

GRRM1.22の超並列実行における探索過程の解析

量子化学探索研究所

○渡邊啓正, 時子山宏明, 大野公一

Process Analysis of Massively Parallel Exploration of GRRM 1.22

○Hiromasa Watanabe, Hiroaki Tokoyama, Koichi Ohno

Institute for Quantum Chemical Exploration

【Abstract】 Global reaction route mapping (GRRM) of chemical structures (equilibrium structure EQ, transition structure TS) on the potential surface is now possible by ADDF method utilizing anharmonic downward distortion of potential. GRRM1.22 automatically explores EQ, TS, IRC and dissociation channels by repeating exploration of reaction path around EQ. The authors already implemented the NeoGRRM method in GRRM1.22 and adapted it for parallel execution between multiple nodes. For this time, GRRM calculation was performed on the BCNOS system using a computer cluster with 240 cores for the first time, and the exploration results and its process were analyzed. The performance is superior to MPI parallel execution of GRRM 17, and the details of the exploration process are reported.

【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。GRRM1.22 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。筆者らは既に GRRM1.22 に NeoGRRM 法[2,3]を実装して複数ノード間並列実行に対応させた[4,5]。今回、BCNOS 系に対し、初めて 240 コアクラスタ環境にて GRRM 計算を行い、探索結果と探索過程を解析した。GRRM17 の MPI 並列実行に比べて優位な性能が得られており、探索経過の詳細について報告する。

【方法】

GRRM1.22 GRRM1.22 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 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。

GRRM17 GRRM17 は、ADDF 計算・MC-AFIR 計算・SC-AFIR 計算[6]などにおいて、計算機間の通信に MPI を用いる並列分散計算に対応している。

【結果・考察】

BCNOS 系に対して、計算レベル B3LYP/6-31G* で ADDF 法を用いた自動探索に要した計算時間を Table 1 に示す。GRRM17 で CPU 16 コアを使用して 251.4 時間要していたのに対し、GRRM1.22 に NeoGRRM 法を適用した場合 240 コアを用いて 59.7 時間 (4.2 倍速) で完了した。なお、1点周り探索処理には、GRRM1.22・GRRM14・GRRM17 の間で、大きな性能差を生むような差異は含まれていない。使用コア数比の 15 倍に対し 4.2 倍速は、H₃CNO₃ 系の NeoGRRM の性能報告[4]でコア数比を大きく超えた結

果と比べると低い。Fig. 1 に示す、今回の BCNOS 系の自動探索実行中の 1 点周りジョブ数の推移から、これは、今回の計算時間全体に対して、探索の並列度が最大となっていた時間の占める割合が低く、1 点周り探索の対象の減少を反映してジョブ数が減衰したことが原因と考えられる。

Table 1. Calculation time of SHS/ADDF on BCNOS system with B3LYP/6-31G* level

プログラム/並列方式	使用コア数	計算時間	EQ 数	TS 数
GRRM17	16	251.4 時間 (10.5 日)	126	406
GRRM1.22/NeoGRRM	56	205.0 時間 (8.6 日)	121	438
GRRM17/MPI	240	87.4 時間 (3.6 日)	125	394
GRRM14/NeoGRRM	256	59.3 時間 (2.5 日)	117	400
GRRM1.22/NeoGRRM	240	59.7 時間 (2.5 日)	126	448

同じ 240 コア環境を用いて GRRM17/MPI 並列で実行した場合 87.4 時間を要した。見つかった EQ・TS の数は NeoGRRM 方式と比べ同程度以下であり、NeoGRRM 方式の方が効率よく自動探索を行えている。今回 NeoGRRM 方式では、計算開始時に乱数を用いて初期構造を多数生成し、それらそれぞれについての 1 点周り探索を一斉に開始した。これにより計算開始時から全ノードを活用した探索を実行でき、早い時点で、次に探索すべき構造をより多く得ることができる (Fig. 2 に示す両方式の EQ の累積発見数から、これを確認できる)。そして、それらの構造に対する 1 点周り探索を、その時点で CPU コアが空いているノードに即座に投入する。これら一連の無駄のない並列分散処理により、NeoGRRM 方式で効率よい探索が達成された。

【参考文献】

- [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)。
- [5]渡邊 啓正、時子山 宏明、大野 公一、GRRM1.22 マルチノード対応並列化、シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア 2017」(仙台)、2017。
- [6]S. Maeda *et al.*, "Implementation and performance of the artificial force induced reaction method in the GRRM17 program", *J. Comput. Chem.*, 39, 233-251 (2018)。

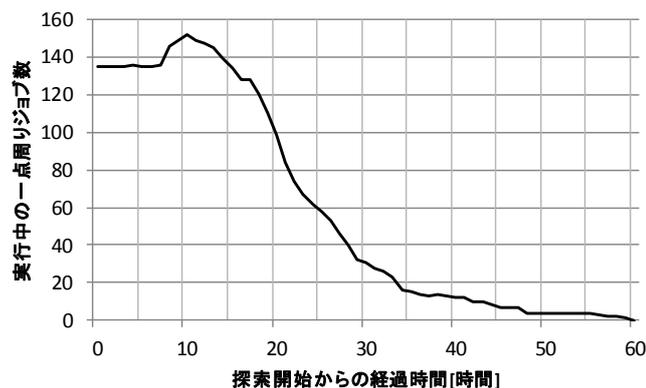


Fig. 1. Time series of the number of running FirstOnly ADDF jobs

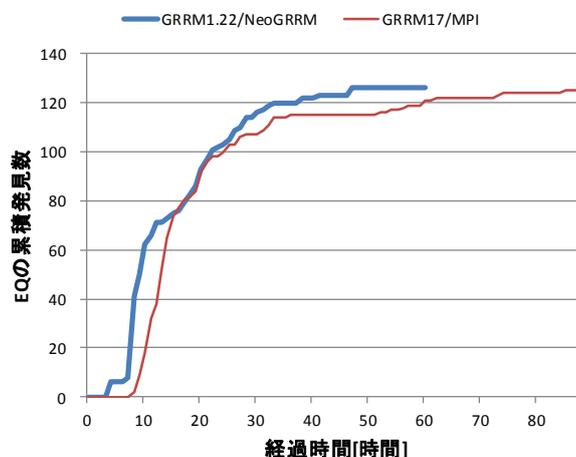


Fig. 2. Time series of the accumulated number of found EQs