The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	SX-4上のGaussian94の計算時間について
Author(s)	金島, 岳
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1998, 108, p. 152-157
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/66278
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

SX-4 上の Gaussian94 の計算時間について

金島 岳
大阪大学大学院基礎工学研究科物理系専攻
kanashima@ee.es.osaka-u.ac.jp,h63173@center.osaka-u.ac.jp

平成 10 年 3 月 31 日

1 はじめに

非経験的分子軌道計算パッケージ Gaussian94[?] が SX-4 の上でどの程度の速度で計算をするか H_2O という非常に小さな系および、比較的多くの原子からなる Si クラスタを調べてみた。また複数の CPU を使用することによる効果についても調べた。

2 Gaussian94 の使いかた

計算量が多いため、負担金の観点よりバッチ処理が主になると思われるので[1]、簡単なバッチファイルを例として示す。

```
#!/usr/bin/sh
## BATCH OPTION
#@$-q p4
#@$-o stdout
#@$-e stderr
#@$
##
## set output option (fortran)
#F_FILEINF=YES
#export F_FILEINF
F_PROGINF=DETAIL
export F_PROGINF
##
## set for g94
G94ROOT=/usr/local/appli
export G94ROOT
gr=$G94ROOT
GAUSS_EXEDIR=$gr/g94/bsd:$gr/g94
export GAUSS_EXEDIR
SS_ARCHDIR=$gr/g94/arch
```

[1] なお、300 秒以下ではバッチ、会話型では料金が同じです。

```
export SS_ARCHDIR
G94BASIS=$gr/g94/basis
export G94BASIS
PATH=${PATH}:$GAUSS_EXEDIR
LD_LIBRARY_PATH=$GAUSS_EXEDIR
export LD_LIBRARY_PATH
F_ERROPT1=271,271,2,1,2,2,2,2
export F_ERROPT1
##
## go program
cd /home/ccns01/user1/h63173
g94 2_01.com > 2_01.out 2>&1
```

- このバッチファイルでは、基本的に必要な設定をすべて行なっているため、.login などでは何も指定する必要ない。
- 後で述べるが、現在の Gaussian94 では複数 CPU 対応されていないため、"p4" クラスで十分と考え、p4 を指定している。
- Gaussian ではファイルアクセスが非常に多いため、アクセスを記録するためのオプション、"export F_FILEINF" を指定していない。
- 後から 2 行目にファイルがあるディレクトリへの cd (change directory) を、後から 1 行目に計算するデータファイル (この例では "2_01.com") を指定している。また、F_PROGINF による Program Information を記録するために、この例では "2_01.out" を指定している。

3 小さな系 (H_2O)

3.1 入力

使用した基底関数は 2 種類で、最小基底関数系 STO-3G の HF レベルの計算 (これが通常もっとも小さい系である) および分極基底関数系 6-31G**の 2 次の摂動 MP2 レベルでの計算 (定量的な議論をするにはこの程度の系が必要と思われる) による構造最適化を行なった。実際に使用した入力ファイルを付録??および??へ示す。なお、水分子の結合角および結合長はそれぞれ 104.5°、0.957 Å[?] である。

3.2 結果

計算された O-H 距離および H-O-H 結合角を表??に示す。出力の時間に関する部分を切り出したものを付録??に付けた。

表 1: STO-3G/HF および 6-31G**/MP2 で計算された O-H 距離および H-O-H 結合角

基底関数	level	O-H (Å)	H-O-H (°)	計算時間
STO-3G	HF	0.9892	100.004	19.4 秒
6-31G**	MP2	0.9611	103.8927	70.2 秒

6-31G**/MP2 では共にほぼ測定値となることが分る。計算は正常に行なわれることが確認されたので、

計算時間について調べてた。会話使用 (CPU1 つしか使用しない)、バッチで 4CPU を使用、および比較のためにワークステーション (WS; HP712/60[2]) における計算時間を表??、??に示す。なお、計算された O-H 長さおよび H-O-H 結合角はすべて同じ値となった。

表 2: (a) STO-3G/HF による計算時間の CPU 数依存性

計算環境	計算時間
SX CPU1	19.4 秒
SX CPU4	19.5 秒
HP712/60	75.5 秒

表 3: (b) 6-31G**/MP2 による計算時間の CPU 数依存性

計算環境	計算時間
SX CPU1	70.2 秒
SX CPU4	70.3 秒
HP712/60	173.2 秒

現在 Gaussian94 では multi-cpu への対応がなされていないとのことであるが、確かに、この程度の計算においては表に示されるように CPU 数による速度向上は全く無いことが示された。また、負担額で比較しても、SX は WS の 20 倍であるためコストパフォーマンスも非常に悪い可能性がある。(可能性としたのは、HP712/60 は低速な WS とはいえ、研究室のものであり、大計センターの WS で比較したものではないためである。)

4 サンプル

大きな系で行なう前に、まず計算速度の概要を把握するために、Gaussian94 に附属のサンプルプログラムについて計算を行ないその計算時間を調べた。DEC AlphaServer 2100[5/250] [3]での計算結果がマニュアルにあるので [?] それとの比較を行なった。特に計算時間が長いものをいくつか選択した (但し 2_01 を除く)。なお、SX4 でのメモリ割り当ては 1GB [4]とした。結果を表??へ示す。計算時間は DEC に比べおおよそ 1/5 程度になっている。しかし、時々1/10 程度になっているものがあるが、basis function の数、中間ファイルの大きさなどとの相関は見られず、一般論として、大きなものほど計算速度の向上が大きいとしか言えない。使用がメモリ標準のままの場合多少遅くなる[5]。

5 大きな系 ($Si_{23}H_{28}$)

表??に示されるように H_2O のような非常に小さい系では SX-4 上での計算時間が WS と比較してたかだか 2〜4 倍程度しかなく、SX-4 の能力が十分発揮されていない。また表 tab:DECvsSX4 へ示したように大

[2] Central processor PA7100LC, Clock frequency 60MHz, MIPS 73.0, MFLOPS (DP) 12.9, SPECint92 67.3, SPECfp92 85.3 [?]

[3] CPU/Clock Speed 21164/250MHz, SPECint92 277.1, SPECfp92 410.4, Maximum I/O Bandwidth 132 MB/s [?]

[4] データファイルの頭へ、"%Mem = 1GB" を追加

[5] 10_04c の場合 0:35:58.4

表 4: DEC vs SX4

Input File	Description of Job	CPU Time (DEC)	CPU Time (SX4)
2_01	Propene energy	0:00:15.1	0:00:07.6
3_06b	$C_{60}O$ Optimizations (HF)	11:14:52.2	1:47:26.4
4_05b	Larger strained hydrocarbons freqs.	2:01:23.1	0:38:14.5
5_04	N,N-Dimethyl-formamide opt.+freq	3:24:00.7	0:54:30.2
8_02b	CH_4 PES scan	2:14:42.9	0:32:45.2
8_09b	Benzene (isodesmic reaction)	2:53:47.4	0:38:44.5
10_01a	Dichloroethane in solution (IPCM)	2:52:17.7	1:10:01.9
10_04c	N-methyl-(2-nitrovinly) anime rot. TS	4:28:53.4	0:31:39.9
10_05a	Furfuraldehyde (anti) in solution	4:08:21.0	0:12:06.3
10_05b	Furfuraldehyde (syn) in solution	4:02:58.7	0:12:12.6

きな系では計算時間の向上が大きいため、$Si_{23}H_{28}$という、かなり大きなクラスターを使った計算を行なった。[6]これは、Si 原子 23 個を結晶と同じ結合長、結合角で結合し余った足は H 原子で終端したもので、Si 単結晶の一部を切り出したものである。このクラスターにおいて終端 H 原子の 1 つについて自由に動けるようにし (他の Si, H 原子は固定) 安定な位置の計算を行なうことを試みた。

なお、計算はすべて 1CPU で行なった。また一般に、系が大きくなると Direct SCF の方が高速に計算できる [?] ことより、"SCF=Direct" を指定している。その結果、以下のような失敗をした。

- パラメータとして "OPT" を指定したところ、全ての自由度に対して最適化が行なわれていた。
  ↪ "Opt=Z-matrix" とすることで回避した。
- 3-21G/MP2 level (#MP2/3-21G SCF=Direct Pop=Reg Opt) で、DISK I/O 速度を向上させようと、/jtmp を使用したところ上限 (4 G) にひっかかった。(%NQS(INFO): The request received a signal SIGXTMPF (exeeded temporary file capacity limit))
  ↪ SX ファイル拡張申請を行ない、10 Gbyte の local を割当ててもらった。振動計算も同時に行なったものであるが、"File lengths (MBytes): RWF= 7846 Int= 0 D2E= 0 Chk= 2 Scr= 1" と、RWF のみで 8 GB 程度必要であった。

計算が成功したものは、STO-3G/HF level (#HF/STO-3G SCF=Direct Pop=Reg Opt) で行なったものであり、39 分 43 秒の時間で計算が終了した。基底関数が小さいため、"File lengths (MBytes): RWF= 64 Int= 0 D2E= 0 Chk= 10 Scr= 1" と作業ファイルも小さいものであった。

6 まとめ

SX4 で Gaussian94 を使用する場合に注意することを簡単にまとめると以下のようになる。

- 小規模計算は SX4 上で行なっても性能向上は見られない。
- 複数 CPU 化されていないため p4 で十分と考えられる。
- 一時ファイルは/jtmp を使用しない方がよい。
- メモリは 1GB 程度を指定した方がよい。

[6]これは著者が実際に研究対象としている系であり、現在は半経験的分子軌道法パッケージ MOPAC93[?] をもっぱら利用している。

参考文献

[1] Gaussian 94, Revision D.4, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, P. M. W. Gill, B. G. Johnson, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, T. Keith, G. A. Petersson, J. A. Montgomery, K. Raghavachari, M. A. Al-Laham, V. G. Zakrzewski, J. V. Ortiz, J. B. Foresman, J. Cioslowski, B. B. Stefanov, A. Nanayakkara, M. Challacombe, C. Y. Peng, P. Y. Ayala, W. Chen, M. W. Wong, J. L. Andres, E. S. Replogle, R. Gomperts, R. L. Martin, D. J. Fox, J. S. Binkley, D. J. Defrees, J. Baker, J. P. Stewart, M. Head-Gordon, C. Gonzalez, and J. A. Pople, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 1995.

[2] 「理科年表」国立天文台編 (丸善、1990)

[3] MOPAC93, James J. P. Stewart, Fujitsu Ltd.

[4] James. B. Foresman and Æleen Frisch: "Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods", Second Edition, Gaussian Inc. (Pittsburgh)

[5] http://www.hp.com/wsg/jun27/712ds.html#specs

[6] http://www.digital.com/alphaserver/archive/2100/alphaserver2100.html

A ファイル

A.1 入力ファイル (STO-3G, HF)

```
$ RunGauss
%Chk=h2o.01.chk
%Mem=20000000
#HF/STO-3G SCF=Direct Pop=Reg Fopt

H2O

0 1
O
H 1 rh1
H 1 rh2 2 120.0

rh1=1.0
rh2=1.0
```

A.2 入力ファイル (6-31G**, MP2)

```
$ RunGauss
%Chk=h2o.02.chk
%Mem=20000000
#MP2/6-31G** SCF=Direct Pop=Reg Fopt
```

A.3. 出力ファイルの計算時間に関する部分

```
H2O

0 1
O
H 1 rh1
H 1 rh2 2 120.0

rh1=1.0
rh2=1.0
```

A.3 出力ファイルの計算時間に関する部分

```
-- Single CPU (会話使用) -- STO-3G/HF --

Job cpu time:  0 days  0 hours  0 minutes 19.4 seconds.
File lengths (MBytes):  RWF=    5 Int=    0 D2E=    0 Chk=    1 Scr=    1

-- Single CPU (会話使用) -- 6-31G**/MP2 --

Job cpu time:  0 days  0 hours  1 minutes 10.2 seconds.
File lengths (MBytes):  RWF=    5 Int=    0 D2E=    0 Chk=    1 Scr=    1

-- 4 CPU (batch) -- STO-3G/HF --

Job cpu time:  0 days  0 hours  0 minutes 19.5 seconds.
File lengths (MBytes):  RWF=    5 Int=    0 D2E=    0 Chk=    1 Scr=    1

-- 4 CPU (batch) -- 6-31G**/MP2 --

Job cpu time:  0 days  0 hours  1 minutes 10.3 seconds.
File lengths (MBytes):  RWF=    5 Int=    0 D2E=    0 Chk=    1 Scr=    1

-- HP712/60 による結果 -- STO-3G/HF --

Job cpu time:  0 days  0 hours  1 minutes 15.5 seconds.
File lengths (MBytes):  RWF=    5 Int=    0 D2E=    0 Chk=    1 Scr=    1

-- HP712/60 による結果 -- 6-31G**/MP2 --

Job cpu time:  0 days  0 hours  2 minutes 53.2 seconds.
File lengths (MBytes):  RWF=    5 Int=    0 D2E=    0 Chk=    2 Scr=    1
```