

## 量子化学探索の効率化と超並列化

○大野公一

豊田理研

ohnok@m.tohokku.ac.jp

**序** ポテンシャル表面上に散在する化学構造（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（量子化学探索）は、4原子以上では不可能とされていた[1]が、ポテンシャルの非調和下方歪み(ADD)に着目することで可能になり[2]、自動探索プログラム GRRM[3, 4]が開発され、さらに昨年の本討論会で、並列アルゴリズムを搭載した GRRM11 について報告した[5]。今回は、GRRM11 では node 内に限定されている並列化を、node 間に拡張する超並列化 GRRM の開発状況について報告する。

**従来の 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）を繰り返しながら EQ, TS, IRC 及び解離反応経路(DC)を芋づる式に探索する自動解析プログラムであり、1点周り探索を直列で繰り返す（非並列）GRRM1.22 と、1つの node 内で1点周り探索を複数同時に進行させる（並列）GRRM11 がリリースされている（問合せ先 ohnok@m.tohoku.ac.jp）。

**超並列 GRRM 法** 超並列化 GRRM 法では、複数の node（計算機）を利用して GRRM の並列探索を行う。並列化において、各過程の計算時間と比べて並列処理のためのデータ通信時間が無視できることが重要である。GRRM 法の場合、並列化の対象である各 EQ 1点周りの探索に要する計算時間は、図1に示すように、原子数10以上で100時間以上に達する。そこで1点周り探索を同時に利用可能な多数の node でそれぞれ行わせ、1点周り探索の投入と結果の集約を親プロセスが管理する超並列 GRRM を開発した。

並列化 GRRM では、図2のように、親プロセスは、1点周り探索に着手済みの EQ を登録した Done List と全体の探索結果をまとめた Total EQ List 等を管理し、各子プロセスは、自分が探索した構造の List だけを管理する。

GRRM11 では、各子プロセスが自己の EQ List 中から1点周り未着手の EQ を全体の Done List を参照して選び出しながら非並列の GRRM 探索を続け、親プロセスは子プロセスの進捗の監視と全体リストの更新を全部の子プロセスが終わるまで続ける。

超並列 GRRM では、各子プロセスを1点周り探索1回だけ(FirstOnly)に限定することで、親子間のデータのやり取りを最初と最後だけにし、子プロセスの途中で親子間のデータ通信をまったく行わないことで探索を効率化する。子プロセスの途中でデータ通信を行わないため、子プロセスに任意の node（計算機）を利用することができ、GRRM の並列度を飛躍的に高めることができる。

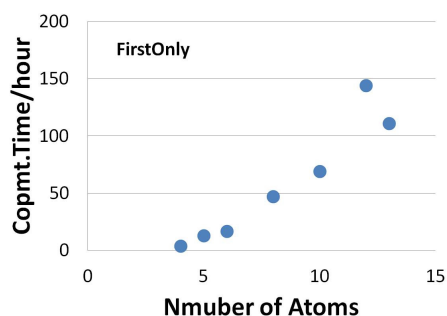


図1. 1点周り探索時間と原子数

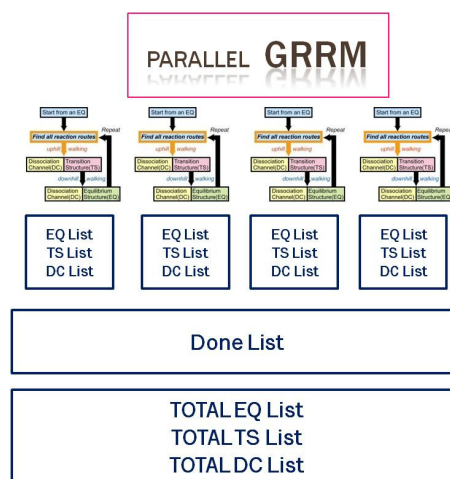


図2. GRRM の並列化  
(超並列 GRRM では、親子間のデータ通信を最初と最後に限定)

[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).