SMASH(Scalable Molecular Analysis Solver for High performance computing systems) ユーザーマニュアル ver. 1.0.1

## 1. 可能な計算

Hartree-Fock, B3LYP: 閉殻・開殻エネルギー及び構造最適化計算 MP2: 閉殻エネルギー計算

#### 2. インストール方法

Intel、AMD マシンで MPI を使ってコンパイルする場合、smash/ディレクトリ内でmake

と実行する。

MPI 並列しない場合、

#### make -f Makefile.x86.noMPI

と実行する。

Intel コンパイラ、MKL ライブラリ以外を使用する場合、Makefile、Makefile.x86.noMPIのF90、LIB、OPTを編集する。

Kコンピュータ、FX10を利用する場合、

#### make -f Makefile.fujitsu

と実行する。

bin/smash ができれば、インストール終了。

#### 3. 重要な設定

Linux システムの stack size と環境変数の OMP\_STACKSIZE のデフォルト値は小さいため、実行前に新しい値を設定する必要がある。

bash の場合: ~/.bashrc ファイルに次の2行を追加してください。

#### ulimit -s unlimited

## export OMP\_STACKSIZE=1G

csh,tcsh の場合:~/.cshrc もしくは~/.tcshrc ファイルに次の 2 行を追加してください。 unlimit

#### setenv OMP\_STACKSIZE 1G

もし SCF 計算が開始すぐに止まる場合、OMP\_STACKSIZE の値をより大きくしてください。

#### 4. 実行方法

## 4.1. ノード内(OpenMP)並列

1 プロセスのスレッド数を決めるため、環境変数 OMP\_NUM\_THREADS を設定してください。

bash の場合: ~/.bashrc ファイルに次の行を追加してください。

export OMP\_NUM\_THREADS=(スレッド数)

csh,tcsh の場合: ~/.cshrc もしくは~/.tcshrc ファイルに次の行を追加してください。

setenv OMP\_NUM\_THREADS (スレッド数)

設定後、次のように計算を実行してください。

bin/smash < (input ファイル名) > (output ファイル名)

# 4.2. ノード間(MPI)並列

mpirun もしくは mpiexec コマンドにより MPI 並列計算を開始してください。 MPI プロセス数は-np の後に指定してください。

mpirun -np (プロセス数) bin/smash < (input ファイル名) > (output ファイル名)

# 4.3. ハイブリッド(MPI/OpenMP)並列

1プロセスあたりのスレッド数(OMP\_NUM\_THREADS の値)は1ノードのコア数と同じ、プロセス数は使用するノード数と同じにすると最も効率的に計算できます。 OMP NUM THREADS を設定後、MPI 計算を開始してください。

## 5. インプット形式

```
job runtype=optimize method=b3lyp basis=gen memory=1g
control spher=.false.
scf diis=.false.
opt nopt=100
geom
 O 0.0000000
                   0.0000000
                                 0.1423813
    0.0000000
 Η
                   0.7568189
                                -0.4626257
     0.0000000
 Η
                  -0.7568189
                               -0.4626257
basis
O
6-31G(d)
****
Η
STO-3G
****
```

job, control, scf, opt, dft で始まる行で計算内容を指定して、geom の次の行から原子と その座標を指定する。大文字と小文字の区別はない。原子ごとの基底関数、ECP を指 定する場合、basis、ecp の次の行から指定する。

# 6. キーワード内容

# 6.1. job

計算実行方法	
energy: エネルギー計算 (default)	
gradient: エネルギー微分計算	
optimize: 構造最適化計算	
計算方法	
HF: Hartree-Fock 計算(default)	
b3lyp: B3LYP 計算	
mp2: MP2 計算	
基底関数	
sto-3g (default), 6-31g, 6-31g(d), cc-pvdz, cc-pvtz, cc-pvqz,	
d95v, lanl2dz	
gen: 元素ごとに指定(参照 6.6 basis)	
1ノード当たりメモリ使用量(default 2GB)	
使用可能単位:B, KB, MB, GB, TB	
系の電荷 (default ±0)	
スピン多重度	
1: singlet	
2: doublet	
3,4,: triplet, quartet,	
波動関数種類	
RHF : Closed-shell (default)	
UHF: Open-shell	
ECP (Effective Core Potential)	
lanl2dz	
gen: 元素ごとに指定(参照 2.7 ecp)	

# 6.2. control

spher	Spherical Harmonics もしくは Cartesian 基底指定	
.true. : Spherical (5d, 7f,) (default)		
	.false. : Cartesian (6d, 10f,)	

guess	初期波動関数		
	huckel:拡張 Huckel 計算(default)		
	check: チェックポイントファイル参照		
check	チェックポイントファイル名 (default:空白)		
cutint2	2 電子積分のカットオフ値		
	1.0d-12 (default)		
bohr	距離の単位		
	.false.: Å(default)		
	.true.: bohr		
iprint	出力制御		
	1:最少出力		
	2:通常出力(default)		
	3: 詳細出力		

# 6.3. scf

	<del>-</del>	
diis	DIIS 指定	
	.true. : DIIS (default)	
	.false. : Second-order SCF	
maxiter	最大 SCF 回数	
	100 (default)	
dconv	SCF での電子密度収束判定	
	5.0D-6 (default)	
maxdiis	最大 DIIS 回数	
	20 (default)	
maxsoscf	最大 SOSCF 回数	
	20 (default)	

# 6.4. opt

nopt	最大 Opt 回数 50 (default)	
	50 (default)	
noptconv	Opt での Force 収束判定	
	1.0D-4 (default)	
cartesian	構造最適化時の座標系	
	.true. : Cartesian coordinate	
	.false. : Redundant coordinate (default)	

# 6.5. dft

nrad	汎関数数値積分の動径点数	
	96 (default)	
nleb	汎関数数値積分の Lebedev グリッド角度点数	
	302 (default)	

# 6.6. geom

"geom"の次の行から分子構造の読み込みが始まる。1 行に1原子で、元素記号と xyz 座標を書く。空行もしくはファイルの最後で分子構造の読み込みが終了する。 チェックポイントファイルから読むときは、初めの行を geom=check と書く。

#### 6.7. basis

元素ごとに指定する。

関数名(6-31G(d)、cc-pVDZ、LANL2DZ など)でも関数の直接記入でも可。 関数名と関数の併用も可(LANL2DZ に d 関数追加など)。

元素ごとの区切りは\*\*\*\*で、basis 指定の最後は空行。

関数のフォーマットは次の通り。

#### (元素記号)

(軌道角運動量 (S,P,D,F,G,SP)) (primitive 関数の数)

(Gauss 関数の指数) (短縮係数) (P 関数の短縮係数(SP の場合のみ))

(Gauss 関数の指数) (短縮係数) (P 関数の短縮係数(SP の場合のみ))

...primitve 関数の数繰り返し

...関数指定の繰り返し

\*\*\*\*

# 例)

basis Se

LanL2DZ

D 1

0.384 1.0

\*\*\*\*

CH

6-31G(d)

\*\*\*\*

#### 6.8. ecp

元素ごとに指定する。

関数名(LANL2DZ)でも関数の直接記入でも可。

ecp 指定の最後は空行。

関数のフォーマットは次の通り。

(元素記号)

(関数名(任意)) (最大軌道角運動量) (Core 電子数)

(タイトル(任意))

(Gauss 関数の数)

(Rの次数) (Gauss 関数の指数) (Gauss 関数の係数)

(Rの次数) (Gauss 関数の指数) (Gauss 関数の係数)

...Gauss 関数の数繰り返し

...Gauss 関数指定の繰り返し

例)	ogn				
,	ecp				
	Au				
	LanL2DZ				
	Cl				
	Cl-ECP 2 10				
	d-ul potential				
	5	10.000000			
	1 94.8130000	-10.0000000			
	2 165.6440000	66.2729170			
	2 30.8317000	-28.9685950			
	2 10.5841000	-12.8663370			
	2 3.7704000	-1.7102170			
	s-ul potential				
	5				
	0 128.8391000	3.0000000			
	1 120.3786000	12.8528510			
	2 63.5622000	275.6723980			
	2 18.0695000	115.6777120			
	2 3.8142000	35.0606090			
	p-ul potential				
	6				
	0 216.5263000	5.0000000			
	1 46.5723000	7.4794860			
	2 147.4685000	613.0320000			
	2 48.9869000	280.8006850			
	2 13.2096000	107.8788240			
	2 3.1831000	15.3439560			