

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

○渡邊 啓正¹, 大野 公一¹¹量子化学探索研究所¹watanabeh@iqce.jp

序 ポテンシャル表面上の化学構造（平衡構造 EQ、遷移構造 TS）の自動探索（GRRM）はポテンシャルの非調和下方歪(ADD)を利用する ADDF 法[1]によって可能となった。GRRM プログラムでは、多原子系のポテンシャルエネルギー超曲面上の一点の電子状態計算（一点計算）を多数回繰り返す。一点計算としては必ずしも大規模計算でなくとも計算回数が膨大となるため、GRRM プログラムによる計算時間が一般に全体として大規模となる。NeoGRRM 法[2]はこの計算時間を大幅に短縮する。これまでに、NeoGRRM 法の 128 コアまでの並列性能を報告したが、今回は 16 コア×16 ノードの計算機からなる 256 コアクラスタ環境における性能について報告する。

GRRM プログラム GRRM プログラムでは、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。

従来の NeoGRRM では暗号化されていないリモートシェルで探索ジョブを投入していたが、より幅広い計算機環境へ NeoGRRM を適用可能とするため、今回、暗号化されたリモートシェルによるジョブ投入も行えるよう NeoGRRM プログラムを拡張した。

性能報告 表 1 に 256 コアクラスタ環境で実施した種々の系の探索時間を記す。H₃CNO₃ の全面探索は、従来 16 コア機 1 ノードで探索に 8,664 時間（361 日）要していたが、256 コアクラスタ環境では 297.8 時間（12.4 日、29.1 倍高速）で完了した。コア数比（256/16=16 倍）を大きく超える高速化が達成されたことは、ADDF による全面探索に本質的に非常に高い並列性があり、16 コアでは並列度が十分に上がらず、256 コア環境で最大 144 個の探索ジョブを同時実行可能として並列度が上がったためと考えられる。図 1 に H₃CNO₃ における並列実行中の 1 点周りジョブ数の推移を示す。探索時間の前半は並列度ほぼ最大の状態が維持され、後半は 1 点周り探索の対象の減少を反映してジョブ数が減衰する様子が確認できる。H₃CNO₃ 全面探索の個々の 1 点周りジョブの時間分布は、図 2 に示すように、平均値が 32.7 時間のほぼ正規分布に近い形となった。

表 1. 256 コアクラスタ環境での探索時間

化学式	LADD	EQ 数	TS 数	探索時間
C ₆ H ₆	5	849	2,600	105.6 時間
H ₂ C ₃ O ₂	指定無	207	1,114	119.8 時間
BCNOS	指定無	121	419	58.8 時間
H ₄ C ₂ O ₂	指定無	121	848	86.5 時間
H ₃ CNO ₃	指定無	676	4,835	297.8 時間

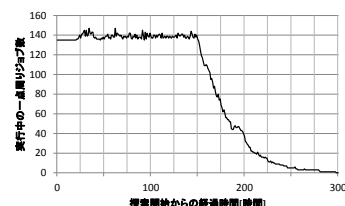


図 1. 1 点周りジョブ数の推移

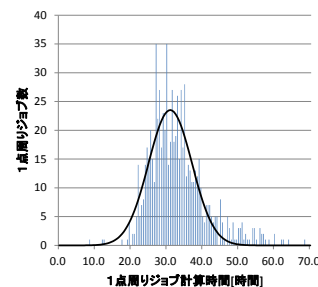


図 2. 1 点周りジョブの時間分布

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

[2]大野、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、1P05(2013)。