The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	分子軌道計算プログラム,AMOSSの並列計算における計算速度と計算結果の視覚化法の検討
Author(s)	高木, 達也
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1998, 108, p. 135-148
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/66276
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

ＳＸ－４モニター結果報告
分子軌道計算プログラム、AMOSSの並列計算における計算速度と計算結果の視覚化法の検討

大阪大学 遺伝情報実験施設　高木達也*

はじめに

SX4とともに大阪大学大型計算機センターに導入された分子軌道法プログラム、AMOSSは、多数ある他の同様なプログラム、GAUSSIAN94、GAMESS、HONDO、等の分子軌道計算プログラムの中でも、おそらく初めて、最初からベクトル化、パラレル化を意識して作成されたプログラムと思われ、その高速性に関しては、元来、多大な期待がもたれていた。このため、本計画では、以下の点に重点を置いて検討を試みた。

1）AMOSSの種々の計算での速度

2）AMOSSのプリポスト機能の使用方法と使用実感

3）AMOSSの改善すべき点

まず最初に、速度の面から考えてみる。なお、改善点はその都度記載したので、別に節を設けなかった。

１．AMOSSの種々の計算での速度

１）ＨＦ近似における計算

AMOSSの計算が、１、４、８ＣＰＵモードでどのように加速されるか、並列化やベクトル化がどの程度進んでいるかを調査してみた。まず、生データから・・・

*：現在の所属は、大阪大学大学院 薬学研究科 応用医療薬科学専攻

a ：PdC22N5H23

原子数　　51
基底関数　　Pd　酒井－藤永のMP-2をsplitしたもの（8s5p5d)/[2s2p2d]
　　C,N　MIDI-3(7s3p)/[3s2p]
　　H　MINI-3(4s)/[1s]
　計　　286
電子数　　204
ＲＨＦ、Direct SCF、１点計算
静電ポテンシャルを計算

	4CPU	8CPU
Real Time (sec)	1477.89505	1260.219352
User Time (sec)	5174.152957	8752.439007
Sys Time (sec)	322.537708	628.798108
Vector Time (sec)	2825.225774	3658.354922
Inst. Count	1.28E+11	1.80E+11
V. Inst. Count	25711910494	33148543886
V. Element Count	5.05E+12	6.48E+12
FLOP Count	1.90E+12	2.67E+12
MOPS	995.273244	757.510799
MFLOPS	367.685099	305.204142
MOPS (concurrent)	3558.759717	5355.314856
MFLOPS (concurrent)	1314.717267	2157.677858
VLEN	196.300878	195.588596
V. Op. Ratio (%)	98.01104	97.789013
Memory Size (MB)	939	947
Max Concurrent Proc.	4	8
Conc. Time(>= 1)(sec)	1447.047962	1238.03497
Conc. Time(>= 2)(sec)	1372.105486	1180.45864
Conc. Time(>= 3)(sec)	1294.340105	1172.885229
Conc. Time(>= 4)(sec)	1127.817816	1158.566183
Conc. Time(>= 5)(sec)		1133.653299
Conc. Time(>= 6)(sec)		1091.760077
Conc. Time(>= 7)(sec)		1019.185685
Conc. Time(>= 8)(sec)		888.005689
Event Busy Count	0	0
Event Wait (sec)	0	0
Lock Busy Count	0	0
Lock Wait (sec)	0	0
Barrier Busy Count	0	0
Barrier Wait (sec)	0	0
MIPS	24.764886	20.535813
MIPS (concurrent)	88.550835	145.18043
I-Cache (sec)	88.993271	152.75122
O-Cache (sec)	63.641694	91.026635
Bank (sec)	171.723228	183.647899

b：PdC14N4H16

原子数　35
基底関数　Pd　酒井－藤永のMP-2をsplitしたもの (8s5p5d)/[2s2p2d]
C,N　MIDI-3(7s3p)/[3s2p]
H　MINI-3(4s)/[1s]
計　198
電子数　142
ＲＨＦ、Direct SCF、１点計算
静電ポテンシャルを計算

	1CPU	4CPU	8CPU
Real Time (sec)	881.366072	580.506352	524.075328
User Time (sec)	843.172735	2176.727334	3846.945335
Sys Time (sec)	27.916363	37.790113	63.76948
Vector Time (sec)	792.803612	908.873906	1005.481676
Inst. Count	22777101990	57939401966	80509808990
V. Inst. Count	6945169285	8500311255	9488503706
V. Element Count	1.43E+12	1.57E+12	1.75E+12
FLOP Count	3.84E+11	4.30E+11	5.14E+11
MOPS	1717.465841	745.02235	472.966664
MFLOPS	454.921456	197.717186	133.621477
MOPS (concurrent)	1707.469243	2842.535369	3546.925515
MFLOPS (concurrent)	452.273563	754.364074	1002.06941
VLEN	206.22801	184.966335	184.27095
V. Op. Ratio (%)	98.906725	96.951423	96.096609
Memory Size (MB)	930	939	947
Max Concurrent Proc.	1	4	8
Conc. Time(>= 1)(sec)	848.109198	570.515509	512.972966
Conc. Time(>= 2)(sec)		548.485552	487.269151
Conc. Time(>= 3)(sec)		543.342927	486.703003
Conc. Time(>= 4)(sec)		521.966016	486.003851
Conc. Time(>= 5)(sec)			484.54228
Conc. Time(>= 6)(sec)			481.072504
Conc. Time(>= 7)(sec)			472.781079
Conc. Time(>= 8)(sec)			448.510721
Event Busy Count	0	0	0
Event Wait (sec)	0	0	0
Lock Busy Count	0	0	0
Lock Wait (sec)	0	0	0
Barrier Busy Count	0	0	0
Barrier Wait (sec)	0	0	0
MIPS	27.013566	26.617666	20.928244
MIPS (concurrent)	26.856332	101.556226	156.94747
I-Cache (sec)	6.9614	13.050145	20.815675
O-Cache (sec)	4.241764	19.05709	27.136238
Bank (sec)	35.6535	35.885287	38.263512

c ：C8N1H7

原子数　　16
基底関数　C,N　MIDI-3(7s3p)/[3s2p]
　　H　MINI-3(4s)/[1s]
　計　　88
電子数　　62
ＲＨＦ、Direct SCF、１点計算
静電ポテンシャルを計算

	1CPU	4CPU	8CPU
Real Time (sec)	221.06973	162.142605	153.524553
User Time (sec)	208.031753	613.561318	1153.961614
Sys Time (sec)	10.407241	10.418829	10.838664
Vector Time (sec)	194.797428	195.539373	196.319308
Inst. Count	6408065091	14391205477	20145072990
V. Inst. Count	1642146940	1648225374	1656336214
V. Element Count	3.61052E+11	3.61795E+11	3.62785E+11
FLOP Count	51630314284	51984925972	52457643067
MOPS	1758.469772	610.432339	330.404443
MFLOPS	248.184777	84.726537	45.458742
MOPS (concurrent)	1740.665142	2349.587543	2541.436784
MFLOPS (concurrent)	245.671889	326.117088	349.663938
VLEN	219.865605	219.505594	219.028784
V. Op. Ratio (%)	98.697187	96.597677	95.150801
Memory Size (MB)	929	935	939
Max Concurrent Proc.	1	4	8
Conc. Time(>= 1)(sec)	210.159634	159.40571	150.023029
Conc. Time(>= 2)(sec)		153.900312	145.146057
Conc. Time(>= 3)(sec)		152.237265	144.980382
Conc. Time(>= 4)(sec)		150.120168	144.587248
Conc. Time(>= 5)(sec)			143.972524
Conc. Time(>= 6)(sec)			143.34248
Conc. Time(>= 7)(sec)			142.885938
Conc. Time(>= 8)(sec)			141.157355
Event Busy Count	0	0	0
Event Wait (sec)	0	0	0
Lock Busy Count	0	0	0
Lock Wait (sec)	0	0	0
Barrier Busy Count	0	0	0
Barrier Wait (sec)	0	0	0
MIPS	30.803303	23.455203	17.457316
MIPS (concurrent)	30.491417	90.280364	134.279871
I-Cache (sec)	2.091026	2.224593	2.362755
O-Cache (sec)	1.158785	1.788941	2.387831
Bank (sec)	4.281501	4.225354	4.251095

課金の視点から見ると、

課金されるCPUtime/sec

	1CPU	4CPU	8CPU
1	—	1448	1239x1.5=1859
2	849	571	513x1.5= 770
3	211	160	151x1.5= 227

となって、4cpuが最もお得と言うことになる。

なお、いずれのケースでも、やや、バンクアクセスの時間が多いように思うのは気のせいだろうか？

2）MP2計算の計算時間の解析

さて、MP2計算は、HF計算に比べてあまり並列化が進んでいないパートのようである。以下、お見せするのは、複核錯体モデル、Mo2(OH)6で、金属原子間結合をもつ錯体のRHF-MP2計算の例である。

	1CPU	4CPU	8CPU
Real Time (sec)	340.835917	312.135271	304.276154
User Time (sec)	152.277822	158.574323	205.974462
Sys Time (sec)	77.619294	91.382917	104.325947
Vector Time (sec)	73.904763	74.189244	93.438184
Inst. Count	8616219829	9054223306	11972652002
V. Inst. Count	910778292	936970353	1186550983
V. Element Count	83247354877	87780779936	1.08156E+11
FLOP Count	31539378703	32330146101	39187919469
MOPS	597.281963	604.751331	577.459587
MFLOPS	207.117348	203.880083	190.256205
MOPS (concurrent)	579.767735	746.374378	729.721651
MFLOPS (concurrent)	201.044002	251.625523	240.422144
VLEN	91.402436	93.68576	91.151437
V. Op. Ratio (%)	91.528087	91.535538	90.931624
Memory Size (MB)	930	939	947
Max Concurrent Proc.	1	4	8
Conc. Time(>= 1)(sec)	156.877989	128.485162	162.996298
Conc. Time(>= 2)(sec)		13.200799	7.93131
Conc. Time(>= 3)(sec)		12.002122	7.85677
Conc. Time(>= 4)(sec)		9.390978	7.708543
Conc. Time(>= 5)(sec)			7.405142
Conc. Time(>= 6)(sec)			6.953378
Conc. Time(>= 7)(sec)			6.185012
Conc. Time(>= 8)(sec)			4.761067
Event Busy Count	0		0
Event Wait (sec)	0	0	0
Lock Busy Count	0		0
Lock Wait (sec)	0	0	0
Barrier Busy Count	0	0	0
Barrier Wait (sec)	0	0	0
MIPS	56.582237	57.09766	58.1268763.
MIPS (concurrent)	54.923064	70.46901	73.4535219
I-Cache (sec)	10.282295	10.36985	13.5358544
O-Cache (sec)	8.655325	9.38873	11.6150953
Bank (sec)	11.174368	8.6529	8.6192637

ということで、8CPUは論外となり、4CPUの利ざやもわずかのようである。

3）結論

1：HFレベルの１点計算は（おそらく構造最適化計算も）4CPUが断然速い。8CPUも速いが、課金体型を考えると損。

2：MP2計算では、8CPUはもはやオーバーヘッド等でかえって遅くなる。4CPUがわずかに速いが、あまりうまく並列化されていないようだ。

となる。Gaussian94の速度はせいぜい、数十MFlops前後であるので、200MFlops(MP2計算)、1000～2000MFlops(HF計算)というのは、驚異的な速さと言えよう。

なお、計算規模が大きくなるにつれ、direct SCF 計算といえども Disk FileとのI/Oが増大するが、なぜか、direct SCF 計算時のAMOSSの一時ファイルは/var/tmp下に限定されているようである（単に筆者の認識不足であればお許し下さい)。これを/jtmp下や、もし拡張メモリーが利用できるようになればその下へ持って行ければ、更にターンアラウンドの改善につながる（ひょっとしたらいくらか課金の節約につながるか）と思うのだが、いかがだろうか。

2．AMOSSのポストプロセッサーの使用法及び使用感

AMOSSは、そのポストプロセッサー機能を用いて、分子軌道の等値曲面図や分子構造（ワイヤーモデル、棒球モデル、ＣＰＫモデル等)、vdW表面上の静電ポテンシャル等を、描くことができる。その使用方法は、概略、以下のようである。

1：準備。amossのポストプロセッサーを利用するためには、AMOSS専用のディレクトリを作成しておく方が便利。例えば、以下では、

/usr1/x00000/amoss/sysin	入力データ
/usr1/x00000/amoss/sysout	出力データ
/usr1/x00000/amoss/amosscg	グラフィックス用データ

と仮定しているので、この記述の部分は、各自のディレクトリ記述に読み替えていただきたい。

このディレクトリ(この例では/usr1/x00000/amoss)直下とホームディレクトリに、.avsrc ファイルと .amossrc ファイルを作成する。.avsrcファイルの例を、図１に示したが、変更しなければならないところはほとんどない。また、.amossrcは、図２に例を示した。図２で、ここから変更する必要があるのは、

```
$DATA_PATH
      AmossSysinDirectory  = /usr1/x00000/amoss/sysin
      AmossSysoutDirectory = /usr1/x00000/amoss/sysout
      AmossDataDirectory   = /usr1/x00000/amoss/sysout
      AmossCGDirectory     = /usr1/x00000/amoss/amosscg
$END
;
;
$BASIS_FILE
      BasisSetFileName     = /usr1/x00000/amoss/BASISFILE
$END
```

の、ディレクトリ指定の部分だけである。

```
#################################################################
#       AVS STARTUP FILE FOR AMOSS PRE/POST PROCESSOR           #
#                                          NEC CORPORATION 1996 #
#################################################################
#
DisplayPixmapWindow             512x512+270+20
#
#################################################################
#  AVS LIBRARY SETTING                                          #
ModuleLibraries ¥
          $Path/unsupp_mods/Unsupported ¥
          $Path/chem_lib/Chemistry ¥
          $Path/avs_library/Animation ¥
          $Path/avs_library/FiniteDiff ¥
          $Path/avs_library/UCD ¥
          $Path/avs_library/Volume ¥
          $Path/avs_library/Imaging ¥
          $Path/avs_library/Supported ¥
        /usr/local/appli/amoss/amosspp/amosspp_library/AMOSSPPLib
#         ^
#         |
#    THIS LINE IS AMOSS PRE/POST PROCESSOR LIBRARY SETTING.
#
#    If AMOSS PRE/POST PROCESSOR is installed directory '/usr',
#      add the library for AMOSS PRE/POST PROCESSOR is
#        '/usr/amosspp/amosspp_library/AMOSSPPLib'.
#    When add the AMOSS PRE/POST PROCESSOR library,
#      DO NOT forget mark of '¥' after '.../Supported', this mark
#        indicate continuance line.
#
#
#################################################################
#  PATH NAME SETTING FOR AVS
#
#    Specifies the directory tree in which AVS is installed.
#
 Path /usr/local/appli/AVS53/avs
#
#
#################################################################
#  VISUAL TYPE SETTING FOR AVS
#
#    Specifies the visual type that your display capable of.
#
 VisualType                     TrueColor
#
#
#################################################################
#  AMOSS PRE/POST PROCESSOR APPLICATION MENU SETTING
#
#    If AMOSS PRE/POST PROCESSOR is installed directory '/usr',
#      application menu setting is as follows.
#
 Applications
          /usr/local/appli/amoss/amosspp/runtime/AMOSSPPMenu
#
#
#################################################################
#       END OF AVS STARTUP FILE FOR AMOSS PRE/POST PROCESSOR    #
#################################################################
```

図1　.avsrc ファイルの例

```
*** AMOSS PRE/POST PROCESSOR DEFAULT DATA FILE
;     ***************************************************************
;     *  COPYRIGHT (C) NEC CORPORATION 1996                         *
;     *                                                             *
;     *  NEC CONFIDENTIAL AND PROPRIETARY                           *
;     *                                                             *
;     *  ALL RIGHTS RESERVED BY NEC CORPORATION. THIS PROGRAM MUST  *
;     *  BE USED SOLELY FOR THE PURPOSE FOR WHICH IT WAS FURNISHED  *
;     *  BY NEC CORPORATION. NO PART OF THIS PROGRAM MAY BE         *
;     *  REPRODUCED OR DISCLOSED TO OTHERS, IN ANY FORM, WITHOUT    *
;     *  THE PRIOR WRITTEN PERMISSION OF NEC CORPORATION. USE OF    *
;     *  COPYRIGHT NOTICE DOES NOT EVIDENCE PUBLICATION OF THIS     *
;     *  PROGRAM.                                                   *
;     ***************************************************************
;
;This is a Default data file for AMOSS PRE/POST PROCESSOR.
;
;Default data file Version 1.10
;
$DATA_PATH
     AmossSysinDirectory  = /usr1/x00000/amoss/sysin
     AmossSysoutDirectory = /usr1/x00000/amoss/sysout
     AmossDataDirectory   = /usr1/x00000/amoss/sysout
     AmossCGDirectory     = /usr1/x00000/amoss/amosscg
$END
;
;
$BASIS_FILE
     BasisSetFileName     = /usr1/x60431/amoss/BASISFILE
$END
;
;
$PHYSICAL_CONSTANTS
     BohrRadius           =  0.5291772E-10    ; (m)
     Coulomb              =  0.1602177E-18    ; (C)
$END
;
;
$STRUCTURE
     StickScale           =  0.5              ; 0.1 < X < 1.0
     SphereScale          =  1.0              ; 0.1 < X < 2.0
     Resolution           =  3.0              ; 1.0 < X < 10.0
$END
;
;
$MO_FUNCTION
     Resolution           =  30               ; 10 < X < 50
     LatticeGeneration    =   1               ; 0:manual 1:automatic(default)
     MoValue              =  0.02             ; 1.0E-7 < X < 1.0
     XRotation            =  0.0              ; 0.0 < X < 360.0
     YRotation            =  0.0              ; 0.0 < X < 360.0
     Distance             =  0.0              ; -1.0 < X < 1.0
$END
;
;
$TOTAL_DENSITY
     Resolution           =  30               ; 10 < X < 50
     LatticeGeneration    =   1               ; 0:manual 1:automatic(default)
     DensityValue         =  0.08             ; 1.0E-7 < X < 1.0
     XRotation            =  0.0              ; 0.0 < X < 360.0
     YRotation            =  0.0              ; 0.0 < X < 360.0
     Distance             =  0.0              ; -1.0 < X < 1.0
$END
;
;
$SPIN_DENSITY
     Resolution           =  30               ; 10 < X < 50
     LatticeGeneration    =   1               ; 0:manual 1:automatic(default)
     DensityValue         =  0.04             ; -1.0 < X < 1.0
     XRotation            =  0.0              ; 0.0 < X < 360.0
     YRotation            =  0.0              ; 0.0 < X < 360.0
     Distance             =  0.0              ; -1.0 < X < 1.0
$END
;
;
$DIPOLE_MOMENT
     ArrowScale           =  0.5              ; 0.1 < X < 1.5
$END
```

```
;
;
$ELECTROSTATIC_POTENTIAL
    Distance            =  0.3              ; 0.0 < X < 2.0
$END
;
;
$ATOMIC_DATA
;   name    radius(au) R    G    B
;   H       0.801      1.00 1.00 1.00
    H       0.901      1.00 1.00 1.00
    He      1.020      0.93 1.00 1.00
    Li      2.527      0.86 1.00 1.00
    Be      2.103      0.75 1.00 1.00
    B       1.502      0.64 1.00 1.00
    C       1.576      0.30 1.00 0.30
    N       1.352      0.37 1.00 1.00
    O       1.361      1.00 0.30 0.30
    F       1.340      0.19 1.00 1.00
    Ne      3.005      0.07 1.00 1.00
    Na      2.908      0.01 1.00 1.00
    Mg      2.912      0.98 0.93 1.00
    Al      2.706      0.98 0.83 1.00
    Si      2.122      0.98 0.63 1.00
    P       1.790      0.98 0.49 1.00
    S       1.784      0.98 0.31 1.00
    Cl      1.878      0.98 0.16 1.00
    Ar      3.609      0.98 0.06 1.00
    K       3.691      0.98 0.99 0.88
    Ca      3.730      0.98 0.99 0.74
    Sc      3.035      0.98 0.99 0.61
    Ti      2.736      0.98 0.99 0.43
    V       2.477      0.98 0.99 0.30
    Cr      2.360      0.98 0.99 0.13
    Mn      2.581      0.98 0.99 0.01
    Fe      2.345      0.98 0.00 0.01
    Co      2.368      0.87 0.00 0.01
    Ni      2.355      0.68 0.00 0.01
    Cu      2.415      0.68 0.28 0.01
    Zn      2.519      0.68 0.78 0.01
    Ga      2.307      0.68 0.85 0.01
    Ge      2.271      0.68 0.99 0.01
    As      2.302      0.68 0.53 0.01
    Se      2.033      0.68 0.53 0.96
    Br      2.156      0.68 0.53 0.86
    Kr      2.203      0.28 0.53 0.86
    Rb      4.677      0.28 0.53 0.71
    Sr      4.067      0.69 0.53 0.71
    Y       3.356      0.69 0.53 0.39
    Zr      3.005      0.69 0.87 0.39
    Nb      2.700      0.69 0.87 0.13
    Mo      2.576      0.85 0.87 0.03
    Tc      2.555      0.85 0.38 0.03
    Ru      2.504      0.85 0.59 0.03
    Rh      2.542      0.85 0.98 0.03
    Pd      2.600      0.85 0.98 0.49
    Pd      2.800      0.85 0.98 0.49
    Ag      2.731      0.85 0.98 0.66
    Cd      2.816      0.85 0.98 0.14
    In      3.073      0.27 0.98 0.14
    Sn      2.655      0.10 0.98 0.14
    Sb      2.740      0.00 0.98 0.14
    Te      2.706      0.00 0.83 0.14
    I       2.521      0.00 0.83 0.46
    Xe      2.396      0.00 0.83 0.54
    Cs      5.017      0.14 0.83 0.68
    Ba      4.108      0.14 0.21 0.68
    La      3.534      0.14 0.43 0.68
    Ce      3.449      0.02 0.43 0.68
    Pr      3.439      0.02 0.75 0.23
    Nd      3.428      0.30 0.75 0.32
    Pm      3.402      0.55 0.12 0.32
    Sm      3.402      0.75 0.12 0.32
    Eu      3.770      0.75 0.54 0.32
    Gd      3.377      0.46 0.78 0.07
    Tb      3.332      0.65 0.36 0.07
    Dy      3.311      0.99 0.36 0.07
    Ho      3.294      0.99 0.66 0.07
```

```
    Er      3.277       0.99 0.24 0.07
    Tm      3.258       0.99 0.07 0.07
    Yb      3.666       0.99 0.07 0.20
    Lu      3.247       0.99 0.07 0.38
    Hf      2.956       0.99 0.07 0.53
    Ta      2.702       0.99 0.07 0.67
    W       2.591       0.99 0.07 0.81
    Re      2.591       0.99 0.07 0.99
    Os      2.528       0.99 0.25 0.99
    Ir      2.566       0.06 0.64 0.99
    Pt      2.623       0.06 0.72 0.99
    Au      2.725       0.06 0.87 0.99
    Hg      2.840       0.06 0.33 0.99
    Tl      3.220       0.66 0.33 0.99
    Pb      3.307       0.82 0.33 0.99
    Bi      2.925       0.82 0.14 0.99
    Po      3.162       0.82 0.14 0.58
    At      3.162       0.82 0.14 0.29
    Rn      3.162       0.82 0.54 0.29
    Fr      5.102       0.82 0.54 0.12
    Ra      4.157       0.82 0.54 0.49
    Ac      3.549       0.09 0.89 0.49
    Th      3.398       0.13 0.89 0.28
    Pa      3.035       0.26 0.89 0.28
    U       2.617       0.26 0.89 0.06
    Np      2.476       0.26 0.78 0.06
    Pu      2.859       0.26 0.78 0.78
    Am      3.439       0.26 0.78 0.53
    Cm      3.439       0.02 0.78 0.80
    Bk      3.439       0.02 0.78 0.53
    Cf      3.439       0.02 0.22 0.86
    Es      3.439       0.02 0.22 0.60
    Fm      3.439       0.02 0.85 0.60
    Md      3.439       0.02 1.00 0.60
    No      3.439       0.02 0.25 0.60
    Lr      3.439       0.02 0.48 0.60
;
    charge 0.378        0.98 0.13 0.09
    dummy 0.378         0.30 0.30 0.30
$END
;
;
*** END OF AMOSS PRE/POST PROCESSOR DEFAULT DATA FILE
```

図2　.amossrc ファイルの例

2： AMOSSの入力データで、Computer Graphics用のファイルを作成すること、及びそのファイルの場所（ディレクトリ、名前）を指定する。例えば、Mo2(OH)6のRHF計算の場合、次ページの図3のようになる。

$AMOSS～$ENDの間にある、GRAPH...が、グラフィックス制御のオプションで、

GRAPHICS=YES

で、グラフィック表示を行うためのデータファイルを作成することを示している。次の、

GRAPHDIR=/usr1/x00000/amoss/amosscg
GRAPHFILE=mo1HF_4

で、そのデータファイルが/usr1/x00000/amoss/amosscgという名前のディレクトリの下に、データファイル名mo1lHF_4.CGFという名前のファイルが作成されることを示している。

3：AMOSSの計算を始める。

4：分子軌道計算が終われば、ccindigo01にログインする。

研究室のSGIマシンやEWS4800系WSからloginする場合は、

xhost ccindigo01.center.osaka-u.ac.jp

コマンドをお忘れなく。なお、現在のところ、動作が確認できたのは、SGIマシンとEWS4800系のみである。

5：cd amoss コマンドで、AMOSSのポストプロセッサーを起動するディレクトリに移る。

6：amosspost コマンドを投入する。

7：画面左端と上に、新たなウィンドウが現れる。分子軌道を表示する場合は、上に現れたウィンドウの中から、MOを選んで左クリックすると、左のウィンドウ内に新たなメニューが現れる。このうち、真ん中少し上にある、CGファイルの選択メニューで、先に作成したCGファイルを選択する。

8：CGファイルが選択されると、中央ウィンドウに分子構造（通常、棒球モデル）が表示される。左のウィンドウには、3つの「setting」ボタンが表示される。このうち、「MO function calculation」のsettingで表示したい分子軌道の番号を指定、必要ならば「structure」のsettingで、分子構造の表示モデルを skeleton に変更する。

9：「MO function calculation」の「exec」ボタンをクリックすると、暫くして、分子軌道の等値曲面が表示される。必要な場合は、「modelling」のsettingで、表示モデルや、等値曲面の「値」の指定などを行う。

10：表示されたモデルは、マウスを、中クリックを押しながら動かすと、自在に回転し、右クリックを押しながら動かすと、平行移動する。都合に合わせて、最も見やすい位置に持ってくる。

11：RGBファイルに落としたい場合は、snapshotで取り込む。

```
$TITLE
 HF calculation test for AMOSS.
 Mo2(OH)6 O:MIDI-3 H:MINI-3 Mo:MPD-2
$END
$AMOSS
        RUNTYPE= (FIX,RHF)
        BASISDIR=/usr1/x00000/amoss
        RYSDIR=/usr1/x00000/amoss
        GRAPHICS=YES
        GRAPHDIR=/usr1/x00000/amoss/amosscg
        GRAPHFILE=mo1HF_4
$END
$GEOM
 UNIT=ANG
  MO1
  MO2 MO1 2.122862
  O1  MO1 1.920000 MO2  97.1500
  H1  O1  0.9895   MO1 123.9500 MO2 180.000
  O2  MO1 1.920000 MO2  97.1500 O1  120.000
  H2  O2  0.9895   MO1 123.9500 MO2 180.000
  O3  MO1 1.920000 MO2  97.1500 O1 -120.000
  H3  O3  0.9895   MO1 123.9500 MO2 180.000
  O4  MO2 1.920000 MO1  97.1500 O1  180.000
  H4  O4  0.9895   MO2 123.9500 MO1 180.000
  O5  MO2 1.920000 MO1  97.1500 O4  120.000
  H5  O5  0.9895   MO2 123.9500 MO1 180.000
  O6  MO2 1.920000 MO1  97.1500 O4 -120.000
  H6  O6  0.9895   MO2 123.9500 MO1 180.000
$END
$BASIS
        DEFAULT=MIDI-3
        H=MINI-3
        MO=MPD-2
$END
$RHF
        MAXCYC=100   SCFCONV=1.0D-5
$END
$POP
        MULLIKEN = CROSS
$END
```

図３　AMOSSの入力ファイル例

と、おおよそこんなところだと思われる。なかなかよくできたポストプロセッサーで、最も秀逸なのは、他の同様のプロセッサーと異なり、分子軌道関数の値などをあらかじめ計算しておいてから表示するのではなく、ポストプロセッサー内で計算できるところで、表示させる分子軌道を間違えたため、もう一度計算し直すなどといったことがないのが特徴である。

ただ、静電ポテンシャルの表示では、分子表面上の静電ポテンシャルの値が色分けして表示されるのだが、異なる分子間で比べようと思っても、どの色がどんな値に対応しているのかを、こちらで設定できない場合があるのが最大の難点かと思われる（最小値、最大値が決められているので）。

なお、遷移金属原子間δ結合の例を、/usr1/x60431/Mo2OH6_44.jpg に格納してある。また、図４～図６にAMOSSのポストプロセッサーによる表示例を、図７にその全体像を示した。

3．謝辞

最後になりましたが、筆者の SX-4 モニター申請を許可していただきました、大阪大学大型計算機センターライブラリープログラム研究開発計画委員会に感謝いたします。また、メーリングリストを通じまして、種々の情報をお寄せいただきました、SX-4 ユーザーの皆様、特に、SX-4 モニターの皆様に感謝いたします。

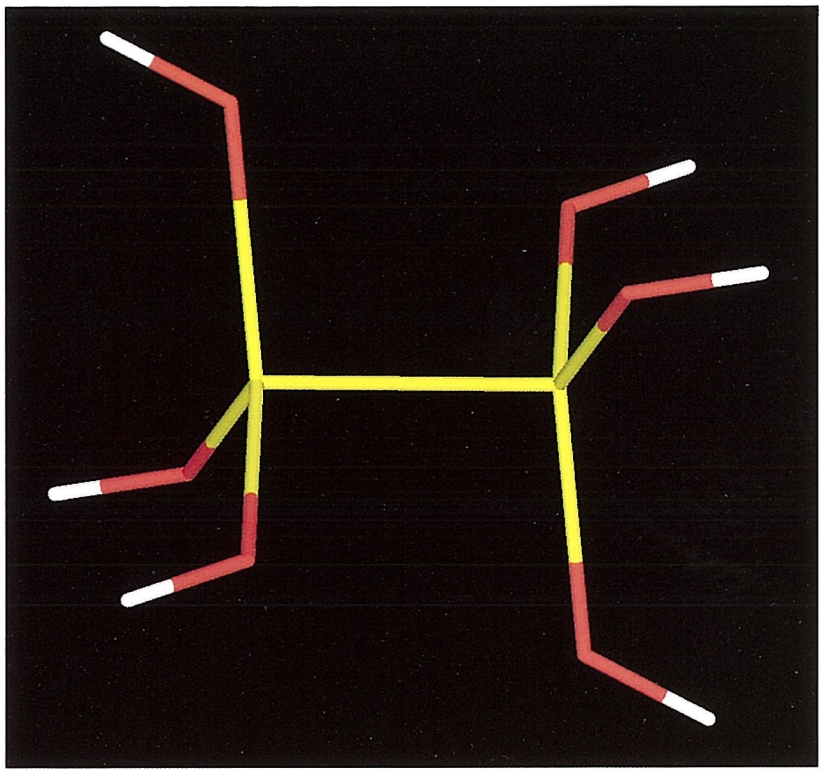

図4　AMOSS ポストプロセッサーによる Mo2(OH)6 の分子構造の表示例

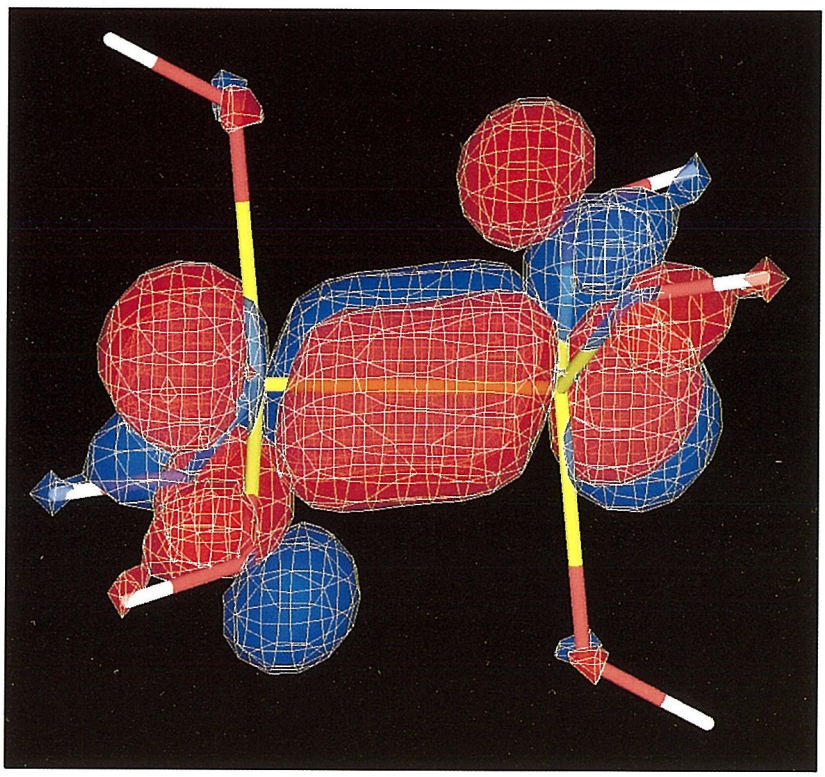

図5　AMOSS ポストプロセッサーによる Mo2(OH)6 の HOMO の等値曲面（半透明表示）

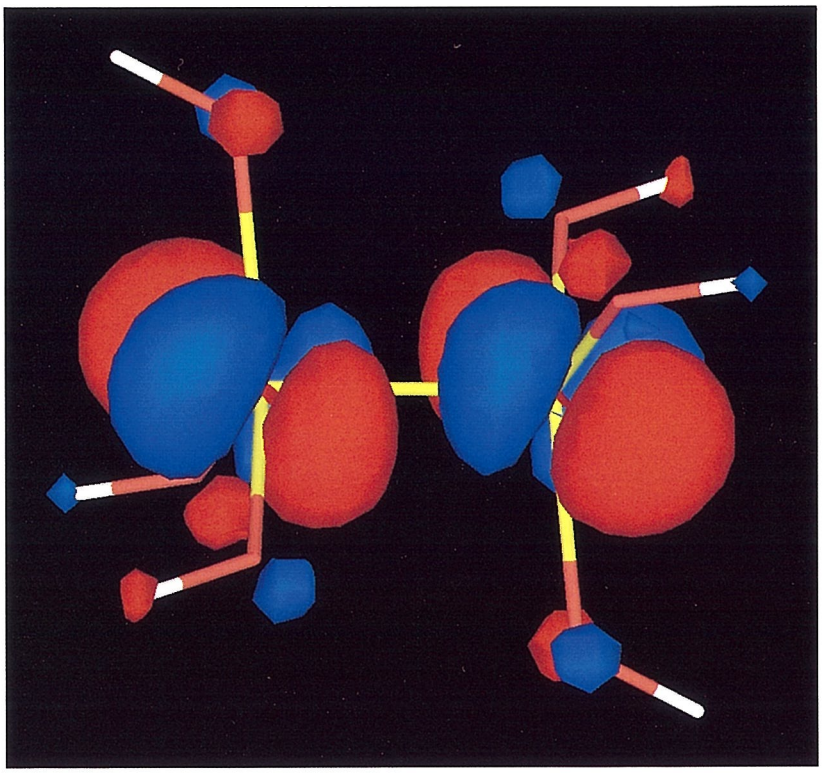

図6　AMOSS ポストプロセッサーによる Mo2(OH)6 の LUMO の等値曲面

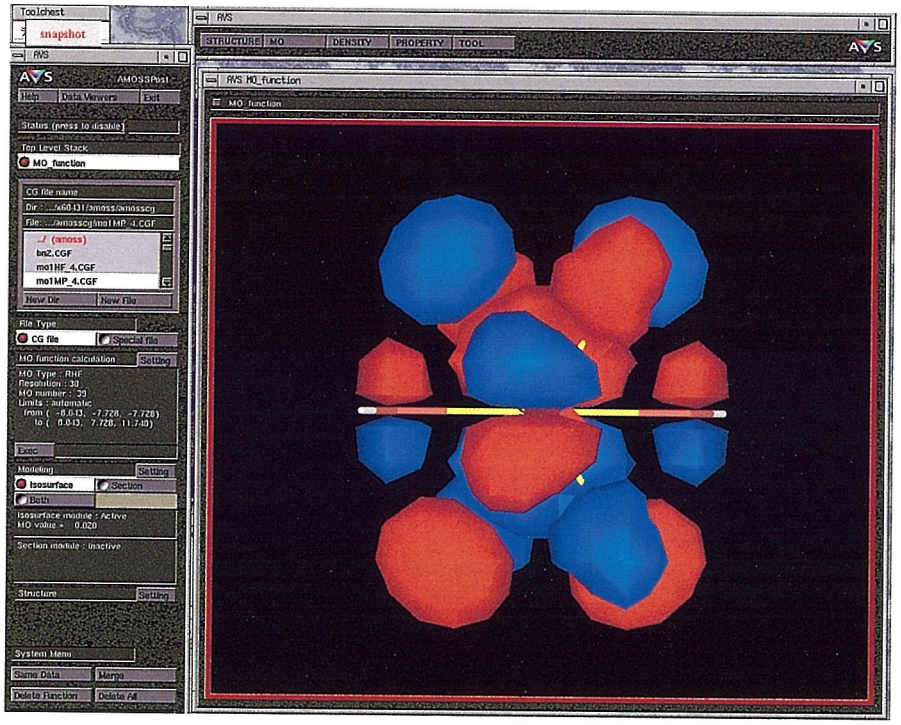

図7　AMOSS ポストプロセッサー使用画面