OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	SX-4上のGaussian94の計算時間について(II)
Author(s)	金島, 岳
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1999, 112, p. 97-100
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/66334
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(II)

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11年2月28日

昨年度[1]にひきつづき、非経験的分子軌道計算パッケージGaussian94[2]がSX-4の上でどの程度の速度で計算をするかを調べた。今回は、密度汎関数法や半経験的方法も検討対象とした。

計算はすべてジョブクラスp4のバッチで行なった。なお、Gaussian94は内部で別のプログラムを起動するため、プログラム特性情報を得るためには、バッチスクリプト中で

```
F_PRINFDIFF=NO
export F_PRINFDIFF
F_PROGINF=DETAIL
export F_PROGINF
```

(/bin/shの場合)のように、F_PRINFDIFF=NOを指定する必要がある。計算した系は、シリコンクラスター(Si_xH_y)、アルコール(メタノール、エタノール、プロパノール)の構造最適化である。オプションは「FOpt SCF=Direct」で、すべての原子を動かせるようにし、電荷は合計0の中性クラスターとした。

表1に計算したクラスターと使用した基底関数及びその時の計算時間を示す。なお、「exceeded cpu limit」は8時間を超えたため打ち切られたことを示す。表中のPM3は半経験的計算、B3LYPおよびBLYPは密度汎関数法による計算を表している。この系においては密度汎関数法による高速化は見られない。次に、計算時間を予測するための検討を行った。一般に分子軌道計算プログラムでは計算時間はN^mに比例する。今回の計算における、各クラスター/基底関数で使用されたGauss関数の数と計算時間の関係を図1に示す。図に示されるように、おおよそ$N^{1.9}$に比例することが分かる。Nの小さなところを拡大したものが図2である。この程度の大きさでは計算時間はおおよそ$N \times 1.2$の直線的に増加する傾向が見られた。なお、これらの傾向よりexceeded cpu limitとなった系の計算時間を推定すると、約40時間となる。ところで、SX-4上のMOPAC93[3]を使用してPM3で計算を行ったところ、2.28秒とこちらの方が計算時間は短かかった。

ところで、このような傾向がどの程度一般性を持つか、Gaussian94のテストデータのうちHF、MP2、B3YLP, BLYPの計算にについてあてはめてみた。なお、これらの計算は、先の全ての原子を動けるようにするなどの大規模のものではない。結果を図3に示す。図中には$N \times 1.2$の直線も示した。非常に大まかではあるが、おおよそ$N \times 1.2$で計算時間が増大する傾向が見られることが分かる。

表 1: 構造最適化計算にかかった時間

クラスター	計算方法 / 基底関数	計算時間 ((日:) 時:分:秒)
Si_2H_6	HF/STO-3G	0:00:41.5
	B3LYP/3-21G	0:05:25.6
	MP2/6-31+G*	0:06:17.5
	B3LYP/6-31+G*	0:06:29.7
	BLYP/3-21G	0:18:09.8
Si_8H_{18}	MP2/6-31+G*	1:15:19:05.6
	B3LYP/6-31+G*	exceeded cpu limit
C_2H_5OH	MP2/6-31G**	0:05:32.6
	MP2/6-31G**	0:07:34.6
C_3H_7OH	PM3	0:00:18.6
	HF/STO-3G	0:02:42.8
	B3LYP/6-31+G*	0:27:23.0

このように、非常のおおざっぱではあるが、小さな系ではほぼ $\sim N \times 1.2$、大きな系かつ大規模計算ではほぼ $\sim N^{1.9}$ 程度の計算時間を見込まないといけないことが示された。

参考文献

[1] 大阪大学大型計算機センターニュース Vol.**28** (1998-5) 152.

[2] 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.

[3] MOPAC93.00 Manual, J. J. P. Stewart, Fujitsu Limited, TOkyo, Japan (1993).

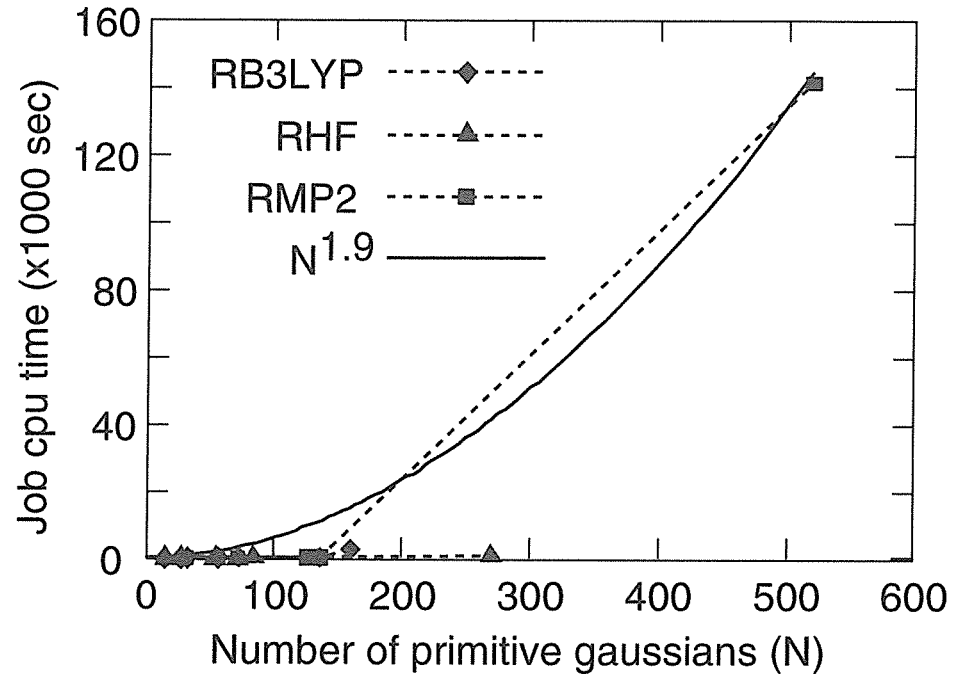

図 1: クラスター計算に使用された Gauss 関数の数と計算時間の関係。実線は $N^{1.9}$。

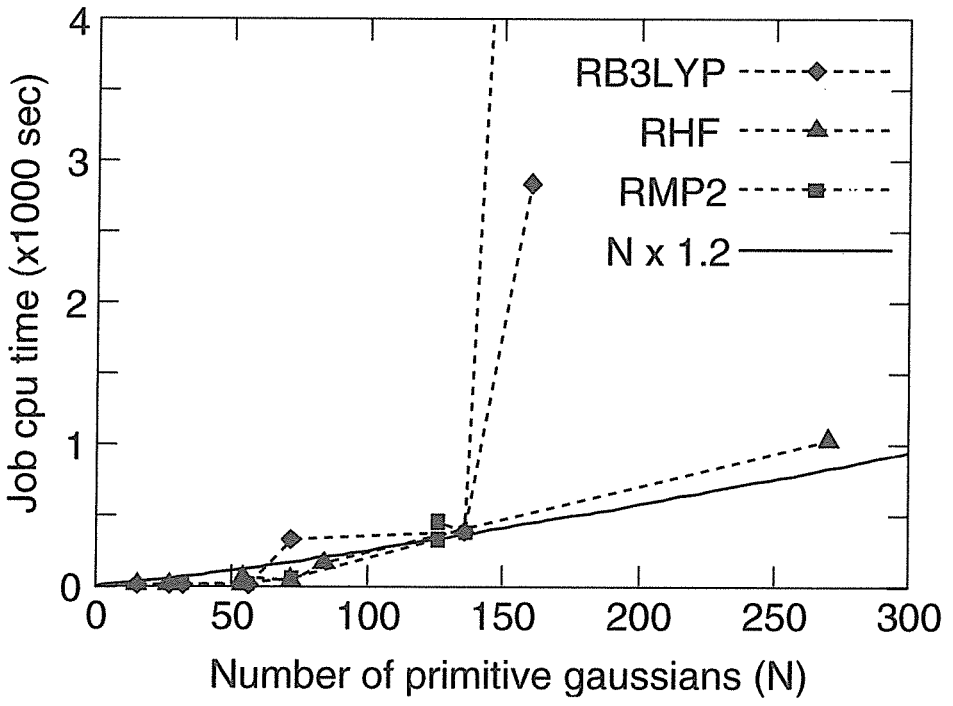

図 2: クラスター計算に使用された Gauss 関数の数と計算時間の関係。0 付近を拡大したもの。実線は $N \times 1.2$。

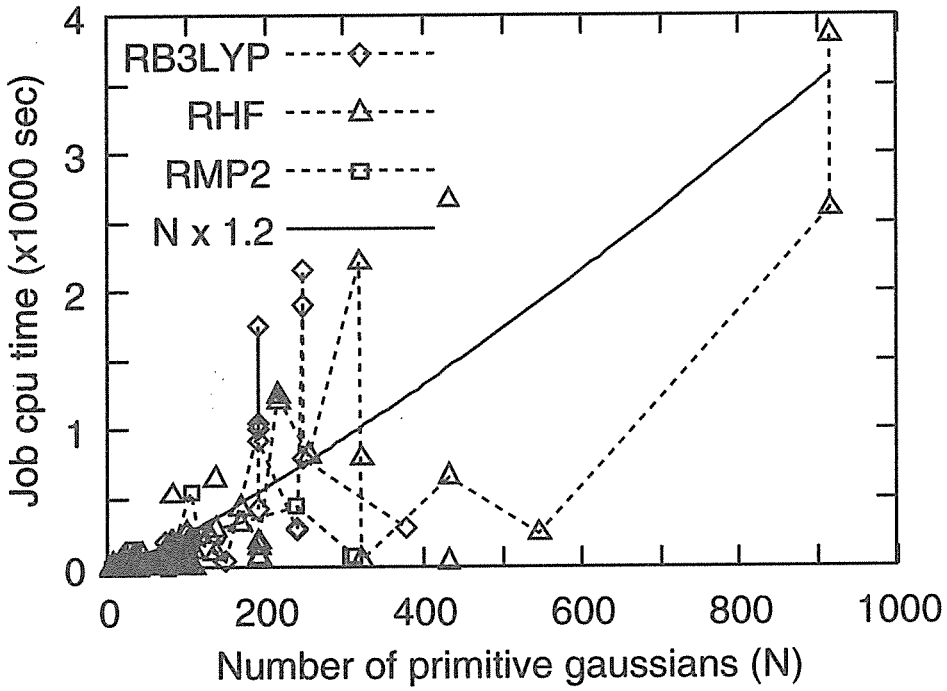

図 3: G94 の test データのうち HF、MP2、B3LYP、BYLP の系の Gauss 関数の数と計算時間の関係