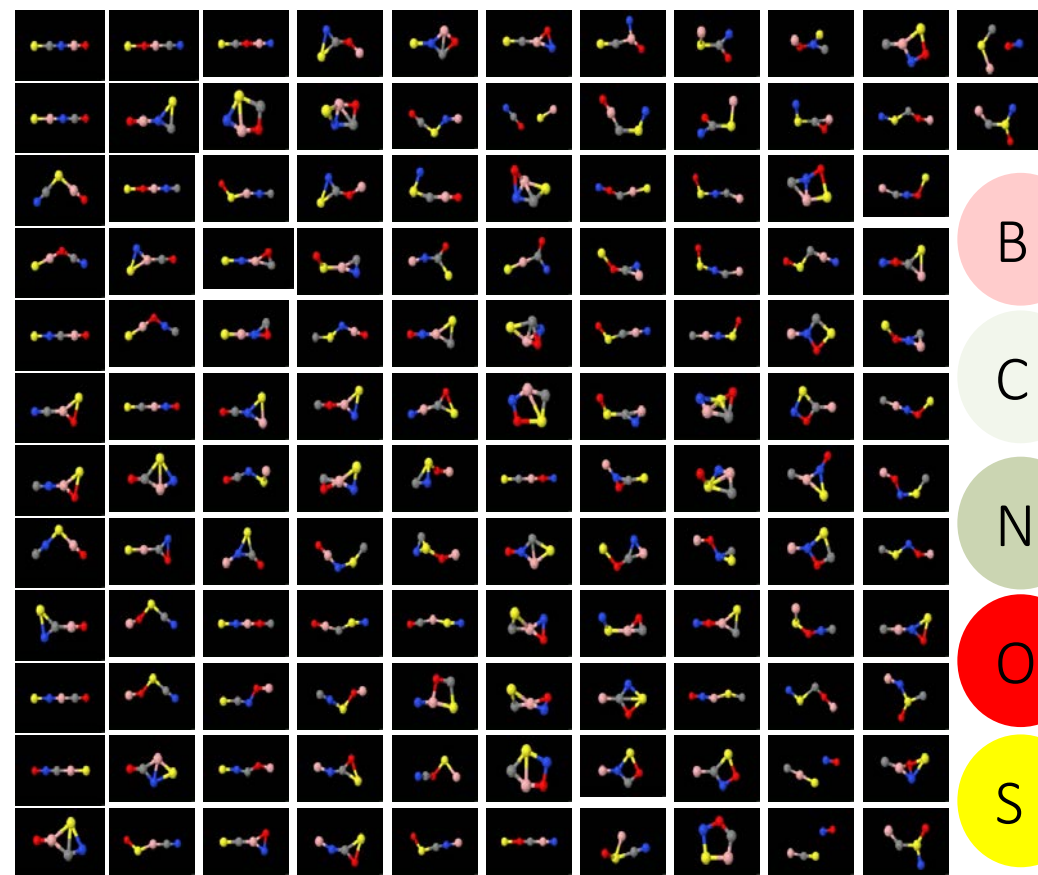
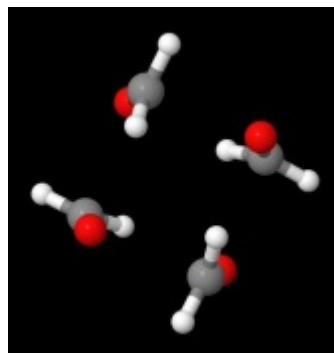
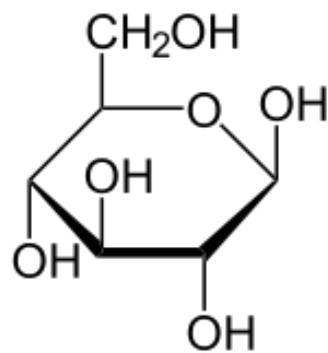
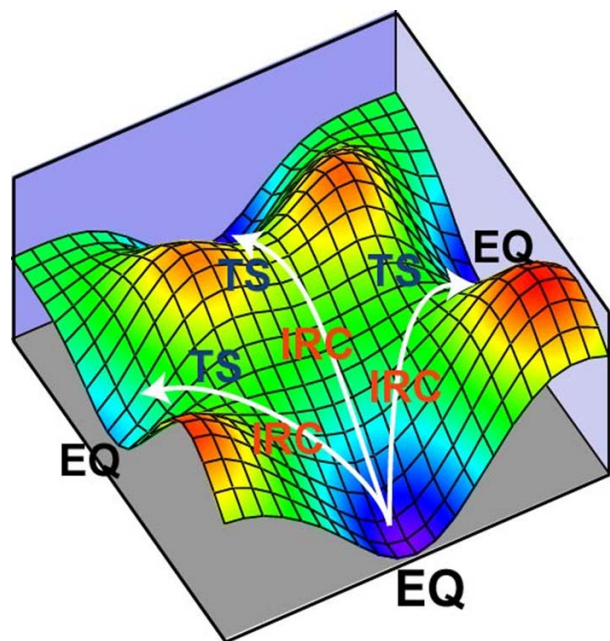
反応経路自動探索プログラム GRRM

平衡構造 EQ

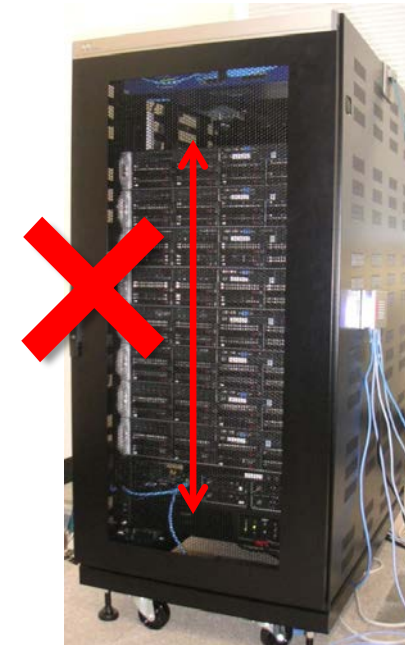
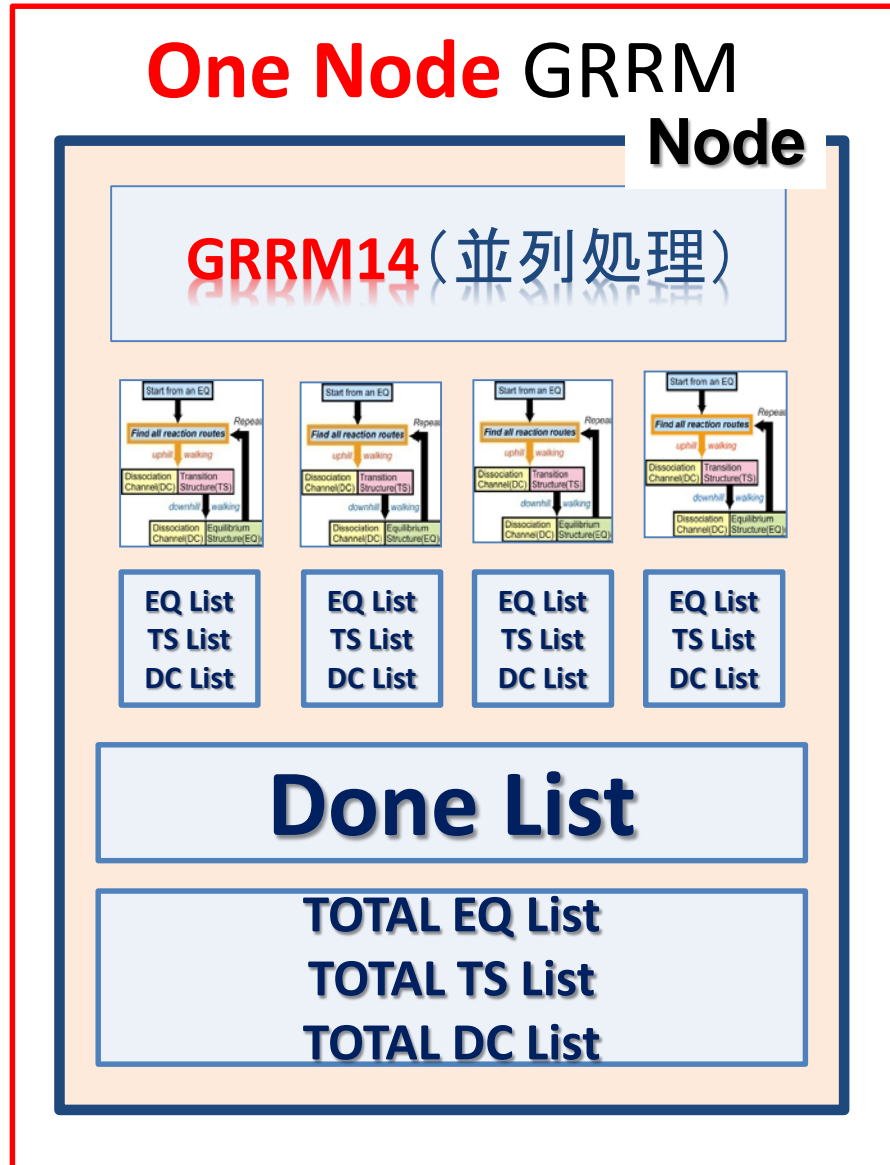
遷移構造 TS

反応経路 IRC

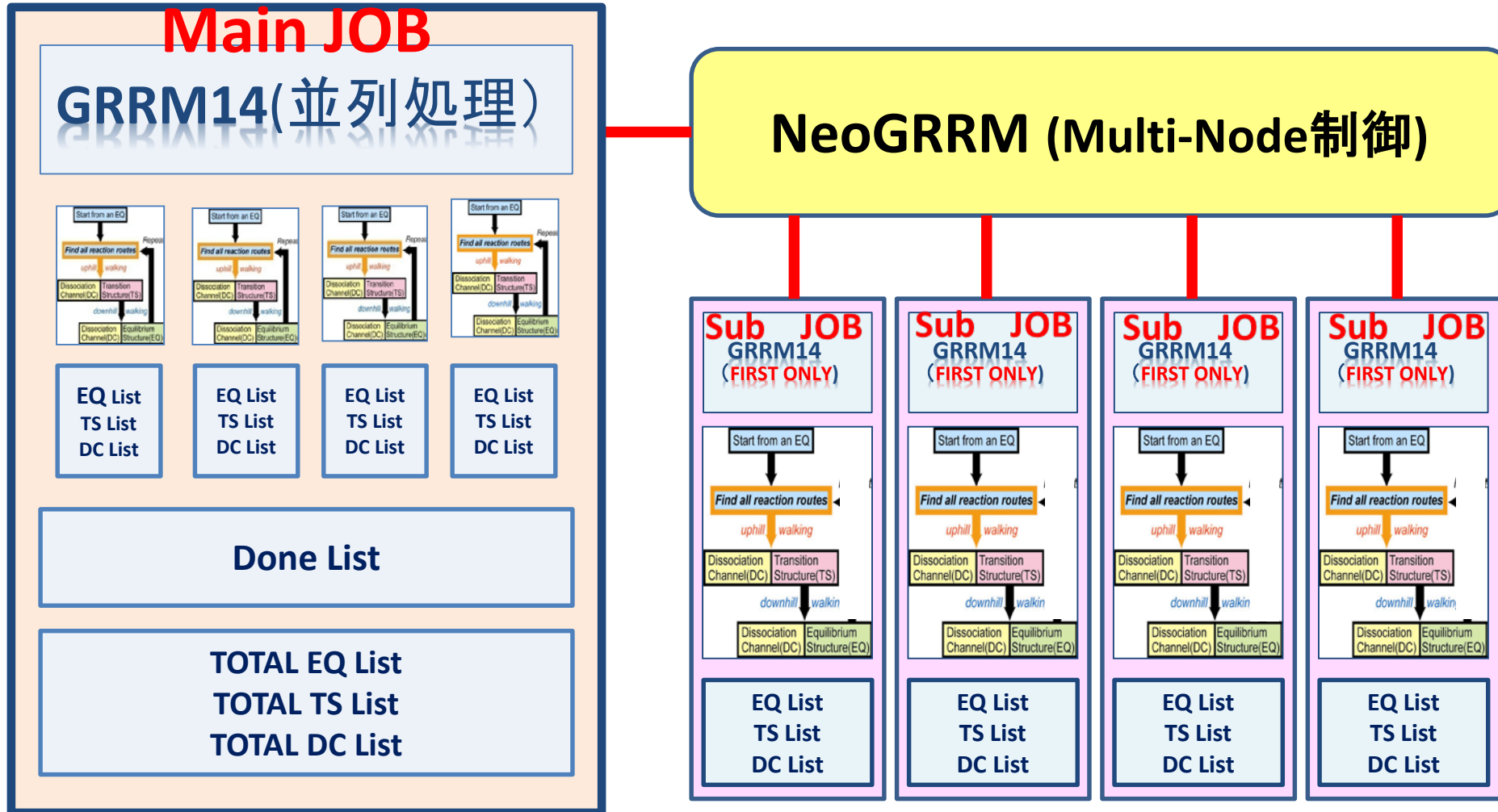
を自動的に調べ上げる



GRRM14では node内でのみの 並列化



NeoGRRM : Multi-Node GRRM



NeoGRRM による 探索例

C6H6 RHF/6-31G

EQ 2727

TS 23565

探索時間 286.4 時間(約12日)

H3CNO3 B3LYP/6-31G*

EQ 667

TS 4734

16コア機で 8664.0時間(約1年)かかっていたものが
256コア機のNeoGRRMでは 297.8時間(12.4日)で終了

16コア × 16ノード = 256コア



NeoGRRM : GRRM 超並列化ソフトウェア

- ・ リリースされている GRRM プログラムをそのまま用いる。

- ・ 計算機(ノード)

Linuxマシン(クラスタ計算機でなくてもよい。コア数やCPUが不ぞろいでもよい。)

同じVersionのGRRMプログラム・Gaussianプログラムを使用

メインノードからサブノードに通信

メインノードにのみNeoGRRMをインストール

GRRMのジョブの投入はメインノードで

GRRMジョブの結果のファイル群はメインノードの作業ディレクトリに生じる