

1D12

基底関数のための web アプリケーションの開発

(北大院理^{*1}、苫駒大^{*2}、青森大^{*3}、九大院総理工^{*4}、室工大^{*5}、名市大^{*6})
野呂武司^{*1}、関谷雅弘^{*2}、長内有^{*3}、三好永作^{*4}、古賀俊勝^{*5}、舘脇洋^{*6}

[序]

われわれは、現在までに H - Ra までの valence 電子のための相関基底関数の開発論文としてまとめ、基底関数も web 上で公開している。これらの基底関数は性能的に優れているにもかかわらず、広く利用されるに至っていない。これは、公表の仕方が必ずしも利用者本位ではないためと考えられる。すでに web からすべての相関基底関数は download できる状態ではあるが、利用者が適当な (core, valence) 基底関数を用意し、decontraction の仕方を決定した上に、この相関基底関数を付加し、使用する software の入力形式に整形する必要がある。多くの利用者にとって、これらの作業は必ずしも容易ではない。適当な基底関数の選択、decontraction pattern の決定は経験のいる作業であり、場合によってはテスト計算の必要がある。入力形式への整形作業は、単純ではあるが注意力が必要であり、できればしたくない作業である。そこで、利用者にとって使いやすい形で公開するために web アプリケーションを開発することにした。

[基底関数の性質]

これまでに開発した基底関数の性質を振り返っておく。基底関数は、原子の CI 計算によって得られた正確な自然軌道をなるべく再現するように最適化された。CGTF の個数、項数は、基底関数の大きさをまず決めた上で各 CGTF の項数を試行錯誤的に正確さとコンパクトさから決定した。このように決められた基底関数は、原子の自然軌道を忠実に再現しながら、ANO などに比べてはるかにコンパクトとなる。さらに、segment 型の縮約を採用しているので分子系で用いる際に環境の変化に適用する柔軟性も有しており、理想的な基底関数が得られたと考えている。

[供給する基底関数]

- 利用頻度の多いサイズ (dzp, tzp, qzp) の基底関数を選び、相関基底関数を組み合せた。
- 基底関数として、舘脇-古賀の segmented set と三好-酒井等の MCP set を選択した。
- 利用頻度の高い software (Gaussian, GAMESS, MOLPRO, MOLCAS, ALCHEMY2) の入力形式をそろえた。

- 提供する基底関数は性能テストの結果 (HF エネルギー、相関エネルギー)、文献情報を示した。

[性能比較 : Kr]

基底関数の性能比較として、Kr の結果を例として掲げる。この web アプリケーションで供給する全電子計算用基底関数 (表中では seg と略記) と良く使われている Dunning 等の基底関数 (表中の cc) の結果を比較した。

size	contraction	HF energy	correlation
DZP			
seg	(74321/7421/72)	-2751.99418250	-.12295794
cc	(13,13,13,13,1/10,10,10,1/51)	-2751.97487182	-.12410219
TZP			
seg	(743111/74111/721/2)	-2751.99640010	-.17989915
cc	(18,18,18,18,11/11,11,11,11/711/1)	-2752.05212061	-.18026586
QZP			
seg	(743111/74111/7111/11/2)	-2751.99647111	-.19899924
gen	(17,17,17,17,111/12,12,12,111/9111/11/2)	-2752.05422075	-.20199652
cc	(18,18,18,18,111/13,13,13,111/9111/11/1)	-2752.03048162	-.20144981

K 殻など内殻軌道のための項数が少ないため HF エネルギーは少し劣っているが、相関エネルギーはほぼ同等といえる。DZP, TZP, QZP と基底関数の大きさは同じだが、cc に比べて GTF の展開項数ははるかに少ない。ちなみに表中の QZP/gen は、Koga-Tatewaki の uncontracted set ($20s15p9d$) を cc と同じ様に decontract し $3d2f1g$ を加えた基底関数による結果であり、cc に比べて基底関数の規模はわずかに小さく、HF エネルギー、相関エネルギー共にわずかに良好な結果を示している。このタイプの基底関数も、供給する予定である。

[web アプリケーション]

web アプリケーションの構築は以下の方針にしたがって行った。1) データ本体における xml 形式の採用、2) 動的な web application、3) プラットホームに非依存性の実現、4) フレームワークの利用 (保守性の確保)、5) apache - tomcat - struts 上に構築、6) java + JSP で実装。現在、ほぼ完成しており試験的に九州大学 (URL:<http://meg.cube.kyushu-u.ac.jp/sapporo3>) で公開している。apache-tomcat がインストールされている環境には、war ファイルをコピーするだけでどこにでも移植が可能である。基底関数のデータ本体は、北海道大学理学研究科の linux マシンにあり、どこからも自由にアクセスできる。データ本体の xml ファイルのアクセスメソッドも公開可能であり、基底関数に直接プログラムからアクセスする道も開かれている。