The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	SX4上で量子化学計算を行って ： 初心者としての失敗の諸々
Author(s)	中野, 元裕
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1998, 108, p. 149-151
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/66277
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

SX4 上で量子化学計算を行なって
── 初心者としての失敗の諸々 ──

SX monitor No.10 中野 元裕

SX4 上のアプリケーションソフトのモニターとして、量子化学計算プログラム AMOSS および Gaussian94 を試用しましたが、初心者ゆえの失敗もいろいろ経験させてもらいました。利用者の参考に、というよりは初心者に優しいサービスの開発を期待して(?)、失敗談の一端を報告します。

【ジョブの制御に関係した失敗】

(1) 投入したジョブが 10 分以上経っても qstatr や qstatq で表示されないことがある。これに気付かず、受け付けられていないのかと思って同一のジョブを２度３度と投入してしまい、不要な計算を複数回行なってしまう。後日、課金が何万円も減っているのを見て驚くことに ...

(2) そして、課金が切れるとファイルの読み出しすらできない。なぜ課金が切れるような羽目に陥ったのか、エラーファイルを調べる事も出来ないし、途中までの結果も読ませてもらえない。せめて ftp をかけられる程度の金額を別枠にして、課金切れでもファイルのやり取りが出来るようにして欲しいという要望は

初心者の贅沢？

今書いている報告書の足しにしようにも、計算したためたログファイルもエラーファイルもアクセス不能の有り様。

(3) CPU time over だけでなく、メンテナンスのため(?)に管理者にシグナルを送られてジョブを打ち切られることがある。管理者の方は事前に掲示で警告しているから、それに気付かないユーザーの責任、という意識で気軽に kill して呉れるのでしょうが、P8 クラスなんかで計算していて何万円も使った挙げ句アウトプットが一行も無し、というのはやっぱり寒すぎる。日本語の読めない telnet でアクセスしてる人も居るのに。

このような失敗を何度か経験すると、どれくらいの CPU time で収束するか予想を付けにくいこの種の計算には、2,3 倍遅くても課金切れや time over を気にしなくてよい WS がどれほどありがたいか、身にしみて理解できる。HD やメモリー容量の制限上、WS を使えない場合を除けば、わざわざ SX4 を使う利点はあまり無いように思う。

【アプリケーションに関連した失敗】

(1) 柔らかい分子(fluxional molecule)と呼ばれる、局所安定構造を複数もつ分子の構造最適化計算は注意しないと収束しないことがある。具体的には Gaussian94 を使って tert-ブチル基をふたつもつ分子の最適化を行なったら、デフォルトの Berny optimization では何日計算してもメチル基が回っていて止まらない。こんな時は OPT=STEEP で無理矢理にポテンシャル極小に落すという手が吉。

(2) 開殻分子の超微細結合定数を評価するときは ECP 基底関数系は使えない。重金属原子の入った分子だったので、つい経済的観点から ECP 基底を使ったら Fermi contact analisys (超微細結合定数)の結果はほとんどゼロ。ちゃんと内殻の s 軌道を含む基底を使わないといけなかったらしい。

(3) 常磁性金属イオン間の反強磁性的超交換相互作用を評価するのに、まず基底状態 (S=0) のスピン分布を見ようとしたら、分子内いたるところスピンがゼロ。本当はふたつの金属イオン上に同じ大きさで逆向きのスピンが乗ってる筈なのに。これは Gaussian94 が SCF の出発状態としていたるところスピンゼロの近似的波動関数から始めてしまうためらしい。現在、GUESS=MIX の効き目を検討中。

ところで、Gaussian94 の参考書、"Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods"の日本語版が最近出版されたとのこと。Gaussian のユーザーには朗報です。

「電子構造論による化学の探求"」(James B. Foresman and AEleen Frisch, 田崎健三訳, Gaussian Inc.,

ISBN 0-9636769-8-9)