



|              |   |
|--------------|---|
| 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          | <a href="https://hdl.handle.net/11094/66334">https://hdl.handle.net/11094/66334</a> |
| 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_PRINTDIFF=NO
export F_PRINTDIFF
F_PROGINF=DETAIL
export F_PROGINF
```

(/bin/sh の場合) のように、F\_PRINTDIFF=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 ( $\text{Si}_x\text{H}_y$ )、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、B3LYP、BLYP の計算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          | 計算時間               |
|----------------------------------|---------------|--------------------|
|                                  | / 基底関数        | ((日:) 時:分:秒)       |
| Si <sub>2</sub> H <sub>6</sub>   | 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 <sub>8</sub> H <sub>18</sub>  | MP2/6-31+G*   | 1:15:19:05.6       |
|                                  | B3LYP/6-31+G* | exceeded cpu limit |
| C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH | MP2/6-31G**   | 0:05:32.6          |
|                                  | MP2/6-31G**   | 0:07:34.6          |
| C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH | 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).

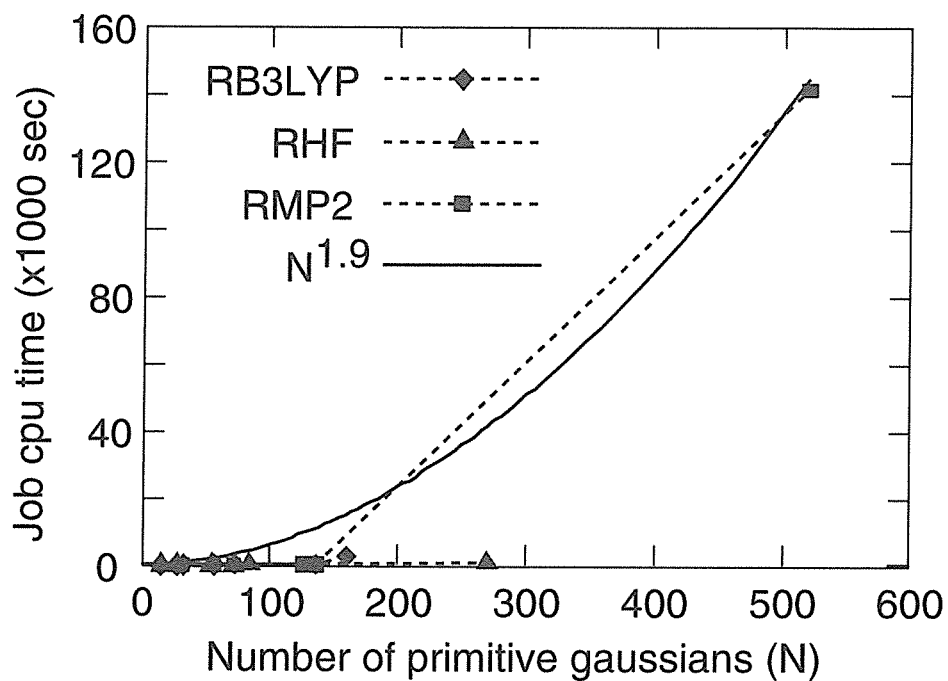


図 1: クラスター計算に使用された Gauss 関数の数と計算時間の関係。実線は  $N^{1.9}$ 。

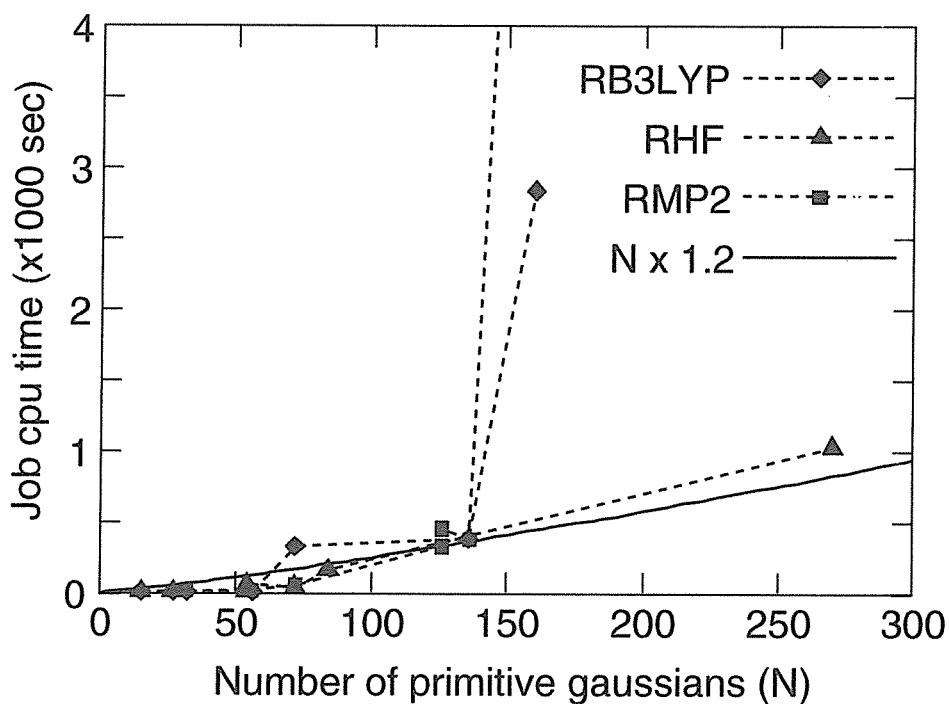


図 2: クラスター計算に使用された Gauss 関数の数と計算時間の関係。0 付近を拡大したもの。実線は  $N \times 1.2$ 。

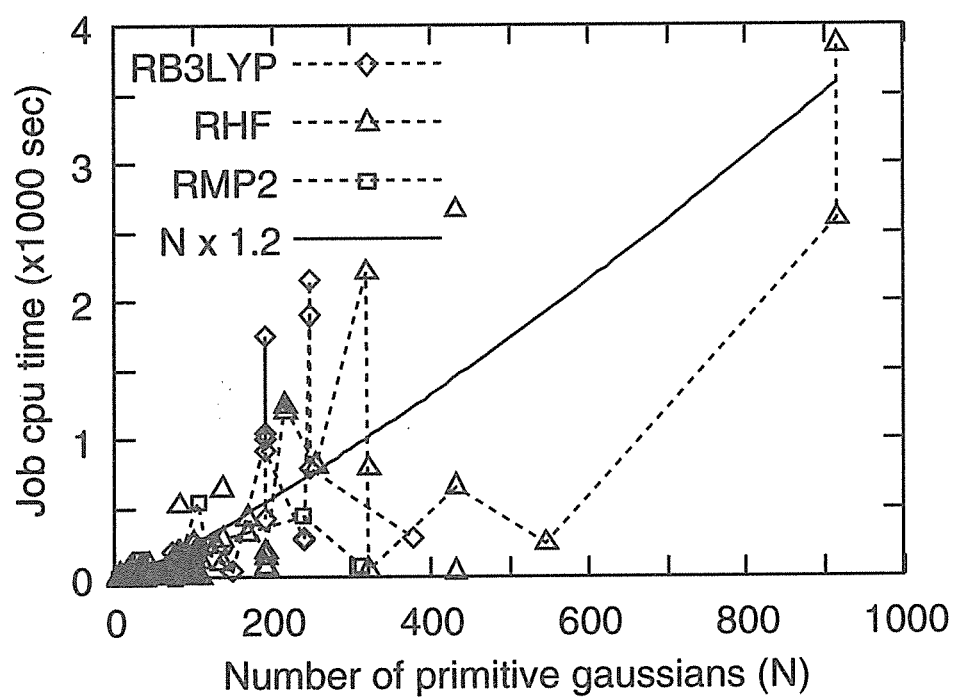


図 3: G94 の test データのうち HF、MP2、B3LYP、BYLP の系の Gauss 関数の数と計算時間の関係