

## GRRM1.22 のマルチノード対応並列化

渡邊 啓正<sup>1</sup>, ○時子山 宏明<sup>1</sup>, 大野 公一<sup>1</sup>

<sup>1</sup>量子化学探索研究所

<sup>1</sup>watanabeh@iqce.jp

**序** ポテンシャルの非調和下方歪を利用する ADDF 法[1]により、ポテンシャル表面上の化学構造（平衡構造 EQ、遷移構造 TS）を自動探索（GRRM）することが可能となった。GRRM は 1.22、11、14 とバージョンアップしてきており、そのうちノード内マルチコアで並列可能であるのは 11 以降のみである。また、いずれもマルチノード間並列処理には対応していない。今回、著者らは GRRM1.22 に対して NeoGRRM 法[2,3]を実装することで、ノード内マルチコア並列、さらにマルチノード間並列に対応させたことを報告する。

**GRRM1.22 プログラム** GRRM プログラムバージョン 1.22 は、EQ の周囲の反応経路の探索（1 点周り探索）を繰り返して EQ, TS, IRC 及び解離経路を芋づる式に自動探索する。

**NeoGRRM プログラム** NeoGRRM は GRRM プログラムを用いて 1 点周り探索を複数ノードで並列に行う。これには次の 3 点の対応が行われる。

- (1)各ノードで行う探索がノード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ノード間のデータ通信時間をできるだけ短縮する。
- (3)多数のノードで別々に探索した結果を統合する。

1 点回り探索をノード内で複数実行することで、ノード内マルチコア並列にも対応できる。

**検証試験** GRRM1.22 に対して NeoGRRM 法を実装し、H<sub>4</sub>C<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 系の GRRM 全面探索を B3LYP/6-31G\*レベルで 3 ノードの計算機群を用いて実行した。結果、5.2 日で完遂し、EQ110 個・TS721 個を探索できた。探索中の各ノードの使用率を図 1 に示す。開始後 72 時間まで全ノードともほぼ 100% 使用し続けており NeoGRRM 法の並列効率の高さを類推できる。それ以降の使用率低下は既報[4]のとおり 1 点回り探索の対象の減少を反映したジョブ数の減衰による。また、今回使用した 3 ノードは 16, 16, 24 コアの計 56 コアからなる。NeoGRRM が、不均質な計算機群であっても、全ノード活用して高い使用率で並列に探索実行できることも示している。

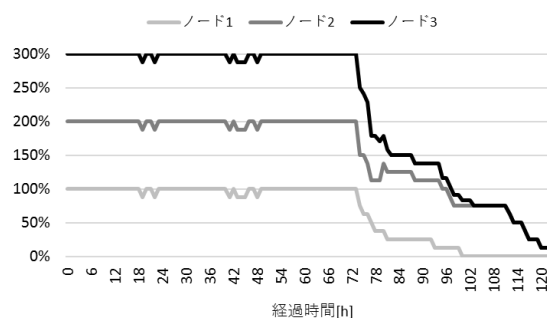


図 1 H<sub>4</sub>C<sub>2</sub>O<sub>2</sub>探索中のノード使用率

**評価と展望** GRRM では、初期 EQ 構造さえ与えれば芋づる式に EQ・TS・IRC・解離経路を入手できる。学生や将来の化学研究者に対し、化学反応を卓上 f で手軽に調べて理解可能とするこの特長はきわめて重要である。本提案は、GRRM11 以降と比較すると、ポテンシャル交差や AFIR の機能は持たないものの、基本的な GRRM 計算を、身近な計算機を集めて利用し高速に並列実行できるため、GRRM の普及促進にはずみをつけるものとなることが期待できる。そこで、幅広い配布を想定し、操作マニュアルの配備や、ソフトウェア不正コピー対策のライセンスチェック機構の組み込みを進めている。

[1] K. Ohno and S. Maeda, Chem. Phys. Lett. 384(4-6), 277-282 (2004).

[2]大野 公一、量子化学探索の効率化と超並列化、第 15 回理論化学討論会（仙台）、1P17 (2012)。

[3]大野 公一、マルチノード対応 GRRM プログラムの開発、第 16 回理論化学討論会（福岡）、1P05 (2013)。

[4]渡邊 啓正、大野 公一、大規模並列環境における NeoGRRM の反応経路自動探索の性能評価、第 19 回理論化学討論会（東京）、2P43(2016)。