

GRRM1.22 マルチノード対応並列版の性能報告およびパッケージング

○渡邊 啓正, 時子山 宏明, 大野 公一

量子化学探索研究所

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。著者らは既に GRRM1.22 に対して NeoGRRM 法[2, 3]を実装し、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、不均質な計算機群を用いた $\text{H}_4\text{C}_2\text{O}_2$ 系での性能を報告した[4]。今回、他の系での探索性能を報告し、他の GRRM 並列処理方式と性能を比較する。また、本提案の幅広い配布に向けた取り組みも報告する。

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。

GRRM17 GRRM17 は、ADDF 計算・MC-AFIR 計算・SC-AFIR 計算[5]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。

検証試験 GRRM1.22 に NeoGRRM 法を実装し、BCNOS 系の GRRM 全面探索を B3LYP/6-31G* レベルで実行した性能を表 1 に示す。同一の 240 コア環境で GRRM17/MPI 並列で実行した場合と比べて、GRRM1.22/NeoGRRM 並列では高速に探索を行えている。NeoGRRM 方式では、計算開始時に乱数を用いて

表 1. BCNOS の全面探索時間

プログラム/並列方式	コア数	計算時間
GRRM17	16	251.4 時間
GRRM1.22/NeoGRRM	56	205.0 時間
GRRM17/MPI	240	87.4 時間
GRRM14/NeoGRRM	256	59.3 時間
GRRM1.22/NeoGRRM	240	59.7 時間

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とで、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多く得ることができる。こうした、探索の並列性を引き出す仕掛けが高速化に寄与している。

パッケージング 本提案が、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ことから、GRRM の普及促進の期待を持って、幅広い配布に向けたパッケージングを行った。Linux 向け実行可能形式に、暗号化によるソフトウェア不正コピー対策とライセンスチェック機構を（物理的なドングルを使わずに）実装した。さらに、調達の容易さに配慮し、問合せ受付から全ての納品まで単一の販売元から提供する体制を構築している。

[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、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)。

[5] 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)。